

Návod pro práci s programem ACD/ChemSketch

verze 12

1) Stručně o ChemSketchi

Program ACD/ChemSketch slouží ke kreslení chemických struktur včetně jejich vizualizace a hodí se pro kreslení i jiné chemické grafiky (např. chemických aparatur).

2) Získání programu

Program ACD/ChemSketch Freeware je k dispozici ke stažení na internetové adrese <http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/>. Aktuální verze nese číslo 14. V multimediální učebně je nainstalována verze č. 12, k níž se vtaňuje i tento návod (a lze ji stáhnout např. zde <http://www.slunecnice.cz/sw/acd-chemsketch/>). Freewarová verze je zdarma pouze pro osobní potřebu či výukové účely.

3) Prostředí Structure/Draw

ChemSketch pracuje ve dvou základních prostředích: **Structure** a **Draw**, mezi nimiž se přepíná tlačítka

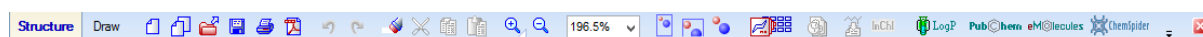
Structure **Draw** umístěnými v levém horním rohu obrazovky. V prostředí **Structure** lze kreslit chemické vzorce (struktury) a reakční schémata, zatímco **Draw** slouží ke kreslení jiných grafických objektů.

Pracovní prostředí se skládá z následujících prvků, které jsou v režimu Structure/Draw velmi podobně uspořádané.

Menu

File Edit Pages Tools Templates Options Documents Add-Ons I-Lab ACD/Labs Help

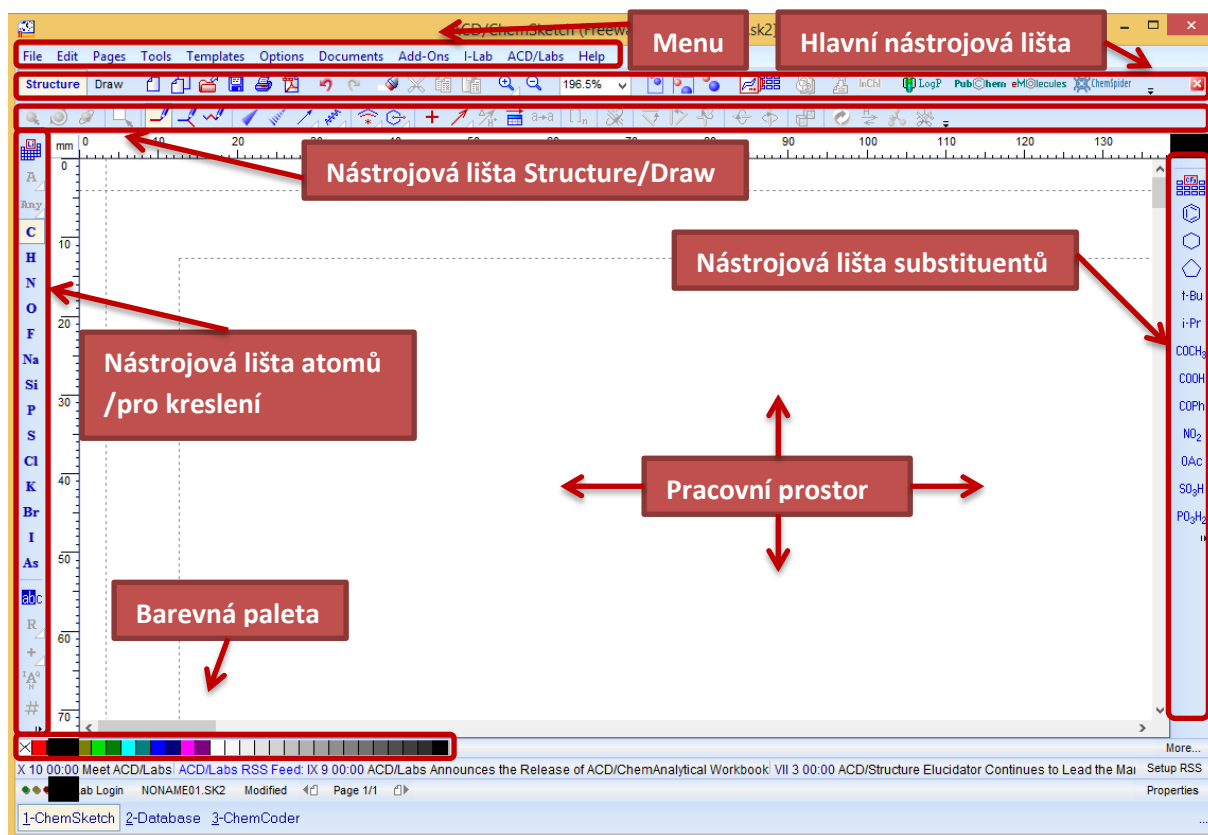
Hlavní nástrojová lišta (zkráceně hlavní lišta)

Structure Draw  196.5%

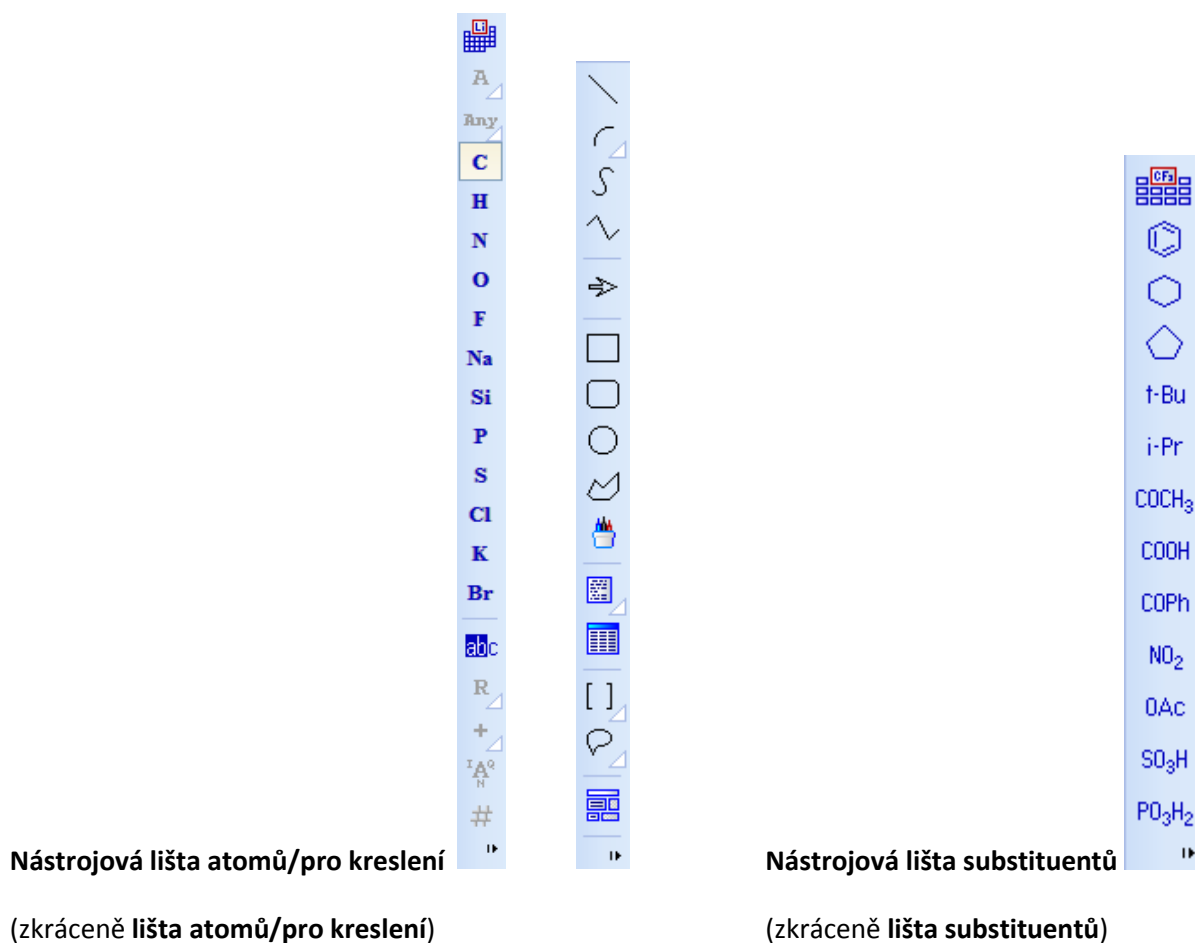
Nástrojová lišta Structure/Draw (zkráceně lišta Structure/Draw)







Obrázek 1: Celkové uspořádání pracovního prostředí programu





Barevná paleta



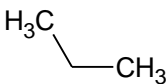
4) Prostředí Structure

a) Normální kreslení (Draw Normal)

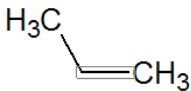
1. V prostředí **Structure** vyberte ikonu **Draw Normal**  v **Nástrojové liště Structure** (pokud jste po spuštění programu neklikli na jinou ikonu **lišty Structure**, je ikona **Draw Normal** ve výchozím nastavení vybraná).

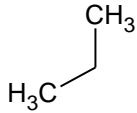
2. Vyberte **atom uhlíku**  v **Nástrojové liště atomů**.

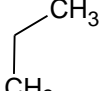
3. Kliknutím levým tlačítkem do volného pracovního prostoru se vykreslí **CH₄**. Opětovným kliknutím na CH₄ se přidá **-CH₃** skupina a vznikne **H₃C-CH₃**. Klikneme-li podruhé

na původní atom uhlíku, vznikne 

4. Kliknutím na ikonu **Set Bond Vertically**  a kliknutím na jakoukoli vazbu vytvořeného

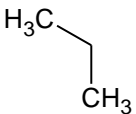
vzorce (např. na vyznačenou vazbu ) se struktura natočí touto vazbou


vertikálně (svisle), v uvedeném příkladu takto: . Klikneme-li znovu na tutéž vazbu,

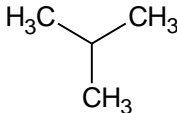
struktura se nám vertikálně přetočí . Analogicky funguje ikona **Set Bond Horizontally**

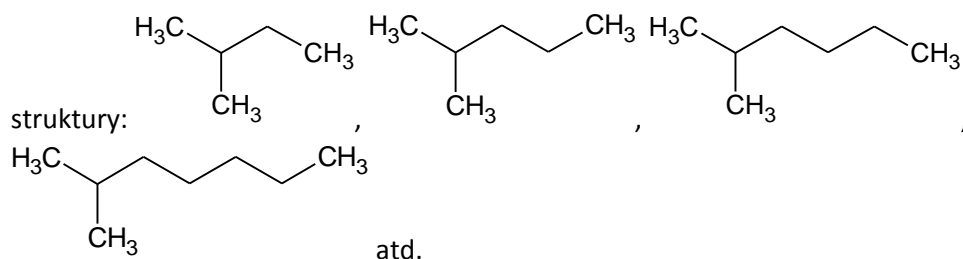


5. Klikneme-li nyní na ikonu **Flip Left to Right** , struktura se nám překlopí podél pomyslné

vertikální osy a vznikne . Analogicky funguje tlačítko **Flip Top to Bottom**

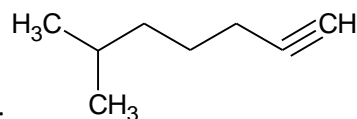
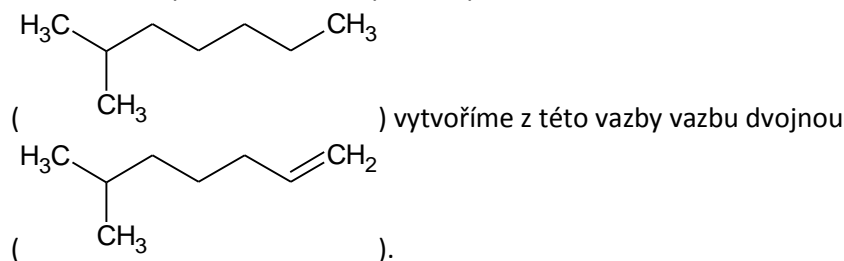
(překlopení podél pomyslné horizontální osy struktury), či **Flip on Bond**  (překlopení podél pomyslné osy struktury procházející vybranou vazbou).

6. Kliknutím na **Draw Normal** a prostřední (nevyznačený) atom uhlíku se vykreslí . Opakovaným kliknutím na atom uhlíku nejvíce vpravo postupně získáme následující




b) Dvojn  a trojn  vazby

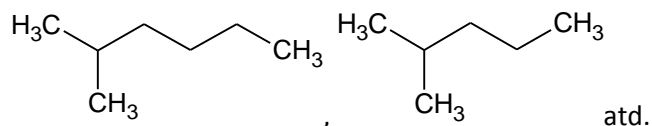
1. **Kliknut m na poslední vazbu** vpravo v poslední nakreslen  struktuře




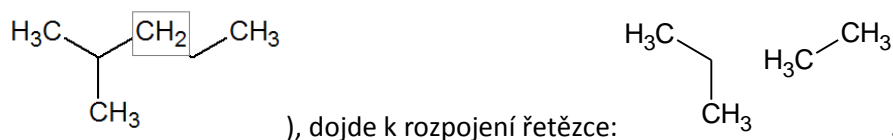
2. **Druh m kliknut m na tuto vazbu** vznikne vazba trojn :
3. **Třet m kliknut m na tuto vazbu** vznikne op t vazba jednoduch .

c) Maz n  atom 


1. Po kliknut  na ikonu **Delete**  v **Hlavn  n strojov  lišt ** a n sledn m najet  na n kter  atom   skupinu atom  v j z nakreslen  struktuře se objev  velk   ern  š pka s n pisem **DEL** a po kliknut  jsou tyto atomy smaz ny. Budeme-li takto postupn  klikat na atomy uhl ku ve struktuře nejv ce vpravo, budou postupn  vznikat n sleduj c  struktury:



2. Efektu maz n  lze tak  dos hnout pomocí ikony **Select/Move**  v lišt  **Structure** a n sledn ho ozna en  atomu/skupiny atom , je  m  b t vymaz na společn  se stiskem kl vesy **Delete**. Ozna me-li takto atomy uprostřed řet zce (např. jako na obr zku



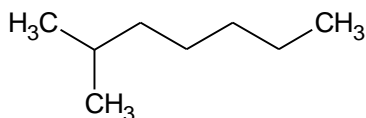
d) Zrušení akce

1. Pokud provedeme nechtěnou operaci, můžeme ji vrátit zpět pomocí ikony **Undo** (Zrušit)  . Jakmile využijeme tlačítko Undo (můžeme i několikrát za sebou), je aktivována ikona **Rendo**



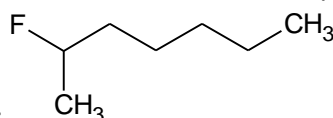
(Předělat), která vrací změny provedené ikonou **Undo**.

2. Stejného efektu lze dosáhnout pomocí klávesových zkratk **Ctrl+Z – Undo**, **Ctrl+Y – Rendo**.
3. Vyzkoušejte si uvedené ikony či zkratky a nakonec získajte zpět původní strukturu z bodu 6 oddílu **Normální kreslení** (před vysvětlováním násobných vazeb), tedy




e) Výměna atomů

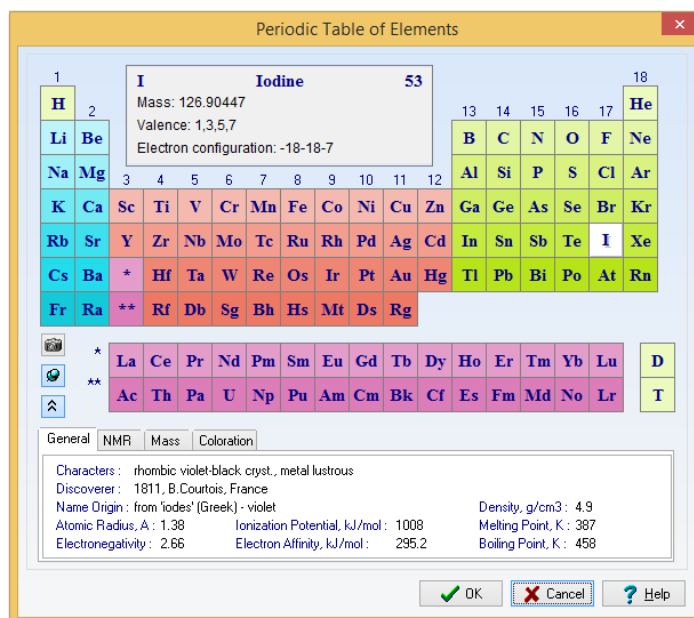
1. Kliknutím např. na atom fluoru **F**  v **liště atomů** a následným kliknutím na levý uhlíkový



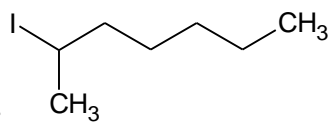
atom se tento změní v atom fluoru:

2. Pokud některý atom (např. **I**) není v liště atomů, stačí kliknout na **ikonu periodické tabulky**

v téže liště  a atom z ní vybrat a následně potvrdit tlačítkem **OK**. Tím dojde k zaznamenání atomu do **lišty atomů**.




3. Máme-li vybraný atom jodu **I** v **liště atomů** a klikneme na atom fluoru v naší struktuře, dojde

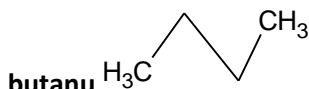


k jejich záměně:

f) Nepřetržité kreslení (Draw Continuous)

1. Pokud v režimu **Normálního kreslení** klikneme na dvě volná místa pracovní plochy, vzniknou dvě skupiny CH_4 .

2. Pokud přejdeme do režimu **Nepřetržitého kreslení (Draw Continuous)**, ikona  a opět klikneme na dvě volná místa pracovní plochy, vznikne molekula **ethanu**, dále **propanu**,

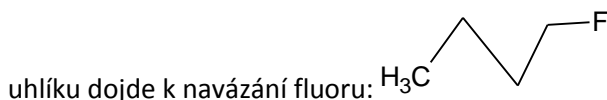


butanu atd. Kreslení ukončíte např. kliknutím na tlačítko **Select/Move**.

V tomto režimu mohou být vazby kresleny vazby pouze z černě zvýrazněného atomu.

Automaticky je to poslední nakreslený atom. Chceme-li kreslit vazby z jiného atomu, stačí na něj kliknout, čímž se zvýrazní.


3. Chceme-li v režimu **Nepřetržitého kreslení nahradit atomy vodíku** např. **atomy fluoru**, musíme: a) v liště atomů vybrat atom fluoru, b) označit kliknutím atom uhlíku (např. ten úplně vpravo v butanu), na který se má fluor navázat, c) dalším kliknutím na tento atom

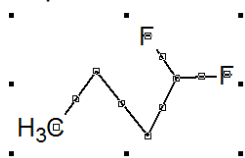


uhlíku dojde k navázání fluoru: . Chceme-li navázat další atom fluoru, musíme postup b), c) opakovat – označit atom uhlíku a dalším kliknutím navázat fluor



g) Vybrání, přemístění, kopírování a mazání struktury


1. Pomocí ikony **Select/Move**  lze **vybrat** příslušnou **strukturu** a to tak, že klikneme do prostoru uvnitř obdélníkové plochy vymezené krajními atomy struktury:

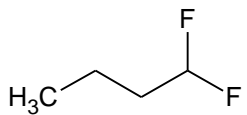


- . Strukturu lze také vybrat kliknutím a tažením myši (při vybrané ikoně **Select/Move**).
2. Po najetí myši na některý z atomů nebo některou z vazeb struktury (u kurzoru se objeví černý křížek) lze tažením myši tuto strukturu **přemístit na pracovní ploše**. Uvolněním myši dojde k umístění struktury.
 3. Tlačítko **Select/Move** lze také použít pro rychlé **vykopírování struktury** do jiného programu, např. **MS Word**. Stačí strukturu označit, zkopírovat pomocí zkratky **Ctrl+C** a vložit do daného programu pomocí zkratky **Ctrl+V**. Strukturu také můžeme zkopírovat přímo **do ChemSketchu**. Po stisknutí **Ctrl+C** a **Ctrl+V** se objeví náhled struktury, kterou snadno umístíte na vybrané místo kliknutím myši.
 4. Vybereme-li pomocí **Select/Move** strukturu, nebo více struktur a stiskneme-li klávesu **Delete**, dojde k jejich vymazání. Můžeme tak vymazat kopii právě vložené struktury z bodu 3.

h) Vyčištění struktury

1. Vybereme strukturu nakreslenou v rámci nepřetržitého kreslení (viz bod g)) pomocí ikony **Select/Move**.

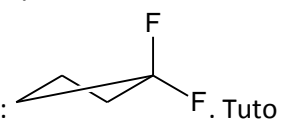
2. Následně stiskneme ikonu **Clean Structure** (Vyčištění struktury)  na **Nástrojové liště Structure**, čímž se optimalizují všechny vazebné délky a úhly v nakreslené struktuře:



3. Pokud stiskneme ikonu **Clean Structure** aniž by byla vybrána konkrétní struktura, optimalizují se všechny struktury na stránce.

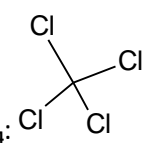
i) Tažení myši

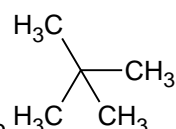
1. V prostředí **Draw Normal** či **Draw Continuous** lze využít tažení myši.
2. **Táhnutím myši od jednoho atomu ke druhému** (např. mezi dvěma skupinami CH₄) se vykreslí jednoduchá vazba mezi těmito atomy.
3. **Tažením myši od vybraného atomu do volného prostoru** se vloží nový atom na konec kreslené vazby. **Naopak tažením myši z volného prostoru k atomu** se vloží atom na začátek nové vazby.
4. Zkusme táhnout myši ve struktuře z bodu 2 oddílu Vyčištění struktury: od levého atomu

uhlíku k atomu uhlíku nejvíce vpravo. Vznikne následující struktura: . Tuto

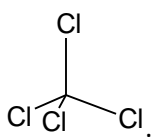
strukturu optimalizujeme pomocí **Clean Structure**: .



j) Prostorové vazby



1. Nakresleme strukturální vzorec tetrachlormethanu **CCl₄**: . (Např. pomocí **Draw**

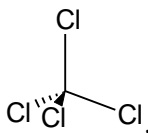
Normal nakreslíme , kde následně nahradíme methylové skupiny atomy chloru.)

2. Vybereme strukturu a klikneme na ikonu **3D Optimization**  v liště **Structure**. Tím nám

bude umožněno pomocí myši natočit strukturu do následující polohy: .



3. Nyní pomocí ikon  a  můžeme vyznačit prostorové vlastnosti vazeb. Vybereme ikonu a následně označíme příslušnou vazbu:

- ikona  slouží k vytvoření **vazeb orientovaných směrem k nám**,
- ikona  slouží k vytvoření **vazeb orientovaných od nás pryč**,

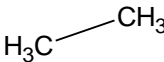



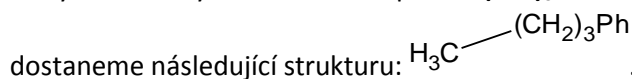
- vytvoříme následující strukturu:

4. Podobně fungují následující ikony:

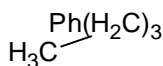
- ikona  slouží k vytvoření **koordináčních vazeb**,
- ikona  slouží k vytvoření **neurčitých vazeb**,
- kliknutím do pravého dolního rohu obou ikon můžeme vybrat různá typy těchto vazeb.

K) Složitější substituenty

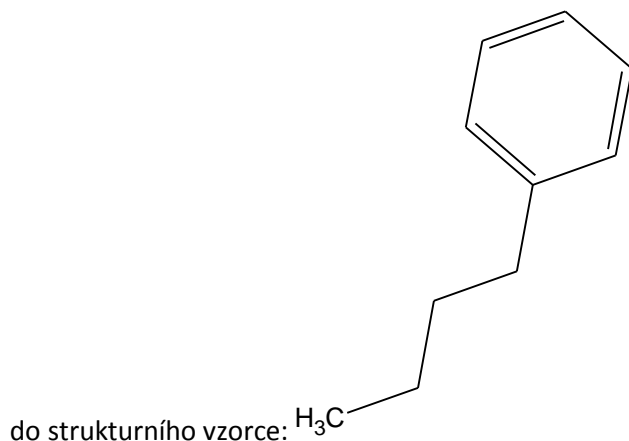
1. Nakresleme ethan, např. v režimu **Draw Continuous**: .
2. V **liště atomů** vyberte ikonu **Edit Atom Label**  a klikněte na pravou methylovou skupinu. Tato ikona umožňuje nahradit popisec koncového atomu písmennými zkratkami.
3. Zapišme do textového pole v nově otevřeném dialogovém okně **Edit Label** „(CH₂)₃Ph“. Povšimněme si, že jakmile napíšete číslo, automaticky se z něj vytvoří dolní index, ve výsledku tedy budeme mít napsáno: (CH₂)₃Ph. Následně aktivujeme tlačítko **Insert**, čímž




4. Kliknutím na ikonu **Change Position**  se změní orientace připojeného substituentu:

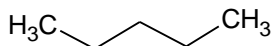


5. Klikněme na **Edit Atom Label** a označme náš nový substituent (CH₂)₃Ph v dané struktuře. V dialogovém okně **Edit Label** pak klikněme na tlačítko **Expand**. Popisek se rozvine

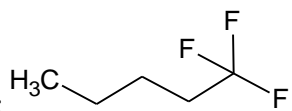


I) Kreslení řetězců (Draw Chains)

1. Kliknutím na ikonu **Draw Chains**  (při vybraném atomu **C**), kliknutím do pracovního prostoru a tažením myši se vytváří řetězec. Zároveň program pomocí čísel napovídá, kolik atomů uhlíku je již nakresleno. Přestaneme-li táhnout u **C 5**, nakreslíme **pentan**:

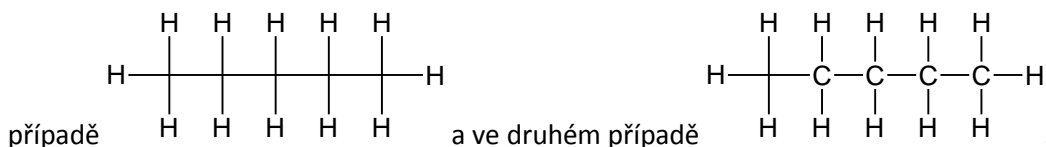


2. Chceme-li substituovat některý z vodíků, vybereme substituent (např. **F**) a klikneme



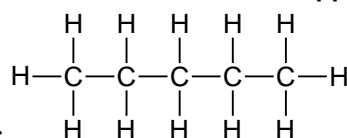
na požadovaný atom uhlíku (např. na pravý **C**):

3. Režim **Draw Chains** také můžeme využít tak, že vyjdeme z **methanu** CH_4 a následně klikneme na tuto skupinu. Vznikne **ethan** $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$. Následně můžeme klikat na koncové či vnitřní uhlíky – bude docházet k větvení řetězce **pod úhlem 120°** a se **stejnými délkami vazeb**.
4. Budeme-li postup z bodu 1 a 3 opakovat se stisknutou klávesou **Ctrl**, budou se vazby vykreslovat pod úhlem **180°** (v případě postupu z bodu 3: $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$), případně se nevykreslí vůbec (v případě postupu z bodu 1: $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$).
5. Vybráním struktury a volbou z **Menu Tools – Add Explicit Hydrogens** dostaneme v prvním



Pro rychlejší provedení zkuste na vybrané kopii struktury stisknout klávesové zkratky **Alt+T** a **Shift+Y**.

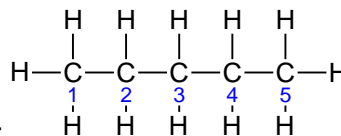
6. Vybereme-li libovolnou strukturu z bodu 5 a zvolíme-li v **Menu Tools – Structure Properties (Alt+T a Shift+P)**, otevře se nám dialogové okno **Properties**. V něm můžeme nastavit **zobrazování vnitřních atomů uhlíku**: zatržením **All** v sekci **Show Carbons** (na defaultně zobrazené záložce **Commons**). Nastavení provedeme stisknutím tlačítka **Apply**. V případě




obou dvou struktur dostaneme stejný výsledek:

7. Pokud budeme kreslit další strukturu, vnitřní atomy uhlíku se zobrazovat nebudou. Pomocí tlačítka **Set Default** v dialogovém okně **Properties** bychom mohli nastavení uložit do právě používaného stylu (**Current Style**) **Normal**. Lépe však bude vytvořit si **vlastní styl**: obsah pole **Current Style** přepíšeme např. na „**Výchozí styl**“ a zvolíme tlačítko **Save**. Naši volbu potvrdíme stisknutím tlačítka **Yes** v nově otevřeném okně **Save style**. Pomocí tlačítka **Set Default** v dialogovém okně **Properties** nastavíte svůj **Výchozí styl** jako výchozí pro všechny následující struktury (jinak by se i nadále používal styl **Normal**, který vnitřní uhlíky nezobrazuje). Po volbě jsme v novém okně dotázáni, zda se má volba aplikovat **na všechny dosud nakreslené struktury** – stačí zvolit **Ne**. Stejného efektu lze dosáhnout volbou v **Menu – Options – Set Structure Drawing Style** a výběrem defaultního stylu. Při tomto postupu se kdykoli můžeme vrátit k původnímu stylu **Normal**.

8. Pokud chceme řetězec očíslovat, využijeme ikonu **Manual Numbering** , která nám



umožní postupně označovat čísla jednotlivé atomy: . Volbou

v **Menu Tools – Generate – Name for Structure** (či volbou ikony  v **hlavní liště**) dojde k pojmenování struktury v angličtině podle nomenklatury IUPAC („pentane“). Pokud bychom chtěli číslování řetězce odstranit, v Menu zvolíme **Tools – Clear Numbering**.

9. **Dvojitým kliknutím na atom** nebo **vazbu** v nakreslené struktuře se zobrazí dialogové okno **Properties**, v němž můžeme měnit další vlastnosti (v příslušné záložce **Atom** či **Bond**).

V záložce **Atom** tak můžeme změnit typ písma pro vybraný atom, jeho velikost či barvu;


v záložce **Bond** násobnost vazby, prostorové vlastnosti, tloušťku či barvu.


10. Nakresleme **pentan** pomocí režimu **Draw Chains**, postupným klikáním na koncový atom při stisknuté klávese **Ctrl** při zvoleném **Výchozím stylu**: $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$. Následně v dialogovém okně **Properties** v záložce **Commons** odškrtneme pole **Auto**. Pokud by totiž zůstalo zaškrtnuté, změnou velikosti symbolu pro atom by se automaticky přepočítala i délka vazby. Jelikož chceme, aby se zobrazovaly všechny vazby ve struktuře, nastavíme délku vazby (**Bond Length**) např. na 10 mm a volbu potvrdíme tlačítkem **Apply**:

$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$. V nově vytvořené struktuře se první vazba jeví delší, vše však snadno spravíme, pokud na první skupinu atomů třikrát použijeme ikonu **Change Position**: $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$.


m) Vybírání, Změna velikosti a rotace

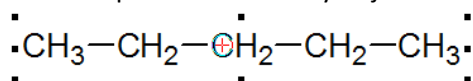
1. Používáme-li ikonu **Select/Move** (v **liště Structure**) a zároveň je poblíž ní zobrazena ikona

Laso On/Off v následujícím tvaru , vybírají se objekty (prostřednictvím kliknutí a tažení myši) jako **obdélníkové tvary**.

2. Je-li ikona **Laso On/Off** přepnuta do režimu  (stačí kliknout na obdélníkovou ikonu z bodu 1), vybírají se objekty prostřednictvím nepravidelných tvarů „házeného lasa“, které se vytvoří kliknutím a tažením myši.

3. Je-li vybrána struktura, lze ji tažením za její libovolný roh **zmenšit** nebo **zvětšit**.



4. S ikonou **Select/Rotate/Resize**  můžeme kliknutím a tažením myši vybrat strukturu. Tím se nám uprostřed struktury objeví červené kolečko – **střed otáčení**:




. Pokud se k tomuto kolečku přiblížíme myší, změní se kurzor v oboustrannou šipku. V tuto chvíli můžeme kliknutím a tažením myši otočit strukturu

kolem vyznačeného středu: $\text{CH}_3-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{CH}_3$. Pokud **chceme změnit střed otáčení**, stačí jen na něj kliknout a tažením myši jej posunout.


n) Chemické reakce

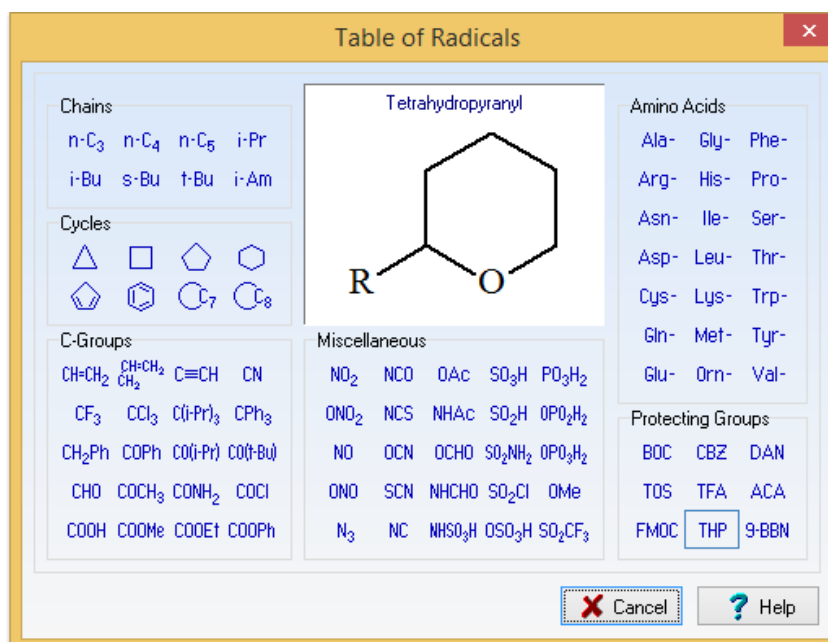
1. K vyznačení slučovaných sloučenin použijeme ikonu **Reaction Plus**  z lišty **Structure**.
2. Pro zápis chemických reakcí využijeme ikonu **Reaction Arrow** . Kliknutím do pravého dolního rohu ikony můžeme vybrat různé typy reakčních šipek. Šipka se vykreslí kliknutím a tažením myši.
3. Pokud chceme šipku doplnit o text nad či pod šipkou, vybereme ikonu **Reaction Arrow**

Labeling  s jejíž pomocí označíme příslušnou šipku. V nově otevřeném dialogovém okně **Edit Reaction Conditions** pak do textových polí nad a pod šipkou zapíšeme požadované údaje.

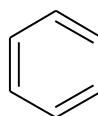
o) Šablony

Složité struktury nemusíme kreslit celé od začátku, ale můžeme využít předdefinovaných šablon. Pro tyto účely lze využít:

- ikonu **Table of Radicals (Tabulka substituentů)**  v liště **substituentů** – po jejíž aktivaci můžeme vybírat z několika možných substituentů.

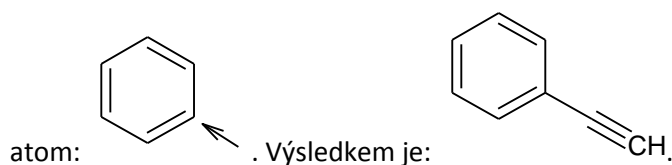



Obrázek 2: Tabulka substituentů



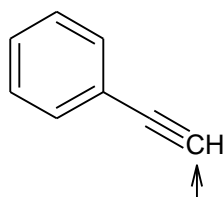
1. V **Tabulce substituentů** zvolme **benzen** a kliknutím jej umístíme do pracovního prostoru. Po použití substituentu se jemu příslušná ikona objeví v liště substituentů (pokud tam již nebyla dříve, jako benzen).

2. V tabulce substituentů zvolme ethynyl () a klikněme na šipkou vyznačený atom:

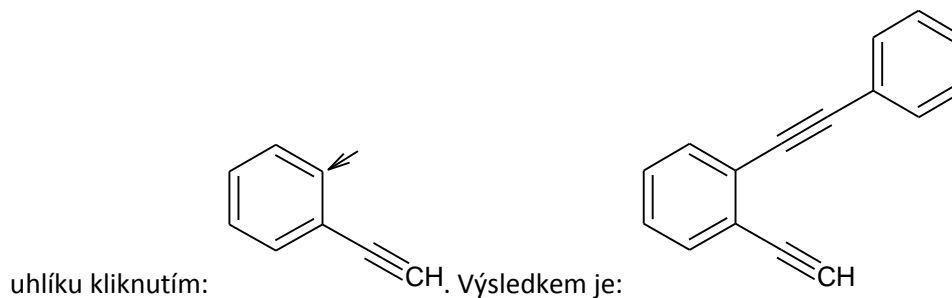



- ikonu **Instant Template**  v liště **Structure** – s jejíž pomocí můžeme označit libovolnou námi nakreslenou strukturu jako šablonu – stačí s pomocí ikony označit místo připojení (atom, nebo vazbu) a vytvořenou šablonu někam vložit.

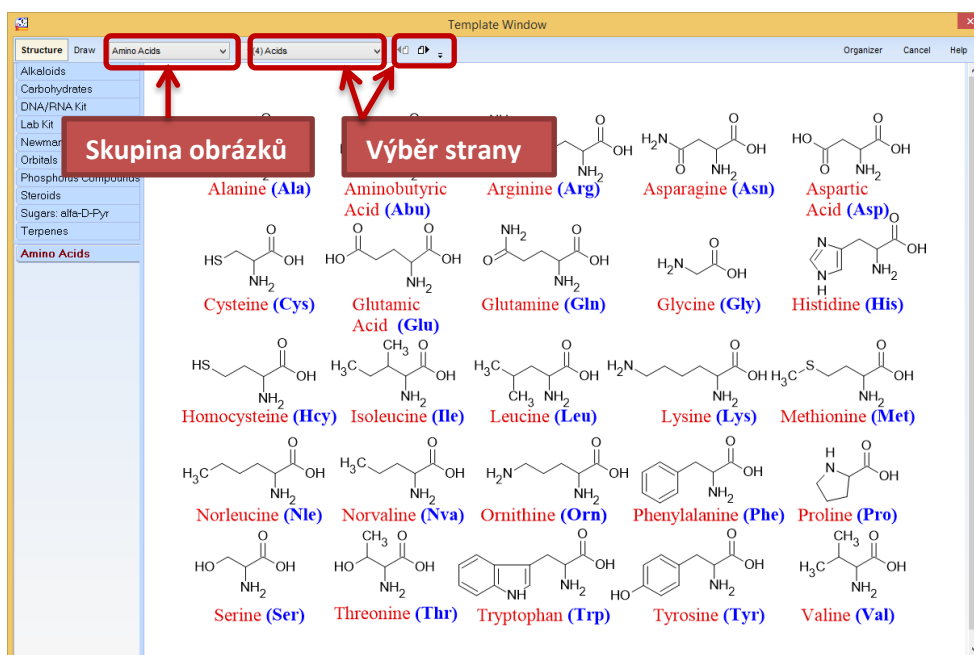
- Pomocí ikony **Instant Template** označme šipkou vyznačený atom uhlíku



. Vytvořenou šablonu připojme na další šipkou vyznačený atom



- ikonu **Open Template Window (Otevřít Okno Šablon)**  v hlavní liště (nebo klávesu **F5**) – po jejíž aktivaci můžeme vybírat z mnoha předdefinovaných struktur.



Obrázek 3: Okno šablon v prostředí Structure, skupina Amino Acids, strana 1

Kromě **skupin chemických vzorců** (např. DNA/RNA Kit, Amino Acids) zde najdeme skupiny, které využijeme při kreslení v prostředí **Draw: Lab Kit, Newman Projections** a **Orbitals**. Obrázek vybereme kliknutím a dalším kliknutím jej umístíme do pracovního prostoru (v případě posledních tří uvedených skupin budeme automaticky přeprnuti do prostředí **Draw**).

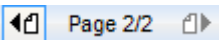
Námi nakreslenou chemickou strukturu lze se strukturou ze šablony sjednotit třemi způsoby:

- přenést stín šablony kurzorem nad vazbu tak, že vazby, které mají být sjednoceny, se překrývají a pak kliknout,
- zamířit stínem šablony na atom struktury, ke kterému ji hodláte připojit, až se objeví vazba a kliknout,
- ukázat atomem šablony na atom, se kterým se má spojit spiro-vazbou, a zároveň držet stisknutou klávesu SHIFT a kliknout.

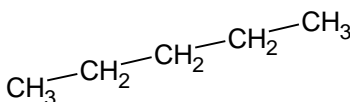
Pozn. Stín šablony lze překlopit použitím klávesy TAB.

p) Ukládání struktur

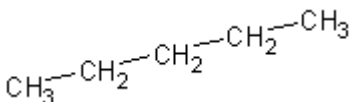
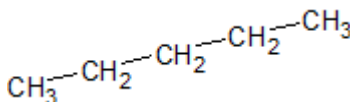
Vytvořený soubor můžeme uložit pomocí **Menu – File – Save As** (klávesová zkratka **Ctrl+Shift+S**). Pokud chceme se vzorci dále pracovat, je třeba je uložit ve formátu **sk2** (ChemSketch 2.0 Document). Tím uložíme všechny struktury na aktivní stránce. Pokud bychom chtěli uložit pouze jeden vzorec:

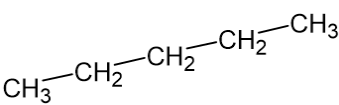
- můžeme ho před samotným uložením **vykopírovat na novou stránku**, kterou si nejdříve vytvoříme pomocí **Menu – Pages – New** (mezi stránkami pak přecházíme pomocí ikony  pod lištou barev);
- vzorec označíme a **vykopírujeme do externího programu** (např. IrfanView),
- uložíme všechny vzorce na stránce a **v externím programu ořízneme jednotlivé vzorce** (např. v IrfanView pomocí označení oblasti kliknutím a tažením myši a následné zkratky oříznutí **Ctrl+Y**)

Do **MS Word** nebo **PowerPoint** lze obrázky vkládat přímo pomocí zkratk **Ctrl+C** a **Ctrl+V**. Pokud se

Vám vložený vzorec (např. ) zdá příliš kostrbatý, je několik možností, jak jej vylepšit:

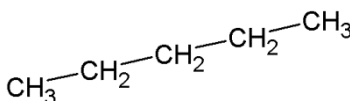
- V **Menu** programu ChemSketch **Options – Preferences** v záložce **General** zatrhnout **Use Antialiasing**. Bohužel, funkce antialiasing se neprojeví při ukládání ve formátech **gif**:

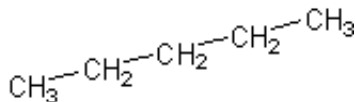
 či **png**:  . Můžeme však udělat náhled stránky (klávesa **Print Screen**) a pomocí **Ctrl+V** jej vložit do programu **IrfanView**, kde

vzorec ořízneme. Výsledek  je v kvalitě dostačující např. **pro webové stránky**.

- Pokud chceme kvalitnější výstup (např. pro tištěné publikace), obrázek vyexportujeme jako **tif** (není potřeba zapínat funkci Antialiasing). Při ukládání se pod polem se zvolenou příponou

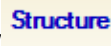

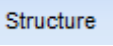

soboru objeví tlačítko **Options**, v němž je možné změnit rozlišení výstupního souboru.

Defaultně je nastaveno 300 DPI: , což je pro tištěné publikace vhodný. Zvolíme-li např. 90 DPI, obrázek již vypadá poněkud hůře:








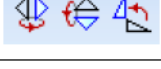


Závěrem si dovoluji doporučit internetový odkaz <http://www.martinsvehla.cz/databaze/>, na němž najdete hotové vzorce a rovnice z organické chemie a biochemie ke stažení. Vzorce jsou jak ve formátu umožňujícím jejich editaci v programu ChemSketch (**sk2**), tak ve formátu **tif** a **pdf**. Stejná databáze je dostupná na adrese <http://www.studiumchemie.cz/templaty.php>. Avšak první odkaz umožňuje celou databázi stáhnout na jedno kliknutí. Vzorce ve formátu **sk2** lze pomocí **Menu – File – Open (Ctrl+O)** otevřít v programu ChemSketch a následně je upravit, např. barevně zvýraznit atomy apod.

5) Prostředí Draw




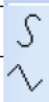








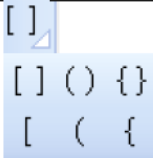


Pro práci v prostředí **Draw** je třeba se do něj nejdříve přepnout pomocí ikony  . Takto   ikona vypadá, pokud již v prostředí **Draw** pracujeme. Prostředí je vhodné zejména pro **kreslení chemických aparatur**.

Popis nástrojové lišty Draw:

	Šipka pro výběr, pohyb a změnu velikosti
	Šipka pro rotaci objektu
	Editace uzlů objektu
	Úprava textu
	Přenesení do popředí
	Přenesení do pozadí
	Spojování/rozdělování objektů (spojí více objektů do jednoho nebo rozdělí na více objektů jeden původní)
	Rotace objektu

	Zarovnání
---	-----------

Popis nástrojové lišty pro kreslení

	Kreslení čáry
	Kreslení obloučku
	Kreslení křivky
	Kreslení více spojených čar
	Vložení a úprava parametrů šipky
	Vložení obdélníku/čtverce
	Vložení zaoblených útvarů
	Vložení kruhu/elipsy
	Vložení polygonu
	Vložení obrázku
	Vložení textu
	Vložení tabulky
	Vložení závorek
	Zaoblení popisku
	Šablona zprávy

Literatura

1. <http://www.acdlabs.com/>
2. http://www.ft.tul.cz/depart/knt/nanotex/Program%20ACD_k%20%20cviceni%20TNA_vizualizace%20molekul.pdf
3. http://www.vscht.cz/lam/new/chemsk_t_v10_CZa.pdf
4. http://fch.upol.cz/skripta/labt/chemsketch_kfc.pdf
5. www.kvic.cz/apps/ICeMSK/GetFile.aspx?src=Poradna&ID=83