

Универзитет у Бањој Луци
Природно-математички факултет

Збирка задатака из коришћења ACD/ChemSketch-а

Димитрије Д. Чвокић



Бања Лука, 2026



Универзитет у Бањој Луци
Природно-математички факултет



Збирка задатака из коришћења ACD/ChemSketch-a

Димитрије Д. Чвокић

Бања Лука, 2026

Назив дјела:

Збирка задатака из коришћења ACD/ChemSketch-a
Прво издање

Аутор:

Доц. др Димитрије Д. Чвокић

Издавач:

Универзитет у Бањој Луци
Природно-математички факултет
78000 Бања Лука, др Младена Стојановића 2

За издавача:

Академик проф. др Радослав Гајанин, ректор
Академик проф. др Горан Трбић, декан

Секретар издавачке дјелатности:

Проф. др Драгојла Голуб

Рецензенти:

Проф. др Александар Љ. Савић
Доц. др Марко Ђукановић

Аутор прелома и графичке обраде публикације:

Димитрије Д. Чвокић

Лиценца:

Creative Commons Ауторство
Некомерцијално 4.0 Међународна лиценца (CC-BY-NC 4.0)
<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>
Ово дјело се може слободно користити, дистрибуирати, и адаптирати у некомерцијалне сврхе уз навођење аутора.

Лектор:

Никола Париповић

Штампа:

Тираж: 0 примјерака

Електронско издање

ISBN: 978-99997-45-17-8

UDC (УДК): 004.92:[54:57(075.8)(076)(0.034.2)

MSC (2020): 92E10 (Molecular structure, configuration, conformation), 92E30 (Computational biology), 68U20 (Simulation), 92C45 (Kinetics in biochemical problems)

Одлуком Наставно-научног вијећа Природно-математичког факултета Универзитета у Бањој Луци под бројем 19-3.3164/25, од 09.12.2025. г., и Одлуком Сената Универзитета у Бањој Луци под бројем 02/04-3.2958-47/25, од 25.12.2025. г., одобрено је издавање ове књиге као универзитетске наставне литературе.

Парадокс намјерно остављене празне стране.

Садржај

Предговор	1
1. Историјат примјене рачунара у хемији и биологији	2
2. Основе ACD/ChemSketch-а	4
2.1 Преузимање и инсталација ACD/ChemSketch-а.....	4
2.2 Покретање ACD/ChemSketch-а.....	4
2.3 Затварање ChemSketch-а	5
3. Цртање простих структура.....	6
3.1 Цртање атома и веза, и додавање етикета.....	6
3.1.1 Коришћење Draw Normal оруђа.....	6
3.1.2 Двоструке и троструке везе	9
3.1.3 Појединачно брисање (уклањање) атома.....	10
3.1.4 Команда Undo.....	12
3.1.5 Полимери.....	13
3.1.6 Замјена атома	14
3.1.7 Коришћење оруђа за непрекидно исцртавање (Draw Continuous Tool).....	16
3.1.8 Превлачење курсора миша	17
3.1.9 Прочишћавање структуре.....	18
3.1.10 Преправљање атомских ознака	20
3.1.11 Оруђе за цртање ланаца (Draw Chains Tool).....	23
3.1.12 Чишћење екрана	24
3.1.13 Обртање структура	25
3.1.14 Излаз.....	28
3.1.15 Снимање ChemSketch документа (.SK2)	28
3.1.16 Снимање структура као MDL Molfile.....	29

3.1.17 Штампање	29
4. Цртање сложенијих структура	30
4.1 Употреба табеле радикала	30
4.2 Употреба цикличних структура	32
4.3 Брисање атома и дијелова структуре	34
4.3.1 Истовремено брисање више атома	34
4.4 Замјена атома	36
4.5 Постављање и мијењање позиције вишеструких веза	37
4.6 Постављање наелектрисања и дефинисање анјона и катјона	39
4.7 Маркушова (Markush) веза	42
4.7.1 Маркушове везе са додатним или уклоњеним дијеловима	44
4.8 Организација стехиометријских дескриптора	45
4.9 Цртање координацијских веза	48
4.10 Делокализовано наелектрисање и криве	51
4.11 Још неке врсте веза	53
4.12 Промјена својстава атома	54
5. Напредне структуре, SMILES и InChI записи, реакционе шеме	56
5.1 2D-оптимизација	56
5.1.1 Цртање структура цикличних алкана	56
5.1.2 Цртање структура цикличних пептида	58
5.2 SMILES записи	61
5.2.1 Додјела SMILES записа	61
5.2.2 Формирање структуре на основу SMILES записа	63
5.3 InChI запис	64
5.3.1 Додјела InChI записа	64
5.3.2 Стварање структура из InChI записа	66
5.4 3D-оптимизација	68
5.4.1 Цртање структуре бицикло[2.2.2]октана	68
5.4.2 Цртање структуре триптицена	70

5.4.3 Цртање структуре кубена	72
5.4.4 Цртање структуре додекахидрана ([5]Фулерен – C ₂₀)	75
5.5 Цртање, етикетирање и скицирање реакција	77
5.5.1 Цртање реакционе шеме.....	77
5.5.2 Етикетирање реакције	81
5.5.3 Означивање реакције	82
6. Напредно цртање: шаблони.....	84
6.1 Табела радикала.....	84
6.1.1 Цртање структуре флуорескамина	84
6.2 Instant Template оруђе.....	87
6.2.1 Цртање структуре цикличног олигомера	87
6.3 Template Window оруђе.....	88
6.3.1 Цртање структуре дијела ланца дезоксирибозо – 5 – фосфата.....	88
6.3.2 Додавање база	90
6.4 Цртање сложених структура биомолекула	93
6.4.1 Цртање структуре β – малтозе	93
7. Рачунање макроскопских својстава молекула	100
7.1 Рачунање макроскопских својстава.....	100
7.1.1 Изборник наредби	100
7.1.2 Аутоматски приказ на статусној траци.....	104
7.2 Израчунавање моноизотопске масе за одређене дијелове молекуле (Mass Spec Scissors).....	104
8. Тастери посебних опција	110
8.1 Таутомери	110
8.1.1 Грешке у хемијској литератури.....	112
8.2 ACD/Name Freeware Add-on	113
8.2.1 Ограничења ACD/Name Freeware-а	118
9. Формирање графичких објеката.....	120
9.1 Цртање енергетских дијаграма реакција	120

9.1.1 Цртање кривих.....	120
9.1.2 Измјена кривих.....	122
9.1.3 Цртање X и Y оса.....	125
9.2 Цртање различитих облика орбитала	127
9.2.1 Цртање p-орбитала	128
9.2.2 Цртање d-орбитала	132
9.2.3 Цртање π-орбитала	135
9.3 Цртање два ланца ДНК	137
9.4 Цртање липида и мицела	145
9.4.1 Цртање липида	146
9.5 Цртање лабораторијске апаратуре.....	150
9.5.1 Додавање текстовних описа.....	153
9.5.2 Додавање облачића.....	153
9.5.3 Груписање елемената	154
9.6 Цртање табела	154
9.6.1 Цртање садржаја табеле.....	154
9.6.2 Убацивање табеле.....	154
9.6.3 Уношење података у табелу	155
9.6.4 Измјена садржаја табеле.....	156
9.6.5 Уређивање изгледа табеле.....	156
10. Уређење докумената	160
10.1 Уношење горње и доње маргине	160
10.2 Прављење плаката.....	161
11. Рад са стиловима у Structure-режиму	162
11.1 Стварање сопственог стила	162
12. Литература	167
13. Биљешка о аутору	168

Предговор

Ова збирка задатака је осмишљена да служи као свеобухватан водич кроз основне и напредне функције софтвера за цртање и анализу хемијских структура ACD/ChemSketch. Ријеч је о широко коришћеном оруђу у хемијској и биолошкој академској заједници јер омогућује олакшану визуелизацију сложених молекула и хемијских реакција, па и читавих експеримената.

Сама збирка за циљ има да студентима Студијског програма Биологија и Студијског програма Хемија на Природно-математичком факултету Универзитета у Бањој Луци обезбиједи довољно илустративних задатака како би могли усавршити коришћење ACD/ChemSketch-а, а са којим студенти бивају упознати на предметима Примјена рачунара у биологији и Хемијска информатика. Свака од тема које су обрађене кад је ријеч о овом софтверу, пропраћена је прикладним уводним објашњењима.

Методологија која је кориштена у овој књизи се ослања на приступ корак-по-корак. Уз детаљне цртеже и примјере, помаже да се лакше прате и примјене различите функционалности софтвера ACD/ChemSketch-а. Свака фаза у извршењу задатака који је изабран као демонстративни је пажљиво објашњена и поткријепљена визуелним материјалима ради лакшег разумијевања и сналажења.

Независно од претходног искуства са ACD/ChemSketch-ом, ова књига би требала да помогне да се учинковито савладају сви аспекти овог софтвера. Користећи је као својеврсни водич, могу се у потпуности искористити све предности које ACD/ChemSketch пружа и значајно побољшати личне вјештине (био)хемијске визуелизације.

Надамо се да ће овај приручник постати инспиративан и користан ресурс у свакодневном раду и истраживању. Аутор се захваљује колегици Драгани Згоњанин на помоћи око техничке припреме рукописа ове збирке задатака.

Аутор

1. Историјат примјене рачунара у хемији и биологији

Коришћење рачунара у хемији и биологији представља револуцију која је значајно промијенила начин на који научници приступају истраживањима и рјешавању комплексних проблема. Историјски гледано, овај процес је започет средином 20. вијека, са развојем првих електронских рачунара. Почетни напори били су усмјерени на израду основних прорачуна, као што су калкулације молекулских орбитала и реакцијских кинетика у хемији, као и анализа биолошких података.

У раним 1960-им и 1970-им, појавом моћнијих рачунара и развојем софтвера, научници су почели да примењују сложеније рачунске методе за потребе истраживања из области квантне механике и молекулске динамике, што је омогућило дубљи увид у структуру и понашање молекула. У хемији, овај период је обележен развојем метода као што су Хартри-Фокова метода и теорија функционала густине (DFT), које су постале кључне за разумевање електронске структуре молекула.

У биологији, рачунари су почели да играју значајну улогу у секвенцирању ДНК и анализи генетских података, што је кулминирало пројектом људског генома у 1990-им и раним 2000-им. Овај пројекат, један од најамбициознијих научних подухвата, користио је рачунарску моћ за анализу милијарди база ДНК, омогућивши научницима да мапирају цео људски геном и тиме отворе нове путеве у медицинским истраживањима и биотехнологији.

Током посљедњих деценија, развој рачунарских метода и технологија, укључујући машинско учење и вјештачку интелигенцију, додатно је унаприједио способност научника да анализирају сложене биолошке и хемијске системе. Ови алати сада омогућавају предвиђање

структуре протеина, моделовање интеракција лекова и циљање нових терапија са прецизношћу која је некада била незамислива.

Историја рачунарске хемије и биологије илуструје брз напредак науке и технологије, показујући како интеграција рачунарских метода у традиционалне дисциплине може водити ка значајним научним открићима и унапређењу нашег разумијевања природе.

2. Основе ACD/ChemSketch-а

У овом поглављу је детаљно представљен процес преузимања, поставке и покретања ACD/ChemSketch-а. Основни кораци овог процеса ће вам омогућити брз и ефикасан почетак рада са програмом.

2.1 Преузимање и инсталација ACD/ChemSketch-а

Кораци за преузимање и инсталацију ACD/ChemSketch-а на оперативном систему Виндоуз:

- Отворити страницу
<http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/>
- Кликнути на Download Freeware.
- Након преузимања покренути инсталацију и пратити упутства.

2.2 Покретање ACD/ChemSketch-а

Кад је ријеч о покретању саме апликације ACD/ChemSketch, постоји неколико начина:

- Двоструким кликом на ChemSketch иконицу.
- Start→All Programs→ACD/Labs Freeware→ChemSketch.
- Двоструким кликом на CHEMSK.exe у прозору директоријума под којим су инсталирани све ACD/Labs програме.
- Уколико је већ отворен неки ACD/Labs програм из ACD/Labs изборника, довољно је кликнути на ChemSketch.

2.3 Затварање ChemSketch-а

Што се тиче завршетка рада са апликацијом ChemSketch, имамо неколико начина за њено “затварање”:

- Кликнути на Close у горњем десном углу насловне линије прозора.
- Са изборника ACD/Labs изабрати Close All. Ово ће затворити све тренутно покренуте програме ACD/Labs-а, један за другим.
- File→Exit. Ово ће затворити само тренутно отворен програм ACD/Labs-а.

У зависности од покренутог програма ACD/Labs-а биће вам понуђено да сачувате свој рад у одговарајућем формату.

3. Цртање простих структура

Сада ћемо се упознати са неопходним знањима за учинковит почетак рада са ChemSketch-ом, усмјерен првенствено на основне технике цртања у овом програму, које укључују употребу различитих оруђа као што су Draw Normal Tool, Draw Continuous Tool, Draw Chains Tool и друге.

У наставку слиједи низ задатака који илуструју употребу ових оруђа и техника у ChemSketch-у, а који ће вам омогућити лако формирање и приказ различитих хемијских структура, те разне модификације у њиховој структури, од основних цртежа до комплексних хемијских спојева.

На крају поглавља се налазе корисни савјети за чишћење екрана, ротирање структура, као и за снимање и штампање садржаја.

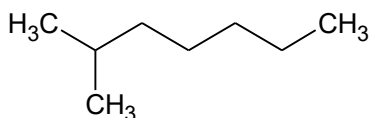
3.1 Цртање атома и веза, и додавање етикета

Цртање атома и веза су основне радње у ChemSketch-у. За њихово извршавање мора бити омогућен Structure Mode.

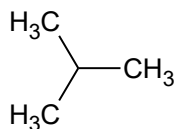
3.1.1 Коришћење Draw Normal оруђа

Draw Normal Tool се аутоматски покреће заједно са самим програмом. Омогућује цртање обичних или разгранатих ланаца, те замјену атома неким другим из периодног система елемената.

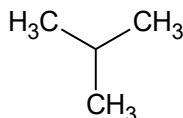
Задатак 1. Нацртати молекулу



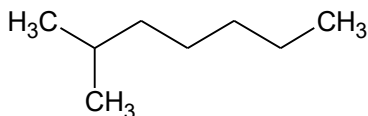
- Увјерити се да је укључено оруђе Draw Normal и да је изабран атом угљеника (C).
- Кликнути на празно мјесто да се исцрта CH_4 .
- Кликнути на CH_4 да се дода $-\text{CH}_3$, формирајући при том CH_3-CH_3 .
- Кликнути двапут на исти C-атом да би се формирала структура



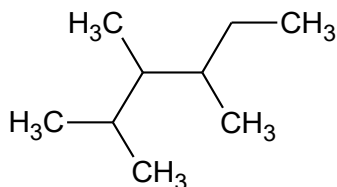
- Изабрати опцију Set Bond Vertically и кликнути на неку од веза да би се дата структура обрнула



- Опет изабрати оруђе Draw Normal.
- Кликнути на крајње десни C-атом и на тај начин по жељи продуживати ланац.

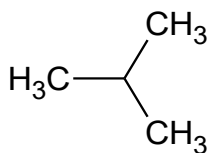


Задатак 2. Нацртати молекулу

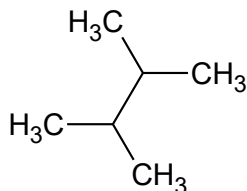


- Изабрати оруђе Draw Normal и атом угљеника (C).
- Кликнути на празан простор да се исцрта CH_4 .

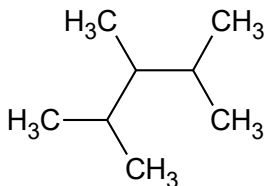
- Затим, као и у претходном примјеру кликом разгранати структуру



- Двоструким кликом на горњу CH_3 групу разгранати структуру

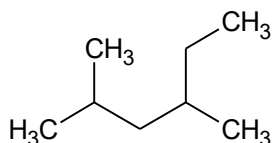


- На основу структуре коју треба нацртати види се да претходно описане кораке треба поновити још једанпут на одговарајућој CH_3 групи. Структура коју добијамо изгледа овако



- Кликом на CH_3 групу која још увијек нема жељени изглед добијамо тражену структуру.

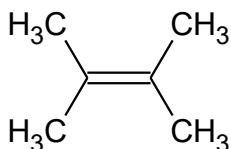
Задатак 3. Нацртати структуру



3.1.2 Двоструке и троструке везе

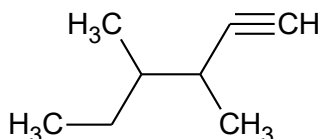
Сваки од задатака у овом поглављу захтијева различите вјештине у руковању хемијским структурним формулама и њиховим модификацијама у контексту двоструког и троструког везивања.

Задатак 4. Нацртати структуру



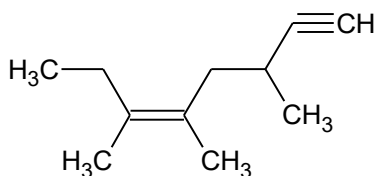
- Нацртати структуру као у задатку из (претходног) потпоглавља 2.1.1.
- Кликните још једном на „средишњу” везу да би се замјенила двоструком.

Задатак 5. Нацртати структуру



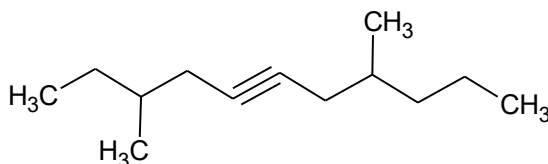
- Нацртати структуру као у задатку из претходног потпоглавља.
- Кликните двапут на „горњу десну” везу да би се замијенила троструком.

Задатак 6. Нацртати структуру



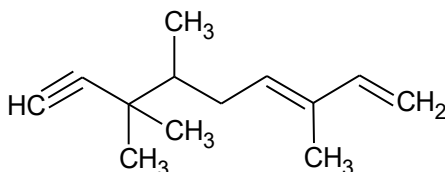
- Нацртати структуру као у задатку из претходног потпоглавља.
- Кликнути још једанпут на везу која треба да се замјени двоструком, а двапут на везу која треба да се замјени троструком.

Задатак 7. Нацртати структуру

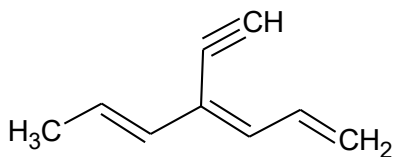


- Нацртати структуру као у Задатку 1, из претходног потпоглавља.
- Кликнути двапут на везу између двије CH₂ групе да бисте добили троструку везу.

Задатак 8. Нацртати структуру

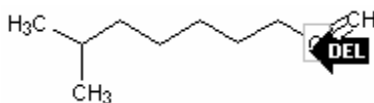


Задатак 9. Нацртати структуру

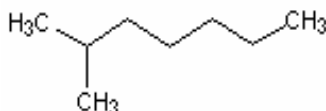


3.1.3 Појединачно брисање (уклањање) атома

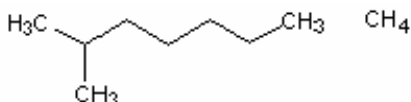
- Кликнути на Delete из General toolbar-а.
- Изабрати атом за уклањање.



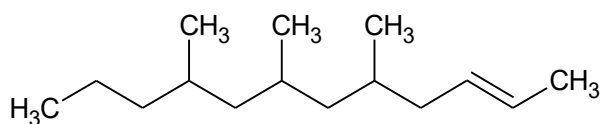
Структура сада изгледа овако



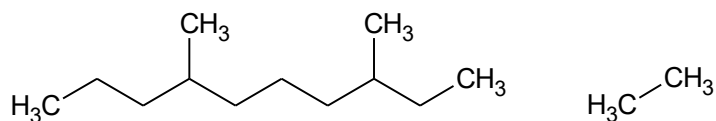
- Кликнути на Undo да бисте поништили промјене.
- Притиснути CTRL и кликнути на Delete да би се поново обрисао исти атом. На овај начин задржава се атом који је био везан за претходно обрисани.



Задатак 10. Нацртати структуру



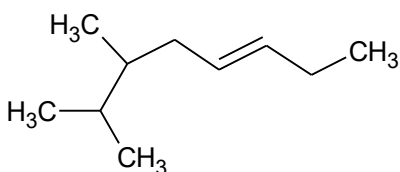
Потом, користећи оба претходно описана начина, формирати следеће двије структуре



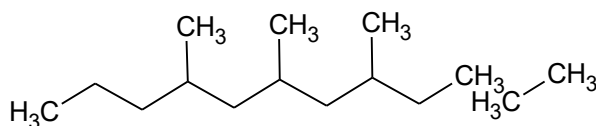
- Нацртати структуру као у потпоглављу 2.1.1. коришћењем Draw Normal оруђа.

- Изабрати Delete са General toolbar-а и кликнути на двоструку везу.
- Претходним кораком ријешили смо задатак. Да бисмо то урадили и на други начин употребити опцију Undo, чиме враћамо почетну структуру.
- Притиснути CTRL и Delete након чега добијамо двије тражене структуре.

Задатак 11. Нацртати структуру



Потом, користећи један од начина за брисање добити следеће структуре



3.1.4 Команда Undo

Undo команда омогућава да се пониште претходни кораци (радње).

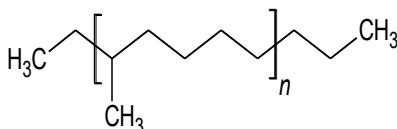
- Кликнути Undo. Ово ће поништити посљедњу радњу и вратити радну површ у претходно стање.
- Кликнути Undo неколико пута како бисте се вратили на жељени корак.

Примијетимо да се аутоматски појављује команда Redo која се налази поред команде Undo. Иначе, Undo команду можемо користити до 50 пута.

3.1.5 Полимери

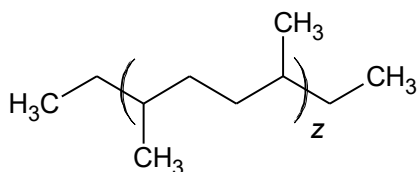
У овом потпоглављу биће обрађене технике и кораци за креирање полимерних структура у ACD/ChemSketch-у, укључујући коришћење Polymers (Brackets Tool) опције и различитих врста заграда за израду и уређивање полимера.

Задатак 12. Нацртати полимер



- Изабрати опцију Polymers (Brackets Tool) за отварање Polymer panel-a
- Изабрати одговарајућу врсту заграда (правоугаоне).
- Простим кликом и превлачењем одабрати дио који треба начинити полимером (појавиће се одмах на радној површини).
- Кликнути на опцију Close и напустити Polymer Drawing режим.

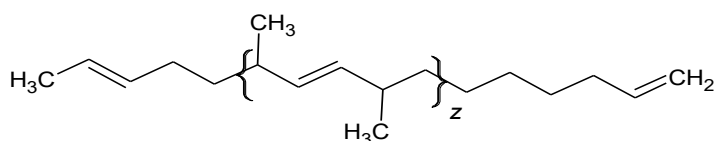
Задатак 13. Нацртати полимер



- Нацртати структуру као у потпоглављу 2.1.1. коришћењем Draw Normal оруђа.
- Изабрати опцију Brackets Tool за отварање прозора са полимерима.

- Изабрати одговарајућу врсту заграда (обичне).
- Изабрати индекс z .
- Кликом и превлачењем курсора изабрати дио који треба начинити полимером.
- Кликнути на опцију Close.

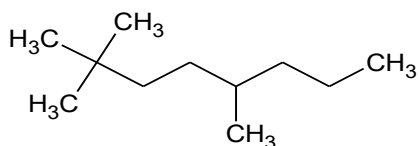
Задатак 14. Нацртати полимер



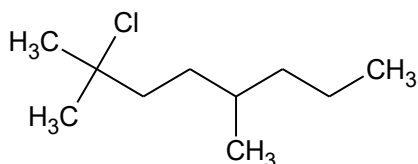
3.1.6 Замјена атома

У овом потпоглављу, научићете како да користите ACD/ChemSketch за замјену атома у хемијским структурама, укључујући кораке за избор атома из периодног система елемената и њихову замјену.

Задатак 15. Нацртати структуру

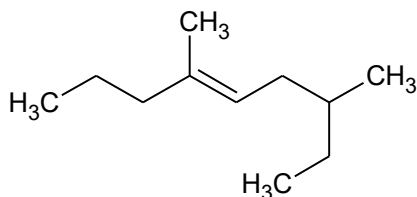


а потом је превести у

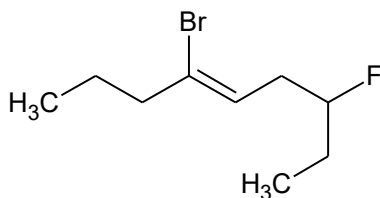


- Нацртати структуру као у потпоглављу 2.1.1. коришћењем Draw Normal оруђа.
- Кликнути на Periodic Table. Отвара се периодни систем елемената.
- Кликнути на одговарајући атом. У овом случају то је атом хлора (Cl).
- Кликнути на ОК.
- Изабрати метил групу коју желите да замијените, а потом кликнути на њу.

Задатак 16. Нацртати структуру



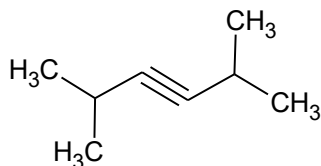
а потом је трансформисати у



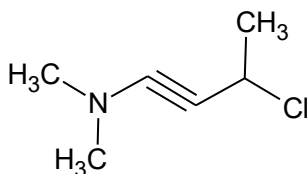
- Нацртати основну структуру за рад.
- Кликнути на Periodic Table.
- Кликнути на атом брома (Br), а затим на ОК.
- Кликнути на метил групу коју треба замијенити са атомом брома.
- Опет отворити периодни систем елемената кликом на Periodic Table.
- Изабрати атом флуора (F).

- Кликнути на метил групу коју треба замијенити са атомом флуора.

Задатак 17. Нацртати структуру



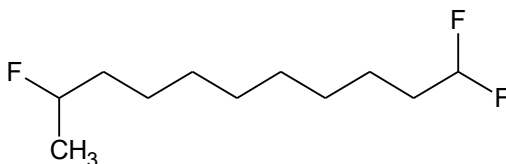
а потом је трансформисати у



3.1.7 Коришћење оруђа за непрекидно исцртавање (Draw Continuous Tool)

Када је ово оруђе активирано, везе се могу правити искључиво преко означених атома. За означавање атома довољно је кликнути на њега.

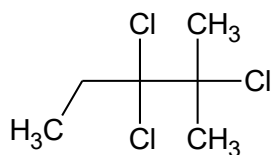
Задатак 18. Нацртати структуру



- Кликнути на Draw Continuous. Десним кликом се лако можете вратити на овај метод.
- Изабрати флуор (F) из панела Atom.

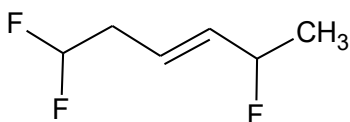
- Кликнути на угљеник (C) положен десно ради означавања. Кликнути поново да би се за њега везао флуор (F). Кликнути двапут на угљеников атом (C) и вежите два атома флуора (F).

Задатак 19. Нацртати структуру



- Кликнути на Draw Continuous.
- Изабрати атом хлора (Cl) из панела Atom.
- Кликнути на атом угљеника да би се за њега везао хлор, а затим два пута на други атом угљеника да би се за њега везала два атома хлора.

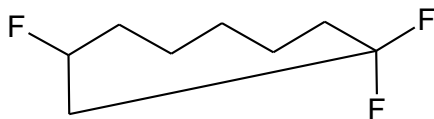
Задатак 20. Нацртати структуру



3.1.8 Превлачење курсора миша

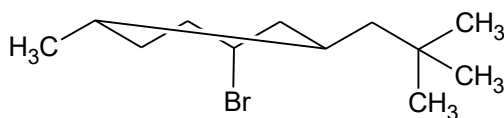
Са било којим оруђем за цртање, Draw Normal или Draw Continuous, превлачење од једног атома ка другом ствара једноструку везу између њих. Уколико превлачите ка или од празне површи, нови атом ће бити уметнут на почетку или крају нацртане везе.

Задатак 21. Нацртати структуру

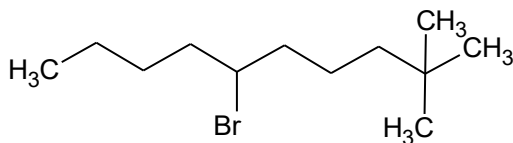


- Изабрати оруђе Draw Normal или Draw Continuous.
- Превлачењем успоставити везу од једног ка другом атому.

Задатак 22. Нацртати структуру

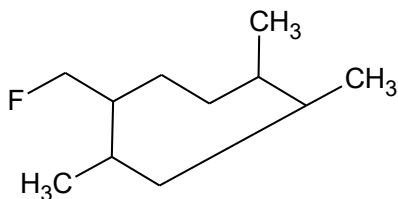


- Изабрати оруђе Draw Normal, Draw Continuous или Draw Chains.
- Нацртати основну структуру за рад



- Користећи оруђе Draw Normal превлачењем успоставити везу од једне до друге CH₂ групе.

Задатак 23. Нацртати структуру



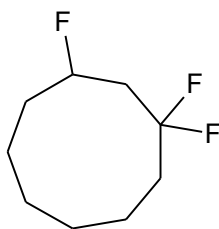
3.1.9 Прочишћавање структуре

Како би све везе и углови у нацртаној структури били једнаки стандардним вриједностима потребна су сљедеће два оруђа:

- Options→Preferences→Clean Method 2
- Structure→Clean Structure.

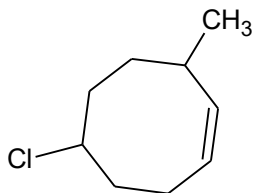
Поред тога што изједначавају дужине свих веза и углова и чине да структура изгледа лијепо – такође чине да нацртане структуре буду хемијски исправне. За линеарне структуре, на примјер, везе код sp^2 угљеника бивају под углом од 120° , а код sp угљеника под углом од 180° .

Задатак 24. Нацртати сљедећу структуру и искористити команду Clean Structure.



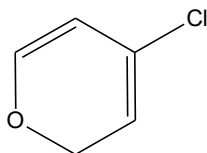
- Кликнути на Draw Normal.
- Изабрати атом угљеника (C).
- Нацртати простим кликом и превлачењем структуру са девет C атома.
- Изабрати атом флуора (F) и везати за нацртану структуру три атома флуора.
- Кликнути на опцију Clean Structure која ће изједначити дужине свих веза и њихове међусобне углове.

Задатак 25. Нацртати структуру



- Кликнути на Draw Normal.
- Изабрати атом угљеника (C).
- Нацртати структуру са осам C атома.
- Везати још једну CH₃ групу за структуру.
- Формирати двоструку везу на одговарајућем мјесту.
- Изабрати атом хлора (Cl) и повезати га са датом структуром помоћу једноструке везе.
- Кликнути на опцију Clean Structure.

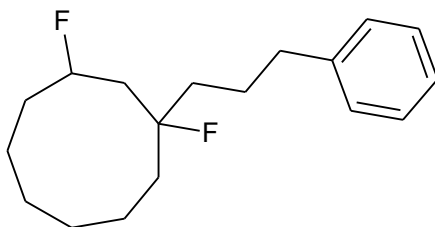
Задатак 26. Нацртати структуру



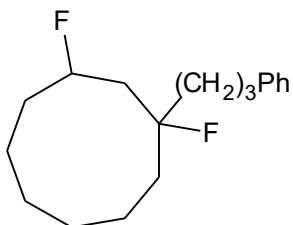
3.1.10 Преправљање атомских ознака

Оруђе Edit Atom Label нам омогућује да завршне атоме замијенимо неким скраћеницама.

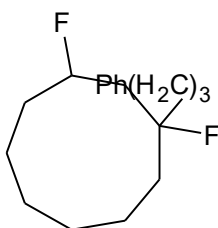
Задатак 27. Нацртати структуру



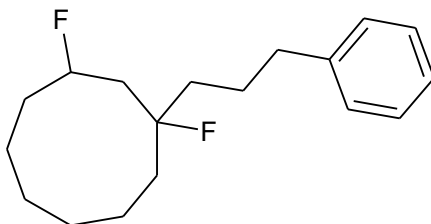
- Нацртати структуру као у Задатку 1 из потпоглавља 2.1.1 Коришћење Draw Normal оруђа и Задатку 4 из потпоглавља 2.1.2. Двоструке и троструке везе.
- Изабрати Edit Atom Label са Atom и кликнути на горњи десни атом флуора у нацртаној структури.
- У прозору Edit Label, укуцати $(\text{CH}_2)_3\text{Ph}$ и кликути Insert. Уочићете како је ознака са доњим индексима убачена умјесто атома флуора.



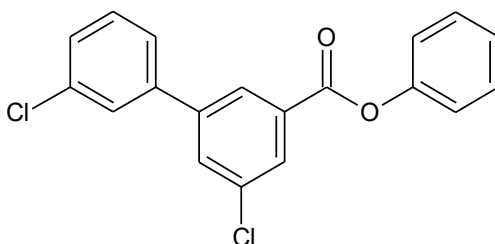
- Кликнути на Change Position, а затим кликнути на ознаку да би се обрнула.



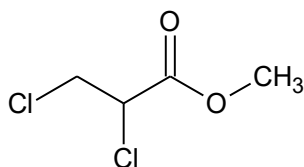
- Поново отворити прозор Edit Label и кликнути на Expand.



Задатак 28. Нацртати следећу структуру на начин описан у претходном задатку.

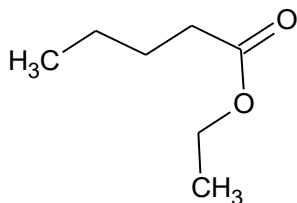


- Нацртати структуру као у потпоглављима 2.1.1 Коришћење Draw Normal оруђа и 2.1.2. Двоструке и троструке везе.



- Кликнути на Edit Atom Label и кликнути на CH₃ групу.
- Изабрати C₆H₅ групу и кликнути на Insert.
- Изабрати Edit Atom Label и кликнути на Expand.
- Поновити претходна три корака и додати још двије овакве групе на одговарајућа мјеста.

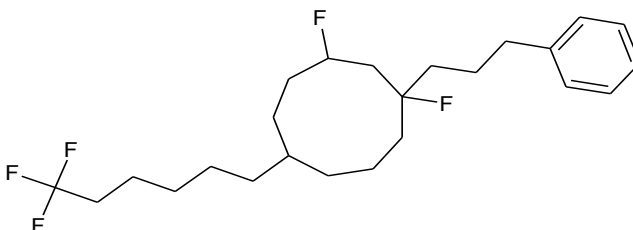
Задатак 29. Нацртати структуру



3.1.11 Оруђе за цртање ланаца (Draw Chains Tool)

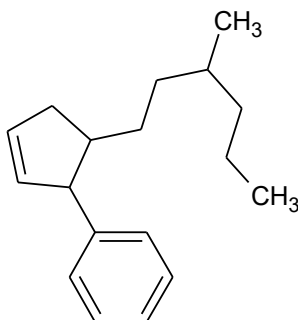
Коришћењем овог оруђа простим превлачењем курсора миша можете лако цртати дуже или краће угљеничне ланце.

Задатак 30. Нацртати структуру



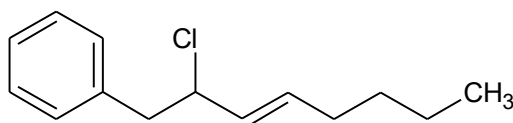
- Нацртати структуру као у потпоглављима 2.1.1 Коришћење Draw Normal оруђа и 2.1.2. Двоструке и троструке везе.
- Са линије Structures изабрати Draw Chains и изабрати почетни атом ланца – у овом случају то је трећи атом угљеника.
- Превлачењем улијево формирати ланца. Уочићете да се бројач угљеника (C #) смјештен поред курсора миша мијења са сваким доданим или одузетим атомом. Направити ланац од шест угљеника.
- Изабрати атом флуора, и док је Draw Chains и даље активиран, кликнути три пута на први атом новонасталог угљоводоничног ланца.
- Изабрати опцију Select/Move и означите сва три атома флуора.
- Кликните на Clean Structure.

Задатак 31. Нацртати следећу структуру користећи сва потребна оруђа која сте до сада упознали.



- Изабрати бензенов прстен из Table of Radicals и нацртати га.
- Затим, из исте табеле изабрати циклопентански прстен и повезати са претходном структуром.
- Кликнути на Draw Chains и нацртати ланац.
- Користећи оруђе Draw Chains нацртати и други ланац, повезан са одговарајућим C атомом.

Задатак 32. Нацртати структуру



3.1.12 Чишћење екрана

Екран (прозор) се може очистити на више начина:

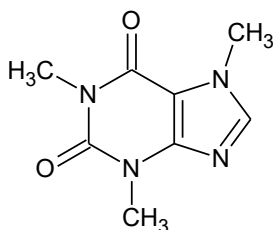
- FileNew. Отвара се нови, празан документ.
- Кликнути на New Page у горњем лијевом углу. Овим ћете убацити нову, празну страну.
- EditSelect All, а потом EditDelete.

- Притиснути CTRL+A да бисте означили све објекте на страници и онда притиснути типку DELETE.
- На General toolbar-у кликнути Delete. Кликнути на празан простор поред нацртане структуре да означите све, а затим кликнути на неку од њих како бисте очистили комплетну радну површину.

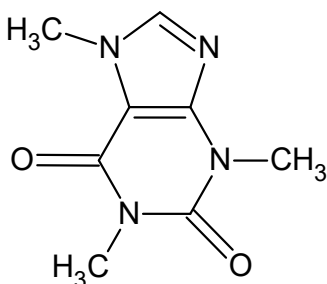
3.1.13 Обртање структура

Структуру можемо обртати кликом на оруђа из Structure toolbar-а.

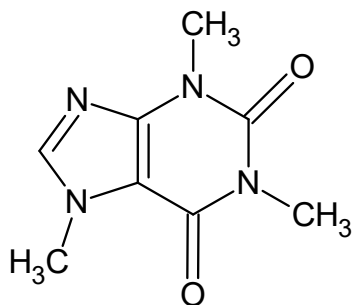
Задатак 33. Обрнути следећу структуру оруђем из Structure toolbar-а



- Нацртати структуру као у потпоглављима 2.1.1 Коришћење Draw Normal оруђа и 2.1.2. Двоструке и троструке везе.
- Кликнути на Set Bond Horizontally, а потом на везу да би је поставили водоравно. Структура ће се обрнути у одговарајући положај.

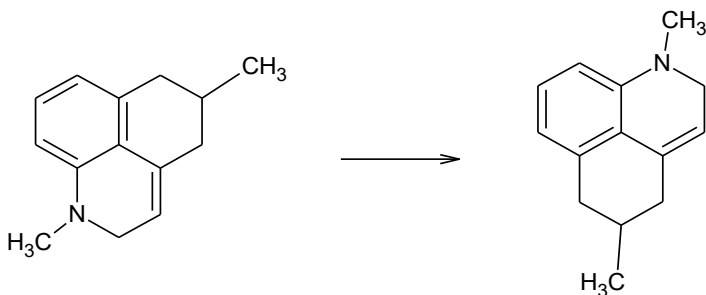


- Кликнути на Set Bond Vertically, а затим кликнути на везу коју желите поставити усправно. Поново, долази до одговарајућег обртања читаве структуре.



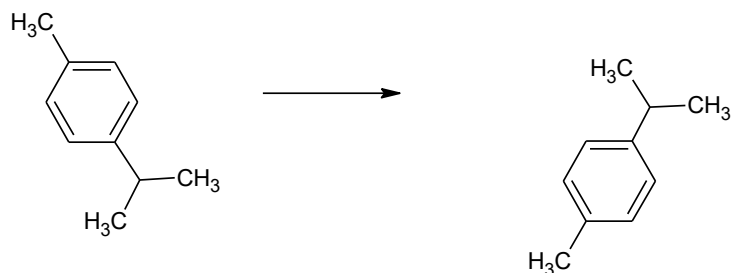
- Кликнути на Flip on Bond, а затим кликнути на везу – цијела структура ће се обрнути око везе на коју сте кликнули.
- Прво означити структуру или дио структуре. Кликнути Flip Top to Bottom, и означена структура или њен дио ће се обрнути наопако. Ако нисте означили ништа, обрнуће се све нацртане структуре.
- Кликните Flip Left to Right, да обрнете означену структуру или њен дио с лијева на десно.

Задатак 34. Обрнути дату структуру да би добили жељену.



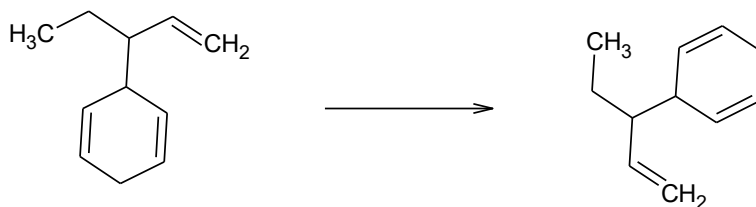
- Нацртати структуру као у потпоглављима 2.1.1 Коришћење Draw Normal оруђа и 2.1.2. Двоструке и троструке везе.
- Кликнути на Flip on Bond и изабрати везу између N и CH₃.
- Изабрати Set Bond Horizontally и кликнути два пута на исту везу.
- Изабрати Set Bond Vertically те кликнути на поменућу везу.

Задатак 35. Обрнути дату структуру да би добили жељену.

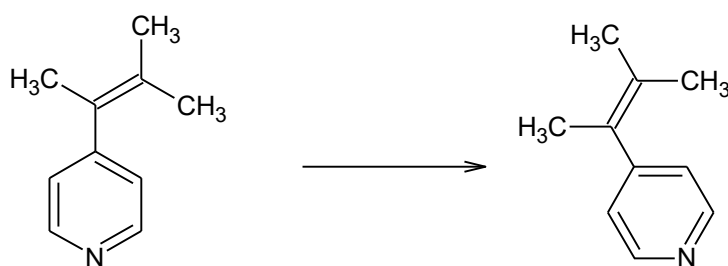


- Нацртати структуру као у потпоглављима 2.1.1 Коришћење Draw Normal оруђа и 2.1.2. Двоструке и троструке везе.
- Означити нацртану структуру.
- Кликнути на Flip Top to Bottom са Structure Toolbar-а.

Задатак 36. Обрнути дату структуру да бисте добили жељену.



Задатак 37. Обрнути дату структуру да бисте добили жељену.



3.1.14 Излаз

Нацртане структуре можете снимити, штампати, или их убацити у друге апликације као што су MS Word и MS Excel.

3.1.15 Снимање ChemSketch документа (.SK2)

- FileSave.
- У Dialog Box-у који се појави, унијети назив и одабати локацију на коју желите да буде смјештен ваш документ.

3.1.16 Снимање структура као MDL Molfile

Уобичајени формат који дијеле многи програми јесте Molfile. Уочићете да он неће задржати графичке слике, текст, и слично, већ *само* молекулску структуру.

- Означити структуру коју је потребно снимити у формату Molfile.
- Са File изборника изабрати Export.
- У Save As Type прозору изабрати MDL Molfiles (*.mol).
- Унијети назив датотеке и локацију на којој ће бити снимљена.
- Кликнути на Save.

3.1.17 Штампање

Други начин да сачувате свој рад јесте да га иштампате. Прије почетка штампања провјерите подешавања у прозору Page Setup.

- Са изборника File изабрати Page Setup. На екрану ће се појавити прозор у којем се може подешавати величина папира, оријентација, маргине и слично.
- Кликнути на ОК да бисе задржала подешавања.
- На General toolbar-у кликнути на Full Page да бисте видјели како ће страница изгледати након штампања. Ако је потребно помјерити објекте на страници у одговарајући положај.
- Са изборника File изабрати опцију Print или кликнути на Print из General toolbar-а. Отвориће се прозор у којем се може подешавати број копија за штампу.
- Кликнути на Print.

4. Цртање сложенијих структура

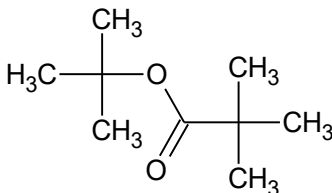
У овом поглављу под синтагмом цртање сложенијих структура у програму ACD/ChemSketch представља напредније технике за израду хемијских структура које укључују коришћење табеле радикала за брз и ефикасан избор компоненти молекула. Само поглавље обрађује употребу табеле радикала за цртање аминокиселина, нуклеотида и других често употребљаваних хемијских структура.

4.1 Употреба табеле радикала

Табела радикала укључује већ нацртане структуре аминокиселина, њихових заштитних група, као и нуклеотида и других често употребљаваних радикала.

- На General toolbar-у кликнути на Save File, затим на New Page.
- На Reference toolbar-у кликнути на Table of Radicals. Приказује се табела радикала.
- Избрати радикале који су вам потребни. Сада ће они бити смјештени уз десну ивицу екрана што омогућује лакшу накнадну употребу.
- За брисање изабраних радикала (са десне стране, из Reference toolbar-а) кликнути двапут на Reference toolbar и у прозору који се отвори кликнути на Yes.

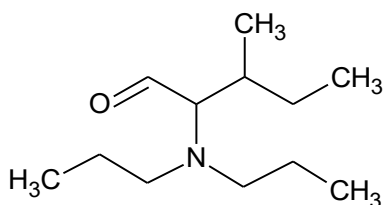
Задатак 38. Нацртати структуру



- Кликнути на Table of Radicals на Reference toolbar-у.

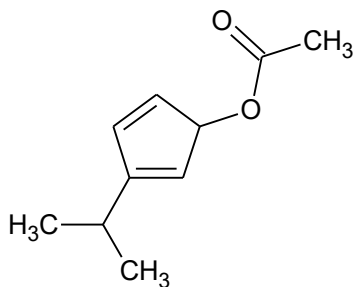
- У дијелу Chains изабрати t-Bu (терц бутил).
- Цртати на жељеном мјесту у прозору.
- Опет кликнути на Table of Radicals на Reference toolbar-у.
- Из дијела C-Groups изабрати CO(t-Bu).
- Групу везати на одговарајућем мјесту.

Задатак 39. Нацртати структуру



- Кликнути на Table of Radicals на Reference toolbar-у.
- У дијелу Amino Acids изабрати Ile-.
- Нацртати изабрану структуру.
- Опет кликнути на Table of Radicals.
- Изабрати n-C₃ из дијела Chains и повезати са NH₂.
- Поновити претходни корак и нацртати жељену структуру.

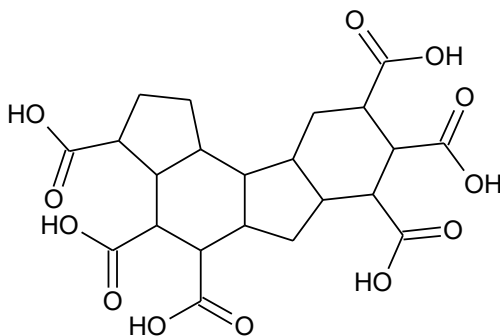
Задатак 40. Нацртати структуру



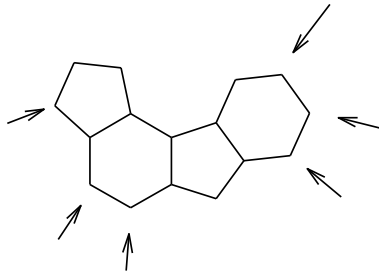
4.2 Употреба цикличних структура

Израда цикличних структура представља кључни аспект у молекуларној хемији. У овом потпоглављу, показаћемо како се могу креирати сложена једињења попут хексадекахидроциклопента[с]флуор-хексакарбоксилне киселине, холестерола и пиперацилина, користећи алате за цртање у програму ACD/ChemSketch.

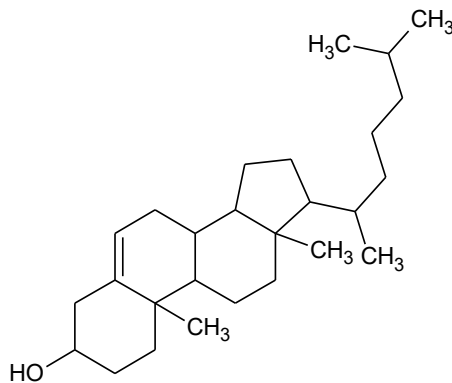
Задатак 41. Нацртати структуру за једињење: хексадекахидроциклопента[с]флуор-3,4,5,7,8,9-хексакарбоксилна киселина.



- Са Reference toolbar-а изабрати Cyclohexane.
- Кликнути на радну површ да бисте нацртали петочлани прстен.
- На Reference toolbar-у кликнути на Cyclopentane.
- Спајати дате структуре док се не добије приказана комбинација прстена.
- На Reference toolbar-у у дијелу C-Groups изабрати COOH.
- Кликнути на атоме на које је потребно везати COOH групе.

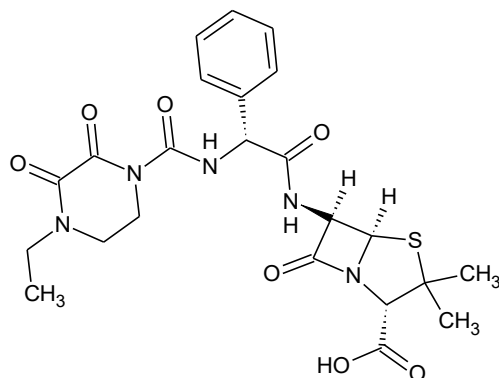


Задатак 42. Нацртати структуру холестерола.



- Са Reference toolbar-а изабрати Cyclohexane.
- Нацртати изабрану структуру.
- Са Reference toolbar-а изабрати Cyclopentane.
- Нацртати изабрану структуру.
- Кликом на везу између два С атома нацртати двоструку везу.
- Изабрати оруђе Draw Chains и нацртати ланац.
- Изабрати из Periodic Table атом кисеоника (O) и додати OH групу.

Задатак 43. Нацртати структуру пиперацилина.



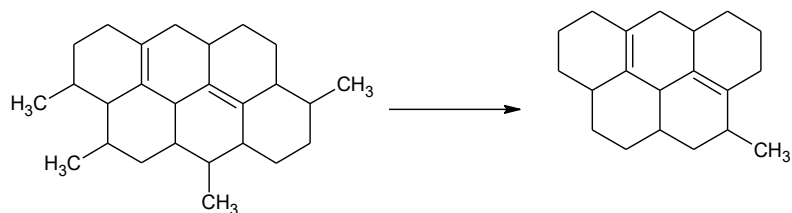
4.3 Брисање атома и дијелова структуре

Овај поступак можете извршити на два начина: брисањем сваког атома појединачно (као што је то рађено потпоглављу 2.1.3) или истовременим брисањем више атома.

4.3.1 Истовремено брисање више атома

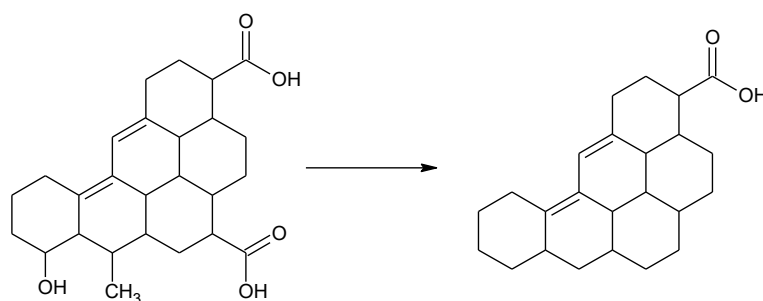
Истовремено брисање више атома представља важну технику за уређивање хемијских структура. Објаснићемо како користити алатку Lasso за брзо и ефикасно брисање више атома одједном, чиме се поједностављује процес модификације молекуларних структура.

Задатак 44. Извршити истовремено брисање атома.



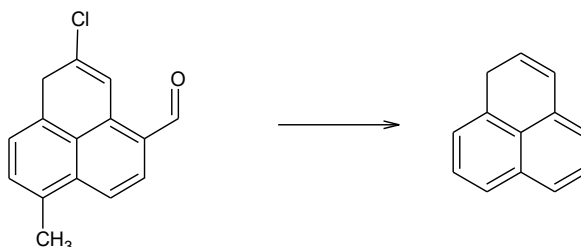
- Са Structure toolbar-а кликнути на Lasso On/Off, да бисте активирали опцију Lasso. Опција Select/Move се аутоматски активира.
- Повући показивач тако да се сви жељени атоми смјесте у затворену ласо линију.
- Са General toolbar-а кликнути на Delete и кликнути на неки од означених атома, да бисте обрисали све заједно. Такође, можете притиснути и Delete са тастатуре.

Задатак 45. Извршити истовремено брисање атома.



- Кликнути на Lasso On/Off са Structure Toolbar-а, да бисте активирали опцију Lasso.
- Све атоме које треба обрисати обухватити у затворену ласо линију.
- Кликнути на Delete са General toolbar-а.

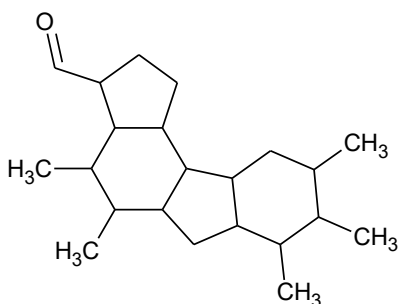
Задатак 46. Извршити истовремено брисање атома.



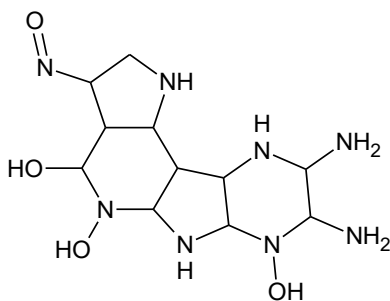
4.4 Замјена атома

Замјена атома у хемијским структурама је кључна техника за прилагођавање молекула специфичним потребама. У овом потпоглављу, показаћемо како се користи ACD/ChemSketch за замену атома угљеника са другим атомима, као што су азот и кисеоник, ради добијања жељених структура.

Задатак 47. Замијенити атоме молекула



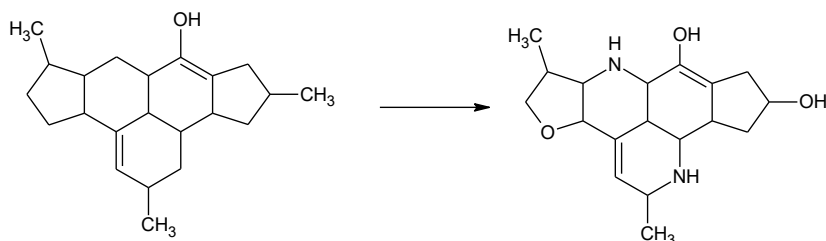
да би се добио



- Са линије Atom изабрати азот (N) и кликнути на све атоме угљеника које желите промијенити (као што је у овом случају назначено на слици).
- Са линије Atom изабрати кисеоник (O) и на исти начин га „убаците” у структуру.

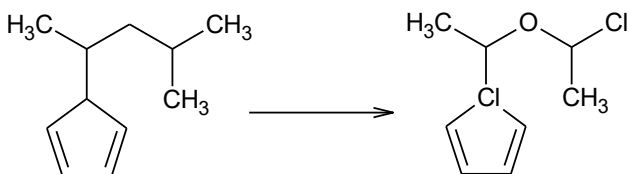
Атоме не можете мијењати коришћењем оруђа Draw Continuous (видјети поглавље 2.2.8).

Задатак 48. Замијенити атоме да би се од почетне добила тражена структура.



- Изабрати атом азота (N) са линије Atom и кликнути на све атоме угљеника (C) које желите промијенити.
- Затим, изабрати атом кисеоника (O), кликнути на атом угљеника и на CH₃ групу и тако извршити одговарајућу замјену.

Задатак 49. Замијенити атоме да би се од почетне добила тражена структура.

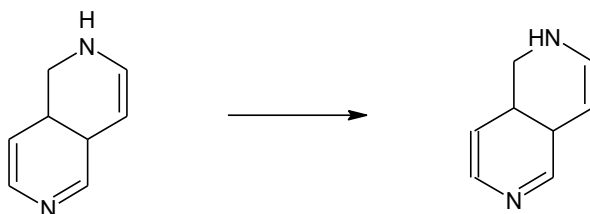


4.5 Постављање и мијењање позиције вишеструких веза

Вишеструке везе можете додати одабиром неке од сљедећих опција Draw Normal, Draw Continuous или пак Draw Chains. Након тога само треба кликнути на везу коју желите измијенити.

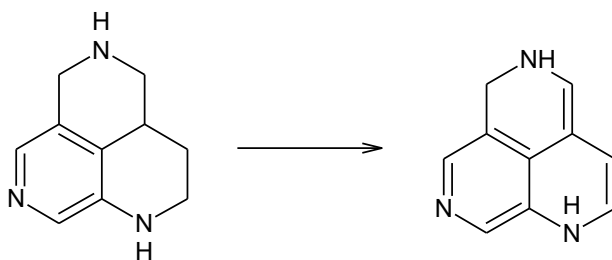
Коришћењем опције Change Position изглед структуре се може додатно подешавати. По одабиру (клика) поменути опције/дугмета, потребно је још и одабрати атоме и двоструке везе које желите да мичете. Обратите посебну пажњу на кретање одабраних атома око осталих, као и двоструке везе око једноструке.

Задатак 50. На основу инструкција из претходног потпоглавља модификовати структуру.



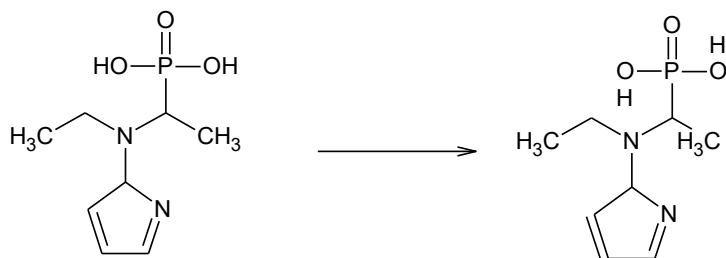
- Нацртати структуру као у потпоглављу 3.2. Употреба цикличних структура и 3.4. Замјена атома.
- Изабрати опцију Change Position и кликнути на двоструку везу, ако то није жељени облик, поновити поступак.
- Уз активiranу исту опцију, кликнути на атом азота и мијењати га док не добијете жељени облик.

Задатак 51. Извршити дате промјене на структури.



- Нацртати структуру као у потпоглављу 3.2. Употреба цикличних структура и 3.4. Замјена атома.
- Кликнути на Change Position и мијењати положај двоструке везе.
- Нацртати двоструке везе умјесто једноструких простим кликом на везу.
- Активирањем опције Change Position мијењати положај атома водоника(H) док не добијете жељени.

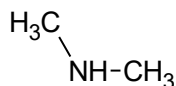
Задатак 52. Извршите промјене на почетној структури да бисте добили жељену.



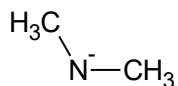
4.6 Постављање наелектрисања и дефинисање анјона и катјона

У овом дијелу описан је поступак приказивања анјона, катјона, слободних радикала, и других наелектрисаних специја.

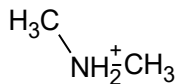
- Уз помоћ опција из Atoms toolbar-а нацртати погодну структуру, на примјер



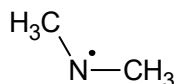
- На Atoms toolbar-у кликнути на Increment Charge да бисте добили следеће опције:
 - Increment (+) Charge
 - Decrement (-) Charge
 - Radical
 - Positive radical ion
 - Negative radical ion
- Кликнути на Decrement (-) Charge и потом на NH групу да бисте добили анјон.



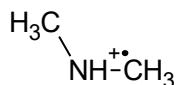
- Кликнути на Increment (+) Charge и потом двоструким кликом на N⁻ да бисте добили катјон.



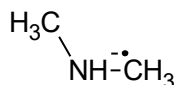
- Кликнути на Radical и затим на NH₂ групу, да бисте добили радикал.



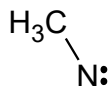
- Кликните на празан простор да бисте промијенили изабрану опцију у Positive radical ion.



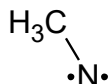
- Кликните на празан простор да бисте изабрали опцију Negative radical ion.



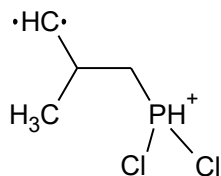
- Кликнути на Delete из General toolbar-а и избришите CH₃.
- Изабрати Radical и кликнути неколико пута на NH да бисте добили асиметрични дирадикал.



- Кликните још једном на исто мјесто, с активираним опцијом Radical, да бисте добили симетрични дирадикал.

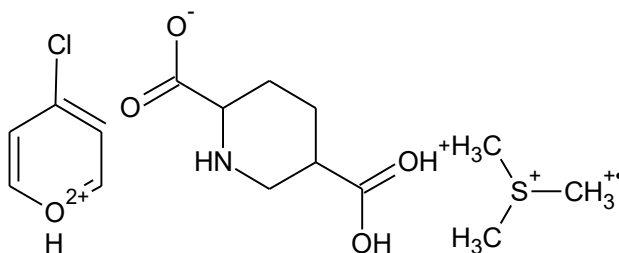


Задатак 53. Нацртати следећу структуру:

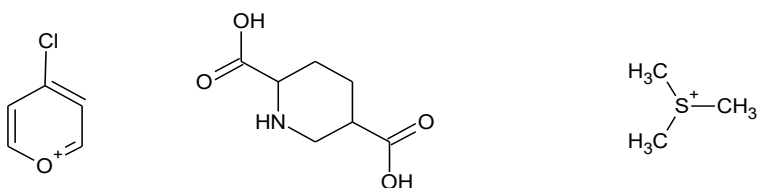


- Нацртати структуру као у потпоглављу 2.1.1 Коришћење Draw Normal оруђа.
- Кликнути на Radicals из Atoms toolbar-а, а затим на CH₃ (да бисте формирали симетрични радикал потребно је кликнути три пута).
- Са активираном опцијом Radicals кликнути десним кликом на празан простор и промијенити опцију у +.
- Кликнути на атом фосфора.

Задатак 54. Нацртати следеће катјоне, анјоне и радикале.



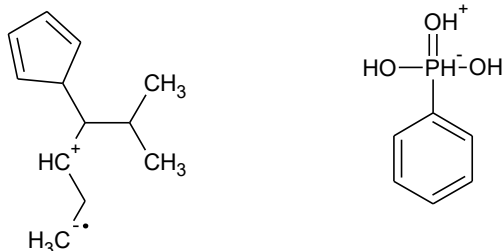
- Нацртати почетне структуре које требају изгледати овако



- Кликнути на доњи десни угао оруђа Increment Charge из Atoms toolbar-а.

- Бирати одговарајуће анјоне, катјоне или радикале обзиром на потребе задатака.
- У првом случају изабрати + и кликнути на већ позитивно наелектрисани кисеоник (O^+).
- У другом примјеру на OH групу кликнути са активираним опцијом -, а на атом кисеоника са опцијом +.
- Трећи примјер захтјева активирање опције Positive Radical Ion. Након активирања кликнути на CH_3 групу.

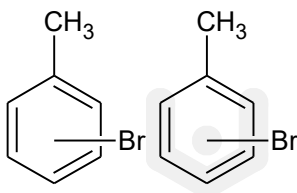
Задатак 55. Нацртати сљедеће анјоне, катјоне и радикале.



4.7 Маркушова (Markush) веза

Како бисте означили недефинисане тачке везивања у одређеним структурама, користите неку од опција Маркушових веза.

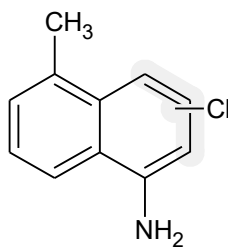
Задатак 56. Нацртати сљедеће структуре



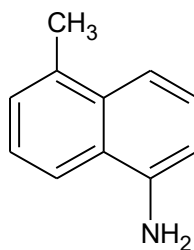
- Нацртати структуру толуена.
- Са Atoms toolbar-а изабрати атом брома.
- Означити пет доњих атома угљеника.
- Изабрати Markush Bond или Markush Bond with Shadow.

У датим структурама атом брома може бити повезан са било којим од пет означених угљеника у толуену.

Задатак 57. Нацртати следећу структуру

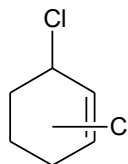
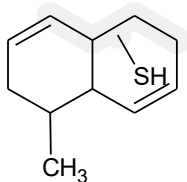


- Нацртати структуру као у поглављу 3.2. Употреба цикличних структура.



- Изабрати атом хлора са Atoms toolbar-а.
- Означити три атома угљеника за које може бити везан атом хлора.
- Изабрати Markush Bond with Shadow.

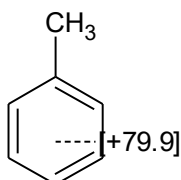
Задатак 58. Нацртати слједеће структуре



4.7.1 Маркушове везе са додатним или уклоњеним дијеловима

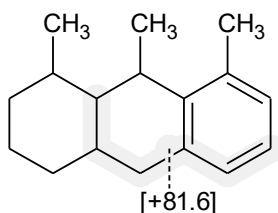
Овај посебан тип Маркушова структура је користан за креирање метаболитских или масено-спектрометријских промјена хемијских структура.

Задатак 59. Нацртати структуру



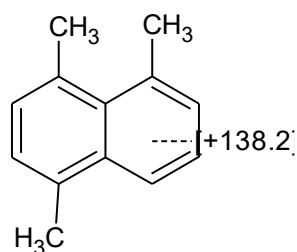
- Нацртати толуен.
- Означити пет доњих атома угљеника.
- Изабрати опцију Markush Bond with Added or Remove Fragment са Structure toolbar-а.
- У отвореном директоријуму означити Addition и Mass, а затим укуцати масу (79,9).
- Кликнути на ОК.

Задатак 60. Нацртати структуру



- Нацртати структуру као у потпоглављу 3.2. Употреба цикличних структура.
- Означити одговарајуће атоме.
- Изабрати опцију Markush Bond with Added or Remove Fragment with Shadow.
- У отвореном директоријуму означити Addition и укуцати масу (81.6) у поље Mass.

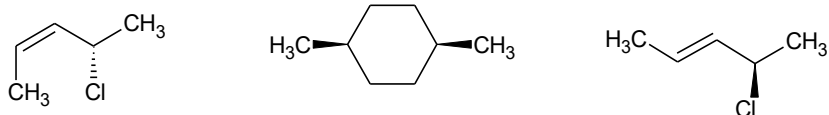
Задатак 61. Нацртати структуру



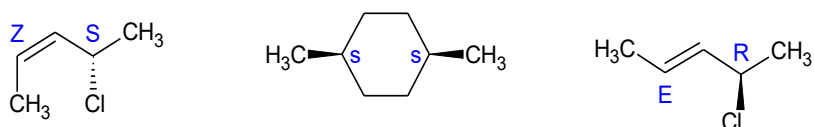
4.8 Организација стехиометријских дескриптора

ACD/ChemSketch омогућава организацију стереохемијских дескриптора за хиралне и псеудо-хиралне центре, као и за конфигурације двоструке везе.

Задатак 62. Нацртати следеће структуре коришћењем претходно описаних метода:

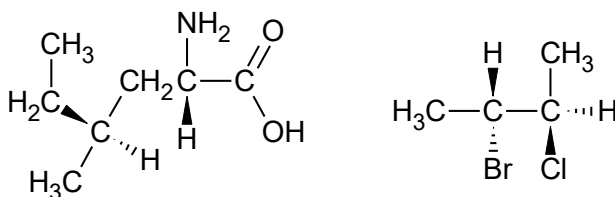


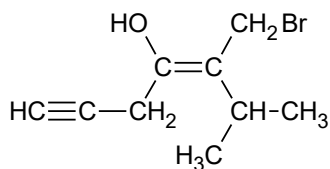
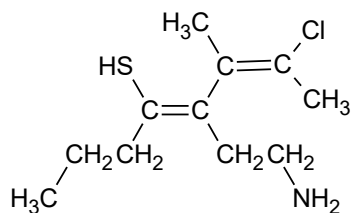
- Означите све структуре.
- У изборнику Tools, одаберати Generate и кликнути на Stereo Descriptors (ово можете чинити у Structure и Draw mode-у). Стереодескриптори се појављују уз одговарајуће хиралне атоме и двоструке везе.



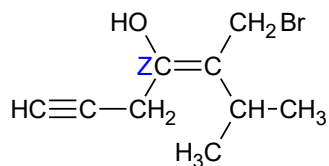
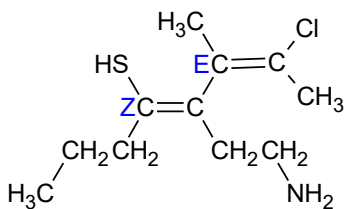
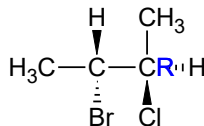
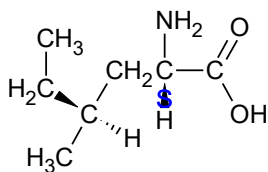
- Доступни су следећи стереодескриптори:
 - S и R који описују конфигурацију хиралног центра;
 - E и Z који описују конфигурацију двоструке везе;
 - s и r који описују конфигурацију псеудо-хиралних центара.
- Options Preferences.
- Одабрати картицу Structures и потом изабрати жељену боју у Auto/Manual Numbering Color. Идући пут када покренете ову опцију, слова ће бити обојена одабраном бојом.

Задатак 63. Нацртати следеће структуре и означити њихове стереоцентре.

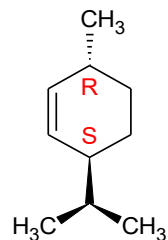
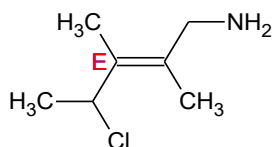




- Нацртати структуре као у потпоглављу 2.1.1 Коришћење Draw Normal оруђа и и 2.1.2 Двоструке и троструке везе.
- Користећи оруђе Up Stereo Bonds и Down Stereo Bonds нацртати стерео везе на мјестима на којима је то потребно.
- Означити структуру.
- Из изборника Tools Generate Stereo Descriptors



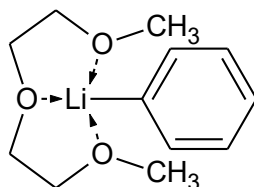
Задатак 64. Нацртати следеће структуре



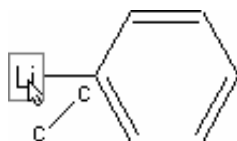
4.9 Цртање координацијских веза

Постоји више начина цртања координацијских веза. ACD/ChemSketch омогућава вам да цртате четири различита облика.

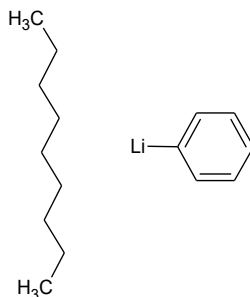
Задатак 65. Нацртати структуру



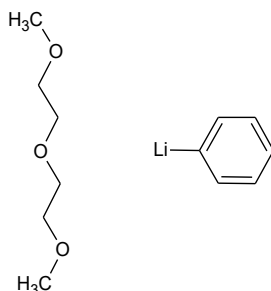
- Користећи Table of Radicals изабрати бензенoв прстен и поставити га на радну површ.
- Изабрати Set Bond Horizontally и обрнути прстен.
- Активирати Draw Normal, а из периодног система елемената изабрати литијум (Li) и кликнути на ОК. Повезати атом литијума са прстеном као што је приказано на следећој слици.



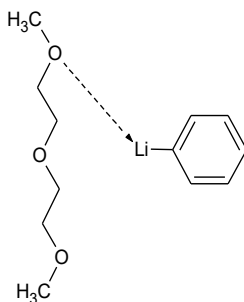
- Изабрати угљеник из изборника Atom укључити оруђе Draw Chains. На празној површини, с лијеве стране нацртаног прстена, извући ланац од 9 угљеника. Добијени ланац не смије да додирује прстен.



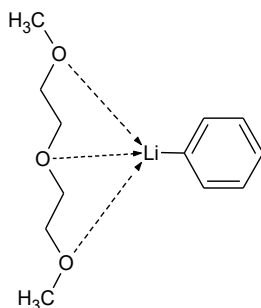
- Поново изабрати Draw Normal, а из изборника Atom кисеоник (O). Кисеонике смјестити на одговарајућа мјеста (како је приказано на слици).



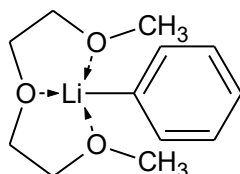
- На Structure toolbar-у кликнути на бијели троугао иконице оруђа Coordinating Bonds и одабрати Coordinating (Dashed Arrow) Bond.
- Повући линију од једног кисеоника ка литијуму како бисте их спојили координацијском везом. Пуштањем тастера појавиће се испрекидана стрелица.



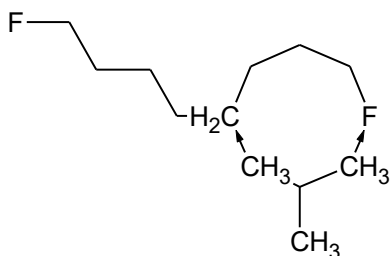
- На исти начин повуците везе према литијуму од преостала два кисеоника



- Кликнути на Clean Structure за изједначавање свих веза

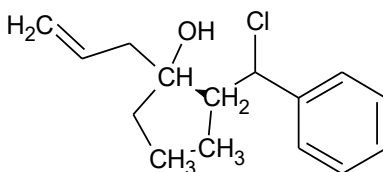


Задатак 66. Нацртати структуру



- Нацртати ланац са одговарајућим бројем угљеникових атома, а затим крајње атоме замијенити са атомима флуора.
- Нацртати структуру изобутана, или изабрати из Table of Radicals.
- Кликнути на Coordinating (Arrow) Bonds и изабрати одговарајућу врсту везе.
- Повезати CH₃ групе координационим везама са два атома угљеника у ланцу.
- Кликнути на Clean Structure.

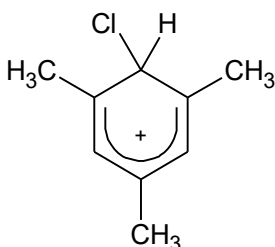
Задатак 67. Нацртати структуру



4.10 Делокализовано наелектрисање и криве

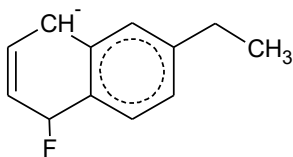
Делокализоване везе и наелектрисање могу бити коришћени за цртање реакционих интермедијера, делокализованих наелектрисања и органометалних структура.

Задатак 68. Нацртати структуру



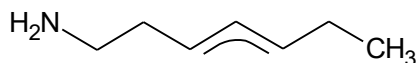
- Нацртати структуру као у поглављу 3.2 Употреба цикличних структура.
- Активирати опцију Select/Move.
- Притиснути SHIFT и означити одговарајуће везе.
- Кликнути на Solid Delocalization Bond са Structure toolbar-а.
- Кликнути на Increment (+) Charge са Atoms toolbar-а, а затим на тачку у центру делокализованих веза.

Задатак 69. Нацртати структуру.



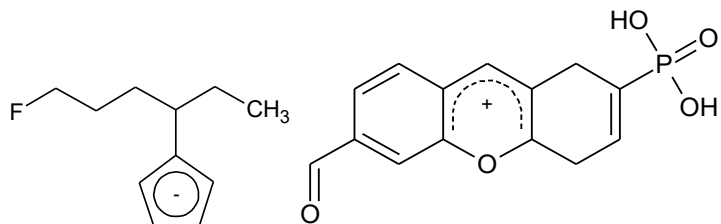
- Нацртати структуру као у поглављу 3.2. Употреба цикличних структура.
- Означити десни бензенов прстен, односно све везе које га чине.
- Кликнути на Dotted Delocalization Curve са Structure toolbar-a.

Задатак 70. Нацртати структуру.



- Нацртати одговарајући ланац и замијенити крајњи угљеников атом са атомом азота.
- Означити двије везе ланцу.
- Кликнути на Solid Delocalization Bond са Structure toolbar-a.
- Кликнути на Decrement (-) Charge са Atoms toolbar-a, а затим на тачку у центру делокализованих веза.

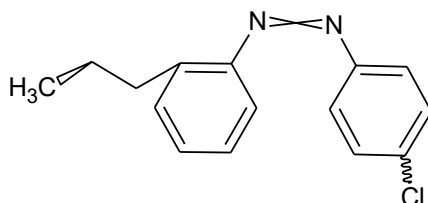
Задатак 71. Нацртати сљедеће структуре



4.11 Још неке врсте веза

Можете нацртати и структуре које садрже недефинисане двоструке и једноструке стерео-везе, тј. које указују на то да конфигурације двоструке везе или хирални центар нису познати, или се пак не узимају у обзир.

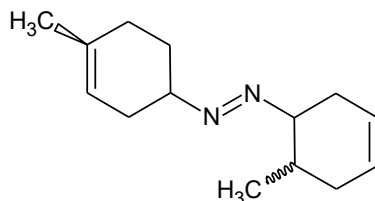
Задатак 72. Нацртати структуру



- Нацртати структуру као у поглављу 3.2. Употреба цикличних структура.
- Кликнути на бијели троугао код опције Undefined Stereo Bonds, да бисте видјели све понуђене типове веза.
- Кликнути на Undefined Double Stereo Bond, а затим извршити замјену веза.
- Из исте групе опција Structure toolbar-а изабрати Undefined Stereo Bond и кликнути на везу између атома хлора и угљеника.
- Потом изабрати опцију Hollow Bonds и замијенити везу између два атома угљеника.

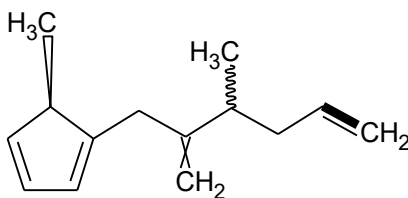
Осим наведених врста веза, код ове опције можете наћи и Delocalized Bonds, Double Bonds with Partial Order (користе се за опис делокалозације двоструке везе, таутомерије и ароматичних структура), Double Semibold Bonds и Quadruple Bonds (користи се за цртање неких органометалних комплекса).

Задатак 73. Нацртати структуру



- Нацртати структуру као у поглављу 3.2. Употреба цикличних структура.
- Кликнути на троугао у доњем десном углу иконице Hollow Bonds са Structure toolbar-а.
- Изабрати Hollow Bonds и извршити замјену одговарајуће везе.
- Изабрати Undefined Stereo Bonds и извршити замјену одговарајуће везе.

Задатак 74. Нацртати структуру



4.12 Промјена својстава атома

Ако желите да прикажете валенцију или изотопску масу атома у нацртаној структури у ACD/ChemSketch-у, или да промијените врсту и величину атома, можете користити панел Properties.

- Означите атом, везу, наелектрисање или цијелу структуру на којој желите извршити промјену.

- Двоструки клик на означено мјесто отвориће панел Properties.
- Изабрати неку од понуђених картица: Atom, Bond, Special или Common.
- Промијенити величину симбола атома, тип текста, тип везе, прикажите или сакријте одређене атоме, тип сјене и томе слично.
- Кликнути на Apply да бисте сачували извршене промјене.

5. Напредне структуре, SMILES и InChI записи, реакционе шеме

Фокусираћемо се сад на анализу и манипулацију молекулским структурама у ACD/ChemSketch софтверу. Представљена је 2D- и 3D-оптимизација, коришћење SMILES и InChI записа за представљање молекула, као и цртање цикличних алкана и пептида.

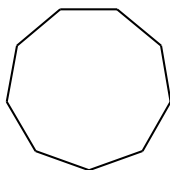
5.1 2D-оптимизација

The Clean Structure оруђе може се користити за 2D-оптимизацију одређене структуре, односно њеним прекрајањем и промјеном величине може да стандардизује све дужине веза и углова.

5.1.1 Цртање структура цикличних алкана

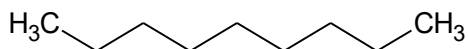
Користећи следеће технике можете брзо нацртати савршене цикличне алкане.

Задатак 75. Нацртати структуру циклононана

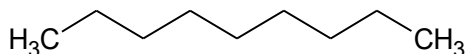


- На Atoms toolbar-у кликнути на Carbon.
- У Structure toolbar-у, кликнути на Draw Chains и повлачењем курсора у радном простору нацртати 9-очлани ланац. Имајте на уму да информативни курсор показује број

атома у ланцу а он је изабран у Preferences dialog box (General tab).



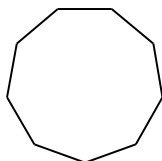
- У Structure toolbar-у кликнути Flip Top to Bottom да се структура обрне наопако.



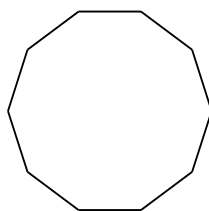
- Десним кликом укључити Draw Normal алатку и превући од првог атома до последњег како бисте их повезали.



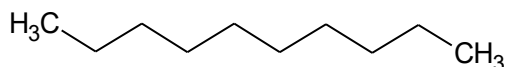
- Користите Clean Structure да добијете следећу структуру:



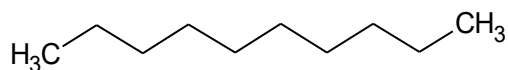
Задатак 76. Нацртати структуру циклодекана.



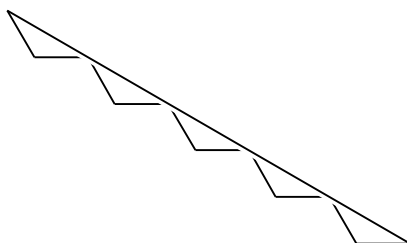
- На Atoms toolbar-у кликнути на Carbon.
- У Structure toolbar-у кликнути на Draw Chains и повлачењем курсора по радном простору нацртати 10-точлани ланац. (информативни курсор показује број атома у ланцу, а он је изабран у Preferences dialog box (General tab))



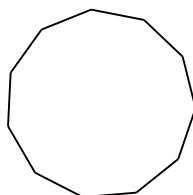
- У Structure toolbar-у кликнути Flip Top to Bottom да се структура обрне наопако.



- Десним кликом укључити Draw Normal алатку и превући од првог атома до посљедњег како бисте их повезали.



- Да добијете тражену структуру циклодекана, користите алатку Clean Structure.



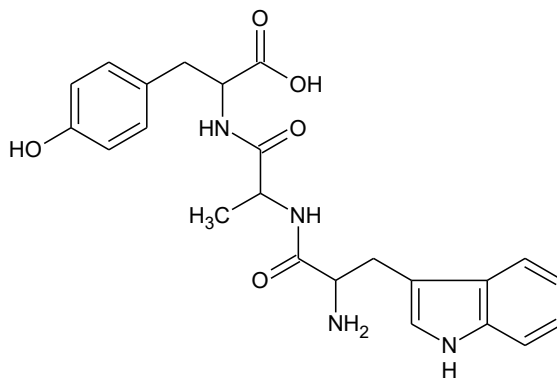
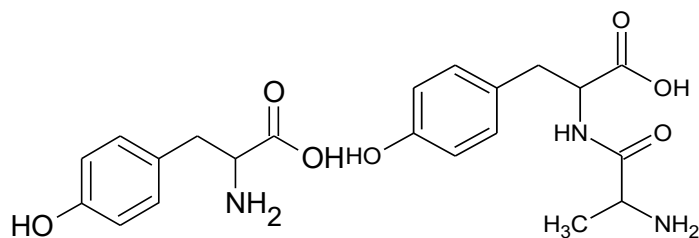
Задатак 77. Нацртати структуру циклоалкана са пет угљеникових атома.

5.1.2 Цртање структура цикличних пептида

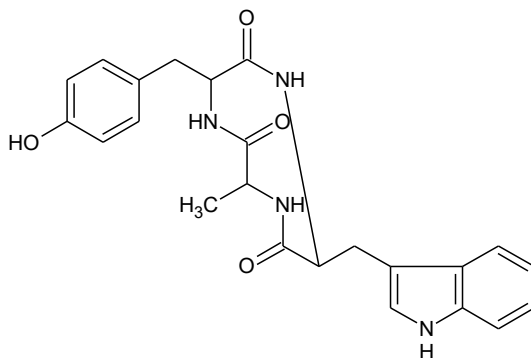
У наредним задацима је детаљно описан процес цртања структура цикличних пептида коришћењем софтвера за хемијско цртање, презентујући појединачне кораке у конструисању Tyr-Ala-Trp, Val-Gly-Ser-Ala, и H-Ala-Glu-Asp-Arg-OH пептидних ланаца.

Задатак 78. Нацртати структуру Tyr-Ala-Trp.

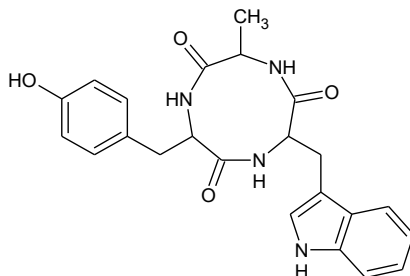
- У Template Window који се може налазити уз Open Template Window, одабрати Amino Acids.
- Изабрати Tyrosine и умножити га на радној површини.
- Из изборника Table of Radicals изабрати Alanine и Тryptophan и повезати одговарајуће радикале:



- Десним кликом одабрати Select/Move и повући од NH₂ групе до OH групе.

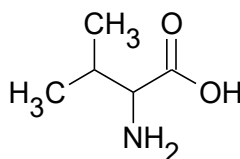


- Одабрати Clean Structure да би се добила следећа структура:



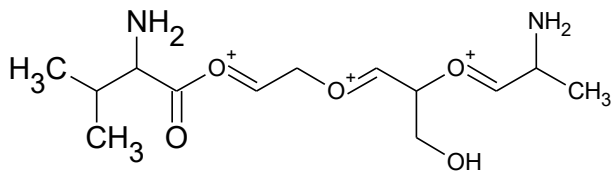
Задатак 79. Нацртати структуру Val – Gly – Ser – Ala.

- Кликот на Templates одаберете из падајућег изборника Template Window. Отвори вам се дијалог прозор у ком одаберете Amino Acids.
- Изаберете Valine и превучете га на радну површину.



- Затим из изборника Table of Radicals избрати Glycine, Serine и Alanine, и повезати одговарајуће радикале:

Amino Acids:	
Ala	Gly
Arg	His
Asp	Ile
Asp	Ser
Asp	Thr
Cys	Leu
Glu	Trp
Met	Tyr
Val	



- Одабрати Clean Structure да би се добила одговарајућа структура.

Задатак 80. Нацртати структуру H-Ala-Glu-Asp-Arg-OH.

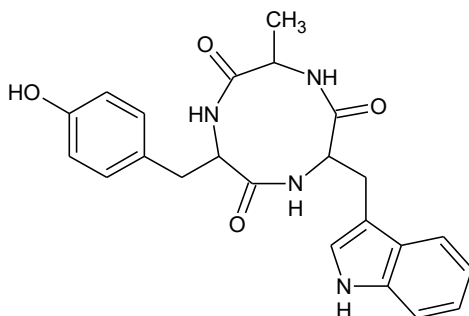
5.2 SMILES записи

ACD/ChemSketch може преводити SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry Specification) записе у структуру, и преводити структуре у SMILES записе.

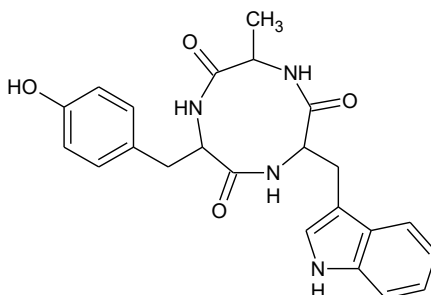
5.2.1 Додјела SMILES записа

ACD/ChemSketch омогућава генерисање и управљање SMILES записима за различите хемијске структуре, укључујући цикличне пептиде и аминокиселинске низове.

Задатак 81. Одредити SMILES запис за циклични пептид нацртан у поглављу 4.1.2.



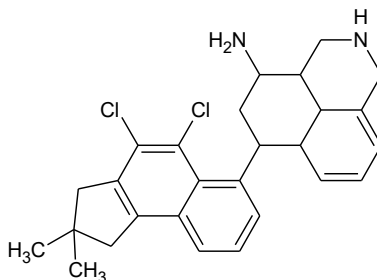
- Из изборника Tools, показати на Generate, и потом одабрати SMILES Notation. Додијељени запис се појављује испод структуре.



Oc1ccc(cc1)CC4NC(=O)C(C)NC(=O)C(Cc3cnc2ccccc23)NC4=O

- Запис можете умножити тако што ћете га одабрати и притиснути Ctrl + C. Командом Ctrl + V ћете га прелијепити у било који други програм за обраду текста.

Задатак 82. Пронаћи и исписати SMILES запис за сљедећу структуру:



- Нацртати задану структуру. Из изборника Tools, показати на Generate, и потом одабрати SMILES Notation. Додијељени запис се појављује испод структуре.
- Добијени запис можете умножити тако што ћете га одабрати и притиснути Ctrl + C. Командом Ctrl + V ћете га прилијепити у било који други програм за обраду текста.

Задатак 83. Пронаћи и исписати SMILES запис за структуру Val – Gly – Ser – Ala.

(Структура цртана у задатку 78.)

5.2.2 Формирање структуре на основу SMILES записа

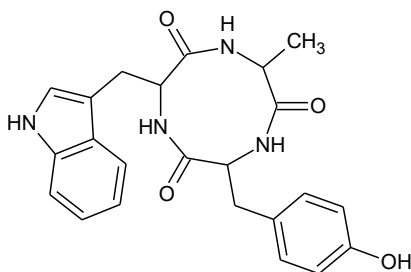
Сада ћемо покушати обрнути задатак – превести SMILES записе у структуре.

Задатак 84. Формирати структуру за SMILES запис из претходног поглавља

```
Oc1ccc(cc1)CC4NC(=O)C(C)NC(=O)C(Cc3cnc2ccccc23)NC4=O
```

- Одабрати стринг из претходног поглавља.
- Из изборника Tools, показати на Generate, и затим одабрати Structure from SMILES. Додијељена структура је смјештена испод стринга. Као што видите, ради се о истој структури као из претходног поглавља.

```
Oc1ccc(cc1)CC4NC(=O)C(C)NC(=O)C(Cc3cnc2ccccc23)NC4=O
```

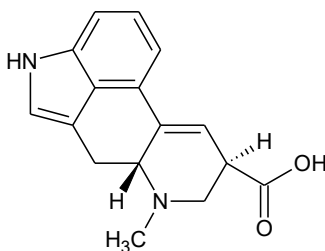


- Уколико на радној површини немате никакав запис или он није означен, одабир команде Structure from SMILES ће отворити прозор у коме ручно можете уписати SMILES запис структуре коју желите да прикажете.
- Кликнути ОК. Структура се приказује као њена шаблонска сјена.
- Кликнути на радну површину да бисте је смјестили.

Задатак 85. Формирати структуру за сљедећи SMILES запис

Oc1ccc(cc1)CC4NC(=O)C(C)NC(=O)C(Cc3cnc2ccccc23)NC4=O

- Одабрати стринг из претходног поглавља.
- Из изборника Tools, показати на Generate, и затим одабрати Structure from SMILES. Додијељена структура је смјештена испод стринга.
- Кликнути ОК, а затим кликнути на радну површину да бисте је смјестили.



Задатак 86. Пронаћи структуру за сљедећи SMILES запис!

- N1CCN(CC1)C(C(F)=C2)=CC(=C2C4=O)N(C3CC3)C=C4C(=O)O
- O=Cc1ccc(O)c(OC)c1

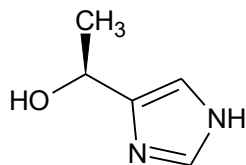
5.3 InChI запис

ACD/ChemSketch може преводити InChI (IUPAC International Chemical Identifier) записе у структуре, као и структуре у InChI записе.

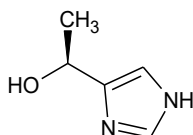
5.3.1 Додјела InChI записа

Наведени задаци објашњавају поступак генерисања и упоређивања различитих InChI записа коришћењем опција у ACD/ChemSketch-у.

Задатак 87. Исписати InChI запис за сљедећу структуру:



- Користећи стечена знања, нацртати структуру.
- Из изборника Tools, показати на Generate, и затим одабрати InChI Options. У прозору који вам се отвори, означити поља Mobile H Perception и Absolute.
- Из изборника Tools, показати на Generate, и затим одабрати InChI for Structure. Додијељени запис се појављује испод нацртане структуре:

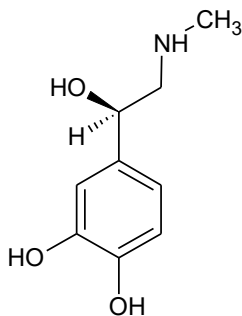


InChI=1S/C5H8N2O/c1-4(8)5-2-6-3-7-5/h2-4,8H,1H3,(H,6,7)/t4-/m0/s1

- Поновити додјелу InChI записа за исту структуру само са другим опцијама; у прозору InChI Options, уклоните ознаку са Mobile H Perception и одаберите Ignore у Stereo Options. Сада запис изгледа овако:

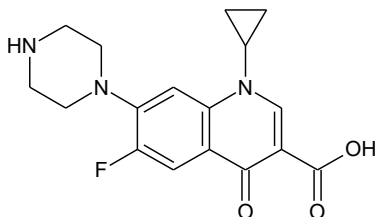
InChI=1/C5H8N2O/c1-4(8)5-2-6-3-7-5/h2-4,8H,1H3,(H,6,7)/f/h6H

Задатак 88. Исписати оба InChI записа за сљедећу структуру:



- Користећи стечена знања, нацртати структуру.
- Из изборника Tools, показати на Generate, и затим одабрати InChI Options. У прозору који вам се отвори, означити поља Mobile H Percaption и Absolute.
- Из изборника Tools, показати на Generate, и затим одабрати InChI for Structure. Додијељени запис се појављује испод нацртан.

Задатак 89. Исписати оба InChI записа за сљедећу структуру:



5.3.2 Стварање структура из InChI записа

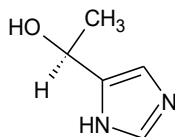
Сада ћемо покушати обрнути задатак – превести InChI записе у структуре.

Задатак 90. Формирати структуру за InChI запис добијен у претходном поглављу:

InChI=1S/C5H8N2O/c1-4(8)5-2-6-3-7-5/h2-4,8H,1H3,(H,6,7)/t4-/m0/s1

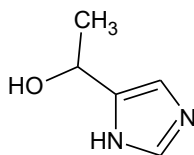
- Одабрати стринг из претходног поглавља.
- Из изборника Tools, показати на Generate, и затим одабрати Structure from InChI. Додијељена структура је смјештена испод стринга. Као што видите, ради се о истој структури као из претходног поглавља:

InChI=1S/C5H8N2O/c1-4(8)5-2-6-3-7-5/h2-4,8H,1H3,(H,6,7)/t4-/m0/s1



- Одабрати други InChI запис, а потом команду Structure from InChI. Видјећете да се стереоизомерија не огледа у овој структури:

InChI=1/C5H8N2O/c1-4(8)5-2-6-3-7-5/h2-4,8H,1H3,(H,6,7)/f/h7H

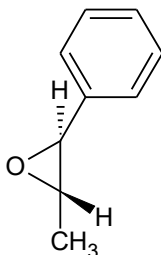


Задатак 91. Формирати структуру за оба InChI записа.

a) InChI=1S/C9H10O/c1-7-9(10-7)8-5-3-2-4-6-8/h2-7,9H,1H3/t7-,9+/m0/s1

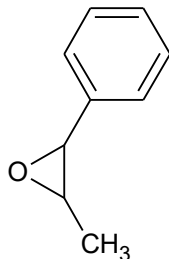
б) InChI=1/C9H10O/c1-7-9(10-7)8-5-3-2-4-6-8/h2-7,9H,1H3

а) Из изборника Tools, показати на Generate, и затим одабрати Structure from InChI. Додијељена структура је смјештена испод стринга.



б) InChI=1/C9H10O/c1-7-9(10-7)8-5-3-2-4-6-8/h2-7,9H,1H3

Поступак је исти као претходни.



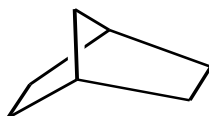
5.4 3D–оптимизација

Овај одјељак објашњава како направити структуре које имају стварне углове и дужине веза. Нема потребе да се објашњава колико је тешко нацртати овакве структуре пропорционално. Могућности које нам нуде опције 3D – Optimisation и 3D – Rotation нам помажу да брзо савладамо овај задатак. Ове опције омогућавају да направимо сложене структуре у ACD/ChemSketch-у са лакоћом.

5.4.1 Цртање структуре бицикло[2.2.2]октана

Ово поглавље је посвећено прецизном процесу цртања структуре бицикло[2.2.2]октана уз опис како да додамо и модификујемо угљоводоничне мостове и водоничне атоме, те како да оптимизујемо и ротирамо 3D модел нацртане структуре.

Задатак 92. Нацртати структуру

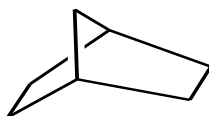


- Из изборника Options изаберати Preferences, и у дијалог прозору који се појави притиснути тастер Structure.
- У подручју 3D – Optimisation скините ознаку са Add Hydrogens и затим притиснути ОК.

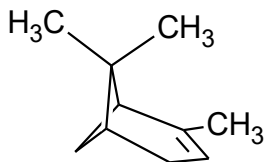
- Из изборника References или из изборника Table of Radicals изаберати Cyclohexane. Кликнути на радну површину да поставите циклохексанов прстен.
- Изабрати Draw Normal и нацртати угљоводонични мост тако што ћете повлачити курсор како је приказано на сљедећој шеми:



- Кликнути на 3D-Optimatization да добијете 3D модел нацртане структуре.
- Ако је изабран 3D – Rotations mode у тастеру Structure из дијалог прозора Preferences (изборник Options) у истом тренутку када се заврши 3D оптиматизација бићете пребачени у 3D ротацију. Ако нисте пребачени притисните 3D – Rotation.
- Курсором притисните на било који атом или везу у структури и повуците преко радне површине да би добили приказану структуру:



Задатак 93. Нацртати сљедећу структуру користећи претходно дата упутства



- Из изборника Options изабрати Preferences, и у дијалог прозору који се појави притиснути тастер Structure.
- У подручју 3D – Optimisation скините ознаку са Add Hydrogens и затим притиснути ОК.

- Из изборника References или из изборника Table of Radicals изабрати Cyclohexane. Кликнути на радну површину да поставите циклохексанов прстен.
- Изабрати Draw Normal и нацртати двоструку везу, затим нацртати још једну $-CH_3$ групу на било који атом који чини двоструку везу.
- Изабрати Draw Continuous и нацртати угљоводонични мост.
- Поново изабрати опцију Draw Normal и нацртати двије $-CH_3$ групе на C атому угљоводоничног моста.
- Кликнути на 3D-Optimatization да добијете 3D модел нацртане структуре.
- Курсором притисните на било који атом или везу у структури и повуците преко радне површине да би добили приказану структуру.

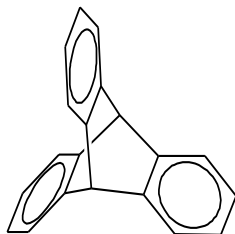
Задатак 94. Нацртати структуру бицикло[2,2,2]октан-2,5-диона (једињење са слике)



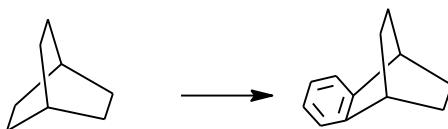
5.4.2 Цртање структуре триптицена

У овом потпоглављу описан је процес цртања и 3D оптимизације структуре триптицена. Наведени задаци представљају кораке потребне за генерисање бицикличних и бензенских структура, њихово повезивање и прелазак у 3D облик, као и приказивање ароматичних прстенова коришћењем ACD/ChemSketch софтвера.

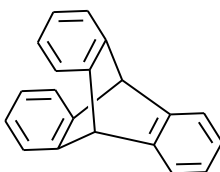
Задатак 95. Нацртати структуру



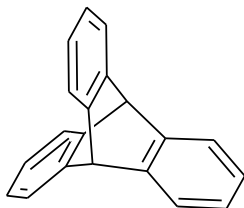
- Нацртати структуру бицикло[2.2.2]октана као што је описано изнад или на линији са оруђем кликнути Template Window затим одабрати Bicyclics тастер. Пренесите на радну површину.
- Из Reference или Table of Radicals изаберите Benzene.
- Кликнути на одговарајућу везу да спојите бензенов прстен као што је приказано на слици:



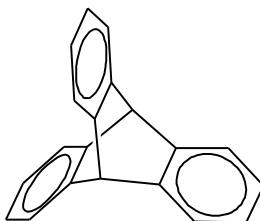
- Поновите корак 2-3 са преосталим везама како бисте добили сљедећу структуру:



- Ако се на радној површини налази више од једне структуре означите структуру коју желите да преведете у 3D облик користећи нека од сљедећих оруђа (Select/Move, Select/Rotate/Resize или 3D-Rotation).
- Притиснути 3D Optimization да добијете модел нацртане структуре:



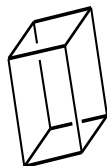
- Уколико је Switch to 3D Rotation Mode одабран у прозору Preferences, програм ће се аутоматски пребацити на 3D Rotation након што је 3D оптимизација завршена. Ако ово није случај, кликнути на 3D-Rotation. Притисните на било који атом или везу на структури и повуците преко радне површине да би добили жељену пројекцију.
- Из изборника Tools изабрати Show Aromaticity да прикажете ароматичне прстенове:



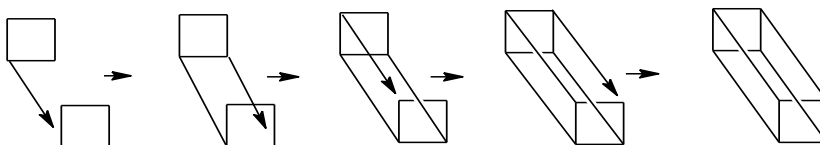
5.4.3 Цртање структуре кубена

У наредним задацима, фокус је на методама цртања цикличних структура, као што су кубен и други циклични системи. Процес укључује избор одговарајућих радикала из Табеле радикала, њихово спајање у структуре, и оптимизацију у тродимензионалном простору ради добијања прецизних просторних репрезентација.

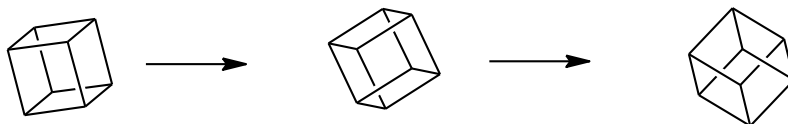
Задатак 96. Нацртати структуру кубена



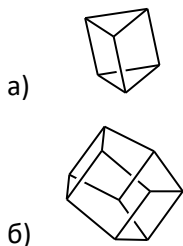
- Из Reference или из Table of Radicals изаберите Cyclobutane. Кликнути двапут на радну површину да бисте поставили два четворочлана прстена један испод другог.
- Кликнути на Draw Normal и спојити углове циклобутана везама повлачећи од једног атома ка другом како је приказано:



- Кликнути на 3D Optimization да добијете модел нацртане структуре.
- Одабрати 3D Rotation ако ова опција није претходно означена.
- Кликнути на било који атом или везу у структури и повуците преко радне површине да би добили пројекцију коју желите.



Задатак 97. Нацртати следеће структуре користећи претходно дата упутства:



а) Прва структура:

- Из Reference или из Table of Radicals изаберите Cyclopropane. Кликнути два пута на радну површину да бисте поставили два трочлана прстена један испод другог.
- Кликнути на Draw Normal и спојити углове циклопропана везама повлачећи од једног атома ка другом.
- Кликнути на 3D Optimization да добијете модел нацртане структуре.
- Одабрати 3D Rotation ако ова опција није претходно означена.
- Кликнути на било који атом или везу у структури и повуците преко радне површине да би добили пројекцију коју желите.

б) Друга структура:

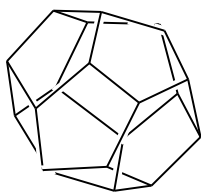
- Из Reference или из Table of Radicals изаберите Cyclopentane. Кликнути два пута на радну површину да бисте поставили два трочлана прстена један испод другог.
- Кликнути на Draw Normal и спојити углове циклопропана везама повлачећи од једног атома ка другом.
- Кликнути на 3D Optimization да добијете модел нацртане структуре.
- Одабрати 3D Rotation ако ова опција није претходно означена.

- Кликнути на било који атом или везу у структури и повуците преко радне површине да би добили пројекцију коју желите.

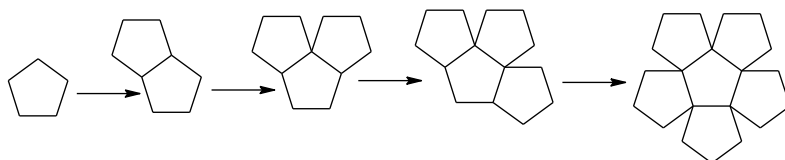
5.4.4 Цртање структуре додекахидрана ([5]Фулерен – C₂₀)

Процес цртања структуре додекахидрана, познатог као [5]Фулерен (C₂₀), обухвата прецизне кораке за избор и спајање циклопентанових радикала, уврштавање додатних атома и веза, те 3D пројекцију структуре за жељени приказ.

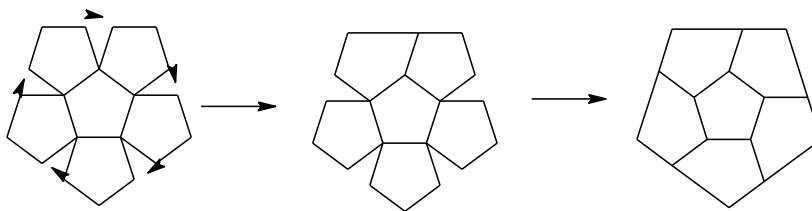
Задатак 98. Нацртати структуру фулерена



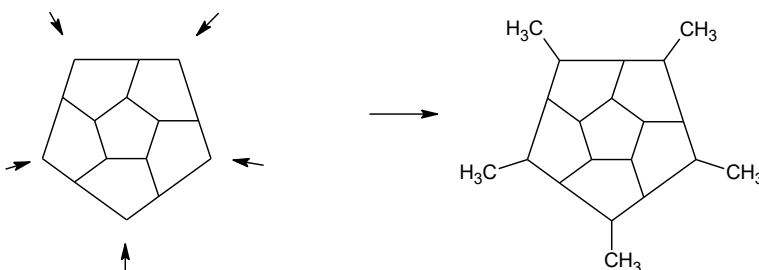
- Из Reference или из Table of Radicals изабрати Cyclopentane. Кликнути двапут на радну површину да поставите циклопентанов прстен.
- Редом кликајте на сваку везу прстена да би на њих додали пет других прстенова.



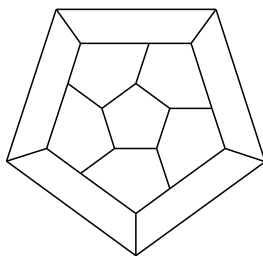
- Десним кликом се брзо пребацити на Select/Move.
- Повлачити атоме са једног прстена према атомима другог како је приказано на сљедећој шеми да би их спојили:



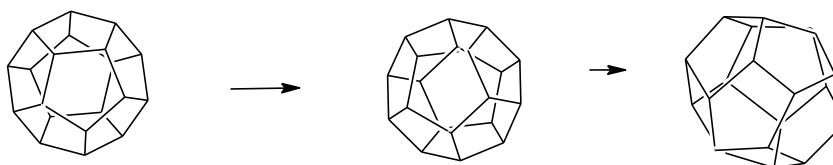
- Из изборника Atoms одабрати Carbon, затим кликнути директно на тачке указане стрелицама да додате још атома и веза:



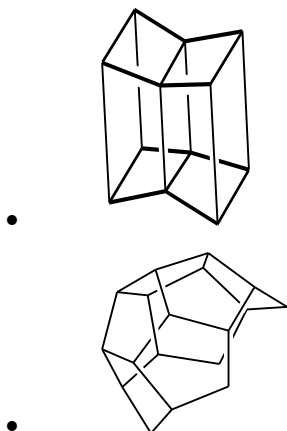
- Спојите сусједне метил групе са једноструким везама повлачећи од једног крајњег атома према другом да би добили сљедећу структуру:



- Кликнути на 3D Optimization да би добили модел нацртане структуре. Означити 3D Rotation уколико није претходно означена.
- Кликнути на било који атом или везу у структури и повући преко радне површине да би добили пројекцију коју желите.



Задатак 99. Нацртати следеће структуре користећи претходно дата упуства:



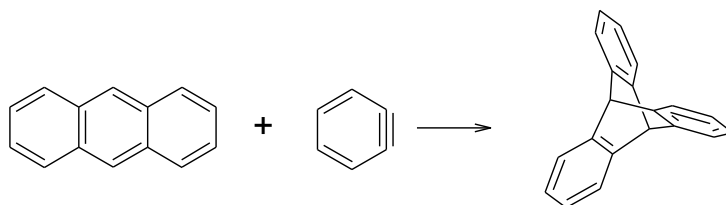
5.5 Цртање, етикетирање и скицирање реакција

Овај одјељак објашњава како нацртати реакције и комплексне хемијске шеме са ручним или аутоматским мапирањем.

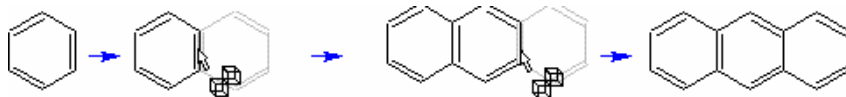
5.5.1 Цртање реакционе шеме

Цртање реакционих шема у ACD/ChemSketch укључује употребу различитих хемијских структура и реакционих знакова ради визуелног представљања различитих хемијских процеса и механизма.

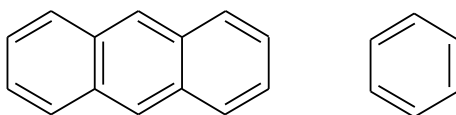
Задатак 100. Нацртати пратећу реакциону шему



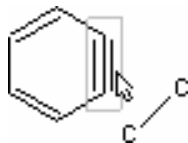
- Из Table of Radicals, изабрати Benzene (ако сте недавно користили овај шаблон, можете га пронаћи у Reference палети).
- Притиснути TAB да окренете шаблонску сијенку и нацртати пратећу структуру тако што ћете кликнути неколико пута на радну површину:



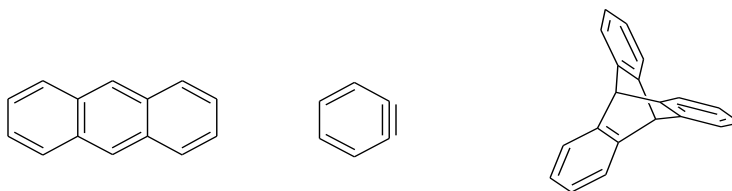
- Притиснути TAB како бисте поновили претходни корак и кликнути поред приказане структуре да нацртате одвојен прстен десним кликом миша на жељено мјесто на радној површини.



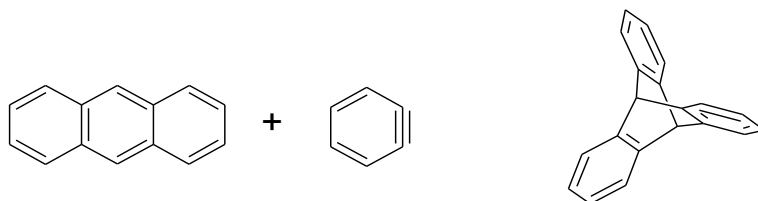
- Из Structure toolbar изабрати Draw Normal и кликнути на везу на прстену да би се утростручила.



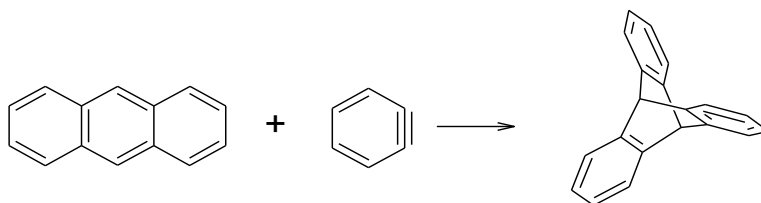
- Нацртати структуру триптицина као што је описано у одјељку 4.4.2. и поставити је поред осталих нацртаних структура.



- Из Structure toolbar изабрати Reaction Plus и кликнути између прве и друге структуре да га поставите.

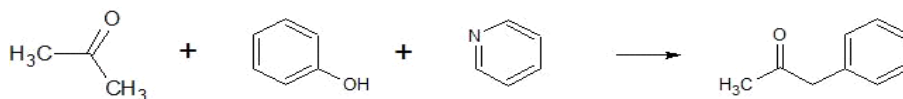


- Изабрати Reaction Arrow и кликнути између друге и треће структуре и поставити је као што је приказано:

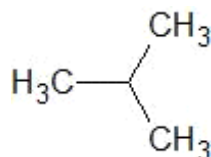


- Да бисте помјерили знак плус или стрелицу потребно је изабрати опцију Select/Move, поставити показивач на објекат, а затим премјестити на одговарајуће мјесто.

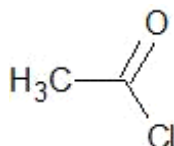
Задатак 101. Нацртати пратећу реакцију



- Изабрати Draw Normal из Structure toolbar нацртати прво структуру 2-метилпропана.



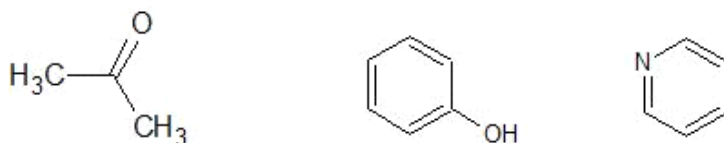
Из Templates/Periodic Table изабрати Cl и са њим замијенити једну CH₃ групу, затим на исти начин одабрати O атом и њиме замијенити другу CH₃ групу. Кликнути на везу угљеник-кисеоник да би направили двоструку везу и добили следећу структуру:



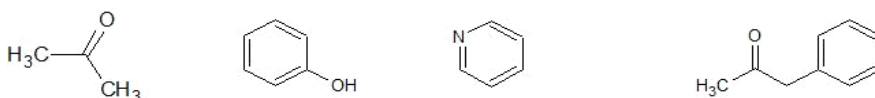
- Из Table of Radicals изабрати Benzene и нацртати бензенов прстен поред горње структуре. Из Templates/Periodic Table изабрати кисеоник (O) кликнути на Draw Continuous и накачити га на било који C атом у прстену.



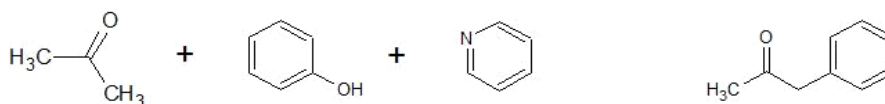
- Затим поново одабрати Benzene из Table of Radicals и нацртати прстен. Из Templates/Periodic Table изабрати азот (N) и кликнути на било који угљеников атом у прстену.



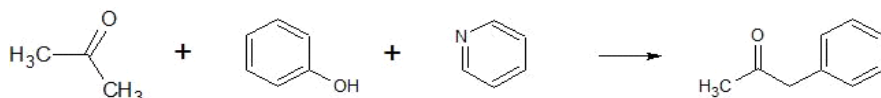
- Поред ове структуре поново на горе објашњен начин нацртати бензен, затим кликнути на Draw Normal одабрати поново елемент угљеник и доцртати супституент. Из Templates/Periodic Table изабрати кисеоник (O) и замијенити њиме атом угљеника. Још једном кликнути на једноструку везу C-O да би добили двоструку.



- Из Structure toolbar изабрати Reaction Plus и кликнути између прве и друге и друге и треће структуре да га поставите.

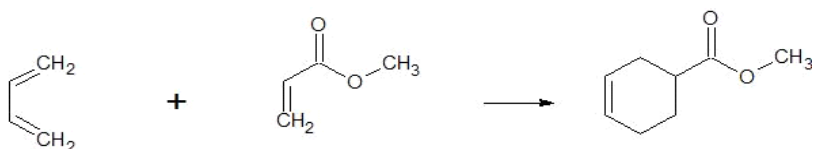


- Изабрати Reaction Arrow и кликнути између треће и четврте структуре.



- Да бисте помјерили знак плус или стрелицу потребно је изабрати опцију *Select/Move*, поставити показивач на објекат, а затим премјестити на одговарајуће мјесто.

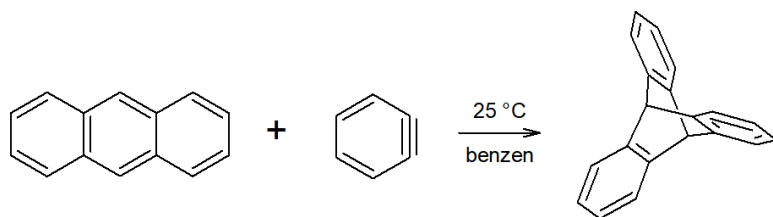
Задатак 102. Нацртати реакциону шему Diels-Alder-ове реакције.



5.5.2 Етикетирање реакције

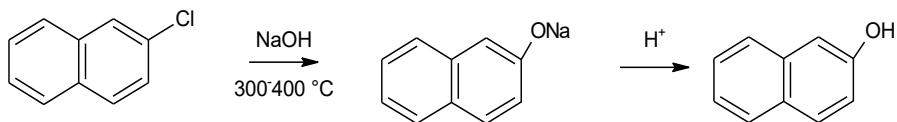
У овом одјелјку, научићете како да унесете експерименталне услове у реакциону шему.

Задатак 103. Убацити експерименталне услове у шему реакције описане у претходном поглављу



- Из *Structure toolbar*-а изабрати *Reaction Arrow Labeling*.
- Кликнути на реакциону стрелицу да бисте отворили прозор *Edit Reaction Conditions*.
- У прозору *Edit Reaction Conditions*, укуцати “25” у горњем окну, а затим изабрати *C* на десној страни прозора.
- Укуцати бензен у доњем окну.
- Кликнути *OK* да бисте затворили прозор.

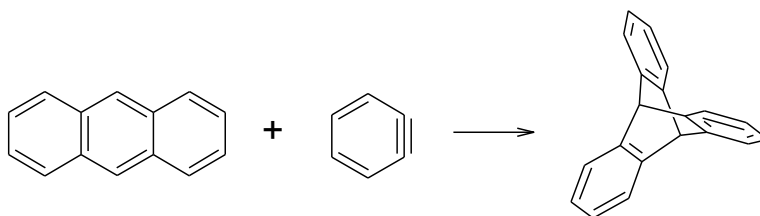
Задатак 104. Нацртати пратећу реакцију



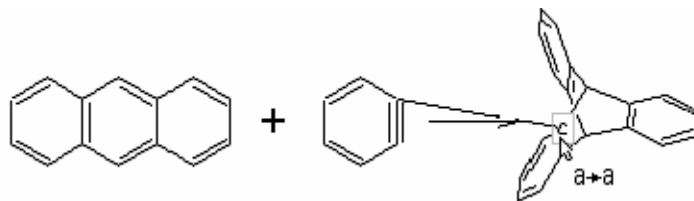
5.5.3 Означавање реакције

Ово оруђе вам омогућава да означите атоме/елементе реакције аутоматски или ручно. Како бисте разликовали аутоматски од ручно означених бројева, одаберите двије различите боје за ове опције.

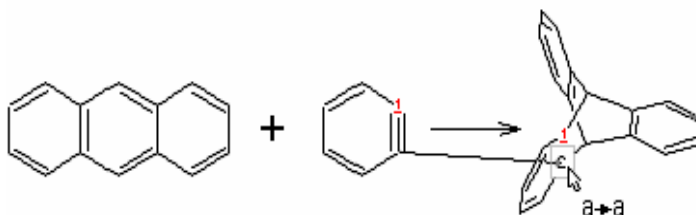
Задатак 105. Означити следећу реакцију



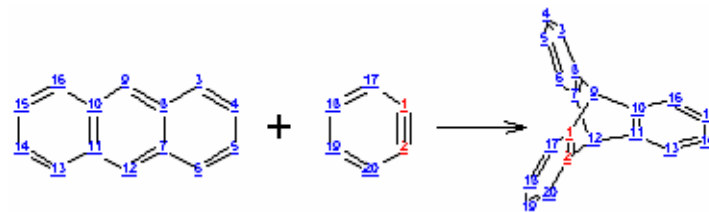
- Из изборника Options, изабрати Preferences да се приказа прозор Preferences.
- Одабрати картицу Reaction, и изабрати црвену боју у Manual Mapping Color.
- Одабрати картицу Structure, и онда изабрати плаву боју у Auto/Manual Numbering Color.
- Кликнути ОК.
- Из Structure toolbar-а изабрати Atom-Atom Map да би се приказала табла Map Tools и омогућила начин означавања.
- Показати на атом у реактанту и повући до одговарајућег атома у продукту. Након пуштања тастера миша, појављује се 1 на реакционој шеми, што означава ручно означене атоме.



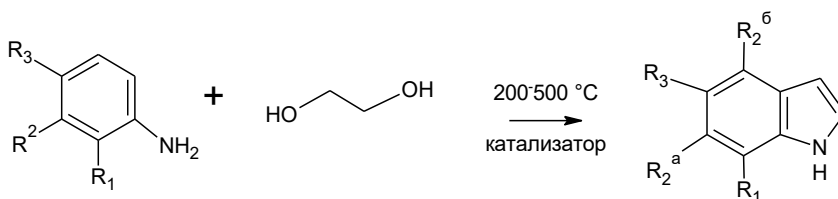
- Изабрати сљедећи атом и повући до његовог пара у производу. Након пуштања тастера миша, појављује се 2 поред атома реактанта и поред његовог пара у продукту.



- Из Map Tools изабрати Auto Mapping. Ознаке свих осталих атома се аутоматски додјељују једни другима:



Задатак 106. Нацртати и мапирати приказану хемијску реакцију



6. Напредно цртање: шаблони

У овој глави су представљене напредне технике цртања помоћу Template Window, Instant Template и других алатки у ACD/ChemSketch, што омогућава ефикасно формирање и модификовање хемијских структура. Фокус је на напредном цртању помоћу шаблона, укључујући коришћење табеле радикала и других алатки.

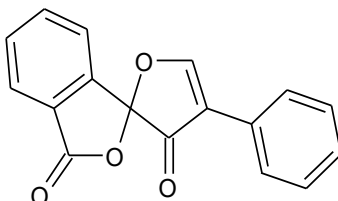
6.1 Табела радикала

Табела радикала је сет хемијских радикала за цртање структура. Њихова имена и, у неким случајевима, скраћенице ће вам помоћи да брзо преведете *хемијску стенографију* у смислену структуру.

6.1.1 Цртање структуре флуорескамина

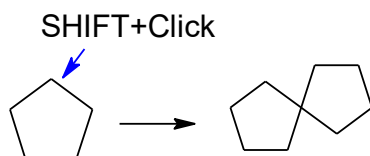
Цртање комплексних органских молекула захтијева употребу различитих алата како би прецизно конструисати и манипулисати молекулским структурама ради разумијевања њихових хемијских својстава и структурних карактеристика.

Задатак 107. Нацртати сљедећу структуру користећи шаблоне из табеле радикала.

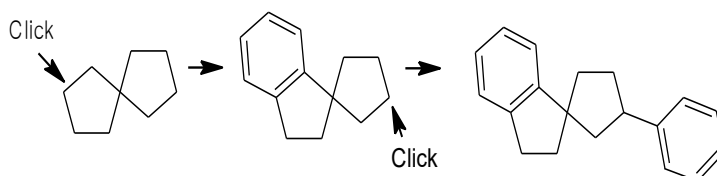


Увјерите се да сте у Structure mode-у.

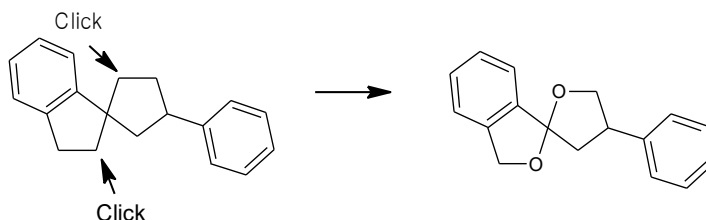
- На General toolbar, кликнути New Page да отворите нову празну страницу.
- На Reference toolbar или из Table of Radicals, изабрати Cyclopentane.
- Кликнути на радну површ ChemSketch-а да залијепите прстен.
- Кликнути на означени атом док држите SHIFT да добијете спиралну везу са другим циклопентановим прстеном.



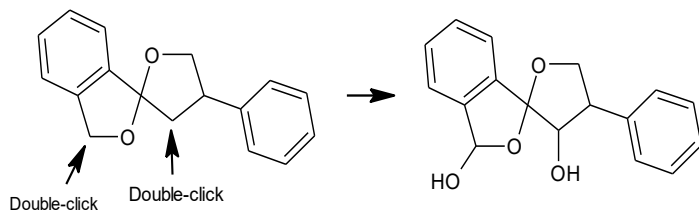
- Из Reference оруђа или из Table of Radicals изабрати Benzene.
- Прво кликнути на означену везу да јој придружите бензен, а затим кликнути на означени атом да га спојите са фенил радикалом:



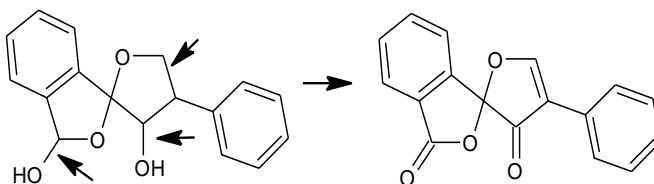
- Из Atoms toolbar-а кликнути на Oxygen (уз напомену да је Draw Normal аутоматски омогућено). Кликнути на означене атоме да их замијените са атомима кисеоника:



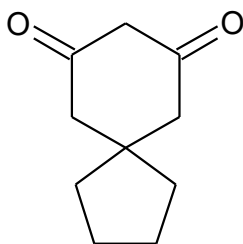
- Десни клик брзо пребацује на Draw Continuous оруђе. Двокликом на означене атоме повезаћете ОН групе на њих:



- Кликнути на означене једноструке везе да их замијените са двоструким:

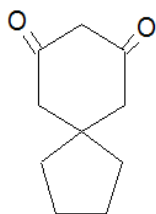


Задатак 108. Нацртати структуру спиродекандиона.

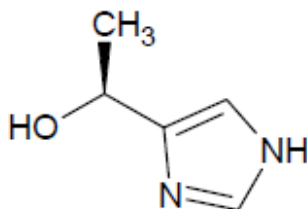


- На General toolbar, кликнути New Page да отворите нову празну страницу.
- Из Table of Radicals изабрати Cyclopentane.
- Кликнути на радну површ ChemSketch-а да залијепите прстен.
- Затим опет из Table of Radicals изабрати Cyclohexane.
- Кликнути на радну површ ChemSketch-а да залијепите прстен.
- Из Atoms toolbar-а кликнути на Oxygen (уз напомену да је Draw Normal аутоматски омогућен). Кликнути на означене атоме да их замијените са атомима кисеоника.

- Кликнути на означене једноструке везе да их замијените са двоструким: па након замјене веза имамо



Задатак 109. Нацртати структуру



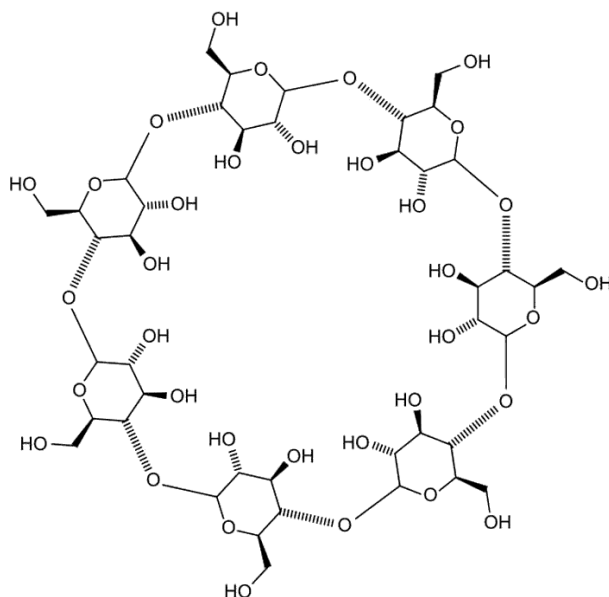
6.2 Instant Template опуђе

Ако желите да умножите дио молекуле који се не налази у Table of Radicals, можете користити Instant Template опуђе као команду “Paste”. То је боље од обичне команде “Paste”, јер можете да одредите тачку везивања.

6.2.1 Цртање структуре цикличног олигомера

Наредни задатак пружа прилику да истражимо процес конструисања специфичних молекулских структура.

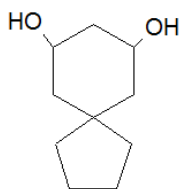
Задатак 110. Нацртати следећу структуру



6.3 Template Window opyђе

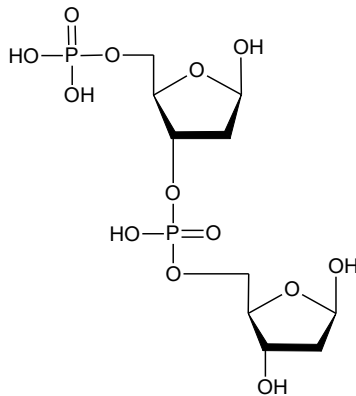
The Template Window је најпрефињенија карактеристика од три шаблонске карактеристике у ACD/ChemSketch зато што вам омогућава да организујете и похрањујете структуре или цртеже које можда желите да касније умножите.

6.3.1 Цртање структуре дијела ланца дезоксирибозо – 5 – фосфата

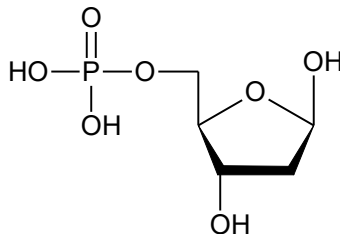


У потпоглављу 6.3.1, фокус је на цртању структуре дела ланца дезоксирибозо-5-фосфата, што представља кључни корак у разумевању молекуларне архитектуре ДНК и РНК.

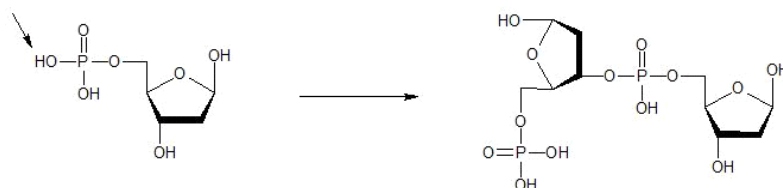
Задатак 111. Нацртати сљедећу структуру



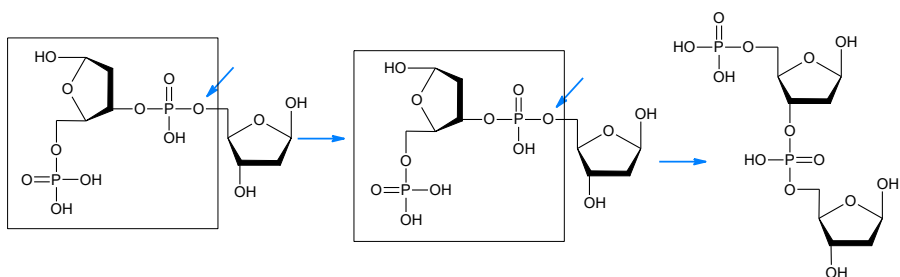
- Из General toolbar-а кликнути на Template Window. Из DNA/RNA Kit прозора изабрати 2 – дезоксирибозо – 5 – фосфата(ланчани облик):



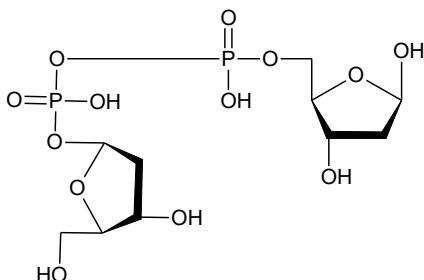
- Кликнути на радну површ да умножите изабрани шаблон.
- Принијети стрелицу на означени атом и држећи SHIFT кликнути да вежете сљедећи 2 – дезоксирибозо – 5 – фосфат:



- Изабрати опцију Select/Rotate/Resize.
- Означити дио структуре повлачењем правоугаоника око њега. Смјестити центар ротације на кисеоников атом означен стрелицом. Затим, држећи SHIFT, повлачите означени дио структуре у смјеру казаљке на сату ротирајући га за 90°.



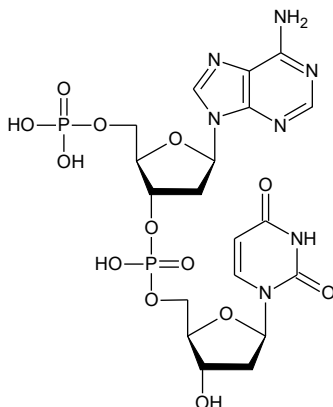
Задатак 112. Нацртати сљедећу структуру и извршити ротацију као што је описано у претходном поглављу



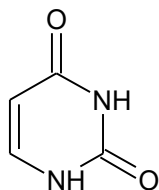
6.3.2 Додавање база

У потпоглављу 6.3.2, фокусирамо се на важан аспект конструисања ДНК и РНК ланца - процес додавања нуклеотидних база.

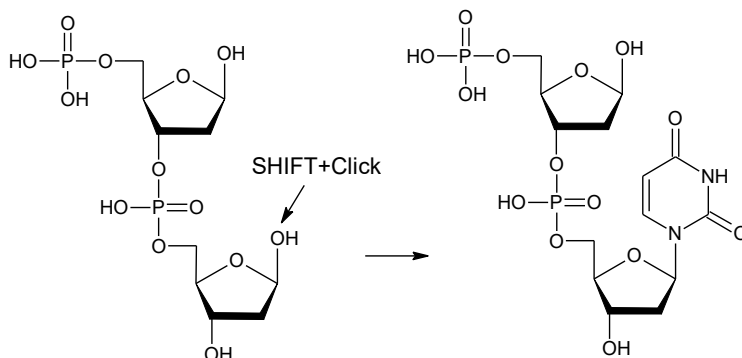
Задатак 113. Нацртати следећу структуру



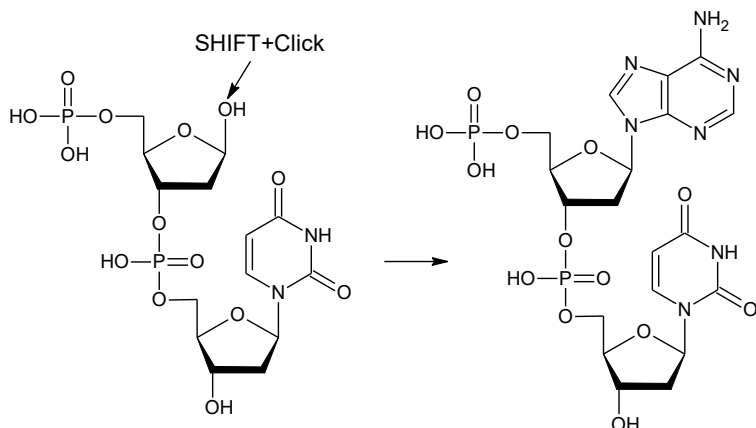
- Отворити Template Window. Из DNA/RNA Kit прозора изабрати базу коју требате кликом на атом који ће бити тачка везивања. На примјер, изабрати урацил, кликом на доњи атом азота тако да ће се он користити као тачка везивања:



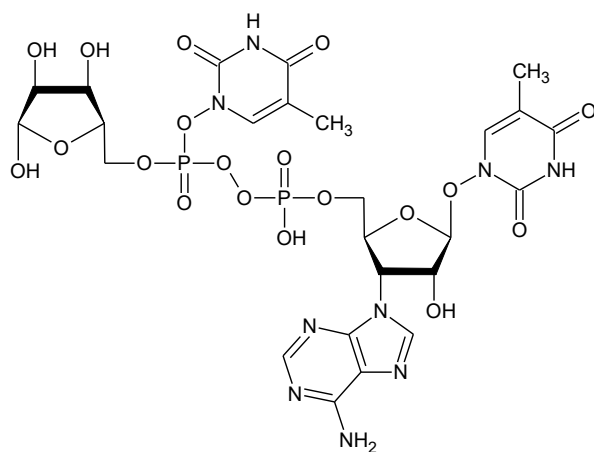
- Кликнути на означени атом испод док држите SHIFT:



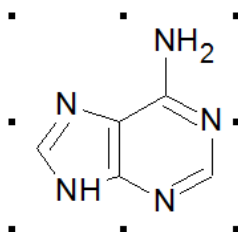
- Поновити кораке 1 и 2 како бисте додали базе на остале нуклеотиде као што је аденин:



Задатак 114. Нацртати следећу структуру користећи се упутствима из претходног поглавља

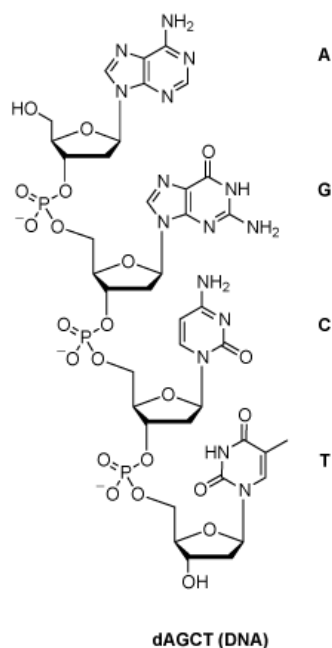


- Оторити Template Window. Из DNA/RNA Kit прозора изабрати базу коју требате, кликом на атом који ће бити тачка везивања. На примјер, изабрати аденин, кликом на доњи атом азота тако да ће се он користити као тачка везивања.



- Истим поступком на одређену базу, у овом случају аденин, одаберите остале нуклеотиде и сложите структуру. Phosphate, Deoxyribose, Thymine и тако даље додајете из Template Window, DNA/RNA.

Задатак 115. Нацртати структуру



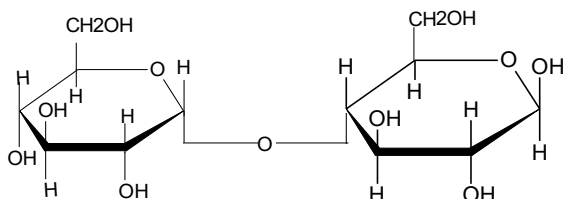
6.4 Цртање сложених структура биомолекула

Приказаћемо неколико примјера за стварање сложених структура биомолекула помоћу различитих ACD/ChemSketch оруђа.

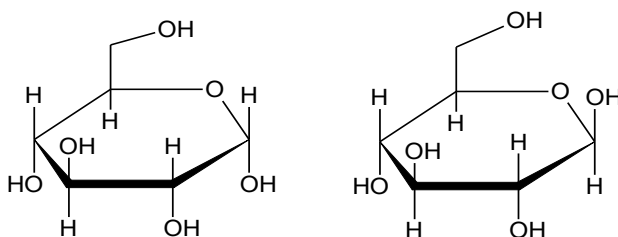
6.4.1 Цртање структуре β – малтозе

У датом одјелку је представљен процес цртања структуре β -малтозе уз употребу различитих алатки ACD/ChemSketch-а, које омогућавају прецизно позиционирање и визуелизацију молекуле.

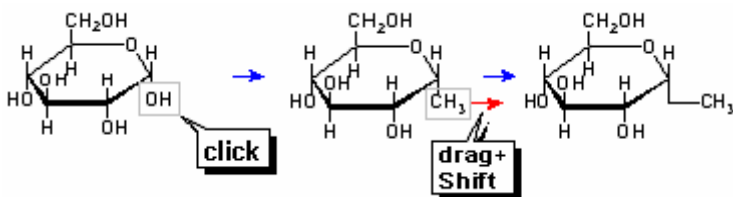
Задатак 116. Нацртати сљедећу структуру



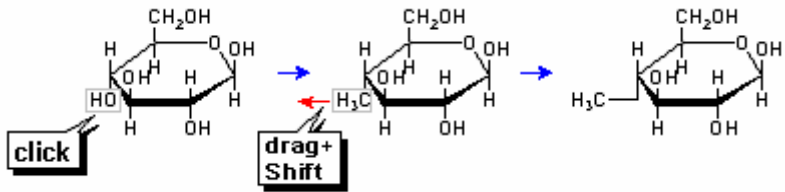
- У прозору Template Window пребацити се на картицу Sugar: alfa-D-pyr tab и провјерити да ли је одабрана опција 1(4) Haworth Formulae. Уколико није, у окнту одабрати ту опцију.
- Кликком изабрати α -D-Glucopyranose, а затим кликнути на радни простор како бисте копирали структуру.
- Поновити кораке 1-2, али овог пута изабрати опцију Sugars: beta-D-pyr, а затим кликнути β -D-Glucopyranose.
- Кликнути на радну површ да би га поставили десно од прве структуре.



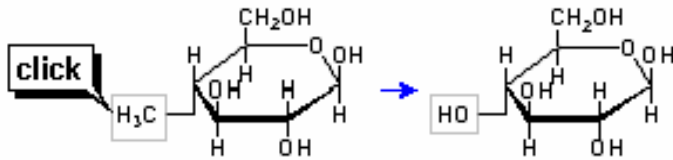
- На Atoms toolbar-у изабрати Carbon(C). Кликнути на означену групу у α -D-Glucopyranose структури да би је замијенили са CH_3 групом, затим превући из CH_3 групе на десну страну држећи SHIFT, да би нацртали везу у одговарајућем углу.



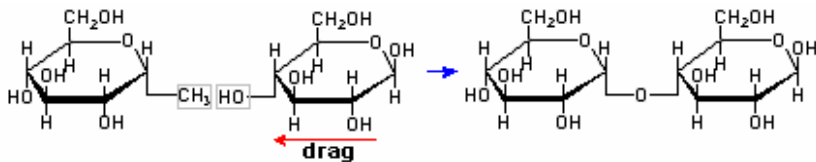
- Поновити корак 5 за β -D-Glucopyranose структуру, да би се добила сљедећа структура:



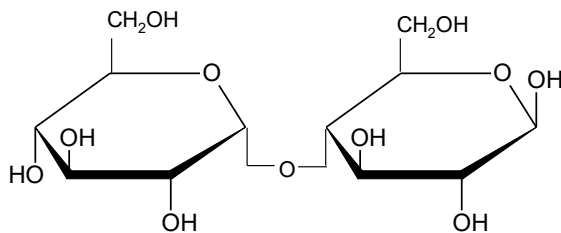
- Кликнути на Охуген(O), затим кликнути на означену групу на β -D-Glucopyranose структури:



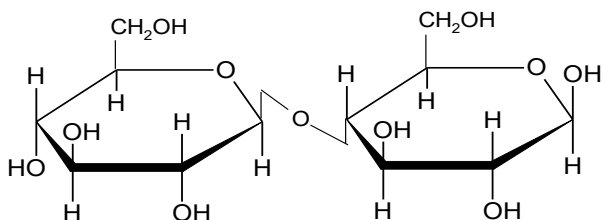
- На Structure toolbar-у кликнути Select/Move, затим кликнути на радну површ, али не дотицати β -D-Glucopyranose структуру, показати на било који атом или везу изабране структуре, превлачити на лејеву страну, док се одговарајуће OH и CH₃ групе не преклопе:



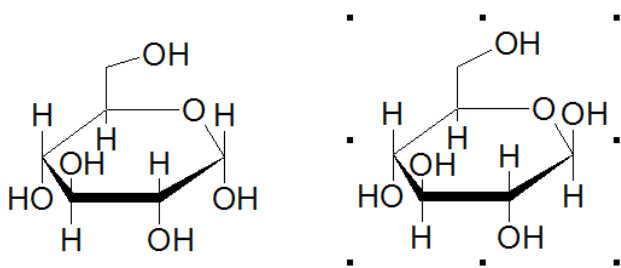
- Уколико желите слободне атоме водоника у датој структури, из опције Tools изабрати Remove Explicit Hydrogens:



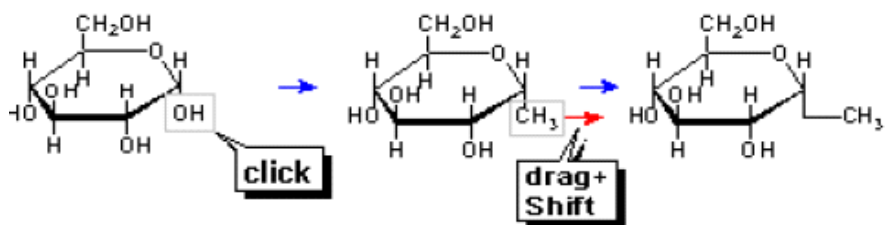
Задатак 117. Покушати самостално нацртати структуру пратећи претходне кораке



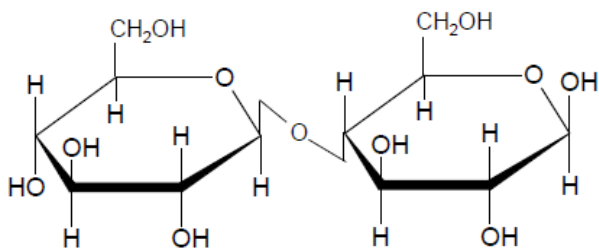
- У прозору Template Window пребацити се на картицу Sugar: alfa-D-pyrtab и провјерити да ли је одабрана опција 1(4) Haworth Formulae. Уколико није, у окну одабрати ту опцију.
- Кликом изабрати α -D-Glucopyranose, а затим кликнути на радни простор како бисте копирали структуру.
- Поновити кораке 1-2, али овога пута изабрати опцију Sugar: beta-D-pyr, а затим кликнути β -D-Glucopyranose.
- Кликнути на радну површ да би га поставили десно од прве структуре.



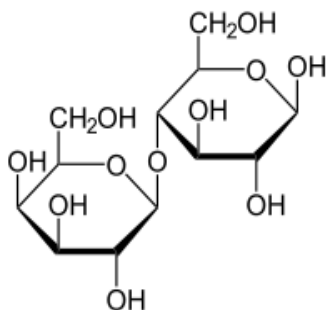
- На Atoms toolbar-у изабрати Carbon(C). Кликнути на групу у α -D-Glucopyranose структури да би је замијенили са CH₃ групом, а затим превући из CH₃ групе на десну страну држећи SHIFT, да би нацртали везу у одговарајућем углу.



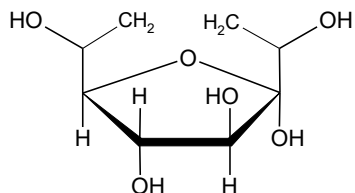
- Поновити корак 5 за β -D-Glucopyranose структуру.
- Кликнути на Oxygen(O), затим кликнути на одговарајућу групу на β -D-Glucopyranose структури.
- На Structure toolbar-у кликнути Select/Move, затим кликнути на радну површ, али не дотицати β -D-Glucopyranose структуру, показати на било који атом или везу изабране структуре, превлачити на лејеву страну, док се одговарајуће OH и CH₃ групе не преклопе.
- Уколико желите слободне атоме водоника у датој структури, из опције Tools изабрати Remove Explicit Hydrogens.



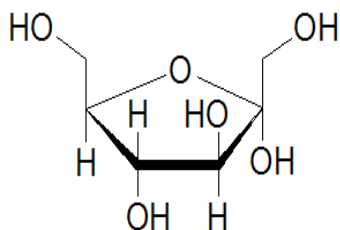
Задатак 118. Нацртати структуру пратећи претходне кораке



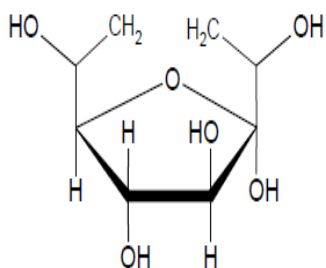
Задатак 119. Нацртати структуру α -D-Fruktofuranoze



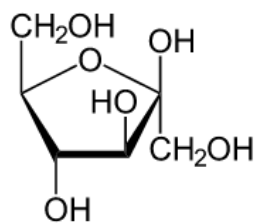
- У прозору Templates/Template Window одабрати опцију Sugars: alfa-D-Fru.
- У програмском прозору изабрати -D-Fructofuranose. Кликот на структуру пренесите је на радну површ.



- Одаберите Draw Normal, а затим угљеников атом (опција Carbon) да бисте на одговарајућим мјестима доцртали CH_2 групе.
- Добијена структура изгледа овако:



Задаток 120. Нацртати структуру β -D-фруктозе.



7. Рачунање макроскопских својстава молекула

У овом поглављу, фокус је на примјенама ACD/ChemSketch за израчунавање различитих макроскопских својстава. Специфично, разматрају се методе за пресликавање хемијских структура у овом софтверу, као и процедуре за израчунавање физичких и хемијских параметара на основу тих структура. Уводе се корисни технички детаљи, укључујући упутства за примјену најновијих алатки за пресликавање и израчунавање, што омогућава читаоцу да дубље разумије процесе и резултате.

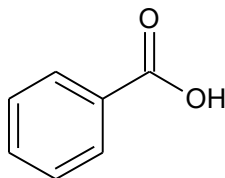
7.1 Рачунање макроскопских својстава

У овом поглављу су описана једноставна средства за израчунавање макроскопских својстава.

7.1.1 Изборник наредби

Ово потпоглавље пружа упутства о томе како да нацртате различите хемијске структуре и анализирате њихове основне хемијске параметре, као и како да прикажете добијене резултате у различитим форматима.

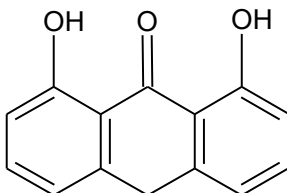
Задатак 121. Нацртати сљедећу структуру и одредити њена макроскопска својства:



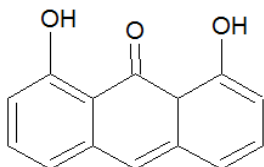
- Нацртати структуру у Structure режиму.

- На изборнику оруђа кликнути опцију Calculate а онда изабрати All Properties или једно од доступних својстава.
- Након одабира израчуната својства се приказују у окну Calculation Results. Нпр. одабиром All Properties за бензооеову киселину приказаће вам се сва њена макроскопска хемијска својства.
- Резултат се може одмах налијепити на радну површ по жељу, кликом на Copy to Editor. Одабиром Draw Mode-а бићете у могућности измијенити текст, уколико то желите.

Задатак 122. Нацртати дату структуру и израчунати њена молекуларна својства.

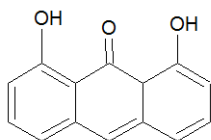


- Нацртати структуру у Structure режиму.
- На изборнику алатки Tools кликнути опцију Calculate а онда изабрати All Properties или једну од доступних особина.
- Након одабира израчуната својства се приказују у прозорчићу Calculation Results. Нпр. одабиром All Properties за ову структуру приказаће вам се сва њена хемијска својства.



Calculation Results	
Molecular Formula:	C ₁₄ H ₁₀ O ₃
Formula Weight:	226.2274
Composition:	C(74.33%) H(4.46%) O(21.22%)
Molar Refractivity:	62.13 ± 0.4 cm ³
Molar Volume:	155.3 ± 5.0 cm ³
Parachor:	454.1 ± 6.0 cm ³
Index of Refraction:	1.731 ± 0.03
Surface Tension:	72.9 ± 5.0 dyne/cm
Density:	1.45 ± 0.1 g/cm ³
Dielectric Constant:	Not available
Polarizability:	24.63 ± 0.5 10 ⁻²⁴ cm ³
RDBE:	10
Monoisotopic Mass:	226.062994 Da

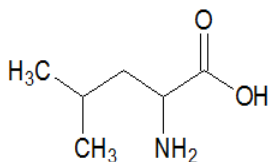
- Резултат се може одмах налијепити на радну површ по жељу, кликом на Copy to Editor. Одабиром Draw Mode-а бићете у могућности измијенити текст, уколико то желите. Уколико резултат налијепите на радну површ, то изгледа овако:



Molecular Formula:	C ₁₄ H ₁₀ O ₃
Formula Weight:	226.2274
Composition:	C(74.33%) H(4.46%) O(21.22%)
Molar Refractivity:	62.13 ± 0.4 cm ³
Molar Volume:	155.3 ± 5.0 cm ³
Parachor:	454.1 ± 6.0 cm ³
Index of Refraction:	1.731 ± 0.03
Surface Tension:	72.9 ± 5.0 dyne/cm
Density:	1.45 ± 0.1 g/cm ³
Dielectric Constant:	Not available
Polarizability:	24.63 ± 0.5 10 ⁻²⁴ cm ³
RDBE:	10
Monoisotopic Mass:	226.062994 Da
Nominal Mass:	226 Da
Average Mass:	226.2274 Da
M+:	226.062446 Da
M-:	226.063543 Da
[M+H] ⁺ :	227.070271 Da
[M+H] ⁻ :	227.071368 Da

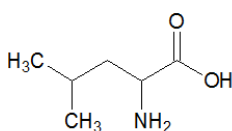
Задатак 123. Нацртати дату структуру леуцина помоћу Templates/Template Window/Amino Acids и израчунати њена молекулска својства.

- Нацртати структуру помоћу Templates/Template Window/Amino Acids и изабрати структуру леуцина.
- На изборнику алатки Tools кликнути опцију Calculate а онда изабрати All Properties или једну од доступних особина.
- Након одабира израчуната својства се приказују у прозорчићу Calculation Results. Нпр. одабиром All Properties за ову структуру приказаће вам се све њена хемијска својства.



Calculation Results	
Molecular Formula:	C ₆ H ₁₃ NO ₂
Formula Weight:	131.17292
Composition:	C(54.94%) H(9.99%) N(10.68%) O(24.39%)
Molar Refractivity:	34.86 ± 0.3 cm ³
Molar Volume:	126.6 ± 3.0 cm ³
Parachor:	316.4 ± 4.0 cm ³
Index of Refraction:	1.462 ± 0.02
Surface Tension:	39.0 ± 3.0 dyne/cm
Density:	1.035 ± 0.06 g/cm ³
Dielectric Constant:	Not available

- Резултат се може одмах налијепити на радну површ по жељи, кликом на Copy to Editor. Одабиром Draw Mode-а бићете у могућности измијенити текст, уколико то желите.



Molecular Formula:	C ₆ H ₁₃ NO ₂
Formula Weight:	131.17292
Composition:	C(54.94%) H(9.99%) N(10.68%) O(24.39%)
Molar Refractivity:	34.86 ± 0.3 cm ³
Molar Volume:	126.6 ± 3.0 cm ³
Parachor:	316.4 ± 4.0 cm ³
Index of Refraction:	1.462 ± 0.02
Surface Tension:	39.0 ± 3.0 dyne/cm
Density:	1.035 ± 0.06 g/cm ³
Dielectric Constant:	Not available
Polarizability:	13.82 ± 0.5 10 ⁻²⁴ cm ³
RDBE:	1
Monoisotopic Mass:	131.094629 Da
Nominal Mass:	131 Da
Average Mass:	131.1729 Da
M+:	131.09408 Da
M-:	131.095177 Da
[M+H] ⁺ :	132.101905 Da
[M+H] ⁻ :	132.103002 Da
[M-H] ⁺ :	130.086255 Da
[M-H] ⁻ :	130.087352 Da

Задатак 124. Нацртати структуру естера помоћу Templates/Template Window/Steroids и израчунати њена молекулска својства.

7.1.2 Аутоматски приказ на статусној траци

Такође је могуће да видите микроскопска својства за одабране структуре у радном простору директно на статусној траци.

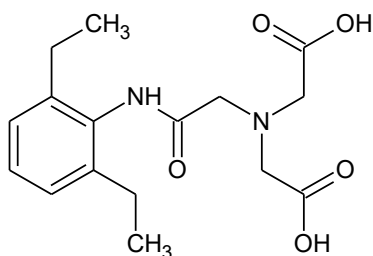
Како бисте видјели својства за структуру коју желите, непходно ју је претходно означити на радној површини. Уколико то не учините, приказаће вам се својства за све нацртане структуре.

Ова опција неће бити доступна ако на радној површини нема ниједне нацртане структуре. Кликните на поње десно на статусној траци и изаберите својство по жељи.

7.2 Израчунавање моноизотопске масе за одређене дијелове молекуле (Mass Spec Scissors)

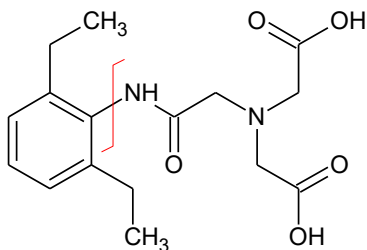
У овом поглављу ћемо рачунати моноизотопске масе за дијелове структуре.

Задатак 125. Нацртати сљедећу структуру и одредити њене моноизотопске масе.



- Нацртати структуру користећи упутства описана у претходним поглављима.
- Изабрати везу (треба да буде ациклична).

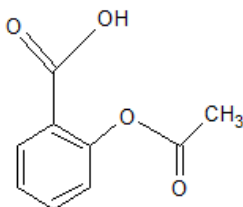
- На Tools изборнику, изабрати Mass Spec Scissors, или на Structure изборнику кликнути одговарајући тастер. То ће приказати моноизотопску масу испод оба фрагмента у радном простору.



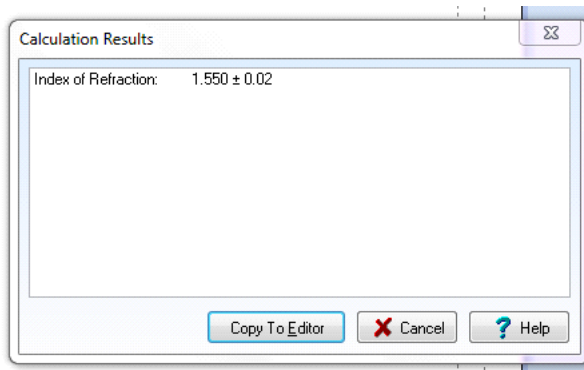
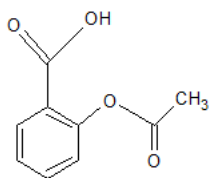
$C_{10}H_{13}133.1017 \text{ Da}$ $C_6H_9N_2O_5189.0511 \text{ Da}$

Задатак 126. Нацртати структуру аспирина ($C_9H_8O_4$) и израчунати индекс преламања.

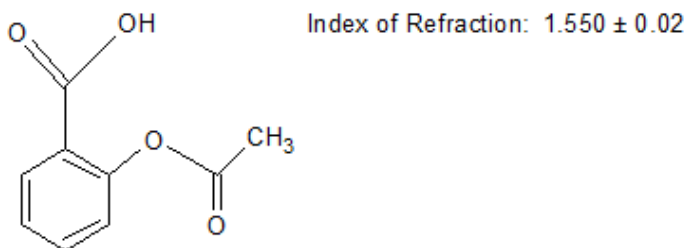
- Нацртати структуру аспирина у Structure режиму.



- На Tools изборнику одабрати Calculate/Index Of Refraction.
- Након тога на радној површини појављује нам се Calculation Results:



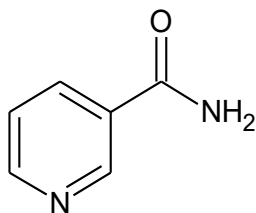
- Кликот на Copy To Editor пребацујемо добијену вриједност на радну површ:



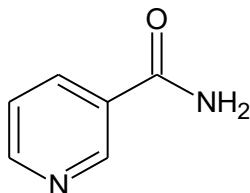
Задатак 127. Нацртати (убацити преко Templates/Template Window/Vitamins) структуру витамина В3 ниацина (Vitamin В3 – Niacinamide), а затим израчунати његову молекулску формулу, индекс преламања и моларну рефракцију.

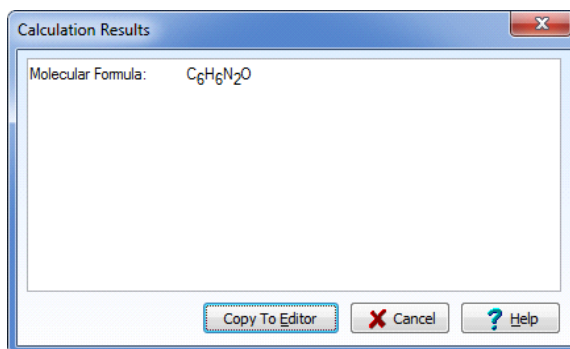
а) Израчунати молекулске формуле:

- Помоћу Templates/Template Window/Vitamins изабрати структуру витамина В3 – Niacinamide.

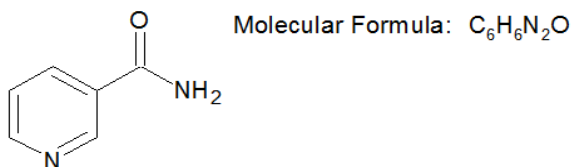


- На Tools изборнику одабрати Calculate/ Molecular Formula.



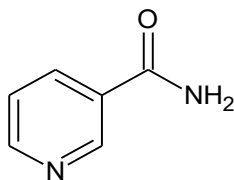


- Резултат се може одмах налијепити на радну површ, кликом на Copy to Editor.

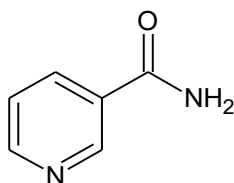


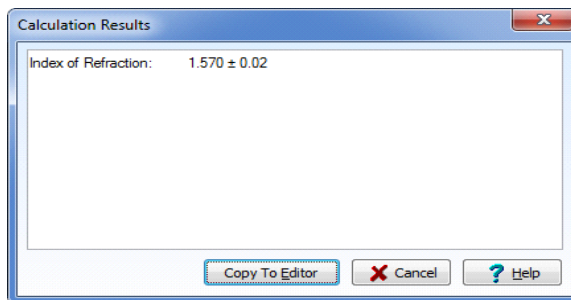
б) Израчунати индекса преламања:

- Помоћу Templates/Template Window/Vitamins изабрати структуру витамина В3 – Nicotinamide.

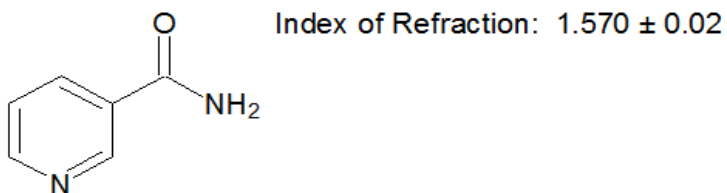


- Индекс преламања израчунати тако што на Tools изборнику одабрати Calculate/Index of Refraction. Након тога на радној површ појављује нам се Calculation Results:



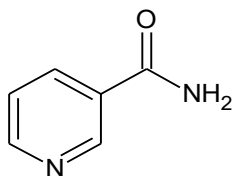


- Кликом на Copy To Editor пребацујемо добијену вриједност на радну површ:

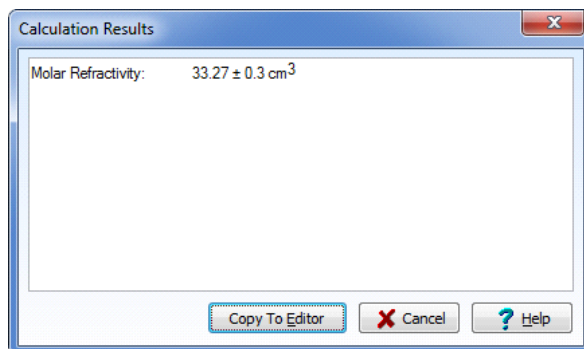
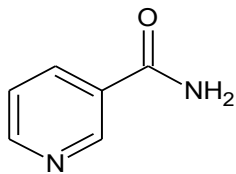


в) Израчунавање моларне рефракције:

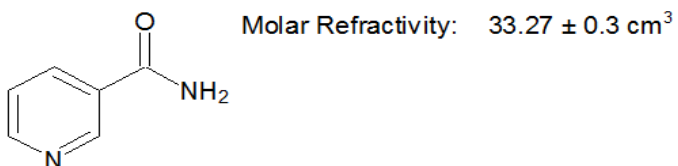
- Помоћу Templates/Template Window/Vitamins изабрати структуру витамина В3 – Niacinamide.



- Индекс преламања израчунати тако што на Tools изборнику одабрати Calculate/ Molar Refractivity. Након тога на радној површ појављује нам се Calculation Results:



- Кликом на Copy To Editor пребацујемо добијену вриједност на радну површ:



Задатак 128. Нацртати структуру аконитата помоћу Templates/Template Window/ и израчунати густину, површински напон и поларност.

8. Тастери посебних опција

У осмој глави је представљен феномен структурних варијанти које могу значајно утицати на хемијска својства једињена. Таутомери, структурни облици који се брзо мијењају у раствору, представљају изазов у хемијској анализи, а ACD/Tautomers нуди иновативно решење за њихову идентификацију и анализу.

8.1 Таутомери

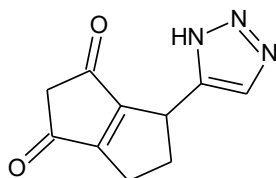
За одређена једињења, постоји смјеша два или више структурно различита облика који се у раствору брзо равнотежно имјењују. У већини случајева таутомери су посљедица размјене протона. ACD/Tautomers је осмишљен да архивира најразумније таутомерне облике нацртаних органских структура.

Доступан је као команда за провјеру Check Tautomeric Form путем изборника Tools или као дугме на Structure оруђу. Могућност постијања других таутомерних облика увијек треба пажљиво размотрити, ако органска структура садржи две или више двоструких / троструких / вишеструких веза, конјугованих или прикључених кисеонику, азоту, сумпору или другим хетероатомима. Садашњи ACD/Tautomers алгоритам обезбјеђује само предложене таутомерне облике, који не морају нужно бити тачни. Провјерите друге изворе и донесите одговарајућу одлуку. ACD/Tautomers алгоритам не функционише са сљедећим класама хемијских једињења:

- Структуре које садрже металне атоме;
- Структуре које садрже наелектисане атоме, осим нејонских производа IV-валентни азот (+) везан за кисеоник (-);
- Структуре које садрже елементе у својим атипичним хемијским валенцама;
- Структуре са координираним везама;

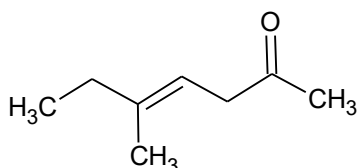
- Структуре које садрже више од 255 атома.

Задатак 129. Пронаћи таутомер сљедеће структуре



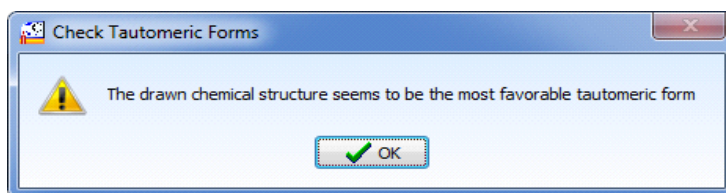
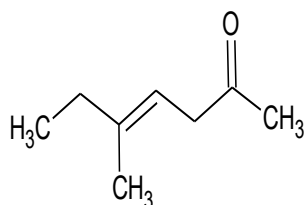
- Нацртати структуру према упутствима описаним у претходним поглављима.
- Изабрати структуру (користећи Select/Move), на Structure оруђу кликните на Check for Tautomeric Forms. Програм почиње претраживање и провјеру таутомерних облика приказане структуре и када се процес заврши, отвориће вам се прозор у коме ће бити исцртан одговарајући таутомер.
- Изабрати жељени облик користећи дугме Next или Prev.
- Кликнути Replace да замијените означену структуру.

Задатак 130. Пронаћи таутомер за сљедећу структуру

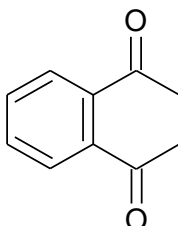


- Нацртати структуру према упутствима описаним у претходним поглављима.
- Изабрати структуру (користећи Select/Move), на Tools оруђу кликните на Check Tautomeric Forms. Програм почиње претраживање и провјеру таутомерних облика приказане структуре и када се процес заврши, отвориће вам се прозор у коме ће бити исцртан одговарајући таутомер или ће се, као у

овом случају, отворити прозор који нам даје информацију да је дата структура фаворизована и нема таутомерних облика.



Задатак 131. Пронаћи таутомере за следећу структуру:



8.1.1 Грешке у хемијској литератури

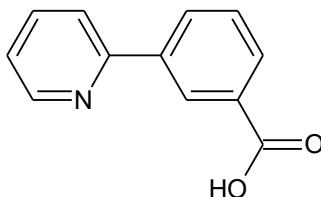
Хемијске структуре се често цртају као један таутомерни облик, а остали постојећи облици се напросто игноришу. Нажалост, никада не можемо бити сигурни да ће одређена једињења бити израђена као што би их израдио неки хемичар. Због тога је разматрање могућих таутомерних облика веома важно за структурне претраге, прогнозе података и њихово тумачење.

Све дате структуре испод су узете из угледних часописа. Многе су нетачне или двосмислено додјељиване таутомерним облицима под описаним експерименталним условима. Уз помоћ ACD/Tautomers, више не ризикујете превиђање уобичајеног таутомера једињења које желите да објавите, проучите доступне податке, или искористите ACD/Labs дијагностику.

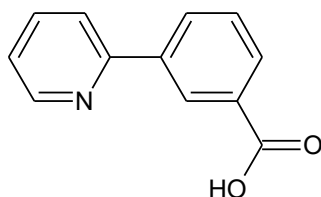
8.2 ACD/Name Freeware Add-on

Сада је могуће кориштење ACD/Name Freeware Add-on-а директно из ACD/ChemSketch-а. Ова опција је једноставна за кориштење: како бисте именовали нацртану структуру/структуре потребно је само кликнути на опцију Generate Name for Structure; име ће вам се приказати као писани текст у радном простору.

Задатак 132. Именујте сљедећу структуру



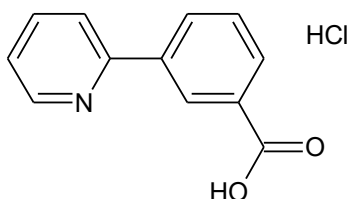
- Кликнути на Generate Name for Structure или на Tools изборник, изабрати опцију Generate и онда Name for Structure. Име се појављује испод нацртане структуре.



3-(pyridin-2-yl)benzoic acid

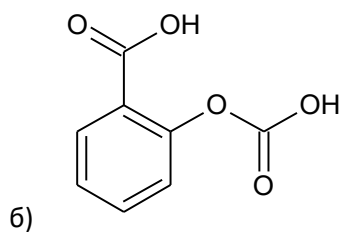
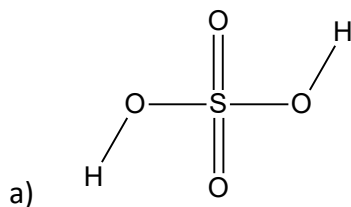
- Помјерите назив повлачењем.

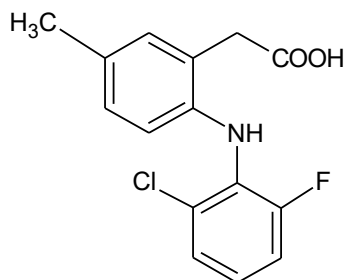
- На Atom оруђу кликнути Chlorine и кликнути једном поред структуре да створите HCl
- Означити ове структуре и кликнути поново на Generate Name for Structure. Овај пут назив за мјешавину структура изгледа:



3-(pyridin-2-yl)benzoic acid—hydrogen chloride (1/1)

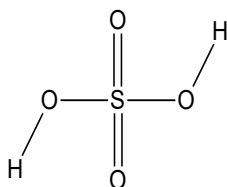
Задатак 133. Нацртати и именовати дате структуре



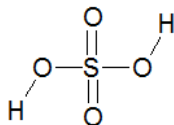


в)

а)

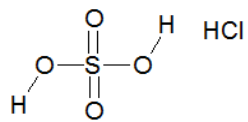


- Кликнути на Generate Name for Structure или на Tools изборник, изабрати опцију Generate и онда Name for Structure. Име се појављује испод нацртане структуре.



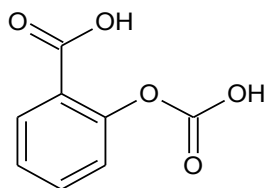
sulfuric acid

- Помјерите назив повлачењем миша.
- На Atom оруђу кликнути Chlorine и кликнути једном поред структуре да створите HCl.
- Означити ове структуре и кликнути поново на Generate Name for Structure. Овај пут назив за мјешавину структура изгледа:

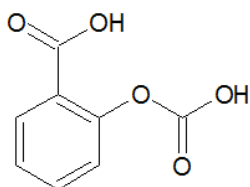


sulfuric acid—hydrogen chloride (1/1)

б)

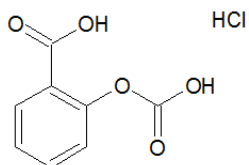


- Кликнути на Generate Name for Structure или на Tools изборник, изабрати опцију Generate и онда Name for Structure. Име се појављује испод нацртане структуре.



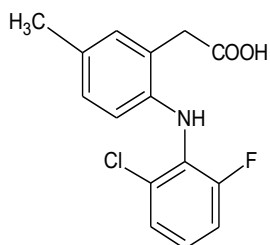
2-(carboxyoxy)benzoic acid

- Као и у претходном случају под а), назив можемо помјерати и додати HCl те видјети назив мијешаних структура.

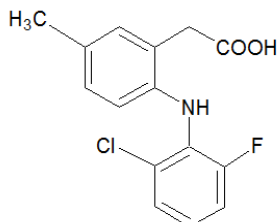


2-(carboxyoxy)benzoic acid—hydrogen chloride (1/1)

в)

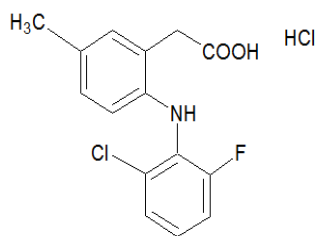


- Кликнути на Generate Name for Structure или на Tools изборник, изабрати опцију Generate и онда Name for Structure. Име се појављује испод нацртане структуре.



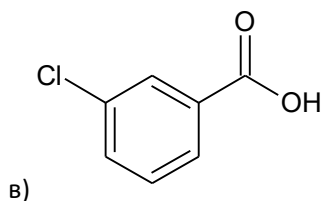
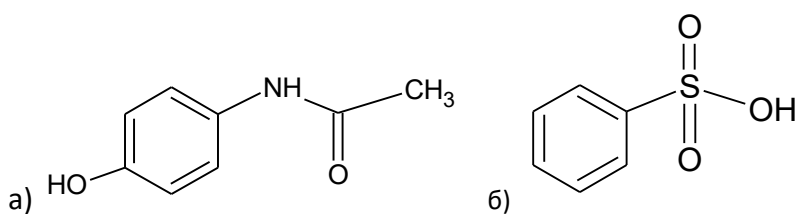
[2-(2-chloro-6-fluoroanilino)-5-methylphenyl]acetic acid

- Помјерите назив повлачењем миша.
- На Atom оруђу кликнути Chlorine и кликнути једном поред структуре да створите HCl.
- Означити ове структуре и кликнути поново на Generate Name for Structure. Овај пут назив за мјешавину структура изгледа



[2-(2-chloro-6-fluoroanilino)-5-methylphenyl]acetic acid—hydrogen chloride
(1/1)

Задатак 134. Нацртати и именовати следеће структуре:



8.2.1 Ограничења ACD/Name Freeware-a

Оруђе ACD/Name Freeware има следећа ограничења на која треба обратити пажњу:

- структура које треба именовати а садрже преко 50 атома укључујући и водоник;
- структуре могу једино да садрже елементе: H, C, N, P, O, S, F, Cl, Br, I, Li, Na и K у њиховим заједничким валенцама;
- структуре не могу садржавати више од 3 циклуса;

- бесплатна верзија не дозвољава да промијените подешавања за давање имена (назива структура). Те користе подешавања која одговарају најпожељнијим IUPAC имена.

9. Формирање графичких објеката

У глави 9 „Формирање графичких објеката“, технике и алати за цртање су есенцијални за креативно и прецизно представљање хемијских облика и структура, што је кључно за разумијевање хемијских концепата.

9.1 Цртање енергетских дијаграма реакција

У овом поглављу истражујемо технике цртања енергетских дијаграма реакција, фокусирајући се на криве, орбитале и комплексне облике, што је од суштинског значаја за прецизно представљање хемијских и биохемијских процеса.

9.1.1 Цртање кривих

У наредним задацима су детаљно објашњени кораци за цртање кривих користећи ACD/ChemSketch софтвер.

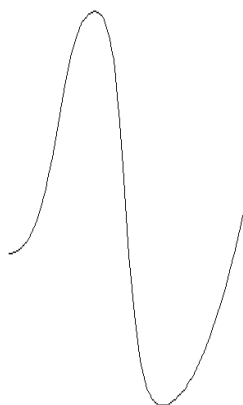
Задатак 135. Нацртати криву



- Укључити оруђе Draw на линији General.

- На Drawing Toolbar-у кликнути Polyline.
- Повући водоравно, од почетне тачке криве ка десно, да бисте развукли контролну линију.
- Пустити клик миша.
- Затим помјерите курсор према горе како бисте нацртали први дио линије.
- Повући водоравно ка десно како бисте развукли контролне линије. Мијењајући дужину контролне линије можете измијенити дијелове криве.
- Пустити клик миша.
- Помјерити миш према доље како бисте нацртали други дио криве.
- Поновити претходне кораке како бисте нацртали нове дијелове.
- Десни клик како би завршили цртање линије.

Задатак 136. Нацртати криву



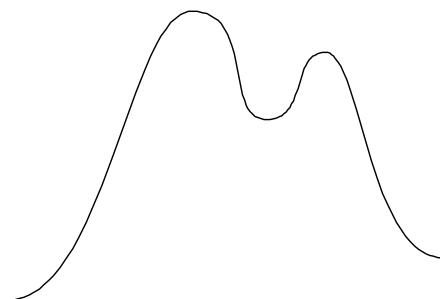
- Укључити оруђе Draw на линији General.
- На DrawingToolbar-у кликнути Polyline.

- Повући миш водоравно, од почетне тачке криве ка десно, да бисте развукли контролну линију.
- Отпустити тастер миша.
- Затим помјерите курсор према горе како бисте нацртали први дио линије.
- Повући водоравно ка десно како бисте развукли контролне линије. Мијењајући дужину контролне линије можете измијенити дијелове криве.
- Отпустити тастер миша.
- Помјерити миш према доље како бисте нацртали други дио криве.
- Поновити претходне кораке како бисте нацртали нове дијелове.
- Десни клик како би завршили цртање линије.

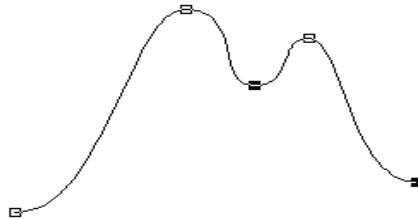
9.1.2 Измјена кривих

У овом потпоглављу представљен је процес измјене кривих у ACD/ChemSketch софтверу. Измјена кривих подразумијева могућност трансформације облика постојећих кривих путем манипулације чворовима и контролним линијама.

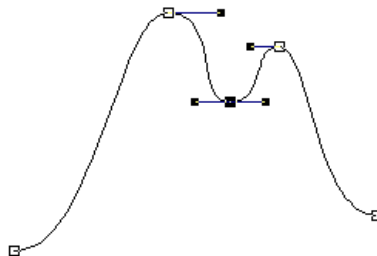
Задатак 137. Измјенити криву



- Ако крива још увијек није изабрана, кликнути Select/Move/Resize и онда кликнути на криву.
- На Editing toolbar-у кликнути Edit Nodes. Ово ће приказати чворове који се могу измијенити.

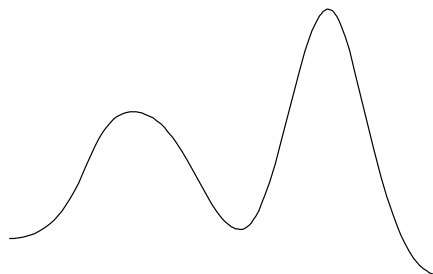


- Кликнути на трећи чвор, он ће се означити и појавиће се контролне линије.

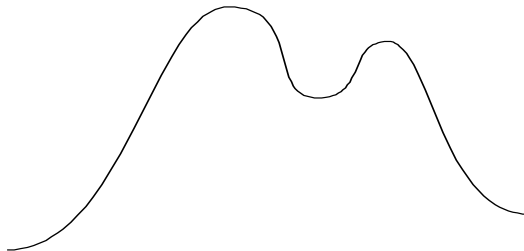


- Повлачити контролне линије, након тога означити и измијенити неки други чвор све док крива не добије изглед какав желите.

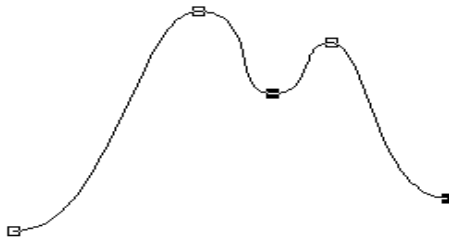
Задатак 138. Узети криву из претходног задатка и измијенити је тако да добије сљедећи изглед:



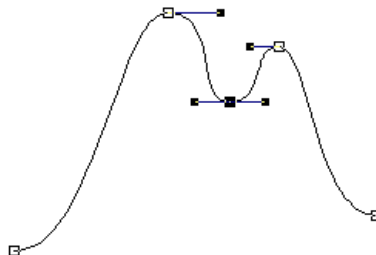
- Крива из претходног задатка:



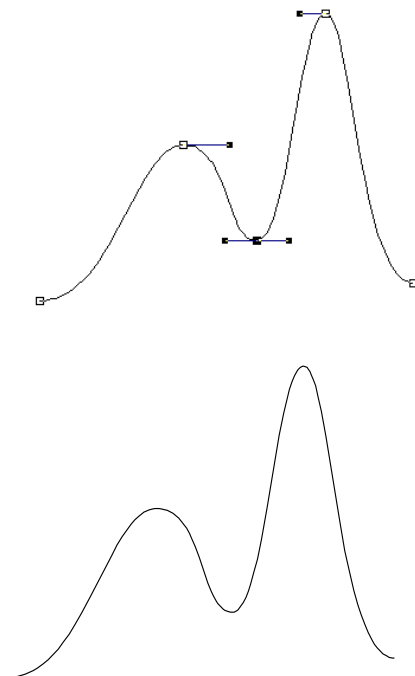
- Ако крива још увијек није изабрана, кликнути Select/Move/Resize и онда кликнути на криву.
- На Editing toolbar-у кликнути Edit Nodes. Ово ће приказати чворове који се могу измијенити.



- Кликнути на трећи чвор, он ће се означити и појавиће се контролне линије.



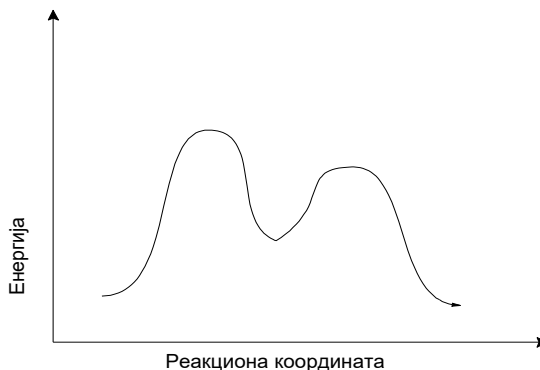
- Повлачити контролне линије, након тога означити и измијенити неки други чвор све док крива не добије изглед какав желите.



9.1.3 Цртање X и Y оса

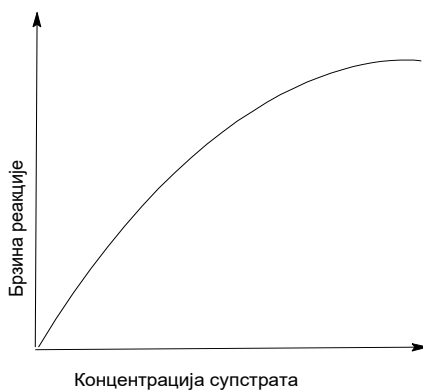
Како би завршили цртање дијаграма реакција потребне су нам осе. Увјерити се да су оруђа Line и Arrow укључена.

Задатак 139. Нацртати сљедећи дијаграм:



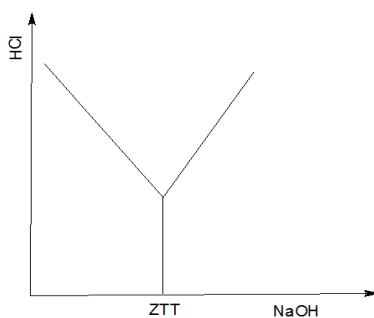
- Из изборника Tools изабрати Arrow Style Panel. На панелу Arrow који се појави из Arrow Type листе изабрати једносмјерну стрелицу.
- Из изборника Options изабрати Snap on Grid и/или Show Grid да олакшате цртање.
- Кликнути на почетак координата и вући на горе како бисте нацртали Y-осу.
- Кликнути на почетак координата и вући водоравно ка десно како би нацртали X-осу.
- Додати натписе Енергија и Реакциона координата користећи оруђа Text и Rotate 90°.

Задатак 140. Нацртати сљедећи графикон:



- Из изборника Tools изабрати Arrow Style Panel. На панелу Arrow који се појави из Arrow Type листе изабрати једносмјерну стрелицу.
- Из изборника Options изабрати Snap on Grid и/или Show Grid да олакшате цртање.
- Кликнути на почетак координата и вући на горе како бисте нацртали Y-осу.
- Кликнути на почетак координата и вући водоравно ка десно како би нацртали X-осу.
- Додати натписе Брзина реакције и Концентрација супстрата користећи оруђа Text и Rotate 90°.
- Изабрати опцију Arc 90° и из координатног почетка повући криву на горе, која заправо показује да брзина реакције расте са концентрацијом супстрата.

Задатак 141. Нацртати сљедећи графикон:



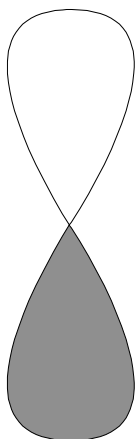
9.2 Цртање различитих облика орбитала

Цртање орбитала у ACD/ChemSketch представља значајан аспект при визуализацији молекулских структура и њихових електронских својстава. Ово потпоглавље се фокусира на цртање p-орбитала, које су од великог значаја у хемијским анализама.

9.2.1 Цртање p–орбитала

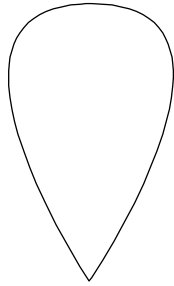
Задаци који слиједу представљају изазове у цртању орбитала, те омогућавају манипулацију положајем, обликом и бојом, што ће читаоцу пружити изузетно практично искуство које ће моћи примијенити у дизајну и анализи молекула.

Задатак 142. Нацртати орбиталу



Провјерити да ли је укључен Draw и на Drawing toolbar-у, изабрати Polygon.

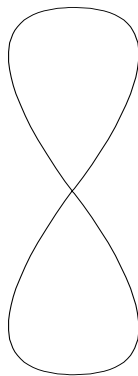
- Повући водоравно од почетне тачке орбитале како бисте развукли контролну линију.
- Пустити клик миша.
- Помјерити миш према доље како бисте нацртали тијело орбитале.
- Кликнути како бисте поправили орбиталу.



- Двоструки десни клик како би завршили цртање орбитале и брзо замијенити оруђе Select/Move/Resize. Изабрати означену орбиталу и превући ка доље држећи CTRL како бисте направили копију нацртане орбитале.

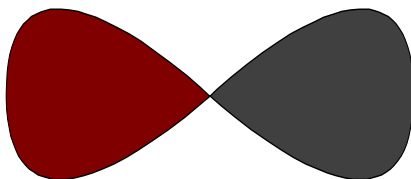


- На Editing toolbar-у кликнути Flip Top to Bottom како бисте обрнули доњи дио орбитале. Поравнати дијелове помијерајући их.

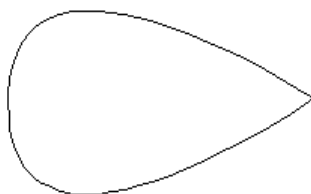


- Кликнути на сиву боју на Color Palette како бисте замијенили боју која испуњава орбиталу.
- Означити оба дијела орбитале и на Editing toolbar-у, кликнути Group. Сада можете управљати дијелови као појединачним објектима. Нпр. ротирати помоћу оруђа Select/Move/Rotate.

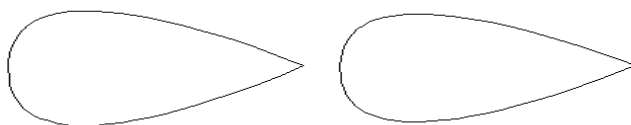
Задатак 143. Нацртати орбиталу



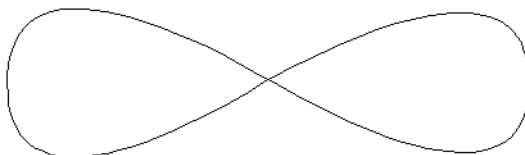
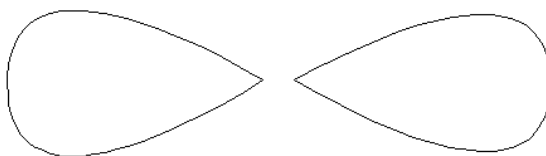
- Повући миш усправно од почетне тачке орбитале како бисте развукли контролну линију.
- Отпустити тастер миша.
- Помјерити миш на десно како бисте нацртали тијело орбитале.
- Кликнути како бисте поправили орбиталу.



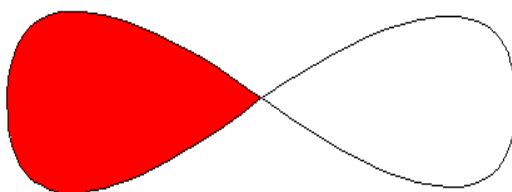
- Двоструки десни клик како би завршили цртање орбитале и брзо замијенили оруђе Select/Move/Resize. Изабрати означену орбиталу и превући ка доље држећи CTRL како бисте направили копију нацртане орбитале.

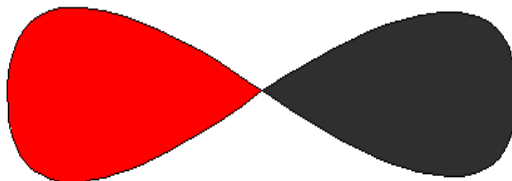


- На Editing toolbar-у кликнути Flip Left to Right како би замијенили положај десне орбитале а то је могуће урадити и користећи опцију
- Rotate 90. Поравнати орбитале помијерајући их.



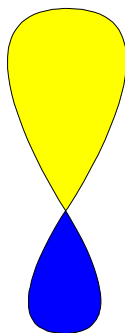
- Кликнути на црвену боју на Color Palette како бисте замијенили боју која испуњава лијеву орбиталу а затим изабрати сиву боју како би замијенили боју која испуњава десну орбиталу.





- Означити оба дијела орбитале и на Editing toolbar-у, кликнути **Group**. Сада можете управљати дијелови као појединачним објектима. Нпр. ротирати помоћу оруђа Select/Move/Rotate.

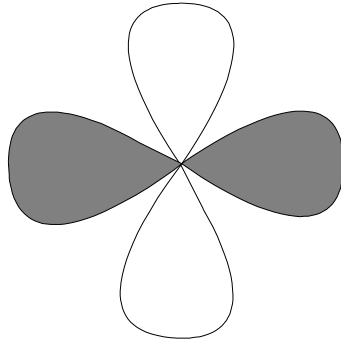
Задатак 144. Нацртати орбиталу



9.2.2 Цртање d-орбитала

У овом потпоглављу, фокус је на цртању d-орбитала које представљају комплексне структуре у хемијском моделирању.

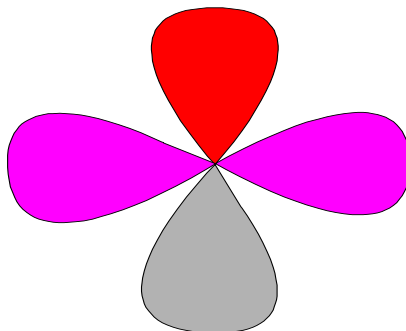
Задатак 145. Нацртати орбиталу



Провјерити да ли је укључен Draw и изаберите оруђе Polygon.

- Повући водоравно ка десно од почетне тачке орбитале како би развукли контролну линију.
- Пустити клик миша.
- Помјерити миш ка доље како бисте нацртали тијело орбитале.
- Повући водоравно на десно како би развукли контролне линије. Означити нацртано како би направили два идентична дијела орбитале, направити једнаке дужине контролних линија.
- Пустити клик миша.
- Десни клик како би завршили цртање орбитале и замијенили оруђе Select/Move/Resize.
- Изабрати орбиталу и држећи CTRL повући како бисте направили копију орбитале.
- Притиснути Rotate 90° како би ротирали ову копију орбитале.
- Кликнути на сиву боју на Color Palette како би замијенили боју која испуњава орбиталу.
- Означити оба дијела орбитале и на Editing toolbar-у, кликнути на Group. Сада можете управљати дијеловима као појединачним објектима. Нпр. ротирати помоћу оруђа Select/Move/Rotate.

Задатак 146. Нацртати орбиталу

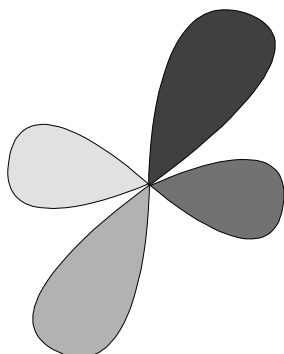


Провјерити да ли је укључен Draw и изаберите оруђе Polygon.

- Повући миш водоравно ка десно од почетне тачке орбитале како бисте развукли контролну линију.
- Отпустити клик миша.
- Помјерити миш ка доље како бисте нацртали тијело орбитале.
- Повући миш водоравно на десно како бисте развукли контролне линије. Означити нацртано како би направили два идентична дијела орбитале, направити једнаке дужине контролних линија.
- Отпустити клик миша.
- Десни клик како би завршили цртање орбитале и замијенили оруђе Select/Move/Rotate. Изабрати орбиталу и држећи CTRL повући како бисте направили копију орбитале.
- Кликнути на Rotate 90° како би ротирали ову копију орбитале.
- Кликнути на сиву боју на Color Palette како би замијенили боју која испуњава орбиталу.

Означити оба дијела орбитале и на Editing toolbar-у, кликнути на Group. Сада можете управљати дијеловима као појединачним објектима. Нпр. ротирати помоћу оруђа Select/Move/Rotate.

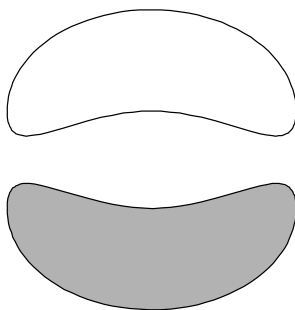
Задатак 147. Нацртати орбиталу.



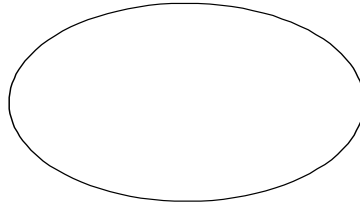
9.2.3 Цртање π -орбитала

Фокус овог поглавља је цртање π -орбитала, које играју виталну улогу у хемијском моделирању и анализи молекулских интеракција.

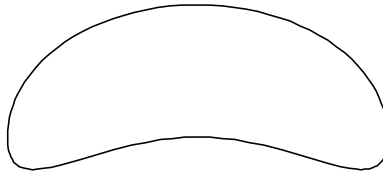
Задатак 148. Нацртати орбиталу



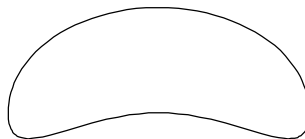
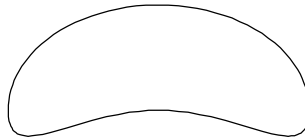
- На Drawing toolbar-у, кликнути Ellipse и превући у радну површ како би нацртали елипсу.



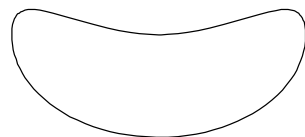
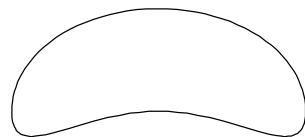
- Из изборника Object изабрати Convert to Polyline.
- На Editing toolbar-у, кликнути Edit Nodes.
- Превући најнижи чвор ка горе.



- Десни клик да замијените оруђе Select/Move/Resize, затим изабрати орбиталу кликом на њен облик и онда држећи CTRL превући како би направили копију орбитале.



- Кликнути Flip Top to Bottom како би ротирали доњу орбиталу.

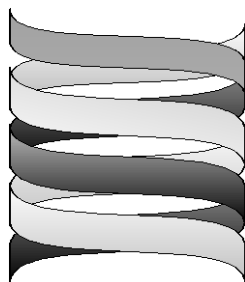


- Кликнути на сиву боју на Color Palette како би замјенили боју која испуњава орбиталу.
- Означити оба дијела орбитале и на Editing toolbar, кликнути Group. Сада можете управљати дијелови као појединачним објектима. Нпр. ротирати помоћу оруђа Select/Move/Rotate.

9.3 Цртање два ланца ДНК

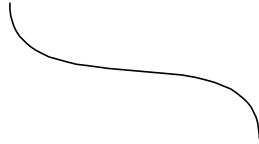
У поглављу 9.3, наведени задаци пружају прилику да се практично примјене технике повезивања, ротирања и бојења, омогућавајући корисницима да створе комплексне структуре ДНК ланца користећи различите алате и технике.

Задатак 149. Нацртати ланац

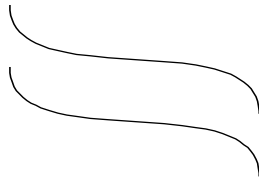


Провјерити да ли сте укључили опцију Draw.

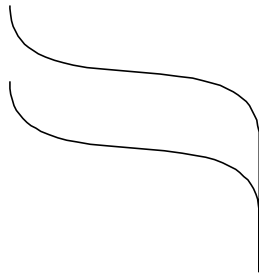
- На Drawing toolbar-у кликнути Polyline.
- Повући на доље од почетне тачке криве како би развукли контролну линију.
- Отпустити тастер миша.
- Помјерити миш ка десно како би нацртали криву.
- Повући на доље како би развукли контролне линије. Мијењајући дужину контролне линије можете измијенити дијелове криве.



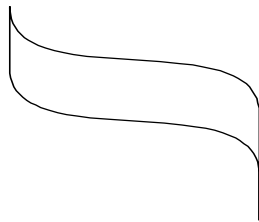
- Пустите клик миша и двоструким десним кликом завршити цртање линије. Укључити оруђе Select/Move/Resize.
- Изабрати означену криву и држећи CTRL + SHIFT, повући доље.



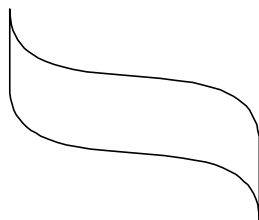
- Означити обје криве тако што ћете вући обиљежене правоугаонике око њих или тако што ћете изабрати сваку од кривих држећи SHIFT, затим из изборника Object изаберите Connect Lines како би спојили десне крајеве кривих.



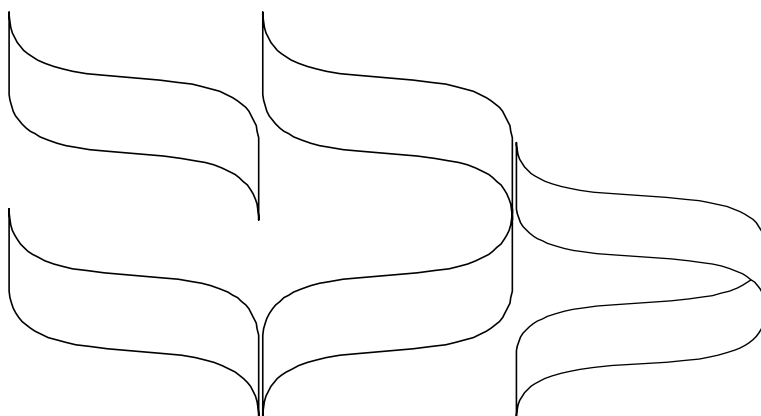
- На Editing toolbar-у, кликнути Edit Nodes. Наставити са следећим како би нацртали дио:
 - Изабрати Connect Vertices како би спојили крајеве чворова са линијом.



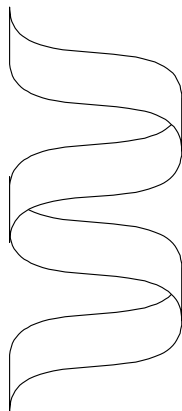
- Изабрати два одговарајућа чвора превлачећи означене правоугаонике око њих и на Edit Nodes toolbar-у, кликните Convert to Line.



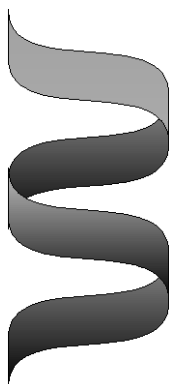
- Десни клик да напустите изборник Edit Nodes и замијените оруђе Select/Move/Resize.
- Направити копију добијених дијелова превлачећи их са CTRL + SHIFT. На Editing toolbar-у, кликнути Flip Left to Right како би ротирали дио и онда изабрати Send to Back како би послали дио на позадину.



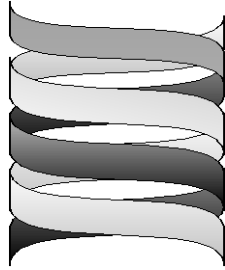
- Означити оба дијела превлачећи или кликом уз држање SHIFT и направите копију. Исправити позицију користећи упуте из претходног корака.



- Означити дијелове обиљежене са тачкама кликом, држећи SHIFT. Двоструки клик на било коју од њих како би отворили Objects Panel. На опцији Fill одредите обиљежја и кликните Apply.
- Означити друга два дијела и одредити обиљежја у панелу Objects, кликнути Apply.

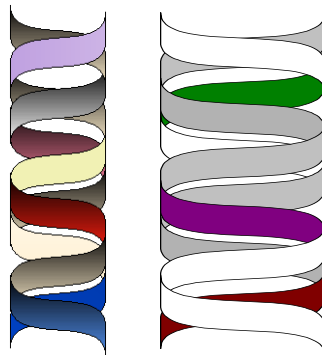


- Означити цијелу спиралу превлачећи означени правоугаоник тако да он укључује све дијелове спирале и направите копију превлачећи их уз CTRL. Кликните Flip Left to Right и затим Flip Top to Bottom.
- Означити дијелове обиљежене тачкама кликом уз SHIFT и онда кликнути на Send to Back.

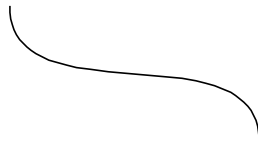


- Означити све дијелове и груписати их.

Задатак 150. Нацртати ланце

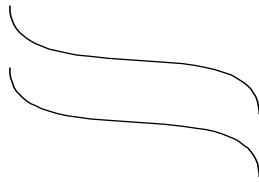


- На Drawing toolbar-у кликнути Polyline.
- Повући миш на доље од почетне тачке криве како би развукли контролну линију.
- Отпустити тастер миша.
- Помјерити миш ка десно како би нацртали криву.
- Повући миш на доље како би развукли контролне линије. Мијењајући дужину контролне линије можете измијенити дијелове криве.

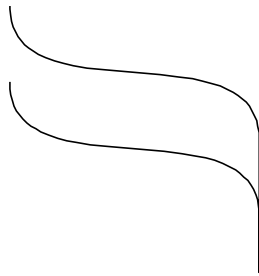


- Отпустите тастер миша и двоструким десним кликом завршити цртање линије. Укључити оруђе Select/Move/Resize.

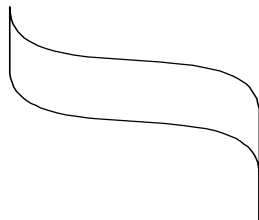
- Изабрати означену криву и држећи CTRL + SHIFT, повући доље.



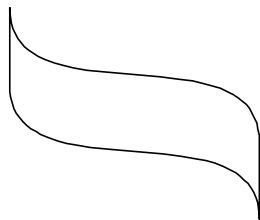
- Означити обје криве тако што ћете вући обиљежене правоугаонике око њих или тако што ћете изабрати сваку од кривих држећи SHIFT, затим из изборника Object изаберите Connect Lines како би спојили десне крајеве кривих.



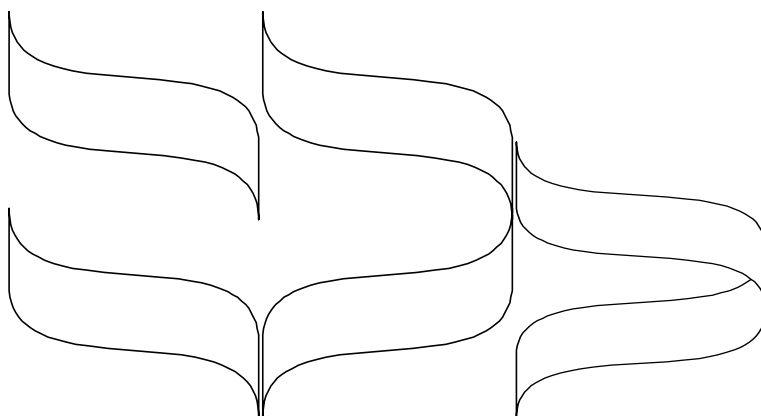
- На Editing toolbar-у, кликнути Edit Nodes. Наставити са следећим како би нацртали дио:
- Изабрати Connect Vertices како би спојили крајеве чворова са линијом.



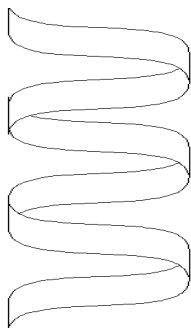
- Изабрати два одговарајућа чвора превлачећи означене правоугаонике око њих и на Edit Nodes toolbar-у, кликните Convert to Line.



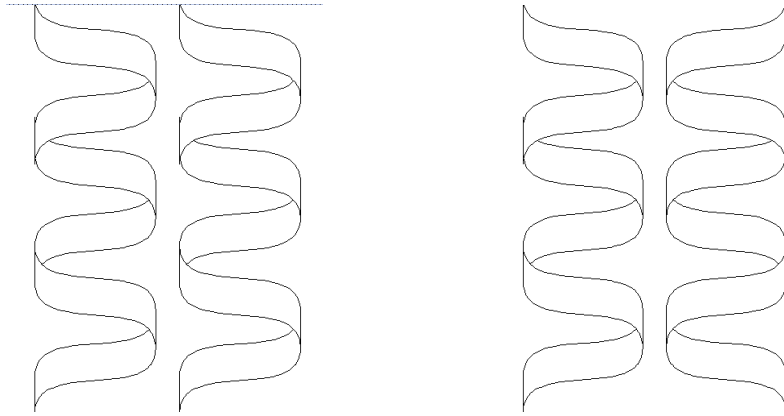
- Десни клик да напустите изборник Edit Nodes и замијените оруђе Select/Move/Resize.
- Направити копију добијених дијелова превлачећи их са CTRL + SHIFT. На Editing toolbar-у, кликнути Flip Left to Right како би ротирали дио и онда изабрати Send to Back како би послали дио на позадину.



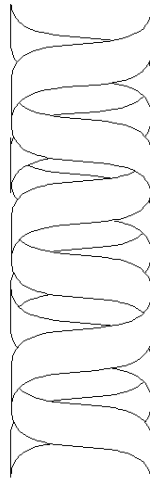
- Означити оба дијела превлачећи или кликом уз држање SHIFT и направите копију. Исправити позицију користећи упуте из претходног корака.



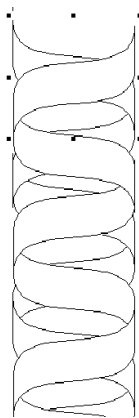
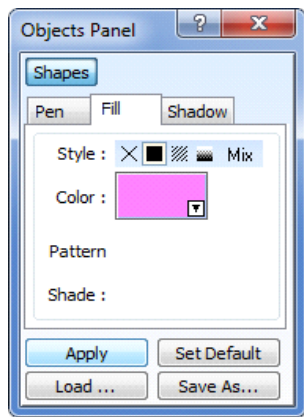
- Означити сваки дио ланца држећи SHIFT а затим истовременим притиском SHIFT+CTRL направити још један такав ланац. Означити један ланац и изабрати опцију Flip Left to Right.



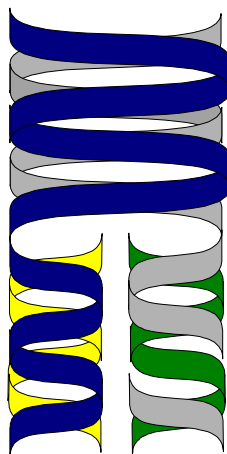
- Означити један ланац и превући га на други ланац, тако да поново добијете један ланац.



- Означити дио обиљежен са тачкама кликом, држећи SHIFT. Двоструки клик како би отворили Objects Panel. На опцији Fill одредите обиљежја и кликните Apply. На тај начин обојити сваки дио ланца траженом бојом. Исти поступак поновити и за други ланац.



Задатак 151. Нацртати ланац



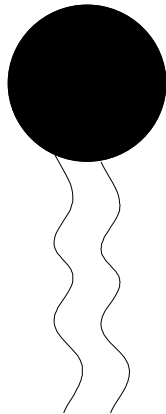
9.4 Цртање липида и мицела

Ово потпоглавље објашњава процес цртања липида, важних компоненти ћелијских мембрана, као и њихових асоцираних структура, познатих као мицеле.

9.4.1 Цртање липида

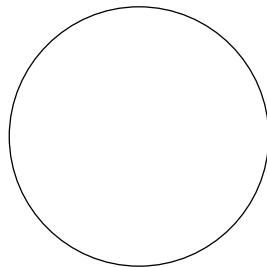
Кроз задатке и упутства описана у овом потпоглављу, читаоци ће се упознати с основним техникама цртања липида, повезивања сегмената, као и примјене облика и боја, што ће им омогућити боље разумијевање структурних карактеристика ових молекула.

Задатак 152. Нацртати липид

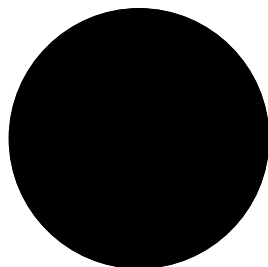


Провјерити да ли је укључена опција Draw.

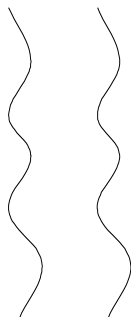
- На Drawing toolbar-у, кликнути Ellipse и превући у радну површ држећи SHIFT како бисте нацртали круг.



- Кликнути на црну боју у Colorpalette како бисте испунили круг.

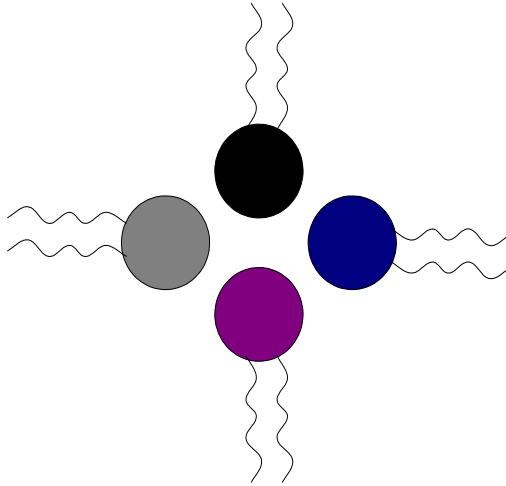


- Кликнути Polyline. Кликнути узастопно на радну површ поред круга како би нацртали угљенични реп и десни клик како би завршили цртање.
- Кликнути Edit Nodes и направити цик-цак линију на следећи начин:
 - Означити све чворове нацртане линије превлачећи правоугаонике око њих. Примјетити да су означени чворови постали црни.
 - Кликнути Convert to Curve и онда Smooth.
 - Десни клик како би замјенили оруђе Select/Move/Resize.
- Обиљежити криву и вући држећи CTRL како бисте оставили копију линије иза.

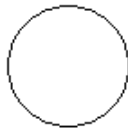


- Поредати репове превлачећи их.

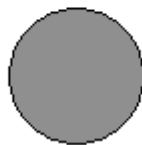
Задатак 153. Нацртати липид



- На Drawing toolbar-у, кликнути Ellipse и превући у радну површ држећи SHIFT како бисте нацртали круг.



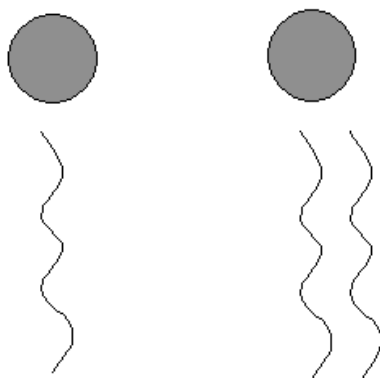
- Кликнути на сиву боју у Color Palette како бисте испунили круг.



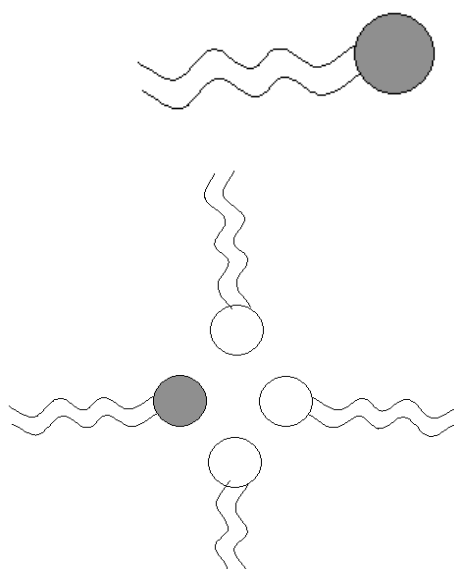
- Кликнути Polyline. Кликнути узаstopно на радну површ поред круга како би нацртали угљенични реп и десни клик како би завршили цртање.
- Кликнути Edit Nodes и направити цик-цак линију на следећи начин:

1. Означити све чворове нацртане линије превлачећи правоугаонике око њих. Примјетити да су означени чворови постали црни.
2. Кликнути Convert to Curve и онда Smooth.
3. Десни клик како би замјенили оруђе Select/Move/Rotate.

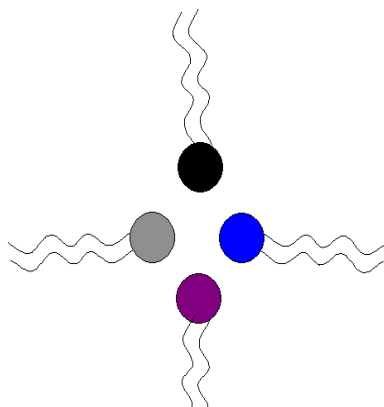
- Обиљежити криву и вући миш држећи CTRL како бисте оставили копију линије иза.



- Поредати репове превлачећи их.
- На исти начин нацртати преостала три липида и њихов положај подесити помоћу опције Select/Move/Rotate.



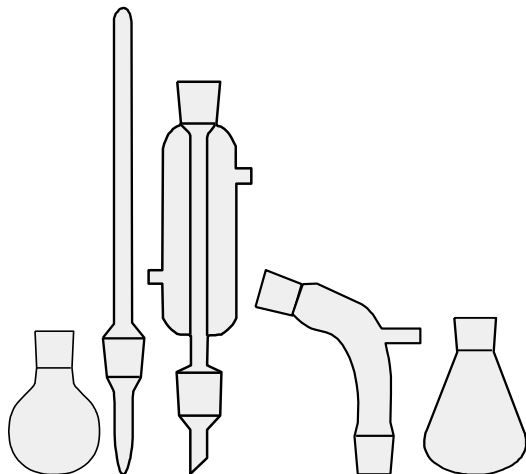
- Сваки круг испунити захтијеваном бојом.



9.5 Цртање лабораторијске апаратуре

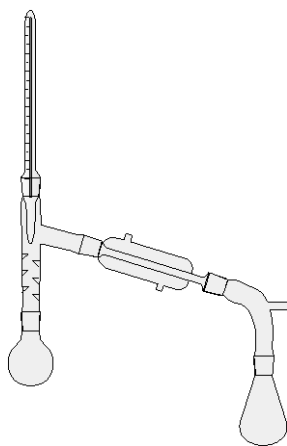
У поглављу 9.5 је објашњен процес цртања лабораторијске апаратуре који ће читаоцима пружити увид у основне технике дизајнирања и структуру различитих лабораторијских инструмената.

Задатак 154. Нацртати следеће дијелове:

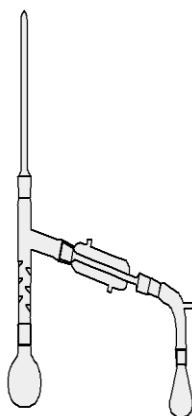
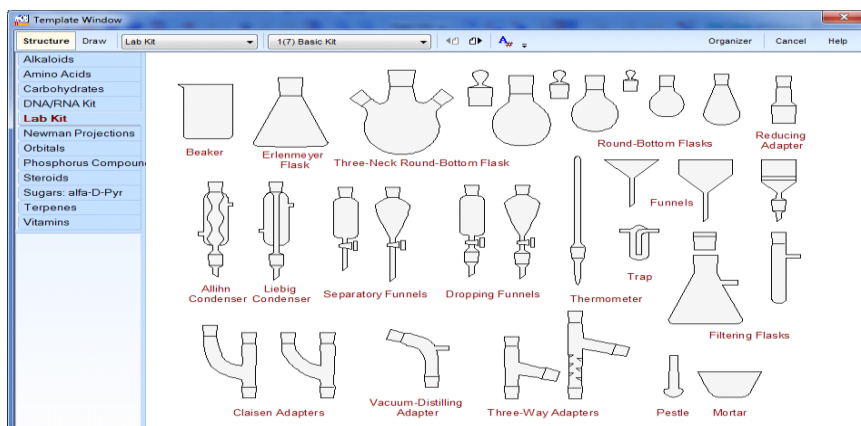


- Укључити изборник Draw и у Template Window, изабрати Lab Kit.
- Из Lab Kit изабрати дијелове апаратуре или ако постоји цијела апаратура и превуците на радну површ.
- Пустити клик миша.

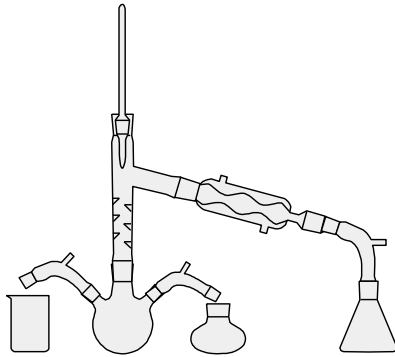
Задатак 155. Нацртати цјелокупну апаратуру.



- Укључити изборник Draw и у Template Window изабрати Lab Kit а потом изабрати дијелове апаратуре и превуците на радну површ.



Задатак 156. Нацртати цјелокупну апаратуру.



9.5.1 Додавање текстовних описа

- Прво изабрати писмо којим ћете уносити текст. Из изборника Tools изабрати Font Panel и Paragraph Panel.
- На Drawing toolbar-у изабрати Text и кликнути на радну површ поред тога што желите да опишете.
- Поновити претходни корак ако желите додати још описа.

9.5.2 Додавање облачића

- На лијевом дијелу Drawing toolbar- у кликнути на десни доњи угао Call out-а да би га раширили на више опција. Из доступних изгледа изабрати изглед који желите.
- Како означите различите објекте на радној површини тако ће се појавити сијенка облачића око њих. Кликнути на сијенку како би се облачић појавио и унијети жељени текст.
- Кликнути десним кликом на радну површ како би изашли из опције Call out.

9.5.3 Груписање елемената

Како би могли нечим управљати као цјеловитим објектом, означити шта желите и кликнути на оруђе Group на Editing toolbar-у. Сада можете помјерати ту слику као цјеловиту, без опасности да би неки елемент могли изгубити или заборавити. У случају да неки од елемената желите избацити, означити тај елемент и онда кликните опет на Group.

9.6 Цртање табела

ACD/ChemSketch вам нуди веома опсежно оруђе за рад са табелама. У овом поглављу ћете савладати цртање табела, њихово допуњавање и саму измјену.

9.6.1 Цртање садржаја табеле

Задатак 157. Нацртати табелу.

Структура	Име	Особине
	Бензен	Састав: C(92.26%) H(7.74%) Густина: $0.873 \pm 0.06 \text{ g/cm}^3$
	Нафтапен	Састав: C(93.71%) H(6.29%) Густина: $1.037 \pm 0.06 \text{ g/cm}^3$
	Хинопин	Састав: C(83.69%) H(5.46%) N(10.84%) Густина: $1.106 \pm 0.06 \text{ g/cm}^3$

9.6.2 Убацавање табеле

Додати ивице табеле која ће садржати податке исписане у претходном поглављу:

- У Draw режиму одабрати команду Table и превлачењем курсора по радној површини дефинишите величину табеле. Отвориће се дијалог прозор Insert Table. Подесити број редова на 4, а колона на 3.
- Кликнути ОК. Празна табела је уметнута. Десни клик да напустите режим за цртање табеле.

9.6.3 Уношење података у табелу

Након што је табела нацртана, можемо је попунити са претходно исписаним подацима.

- Провјерити да ли је Select/Move/Rasize омугућен. Превући испис *Структура* на горњу лијеву ћелију табеле. Након пуштања тастера миша, текст је аутоматски додат у ћелију; ћелија је промијенила величину да би обухватила текст.
- Превући структуру бензена у ћелију одмах испод наслова *Структура*.
- Табелу можете попунити и тако што ћете кликнути на структуру нафталена да би је обиљежили, држати SHIFT и кликнути на празну ћелију испод оне у коју сте смјестили бензен. Кликнути на команду Group. Структура се аутоматски пребацује у обиљежено поље.
- Можете додати и неколико објеката у табелу одједном. Кликнути на текст Бензен, а затим држећи притиснут SHIFT, кликнути на својства које се односе на бензен.
- Превући их у празно поље табеле поред бензена.
- Додати и друге објекте у ћелију превлачењем, означавањем и груписањем. Табела би требала изгледати овако:

Структура	Име	Особине
	Бензен	Састав: C(92.26%) H(7.74%) Густина: $0.873 \pm 0.06 \text{ g/cm}^3$
	Нафтален	Састав: C(93.71%) H(6.29%) Густина: $1.037 \pm 0.06 \text{ g/cm}^3$
	Хинолин	Састав: C(83.69%) H(5.46%) N(10.84%) Густина: $1.106 \pm 0.06 \text{ g/cm}^3$

9.6.4 Измјена садржаја табеле

Показаћемо како се накнадно мијења садржај табеле. У суштини, имамо следеће кораке.

- Провјерити да ли је Select/Move/Resize омугућен. Превлачењем курсора миша означити први ред табеле.
- Кликнути на команду Group. Ово ће разгруписати све ћелије и њихов садржај. Само текстуални дио ће бити означен.
- Двапут кликнути на неки дио текста. Приказаће вам се прозор Object Panel. У катрици Font изабрати Bold, подесити величину слова на 12 и кликнути на Apply.
- Затворити прозор (окно) Object Panel.
- Кликнути на празан простор радне површине.
- Поставити текст назад у први ред табеле користећи једну од техника описаних у претходном поглављу.

9.6.5 Уређивање изгледа табеле

Показаћемо како се накнадно уређује изглед табеле. У суштини, имамо следеће кораке.

- Провјерити да ли је Select/Move/Rasize омугућен. Превлачењем курсора миша означити први ред табеле.

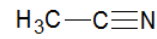
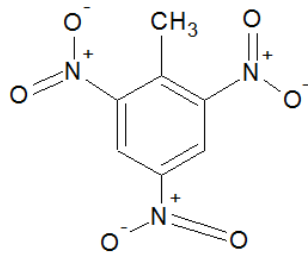
- Дуплим кликом отворити прозор (окно) Object Panel. Уколико картица Fill није видљива, кликнути на стрелицу десно да бисте је приказали и одабрали ју. Подесити боју на примјер, *ivory*.
- Кликнути на Apply; обиљежене ћелије биће попуњене одабраном бојом.
- Затворити прозор (окно) Object Panel.
- Означити читаву табелу. Двоструким кликом поново отворити Object Panel (напомена, у картици Fill боја је подешена на мјешовиту). Пребацити на картицу Pen и одабрати боју *crimson*. Кликнути на Apply.

Структура	Име	Особине
	Бензен	Састав: C(92.26%) H(7.74%) Густина: $0.873 \pm 0.06 \text{ g/cm}^3$
	Нафтапен	Састав: C(93.71%) H(6.29%) Густина: $1.037 \pm 0.06 \text{ g/cm}^3$
	Хинолин	Састав: C(83.69%) H(5.46%) N(10.84%) Густина: $1.106 \pm 0.06 \text{ g/cm}^3$

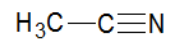
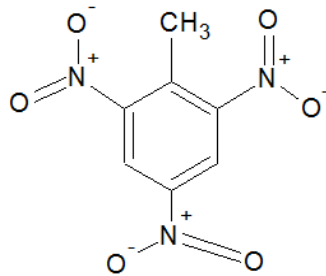
Задатак 158. Нацртати сљедећу табелу:

Структура	Име	Особине
	Тринитротолуен (ТНТ)	Индекс преламања: 1.637 ± 0.02 Површински напон: $71.9 \pm 3.0 \text{ dyne/cm}$
$\text{H}_3\text{C}-\text{C}\equiv\text{N}$	Ацетонитрил	Индекс преламања: 1.330 ± 0.02 Површински напон: $22.7 \pm 3.0 \text{ dyne/cm}$

- Подесити Structure режим. Нацртати структуре Тринитротолуена и Ацетонитрила како је описано у претходним поглављима или их пронаћи у Dictionary оруђу.



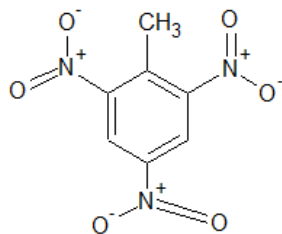
- Draw режим, користећи команду Artistic Text, те унијети имена за сваку од структура.



Ацетонитрил

Тринитротолуен (ТНТ)

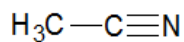
- Израчунати потребна својстава за сваку од њих. Ако је потребно, промијенити структуру и текст за бољи преглед.



Индекс преламања: 1.637 ± 0.02

Површински напон: $71.9 \pm 3.0 \text{ dyne/cm}$

Тринитротолуен (ТНТ)



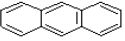
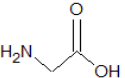
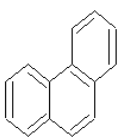
Ацетонитрил

Индекс преламања: 1.330 ± 0.02

Површински напон: $22.7 \pm 3.0 \text{ dyne/cm}$

Изабрати Artistic Text команду. Кликнути на празан простор и укуцати *Struktura*. Потом кликнути ван оквира за текст. На исти начин укуцати *Ime* и *Osobine*. Ово ће бити табела наслова.

Задатак 159. Нартати следећу табелу.

STRUKTURA	IME	OSOBINE
	Adenin	Površinski napon: 122.7 ± 3.0 dyne/cm
	Antracen	Površinski napon: 47.9 ± 3.0 dyne/cm
	Glicin	Površinski napon: 54.4 ± 3.0 dyne/cm
	Fenantren	Površinski napon: 47.9 ± 3.0 dyne/cm

10. Уређење докумената

У овој глави о уређењу докумената у ACD/ChemSketch представљене су различите функционалности за постављање и уређивање горњих и доњих маргина, креирање плаката и уметање заглавља и подножја на сваку страницу документа. Овај одјељак нуди детаљна упутства о томе како ефикасно структурирати и прилагодити документе у складу са специфичним захтјевима и потребама.

10.1 Уношење горње и доње маргине

ACD/ChemSketch вам омогућава убацивање горње и доње маргине за све странице документа. Потребно је само да убаците тест или слику коју желите на једну страницу, а страница ће бити приказана са тим узорком.

- У изборнику странице, одаберите Headers and Footers, а онда Edit. Појавиће се одговарајућа табела оруђа, а на врху странице прозор за уређивање текста.
- Укуцати текст који ће бити на горњој маргини странице, на примјер *ACD/ChemSketch*.
- Headers and Footers Toolbar, кликнути на Go to Next Text; отвориће се нови прозорчић у средини горње маргине. Укуцати *Author:*.
- Кликнути на Insert Auto Text на палети оруђа и изаберати Author. Ваше корисничко име биће аутоматски унешено.
- Кликнути поново на Go to Next Text да бисте унијели још један прозор за текст на десној страни заглавља. Кликнути на Insert Auto Text и изабрати PageX of Y, одговарајући текст је унешен. Ако желите додати још података у подножје странице, кликните Go to Next Text.
- Затворите прозор кликом на опцију Close.

10.2 Прављење плаката

Коришћењем ACD/ChemSketch можете брзо нацртати плакат и одштампати га на папиру било ког формата. ACD/ChemSketch ће аутоматски распоредити постер на странице; једино што треба да урадите (осим дизајна) јесте да их приложите.

У изборнику File изабрати Page Setup.

- У картици Size & Orient подесити формат папира и изабрати опцију Landscape.
- Изабрати картицу Poster. Подесити број страница од којих желите да се постер састоји. Подесити да можете аутоматски видјети величину постера у Virtual Page Size подручју.
- У картици Margins, подесити маргине странице и кликнути ОК.
- Нацртати постер користећи оруђа у Structure and Draw режиму. Кликнути на Full Page да бисте видјели коначан изглед постера.
- Уколико желите видјети како ће постер бити распоређен на појединачне странице приликом штампања, у Options директоријуму изабрати Preferences и у Preferences прозору ући у картицу Borders, означити Printable Area.
- Из директоријума File, изабрати Print или кликнути на Print да бисте одштампали постер и приложили странице.

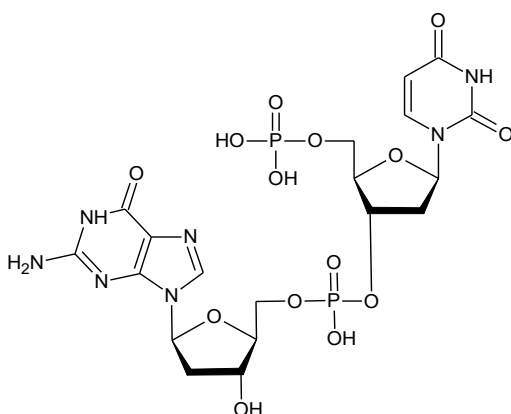
11. Рад са стиловима у Structure-режиму

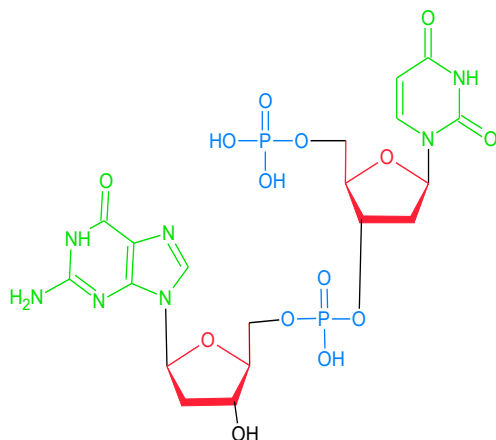
Ако често приказујете своју структуру са посебним скупом својстава, као што су величина фонта, стил фонта, дебљина веза, итд. можете направити да ACD/ChemSketch запамти ове поставке сачувајући их заједно као Style. Ово је посебно корисно ако желите да прикажете структуре на један начин када се ради са њима, али да их ускладите са одређеним стилем часописа приликом подношења рада за објављивање.

11.1 Стварање сопственог стила

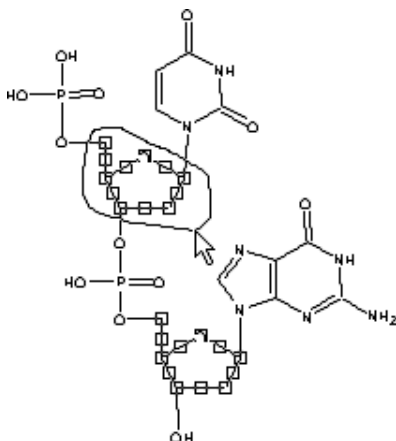
У поглављу 11.1, читаоци могу истражити напредне технике цртања молекулских структура. Овдје је представљено како применијени различите стилске ефекте и боје на различите дијелове структуре, те креирање уникатне и детаљне визуелне репрезентације молекуларних компоненти.

Задатак 160. Нацртати сљедећу структуру и превести је у жељени облик.





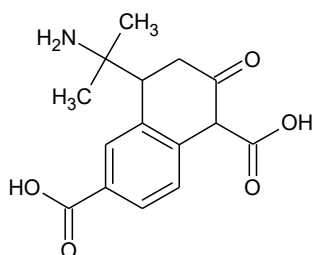
- Нацртати структуру на већ познат начин, самостално или уз помоћ Template Window оруђа.
- Кликнути на оруђе Lasso On, а затим на Select/Move.
- Означити компоненте које су шећери (притиснути SHIFT док означаваате изабране компоненте).



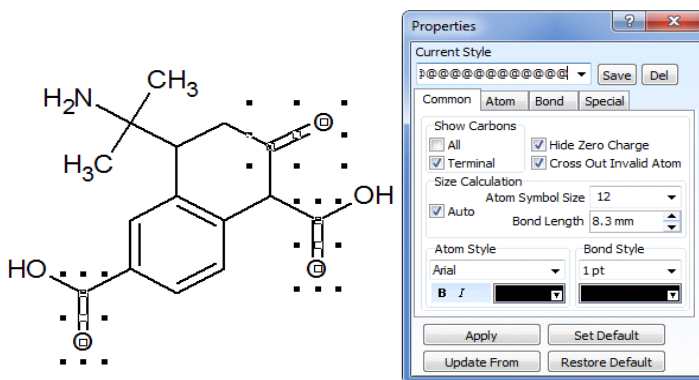
- Двоструким кликом на означени дио отворити прозор Properties.
- У подручју Atom Style и Bond Style изабрати боју за означене дијелове, на примјер црвену. Промијенити ширину веза, на примјер 1,9 Pt.
- Кликнути на Apply. Означена подручија ће постати црвена.

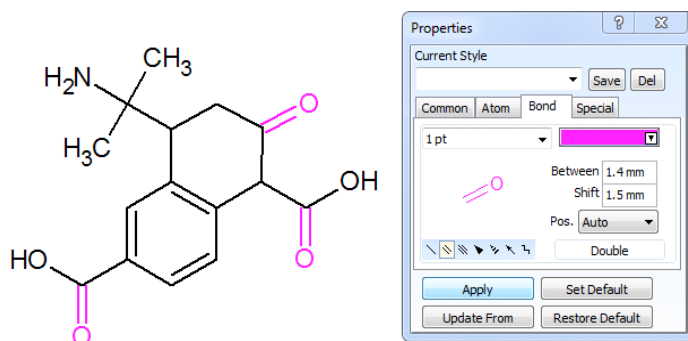
- Уколико желите сачувати овај стил за будуће коришћење, у линији Style, у Properties прозору, уцукати *Sugar* и кликнути Save.
- Ове кораке поновити за остатак молекуле. Фосфате обојите, на примјер у плаву, а аминокиселине у зелену боју.

Задатак 161. Нацртати следећу структуру и обојити све карбонилне групе у љубичасту боју.

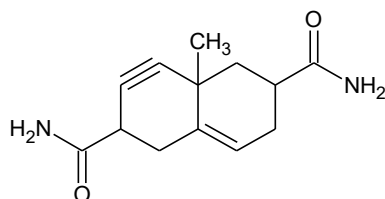


- Нацртати структуру на већ познат начин, самостално или уз помоћ Template Window оруђа.
- Кликнути на оруђе Lasso On, а затим на Select/Move.
- Означити карбонилне групе (притиснути SHIFT док означаваате изабране компоненте).
- Двоструким кликом на означени дио отворити прозор Properties.
- У подручју Atom Style и Bond Style изабрати љубичасту боју за карбонилне групе а затим кликути на Apply.

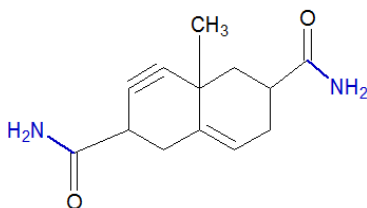




Задатак 162. Нацртати сљедећу структуру, пронаћи и обојити све амидне групе.

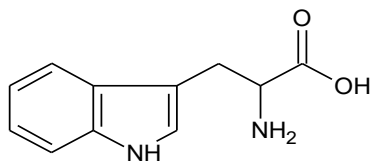


- Нацртати структуру на већ познат начин, самостално или уз помоћ Template Window оруђа.
- Кликнути на оруђе Lasso On, а затим на Select/Move.
- Означити амидне групе (притиснути SHIFT док означавате изабране компоненте).
- Двоструким кликом на означени дио отворити прозор Properties.
- У подручју Atom Style и Bond Style изабрати нпр. плаву боју за амидне групе а затим кликути на Apply.

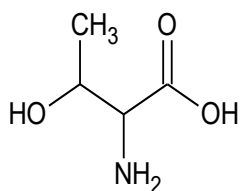


Задатак 163.

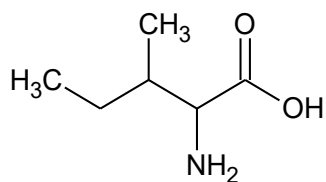
а) Нацртати сљедећу структуру, пронаћи и обојити све аминок групе у црвену боју.



б) Нацртати сљедећу структуру, пронаћи и обојити све хидроксилне групе у плаву боју.



в) Нацртати сљедећу структуру, пронаћи и обојити све метил групе у сиву боју.



12. Литература

- [1.] Bowen, J.P., Bowen, A.M. and Harrison, K. (2016). Creative visualisation in Chemistry. *International Journal of Creative Computing*, 1(2/3/4), 231. <https://doi.org/10.1504/ijcc.2016.076058>.
- [2.] Zare, R.N. (2002). Visualizing Chemistry. *Journal of Chemical Education*, 79(11), 1290. <https://doi.org/10.1021/ed079p1290>.
- [3.] ACD/Labs. (2022). *ChemSketch*. <https://www.acdlabs.com/products/chemsketch/> (Accessed: October 12, 2022).
- [4.] Advanced Chemistry Development, Inc. (2010). *ACD/ChemSketch Version 11.0 for Microsoft Windows, Reference Manual Comprehensive Interface Description*. http://biochem.flas.kps.ku.ac.th/chemsk_r11.pdf (Accessed: October 12, 2022)
- [5.] Advanced Chemistry Development, Inc. (2010). *ACD/ChemSketch Version 12.0 for Microsoft Windows, Tutorial, Drawing Chemical Structures and Graphical Images*. https://tigadalamsatu.files.wordpress.com/2012/04/chemsk_t.pdf (Accessed: October 12, 2022)
- [6.] Bruner, B. (2017). *ChemSketch - An Introductory Guide*. <http://www.bbruner.org/obc/chemsket.htm> (Accessed: October 12, 2022).
- [7.] Slayden, S.W. Drawing Structures with ChemSketch, Structure drawing-Manual. <http://mason.gmu.edu/~sslayden/Chem350/manual/structure.htm> (Accessed: October 12, 2022).
- [8.] *The age of digital chemistry*. (2022). YouTube. <https://www.youtube.com/watch?v=89XoK79DZY0> (Accessed: October 12, 2022).
- [9.] LibreTexts. (2022). Home, Chemistry LibreTexts. <https://chem.libretexts.org/> (Accessed: October 12, 2022).
- [10.] Xiayue, M. (2022). Development of Computational Chemistry and Application of Computational Methods. *Journal of Physics: Conference Series*, 2386. doi: 10.1088/1742-6596/2386/1/012005

13. Биљешка о аутору

Др Димитрије Д. Чвокић је доцент на Природно-математичком факултету Универзитета у Бањој Луци. Области интересовања су му: оптимизација у два нивоа, проблеми размијештања, теорија игара, аналитика, проучавање података, блокчејн-технологије, и примјене рачунарства у природним наукама.

CIP - Каталогизација у публикацији
Народна и универзитетска библиотека
Републике Српске, Бања Лука

004.92:[54:57(075.8)(076)(0.034.2)

ЧВОКИЋ, Димитрије Д., 1984-

Збирка задатака из коришћења ACD/ChemSketch-a
[Elektronski izvor] / Димитрије Д. Чвокић. - 1. онлајн изд. - Ел.
књига. - Бања Лука : Универзитет у Бањој Луци : Природно-
математички факултет, 2026

Системски захтјеви нису наведени. - Наћин pristupa (URL):
Начин приступа (URL): <https://blupress.unibl.org/pmf/index>. -
Насл. са насл. екрана. - Опис извора дана 16.01.2026. - Ел.
публикација у ПДФ формату опсега 168 стр. - Биљешка о аутору:
стр. 168. - Библиографија: стр. 167.

ISBN 978-99997-45-17-8

COBISS.RS-ID 143796737

