

Obsah

Než začnete	v
Verze „Freeware“	v
O této učební pomůcce	v
<i>Pokročilé studium</i>	vi
Konvence práce s myší	vi
Pro další informace	vii
<i>Jak nás kontaktovat</i>	vii
<i>Online Updates</i>	vii
1. Základní informace o ACD/ChemSketch	1
1.1 Co se naučíme	1
1.2 Začínáme s editorem ACD/ChemSketch	1
1.3 Určení asociací souborů	2
1.3.1 <i>Změna asociací souborů</i>	2
1.4 Změna předvolených podadresářů	3
1.5 Instalace přídatných programů (Add-ons)	3
1.6 Ukončení práce s editorem ChemSketch	4
2. Kreslení jednoduchých struktur	5
2.1 Co se naučíme	5
2.2 Kreslení atomů, vazeb a označení	5
2.2.1 <i>Použití nástroje pro normální kreslení Draw Normal</i>	5
2.2.2 <i>Dvojné a trojné vazby</i>	6
2.2.3 <i>Mazání jednotlivých atomů</i>	6
2.2.4 <i>Nástroj „krok zpět“ Undo</i>	6
2.2.5 <i>Polymer</i>	7
2.2.6 <i>Pseudoatomy</i>	7
2.2.7 <i>Změna atomu</i>	7
2.2.8 <i>Použití nástroje pro kontinuální kreslení Draw Continuous</i>	8
2.2.9 <i>Použití nástroje tažení myši Mouse Drag</i>	9
2.2.10 <i>„Vycištění“ struktury</i>	9
2.2.11 <i>Editování staženého zápisu substituentů</i>	9
2.2.12 <i>Nástroj kreslení řetězců Draw Chains</i>	11
2.3 <i>Vycištění pracovní plochy</i>	11
2.4 <i>Práce s encyklopedií ACD/Dictionary</i>	12
2.5 <i>Převracení strukturálních vzorců</i>	13
2.6 <i>Výstup</i>	14
2.6.1 <i>Uložení jako soubor ChemSketch (.SK2)</i>	14
2.6.2 <i>Uložení struktury do souboru typu MDL Molfile</i>	14
2.6.3 <i>Tisk</i>	15
2.6.4 <i>Vložení strukturálního vzorce do dokumentu</i>	15
3. Kreslení složitějších struktur	17
3.1 Co se naučíme	17
3.2 <i>Použití tabulky substituentů</i>	17
3.3 <i>Kreslení cyklických struktur</i>	18
3.4 <i>Odstraňování atomů a fragmentů</i>	19
3.4.1 <i>Odstraňování několika atomů najednou</i>	19
3.5 <i>Záměna atomů</i>	20
3.6 <i>Kreslení dvojných a trojných vazeb</i>	20
3.7 <i>Kreslení nabitých atomů, aniontů a kationtů</i>	20
3.8 <i>Markushovy vazby</i>	22
3.8.1 <i>Markushova vazba s přidaným či odebraným fragmentem</i>	23

3.9	Generování stereodeskriptorů	23
3.10	Kreslení koordinačních vazeb	24
3.11	Delokalizované náboje a křivky	26
3.12	Další typy vazeb	28
3.13	Změna vlastností atomů	30
4.	Komplikovanější struktury, řetězce SMILES a InChI, schémata reakcí	32
4.1	Co se naučíme	32
4.2	2D-optimalizace	32
4.2.1	Kreslení strukturálních vzorců cyklických alkanů	32
4.2.2	Kreslení struktury cyklického peptidu	33
4.3	Řetězce SMILES	35
4.3.1	Generování řetězce SMILES	35
4.3.2	Generování struktur z řetězců SMILES	35
4.4	Identifikátory InChI	36
4.4.1	Generování řetězců InChI	36
4.4.2	Generování strukturálních vzorců z řetězců InChI	38
4.5	3D-Optimalizace	38
4.5.1	Nakreslení struktury bicyklo[2.2]oktanu	38
4.5.2	Nakreslení strukturálního vzorce triptycenu	40
4.5.3	Nakreslení strukturálního vzorce kubanu	41
4.5.4	Nakreslení strukturálního vzorce dodekahedranu ([5]Fullerenu-C ₂₀)	42
4.6	Kreslení, popisování a mapování reakcí	43
4.6.1	Kreslení reakčního schématu	44
4.6.2	Popisování reakcí	45
4.6.3	Mapování reakcí	45
4.6.4	Kalkulátor reakčních dat — Pouze v komerční verzi !	46
5.	Pokročilé kreslicí techniky: Šablony	49
5.1	Co se naučíme	49
5.2	Shrnutí	49
5.3	Tabulka substituentů	50
5.3.1	Kreslení struktury fluoreskaminu	50
5.4	Přímo použitelná šablona	51
5.4.1	Nakreslíme strukturální vzorec cyklického oligomeru	51
5.5	Okno šablon	53
5.5.1	Nakreslení fragmentu molekuly DNA	53
5.5.1.1	Kreslení řetězce 2-deoxy-D-riboso-5-fosfátu	53
5.5.1.2	Přidání bázi	54
5.6	Kreslení složitých biomolekul	55
5.6.1	Kreslení strukturálního vzorce β -Maltose	55
5.7	Tvorba uživatelských šablon	57
5.7.1	Organizátor oken šablon	57
5.7.2	Soubor Template.cfg	58
6.	Výpočet makroskopických vlastností	59
6.1	Co se naučíme	59
6.2	Výpočet makroskopických vlastností	59
6.2.1	Povel z nabídky	59
6.2.2	Automatické zobrazení na stavové liště	60
6.3	Výpočet monoisotopické hmoty fragmentu (MS nůžky)	61
7.	Klávesy speciálních funkcí	62
7.1	Co se naučíme	62
7.2	Tautomery	62
7.2.1	Příklady	63
7.2.2	Chyby v chemické literatuře	64

7.3	Encyklopedie	66
7.4	Freeware Add-on ACD/Name	66
7.4.1	Omezení freewarové verze ACD/Name	67
8.	Hledání struktur — Pouze v komerční verzi!	68
8.1	Co se naučíme	68
8.2	Vyhledání struktury	68
8.2.1	Které soubory prohledávat?	68
8.2.2	Posuzování výsledků hledání	70
9.	Tvorba grafických objektů	72
9.1	Co se naučíme	72
9.2	Kresba energetického reakčního diagramu	72
9.2.1	Kreslení obecné křivky	72
9.2.2	Úprava křivky	73
9.2.3	Kreslení os X a Y	74
9.3	Kreslení různých orbitalů	75
9.3.1	Nakreslíme p-orbital	75
9.3.2	Nakreslíme d-orbital	76
9.3.3	Kreslíme π -orbital	77
9.4	Kreslíme vakuový destilační přístroj	77
9.4.1	Opatření kresby popisky	79
9.4.1.1	Přidání textových popisků	80
9.4.1.2	Popisky v bublinách	81
9.4.1.3	Úprava tvaru bublin	81
9.4.1.4	Seskupování prvků a rušení skupin	82
9.5	Kreslení dvoušroubovice DNA	82
9.6	Kreslení lipidů a micel	85
9.6.1	Kreslení schématu lipidů	86
9.7	Tvorba tabulek	87
9.7.1	Nakreslení obsahu tabulky	87
9.7.2	Vložení tabulky	88
9.7.3	Vkládání dat do tabulky	89
9.7.4	Měníme obsah tabulky	90
9.7.5	Úprava vzhledu tabulky	91
10.	Práce s dokumenty	93
10.1	Vložení záhlaví a zápatí	93
10.2	Převedení dokumentu do formátu Adobe PDF — Pouze v komerční verzi!	94
10.3	Kreslíme plakát (poster)	94
11.	Pracujeme se styly v módu struktur	96
11.1	V kapitole probereme	96
11.2	Změna stylu strukturálních vzorců	96
11.2.1	Použití stylu definovaného časopisem	97
11.2.2	Příprava obrázků pro publikaci	97
11.3	Tvorba vlastního stylu	98
11.3.1	Uživatelský styl: Sugar	98
11.3.2	Uživatelský styl: Phosphate	99
11.3.3	Uživatelský styl: Base	99
11.3.4	Uživatelský styl: Highlight	100
11.4	Použití existujících stylů	101
11.5	Zvolení předvoleného stylu (default)	102
12.	Práce se styly v kreslicím módu	103
12.1	V této části se naučíme	103
12.2	Změna stylu platného pro objekt	103

12.3	Zaznamenání stylu	103
12.4	Použití existujícího stylu	104
12.5	Volba předvoleného stylu	104
12.6	Práce se styly	104
13.	Tvorba šablon pro produkci zpráv	106
13.1	V lekci probereme	106
13.2	O šablonách zpráv	106
13.3	Otevření módu šablon zpráv	106
13.4	Vkládání objektů do šablon	107
13.5	Nastavení preferencí zobrazení	108
13.6	Aranžování objektů šablony	113
13.7	Zápis a použití šablon zpráv	114
14.	Dobrůtky - Goodies	115
14.1	Co jsou to „Goodies“?	115
14.2	Kde se získají?	115
14.3	Goodies	115
15.	Závěr	119