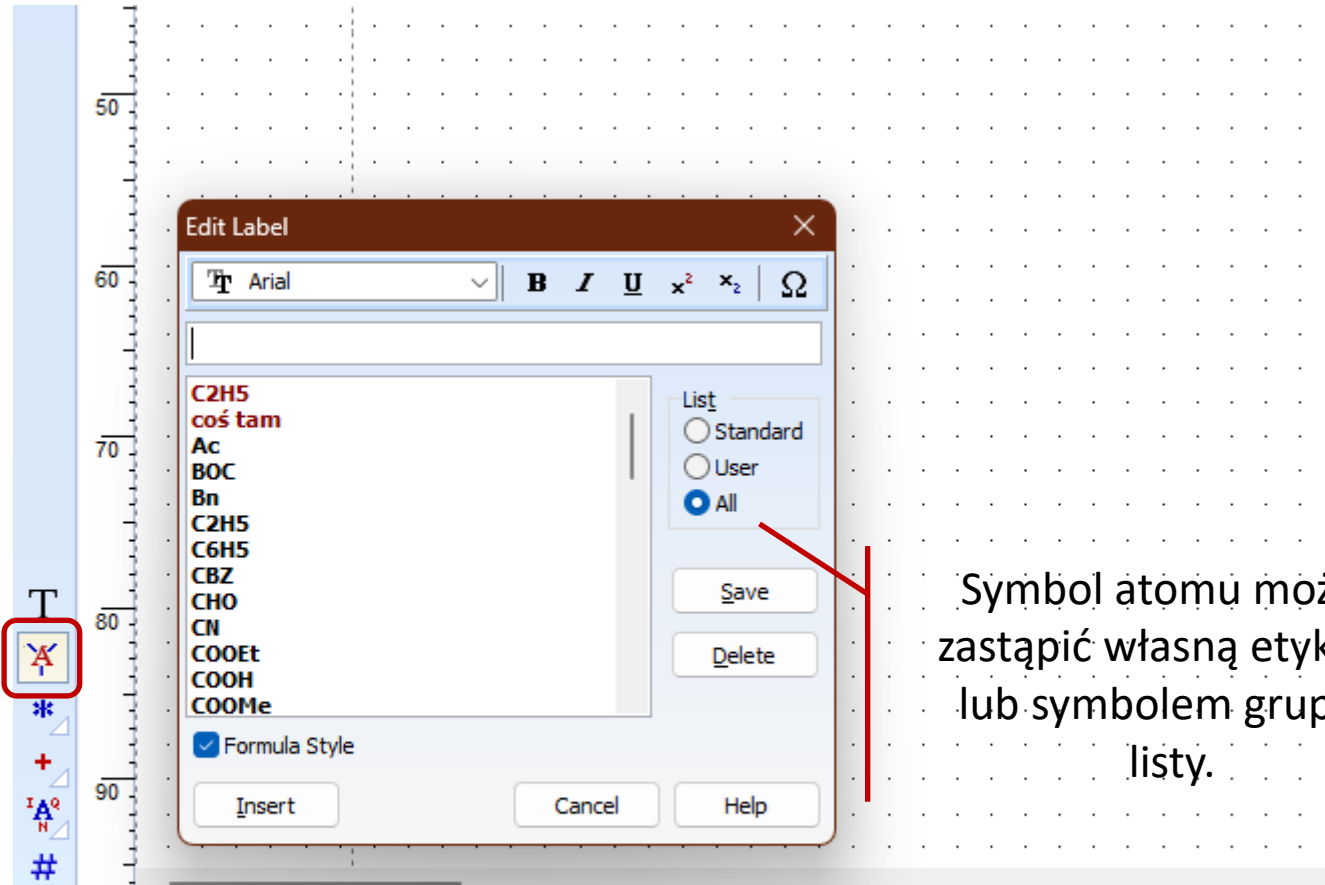


# Techniki informatyczne laboratoria komputerowe

## **ACD/ChemSketch – konfiguracja atomów**

Tomasz Lubera

# Edytowanie etykiety atomu (Edit Atom Label)



Symbol atomu można zastąpić własną etykietą lub symbolem grupy z listy.

# Właściwości atomu (Atom Chemical Properties)

Okno pozwala zmienić domyślną:

- wartościowość
- ładunek
- rodzaj izotopu

NONAME01.SK2 Modified Page 1/1 Fragments: 1 C<sub>9</sub>H<sub>12</sub>N<sub>2</sub>O FW: 164.208

1-ChemSketch 2-Database 3-I-Lab

# Właściwości struktury (Structure Properties)

The screenshot displays the ACD/ChemSketch (Freeware) interface. The 'Tools' menu is open, with 'Structure Properties' (Alt+Shift+S) highlighted. The 'Properties' dialog box is also open, showing settings for the current style, including Markush, Biosequence, and Coloration options, as well as Show Carbons, Size Calculation, Atom Style, and Bond Style settings.

Okno „Properties” można wywołać z menu *Tools* lub przez dwukrotne kliknięcie w strukturę.

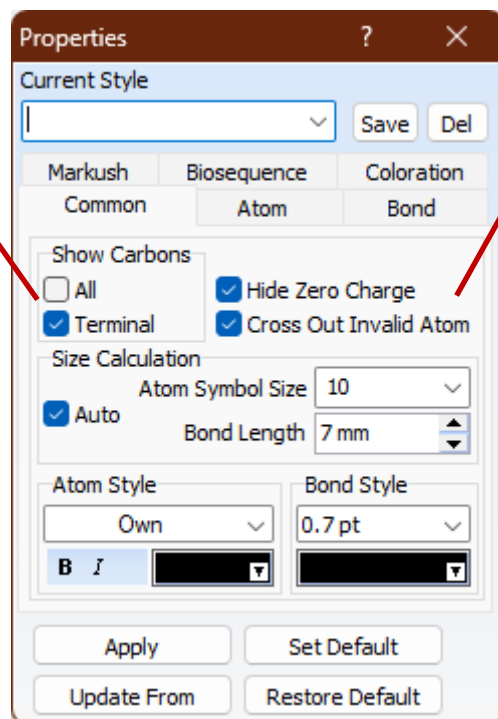
# Właściwości struktury - Wspólne

## (Structure Properties - Common)

Wyświetlanie atomów węgla:

- Wszystkich
- Tylko końcowych (opcja domyślna)

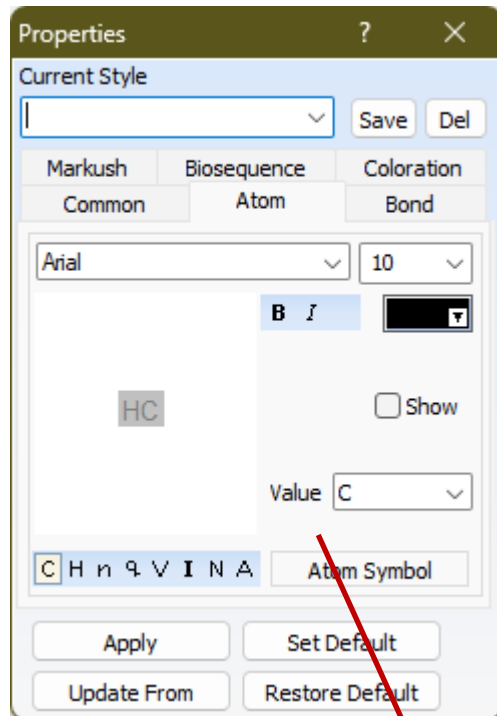
Jeśli nic nie jest zaznaczone widoczne są tylko wiązania i heteroatomy



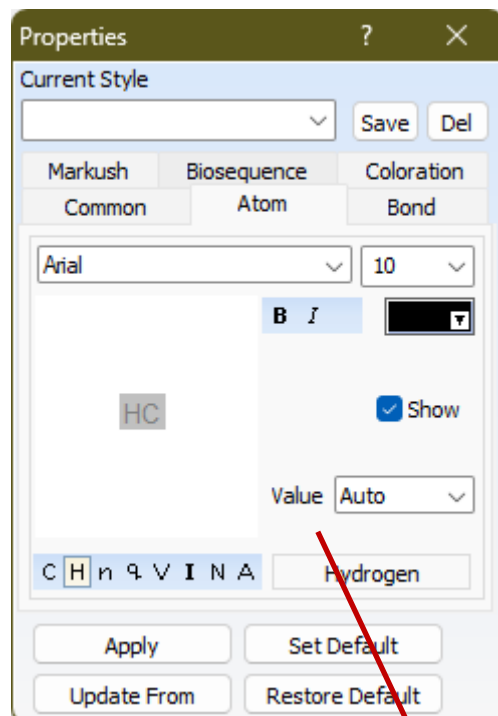
- Ukrywanie ładunku zerowego (domyślne)
- Oznaczanie atomów z błędną wartościowością (domyślne)

# Właściwości struktury - Atom (1)

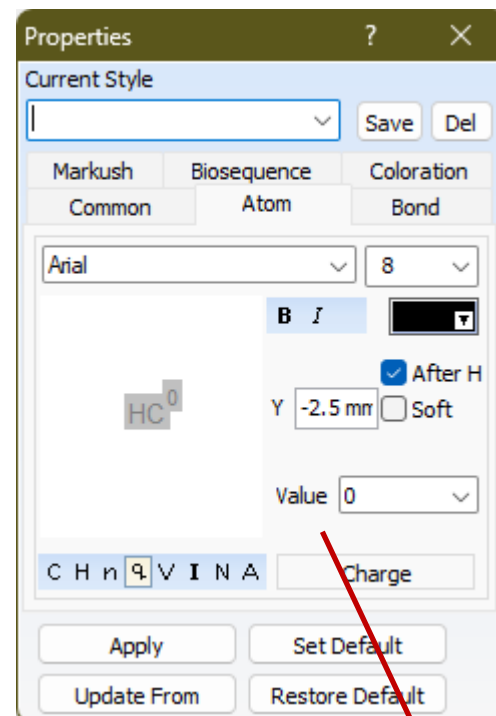
## (Structure Properties - Atom)



Symbol atomu – czy ma być widoczny (Show) i co to jest (Value)



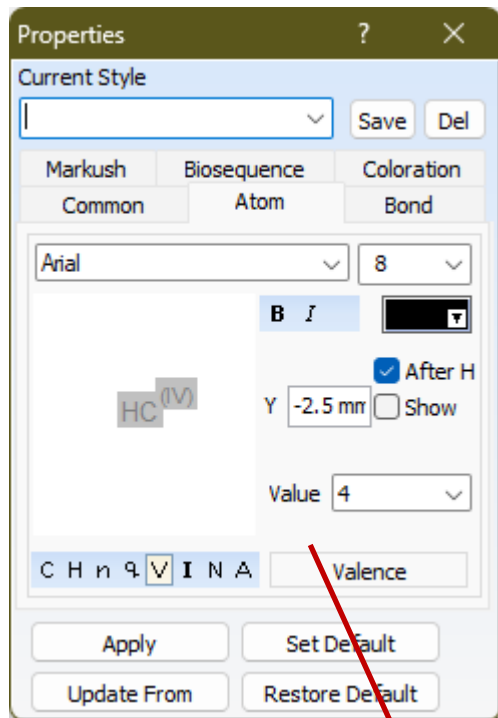
Symbol wodoru – czy ma być widoczny (Show) i po której stronie atomu C/heteroatomu (Value)



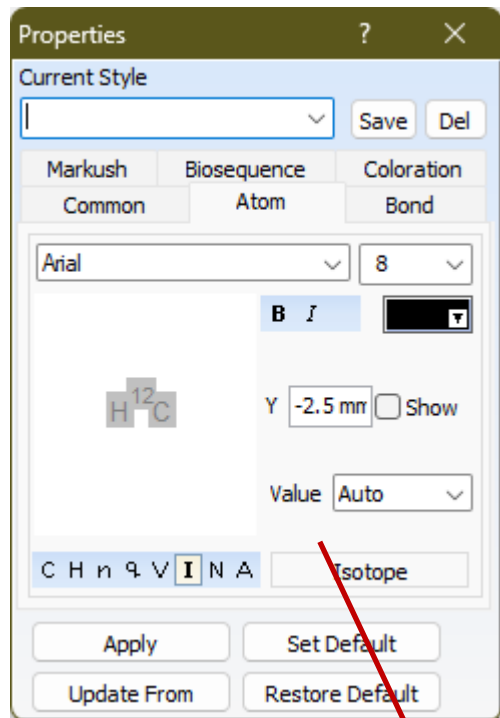
Ładunek – miejsce wyświetlenia (After H), auto znikanie po utworzeniu wiązania (Soft), Wartość (Value)

# Właściwości struktury - Atom (2)

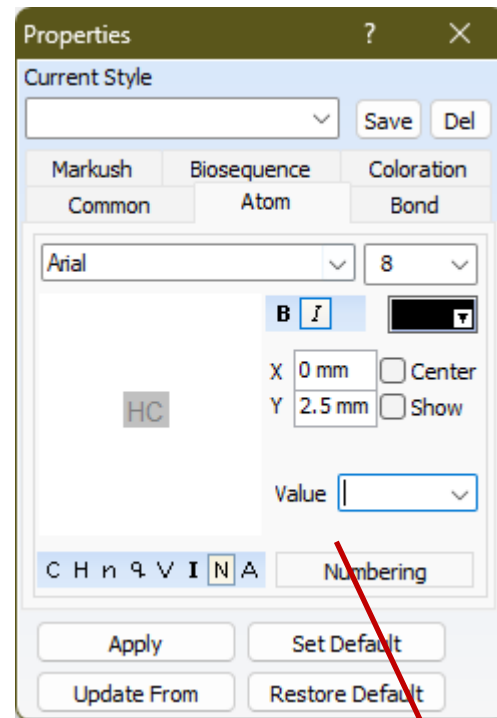
## (Structure Properties - Atom)



Wartościowość –  
lokalizacja (After H),  
czy ma być widoczny  
(Show) i ile wynosi  
(Value)



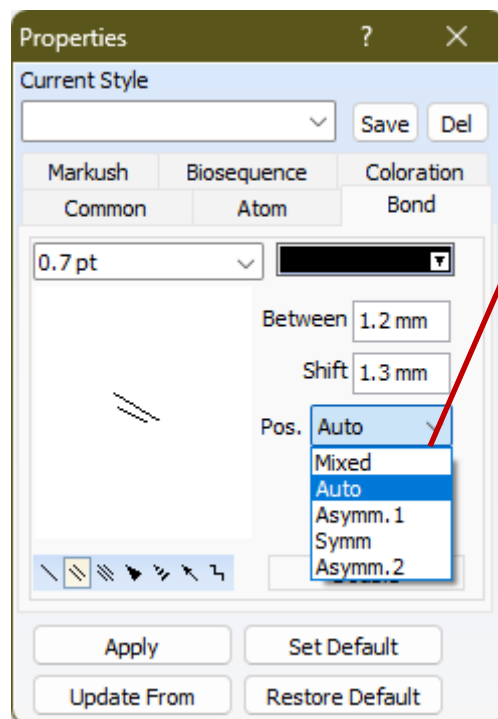
Izotop – czy ma być  
widoczny (Show) i  
jaki jest to izotop  
(Value)



Numerowanie  
atomów – miejsce  
wyświetlenia  
(center), czy ma być  
widoczny (Show),  
Wartość (Value)

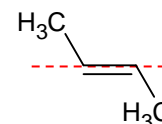
# Właściwości struktury - Wiązanie

## (Structure Properties - Bond)

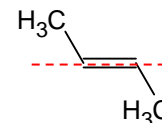


Sposób rysowania kresek wiązania podwójnego względem osi łączącej atomy:

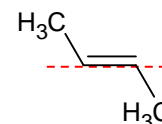
Asymm. 1



Symm



Asymm. 2



Koniec