

آموزش سریع نرم افزار **Chem Draw**

گردآورنده : امید طاهری

فهرست

5	پیشگفتار
7	مقدمه
9	فصل اول آشنایی با محیط برنامه ChemDraw
10	1-1 شروع به کار با ChemDraw
11	2-1 آشنایی با نوارها و ابزار برنامه
12	3-1 گزینه های Main Tools
19	فصل دوم آشنایی با نوار منو
19	1-2 منوی File
19	1-2-1 گزینه New Document
19	2-1-2 گزینه های Open & Open Special
20	3-1-2 گزینه Close
20	4-1-2 گزینه های Save & Save As
20	5-1-2 گزینه Page Setup
21	1-5-2 ابعاد صفحه
	2-5-2 جهت گیری صفحه
	22
22	3-5-2 حاشیه
22	4-5-2 کلید های پنجره Page Setup
23	6-1-2 گزینه Print
23	7-1-2 گزینه Document Setting
24	1-7-2 صفحه آرایی Layout
25	2-7-2 پاورقی Footer

26	Drawing	تنظیمات رسم ساختارها	2 - 1 - 7 - 3
27	Captions & Atom Labels	سر برگ	2 - 1 - 7 - 4
27	Colors	رنگ	2 - 1 - 7 - 5
28	Apply Document Setting	گزینه	2 - 1 - 8
28	Preferences	گزینه	2 - 1 - 9
28	Edit	منوی	2 - 2
29	Repeat	تکرار آخرین تغییر	2 - 2 - 1
29	Undo Delete & available	لغو یک عمل و برگرداندن آن	2 - 2 - 2
29	Redo not		
29	View	منوی	2 - 3
30	Show Rulers	نمایش خط کش ها	2 - 3 - 1
30	Other ToolBar	سایر نوار ابزارها	2 - 3 - 2
31		تغییر نمای صفحه	2 - 3 - 3
31	Show Crosshair	ایجاد خطوط مشبک در صفحه	2 - 3 - 4
31	Object	منوی	2 - 4
31	Add Frame	گزینه	2 - 4 - 1
32		متمرکز کردن ساختار در مرکز صفحه	2 - 4 - 2
32	Rotate	چرخاندن ساختار	2 - 4 - 3
33		مقیاس گذاشتن برای افزایش اندازه ساختار	2 - 4 - 4
33		رسم ساختار در اندازه ثابت	2 - 4 - 5
34	Structure	منوی	2 - 5
34	Band Properties	بیان ویژگی های پیوند	2 - 5 - 1
35		بررسی درستی ساختار رسم شده	2 - 5 - 2

36	2 - 6 خطوط منحنی و منوی Curves
36	2 - 7 منوی Text
37	2 - 8 تنظیمات رنگ و منوی Color
38	2 - 9 منوی Online
38	2 - 10 منوی Window
39	2 - 11 منوی Help
39	2 - 11 - 1 دفترچه راهنما
40	2 - 11 - 2 گزینه Help Mode
41	فصل سوم مثال های کاربردی
42	3 - 1 نام گذاری ترکیبات
43	3 - 2 تبدیل نام ترکیب به ساختار آن
43	3 - 3 نمایش محل اتصال دو واکنش دهنده
44	3 - 5 جدول تناوبی عناصر
45	3 - 6 یکسان سازی فاصله بین ساختارها
45	3 - 7 متصل کردن دو ساختار شیمیایی
45	3 - 8 درج فرمول شیمیایی یک ترکیب
46	3 - 9 روش رسم کمپلکس های آلی فلزی
47	3 - 10 نمایش نوع پلیمر
48	3 - 11 نشان دادن فرمول بسته ساختار
48	3 - 12 نشان دادن دمای ذوب و جوش یک ترکیب
49	3 - 13 نام های مستعار ترکیبات
50	3 - 14 نمایش پیکربندی فضایی ترکیبات
51	3 - 15 نمایش ساختار سه بعدی ترکیبات

52	3 - 16 نمایش طیف $^{13}\text{C-NMR}$ و HNMR ترکیبات
55	3 - 17 رسم ساختار گسترده با استفاده از نام مستعار آن
55	3 - 18 نمایش خصوصیات یک ترکیب
56	3 - 19 اختصاص نام مستعار به یک ساختار
56	3 - 20 به کار بردن سایر نرم افزارها در محیط Chem Draw
57	3 - 21 وارد کردن فایل گرافیکی
58	22 - تایپ علائم خاص ویندوز در محیط Chem Draw

پیشگفتار :

با توجه به گسترش روز افزون استفاده از کامپیوتر در زندگی بشر هیچ یک از جنبه های حیات وی را نمی توان یافت که به نوعی تحت تاثیر فراگیر آن قرار نگرفته باشد. استفاده از کامپیوتر به عنوان ابزار قدرتمندی در جهت گسترش مرزهای دانش و فناوری از جمله همین آثار فراگیر می باشد.

امروزه نرم افزارهای فراوانی در جهت کمک به دانشمندان، محققین و دانشجویان در جهان تولید شده می شود. که با استفاده از آنها می توان به انجام محاسبات سنگین علمی، تحلیل و بررسی سیستم های پیچیده، مدل سازی های سه بعدی، بررسی تئوری های مطرح شده و ... پرداخت. البته نرم افزار های تولیدی تنها به کارهای مطالعاتی و تحقیقاتی محدود نشده و نرم افزارهای نیز در جهت کمک به آموزش مباحث علمی تولید شده است. که با استفاده از این نرم افزارها، فراگیری مباحث پیچیده علمی آسانتر می شود. از جمله این نرم افزارها در رشته شیمی می توان به مجموعه Chem Office اشاره کرد. این نرم افزار می توان کمک زیادی به دانشجویان و اساتید این رشته کند. البته استفاده از این نرم افزار نیازمند آشنایی با محیط و ابزارهای آن می باشد. لذا با توجه به عدم وجود کتاب آموزشی درباره این نرم افزار و نیاز مبرم دانشجویان علاقمند، اقدام به نگارش کتابی درباره آموزش نرم افزار ChemDraw از مجموعه Chem Office نمودم.

در پایان شایسته است از عزیزی که در به ثمر رسیدن این ایده من را همراهی نموده اند، به ویژه از استاد عزیزم دکتر موسوی که ویراستاری علمی کتاب را تقبل کردند، سر کار خانم فهیمه عامری که در ویراستاری آن مرا

یاری کردند و تمامی اساتید عزیزم در دانشگاه سمنان و اعضای خانواده ام که مرا در این راه یاری کردند قدردانی کنم.

امید است در چاپهای بعدی کتاب با لحاظ کردن نظر اساتید، دانشجویان، دانش آموزان و سایر علاقمندان شیمی، تغییرات لازم جهت بهبود کیفیت بخشهای مختلف کتاب و انتقال بهتر مفاهیم در آن به عمل آید. بدین منظور نگارنده نظرهای اصلاحی، انتقادی و پیشنهادی استقبال می کند و از طریق پست الکترونیکی omid8565t@gmail.com منتظر دریافت آرای سازنده استادان محترم و خوانندگان عزیز هستم.

مقدمه :

نرم افزار ChemOffice از سه بخش تشکیل گردیده است که شامل: ChemDraw جهت مسائل آموزشی، محاسبات و ترسیم 2 بعدی. Chem 3D جهت مدل سازی 3 بعدی ترسیمات. ChemFinder جهت جستجوی منابع تحقیقاتی و پژوهشی است. در این کتاب به معرفی نرم افزار ChemDraw از مجموعه نرم افزارهای ChemOffice خواهیم پرداخت. این برنامه به کاربران امکان می دهد تا دامنه گستره ای از ترکیبات آلی، لوازم آزمایشگاهی به همراه رسم ساختارهای پیچیده از یک صفحه ساده تا صفحه های مختلف که گزارش های پیچیده ای را در بر می گیرد ایجاد کند. این برنامه قدرتمند با در اختیار گذاشتن امکانات بسیار قوی و ابزارهای توانا به کاربران کمک می کند تا بتوانند در این محیط به راحتی کار کنند. از جمله مهم ترین امکانات نرم افزار ChemDraw می توان به موارد زیر اشاره کرد :

- 1) طراحی انواع ساختارهای شیمیایی با قابلیت copy to past به دیگر محیط های نرم افزاری ویندوز مانند Word.
- 2) نام گذاری به روش آیوپاک Structures to Name Convert.
- 3) کشیدن شکل و ساختار مولکول از روی نام آن ها Insert name as Structures.
- 4) اصلاح ساختارها و ابعاد مطابق استانداردهای ژورنالهای معتبر مثل JACS و.....
- 5) پیش بینی شیفتهای شیمیایی CNMR و HNMR با دقت نسبتاً بالا که به دلیل اهمیت و کاربری آن مورد علاقه شیمیست ها است.

6) مشاهده نام ترکیب با دادن ساختار گسترده آن.

7) قسمتی از ChemDraw با برخی از ثابتهای ترمودینامیکی ساختار یک ترکیب پیشنهادی را با دقت پایین به ما می دهد.

هر آنچه که شما در ChemDraw رسم نمائید می توانید با عمل copy آن را به محیط های Excel و Powerpoint و Word و یا هر نرم افزار گرافیکی به همان شکل منتقل نمود. این توانایی بیشتر جهت تهیه و تدوین متون و منابع مکتوب، مقالات، پژوهشهای علمی تحقیقاتی، پایان نامه ها، سمینارها و مسائل آموزشی به کار می رود. برای این کار کافی است پس از رسم ساختار مولکول و شکل مورد نظر به وسیله ابزارهای ChemDraw گزینه copy را انتخاب نموده و در مقصد آنرا paste نمائید. بدین صورت کاربران می توانند علاوه بر اسناد، ساختارها و شکل فضایی را در محیط مربوطه در برنامه ChemDraw طراحی کنند.

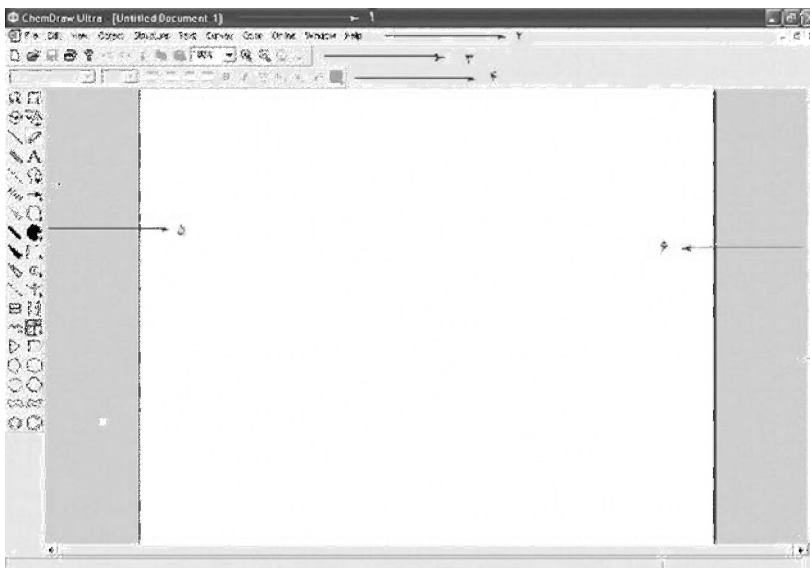
کتابی که در پیش دارید شامل سه فصل می باشد که به معرفی امکانات موجود و نحوه استفاده از این برنامه پرداخته است.

فصل اول

آشنایی با محیط برنامه ChemDraw

2-1 شروع به کار با ChemDraw :

برای اجرای برنامه ChemDraw پس از نصب برنامه از منوی Start گزینه All Programs را انتخاب کرده و در منوی باز شده، گزینه ChemOffice روی ChemDraw کلیک کنید. برنامه ChemDraw اجرا خواهد شد. همچنین می توان با راست کلیک بر روی فضای خالی محیط کار از منوی باز شده بر روی گزینه New رفته و CS ChemDraw Drawing را انتخاب کرده تا یک سند جدید ایجاد شده و با دوبار کلیک بر روی آن برنامه اجرا خواهد شد. که دارای پنجره ای به شکل زیر می باشد.



شکل 1 - 1

2-1 آشنایی با نوارها و ابزار برنامه

در این قسمت به توضیح اجراء مختلف پنجره اصلی برنامه ChemDraw می پردازیم :

1 - این نوار Title Bar یا نوار عنوان نام دارد و نام پنجره در این قسمت درج شده است. در انتهای این نوار سه کلید برای بستن، به حداقل و حد اکثر رساندن پنجره موجود است.

2 - در این قسمت نوار منو یا Menu Bar قرار گرفته است. در این منوها که با انتخاب هر کدام از گزینه ها، فرمان های متفاوتی در برنامه اجرا می شود.

3 - در این قسمت نوار ابزار عمومی یا General ToolBar قرار گرفته است. در این نوار دکمه هایی وجود دارد که با کلیک بر روی هر کدام فرمانی برای ما اجرا می کند. توجه داشته باشید اکثر این دستورات که به صورت کلید در این نوار قرار دارد، داخل منوها موجود می باشد و برای راحتی کاربران این دستورات بر روی نوار ابزار عمومی قرار گرفته است.

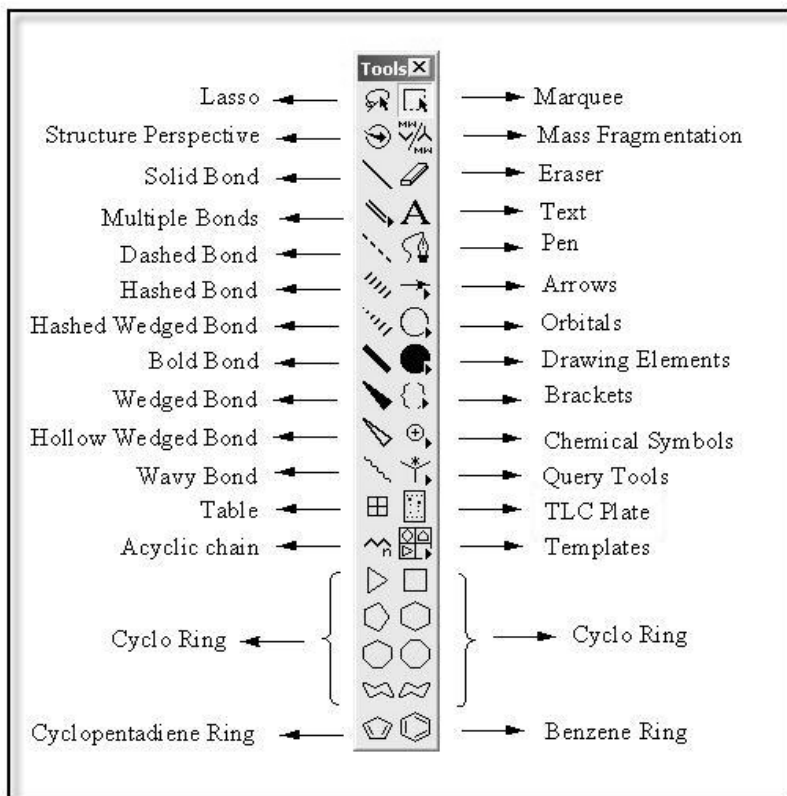
4 - این نوار، نوار ابزار Style نام دارد و کلید های موجود در این قسمت، کار تغییر شکل متن را به عهده دارند.

5 - این ناحیه Main Tools ، ابزارهای مهم نام دارد که یکی از ویژگی های برنامه ChemDraw می باشد و با استفاده از این قسمت می توان به راحتی با موضوعات مختلف در ChemDraw ارتباط برقرار کرد.

6 - این قسمت نوار مرورگر را نشان می دهد که با استفاده از آن می توان سند را مرور کرد.

3-1 گزینه های Main Tools :

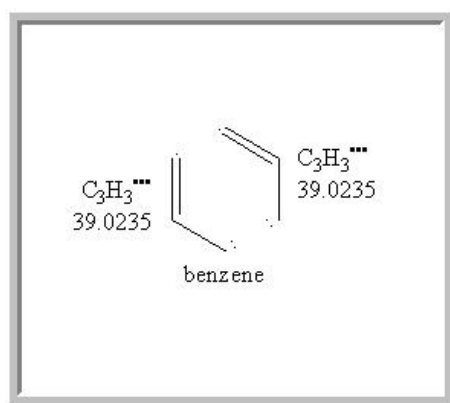
گزینه های موجود در Main Tools به شرح زیر می باشد :



شکل 2-1

کلیدهای Lasso و Marquee :
جهت انتخاب کردن یک ساختار می توان از ابزارهای Lasso & Marquee استفاده کرد.

کلید Mass Fragmentation :
جهت آنالیز بخش های مختلف ساختار می توان از Mass Fragmentation استفاده کرد. به عنوان مثال : با رسم خطی در راستای قطر بنزن)، ملکول به دو بخش تجزیه شده که در زیر هر بخش فرمول و جرم ملکولی آن بخش نمایان می شود.



شکل 3 – 1

کلید Eraser :
جهت پاک کردن قسمت های اضافی مورد نظر می توان از این کلید استفاده کرد.

کلید Pen :

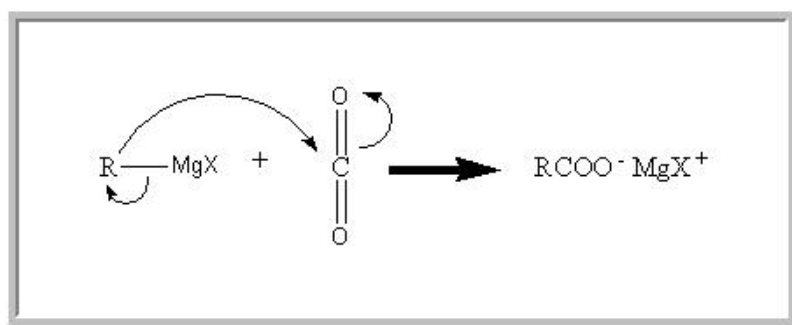
می توان جهت رسم منحنی ها از کلید Pen استفاده کرد.

کلید Text :

از کلید Text که با حرف A نمایان است می توان جهت درج فرمول شیمیایی ترکیبات استفاده کرد. که با انتخاب این کلید نوار Style ToolBar موجود در زیر نوار منو فعال شده و شما می توانید از ابزارهای آن استفاده کنید.

کلید Arrows :

برای نشان دادن جهت واکنش و رسم مکانیسم واکنش ها می توانید از این کلید استفاده کنید. به عنوان مثال مکانیسم واکنش معرف گرینیارد با دی اکسید کربن را نگاه کنید.



شکل 4 - 1

کلید Orbitals :

این گزینه امکان انواع اربیتال های اتمی ... d , p , s و اربیتال های ملکولی ساده را به شما می دهد.

کلید Drawing Elements :

جهت رسم نشانه ها و علائم مختلف از گزینه Drawing Elements استفاده کنید.

کلید Brackets :

از این کلید جهت رسم پرانتز و کروشه استفاده می شود. همچنین می توانید با راست کلیک روی ساختار انتخاب شده از گزینه Add Frame پرانتز و کروشه ایجاد کنید.

کلید Chemical Symbols :

جهت نمایش علائم شیمیایی مورد نیاز می توان از کلید Chemical Symbols استفاده کرد.

کلید TLC Plate :

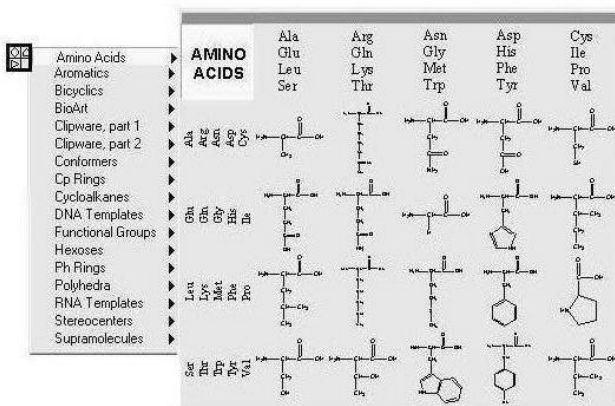
جهت نمایش کروماتوگرافی لایه نازک TLC می توان از ابزار TLC Plate موجود در نوار ابزار اصلی سود جست به کمک این ابزار تعیین درجه بازداری امکان پذیر خواهد بود.

ساختارهای حلقوی Cyclo Ring :

قسمت انتهایی نوار ابزار اصلی شامل ساختارهای حلقوی معول مانند بنزن، سیکلو بوتان، سیکلو هگزان و ... می باشد.

کلید Templates :

جهت رسم ساختارهای تخصصی از جمله آمینو اسیدها، ترکیبات آروماتیک، گروه های عاملی، لوازم و تجهیزات آزمایشگاهی و ... می توان از این کلید استفاده کنید. برای این کار از کلید Templates روی زیر گزینه مربوط رفته تا تمام ساختارهای موجود در زیر گزینه به شما نشان داده شود و با کلیک بر روی ساختار مورد نظر و سپس کلیک بر روی سند، ساختار مورد نظر در صفحه درج می شود. به عنوان مثال شکل زیر آمینو اسیدهای موجود در زیر گزینه Amino Acids نمایش داده شده است.



شکل 5 - 1

ابزارهای رسم پیوند Drawing Bonds :

جهت رسم انواع پیوندها می توان از این ابزارها استفاده کنید. این ابزارها شامل کلیدهای : Solid Band, Multiple Band, Dashed Band, Hashed Band, Bold Band, Wedged Band و می باشد. که هر کدام کاربرد خاصی دارند مثلا :

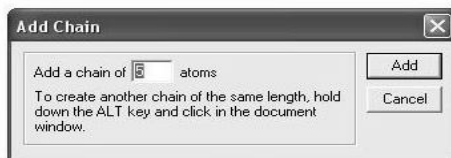
Solied جهت رسم پیوند یگانه و Multiple جهت رسم پیوندهای چند گانه مورد استفاده قرار می گیرد.

کلید Structure Perspective :

جهت چرخاندن ساختارها در جهت های مختلف از کلید Structure Perspective می توان استفاده کرد.

کلید Acyclic Chain :

جهت رسم ساختارهای هیدروکربنی آلیفاتیک اشباع (آلکان ها) می توان از این کلید استفاده کرد. برای این کار روی کلید Acyclic Chain کلیک کرده سپس در سند کلیک کرده، پنجره ای مانند تصویر زیر باز شده که در آن تعداد اتم کربن زنجیر را تعیین می شود، با تعیین تعداد اتم کربن زنجیر و فشار دادن کلید Add از پنجره باز شده ساختار زنجیر رسم می شود.



شکل 6 - 1

فصل دوم

آشنایی با نوار منو

آشنایی با نوار منو :

در این فصل به معرفی گزینه های موجود در نوار منو برنامه ChemDraw می پردازیم. گزینه های هر منو را جداگانه بررسی خواهیم کرد. برای این کار از منوی File شروع می کنیم.

1 - 2 منوی File :

این منو شامل گزینه هایی جهت ایجاد یک سند جدید و تنظیمات مربوط به آن می باشد. که در اینجا به معرفی ساده ای از گزینه های این منو خواهیم پرداخت.

1 - 1 - 2 New Document

با استفاده از این گزینه می توان سند جدیدی ایجاد کرد. همچنین برای ایجاد سند جدید می توان از نوار ابزار عمومی کلید New استفاده کرد.

2 - 1 - 2 گزینه های Open & Open Special :

از گزینه Open برای باز کردن سند های موجود در رایانه استفاده می شود. با انتخاب این گزینه پنجره مربوطه باز شده و از آنجا فایل مورد نظر را باز می کنیم. گزینه Open Special که دارای زیر گزینه های زیادی می باشد. از این گزینه ها جهت باز کردن سند در فرم خاصی می توان استفاده کرد.

3 - 1 - 2 گزینه Close :

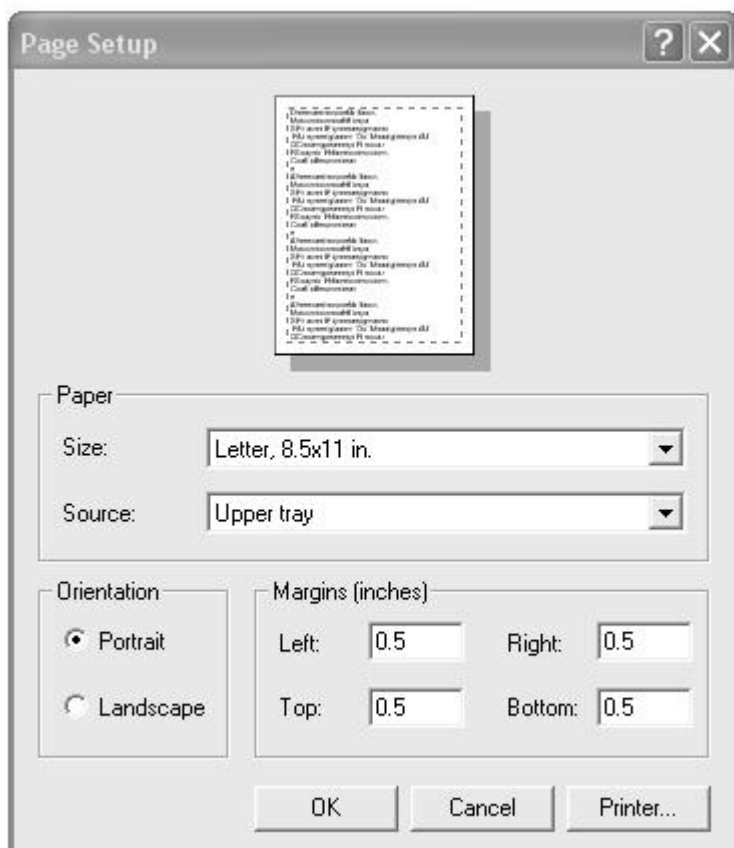
جهت بستن سندهای حاضر از این گزینه استفاده می شود. در صورتی که تغییرات اعمالی بر سند را ذخیره نکرده باشید قبل از بسته شدن پنجره پیامی به شما داده می شود که می خواهید تغییرات روی سند ذخیره شود؟ برای ذخیره تغییرات Yes را انتخاب کنید، اگر شما تمایلی به ذخیره تغییرات ندارید می توانید کلید No را انتخاب کنید و اگر از بستن سند منصرف شدید از کلید Cancel استفاده کنید.

4 - 1 - 2 گزینه های Save & Save As :

جهت ذخیره تغییرات بر روی سند موجود می توان از گزینه Save استفاده کرد. وجهت ذخیره سند موجود به همراه تغییرات اعمالی در یک سند جدید از گزینه Save As استفاده می شود.

5 - 1 - 2 گزینه Page Setup :

برای تنظیم ابعاد و نوع صفحه و تعیین پرینتر می توان از این گزینه استفاده کرد. با انتخاب این گزینه پنجره Page Setup باز می شود که دارای چهار قسمت می باشد.



شکل 1 - 2

1 - 5 - 1 - 2 ابعاد صفحه :

در قسمت Paper می توان ابعاد صفحه و منبع سند را با استفاده از کلیدهای کشویی Size، Source انتخاب کرد.

2-5-1-2 جهت گیری صفحه :

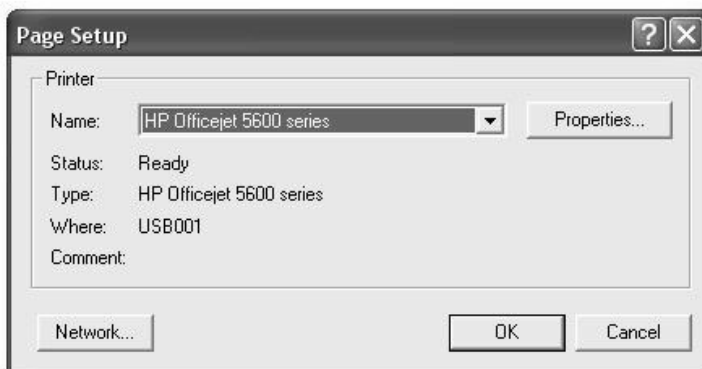
برای تعیین جهت گیری صفحه می توان از قسمت Orientation پنجره Page Setup استفاده کرد. برای قرار گرفتن عمودی Portrait و جهت قرار گرفتن افقی صفحه Landscape را انتخاب کنید.

2-5-1-3 حاشیه :

در قسمت Margins از پنجره Page Setup می توان اندازه حاشیه را از سمت چپ و راست و همچنین بالا و پایین صفحه تعیین کرد.

2-5-1-4 کلید های پنجره Page Setup :

در قسمت کلید های این پنجره سه کلید Ok , Cancel , Printer موجود است. کلید Ok جهت اعمال تغییرات و کلید Cancel جهت لغو این تغییرات مورد استفاده قرار می گیرد. و کلید Printer جهت انجام تنظیمات مربوط به پرینتر مورد استفاده قرار می گیرد. با انتخاب این کلید پنجره جدیدی باز شده که در آن می توانید پرینتر پیش فرض را از کلید کشویی Name انتخاب کرد. با استفاده از کلید Properties می توانید تنظیمات دلخواه خود را روی پرینتر اعمال کنید. همچنین با استفاده از کلید Net Work می توانید به معرفی پرینتر تحت شبکه و تنظیمات مربوط بپردازید.



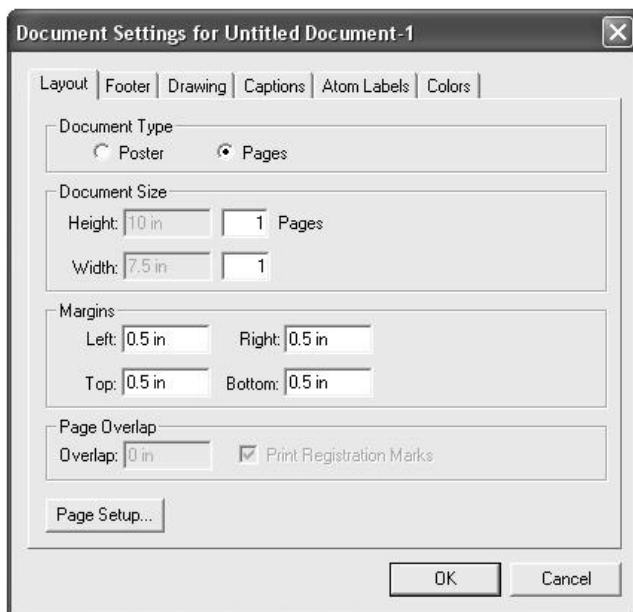
شکل 2 - 2

6 - 1 - 2 گزینه Print :

جهت تهیه پرینت از سند موجود از این گزینه استفاده می شود. که با انتخاب این گزینه پنجره Print باز شده و با استفاده از گزینه های آن می توان تنظیمات مربوط به پرینت سند حاضر را تغییر داد.

7 - 1 - 2 گزینه Document Setting :

با استفاده از این گزینه می توان تنظیمات کلی سند مانند اندازه، نوع صفحه، رنگ و را تغییر داد. با انتخاب گزینه Document Setring پنجره مربوطه باز شده که دارای شش سر برگ می باشد. که به ترتیب به توضیح آنها خواهیم پرداخت.



شکل 3 - 2

1 - 7 - 1 - 2 صفحه آرای Layout :

این سر برگ شامل پنج قسمت می باشد. در قسمت اول Document Type نوع سند را می توان انتخاب کرد که می تواند به صورت صفحه Page و یا پوستر Poster باشد. در قسمت دوم Document Size می توانید اندازه سند را تعیین کنید. بسته به نوع سند، اگر به صورت صفحه باشد می توان تعداد صفحات و اگر به صورت پوستر باشد می توان ابعاد آن را تعیین کرد. در قسمت سوم Margins می توانید همانند پنجره Page Setup به تنظیم حاشیه صفحه از چهار جهت بپردازید.

قسمت چهارم Page Ovr lap در صورتی فعال می باشد که نوع سند خود را پوستر انتخاب کرده باشید و میزان همپوشانی سند را تعیین می کند. قسمت پنجم کلید Page Setup می باشد این کلید همان کار گزینه Page Setup موجود در منوی File را انجام می دهد.

2-7-1-2 پاورقی Footer :

در این قسمت شما می توانید برای سند خود عنوان و پاورقی تعیین کرده و فاصله آنها را تنظیم کنید. برای ایجاد عنوان کفایت عنوان مورد نظر خود را در قسمت Header در جعبه Text بنویسید و فاصله آن را از بالای صفحه در قسمت Position تعیین کنید. برای پاورقی نیز می توانید مانند عنوان عمل کرده اما باید پاورقی را در قسمت Footer وارد کنید. در قسمت انتهایی این صفحه Comment می توان توضیحات مربوطه را وارد کرد.

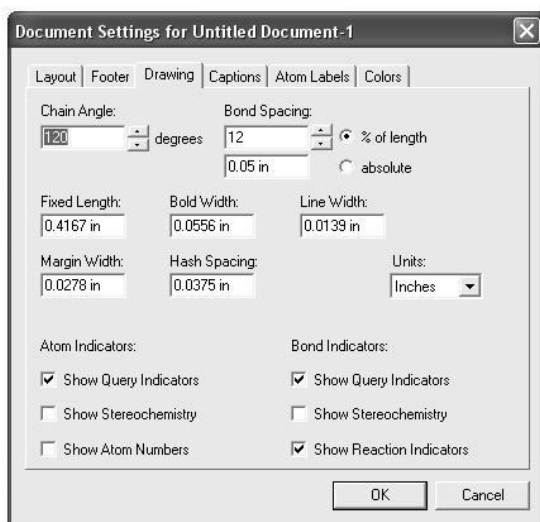


شکل 4- 2

3-7-1-2 تنظیمات رسم ساختارها Drawing :

در سر برگ Drawing می توان تنظیمات مربوط به رسم ساختارها و پیوندها را تنظیم کرد. تنظیماتی نظیر زاویه پیوندها ، پهنایی پیوند و ... را می توان تغییر داد.

برای تغییر زاویه پیوند می توان از قسمت Chain Angle استفاده کرد و عدد مورد نظر را در آن وارد کرد البته عدد پیش فرض برای زاویه پیوند 120 درجه می باشد. همچنین برای نشان دادن پیکربندی کافیت گزینه Show Stereochemistry را فعال کنید. که با این کار اگر در ملکولی مرکز کایرال وجود داشته باشد با حروف R,S پیکربندی آنها تعیین خواهد شد. همچنین برای شماره گذاری اتم ها در ملکول کافیت Show Atom Numbers را فعال کنید.



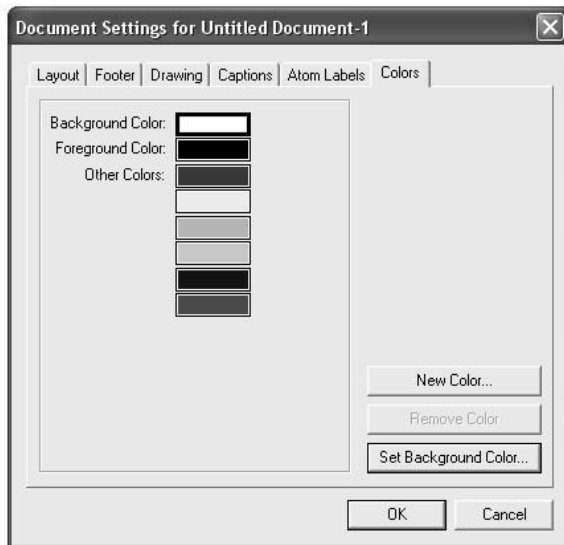
شکل 5 - 2

4 - 7 - 1 - 2 : Captions & Atom Labels سر برگ

در سر برگ Captions می توانید فونت، اندازه، نوع نوشته و فاصله بین خطوط رانتظیم کنید. سر برگ Atom Labels مشابه سر برگ Captions می باشد فقط در این سر برگ فونت، اندازه، نوع خط و فاصله خطوط را در زمان وارد کردن فرمول شیمیایی تعیین می کنیم.

5 - 7 - 1 - 2 : Colors تنظیمات مربوط به رنگ

در سر برگ Colors می توانید کلیه تنظیمات مربوط به رنگ سند را تنظیم کنید. البته برخی از این تنظیمات را می توان توسط منوی Colors انجام داد. در اینجا به بیان برخی از تنظیمات در این سر برگ خواهیم پرداخت.



شکل 6 - 2

برای تغییر رنگ زمینه کافیسست در سر برگ Colors روی رنگ Background Color دوبار کلیک کنید یا اینکه کلید Set Background Color را بزنید با این کار پنجره Color باز شده و شما می توانید رنگ مورد نظر خود را انتخاب کنید. همچنین با استفاده از کلیدهای New Color و Remove Color می توانید رنگ های موجود در منوی Color را کم یا زیاد کرده و با استفاده از Set Other Colors می توانید رنگ های منوی Color را تغییر دهید.

8-1-2 گزینه Apply Document Setting :

با استفاده از زیر گزینه های این گزینه می توانید تنظیمات کلی سند را به حالت پیش فرض برای زیر گزینه انتخابی برگردانید.

9-1-2 گزینه Preferences :

این گزینه مربوط به انتخاب یک سری از موارد انتخابی در سند است مانند واحد فاصله و امثال آن که می توان آنها را تغییر داد.

2-2 منوی Edit :

جهت ویرایش سند می توان از گزینه های این منو استفاده کرد. از جمله گزینه های موجود در این زمینه می توان به Cut , Copy , Paste اشاره کرد که به ترتیب برای برداشتن، کپی کردن و چسباندن مورد استفاده قرار می گیرد. از دیگر گزینه ها در این منو می توان به موارد زیر اشاره داشت.

1 - 2 - 2 تکرار آخرین تغییر Repeat :

گزینه Repeat آخرین تغییر اعمال شده بر روی سند را دقیقاً و در همان مقیاس اعمال شده ذخیره کرده و به شما این امکان را می‌دهد که یک عمل را در مقیاس مشخص برای چندین بار انجام دهید. به عنوان مثال سیکلو هگزان را در نظر بگیرید که آن را تحت زاویه 45 درجه می‌چرخانیم اگر بخواهیم این کار را دقیقاً و در همین مقیاس انجام گرفته تکرار کنیم از گزینه Repeat استفاده می‌کنیم.

2 - 2 - 2 لغو یک عمل و برگرداندن آن Undo available : Delete & Redo not

برای لغو آخرین عمل انجام گرفته بر روی سند از گزینه Undo Delete یا کلید ترکیبی Ctrl + Z می‌توان استفاده کرد. و برای برگرداندن آخرین عمل لغو شده می‌توان از گزینه Redo not available یا از کلید ترکیبی Ctrl + Shift + Z استفاده کرد.

3 - 2 منوی View :

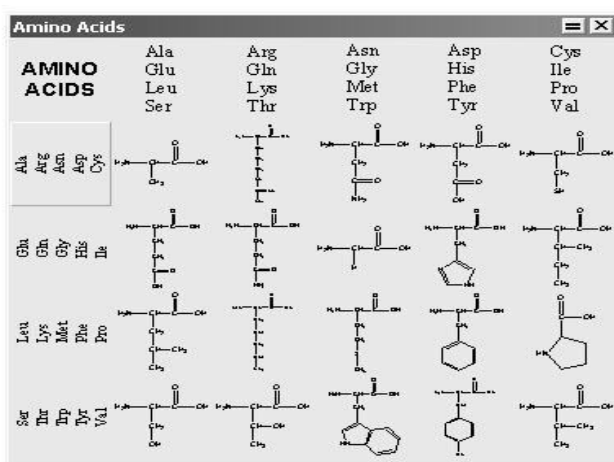
با استفاده از گزینه های این منو می‌توانید ظاهر پنجره را تغییر بدهید. این تغییر شامل نمایش یا عدم نمایش نوارها از جمله نوار ابزار ، نوار ابزار عمومی و می‌شود. با استفاده از گزینه های این منو می‌توان کارهای دیگری نیز انجام داد که به چند مورد مهم آن در زیر اشاره می‌شود.

1 - 3 - 2 نمایش خط کش ها Show Rulers :

در صورتی که در محیط برنامه نیاز به خط کش پیدا کردید این امکان در برنامه پیش بینی شده است. برای داشتن خط کش در برنامه کافیست به منوی View رفته و گزینه Show Rulers را فعال کنید.

2 - 3 - 2 سایر نوار ابزارها Other ToolBar :

گزینه Other ToolBar دارای زیر گزینه های زیادی می باشد که با انتخاب هر کدام یک نوار ابزار خاص آشکار می شود. زیر گزینه های این گزینه شامل کلیدهای نوار ابزار اصلی می باشد. به عنوان مثال با انتخاب زیر گزینه Amino Acids پنجره ای که شامل ساختارهای آمینو اسیدها می باشد باز می شود. ساختارهای موجود در این پنجره همان ساختارهای موجود در زیر گزینه Amino Acids از کلید Templates از نوار ابزار می باشد. تصویر زیر همین نوار ابزار را نشان می دهد.



شکل 7 - 2

3-3-2 تغییر نمای صفحه :

برای تغییر نمای صفحه می توانید از گزینه های قسمت انتهایی منوی View استفاده کرد. این گزینه ها شامل: Actual Size , Fit To Window , Magnify , Recluce می باشند که جهت تغییر نمای صفحه می توان از آنها استفاده کرد.

4-3-2 ایجاد خطوط مشبک در صفحه Show Crosshair :

در صورتی که نیاز به ایجاد خطوط مشبک در صفحه داشتید می توانید جهت ایجاد آنها از منوی View گزینه Show Crosshair یا کلید ترکیبی Ctrl + H استفاده کنید.

4-2-2 منوی Object :

منوی Object دارای پنج قسمت می باشد که هر قسمت دارای گزینه های متنوعی می باشد. که برخی از آنها را در این بخش و برخی دیگر را در فصل بعد شرح خواهم داد.

1-4-2 گزینه Add Frame :

برای ایجاد پرانتز، براکت، آکولاد و ... می توان از منوی Object گزینه Add Frame زیر گزینه مورد نظر را انتخاب کنید. همچنین می توان با انتخاب ساختار مورد نظر و راست کلیک بر روی آن از منوی باز شده گزینه Add Frame را انتخاب کنید.

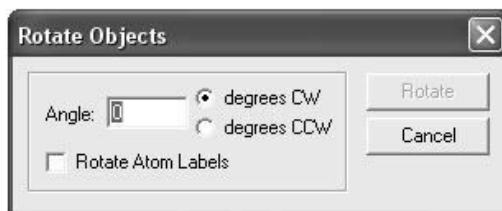
2-4-2 متمرکز کردن ساختار در مرکز صفحه :

برای این کار کافیست ساختار مورد نظر را انتخاب کرده سپس از منوی Object گزینه Center on Page را انتخاب کنید. با این کار ساختار انتخابی در مرکز صفحه قرار می گیرد.

3-4-2 چرخاندن ساختار Rotate :

چنانچه بخواهیم ساختاری را تحت زاویه دلخواه بچرخانیم تنها کافیست آن را انتخاب کرده سپس از منوی Object گزینه Rotate را انتخاب کرده یا کلید ترکیبی Ctrl + R را فشار دهید. با این کار پنجره مربوط باز شده که در آن می توان زاویه چرخش و جهت آنرا تعیین کرد، سپس کلید Rotate را بزنید. روش دیگر اینست که ساختار مورد نظر را انتخاب کرده و روی آن راست کلیک کرده و از منوی باز شده گزینه Rotate را انتخاب کنید.

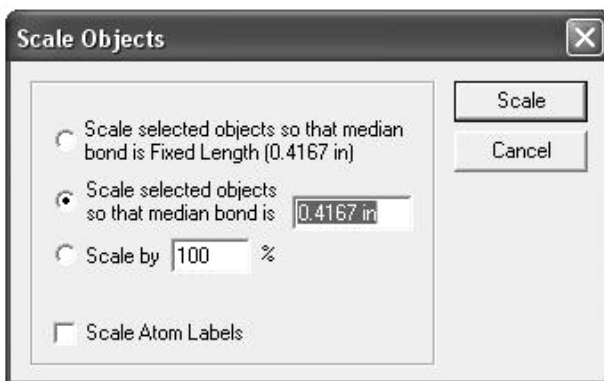
همچنین اگر قصد دارید یک اتم یا گروه عاملی را تحت زاویه معینی بچرخانید کافیست آنرا انتخاب کرده و گزینه Rotate Atom Labels را انتخاب کرده و در پنجره مربوط گزینه Rotate Atom Labels را فعال کنید.



شکل 8 - 2

4-4-2 مقیاس گذاشتن برای افزایش اندازه ساختار :

برای این کار ساختار مورد نظر را انتخاب کرده سپس از منوی Object گزینه Scale را انتخاب کرده یا کلید ترکیبی Ctrl + K را فشار داده تا پنجره Scale Object باز شده با استفاده از گزینه های این پنجره می توانید اندازه ساختار را ثابت کنید، یا براساس اینچ و یا بر اساس درصد آن راقیاس گذاری کنید که با انتخاب هر کدام و تغییر عدد آن می توانید اندازه ساختار مورد نظر را متناسب با مقیاس انتخابی بزرگ یا کوچک کنید.



شکل 9-2

5-4-2 رسم ساختار در اندازه ثابت :

چنانچه گزینه Fixed Lengths از منوی Object را فعال کرده باشید ساختارها تحت یک اندازه تعریف شده رسم خواهند شد. چنانچه گزینه Fixed Lengths فعال نباشد می توانید ترکیب را با اندازه دلخواه رسم

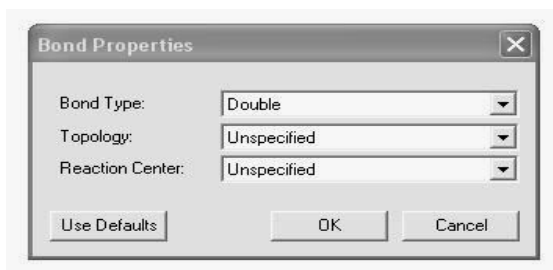
کنید چنانچه این گزینه فعال باشد ساختارها در یک اندازه پیش فرض رسم خواهد شد.

5 - 2 منوی Structure :

این منو شامل گزینه های کاربردی زیادی می باشد. از جمله می توان به قسمت اول این منو که شامل گزینه هایی جهت بیان خواص ترکیبات، پیوندها و می باشد اشاره کرد. همچنین در قسمت آخر این منو گزینه هایی جهت تبدیل ساختار به نام آن و یا برعکس وجود دارد. در اینجا با برخی از این گزینه ها آشنا می شوید و سایر گزینه ها را در فصل بعد توضیح خواهیم داد.

1 - 5 - 2 بیان ویژگی های پیوند Band Properties :

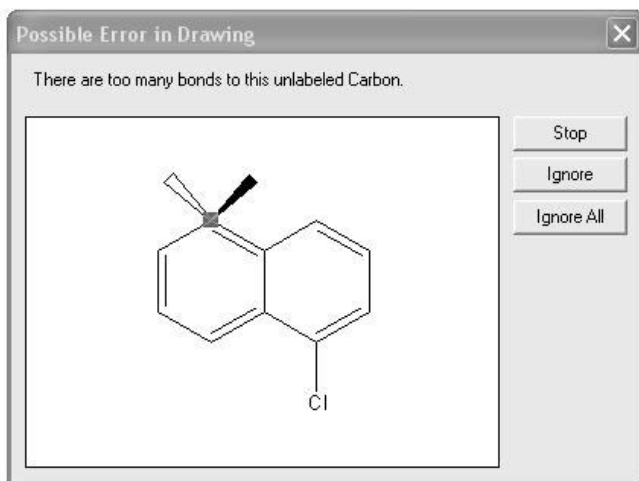
برای بیان ویژگی های پیوند می توانید پیوند مورد نظر را انتخاب کرده سپس از منوی Structure گزینه Band Properties را انتخاب کرده سپس از پنجره باز شده ویژگی های پیوندهای انتخابی را تعیین کنید و کلید Ok را فشار دهید تا ویژگی های پیوند در کنار آن درج شود. پنجره باز شده دارای سه کلید کشویی می باشد که با استفاده از آنها نوع، موقعیت و واکنش پیوند را می توان مشخص کرد.



شکل 10 - 2

2-5-2 بررسی درستی ساختار رسم شده :

برای این کار ساختاری را که رسم کردید، انتخاب کنید و سپس از منوی Structure گزینه Check Structure را انتخاب کنید. در صورت عدم وجود مشکل در ساختار رسم شده، یک پیام حاوی این مطلب که خطایی یافت نشده به شما داده می شود. اما در صورتی که مشکلی در ساختار رسم شده وجود داشته پنجره Possible Error in Drawing باز شده و محل خطا در ساختار را نشان می دهد. این پنجره دارای سه قسمت می باشد. قسمت اول به بیان خطای موجود در ساختار می پردازد. قسمت دوم شامل ساختار رسم شده به همراه قسمت های مشخص شده از ساختار که مشکل دارد، می باشد. قسمت سوم کلیدهایی می باشد که می توان با استفاده از آنها از یک خطا یا کل خطاهای ساختاری چشم پوشی کرد یا آنها را اصلاح کرد.



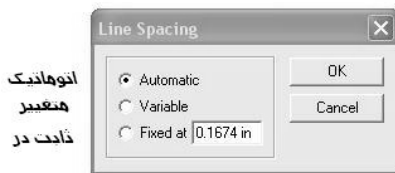
شکل 11 - 2

6-2 خطوط منحنی و منوی Curves :

جهت اعمال تغییرات می توانید از گزینه های این منو استفاده کنید. این منو ابزارهای متنوعی در جهت کار با منحنی ها در اختیار شما قرار می دهد که از آن جمله می توان به این موارد اشاره کرد: گزینه Bold که در جهت ضخیم کردن منحنی های انتخابی می توانید از آن استفاده کنید. گزینه Filled که می توانید در جهت پر کردن منحنی ها از آن استفاده کرد. گزینه Dashed هم جهت خط چین کردن منحنی ها مورد استفاده قرار می گیرد.

7-2 منوی Text :

از گزینه های این منو برای تنظیمات مربوط به متن ها، فرمول ها و ... استفاده می شود. این تنظیمات شامل فونت، اندازه، نوع متن، فاصله خطوط و ... می باشد. به طور کلی این منو دارای سه قسمت می باشد که در قسمت اول آن فونت، اندازه و نوع متن را معین می کند. قسمت دوم شامل گزینه هایی برای تنظیم قرار گرفتن متن در سند می باشد، که می توان با استفاده از این گزینه ها متن را به سمت راست، چپ، یا وسط صفحه قرار داد. گزینه های قسمت اول و دوم در نوار ابزار نگارش نیز موجود است. قسمت سوم آن شامل گزینه Line Spacing می باشد که با استفاده از آن می توان فاصله خطوط را به سه صورت اتوماتیک، ثابت در مقدار معین یا متغیر تنظیم کرد.

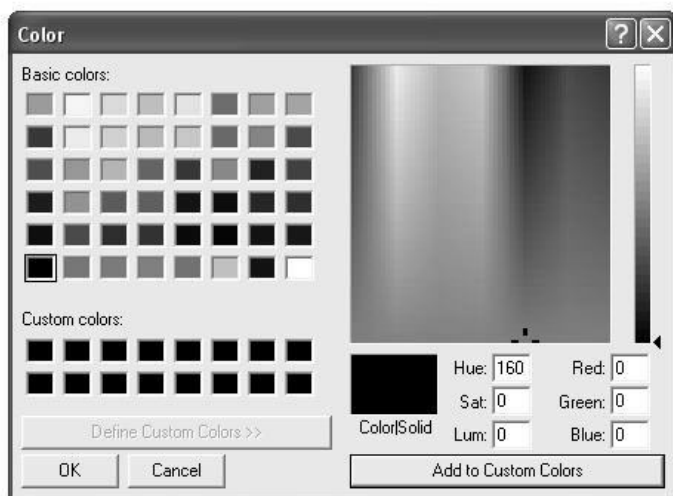


شکل 12 - 2

8-2 تنظیمات رنگ و منوی Color :

همان طور که در توضیح منوی File گفته شد تنظیمات کامل رنگ ها در گزینه Document Settings سربرگ Colors موجود است. اما می توان برخی از تغییرات را از منوی Color انجام داد. از جمله می توان به تغییر رنگ قسمت های مورد نظر از رنگ های موجود در این منو استفاده کرد.

همچنین در انتهای این منو گزینه Other موجود می باشد که با انتخاب آن پنجره Color گشوده خواهد شد. با استفاده از این پنجره می توانید به طیف وسیعی از رنگ ها دسترسی پیدا کنید. همچنین با کلیک بر روی Define Custom Color می توانید رنگ دلخواه خود را برگزینید. می توانید با استفاده از گزینه Add Custom Color رنگ مورد نظر را به پنجره باز شده از گزینه Other اضافه کرد.



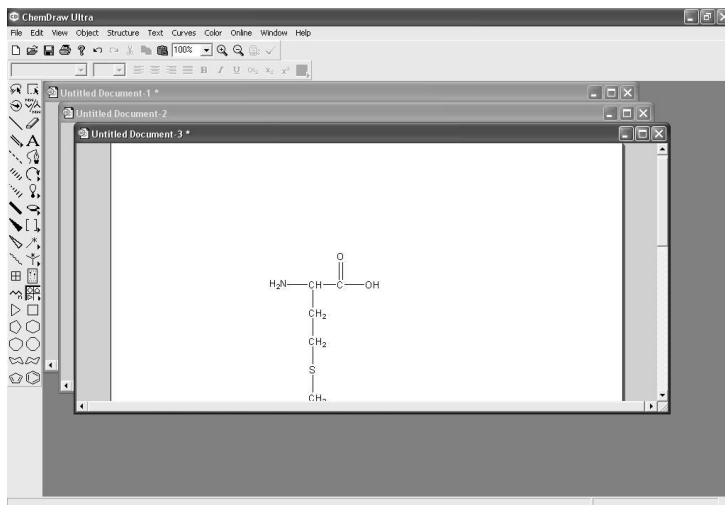
شکل 13-2

9- 2 منوی Online :

همان طور که از نام این منو بر می آید گزینه های آن در صورت اتصال به اینترنت می تواند مورد استفاده قرار گیرد. با استفاده از گزینه های این منو می توان در Web به جستجو درباره مطالب مورد نظر پرداخت.

10- 2 منوی Window :

گزینه های این منو هنگام کار همزمان با دو یا چند سند مورد استفاده قرار می گیرد و با استفاده از گزینه های آن می توان پنجره ها را به صورت آبشاری، چیدمان عمودی، چیدمان افقی یا بر اساس آیکون ها مرتب کرد. به عنوان مثال در شکل زیر پنجره ها به صورت آبشاری مرتب شده اند.



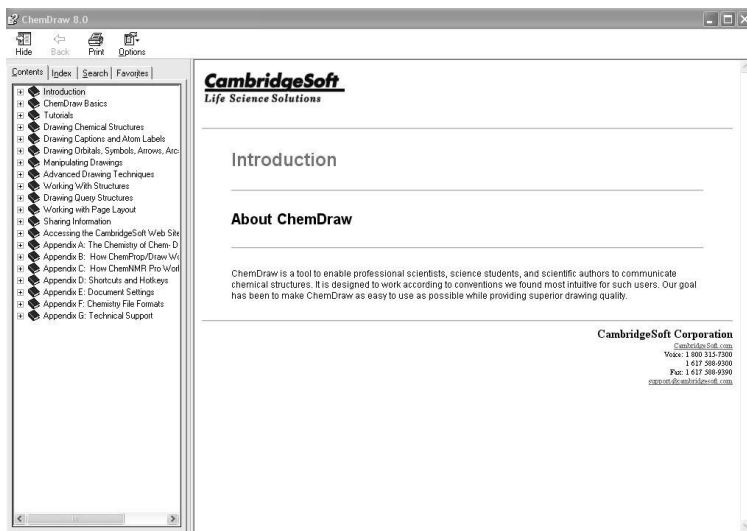
شکل 14- 2

11 - 2 منوی Help :

از مفیدترین منوهای برنامه Chem Drawing می توان به منوی Help اشاره کرد. در این منو گزینه های مفیدی جهت کمک به کاربران وجود دارد که از آن جمله می توان به Contents و Help Mode اشاره کرد.

1 - 11 - 2 دفترچه راهنما

گزینه Contents برای شما دفترچه راهنما Chem Drawing را می آورد که می توانید با مطالعه آن آشنایی بیشتر با امکانات نرم افزار Chem Drawing پیدا کنید.



شکل 15 - 2

2 - 11 - 2 گزینه Help Mode :

این گزینه می تواند به سوالات شما به صورت موردی پاسخ دهد. برای این کار کافیست گزینه Help Mode را از منوی Help انتخاب کرده یا کلید ترکیبی $\text{Shift} + \text{F}_1$ را زده با این کار در کنار آیکون موس یک علامت ؟ ظاهر شده حال با کلیک بر روی قسمت مورد سوال می توانید از اطلاعات دفترچه راهنما در آن مورد بهرمنند شوید.

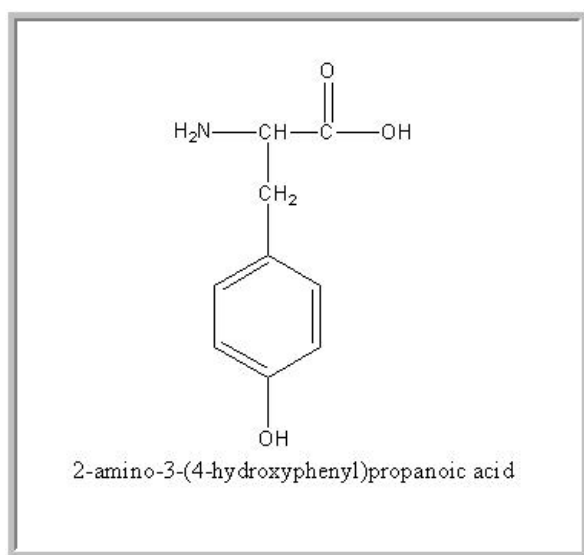
ازجمله گزینه های دیگر منوی Help می توان به گزینه Shortcuts and Hotkeys اشاره کرد که به شما لیستی از کلیدهای میانبر و کار آنها را نشان می دهد.

فصل سوم

مثال های کاربردی

1 - 3 نام گذاری ترکیبات :

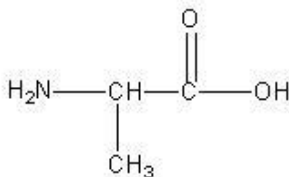
چنانچه بخواهید با در دست داشتن ساختار به نام آن ملکول دست پیدا کنید کافیست ساختار مورد نظر را انتخاب و از منوی Structure گزینه Convert Structure to Name را انتخاب کنید. با این کار شما نام آیوپاک ترکیب مورد نظر را بدست می آورید. به عنوان مثال به ترکیب زیر توجه کنید که نام آن از همین روش بدست آمده است.



شکل 1 - 3

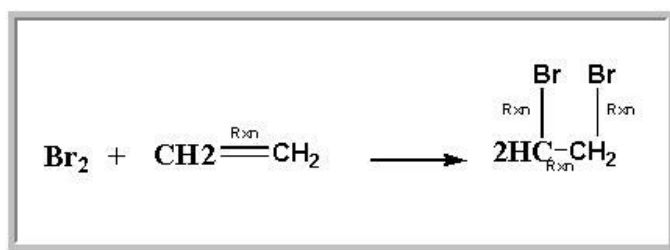
2-3 تبدیل نام ترکیب به ساختار آن :

فرض کنید تنها نام ترکیب را می دانید و می خواهید به ساختار آن پی ببرید. بدین منظور میبایست ابتدا با استفاده از کلید Text نام ترکیب را تایپ نموده و سپس آن را انتخاب نمایید آنگاه از منوی Structure گزینه Convert Name to Structure را انتخاب کنید. مانند ترکیب 2-aminopropanoic acid



3-3 نمایش محل اتصال دو واکنش دهنده :

اکنون فرض کنید می خواهید به محل اتصال دو واکنشگر در محصول پی ببرید. بدین منظور می بایست ابتدا واکنش را نوشته و آن را انتخاب کنید، سپس وارد منوی Structure شده و گزینه Map Reaction Atoms را انتخاب کنید، با این کار محل اتصال دو واکنشگر به وسیله Rxn نشان داده می شود. به عنوان مثال واکنش بروم دار کردن اتیلن را در نظر بگیرید.



شکل 3-3

5-3 جدول تناوبی عناصر :

با استفاده از گزینه Show Periodic Table Window در منوی View می توانید جدول تناوبی کاملی را در اختیار داشته باشید. با فعال کردن این گزینه پنجره Periodic Table گشوده می گردد.

Periodic Table

H

Li

Be

6

Carbon

B

C

N

O

F

Ne

Na

Mg

Al

Si

P

S

Cl

Ar

K

Ca

Sc

Ti

V

Cr

Mn

Fe

Co

Ni

Cu

Zn

Ga

Ge

As

Se

Br

Kr

Rb

Sr

Y

Zr

Nb

Mo

Tc

Ru

Rh

Pd

Ag

Cd

In

Sn

Sb

Te

I

Xe

Cs

Ba

La

Hf

Ta

W

Re

Os

Ir

Pt

Au

Hg

Tl

Pb

Bi

Po

At

Rn

Fr

Ra

Ac

Rf

Db

Sg

Bh

Hs

Mt

Ce

Pr

Nd

Pm

Sm

Eu

Gd

Tb

Dy

Ho

Er

Tm

Yb

Lu

Th

Pa

U

Np

Pu

Am

Cm

Bk

Cf

Es

Fm

Md

No

Lr

<<

Atomic weight:

12.0107

Natural isotopes

12 (98.93), 13 (1.07)

Common valences:

4

Melting point (C):

3527

Boiling point (C):

4000

Density (g/cc):

2.267

Electronegativity (Pauling):

2.55

Ionization potential (kJ/mol):

1086.5

Atomic radius (pm):

71

Discoverer:

Prehistoric

شکل 4-3

این پنجره شامل دو قسمت است که توسط یک کلید می توان بخش دیگر که شامل اطلاعات تکمیلی هر عنصر می باشد را مشاهده کنید. بعلاوه با

کلیک کردن بر روی هر عنصر و سپس کلیک بر روی صفحه اصلی نماد آن عنصر بر روی صفحه ظاهر می گردد.

6 - 3 یکسان سازی فاصله بین ساختارها :

جهت یکسان سازی فاصله ساختارها می توانید از گزینه Distribute از منوی Object استفاده نمایید. برای این کار ساختارهای مورد نظر را انتخاب کنید و سپس به منوی Object رفته و از گزینه Distribute ، برای یکسان سازی فاصله افقی ساختارها Horizontally و برای یکسان سازی فاصله عمودی ساختارها Vertically را انتخاب کنید.

7 - 3 متصل کردن دو ساختار شیمیایی :

جهت اتصال دو ساختار شیمیایی به یکدیگر می توانید از گزینه Join در منوی Object استفاده کنید. جهت اتصال دو ساختار کافیت ابتدا محل اتصال دو ساختار را انتخاب کرده و سپس از منوی Object گزینه Join را انتخاب کرده در نتیجه دو ساختار به هم متصل می شوند.

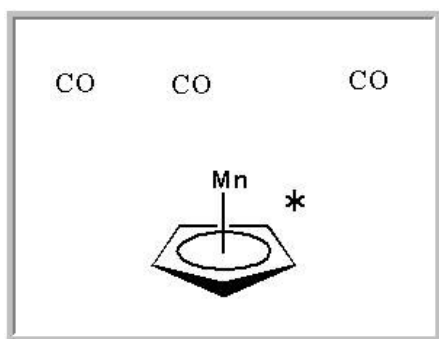
8 - 3 درج فرمول شیمیایی یک ترکیب :

جهت درج فرمول شیمیایی ترکیبات کافیت از منوی View گزینه Show Style ToolBar را فعال کنید. اکنون نواری ظاهر می گردد با انتخاب دکمه Text که با حرف A در نوار ابزار اصلی مشخص است پنجره ای در صفحه ایجاد می گردد که می توانید در آن فرمول مورد نظر را وارد کنید.

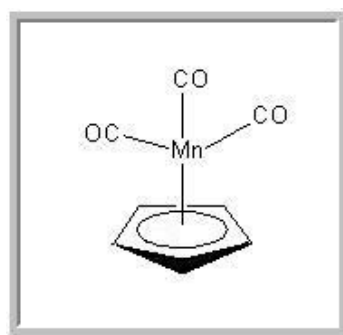
به عنوان مثال برومو متان را در نظر بگیرید، در پنجره باز شده فرمول آن یعنی CH_3Br را تایپ کنید توجه داشته باشید که همانند جدول تناوبی حروف اول مربوط به هر عنصر را یعنی حروف C , H , B را باید بزرگ باشند و برای نوشتن زیروند در فرمول دکمه Formula در نوار ابزار Style ToolBar را فشار دهید.

9-3 روش رسم کمپلکس های آلی فلزی :

همواره در رسم ساختارها نیاز به مراتب چندگانه وجود خواهد داشت. به عنوان مثال در کمپلکس های آلی فلزی چنین مشکلی به چشم می خورد. نرم افزار Chem Draw با قرار دادن گزینه Add Multi-Center Attachment در منوی Structure به رفع این مشکل کمک کرده است. برای این کار کافیست اتمی که نیاز به مراتب چندگانه دارد، که معمولاً اتم مرکزی در کمپلکس های آلی فلزی می باشد را انتخاب کنید سپس گزینه Add Multi-Center Attachment را از منوی Structure انتخاب کرده که با این کار علامت * در صفحه ظاهر می شود که باید آنرا کشیده و روی اتم مورد نظر قرار بدهید با این کار اتم مورد نظر به مراتب چندگانه دست پیدا می کند. به عنوان مثال به ترکیبی که در تصاویر زیر آمده است توجه کنید.



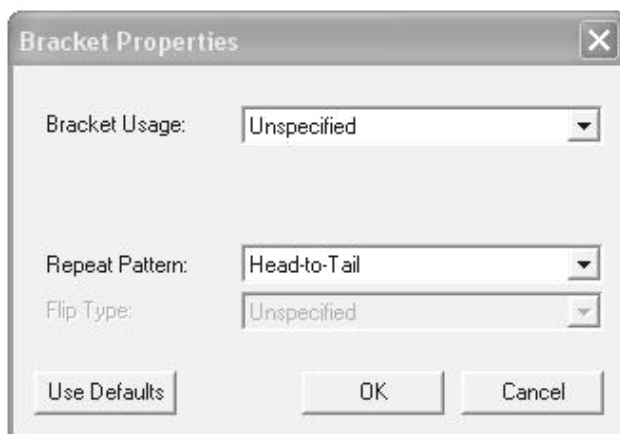
شکل 3-5



شکل 3-6

10-3 نمایش نوع پلیمر :

به کمک گزینه Bracket Properties از منوی Structure می توانید مشخصات پلیمر داخل کروشه را مشخص کنید. با انتخاب این گزینه پنجره Bracket Properties باز می شود که در قسمت Repeat Pattern می توانید نوع آرایش فضایی پلیمر را مشخص کنید.



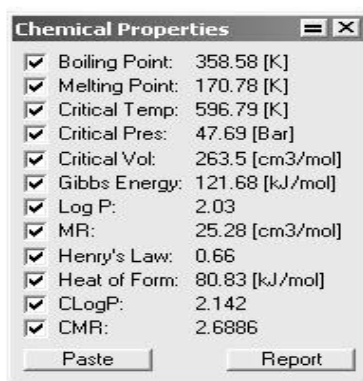
شکل 3-7

11 - 3 نشان دادن فرمول بسته ساختار :

یکی دیگر از امکانات نرم افزار Chem Draw امکان تبدیل ساختار گسترده به فرمول بسته آن می باشد. بدین منظور پس از رسم ساختار گسترده وارد منوی Edit شده و از گزینه کپی، زیر گزینه SMILES را انتخاب کنید ، سپس گزینه Paste را انتخاب کرده با این کار فرمول بسته در صفحه ظاهر خواهد شد.

12 - 3 نشان دادن دمای ذوب و جوش یک ترکیب :

گزینه Show Chemical Properties Window در منوی View امکان مشاهده خواص ترکیب مورد نظر را به شما می دهد. برای این منظور با انتخاب گزینه Show Chemical Properties Window پنجره Chemical Properties در صفحه ظاهر می گردد که شامل دو کلید می باشد. کلید Paste جهت درجه اطلاعات موجود در پنجره و کلید Report برای ارائه گزارش کاملی از خواص ترکیب مورد نظر می باشد.



شکل 8 - 3

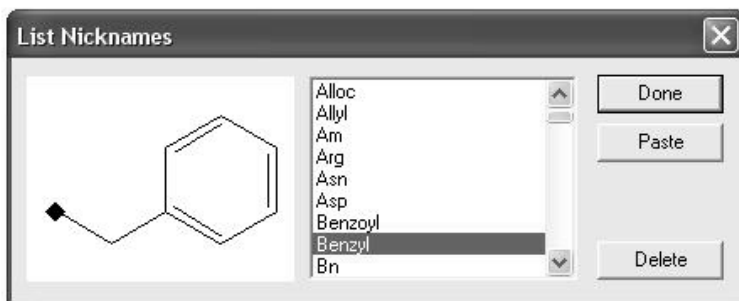
به عنوان مثال ترکیب بنزن به همراه اطلاعات شیمیایی مربوط به آن را در شکل زیر مشاهده کنید.



Boiling Point: 358.58 [K]
Melting Point: 170.78 [K]
Critical Temp: 596.79 [K]
Critical Pres: 47.69 [Bar]
Critical Vol: 263.5 [cm³/mol]
Gibbs Energy: 121.68 [kJ/mol]
Log P: 2.03
MR: 25.28 [cm³/mol]
Henry's Law: 0.66
Heat of Form: 80.83 [kJ/mol]
CLogP: 2.142
CMR: 2.6886

13 - 3 نام های مستعار ترکیبات :

گزینه List Nicknames در منوی File شامل نام های مستعار بسیاری از ترکیبات می باشد که می توانید به جای تایپ نام ترکیب مستقیماً از این گزینه استفاده کنید. با انتخاب این گزینه پنجره List Nicknames ظاهر می گردد که شامل سه قسمت است. قسمت اول از سمت چپ ساختار ترکیب مورد نظر، قسمت وسط نام مستعار ترکیبات و قسمت سوم کلیدهای مربوط به اعمال تغییرات بر روی ترکیبات را در اختیار شما می گذارد.

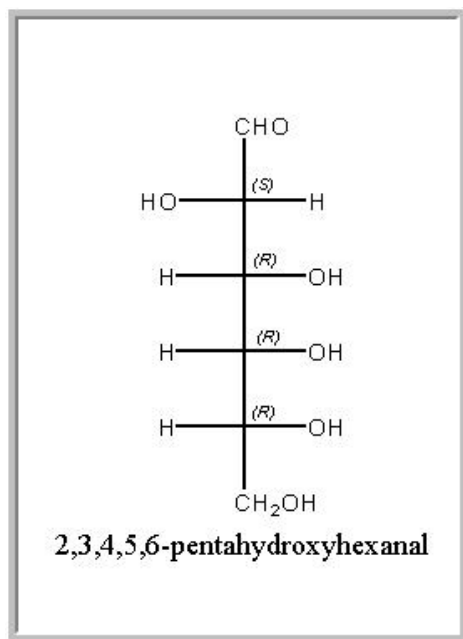


شکل 9 - 3

به عنوان نمونه به جای اینکه نام فنیل را در صفحه تایپ کنید می توانید در قسمت میانی از پنجره List Nicknames نام مستعار آن یعنی Ph را برگزینید و کلید Paste را فشار دهید تا فنیل در صفحه ظاهر گردد. برای تبدیل نام مستعار به ساختار آن می توانید به منوی Structure رفته و گزینه Expand Label را انتخاب کنید تا نام مستعار به ساختار تبدیل شود.

14 - 3 نمایش پیکربندی فضایی ترکیبات :

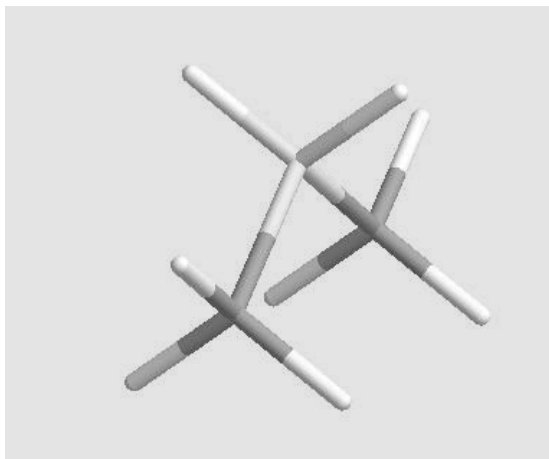
جهت مشاهده ساختار فضایی یا همان پیکربندی (R , S) می توانید از منوی Object گزینه Show Stereo Chemistry را انتخاب کنید. با این کار در صورت وجود مرکز کایرال در ساختار رسم شده پیکربندی آن با حروف R , S تعیین می گردد. به عنوان مثال به ترکیب زیر که دارای چهار مرکز فعال نوری می باشد توجه کنید.



شکل 10 - 3

15 - 3 نمایش ساختار سه بعدی ترکیبات :

جهت مشاهده ساختار سه بعدی ترکیبات در صفحه می توانید از گزینه Get 3D Model از منوی Edit استفاده کنید. با این کار تصویر سه بعدی از ساختار مورد نظر در صفحه ایجاد می شود که با دوبار کلیک بر روی آن به پنجره برنامه Chem 3D می روید. به عنوان مثال تصویر سه بعدی ملکول پروپان در محیط برنامه Chem 3D در زیر آمده است.

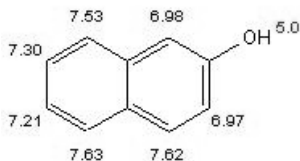


شکل 11 - 3

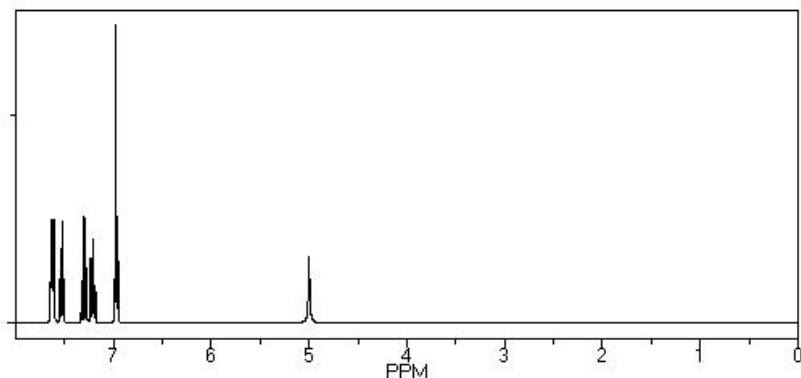
16 - 3 نمایش طیف $^{13}\text{C-NMR}$ و HNMR ترکیبات :

یکی از کاربردی ترین امکانات نرم افزار Chem Draw امکان گزارش طیف HNMR و $^{13}\text{C-NMR}$ ترکیبات می باشد. برای مشاهده طیف HNMR ترکیب مورد نظر کافیست آنرا انتخاب کرده و وارد منوی Structure شده، گزینه Predict 1H-NMR Shift را انتخاب کنید. با این عمل طیف HNMR ترکیب قابل مشاهده خواهد بود. برای مشاهده طیف $^{13}\text{C-NMR}$ ترکیب مورد نظر گزینه Predict $^{13}\text{C-NMR}$ Shift را از همان منو انتخاب کنید. در شکل های زیر طیف HNMR و $^{13}\text{C-NMR}$ β نفتول آمده است .

ChemNMR H-1 Estimation



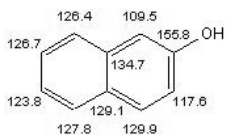
Estimation Quality: blue = good, magenta = medium, red = rough



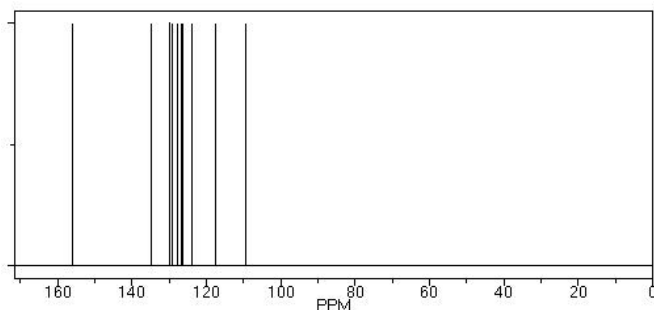
Protocol of the H-1 NMR Prediction:

Node	Shift	Base + Inc.	Comment (ppm rel. to TMS)
CH	7.62	7.67	2-naphthalene
		-0.05	1 -0
CH	6.97	7.32	2-naphthalene
		-0.35	1 -0
CH	6.98	7.67	2-naphthalene
		-0.69	1 -0
CH	7.53	7.67	2-naphthalene
		-0.14	1 -0
CH	7.30	7.32	2-naphthalene
		-0.02	1 -0
CH	7.21	7.32	2-naphthalene
		-0.11	1 -0
CH	7.63	7.67	2-naphthalene
		-0.04	1 -0
OH	5.0	5.00	aromatic C-OH

ChemNMR C-13 Estimation



Estimation Quality: blue = good, magenta = medium, red = rough



Protocol of the C-13 NMR Prediction:

Node	Shift	Base + Inc.	Comment (ppm rel. to TMS)
C	134.7	133.6	2-naphthalene
		0.9	1 -0
		0.2	general corrections
C	129.1	133.6	2-naphthalene
		-4.7	1 -0
		0.2	general corrections
CH	129.9	128.0	2-naphthalene
		1.8	1 -0
		0.1	general corrections
CH	117.6	125.9	2-naphthalene
		-8.3	1 -0
C	155.8	125.9	2-naphthalene
		27.3	1 -0
		2.6	general corrections
CH	109.5	128.0	2-naphthalene
		-18.6	1 -0
		0.1	general corrections
CH	126.4	128.0	2-naphthalene
		-1.7	1 -0
		0.1	general corrections
CH	126.7	125.9	2-naphthalene
		0.5	1 -0
		0.3	general corrections
CH	123.8	125.9	2-naphthalene
		-2.4	1 -0
		0.3	general corrections
CH	127.8	128.0	2-naphthalene
		-0.3	1 -0
		0.1	general corrections

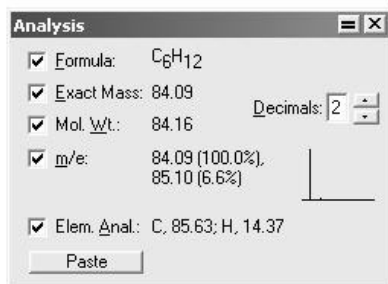
شکل 3 - 13

17 - 3 رسم ساختار گسترده با استفاده از نام مستعار آن :

چنانچه بخواهید ساختار ترکیب مورد نظر را با استفاده از نام مستعار آن رسم کنید کافیست نام مستعار ترکیب را انتخاب کرده و از منوی Structure گزینه Expand Label را برگزینید.

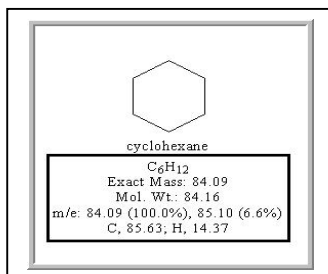
18 - 3 نمایش خصوصیات یک ترکیب :

جهت مشاهده مشخصات ترکیب مورد نظر از جمله جرم ملکولی و نسبت جرم به بار می توانید گزینه Show Analysis Window در منوی View را فعال کنید. با این کار پنجره Analysis باز می شود که می توانید با استفاده از کلید Paste اطلاعات پنجره را در زیر ساختار ترکیب درج نمایید.



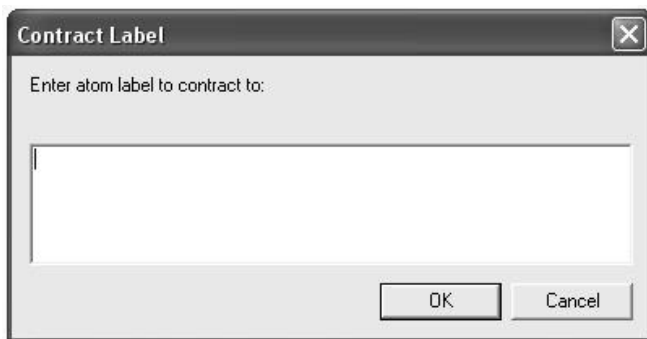
شکل 14 - 3

در شکل زیر نرمال هگزان به همراه خصوصیاتش آمده است.



19 - 3 اختصاص نام مستعار به یک ساختار :

جهت اختصاص یک نام مستعار به یک ترکیب می توانید از منوی Structure گزینه Contract Label استفاده کنید. برای این کار ساختار مورد نظر را انتخاب کرده سپس از منوی Structure گزینه Contract Label را انتخاب کنید، سپس در پنجره باز شده نام مستعار را وارد کرده و کلید Ok را فشار دهید.

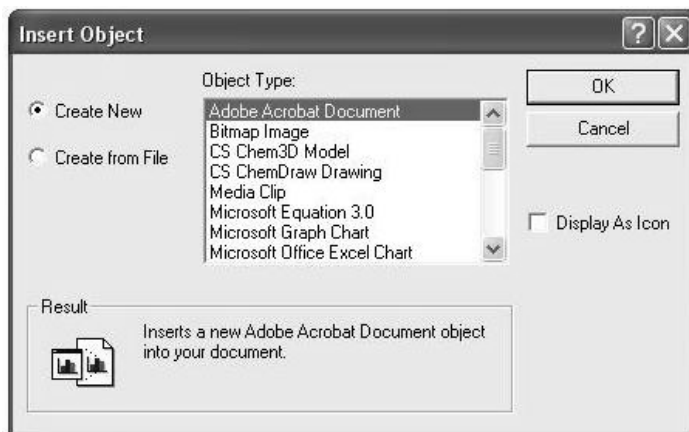


شکل 15 - 3

20 - 3 به کار بردن سایر نرم افزارها در محیط Chem Draw :

یکی دیگر از قابلیت های نرم افزار Chem Draw قابلیت استفاده از نرم افزارهای دیگر در محیط برنامه می باشد. جهت وارد کردن قابلیت های برنامه های دیگر در نرم افزار Chem Draw گزینه Object Insert از منوی Edit را انتخاب کرده که با این کار پنجره Object Insert باز

می شود، با استفاده از آن می توانید از برنامه های دیگر در محیط Chem Draw استفاده کنید. از جمله نرم افزارهای قابل استفاده در محیط Chem Draw می توان به فتوشاب ، Excel ، Word و ... اشاره کرد.



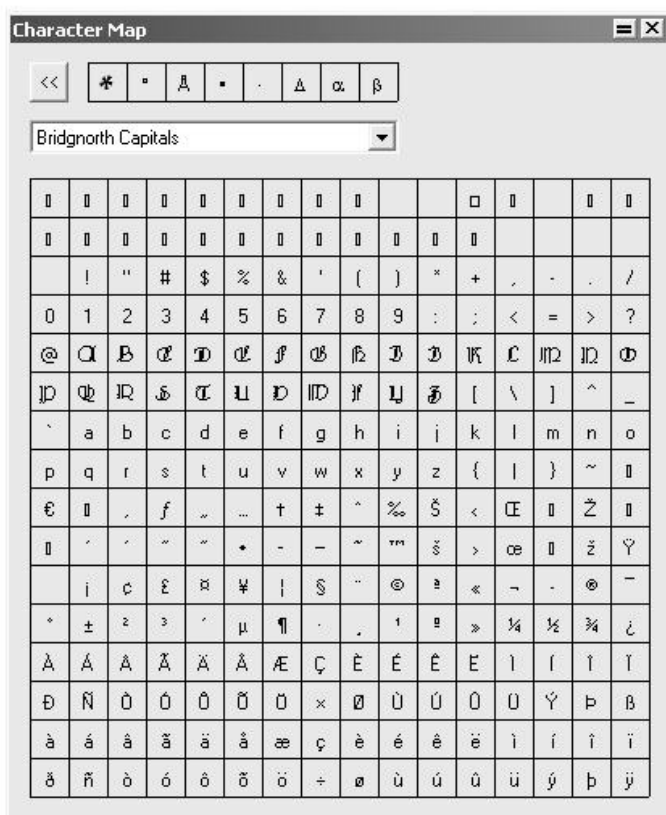
شکل 16 - 3

21 - 3 وارد کردن فایل گرافیکی :

جهت وارد کردن فایل گرافیکی از منوی Edit گزینه Insert Graphic را انتخاب کرده و آدرس فایل مورد نظر را وارد کنید. این گزینه برای وارد کردن فایل هایی با فرمت های TGF , WMF , MSM و امثال آن مورد استفاده قرار می گیرد.

22- تایپ علائم خاص ویندوز در محیط Chem Draw :

جهت فراخوانی علائم خاص ویندوز در هنگام تایپ می توانید از گزینه Show Character Map از منوی View استفاده کنید. با این کار پنجره Character Map باز شده که از آن می توانید علائم خواص را با کلیک بر روی هر یک در سند تایپ کنید.



شکل 17 - 3