














Chemsketch

Κατεβάστε το πρόγραμμα που διατίθεται δωρεάν, στη διεύθυνση:

<http://www.acdlabs.com/resources/freeware/> και εγκαταστήστε το.

Ανοίγουμε το πρόγραμμα και θα μάθουμε να γράφουμε οργανικές ενώσεις και αντιδράσεις.

1. Στην αριστερή πλάγια γραμμή εργαλείων μαρκάρουμε (με αριστερό κλικ) τον C και κάνουμε τόσα κλικ στην οθόνη, σύροντας το ποντίκι, όσοι και οι άνθρακες που θέλουμε.
2. Αν θέλουμε να βάλουμε άλλο στοιχείο (O, Cl κλπ) πρώτα το μαρκάρουμε από την αριστερή πλάγια γραμμή εργαλείων και μετά πάμε στον άνθρακα όπου έχουμε δύο επιλογές. Ή κάνουμε κλικ πάνω στον άνθρακα, οπότε τον αντικαθιστά, ή σύρουμε από τον άνθρακα και αφήνουμε, οπότε το προσθέτει στον άνθρακα.
3. Έχουμε και έτοιμες χαρακτηριστικές ομάδες (-CHO, -CO-, -COOH) στην δεξιά πλάγια γραμμή, που τις μαρκάρουμε και τις προσθέτουμε στην ένωση.
4. Αν θέλουμε διπλούς ή τριπλούς δεσμούς, κάνουμε κλικ πάνω στο δεσμό.
5. Ειδικά για τις χαρακτηριστικές ομάδες -COOH, -CHO κλπ, αν θέλουμε να τις γράψουμε συμπυκνμένα, ενεργοποιούμε το πλήκτρο  από αριστερή πλάγια γραμμή εργαλείων, και με ένα κλικ μέσα στην οθόνη ανοίγει ένα παράθυρο με έτοιμες ομάδες στοιχείων, αλλά και δυνατότητα να φτιάξουμε δικές μας ή να γράψουμε τα A, B, Γ για τις ενώσεις στα δεντράκια.
6. Αν χρειάζεται διόρθωση παίρνουμε το σβηστήρι  από τη δεύτερη πάνω γραμμή εργαλείων και διαγράφουμε με κλικ.
7. Αφού ολοκληρώσουμε την ένωση, ξεμαρκάρουμε τα χημικά στοιχεία πατώντας το  στη δεύτερη πάνω γραμμή εργαλείων. Τώρα μπορούμε να κάνουμε τις παρακάτω μορφοποιήσεις.
8. Μαρκάρουμε την ένωση κάνοντας αριστερό κλικ κοντά ή πάνω της. Από τα **Tools** επιλέγουμε **Structure Properties** και στο παράθυρο που ανοίγει μπορούμε να κάνουμε πολλές μορφοποιήσεις.
9. Από την επιλογή **Common** κάνουμε μορφοποιήσεις σε όλη την ένωση ταυτόχρονα. Από το **Show Carbons** επιλέγουμε **All** ή **Terminal** ανάλογα αν θέλουμε να φαίνονται ή όχι όλοι οι άνθρακες. Στην ίδια επιλογή αλλάζουμε γραμματοσειρά, μέγεθος και χρώμα γραμμάτων, μήκος δεσμών και πάχος γραμμής δεσμών.
10. Τώρα αν θέλουμε να κάνουμε αλλαγές μόνο σε ένα άτομο επιλέγουμε **Atom**
11. Αν ό,τι έχουμε επιλέξει θέλουμε να εμφανίζεται σε όλες τις εφαρμογές το θέτουμε ως προεπιλογή πατώντας **Set Default**.
12. Αν θέλουμε να κάνουμε μορφοποιήσεις μόνο σε ένα κομμάτι της ένωσης το μαρκάρουμε κάνοντας κλικ ακριβώς πάνω του και από τα **Tools** επιλέγουμε **Structure Properties**.
13. Ειδικά για το αρχικό -CH₃ που είναι ανάποδα, μπορούμε να το αντιστρέψουμε αν το μαρκάρουμε και από τα **Structure Properties** επιλέγουμε **Atom** μετά το **H** και από το

- Value** το **Right** και **Apply**. Εναλλακτικά, αν πατήσουμε το πλήκτρο από τη δεύτερη πάνω γραμμή εργαλείων και κλικάρουμε πάνω στο μεθύλιο όσες φορές χρειαστεί για να μπουν τα υδρογόνα στη σωστή θέση.
14. Αν θέλουμε να ευθυγραμμίσουμε την ένωση μπορούμε σύροντας με το ποντίκι, αλλά αν δεν έχουμε σταθερό χέρι, μπορούμε και ως εξής: μαρκάρουμε την ένωση και από τα **Tools** επιλέγουμε διαδοχικά **Explicit Hydrogens** μετά **Clean Structure** και τέλος **Remove Explicit Hydrogens**. Αν η ένωση έχει διπλούς δεσμούς θα χρειαστεί μια μικρή διόρθωση.
 15. Στην ευθυγράμμιση των ενώσεων βοηθά να εμφανίσουμε το πλέγμα της οθόνης από την επιλογή **Options** και **Show Grid**. Ακόμα αν πατήσουμε shift πριν γράψουμε τους άνθρακες, γράφεται η αλυσίδα πιο ευθύγραμμη.
 16. Μπορείτε ακόμα να περιστρέψετε την ένωση αν τη μαρκάρετε και πατήσετε την επιλογή  από τη δεύτερη οριζόντια γραμμή εργαλείων.
 17. Αν θέλουμε να γράψουμε αντιδράσεις ή "δεντράκια" χρησιμοποιούμε το  και το  από τη δεύτερη οριζόντια γραμμή εργαλείων. Αν θέλουμε πάνω στο βέλος να βάλουμε καταλύτες, συνθήκες κλπ μαρκάρουμε την επιλογή  και πατάμε πάνω στο βέλος της αντίδρασης και μας ανοίγει παράθυρο με πολλές δυνατότητες.
 18. Από το  στην αριστερή πλάγια γραμμή εργαλείων μπορούμε να αντικαθιστούμε άνθρακες με -R και μάλιστα αριθμημένα.
 19. Μπορούμε με τα πλήκτρα  και  να αντικαθιστούμε τους δεσμούς και να δίνουμε τρισδιάστατη προοπτική στις ενώσεις.
 20. Αν θέλουμε τα δούμε τρισδιάστατα μοντέλα διαφόρων τύπων για τις ενώσεις, μαρκάρουμε και από τα **Tools** επιλέγουμε 3D Structure Optimization και μετά πατάμε το πλήκτρο  από την πάνω γραμμή εργαλείων. Έτσι ανοίγει παράθυρο με πολλές επιλογές αναπαραστάσεων και επιλογών.
 21. Το όνομα της ένωσης στα αγγλικά δίνεται αν πατήσουμε το πλήκτρο  από την πάνω οριζόντια γραμμή εργαλείων, αφού μαρκάρουμε την ένωση.
 22. Αν θέλουμε να δούμε διάφορες ιδιότητες της ένωσης, όπως Mr, % W/W σύσταση, πυκνότητα κλπ, μαρκάρουμε την ένωση και πατάμε το πλήκτρο  στο τέλος της δεύτερης πάνω γραμμής εργαλείων.
 23. Τέλος για να περάσουμε τις ενώσεις στο κείμενό μας τις μαρκάρουμε και από το **edit** επιλέγουμε **copy** και μετά στο κείμενό μας **paste**. Το **word** χειρίζεται την επικόλληση σαν εικόνα.
 24. Αν έχουμε φτιάξει μια αντίδραση ή ένα δεντράκι, επιλέγουμε το σύνολο με **select all** από το **edit** ή με **ctrl + A** και μετά **copy - paste**.