

Οδηγίες χρήσης του
προγράμματος
ChemDraw
Μέρος II

Δρ Μαρία Κογιώνη

Οκτώβριος 2020

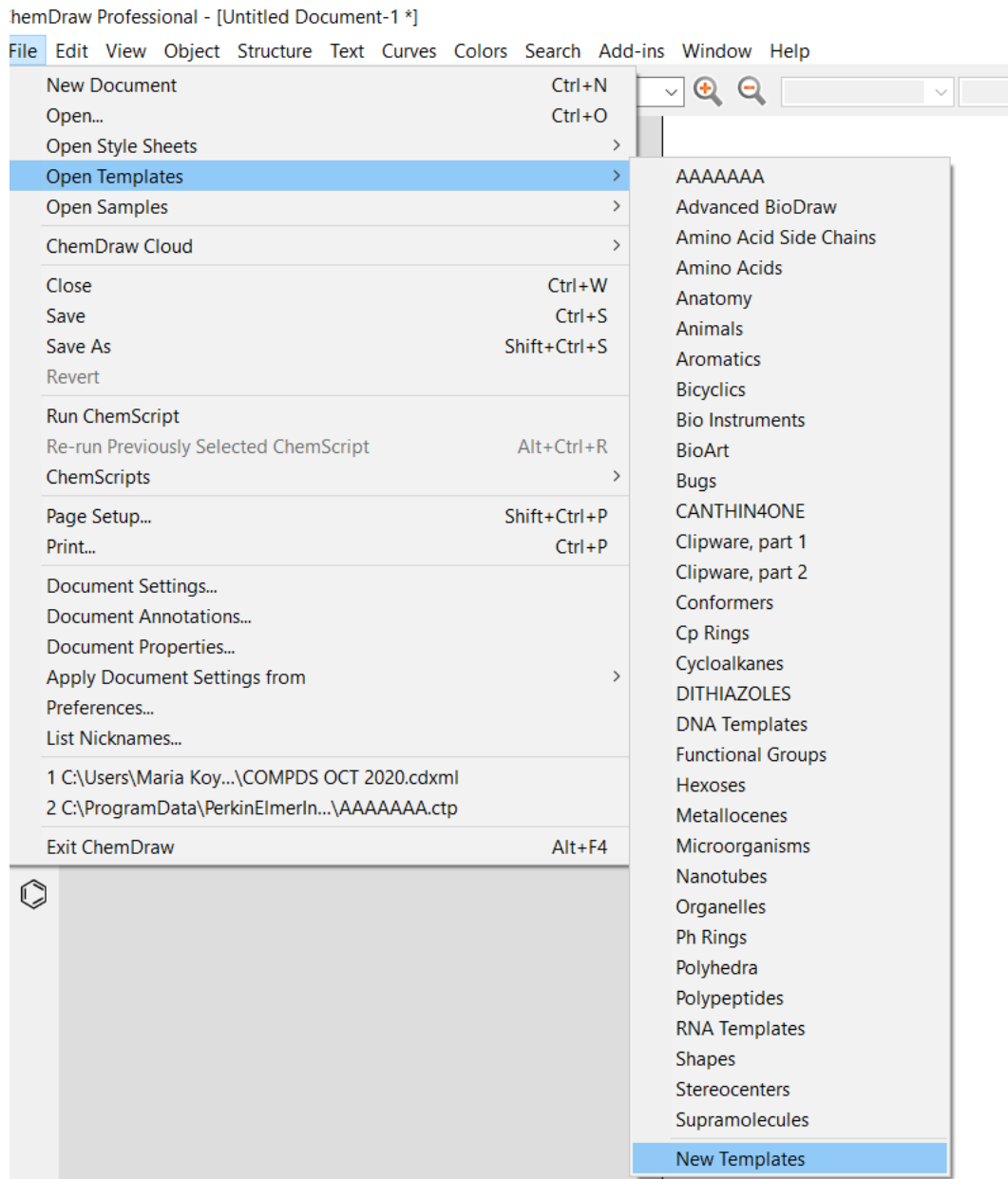
Περιεχόμενα

- [Πως να δημιουργήσω το δικό μου template](#)
- [Εργαλεία χρήσιμα για το σχεδιασμό αντιδράσεων και μηχανισμών](#)
- [Εμφάνιση “Characters Window”](#)
- [Αναστροφή και περιστροφή](#)
- [“Clean Up Structure”](#)
- [Πως να δημιουργήσω τα δικά μου κυρτά βέλη](#)
- [Εφαρμογές – Μηχανισμός Ελευθέρων Ριζών](#)
- [Crosshair](#)

Πως να δημιουργήσω το δικό μου template

Εάν υπάρχουν χημικές δομές, κυρτά βέλη κοκ τα οποία χρησιμοποιείτε συχνά μπορείτε να τα μετατρέψετε σε “σφραγίδες” για εύκολη πρόσβαση και να μην χάνετε χρόνο να τα ξανασχεδιάζετε.

Για να το κάνουμε αυτό επιλέγουμε από το File → Open Templates → New Templates



Πως να δημιουργήσω το δικό μου template (συνέχεια)

ChemDraw Professional - [Untitled Templates-3]

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

100%

A CH₂ X₂ X²

1

Στο νέο παράθυρο που εμφανίζεται έχουμε το grid με τις σφραγίδες 1. Κάθε τετραγωνάκι είναι μια σφραγίδα. Τα επιλέγουμε με αριστερό click και στη συνέχεια σχεδιάζουμε αυτό που θέλουμε να περιέχει. Όταν τελειώσουμε επιλέγουμε "File → Save As" 2

2

3

Δίνουμε το όνομα που θέλουμε και στη συνέχεια επιλέγουμε "Save" 4

Save As

Save in: ChemDraw Items

Name	Date modified
Add-ins	30/01/2020 22:49
BioDrawResources	30/01/2020 22:49
HotLink	30/01/2020 22:49
Monomers	30/01/2020 22:49
N2SData	30/01/2020 22:49
Nicknames	30/01/2020 22:49
AAAAAAA	27/10/2020 16:18
Advanced BioDraw	19/09/2019 04:46
Amino Acid Side Chains	19/09/2019 04:46
Amino Acids	19/09/2019 04:46
Anatomy	19/09/2019 04:46

Save as type: ChemDraw Templates (*.ctp)

Save 4

Cancel

Options... Go To ChemDraw Items

Exit ChemDraw Alt+F4

Πως να δημιουργήσω το δικό μου template (συνέχεια)

ChemDraw Professional - [Maria.ctp]

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

New Document Ctrl+N
Open... Ctrl+O
Open Style Sheets >
Open Templates >
Open Samples >
ChemDraw Cloud >
Close Ctrl+W
Save Ctrl+S
Save As Shift+Ctrl+S
Revert
Run ChemScript
Re-run Previously Selected ChemScript Alt+Ctrl+R
ChemScripts >
Page Setup... Shift+Ctrl+P
Print... Ctrl+P
Document Settings...
Document Annotations...
Document Properties...
Apply Document Settings from >
Preferences...
List Nicknames...
1 Maria.ctp
2 C:\ProgramDat...\Carbon Hybridization.cdxml
3 C:\ProgramData\Per...\Stereoisomerism.cdxml
4 C:\ProgramData\P...\Citric Acid Cycle.cdxml
5 C:\Users\Maria Koy...\COMPDS OCT 2020.cdxml
6 AAAAAAA.ctp
Exit ChemDraw Alt+F4

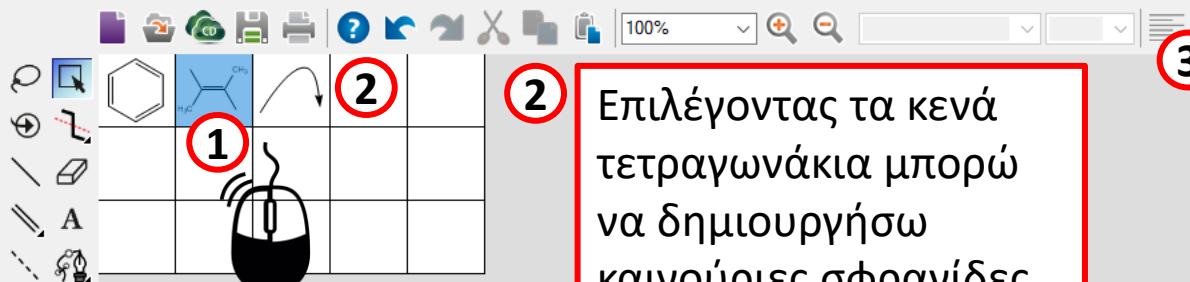
AAAAAAA
Advanced BioDraw
Amino Acid Side Chains
Amino Acids
Anatomy
Animals
Aromatics
Bicyclics
Bio Instruments
BioArt
Bugs
CANTHIN4ONE
Clipware, part 1
Clipware, part 2
Conformers
Cp Rings
Cycloalkanes
DITHIAZOLES
DNA Templates
Functional Groups
Hexoses
Maria
Metallocenes
Microorganisms
Nanotubes
Organelles
Ph Rings
Polyhedra
Polypeptides
RNA Templates
Shapes
Stereocenters
Supramolecules
New Templates

Αν θέλω να προσθέσω νέες σφραγίδες ή να αλλάξω τις υφιστάμενες μου σφραγίδες που έχω αποθηκεύσει στο Template μου τότε απλά το ανοίγω από το menu *File*
“File → Open Templates → Maria (το ονομα που δώσατε στο Template σας)”

Πως να δημιουργήσω το δικό μου template (συνέχεια)

ChemDraw Professional - [Maria.ctp *]

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help



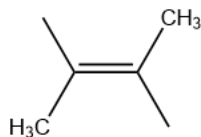
1

2

2

Επιλέγοντας τα κενά τετραγωνάκια μπορώ να δημιουργήσω καινούριες σφραγίδες.

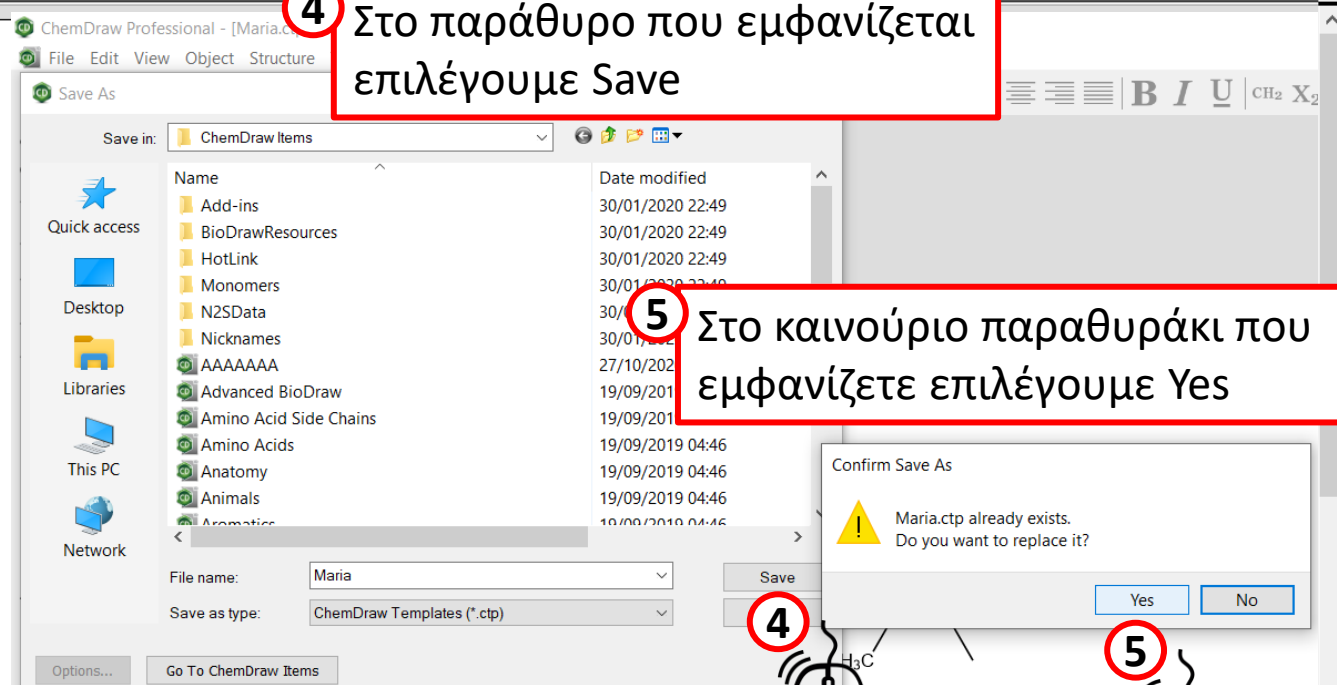
1 Για να αλλάξω μια υφιστάμενη σφραγίδα απλά επιλέγω το τετραγωνάκι που τη περιέχει και κάνω τις αλλαγές που χρειάζονται στο χαρτί εργασίας.



3 Όταν τελειώσουμε επιλέγουμε "File → Save As"

4 Στο παράθυρο που εμφανίζεται επιλέγουμε Save

5 Στο καινούριο παραθυράκι που εμφανίζετε επιλέγουμε Yes

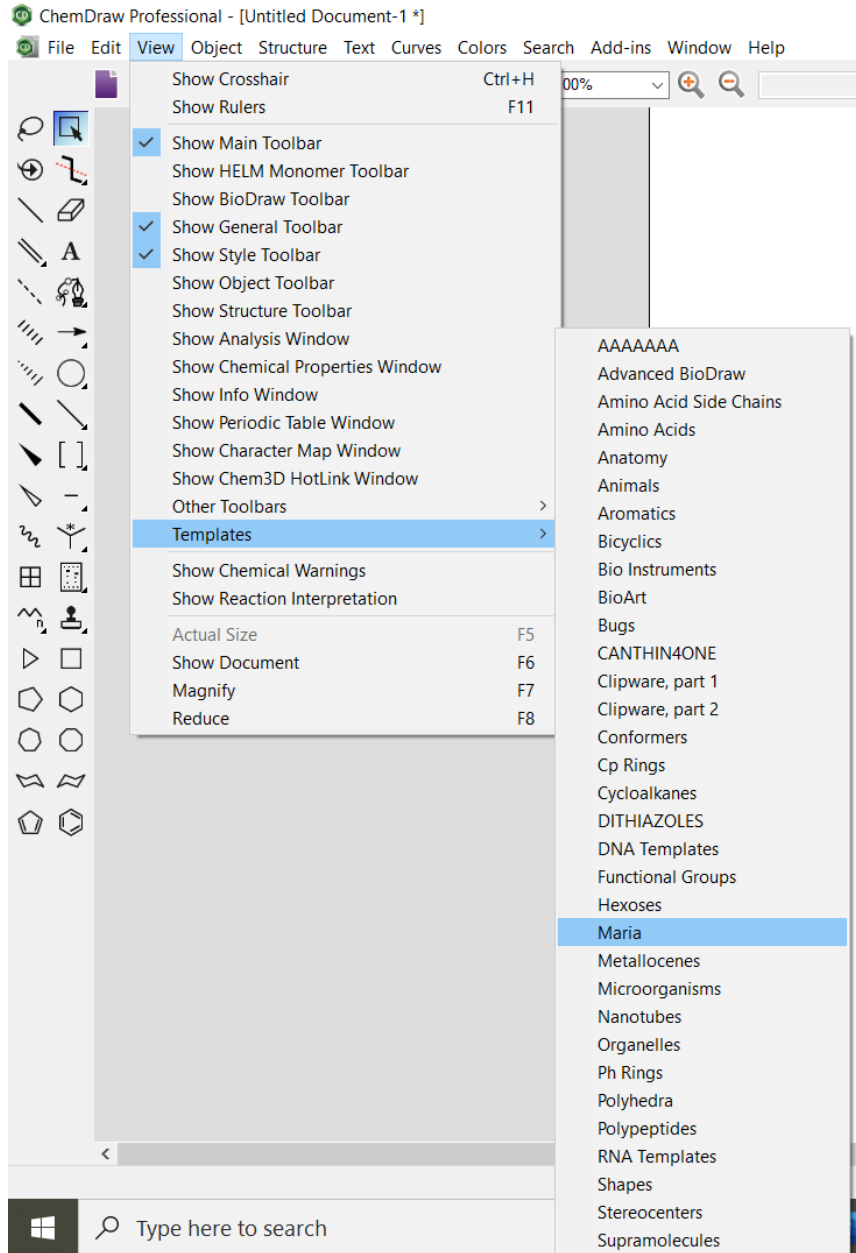


4

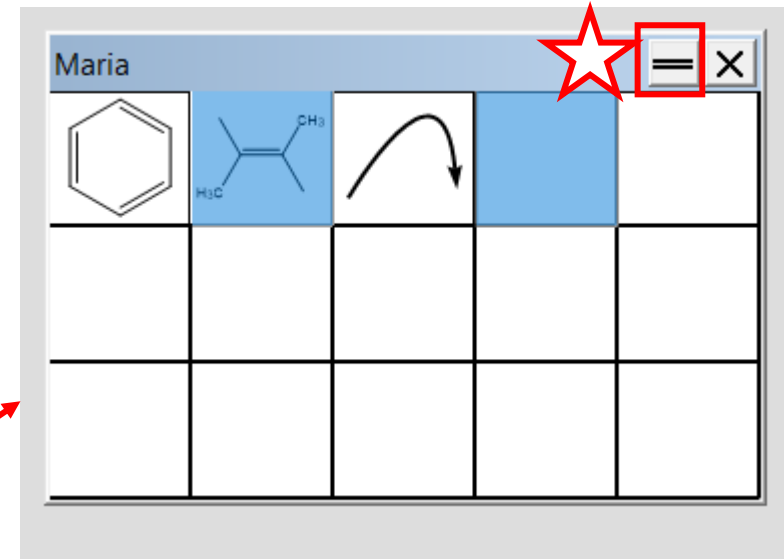
5



Πως να δημιουργήσω το δικό μου template (συνέχεια)

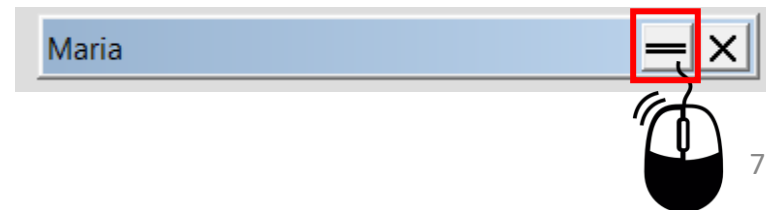


Μπορώ να έχω τις σφαργίδες μου συνεχώς ορατές στο παράθυρο εργασίας μου για εύκολη πρόσβαση από το menu *View* “View → Templates → Maria (το ονομα που δώσατε στο Template σας)”

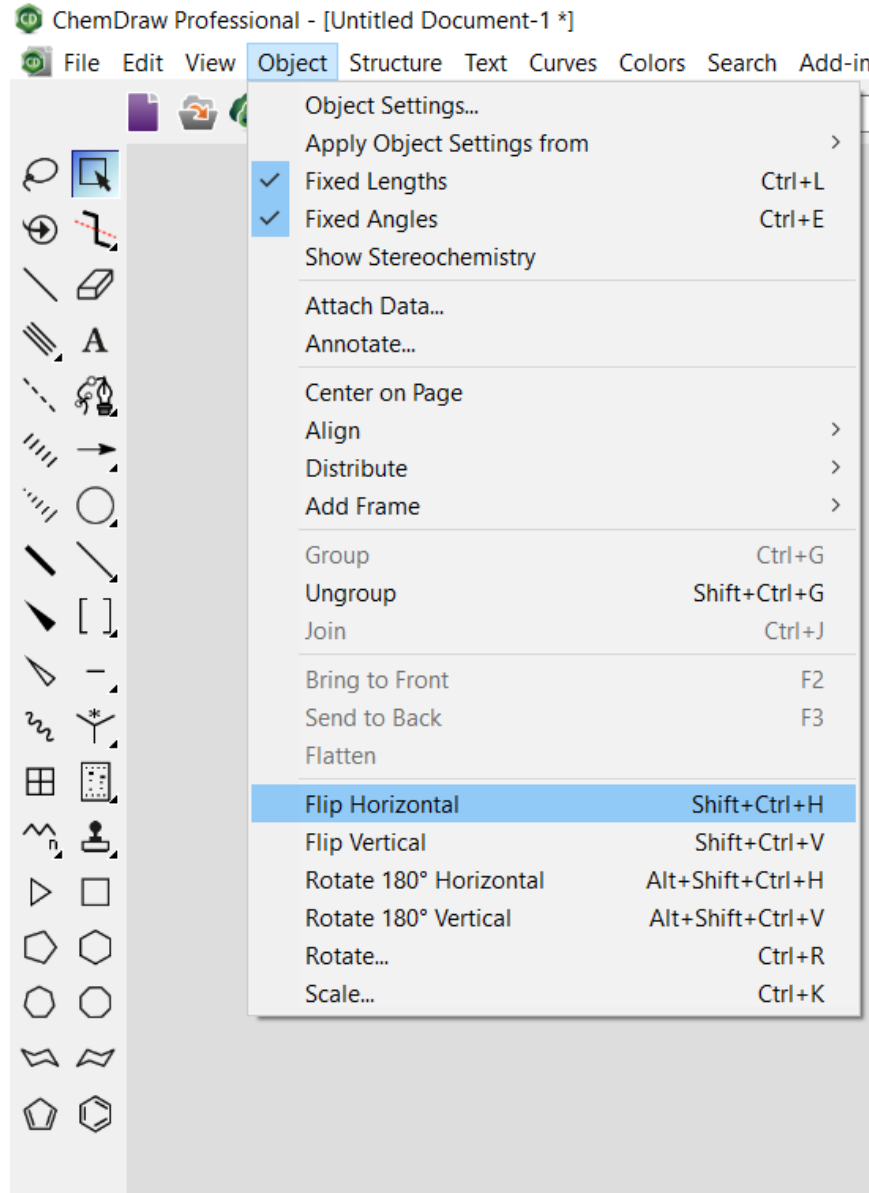


Για να τις χρησιμοποιήσω πατώ αριστερό click στη σφαργίδα που χρειαζομαι και στη συνέχεια αριστερό click στο χαρτί εργασίας

★ Minimise: μπορώ να συμπτύξω το παραθυράκι για να μην καταλαμβάνει χώρο όταν δεν το χρειαζομαι.



Αναστροφή και περιστροφή



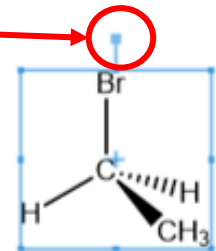
Αναστροφή: Επιλέγω με το lasso τη δομή που θέλω να αναστρέψω και επιλέγω από το menu “Object → Flip Horizontal”

Περιστροφή: Επιλέγω με το lasso τη δομή που θέλω να περιστρέψω και επιλέγω από το menu “Object → Rotate” στο παραθυράκι που ανοιγεί καθορίζω πόσες μοίρες θέλω να περιστρέψω.

Εναλλακτικά φέρνω το δείκτη μου πάνω σε αυτό το τετραγωνάκι

όπου ο δείκτης μετατρέπεται σε ένα διπλό κυρτό βέλος

Σε αυτό το σημείο πατώ αριστερό click και σέρνω το mouse μου προς τη κατεύθυνση που θέλω να περιστρέψω.



Tip: Για να επιλέξω μια δομή μπορώ απλά να κάνω *double click* πανω σε ένα από τα άτομα της δομής και αυτό θα έχει ως αποτέλεσμα την επιλογή ολόκληρης της δομής.

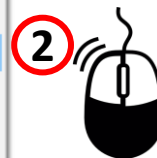
“Clean Up Structure”

Αν σχεδιάσω μια δομή όπου οι δεσμοί και οι γωνιές δεν φαίνονται φυσιολογικά μπορώ να τη διορθώσω επιλέγοντας την και από το menu “Structure” επιλέγω “Clean Up Structure”

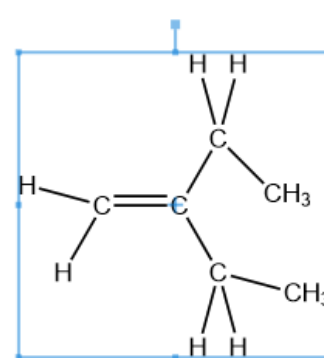
aw Professional - [Untitled Document-1 *]

lit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

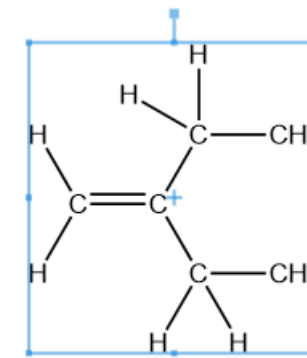
- Atom Properties...
- Bond Properties...
- Bracket Properties...
- Check Structure
- Clean Up Structure** Shift+Ctrl+K
- Clean Up Reaction Shift+Ctrl+X
- Clean Up Biopolymer
- Expand Label
- Contract Label
- Expand Generic Structure
- Expand Generic Structure to SDF...
- Toggle Aromatic Display Alt+K
- Add Multi-Center Attachment
- Add Variable Attachment
- R-Logic Query...
- Add 3D Property >
- Enhanced Stereochemistry >
- Map Reaction Atoms
- Clear Reaction Map
- Analyze Stoichiometry
- Autonumber Reaction
- Clear Reaction Numbers
- Predict ¹H-NMR Shifts
- Predict ¹³C-NMR Shifts
- Make Spectrum-Structure Assignment
- Add Structure to Dictionary...
- Define Nickname...
- Convert Name to Structure Shift+Ctrl+N
- Convert Structure to Name Alt+Ctrl+N



Επιλέγω
Clean Up Structure



Επιλέγω
τη χημική
δομή

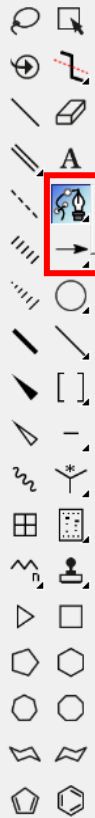


Πως να δημιουργήσω τα δικά μου κυρτά βέλη

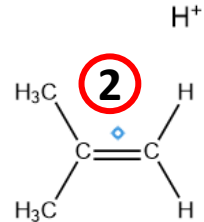
ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 *]

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

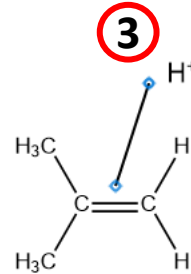
100% CH₂ X₂ X²



1 Από το εργαλείο Pen Tools επιλέγω τη δεύτερη πένα



Αριστερό click στο σημείο όπου θέλω να ξεκινά το βελος μου και ελευθερώνω.



Αριστερό click στο σημείο όπου θέλω να τελειώνει το βελος μου και ελευθερώνω.

2+3

Αυτό μου έχει δημιουργήσει μια ευθεία γραμμή με δύο γαλάζια κυκλάκια στα άκρα. Προσέχω να μην πατήσω κάπου αλλού.

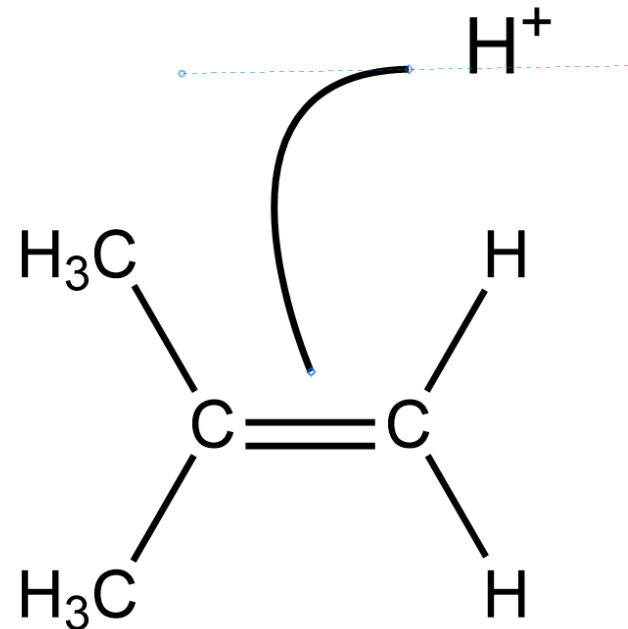
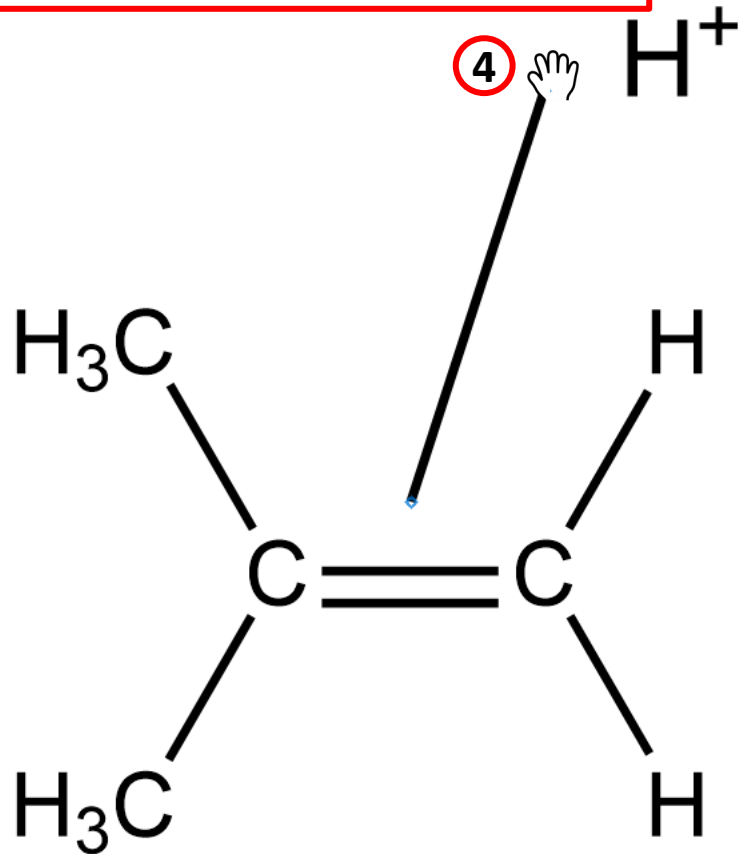
Πως να δημιουργήσω τα δικά μου κυρτά βέλη (συνέχεια)

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 *]

4 Φέρνω το δείκτη μου πάνω από το γαλάζιο κυκλάκι, όπου εξαφανίζεται ο σταυρός από το χεράκι.

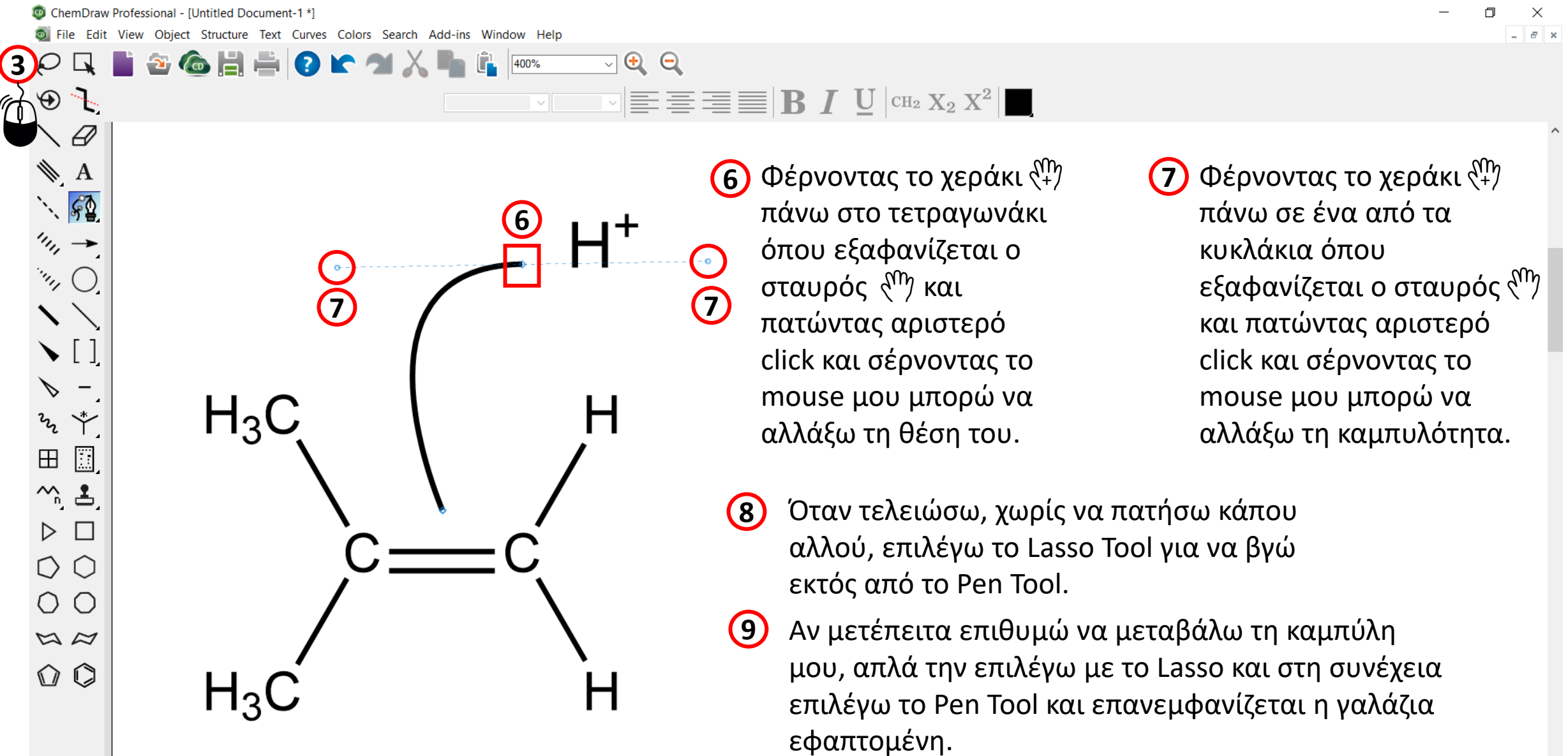


5 Σε αυτό το σημείο πατώ αριστερό click και αφήνοντας το πατημένο σέρνω το mouse μου και παρατηρώ ότι αλλάζει η καμπυλότητα. Τη φέρνω στη μορφή που θέλω και ελευθερώνω το mouse.



Η ενέργεια αυτή έχει οδηγήσει στη δημιουργία μιας εφαπτομένης γαλάζιας γραμμής, με δύο κυκλάκια στα άκρα και ένα τετραγωνάκι στο μέσο.

Πως να δημιουργήσω τα δικά μου κυρτά βέλη (συνέχεια)



3 Φέρνοντας το χεράκι (☞) πάνω στο τετραγωνάκι όπου εξαφανίζεται ο σταυρός (☞) και πατώντας αριστερό click και σέρνοντας το mouse μου μπορώ να αλλάξω τη θέση του.

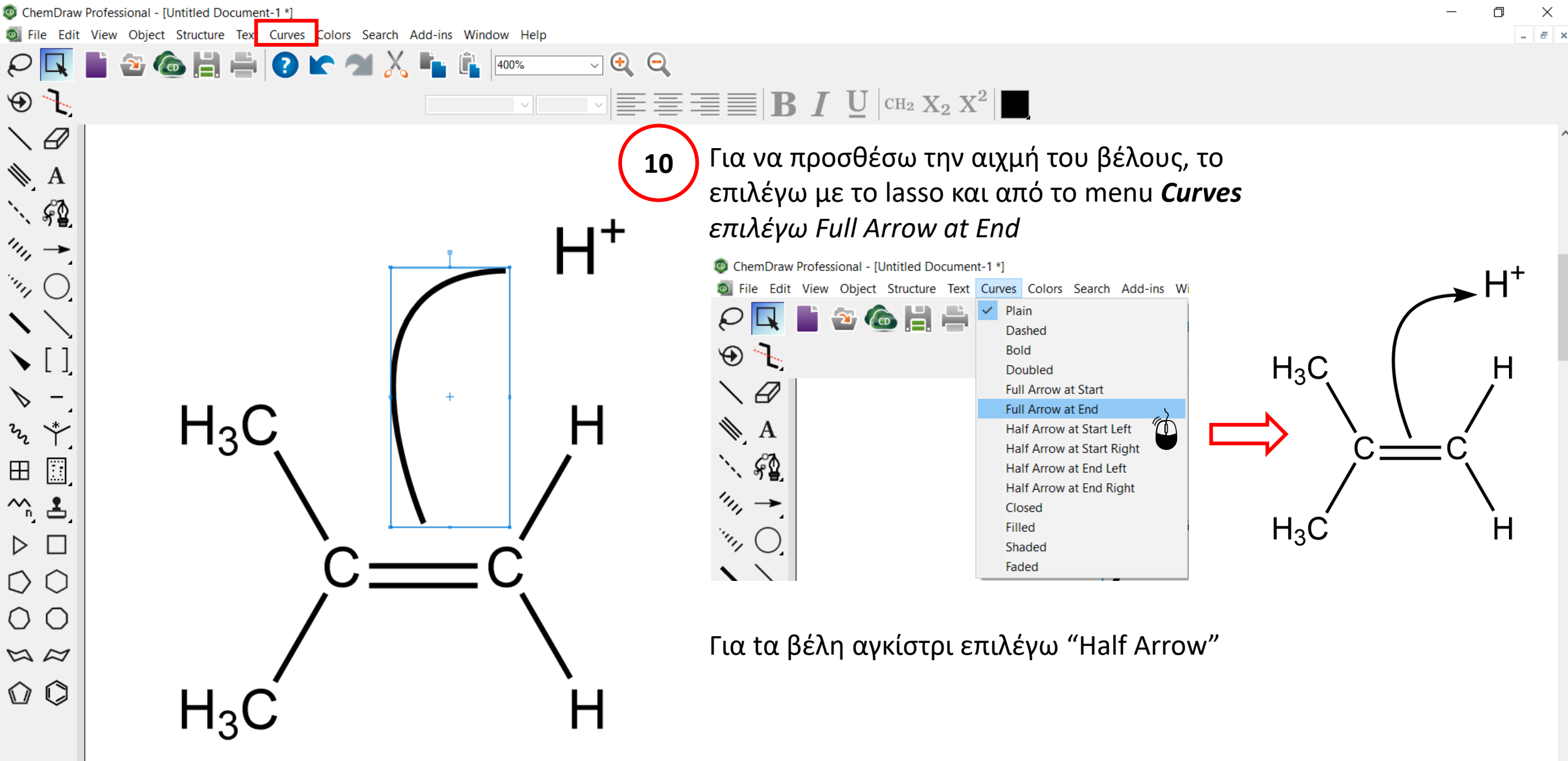
6 Φέρνοντας το χεράκι (☞) πάνω στο τετραγωνάκι όπου εξαφανίζεται ο σταυρός (☞) και πατώντας αριστερό click και σέρνοντας το mouse μου μπορώ να αλλάξω τη θέση του.

7 Φέρνοντας το χεράκι (☞) πάνω σε ένα από τα κυκλάκια όπου εξαφανίζεται ο σταυρός (☞) και πατώντας αριστερό click και σέρνοντας το mouse μου μπορώ να αλλάξω τη καμπυλότητα.

8 Όταν τελειώσω, χωρίς να πατήσω κάπου αλλού, επιλέγω το Lasso Tool για να βγώ εκτός από το Pen Tool.

9 Αν μετέπειτα επιθυμώ να μεταβάλω τη καμπύλη μου, απλά την επιλέγω με το Lasso και στη συνέχεια επιλέγω το Pen Tool και επανεμφανίζεται η γαλάζια επαφτομένη.

Πως να δημιουργήσω τα δικά μου κυρτά βέλη (συνέχεια)



10 Για να προσθέσω την αιχμή του βέλους, το επιλέγω με το lasso και από το μενού **Curves** επιλέγω *Full Arrow at End*

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 *]
File Edit View Object Structure Text **Curves** Colors Search Add-ins Window Help

400%

CH₂ X₂ X²

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 *]
File Edit View Object Structure Text **Curves** Colors Search Add-ins Wi

- Plain
- Dashed
- Bold
- Doubled
- Full Arrow at Start
- Full Arrow at End**
- Half Arrow at Start Left
- Half Arrow at Start Right
- Half Arrow at End Left
- Half Arrow at End Right
- Closed
- Filled
- Shaded
- Faded

Chemical structure showing a carbocation intermediate with a curved arrow pointing from the C=C double bond to the H⁺ ion. The arrow is highlighted with a blue lasso.

Chemical structure showing the final product, a carbocation intermediate with a curved arrow pointing from the C=C double bond to the H⁺ ion.

Για τα βέλη αγκίστρι επιλέγω "Half Arrow"

Εφαρμογές – Μηχανισμός Ελευθέρων Ριζών

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 *] **5**

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

150%

2 Προσθέτουμε τον απλό δεσμό

1 Γράφουμε Br

3 Βάζουμε το 2° Br

4 Με το Pen Tool σχεδιάζω τη καμπύλη του βέλους μου και από το **5** menu "Curves" επιλέγω "Half Arrow at End Left"

5 **1 2 3** Σχεδιάζουμε το Br₂ σε ανοικτή δομή: Τοποθετούμε το ένα άτομο βρωμίου με το Text Tool. Στη συνέχεια προσθέτουμε πάνω του ένα απλό δεσμό με το tool Solid Bond. Και στο άκρο του δεσμού με το Text Tool τοποθετούμε το 2° άτομο Br.

6 Με το lasso επιλέγω το βέλος που μόλις έχω δημιουργήσει, το κάνω copy (ctrl + C) & paste (ctrl + V), και από το menu "Object" επιλέγω "Flip Horizontal" και έτσι δημιουργώ και το 2° βέλος

Curves Colors Search Add-ins Wir

- Plain
- Dashed
- Bold
- Doubled
- Full Arrow at Start
- Full Arrow at End
- Half Arrow at Start Left
- Half Arrow at Start Right
- Half Arrow at End Left **5**
- Half Arrow at End Right
- Closed
- Filled
- Shaded
- Faded

Br—Br

Br—Br

Εφαρμογές – Μηχανισμός Ελευθέρων Ριζών (συνέχεια)

7 Από το Tool "Arrows" επιλέγω το απλό βέλος χημικής αντίδρασης.

8 Πατώ αριστερό click στο χαρτί εργασίας μου και σέρνω για να φέρω το βέλος στο επιθυμητό μήκος.

9 Τοποθετώ ένα άτομο Br

10 Από το menu "Chemical Symbols" επιλέγω τη ρίζα

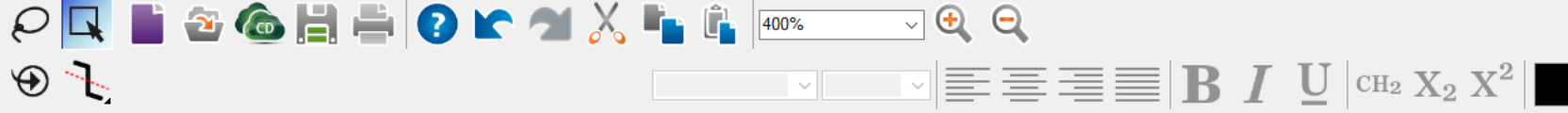
11 Αριστερό click πάνω στο άτομο Br και αφήνω πατημένο σέρνοντας το mouse μου για να φέρω τη ρίζα στην επιθυμητή θέση

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 *]
File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help
150%
CH₂ X₂ X²

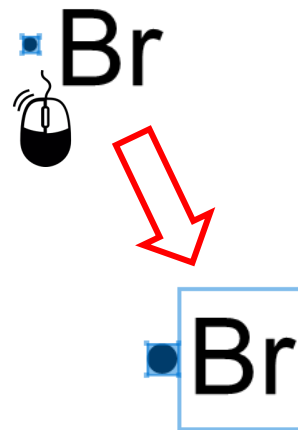
Εφαρμογές – Μηχανισμός Ελευθέρων Ριζών (συνέχεια)

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 *]

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help



12 Για να αλλάξω το μέγεθος της ρίζας, την επιλέγω με το lasso.



13 Φέρνω το δείκτη μου στη γωνιά του γαλάζιου τετράγωνα, που περιβάλλει τη ρίζα όταν την επιλέξω, όπου και αλλάζει σε διπλό βέλος. Σε αυτό το σημείο κάνω αριστερό click και αφήνοντας το πατημένο σέρνω το mouse μου και ελευθερώνω όταν επιτύχω το επιθυμητό μέγεθος.

Εφαρμογές – Μηχανισμός Ελευθέρων Ριζών (συνέχεια)


ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 *]
File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

200%

Arial 10

I U CH₂ X₂ X² ■

14 Με copy & paste δημιουργώ τη 2^η ρίζα Br και με το Text tool τοποθετώ το + της χημικής αντίδρασης.



15 Για να ευθυγραμμίσω τα αρχικά με τα προϊόντα και το βέλος, αρχικά επιλέγω τα αντικείμενα που θέλω να θεωρούνται ως ένα και τα κάνω group

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 *]
File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins

- Object Settings...
- Apply Object Settings from >
- Fixed Lengths Ctrl+L
- Fixed Angles Ctrl+E
- Show Stereochemistry
- Attach Data...
- Annotate...
- Center on Page
- Align >
- Distribute >
- Add Frame >
- Group Ctrl+G**
- Ungroup Shift+Ctrl+G
- Join Ctrl+J
- Bring to Front F2
- Send to Back F3
- Flatten
- Flip Horizontal Shift+Ctrl+H
- Flip Vertical Shift+Ctrl+V
- Rotate 180° Horizontal Alt+Shift+Ctrl+H
- Rotate 180° Vertical Alt+Shift+Ctrl+V
- Rotate... Ctrl+R
- Scale... Ctrl+K

Εφαρμογές – Μηχανισμός Ελευθέρων Ριζών (συνέχεια)

16 Επιλέγω όλα τα αντικείμενα που θέλω να ευθυγραμμίσω και επιλέγω “Align → T/B Centers”

17 Για να τα κατανέμω σε ίσες αποστάσεις μεταξύ τους επιλέγω “Distribute → Horizontally”

18 Με τον ίδιο τρόπο σχεδιάζουμε τον υπόλοιπο μηχανισμό

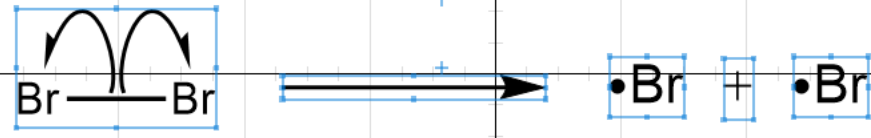
Crosshair

ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 *]

File Edit View Object Structure Text Curves Colors Search Add-ins Window Help

- ✓ Show Crosshair **Ctrl+H**
- Show Rulers **F11**
- ✓ Show Main Toolbar
- Show HELM Monomer Toolbar
- Show BioDraw Toolbar
- ✓ Show General Toolbar
- ✓ Show Style Toolbar
- Show Object Toolbar
- Show Structure Toolbar
- Show Analysis Window
- Show Chemical Properties Window
- Show Info Window
- Show Periodic Table Window
- Show Character Map Window
- Show Chem3D HotLink Window
- Other Toolbars >
- Templates >
- Show Chemical Warnings **F5**
- Show Reaction Interpretation **F6**
- Actual Size **F7**
- Show Document **F8**
- Magnify **F7**
- Reduce **F8**

Για την ευθυγράμμιση είναι επίσης χρήσιμη η εμφάνιση βοηθητικών γραμμών τις οποίες μπορείτε να εμφανίσετε από το "View → Show Crosshair"



Στοιχεία επικοινωνίας



kogioni.maria@ucy.ac.cy



@MariaKoyioni



+35722892804