

ACD/ChemSketch

Version 10.0 para Microsoft Windows

Guía del Usuario

*Dibujando Estructuras Químicas
e Imágenes Gráficas*

Tabla de Contenidos

1. Introducción	1
1.1 Qué es ACD/ChemSketch.....	1
1.2 Modulos adicionales.....	1
1.3 Qué hay nuevo en la versión 5.0.....	2
1.3.1 Funciones Generales ACD/Labs.....	2
1.3.2 Funciones específicas de ChemSketch.....	3
1.4 Qué había nuevo en la versión 4.5.....	3
1.5 Acerca de esta guía.....	5
1.6 Definiciones Usadas.....	5
1.7 Versiones Demo.....	6
1.8 Version Libre.....	6
1.9 Para más Información.....	7
1.9.1 Sitio Web.....	7
1.9.2 Cómo contactarnos.....	6
1.9.3 Actualizaciones en línea —Nuevo en 5.0!.....	7
2. Bases de ACD/ChemSketch	8
2.1 Objetivos.....	8
2.2 Comenzar ACD/ChemSketch.....	8
2.3 Asociando Archivos—Nuevo en 5.0!.....	9
2.3.1 Cambio de Asociaciones de Archivos.....	9
2.4 Cambiando Directorios por defecto.....	9
2.5 Modos Estructura y Dibujo.....	10
2.5.1 Pantalla modo Estructura(Structure).....	11
2.5.2 Pantalla Modo Dibujo(Drawn).....	12
2.6 Salir de ChemSketch.....	13
3. Dibujar Estructuras Simples	14
3.1 Objetivos.....	14
3.2 Dibujar Atomos, Enlaces y Etiquetas.....	14
3.2.1 Uso de la Herramienta Dibujo Normal.....	14
3.2.2 Dobles y Triples Enlaces.....	15
3.2.3 Borrar Atomos Individualmente.....	15
3.2.4 El Comando Deshacer (Undo).....	15
3.2.5 Cambiando un Atomo.....	16
3.2.6 Uso de la Herramienta Dibujo Continuo (Draw Continuous).....	16
3.2.7 Uso del Arrastre del Ratón (Mouse Drag).....	17
3.2.8 “Depurando” la Estructua(Clean).....	17
3.2.9 Uso de las Herramientas Estereo, Coordenadas y Enlaces Indefinidos.....	17
3.2.10 Edición de Etiquetas de Atomos.....	18
3.2.11 Herramienta Dibujar Cadenas (Draw Chains).....	18
3.3 Girando Estructuras.....	19
3.4 Selección, Rotación, y Rotación 3D.....	21
3.5 Salida.....	21
3.5.1 Guardando un Archivo ChemSketch (SK2).....	21
3.5.2 Guardando una Estructura como MDL Molfile.....	22
3.5.3 Imprimir.....	22
3.5.4 Incluir la Estructura en un Documento.....	23
3.6 Limpiar la Pantalla.....	23

4. Comenzando con ACD/I-Lab	24
4.1 Objetivos	24
4.2 Resumen.....	24
4.3 Opciones de Conexión	25
4.4 Acceso	26
4.5 Realizando Calculos.....	27
4.6 Claves Demo.....	28
4.6.1 Para Obtener la Clave Demo.....	28
4.7 Registro.....	29
4.8 Activar su Cuenta I-Lab.....	31
4.9 Anotaciones	31
5. Dibujando Estructuras más Complejas	32
5.1 Objetivos	32
5.2 Uso de la Tabla de Radicales.....	32
5.3 Uso de Anillos	33
5.4 Borrar Atomos y Fragmentos.....	35
5.4.1 Borrar Varios Atomos Simultaneamente	35
5.5 Reemplazar Atomos.....	35
5.6 Hacer Dobles y Triples Enlaces.....	37
5.7 Hacer Cargas, Definir Aniones y Cationes.....	37
5.8 Cambiar Propiedades de Atomos.....	39
6. Estructuras Avanzadas , Notación SMILES, Esquemas de Reacción.....	40
6.1 Objetivos	40
6.2 Optimización 2D	40
6.2.1 Crear la Estructura de un Ciclo Alcano	40
6.2.2 Crear la Estructura de un Peptido Ciclico.....	41
6.3 Notaciones SMILES - Nuevo en 5.0!	42
6.3.1 Generando Notaciones SMILES.....	42
6.3.2 Generando Estructuras desde Notaciones SMILES.....	43
6.4 Optimización 3D.....	44
6.4.1 Crear la Estructura del Biciclo[2.2.2]octano.....	45
6.4.2 Crear la Estructura del Tripticeno.....	46
6.4.3 Crear la Estructura del Cubano.....	47
6.4.4 Crear la Estructura del Dodecahedrano ([5]Fullereno-C ₂₀).....	48
6.5 Dibujar un Esquema de Reacción	50
7. Dibujo Avanzado: Plantillas.....	52
7.1 Objetivos	52
7.2 Resumen.....	52
7.3 Tabla de Radicales.....	53
7.3.1 Crear la Estructura de Fluorescamina.....	53
7.4 Herramienta Plantilla Instantanea.....	54
7.4.1 Crear la Estructura de un Oligomero Ciclico	55
7.5 Ventana Plantilla (Template Windows).....	56
7.5.1 Crear un Fragmento de una Molecula de ADN.....	56
7.5.1.1 Dibujar un Fragmento de Cadena de Desoxiribosa-5-fosfato.....	57
7.5.1.2 Adición de Bases	58
7.6 Dibujar Biomoleculas Complejas	59
7.6.1 Crear la Estructura de β -Maltosa.....	59

7.7 Definir una Plantilla de Usuario	61
7.7.1 El Organizador de la Ventana Plantilla	61
7.7.2 Archivos de Plantilla.cfg	62
7.7.3 Plantillas disponibles	62
8. Crear Objetos Graficos	67
8.1 Objetivos	67
8.2 Dibujar un Diagrama de Energía de Reacción	67
8.2.1 Dibujar una Curva	68
8.2.2 Modificar una Curva	69
8.2.3 Dibujar los ejes X y Y	70
8.3 Dibujar Diferentes Clases de Orbitales	71
8.3.1 Dibujar un orbital-p	71
8.3.2 Dibujar un orbital-d	72
8.3.3 Dibujar un orbital tipo p	73
8.4 Dibujar un Aparato de Destilación al Vacío	74
8.4.1 Anotaciones en un Diagrama	76
8.4.1.1 Adición de Texto Capturado	76
8.4.1.2 Insertar Llamada de Salida	77
8.4.1.3 Modificar Llamadas de Salida	78
8.4.1.4 Agrupar/Desagrupar Elementos	78
8.5 Dibujar una Trenza de la cadena de ADN	79
8.6 Dibujar Lípidos y Micelas	83
8.6.1 Dibujar el lípido	83
8.7 Crear un Cartel (Poster)	85
8.8 Convertir a Adobe PDF - Nuevo en 5.0!	86
9. Trabajar con Estilos en Modo Estructura	87
9.1 Objetivos	87
9.2 Cambiar el Estilo de Estructuras	87
9.2.1 Aplicar un Estilo de Diario	88
9.2.2 Preparar una Publicación	89
9.3 Crear Su Propio Estilo	89
9.3.1 Estilo Definido de Usuario: Azúcar	90
9.3.2 Estilo Definido de Usuario: Fosfato	91
9.3.3 Estilo: Definido de Usuario Base	92
9.3.4 Estilo Definido de Usuario: Realce	93
9.4 Aplicar Estilos Existentes	94
9.5 Ajuste de un Estilo por Defecto	94
10. Trabajando con Estilos Modo Dibujo (Draw)	96
10.1 Objetivos	96
10.2 Cambiar el Estilo de un Objeto	96
10.3 Guardar un Estilo	96
10.4 Aplicar un Estilo Existente	97
10.5 Ajuste de un Estilo por Defecto	97
10.6 Manejando Estilos	98
11. Calcular Propiedades Macroscópicas	99
11.1 Resumen	99
11.2 Calcular Propiedades Macroscópicas	100
11.2.1 Comando Menu	100
11.2.2 Desplazamiento Automático de la Barra de Estado	100

11.3 Algoritmos para Calculos de Propiedades Macroscopicas.....	101
11.3.1 Volumen Molar, MV	101
11.3.2 Refractividad Molar, MR	101
11.3.3 Parachor, P_r	101
11.3.4 Densidad, d	101
11.3.5 Indice de Refracción, n	101
11.3.6 Tension Superficial, γ	102
11.3.7 Constante Dielectrica, ϵ (Permitividad).....	102
11.3.8 Polarizabilidad.....	102
11.3.9 Masa Monoisotopica, Nominal y Promedio.....	102
11.4 Correlación Estadística con Datos Experimentales.....	103
11.4.1 Predecir el Error en la Distribucion de la Refractividad Molar.....	103
11.4.2 Predecir el Error en el Volumen Molar.....	103
11.4.3 Predecir el Error en la Distribucion del Parachor.....	104
11.4.4 Predecir el Error en la Distribucion del Indice de Refraccion.....	104
11.4.5 Predecir el Error en la Distribucion de la Densidad.....	105
11.4.6 Predecir el Error en la Distribucion de la Tension Superficial.....	105
11.4.7 Estimar el Error en la Distribucion de la Constante Dielectrica (Permitividad).....	106
12. Teclas de Funciones Especiales.....	107
12.1 Objetivos.....	107
12.2 Tautómeros.....	107
12.2.1 Ejemplos.....	108
12.2.2 Errores en la Literatura Química.....	109
12.3 Diccionario.....	110
12.4 Adicionar el Nombre ACD/Libre— Nuevo en 5.0!	112
12.4.1 Limitaciones del Nombre ACD/Libre.....	113
13. Utilitarios (Goodies).....	114
13.1 Qué son los “Goodies”?.....	114
13.2 Dónde los puedo encontrar?.....	114
13.3 Utilitarios.....	114
14. Conclusion.....	117

1. Introducción

1.1 Qué es ACD/ChemSketch

ACD/ChemSketch es un software para dibujo en Química de Dibujo Avanzado en Química (Advanced Chemistry Development, Inc). designado para ser usado solo o integrado con otras aplicaciones. ChemSketch es usado para dibujar estructuras químicas, reacciones y esquemas. Puede usarse para desarrollar reportes y presentaciones.

ACD/ChemSketch tiene las siguientes capacidades:

- **Modo Estructura (Structure Mode)** para dibujar estructuras químicas y calcular sus propiedades.
- **Modo Dibujo (Draw Mode)** para texto y procesamiento de gráficos.
- **Propiedades Moleculares (Molecular Properties)** cálculos para estimación automática de:
 - * Peso formula;
 - * Composición en porcentaje;
 - * Refractividad molar;
 - * Volumen molar;
 - * parachor;
 - * índice de refracción;
 - * tensión superficial;
 - * densidad;
 - * constante dieléctrica;
 - * polarizabilidad;
 - * masa monoisotópica, nominal y promedio.

ACD/ChemSketch puede soportarse solo como un paquete de dibujo o actuar como el “referente” para otro software ACD tal como el Predictor RMN.

1.2 Módulos Adicionales

Hay partes de software ACD adicionales que están accesibles a través de la interfase ChemSketch, con un simple clic en un botón. Estas partes, se están incrementando en número con cada mejora, están disponibles como opciones adicionales y podrían considerarse como componentes separados. Por favor contáctenos o consulte nuestra página web para más detalles sobre precio y disponibilidad.

- **ChemBasic**—el lenguaje de programación especial que habilita su uso para abonados del software ACD (puede bajarse de <http://www.acdlabs.com>). ChemBasic esta disponible en nuestro sitio web. Mire el capítulo 13, “Goodies”, para más ejemplos de como ChemBasic puede usarse con ChemSketch.
- **ACD/I-Lab**—el servicio basado en internet que permite acceder instantáneamente a las bases de datos químicas y a los programas de predicción. Se puede obtener una cuenta de Interactive Lab en <http://www.acdlabs.com/ilab>. Desde la primavera del 2000, se dispuso de un demo de 15 días. ChemSketch 4.0 y posteriores pueden acceder a I-Lab

automáticamente, si se corre con un PC que tenga conexión a Internet. Refiérase al capítulo 4 para más detalles.

- **ACD/Tautomers**—chequea y genera las formas tautómeras más razonables de estructuras orgánicas (incluidas en las versiones libre y comercial de ChemSketch). Refiérase a la Sección 12.2 para más detalles.
- **ACD/Dictionary**— consulta la estructura molecular de nombres de drogas comunes. ACD/Diccionario contiene más de 85,000 nombres sistemáticos y no sistemáticos del área terapéutica usados frecuentemente como agentes químicos y biológicos. Las entradas cubren más de 200 áreas terapéuticas, y los inhibidores para más de 500 enzimas diferentes (se incluyen en la versión comercial únicamente). Refiérase a la Sección 12.3 para más detalles.
- **Nuevo! ACD/Free Name (Nombre gratis)**—genera un nombre de acuerdo a las recomendaciones de la IUPAC sobre Nomenclatura Orgánica, Bioquímica e Inorgánica. Esta herramienta se distribuye como una adición libre del ChemSketch. Refiérase a la Sección 12.4 para más detalles.

Los siguientes botones son funcionales si se compran como complemento al ACD/ChemSketch:

- **ACD/Boiling Point and Vaporization**— calcula los puntos de ebullición a cualquier presión desde 0.001 mm Hg hasta 10 atm, en muchos casos hasta ± 10 grados o mejor, para una estructura dibujada en la ventana de ChemSketch. Esta opción se describe en una guía de usuario separada *ACD/Boiling Point & Vapor Pressure Calculator*.
- **ACD/Sigma**— muestra los parámetros tipo Hammett o relacionados para diferentes grupos sustituyentes tal como se dibujan en la ventana de ChemSketch. Esta opción se describe en una guía de usuario separada *ACD/Sigma*.
- **ACD/Name to Structure**— genera la estructura molecular para el nombre de cualquier sustancia que se teclee. ACD/Name to Structure trata muchos nombres de compuestos orgánicos generales y muchos productos naturales derivados de acuerdo a las recomendaciones de la IUPAC en nomenclatura para orgánica, bioquímica e inorgánica. Esta opción se describe en una guía de usuario separada en *ACD/Name to Structure*.

1.3 Qué hay Nuevo en 5.0

Si usted es Nuevo en este software, le recomendamos que trabaje con los ejemplos descritos en los siguientes capítulos. Sin embargo, si ha comprado (o esta pensando comprar) este software como una mejora, rápidamente se hará familiar con las características básicas de ChemSketch. En esta sección se enumeran solamente las nuevas características.

1.3.1 Funciones Generales ACD/Labs

- Todo el software ACD corre como una aplicación de 32-bit sobre PCs con Sistemas Operativos Windows 95/98/NT/ME/2000, excepto para ACD/I-Lab de Intranets, Series para el SGI y Series para productos Sun Solaris.
- Todos los programas del software ACD que corren en PCs son controlados por ACD/Host el cual permite acceder a un conjunto de parámetros descargables temporizados y recargables. Todas las versiones PC del software ACD (excepto para Series PhysChem, Simulador LC y Simulador GC) incluyen una nueva característica que automáticamente detecta el archivo asociado por defecto para ciertas extensiones que son especiales para el software ACD (p.ej. .sk2, .esp, .lud). En la versión 5.0 liberada, hay una ventana ACD que contiene comandos de **Asociación de Archivos...** (menú **File**).

- Todas las versiones PC de software ACD tienen una nueva lista de comandos bajo el menú **Help: Bug Report / Feature Request**. Si usted tiene un PC con conexión a Internet, al seleccionar este comando lo llevará automáticamente a la página web de ACD para dificultades en reportes y nuevas características requeridas.
- Una nueva característica conveniente para todos los diálogos de entrada/salida en todas las ventanas de la versión 5.0 es que la caja de dialogo de **Seleccionar Archivo** pueden cambiar de tamaño (esquina de dialogo inferior derecha). Así, las manipulaciones de carpetas y archivos, como creación de nueva carpeta, limpiar escritorio y mostrar los detalles de los archivos pueden hacerse una vez que se salga de la caja de dialogo.
- ♦ Todo el software ACD para PC puede ser actualizado a través de Internet, usando la facilidad del trabajo en línea. Refiérase a la sección 1.9.3.

1.3.2 Funciones Específicas de ChemSketch

- Ahora puede escribir sus archivos ChemSketch en formato PDF, apropiado para uso con Adobe Acrobat Reader y software relacionado.
- Puede también exportar estructuras en formato Chemical Markup Language (CML).
- Convertir frases SMILES a estructuras, y convertir estructuras a SMILES. (Designaciones Estereoquímicas Excluidas.)
- La masa atómica puede ser calculada, no exactamente la masa promedio, pero si los isótopos más comunes.
- Las instrucciones en línea de Autores ha sido expandida y actualizada con la última información de sus diarios favoritos.
- Hay nuevas plantillas, y algunas mejoras de las plantillas existentes.
- Un Nuevo módulo—ACD/Nombre Gratis—esta disponible como botón sobre la barra de herramientas. Refiérase a la Sección 12.4.
- La convención rotación 3D se ha hecho idéntica a la usada por el visor ACD/3D.

1.4 Qué había en 4.5

- Los botones **Más de Reacción** y **Flechas de Reacción** están disponibles directamente en el modo Estructura. Usted no tiene que escoger el modo Dibujo para dibujar estos objetos.
- El Nuevo tabulador **Reacción** en la caja de dialogo **Preferencia** (menú **Opciones**) permite escoger varias opciones para los signos + y flechas de reacción.
- Los Objetos Gráficos (los creados en el modo Dibujo) pueden seleccionarse y moverse en el modo Estructura. Esto facilita el dibujo de reportes complejos. Para habilitar esta característica, asegúrese de escoger **Seleccionar Gráficos** en el tabulador **Estructura** de la caja de dialogo **Preferencias** (menú **Opciones**).
- La configuración Estéreo puede controlarse cuando se aplican las herramientas **Depurar** y **Girar**. Del menú **Opciones** seleccionar **Preferencias** y referirse a la parte inferior del tabulador **Estructura**.
- Pueden importarse nuevos formatos de archivos: archivos ChemDraw CDX (*.cdx) y REACCS RXN (*.rxn). Los formatos de Exportación RXN son también nuevos.
- Un modulo adicional Nuevo se puede comprar para integrarse en la ventana de ChemSketch — ACD/Name to Structure (refiérase a la Sección 1.2 para más detalles).
- La adición de ACD/I-Lab permite acceder a nuestros módulos de predicción y a varias bases de datos vía Internet. Inscríbase para una cuenta en Interactive Lab en

<http://www.acdlabs.com/ilab>. Desde la primavera del 2001, se dispone de un demo de 15 días de I-Lab. El I-Lab puede accederse automáticamente, si se dispone de un PC con conexión a Internet. Refiérase al Capítulo 4 para usar muestras de I-Lab con la interfase ChemSketch.

1.5 Acerca de esta Guía

Para empezar a usar ACD/ChemSketch en su potencia total no tiene que leer el manual, este programa es intuitivo y simple de usar. Esto es porque esta guía no provee descripciones comprensivas de todas las opciones disponibles en el programa; así que, usted puede comenzar. Después de revisar estos ejercicios, estará en capacidad de usar usted mismo el ACD/ChemSketch, sin ninguna asistencia y con máxima velocidad y eficiencia.

Usted será capaz de ver de cerca cada sección de esta guía en **forma** animada en la **películas** basadas en LotusCam®, descargables de nuestro sitio web. (Estas películas están presentes tanto en nuestro CD demo como en el CD de instalación.)

- ⇒ Esta guía de usuario se provee en forma electrónica, la cual se puede leer en los procesadores de texto disponibles comúnmente. Si no puede localizar algo específico en el índice, escriba una frase que contenga la palabra o frase buscada, o en su defecto palabras relacionadas.
- ⇒ Los pantallazos mostrados a lo largo de esta guía han sido tomados con tamaños relativamente pequeños. La pantalla por defecto es una ventana que cubre toda la pantalla. Haga clic sobre el botón minimizar  (lado superior derecho de la ventana) para obtener un área pequeña de trabajo; haga clic sobre el botón maximizar  para regresar a pantalla completa.
- ⇒ Los pantallazos han sido tomados de las últimas versiones del software. Hemos hecho cada esfuerzo para lograr que se vea el ACD/ChemSketch tal y como se muestra en la guía, pero hay algunas pequeñas discrepancias.
- ⇒ Esta guía asume que usted está familiarizado con el uso del ratón y la manipulación de Microsoft Windows.

Una vez que usted ha usado esta guía, nos gustaría su concepto. Cómo podemos mejorar la documentación para este producto?. Tenemos un pequeño cuestionario que esperamos usted complete. Todos los que respondan el dibujo formarán parte para un premio de ACD/ChemFolder (o descuento equivalente en la compra de cualquier software ACD). Por favor use MS Word 6.0 o posterior para abrir el archivo "survey.doc" o use Adobe Acrobat Reader para abrir "survey.pdf" en la documentación del CD que usted ha recibido con este software, o visite la página "Feedback" en nuestro sitio Web, <http://www.acdlabs.com/feedback/guides.html>. los ganadores del dibujo son anunciados al final de cada año calendario.

1.6 Definiciones Usadas

En este tutorial se usarán los siguientes términos para describir diferentes acciones:

- ⇒ **Puntero (Point)** significa mover el puntero del ratón  hacia un elemento.
- ⇒ **Clic (Click)** significa mover el puntero del ratón, y presionar el botón izquierdo.
- ⇒ **Clic derecho (Right-click)** significa mover el puntero del ratón hacia un elemento, y presionar el botón derecho.
- ⇒ **Doble clic (Double-click)** significa mover el puntero del ratón hacia un elemento, y rápidamente presionar dos veces el botón izquierdo.
- ⇒ **Arrastrar (Drag)** significa presionar el botón izquierdo del ratón y mantenerlo presionado mientras se mueve el ratón.

Nota En Windows el lado izquierdo del ratón se usa por defecto. Para cambiarlo al lado derecho por defecto, desde el **Panel de Control de Windows** seleccione **Mouse** y

haga los cambios que quiera. (esto también permite cambiar la velocidad y los atributos de movimiento del ratón.)

1.7 Versiones Demo

Cuando la versión demo se ejecuta, se verá un mensaje que se desplaza para informarlo que es un software ACD de Demostración. También verá este mensaje a lo largo del curso normal cuando usa el software de demostración.

Las versiones de los programas Demo de ACD/Labs tienen algunos **comandos restringidos** como Guardar, Copiar, Cortar, Pegar y características de impresión. Si usted trata de llevar a cabo una operación restringida en la versión demo, aparecerá una caja de diálogo para informarle que esa operación no está permitida.

Si desea conocer más acerca de una restricción específica en la versión completa del programa, por favor contáctenos. De todas formas, muchos de los ejercicios y ejemplos en esta guía están diseñados para que los pueda ejecutar con la versión demo del programa ACD/Labs.

1.8 Versión Libre

Desde Abril de 1999, Advanced Chemistry Development ha estado ofreciendo de forma libre el ChemSketch, a través del vínculo "Free Stuff" en nuestro sitio Web.

Importante El software libre ACD/ChemSketch puede instalarse en una carpeta separada. Esta carpeta puede contener otro software ACD libre corrientemente disponible, tal como el visor ACD/Spec, el visor ACD/CNMR, el visor ACD/HNMR, etc. pero **no debe contener ningún software ACD comprado**.

La versión libre 5.0 de ACD/ChemSketch tiene varias mejoras, comparadas con la versión anterior. Esta versión contiene más, pero no todas, las funcionalidades de la versión comercial 5.0. la siguiente tabla totaliza las diferencias entre las versiones libre y comercial del ChemSketch 5.0:

Opción	Libre	Comercial
ACD/Tautómeros	√	√
ACD/Nombre Libre	√	√
ACD/Visor 3D	√	√
ACD/I-Lab adiciones	√ (puede ser instalado separadamente ¹)	√
Instrucciones de Autores	√ (puede ser instalado separadamente)	√
Exportar a Adobe PDF		√
ACD/Diccionario		√
Soporte Técnico		√

Nota Aunque el ACD/ChemSketch libre no le permite soporte técnico, nosotros lo

¹ Resaltamos que podría ser más conveniente ofrecer todo el paquete en un solo descargable para ciertos usuarios, pero otros usuarios tienen dificultades al bajar un archivo grande. Así que nosotros los proveemos por partes.

invitamos a visitar el Nuevo grupo ChemSketch en la dirección mencionada en la próxima sección donde usted puede poner sus preguntas o compartir sugerencias.

1.9 Para más Información...

1.9.1 Sitio Web

Para ver lo último en software ACD y servicios, visite nuestro sitio web en

<http://www.acdlabs.com>

Nuestro sitio Web es accedido diariamente unas diez mil veces. Hay una razón para esto: mucho se ofrece a través de nuestro sitio Web. Ya que desde la primavera del 2001, nosotros ofrecemos la versión 4.5 de ChemSketch libre, una adición libre de ISIS 3D, ChemDraw y extensiones libres y un demo libre de 15 días de "Interactive Lab" donde usted puede realizar cálculos usando applets de java sin comprar el software. Tenemos películas basadas en Lotus Cam las cuales muestran la operación de muchos paquetes nuestros (especialmente ChemSketch) disponible para bajarse.

Estamos continuamente actualizando la información en nuestro sitio web. El sitio web le dirá qué conferencia científica puede visitar en la casilla. Puede buscar las preguntas frecuentes en la página y entrar a "conversar" en nuestro grupo de noticias, el cual puede también alcanzar mediante nuestra página web.

Si usted quiere estar informado de los últimos desarrollos en software químico de ACD, por favor asegúrese de inscribirse en el correo de nuestro sitio web:

<http://www.acdlabs.com/feedback/mailing.html>

si desea compartir o hacer parte de nuestro grupo de noticias ChemSketch, por favor acceda a:

<news://news.acdlabs.com/acd.public.chemsketch>

1.9.2 Cómo contactarnos

Se puede acceder a través de nuestro sitio web, por teléfono, fax y correo regular, pero la vía más popular para contactarnos es mediante el correo electrónico. Preguntas sobre precio, ventas, disponibilidad y cosas generales pueden dirigirse a:

info@acdlabs.com.

El Soporte técnico y científico debe ser dirigido a:

support@acdlabs.com.

Por favor díganos el software comprado, el número de la versión y fecha de emisión del producto para el cual usted nos está contactando. (Esta información está disponible al seleccionar Ayuda.). Si aplica, díganos el nombre del distribuidor a quien usted compró el software.

1.9.3 Actualizaciones en Línea—Nuevo en 5.0!

La versión 5.0 de todo el software ACD para PC contiene la capacidad de actualizar software disponible en línea. Usted necesitará el número de registro del software y una conexión a Internet desde el mismo computador donde está instalado el software. Las actualizaciones son pequeños ajustes, por ejemplo, llevando la versión 5.00 a la versión 5.01. Por favor Refiérase al documento "Actualizaciones en Línea", incluido con el resto de la documentación en su Carpeta de Documentos para mayor información, o por correo electrónico a nuestro departamento de soporte.

2. Lo Básico de ACD/ChemSketch

2.1 Objetivos

Este capítulo lo familiarizará con:

- Cómo comenzar el programa;
- Cómo instalar y cambiar las asociaciones de archivos;
- Cómo instalar los directorios por defecto;
- Las bases de la interfase ChemSketch, es decir, los modos Estructura y Dibujo; y
- Como salir de ChemSketch.

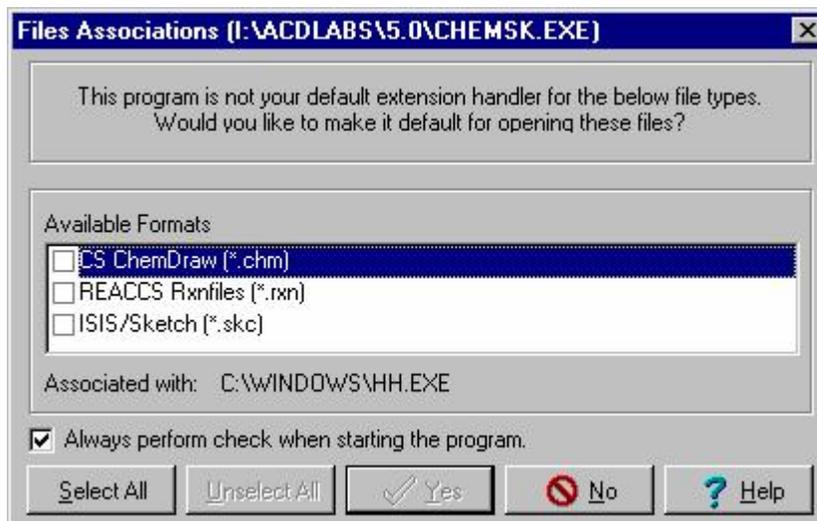
2.2 Iniciando ACD/ChemSketch

Una vez que ACD/ChemSketch ha sido instalado en su computador, siga los siguientes pasos básicos:

1. Iniciar Microsoft Windows.
2. Haga Doble-clic en el icono ChemSketch.
–○–
Desde el menú **Empezar/Correr** en Windows 95/98/2000 o la barra de tareas NT, escoja **ACD/Labs** y luego escoja el icono de ChemSketch.
–○–
Haga Doble-clic en el archivo “chemsk.exe” en la carpeta donde usted instaló todo el software ACD. Por defecto esta es ACD50.
–○–
si usted tiene otros programas ACD/Labs corriendo, desde el menú **ACD/Labs** escoja **ChemSketch**.
3. Usted debería ver una pantalla parpadeante. Si es la versión libre, usted verá la pantalla para los Productos **ACD/Labs**. Clic **OK** para cerrarla. Si desea suprimir esta caja de dialogo en los subsecuentes inicios, escoja **Ayuda (HELP)> ACD/Labs Productos...** y haga clic en **Mostrar esta pantalla al inicio (Show this Screen at Startup)**.

2.3 Instalando Asociaciones de Archivos—*Nuevo en 5.0!*

1. Si esta es la primera vez que usted comienza el programa, puede aparecer la caja de dialogo **Asociación de Archivos (File Association)**.



2. Esta caja contiene una lista seleccionable de extensiones y tipos de archivos—CS ChemDraw(*.CHM), REACCS Rxnfiles (*.RXN), ISIS/Sketch (*.SKC) y posiblemente otras—que usted puede querer abrir automáticamente con el software ACD desde ahora. Si es así, haga clic en la caja de chequeo para los formatos que quiere adicionar y luego escoja el botón **Si**.
3. si no quiere que ChemSketch abra automáticamente los archivos de la extensiones mostradas, o no esta seguro, deje las cajas en blanco y escoja el botón **No**.
4. Entonces usted verá el **Consejo del Día**, que podrá cerrarlo después de leerlo.

2.3.1 Cambiando Asociaciones de Archivos

Si usted no seleccionó los formatos, la asociación puede verse o cambiarse en cualquier tiempo escogiendo del menú **Archivo** la opción **Asociación de Archivos (File Association)**. Si seleccionó todos los formatos, entonces usted recibe un mensaje, “todos los tipos de archivo soportados están asociados con la presente versión.” En este caso, para cambiar la asociación de archivos, debe hacerlo a través de **Windows Explorer**.

1. Abra Windows Explorer, y seleccione un archivo con el que quiere asociar la extensión.
2. Tenga presionada la tecla SHIFT y haga clic con el botón derecho sobre el archivo. Desde el menú emergente, seleccione **Abrir con...**
3. Escoja la aplicación que usted quiere usar para abrir el archivo y seleccione **Siempre usar este programa...**
4. Haga Clic sobre **OK** y cierre Windows Explorer.

2.4 Cambiando Directorios por Defecto

Si usted esta corriendo una copia de ChemSketch para usuario individual, las características del directorio por defecto son igualmente refinadas.

Si tiene una copia para trabajo en red, es aconsejable cambiar el directorio por defecto en el software ACD/Labs así que el drive por defecto para guardar los trabajos es el disco duro del usuario y no el del servidor remoto. Después de crear el acceso local para cada limitado o

ilimitado número de registros, entonces para cada instalación local:

1. En la ventana ChemSketch, desde el menú **Opciones**, escoja el comando **Preferencias**.
2. Haga clic sobre el tabulador **General**. En la parte inferior de la caja especifique el directorio que se abrirá cada vez que usted abra la caja de dialogo **Importar**, **Abrir**, **Guardar**, **Exportar** en la ventana del ChemSketch:



Nota En la caja **Privada** usted puede escoger el directorio para grabar la configuración del programa ChemSketch (por ejemplo., archivos template.cfg y qrstyles.stl).

1. Hacer clic en **OK**.

2.5 Modos Estructura y Dibujo

Cuando inicia ACD/ChemSketch, usted encuentra muchos comandos menú y botones de barras de herramientas que aparecen inactivos. Ellos se harán disponibles tan pronto como dibuje una estructura.

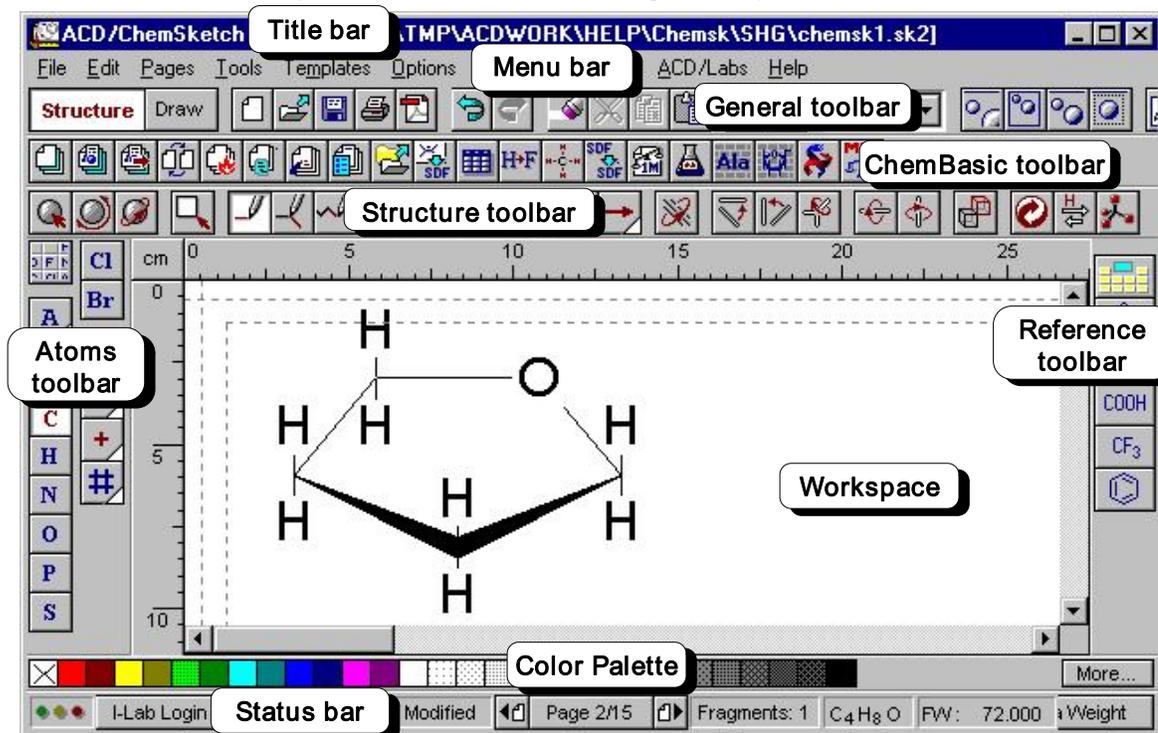
En la ventana de ChemSketch, hay dos modos, **Estructura** y **Dibujo**. Usted los escoge usando los botones en la esquina superior izquierda:



en el modo Estructura usted dibuja estructuras y esquemas de reacción mientras que el modo Dibujo le presenta herramientas para entrar texto y dibujar diferentes objetos gráficos.

2.5.1 Pantalla Modo Estructura

Abajo puede ver la pantalla habilitada del modo Estructura. Los nombres y posiciones de las barras de herramientas, pueden usarse a través de la guía completa.



La barra Titulo muestra el nombre del programa y el nombre del archivo abierto. El nombre por defecto del archivo es NONAMExx.SK2, donde 'xx' es un contador.

Barra Menú contiene una serie de palabras. Cada una vincula a una lista ('menu') de comandos relacionados para trabajar en la ventana de ChemSketch en el modo Estructura.

Barra de Herramientas General localizada al lado derecho debajo de la barra menú, incluye herramientas que están presentes en los dos modos y le ayudarán con tareas relevantes para los dos modos tal como: guardar y abrir archivos, deshacer/rehacer operaciones, copiar y pegar, acercarse y alejarse, como también insertar diferentes plantillas.

Barra de Herramientas ChemBasic localizada debajo de la barra de herramientas General es opcional y contiene utilitarios (Goodies) u otras aplicaciones ChemBasics. Para más detalles referirse al capítulo 13.

Barra de herramientas Estructura ubicada al lado derecho arriba de la zona de trabajo y solamente esta presente en el modo Estructura. Contiene herramientas para dibujar y manipular estructuras químicas.

Barra de herramientas Átomos desplazada verticalmente al lado izquierdo de la pantalla en la esquina izquierda, contiene botones que representan átomos y herramientas para cambiar propiedades de los átomos (carga, valencia, numeración, etc.).

Barra de herramientas Referencia localizada al lado derecho de la ventana, contiene la Tabla de Radicales y diferentes botones que representan radicales ya hechos que usted puede tomar de la tabla. Usted puede además acceder al Diccionario desde esta barra de herramientas.

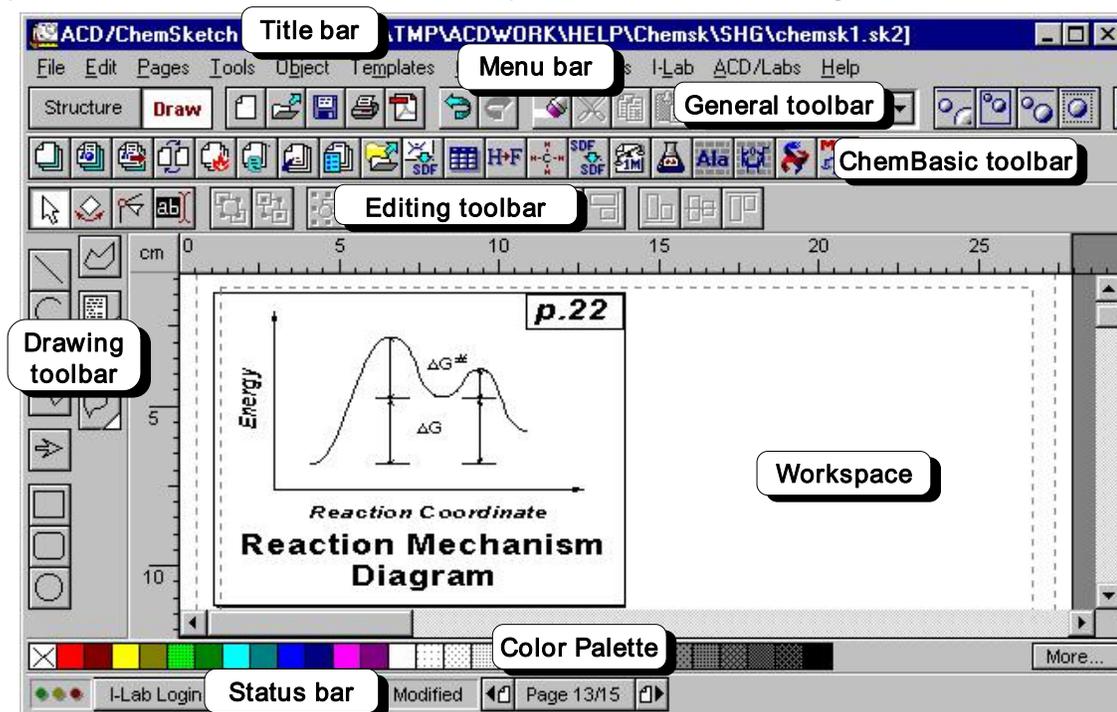
Espacio de trabajo es el área abierta en el centro donde se dibujan las estructuras. (Ejemplo mostrado.)

Paleta de Colores al final de la zona de trabajo le permite acceder rápidamente a los colores de los átomos y los enlaces en la estructura química seleccionada (presionando con el botón derecho del ratón sobre el color).

Barra de Estado contiene información que puede usarse al momento: nombre del archivo SK2 que usted está trabajando, número de fragmentos en la zona de trabajo, fórmula molecular de la estructura seleccionada y otras propiedades disponibles para esa estructura. Esta barra también contiene un botón para acceso automático a I-Lab.

2.5.2 Pantalla Modo Dibujo

Abajo puede ver la pantalla en el modo Dibujo habilitado. Se introducen los nombres y posiciones de las barras de herramientas, para ser usadas durante la guía.



Barra Título muestra el nombre del programa y el nombre del archivo activo. Por defecto el nombre del archivo es NONAMExx.SK2, donde 'xx' es un contador.

Barra Menú contiene una serie de palabras. Cada una vincula a una lista ('menu') de comandos relacionados para trabajar en el modo Dibujo de la ventana de ChemSketch.

Barra de herramientas General localizada al lado derecho debajo de la barra menú e incluye herramientas que están presentes en los dos modos y le ayudarán en las tareas generales como guardar y abrir archivos, rehacer/deshacer operaciones, copiar y pegar, alejar y acercar e insertar diferentes plantillas.

Barra de herramientas ChemBasic localizada debajo de la barra de herramientas General es opcional y contiene ayudas para otras aplicaciones ChemBasic. Para más detalles referirse al capítulo 13.

Barra de herramientas Edición ubicada debajo de la barra de herramientas General, solo está presente en el modo Dibujo, incorpora herramientas para edición y manipulación de objetos gráficos.

Barra de herramientas Dibujo desplazada verticalmente al lado izquierdo de la pantalla, contiene botones para dibujar objetos gráficos y texto.

Zona de trabajo es el área abierta en el centro donde se dibujan los objetos gráficos y se teclea texto.

Paleta de Colores en la parte inferior de la zona de trabajo, permite colorear rápidamente objetos seleccionados (haciendo clic con el botón derecho sobre los colores).

Barra de Estado contiene información que puede usarse al instante: nombre del archivo, estado del documento y número de página.

2.6 Salir de ChemSketch

Usted puede salir del programa por cualquiera de las siguientes vías:

- Haciendo clic  en la esquina superior derecha de la barra de título de cualquier ventana;
- O -
- Desde el menú **ACD/Labs** escoger el comando **Cerrar todo**. Esto cerrará todos los programas ACD abiertos uno a continuación del otro.
- O -
- seleccionar el comando **Salir** del menú **Archivo**. Esto cerrará solo el programa ACD activo.

Usted estará habilitado para salvar su trabajo en el formato de archivo apropiado, dependiendo de la ventana que esté cerrando.

3. Dibujar Estructuras Simples

3.1 Objetivos

En este capítulo se consideran las bases para el dibujo de estructuras, las cuales solo se permiten en el modo Estructura. El objeto de este capítulo es dar un panorama de las características del dibujo en química de ChemSketch. En esta sección aprenderá a:

- Dibujar átomos, enlaces (simples, dobles, triples; acufados, coordinados, indefinidos) y etiquetas;
- Girar una estructura molecular dibujada;
- seleccionar, rotar y redimensionar estructuras dibujadas;
- enviar la estructura a un archivo, documento o impresora; y
- limpiar la pantalla.

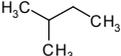
Dibujar enlaces y átomos es la actividad básica en el espacio de trabajo de ChemSketch. Asegúrese que está en el modo Estructura para las siguientes acciones:



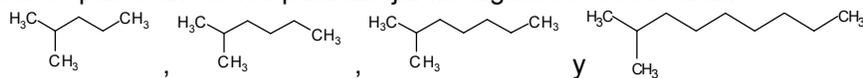
3.2 Dibujar Átomos, Enlaces y Etiquetas

3.2.1 Uso de la herramienta Dibujo Normal

La herramienta Dibujo Normal es la herramienta por defecto cuando se inicia el programa. En este modo usted puede fácilmente dibujar cadenas normales o ramificadas y remplazar los átomos dibujados con otros átomos de la Tabla Periódica de Elementos.

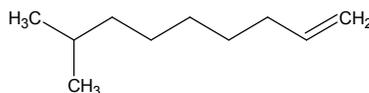
1. Asegúrese que la herramienta **Dibujo Normal**  está habilitada en la barra de herramientas Estructura y que el átomo de **Carbono**  esta seleccionado en la barra Átomos.
2. Haga Clic en un espacio vacío para dibujar CH₄
3. Haga Clic sobre el CH₄ para adicionar un grupo -CH₃, para obtener CH₃-CH₃ con una longitud de enlace estándar. Haga Clic dos veces más sobre el mismo Carbono para dibujar 
4. Haga Clic en el botón **Colocar los Enlaces Verticalmente (Set Bond Vertically)**  sobre la barra Estructura y haga clic en cualquier enlace de la estructura para rotarlo en esta orientación: 
5. Haga Clic en el botón **Dibujo Normal**  sobre la barra Estructura.
6. Haga Clic sobre el Carbono derecho para dibujar 

7. Repita los pasos anteriores para dibujar las siguientes estructuras:

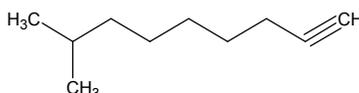


3.2.2 Dobles y Triples Enlaces

1. Sobre la última estructura dibujada, haga clic una vez en el último enlace para ubicar un doble enlace allí:



2. Haga Clic en el mismo lugar para ubicar un triple enlace:



3. Haga Clic sobre el triple enlace para hacer de Nuevo un enlace sencillo.

3.2.3 Borrado Individual de Átomos

Si ha adicionado muchos átomos, usted puede removerlos de uno en uno.

1. Haga Clic en el botón **Borrar (Delete)** .

2. Haga Clic sobre algunos átomos para practicar el borrado.

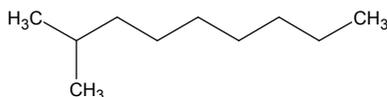
3.2.4 El Comando Deshacer

Otra importante operación es cómo “rescatar” un cambio que no deseaba haber hecho.

1. Haga Clic en el botón **Deshacer (Undo)** . Esto volverá la pantalla del ChemSketch exactamente en donde se hizo el último cambio.

Nota Tan pronto como el botón **Deshacer** es oprimido, el botón **Rehacer (Redo)** (al lado de este) se activará.

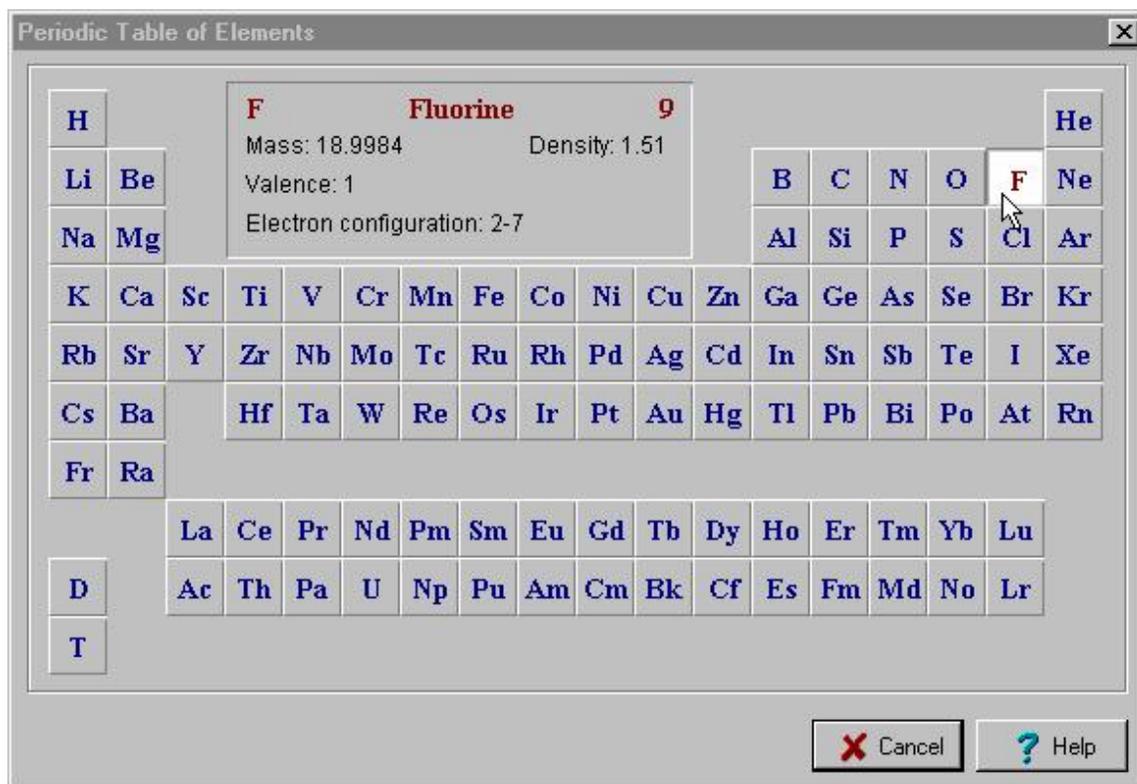
2. Haga Clic varias veces en el botón **Deshacer** hasta que retorne a la siguiente estructura:



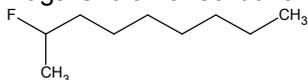
Nota El comando **Deshacer** puede repetirse hasta 50 veces. Cuando usted comienza a dibujar moléculas más complejas u objetos gráficos, se recomienda que adquiera el hábito de guardar su trabajo en un archivo después de hacer varios cambios.

3.2.5 Cambiar un Atomo

- Haga Clic en el botón **Tabla Periódica**  en la barra Atomos para abrir los **Elementos de la Tabla Periódica**:



- Haga Clic en el botón **Flúor** . Note que el botón **Flúor** ahora aparece en la barra Átomos.
- Haga Clic en el Carbono de la izquierda para remplazarlo por el átomo de Flúor:



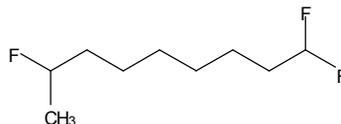
Nota Cuando se seleccionan nuevos elementos de la **Tabla Periódica de Elementos**, los correspondientes botones se adicionan automáticamente a la barra de Átomos. Para remover estos botones, haga doble clic en cualquiera de ellos o doble clic en la barra Átomos y escoja **Si**. Esta acción removerá todo excepto los botones de los átomos por defecto.

3.2.6 Uso de la Herramienta Dibujo Continuo

Cuando la herramienta Dibujo Continuo esta active, se pueden dibujar enlaces sobre el átomo resaltado. Para resaltar un átomo, haga clic en este. Este modo es muy conveniente para "generar" nuevos átomos del átomo seleccionado.

- Haga clic en el botón **Dibujo Continuo**  en la barra Estructura. Alternativamente, puede presionar el botón derecho del ratón para escoger este modo de dibujo.
- Asegúrese que el botón **Flúor**  esta seleccionado en la barra Átomos.

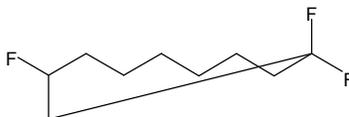
3. Haga clic en el carbono que esta más a la derecha para seleccionarlo. Haga clic otra vez para generar un flúor en el carbono seleccionado. Haga Clic dos veces sobre el mismo carbono para generar un Segundo átomo de flúor:



3.2.7 Usando el Arrastre del Ratón

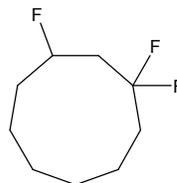
Con las dos herramientas de dibujo, **Dibujo Normal**  o **Dibujo Continuo** , arrastrar el ratón desde un átomo a otro dibuja un enlace sencillo entre ellos. Si arrastra desde un espacio vacío, se inserta un Nuevo átomo al comienzo o al final del enlace dibujado.

Con las dos herramientas activas **Dibujo Normal** o **Dibujo Continuo**, lleve el puntero del ratón desde uno de los carbonos terminales y arrástrelo hasta el otro carbono terminal para dibujar la siguiente estructura:



3.2.8 “Depurar” (Clean) la Estructura

Haga Clic en el botón **Depurar**  en la barra Estructura para estandarizar todas las longitudes de enlace y ángulos en la estructura dibujada para obtener lo siguiente:



Nota el comando **Depurar** no solo estandariza todas las longitudes de enlace sino los ángulos para hacer la estructura más agradable — hace que la estructura dibujada se cierre para hacerla químicamente correcta. Para fragmentos acíclicos, por ejemplo, ubica los enlaces cerca de los carbonos sp^2 a un ángulo de 120° y los enlaces cercanos a los carbonos sp a 180° (lineales). Si dibuja isómeros geométricos y estereo isómeros, el comando "depurar" estandariza sus longitudes de enlace y ángulos mientras retiene todos sus significados estructurales.

3.2.9 Uso de la herramienta enlaces Estereos, Coordinados e indefinidos

Usted puede dibujar una amplia variedad de enlaces, además de las conexiones “ordinarias”:

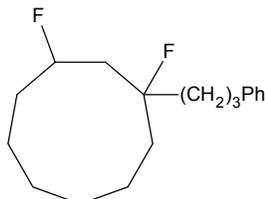
- Enlaces estereo dirigidos hacia usted ;
- Enlaces estereo dirigidos hacia atrás ;
- Enlaces coordinados ;
- Y enlaces indefinidos .

Seleccione una de estas herramientas y haga clic sobre cualquier enlace en la estructura dibujada. Haga clic repetidamente sobre un enlace estereo o coordinado para cambiar su dirección.

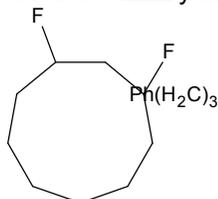
3.2.10 Editando Etiquetas de Átomos

La herramienta **Editar Etiquetas de Átomos**  le permite sustituir átomos terminales con abreviaturas cortas.

1. Haga Clic en el botón **Editar Etiquetas de Átomos** desde la barra Átomos en el átomo de flúor que esta más a la derecha de la estructura dibujada.
2. en el dialogo **Editar Etiqueta**, teclee **(CH₂)₃Ph** y haga clic en **Insertar**. Note que la etiqueta es insertada en la posición escogida y los índices se colocan automáticamente:

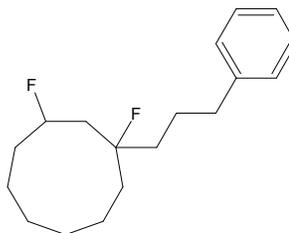


3. Seleccione la herramienta **Cambiar Posición**  y haga clic en la etiqueta para invertirla:



Importante Si usted hace clic sobre la etiqueta con la herramienta **Cambio de Posición (Change Position)** activa mientras mantiene presionada la tecla SHIFT, el punto de conexión de la etiqueta se cambiará.

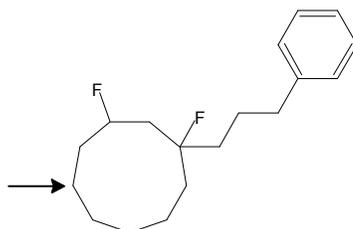
4. Con la herramienta **Editar Etiquetas de Átomos** activa haga clic sobre la abreviatura obtenida para abrir el dialogo **Editar Etiquetas** de nuevo. Entonces haga clic sobre el botón **Expandir** para obtener la siguiente estructura:



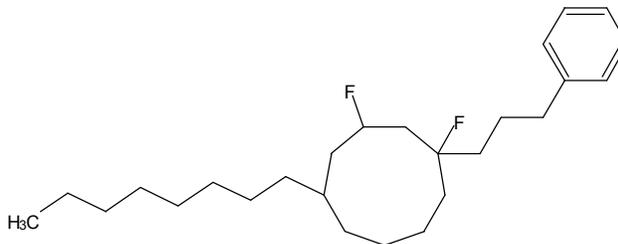
3.2.11 Herramienta Dibujar Cadenas

Usando la herramienta **Dibujar Cadenas**, usted puede fácilmente dibujar cadenas cortas o largas con un simple clic y arrastre del ratón.

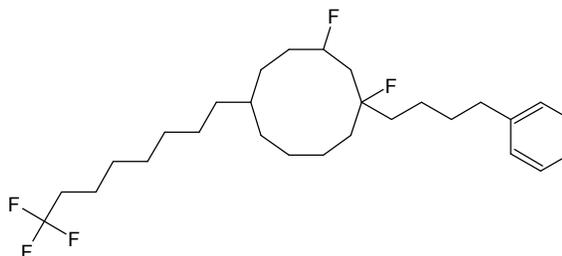
1. Haga Clic en el botón **Dibujar Cadenas**  de la barra Estructura y lleve el puntero del ratón hacia el átomo indicado por la flecha:



2. Presione el botón del ratón y arrástrelo sobre el lado izquierdo. Tan pronto como mueva el ratón desde la estructura, se crea una cadena de carbonos. Note que el contador de carbonos (C #) localizado al lado de la flecha del ratón cambia con cada carbono adicionado o removido. Continúe hasta que el contador alcance C 8, entonces libere el botón del ratón para finalizar la cadena:

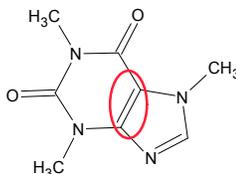


3. con la herramienta **Dibujar Cadenas** activa seleccione el botón **Flúor**  desde la barra Átomos y haga clic en el grupo CH₃ de la izquierda tres veces para generar tres átomos de flúor. Entonces haga clic en el botón **Depurar (Clean)**  en la barra Estructura para obtener la siguiente estructura:

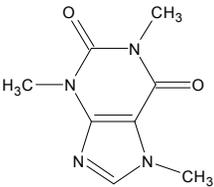


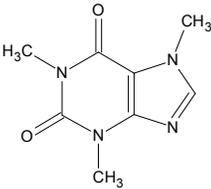
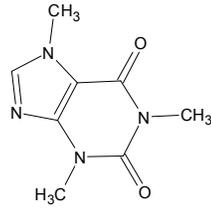
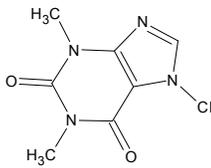
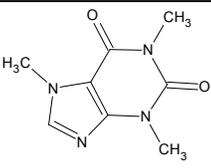
3.3 Girando Estructuras

Usted puede rotar o girar la estructura completa con un simple clic. Intente las tres primeras operaciones sobre el enlace rodeado con un círculo en la molécula de cafeína:

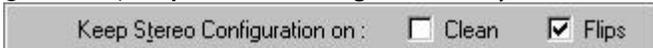


Intente las dos últimas operaciones sobre la molécula, una vez que ha sido seleccionada.

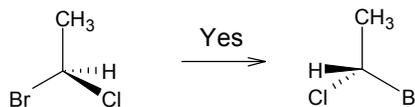
Botón	Función	Resultado
	Seleccione este botón y haga clic sobre el enlace para ubicarlo horizontalmente, rotando el resto de la estructura consecuentemente.	

Botón	Función	Resultado
	Seleccione este botón y haga clic sobre el enlace para girarlo verticalmente, rotando así el resto de la molécula.	
	Gire la estructura alrededor del enlace escogido.	
	Seleccione primero toda la molécula (o fragmento). Este botón gira la estructura o fragmento seleccionado (o si nada esta seleccionado toda la estructura dibujada) desde arriba hacia abajo.	
	Seleccione primero toda la molécula (o fragmento). Este botón gira el fragmento o la estructura seleccionada (o si no hay nada seleccionado, se toma todas las estructura dibujadas) de izquierda a derecha.	

Importante Al aplicar la herramienta **Girar** puede cambiar la configuración estereo. Para controlar esto, desde el menú **Opciones** seleccione **Preferencias** y escoja la opción **Estructura**. Al final del panel está el área de guardar estereo configuración (**Keep Stereo Configuration on**):



estos controles harán que el programa recuerde como "cierto" los arreglos 3D de la molécula. Recomendamos que se seleccione **Girar (Flips)**. En este caso, la molécula anterior es la misma que la molécula después del giro, aunque su representación ha cambiado:



Para el caso de "No", las moléculas antes y después del giro son enantiómeros:



3.4 Seleccionar, Rotar, y Rotar en 3D

Usted puede seleccionar átomos, enlaces y fragmentos por dos diferentes formas, usando la segunda fila de botones. Trate de hacerlo con las moléculas que usted ha diseñado con:

- el **Selector Lazo**  o
- el **Selector Rectángulo** .

Una vez que el o los fragmento(s) han sido seleccionados, hay tres caminos para hacer movimientos:

- **Mover** ,
- **Rotar/Redimensionar** ,
- **Rotar en 3D** ,

o usted puede realizar otras operaciones:

- **Borrar** ,
- **Optimización 3D**  o
- **Optimización 2D (o Depurar)** .

3.5 Salir

Tan pronto como usted haya dibujado una o más estructuras puede guardarlas en un archivo o imprimirlas o insertarlas en otras aplicaciones tal como MS Word, Excel, *etc.* Usted puede también usar la(s) estructura(s) dibujada(s) para intentar llevarlas a los servicios de I-Lab (referirse al Capítulo 4).

3.5.1 Guardando un archivo ChemSketch (SK2)

Permítanos guardar el documento con las estructuras creadas en las secciones previas en el formato propio de ACD,² como un archivo que llamaremos *chapter3.sk2*.

1. desde el menú **Archivo** escoja **Guardar**.
2. en la caja de dialogo que aparece, especificar el nombre del archivo y el directorio donde el archivo será ubicado. Haga clic en **OK**.

² Los detalles para el formato de archivo SK2 se encuentran en el Formato de documento disponible en <http://www.acdlabs.com/download/#misc>.

3.5.2 Salvando una Estructura como un archivo Mol de MDL

Un formato estándar compartido por muchos programas es el formato mol, desarrollado por MDL, Inc. Note que este no retiene imágenes gráficas, texto, etc. Únicamente retiene la estructura molecular.

1. Seleccione la estructura que usted quiere guardar como un archivo mol.
2. Desde el menú **Archivo** escoja el comando **Exportar...** Al final de la caja de dialogo que aparece asegúrese que se selecciona el formato **MDL Molfiles (*.mol)**:



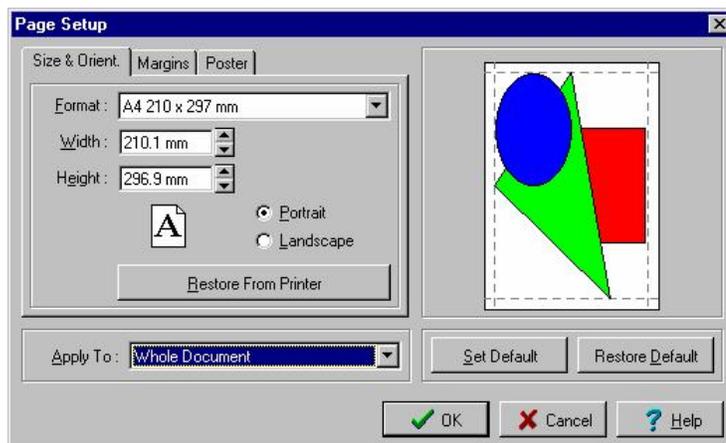
3. Especifique el nombre del archivo y el directorio para guardar el archivo y haga clic en **OK**.

Nota La versión 5.0 de ACD/ChemSketch puede exportar en los siguientes formatos:

ISIS/ Sketch (*.skc),
 REACCS Rxnfiles (*.rxn),
 CS ChemDraw CHM-file (*.chm),
 CML file (*.cml) - **Nuevo!**,
 Adobe Acrobat (*.pdf) - **Nuevo!**,
 Windows Metafiles (*.wmf),
 Windows Bitmap (*.bmp, *dib),
 Paintbrush (*.pcx),
 TIFF Bitmaps (*.tif),
 GIF Bitmaps (*.gif),
 MDL MOL-File (*.mol).

3.5.3 Imprimir

1. Antes de comenzar a imprimir usted puede desear verificar los arreglos del escenario de la página. Desde el menú **Archivo** escoja **Disposición de Página (Page Setup)...** para mostrar la caja de dialogo donde usted puede especificar el tamaño del papel, orientación, márgenes para la página y las opciones para el cartel (más detalles sobre la creación de carteles pueden encontrarse en la sección 8.7):



2. Haga clic en **OK** para guardar los cambios.
3. Haga clic en el botón **Página Completa**  para observar cómo se verá la página al imprimirse.
4. Si es necesario mueva los objetos sobre la página y arrégleslos apropiadamente.
5. Desde el menú **Archivo** escoja **Imprimir** o haga clic  para mostrar la caja de dialogo **Imprimir** donde usted puede especificar el número de copias a imprimir. Haga clic en **OK** para comenzar la impresión.

3.5.4 Encajar la Estructura en un Documento

Algunas veces usted necesita insertar la estructura en un reporte escrito diferente a las otras aplicaciones de ChemSketch (por ejemplo, documentos Word, hojas de cálculo de Excel, etc.).

1. Seleccione la estructura requerida o varias estructuras.
2. Para copiar la selección al portapapeles, haga clic en el botón **Copiar** .
 - O- Desde el menú **Editar** escoja el comando **Copiar**.
 - O- Presione CTRL+C en su teclado.
3. Seleccione la aplicación donde usted quiere insertar la estructura y pegue usando la función Pegar de esa aplicación.

Nota Cuando pegue estructuras copiadas desde ChemSketch en otras aplicaciones (por ejemplo, Microsoft Excel), la estructura puede ser representada como un conjunto de números y figuras (como un archivo MDL mol). Para ubicar un cuadro de la estructura, use la característica Pegado especial en la aplicación en la cual se esta haciendo el pegado. Para la cantidad de opciones de pegado escoja una de las dos opciones **ACD ChemSketch 2.0 Objeto** o **Cuadro**. El formador inserta la estructura como un objeto OLE así que le permite editar la estructura vía ChemSketch haciendo doble clic en la figura.

3.6 Limpiar la pantalla

Para limpiar la pantalla, puede escoger una de las siguientes opciones:

- ⇒ Para abrir un nuevo documento, desde el menú **Archivo** escoja el comando **Nuevo**.
- ⇒ Escoja el botón **Página Nueva**  desde el conjunto de botones de la parte superior izquierda para insertar una página nueva en blanco.
- ⇒ Desde el menú **Editar** escoja el comando **Seleccionar Todo** y seleccione el comando **Borrar**.
- ⇒ Haga clic en el botón **Borrar**  de la barra General. Haga clic en un espacio vacío lejos de la estructura dibujada para seleccionar todas las estructuras, entonces haga clic en cualquier estructura para borrar todo lo que hay en la pantalla.

4. Comenzar con ACD/I-Lab

4.1 Objetivos

Ahora que usted ha aprendido como dibujar moléculas en ChemSketch, queremos que haga una prueba de lo que puede hacer con todo ello!

Este capítulo le dará las bases para trabajar con I-Lab (cosas para “Laboratorio Interactivo”) mediante la interfase de ChemSketch. No se provee una descripción completa de todas las opciones y funciones; es el momento que usted comience. Usted aprenderá:

- Qué es el ACD/I-Lab y qué requiere para usar este servicio;
- Como escoger las opciones en el caso de que este conectado a Internet por una línea o por un proxy;
- Cómo acceder a I-Lab como invitado;
- Cuál es la clave demo y cómo se obtiene;
- Cómo registrarse a I-Lab;
- Cómo activar su cuenta;
- Cómo identificarse; y
- Cómo calcular una propiedad.

Nosotros usamos el servicio Libre de Nombres de la IUPAC como un ejemplo.

4.2 Resumen

ACD/I-Lab es un servicio basado en Internet que le permite acceder instantáneamente a la base de datos química de ACD y a programas de predicción de propiedades. El I-Lab incluye dos servicios, libre y con pago. El registro y la asociación son libres.

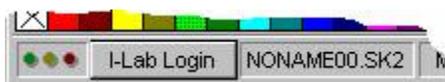
Para el uso de los recursos de ACD/I-Lab con ChemSketch, usted debe tener:

- Una conexión directa a Internet (acceder a las direcciones <http://www.acdlabs.com> y <http://www2.acdlabs.com>) desde el PC donde usted tenga instalado el programa ChemSketch,
- Una dirección de correo electrónico,
- ChemSketch ver. 4.0 o posterior con la adición I-Lab instalado.

Si la adición I-Lab ya esta instalada, cuando usted comience ChemSketch, verá la interfase estándar con el menú adicional **I-Lab** sobre la barra de menú:



y el botón adicional **I-Lab Login** (reemplazado por el botón I-Lab tan pronto como usted se registre) en la parte izquierda de la barra de estado:



Si usted ha comprado ACD/ChemSketch 5.0, la adición I-Lab estará presente (este será el conjunto que se instalará durante la instalación regular del software).

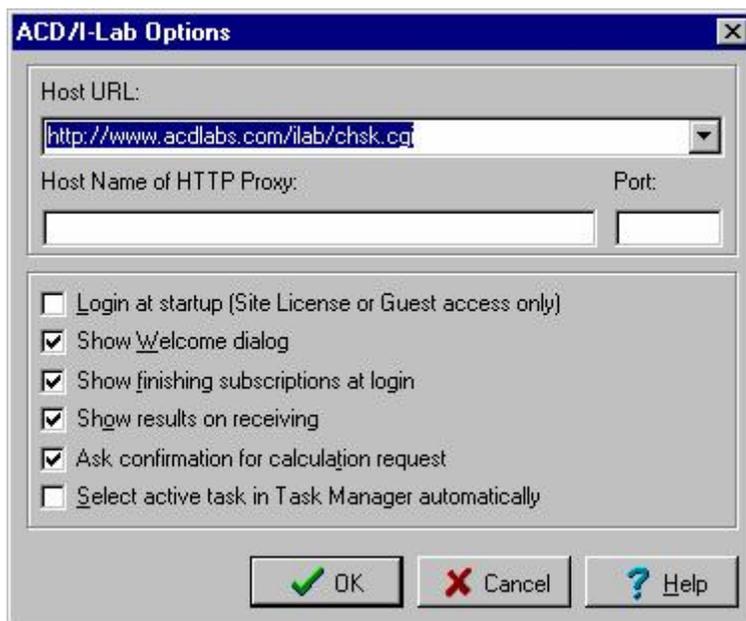
Si no ve el menú I-Lab, por ejemplo, si tiene la versión libre de ChemSketch, o desactivó esta opción durante la instalación de su copia comprada, puede bajarla en forma libre desde http://www.acdlabs.com/download/ilab_addon.html. Instale la Adición en el mismo directorio donde se instaló ChemSketch.

4.3 Opciones de Conexión

Si su computador tiene acceso libre a Internet, por favor salte esta sección.

Si su computador es un computador de un grupo de trabajo protegido por una línea o por un servidor proxy, entonces hay algunas situaciones requeridas antes de que pueda usar ChemSketch para acceder al I-Lab.

1. desde el menú **I-Lab** mostrado arriba, escoja **Opciones...**



2. llene los datos en las cajas **Host Name of HTTP Proxy**: y **Port**: de su red. Esta información puede obtenerse de su administrador de red.

Si encuentra un mensaje de error con “fallo de Requerimiento (403) o fallo de Requerimiento (407)”, esto significa que usted no puede acceder a I-Lab por la seguridad de su servidor proxy. El servidor proxy requiere autenticación de usuario (entrando un usuario/contraseña).

Desafortunadamente, la versión corriente de la adición I-Lab para ChemSketch no tiene ninguna característica para manejar este método de autenticación. En esta situación sólo podrá acceder al I-Lab mediante un buscador Web. Muchos de los buscadores proveen las características necesarias. Esperamos tener la autenticación propia del proxy en la próxima versión de ChemSketch.

4.4 Acceso como Invitado

El camino rápido para mirar como trabaja I-Lab es usar el Acceso como Invitado. En este caso, usted no tiene que registrarse. Como un Usuario Invitado, puede ver la lista de servicios disponibles pero sólo puede usar el servicio de Nombres Libres de la IUPAC.

1. escoja el comando **Usuario** del menú **I-Lab**
O haga clic en el botón **Usuario I-Lab** en la barra de estado (ver arriba).
2. en la caja de dialogo que aparece, haga clic en el botón **Usuario Invitado**.
3. espere durante un tiempo (dependiendo de la velocidad de su conexión a Internet) hasta que aparezca el mensaje de Bienvenida.
4. Haga clic en **OK** para cerrar la caja de dialogo (o puede hacer clic en el botón **Noticias** para ver la página Web con las últimas noticias de I-Lab).

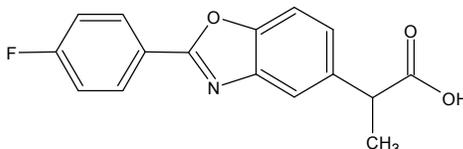
Ahora puede ver los servicios disponibles (haga clic en el botón I-Lab de la barra de estado o escoja el menú I-Lab) y use servicio libre de nombres de la IUPAC.

4.5 Cálculos Permitidos

Tan pronto como usted sea invitado (como usuario o como invitado), puede comenzar a hacer cálculos. En esta versión describiremos como usar el servicio libre de los nombres de la— IUPAC.

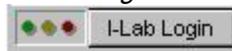
Primero, debe dibujar una estructura de la que quiere generar el nombre.

1. Asegúrese de que esta en el modo Estructura y usando las herramientas de ChemSketch introducidas en el Capítulo 3, dibuje la estructura de interés. Por ejemplo:



2. si hay varias estructuras dibujadas en la página, seleccione la que quiera nombrar.
3. Asegúrese que usted esta inscrito. Verifique la parte izquierda de la barra de estado. Esta debe contener el botón **I-Lab** y las “luces de tráfico” aparecer oscurecidas:

Before Login:

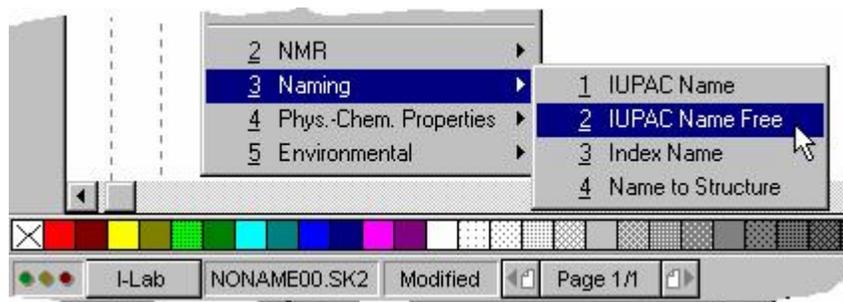


After Login:



Nota La caja muestra la cantidad de dinero que usted tiene en su cuenta (si se muestra en negro) la cantidad que usted debe (en amarillo) si esta conectado por un Sitio Licenciado o es un Usuario Invitado.

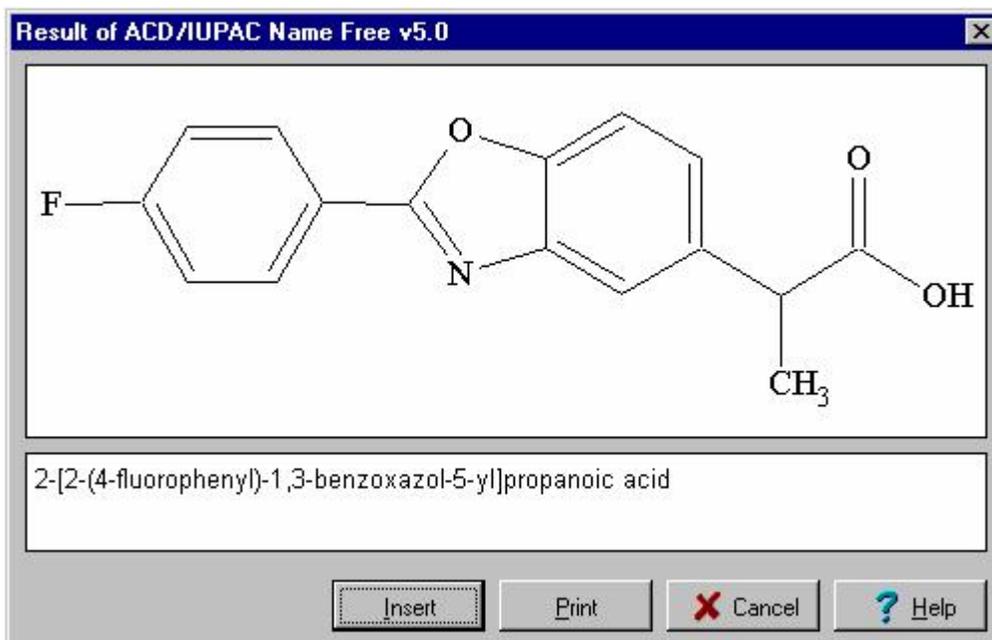
4. Haga clic en el botón **I-Lab** y en el menú panel que aparece escoja **Nombrar > nombre libre IUPAC**:



5. Aparece una caja de dialogo informándole que no se necesitan parámetros adicionales. (Para otras propiedades, esta caja de dialogo puede contener otra información u otras opciones.) Haga clic en **OK** y en la siguiente caja muévase para confirmar su requerimiento y para informarlo de la cuota ("libre" en este caso).



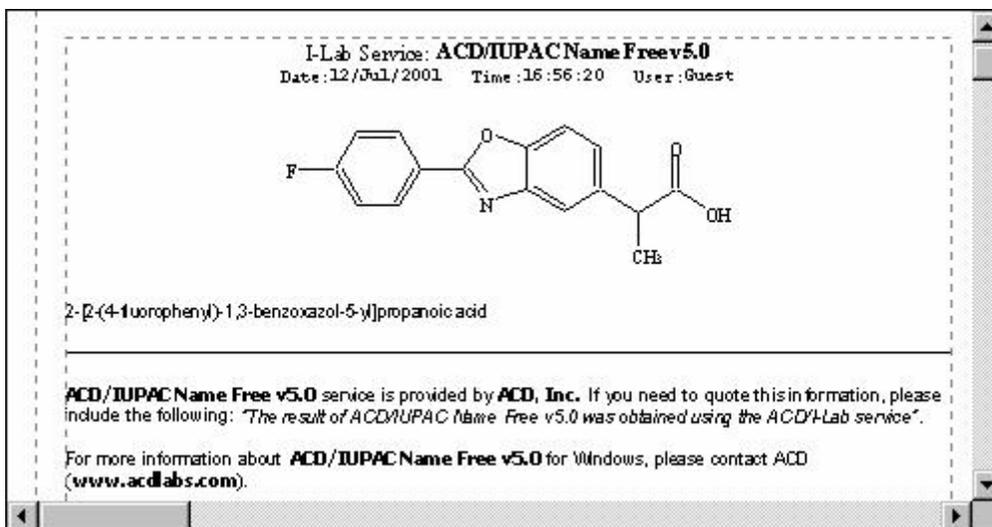
6. Haga clic en **Si**. Tan pronto como su requerimiento sea procesado, aparece la caja de dialogo con los resultados:



Nota Si los **Resultados** mostrados en la recepción no se seleccionaron en la caja de dialogo de **Opciones ACD/I-Lab** (menú **I-Lab > Opciones...**), los resultados de la

caja de dialogo no se mostrarán, pero puede ver los resultados en el **Administrador de Tareas** (menú I-Lab).

8. Para crear el reporte del nombre generado, escoja el botón **Insertar**. La estructura dibujada, el nombre generado y la información de los cálculos I-Lab se sacan en una hoja separada en la ventana ChemSketch:



Nota Para referirlo como cálculo I-Lab en un artículo, se sugiere escribir una frase en la página de salida.

9. Para regresar a la página de estructura, use el botón de flechas de la barra de estado (abajo).

4.6 Claves Demo

Si usted quiere aparecer durante el acceso como Invitado y tener los cálculos de la oferta Nombre Gratis IUPAC, considere realizar los siguientes pasos: una clave demo.

Las claves Demo le permiten obtener los servicios de I-Lab por un periodo limitado de tiempo. Durante este periodo de demostración, tendrá acceso a todos los servicios de I-Lab de forma gratuita. Después de que el periodo demo expire, su cuenta I-Lab será cargada por una transacción básica.

Las claves Demo duran dos semanas (14 días). Puede requerirle a un distribuidor o representante de ventas una clave de un cliente para periodos más largos de uso. Por favor contáctese directamente con el Administrador I-Lab.

Las claves Demo son generadas por el Administrador de I-Lab. Cuando una clave demo se solicita, esta requiere intervención humana. No es un proceso automático como la activación de una cuenta.

Sólo una clave demo es generada anualmente por cuenta. Típicamente las claves demo se dan a cuentas recientemente abiertas. Las claves demo deben solicitarse, ellas no se aplican automáticamente.

La claves Demo se deben aplicar solo una vez! Ellas no deben entrarse cada vez que se acceda al demo. Una vez que esta ha sido aplicada a la cuenta, el usuario tiene un acceso normal.

Si hay problemas aplicando la clave demo para una cuenta I-Lab, el administrador puede manualmente colocar el periodo de demostración para la cuenta.

4.6.1 Para Obtener la Clave Demo

1. Estar seguro de no estar inscrito en I-Lab. Si ya lo está, desde el menú **I-Lab** escoja **Inscrito (Log Out)**.
2. Desde el menú **I-Lab** escoja el comando **Requerir Clave Demo** Su correo por defecto será activado con un mensaje estándar. Lea el mensaje, adicione la información requerida y envíela.

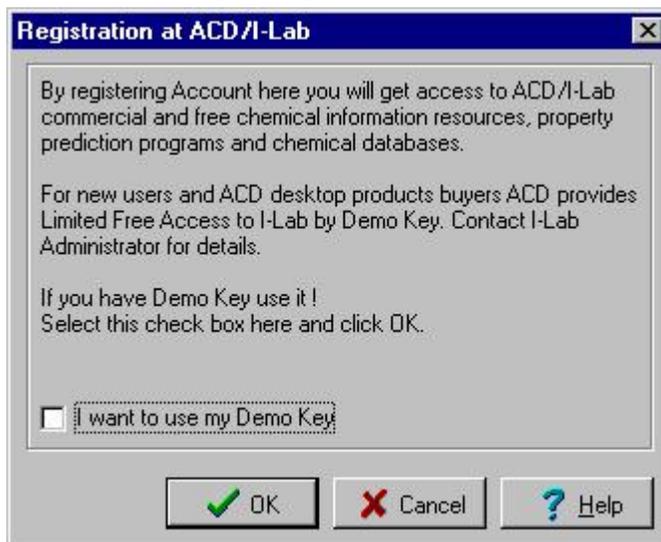
Nota Si la cuenta de correo no comienza automáticamente, puede enviar un mensaje de correo manualmente a ilab@acd labs.com con el propósito "Envíeme una Clave Demo" y escriba su nombre y número de teléfono. Note que, al solicitar la clave demo, usted sabe que I-Lab es un servicio comercial y después que su periodo de demostración acabe, usted pagará por los servicios de I-Lab.

3. El mensaje que contiene la Clave de Acceso Demo se enviará a través de correo electrónico posteriormente, *normalmente el siguiente día hábil*. En este mensaje hallará también las instrucciones para activar la clave.

4.7 Registrarse

Para poder trabajar con los servicios comerciales de I-Lab y para poder usar la Clave Demo, primero debe registrarse y obtener su propia cuenta.

1. Si ya esta registrado como un Invitado, desde el menú **I-Lab** escoja **Log Out**.
2. Desde el menú **I-Lab** escoja el comando **Registrarse en I-Lab**. Aparecerá la siguiente caja de dialogo:

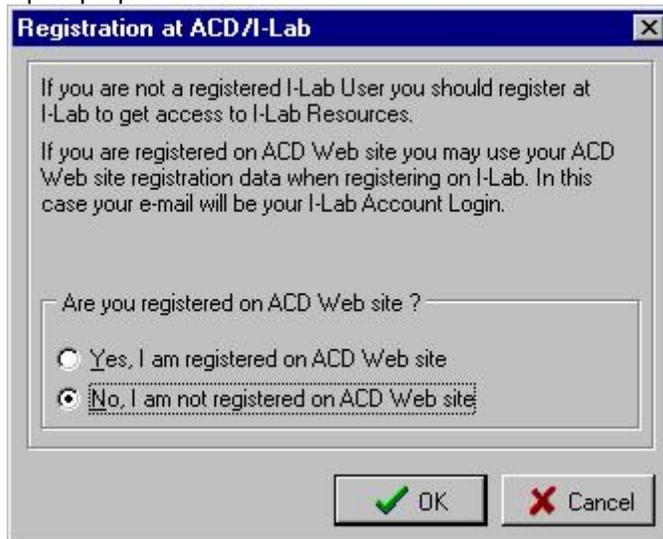


3. Si no tiene una Clave Demo disponible (refiérase a la Sección 4.6 para más detalles), limpie la caja de chequeo **Quiero usar mi Clave Demo** y haga clic en **OK**.

Nota Si quiere usar su Clave Demo, seleccione la correspondiente caja de chequeo. En este caso el procedimiento de registro descrito abajo no será diferente: algunas cajas de dialogo adicionales le harán preguntas para proveer la Clave Demo.

4. Lea el acuerdo de licencia que aparece al final y si esta de acuerdo con los términos, escoja **De acuerdo**.

5. La siguiente caja de dialogo le preguntará si ya esta registrado en el sitio web de ACD. Si va a usar el servicio comercial, se recomienda escoger **No...** igual si esta registrado en el sitio, los detalles que proporcionó en el sitio web no serán suficientes. Haga clic en **OK**.



Registration at ACD/I-Lab

If you are not a registered I-Lab User you should register at I-Lab to get access to I-Lab Resources.

If you are registered on ACD Web site you may use your ACD Web site registration data when registering on I-Lab. In this case your e-mail will be your I-Lab Account Login.

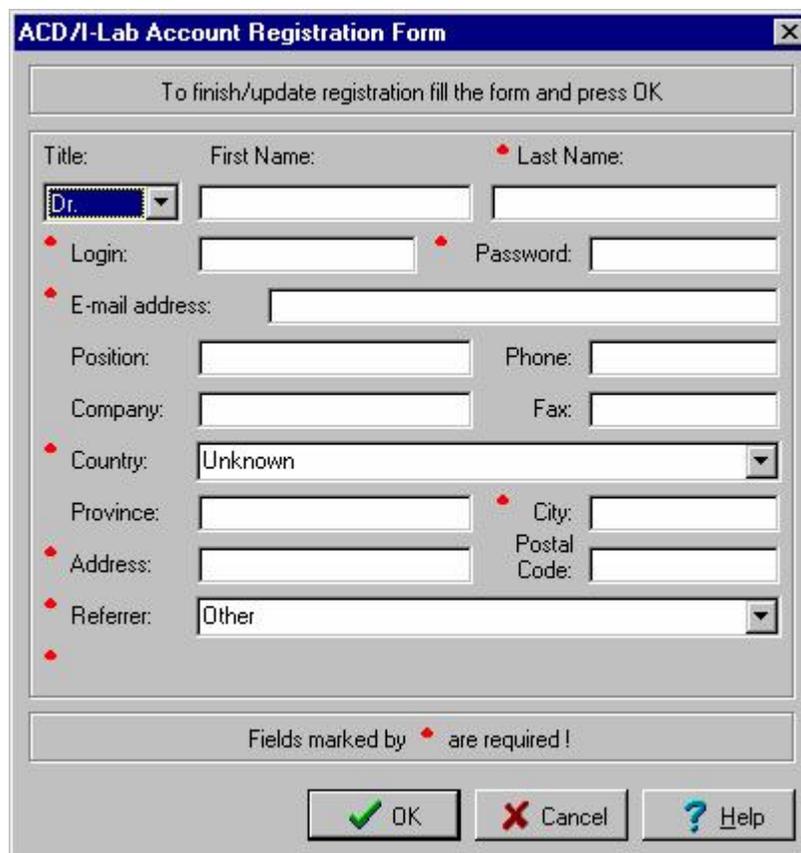
Are you registered on ACD Web site ?

Yes, I am registered on ACD Web site

No, I am not registered on ACD Web site

OK Cancel

6. La forma de Registro de la Cuenta ACD/I-aparece para que usted especifique sus detalles. Los elementos marcados con puntos rojos son obligatorios:



ACD/I-Lab Account Registration Form

To finish/update registration fill the form and press OK

Title: First Name: Last Name:

Login: Password:

E-mail address:

Position: Phone:

Company: Fax:

Country:

Province: City:

Address: Postal Code:

Referrer:

Fields marked by are required !

OK Cancel Help

7. Especifique sus datos personales y cuando haga clic en **OK**, se le preguntará para reescribir su contraseña y se muestra la información que ha entrado. Chequear los detalles y si todo es correcto, haga clic en **OK**.

- Un correo se enviará automáticamente a la dirección de correo que usted envió. El mensaje tendrá el asunto "Su clave de activación de ACD/I-Lab" que debe contener la clave, como recordarle su usuario y contraseña.

4.8 Activando su Cuenta I-Lab

Una vez que se ha registrado y recibido la clave de activación puede activar su cuenta.

- Desde el menú **I-Lab** escoja **Activar Cuenta...** para que se desplace la siguiente caja de dialogo:



- Teclee el usuario y la clave de activación que recibió en el mensaje de correo. Haga clic en **OK** para comenzar la activación.

Importante Usted puede copiar y pegar la clave desde su mensaje de correo directamente en la caja de dialogo usando CTRL+C y CTRL+V.

- Recibirá una confirmación de que su clave fue aplicada exitosamente. Su cuenta I-Lab esta lista para ser usada. *Esta es la única vez que necesita usar la clave.*

4.9 Entrar Usuario-Registrarse (Logging In)

Tan pronto como se registra y activa su cuenta usted puede entrar como usuario.

- Desde el menú **I-Lab** escoja el comando **Login** o haga clic en el botón **I-Lab Login** en la barra de estado.
- En la caja de dialogo que aparece teclee su usuario y contraseña.

Nota En el caso de que quiera inscribirse como un invitado, simplemente haga clic en el correspondiente botón sin proveer usuario y contraseña.

- Haga clic en **OK**. La caja de dialogo de confirmación aparecerá cuando usted sea inscrito exitosamente en I-Lab.

Nota Si no es posible la conexión, aparecerá un mensaje de error en la caja de diálogo. Debe tratar de nuevo posteriormente.

- Vaya a la Sección 4.5 y, si quiere, haga cálculos para otro nombre de la IUPAC gratis.
- Ahora esta listo para seleccionar cualquiera de las opciones disponibles. Desde el menú **I-Lab** escoja el servicio que desee. Recuerde que aparecerá una caja de dialogo para "confirmar su solicitud", en la cual debe seleccionar **No**, si decide no continuar.

5. Dibujar Estructuras más Complejas

5.1 Objetivos

Ahora que usted ha estudiado las bases del dibujo de estructuras descrito en el capítulo 3, y ha visto como puede usarse la estructura como entrada para los cálculos basados en la web del capítulo 4, puede desear dibujar estructuras más complejas usando herramientas avanzadas de ChemSketch.

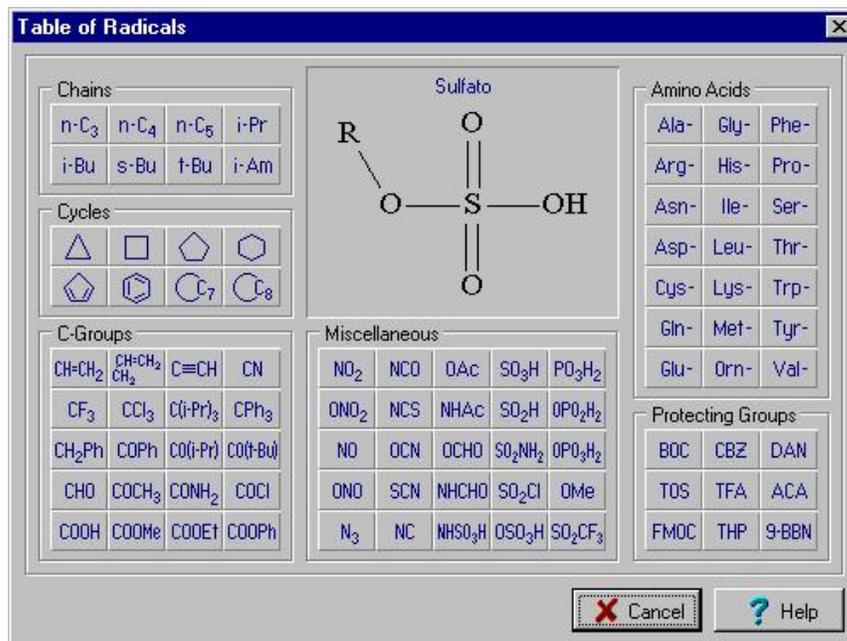
En este capítulo aprenderá como hacer:

- Uso de la Tabla de Radicales para dibujar fragmentos químicos típicos;
- Rápidamente dibujar Anillos.
- borrar y reemplazar átomos;
- hacer dobles y triples enlaces;
- hacer la carga de un átomo, dibujar cationes y aniones; y
- cambiar varias propiedades atómicas

5.2 Usando la Tabla de Radicales

La **Tabla de Radicales** incluye estructuras prediseñadas de amino ácidos, sus grupos protegidos, como los nucleótidos y otros radicales frecuentemente usados.

1. Limpie la pantalla usando las directrices dadas en la sección anterior.
2. Haga clic en el botón **Tabla de Radicales**  de la barra **Referencias** para desplazar los radicales:

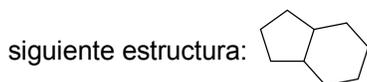


- Haga clic en el botón **Ciclohexano**  en la Tabla de Radicales.
- Un botón **Ciclohexano** se localiza ahora en la barra Referencias al lado derecho de la pantalla.
- Repita estos pasos para el botón **Ciclopentano** .

Nota Cuando usted selecciona nuevos radicales de la Tabla de Radicales, el correspondiente botón se adiciona automáticamente a la barra de Referencias. **Para remover estos botones** de la barra Referencias, haga doble clic en cualquiera de ellos o doble clic en la barra **Referencias** y escoja **SI**.

5.3 Usando Anillos

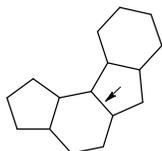
- Seleccione el botón ciclopentano  en la barra **Referencias** al lado derecho O seleccionarlo de la **Tabla de Radicales**.
- Haga clic en la pantalla para crear un anillo de cinco miembros.
- En la barra de herramientas, seleccione el botón ciclohexano . Ahora ponga el puntero del ratón en la flecha para resaltar el enlace indicado,  y haga clic para crear la



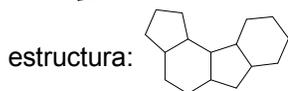
- Repita estos pasos para crear la siguiente estructura;

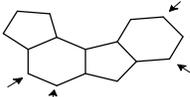


- Haga clic en el botón **Hacer el Enlace verticalmente**  y clic en el enlace indicado

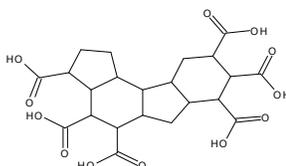


para rotar la estructura alrededor de este enlace y obtener la siguiente



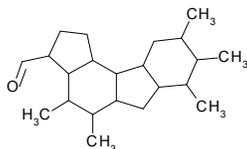
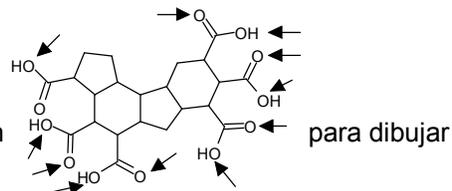
- Haga clic en el botón **Tabla de Radicales**  sobre la barra Referencias.
- En la ventana **Tabla de Radicales**, seleccione el grupo carboxilo  haciendo clic en el botón radical carboxilo .
- Haga clic sobre los átomos indicados en  para generar grupos carboxilos

en ellos:



5.4 Borrando Átomos y Fragmentos

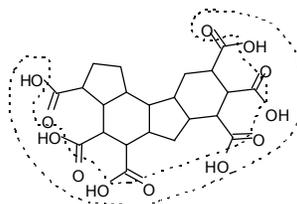
Borre los átomos indicados por flechas en



Usted puede hacer esto de dos formas: borrar cada uno de los átomos individualmente (tratado en la Sección 3.2.3) o borre simultáneamente varios átomos.

5.4.1 Borrar Varios Átomos Simultáneamente

- Haga clic en el botón **Laso On/Off**  de la barra Estructura para habilitar el modo de selección **Laso** . Note que la herramienta **Seleccionar/Mover** se activa.
- Arrastre para incluir todos los átomos especificados en la línea Laso cerrada para seleccionarlos:



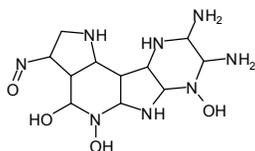
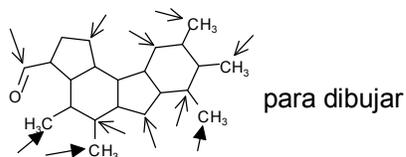
Nota La ruta punteada en este cuadro muestra la ruta sugerida incluyendo los escogidos y que no aparecerán en su espacio de trabajo. Se seleccionan los átomos enlazados en la curva.

- Haga clic en el botón **Borrar**  en la barra de Herramientas General.
- Haga clic en todos los átomos resaltados simultáneamente para borrarlos al mismo tiempo.

Nota Usted puede seleccionar átomos, enlaces y fragmentos de dos formas, usando el selector **Laso**  o el selector **Rectángulo** . Para deseleccionar el fragmento(s), haga clic en cualquier espacio vacío.

5.5 Remplazando Átomos

Reemplace los átomos indicados con flechas en

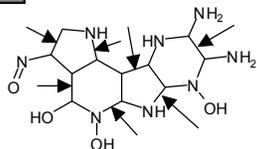


1. Haga clic en el botón **Nitrógeno**  al lado izquierdo de la barra Atomos, luego haga clic sobre todos los carbonos señalados por una flecha de cabeza abierta en la estructura de arriba.
2. Haga clic en el botón **Oxígeno**  en la barra Atomos y luego haga clic sobre los tres Carbonos marcados con una flecha sólida.

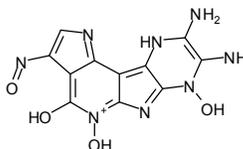
Nota Usted no puede reemplazar átomos con la herramienta **Dibujo Continuo** (ver Sección 3.2.6).

5.6 Hacer Dobles y Triples Enlaces

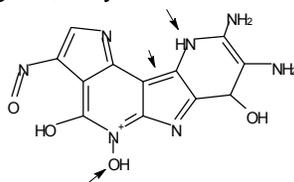
1. Con cualquiera de las herramientas **Dibujo Normal** , **Dibujo Continuo**  o **Dibujo de Cadenas**  activa, haga clic sobre los enlaces indicados en



para hacer dobles enlaces:

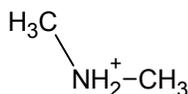


2. Usando el botón **Cambiar Dobles Enlaces o Posición de Hidrógenos**  la apariencia de la estructura puede “refinarse” (fine-tuned). Seleccione este botón y haga clic en los hidrógenos y dobles enlaces indicados. Note el movimiento del hidrógeno alrededor del nitrógeno y del oxígeno, y el doble enlace alrededor del simple:

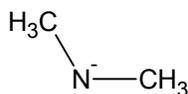


5.7 Hacer Cargas y Definir Aniones y Cationes

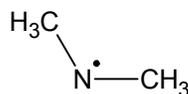
En esta sección dibujaremos el siguiente conjunto de estructuras:



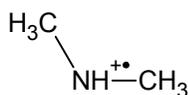
cation



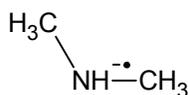
anión



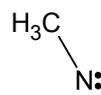
Radical libre



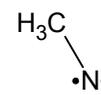
ión radical positivo



ión radical negativo

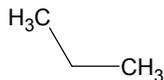


birradical singulete

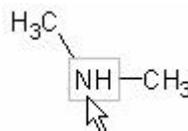


birradical triplete

1. Escoja el botón **Carbono**  en la barra Átomos y verifique que la herramienta **Dibujo Normal**  esta activa. Haga clic tres veces en un lugar para dibujar la siguiente estructura:



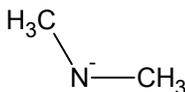
2. Escoja el botón **Nitrógeno**  y haga clic en el carbono central para reemplazarlo por un nitrógeno:



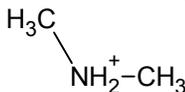
3. Haga clic en la esquina del botón **Incrementar (+) Carga**  en la parte izquierda de la barra Átomos para expandir los siguientes grupos:

-  Incrementar (+) Carga;
-  Disminuir (-) Carga;
-  Radical;
-  Ión Radical Positivo;
-  Ión Radical Negativo.

4. Haga clic en el botón **Disminuir (-) Carga**  y luego clic en el grupo NH para hacer un anión:

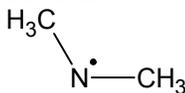


5. Con el botón derecho escoja **Incrementar (+) Carga** (o escoja  desde el grupo de botones) y haga clic dos veces para hacer un catión:

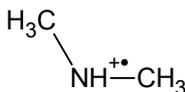


Nota Cuando usa los botones de **Carga**,  o , para cambiar la carga de un no metal, el correspondiente número de átomos de hidrógeno se adiciona automáticamente, o se remueve de este para conservar la valencia química adecuada. Si cambia la carga de un metal, la carga es cambiada en aumentos o disminuciones de acuerdo con la siguiente carga química válida del correspondiente ión. (Usted puede ver valencias comunes en la **Tabla Periódica de Elementos**.)

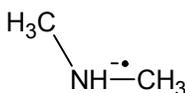
6. Escoja el botón **Radical**  desde el grupo de botones mostrado en el paso 3 y haga clic sobre el grupo NH_2 para dibujar un radical libre:



7. Con el botón derecho en una zona de la hoja haga clic para escoger la herramienta **Ión Radical positivo** o escoja el botón correspondiente  y hacer clic para dibujar el ión radical positivo:



8. Con el botón derecho en una zona de la hoja haga clic para escoger la herramienta **Ión Radical Negativo**  y hacer clic para dibujar el ión radical negativo:



9. Escoja el botón **Borrar**  en la parte superior de la barra General y haga clic en el grupo CH_3 de la derecha para borrarlo.

10. Desde el grupo de botones en el paso 3 escoja la herramienta **Radical**  y haga clic en el grupo NH varias veces hasta que se obtenga el siguiente birradical singulete:



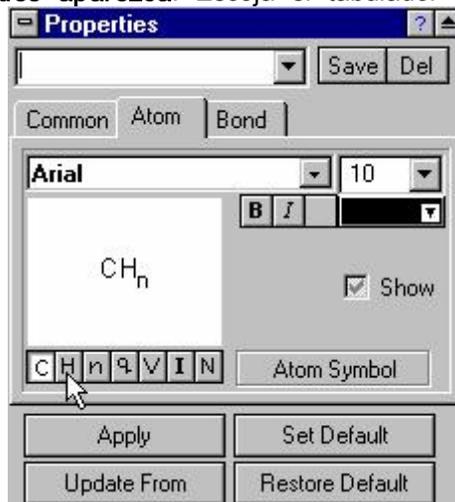
11. Continúe hacienda clic con la herramienta radical hasta que el birradical triplete aparezca:



5.8 Cambiando Propiedades de Atomos

Si quiere mostrar la valencia o la masa isotópica de un átomo en una estructura ChemSketch —o igual cambiar el aspecto o el tamaño del átomo— debe usar el panel **Propiedades**.

- Haga clic en el botón **Seleccionar/Mover** .
- Haga doble clic en el átomo que quiere mostrar y cambiar las propiedades. Esto hace que la caja de dialogo **Propiedades** aparezca. Escoja el tabulador **Propiedades de átomos**:



- Haciendo clic en los botones **C H n q V I N** muestra las opciones para cambiarlas
 - C** – símbolo átomo,
 - H** – hidrógenos relacionados,
 - n** – índice de Hidrógenos relacionados,
 - q** – carga,
 - V** – valencia,
 - I** – masa isotópica,
 - N** – numeración de átomos en toda la molécula.
- Cuando escoja los valores, haga clic en **Aplicar** para que el cambio aparezca inmediatamente en el átomo seleccionado.

6. Estructuras Avanzadas, Notación SMILES, y Esquemas de Reacción

6.1 Objetivos

Este capítulo es el próximo paso para dibujar estructuras más sofisticadas. Se cubren dos clases de optimizaciones: optimizar para mostrar propósitos (2D) y optimización de acuerdo a modelos simples de campos de fuerza (3D). si es la primera vez que esta usando ChemSketch se recomienda que haga los ejercicios descritos aquí sólo después de completar los capítulos previos.

En este capítulo aprenderá a:

- Dibujar estructuras cíclicas de alcanos y Péptidos usando la herramienta optimización 2D (depurar estructura);
- convertir estructuras a formato SMILES y vice versa;
- use la herramienta **Optimización 3D** para dibujar “espectaculares” estructuras 3D del Bicyclo[2.2.2]octano, del triptíceno, del cubano y del dodecahedrano;
- dibujar esquemas de reacción.

6.2 Optimización 2D

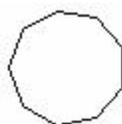
La opción depurar (Clean) puede considerarse una optimización-2D de la estructura dibujada, por ejemplo, redibujar y redimensionar para estandarizar todas las longitudes de enlace y los ángulos. Con esta opción puede fácilmente dibujar estructuras perfectas. Algunos ejemplos:

6.2.1 Creando la Estructura de un Ciclo Alcano



Esta sección se basa en la película **cycloalk.exe** que puede bajarse de nuestro sitio web o encontrarla en la carpeta películas.

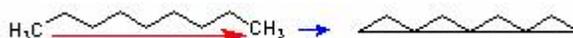
Usando la siguiente técnica puede rápidamente dibujar un ciclo alcano correctamente. Aquí se tiene como dibujar el **Ciclononano**:



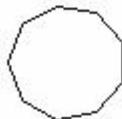
1. Escoja el modo Estructura  y borre todas las estructuras presionando CTRL+A y luego Borrar.
2. Escoja la herramienta **Dibujar Cadenas**  y arrastre sobre la zona de trabajo para dibujar una cadena de 9 miembros. Note que el cursor le muestra el número de átomos en la cadena.



3. Con el botón derecho escoja la herramienta **Dibujo Normal**  y arrastre desde el final de un átomo a otro para conectarlos con el enlace.



4. Haga clic en el botón **Depurar Estructura**  para obtener la siguiente estructura:

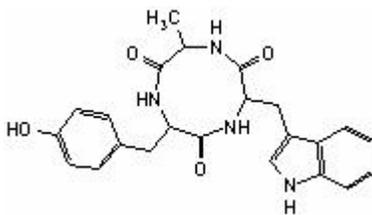


 Intente dibujar anillos C₁₀- y C₈- usando la técnica anterior.

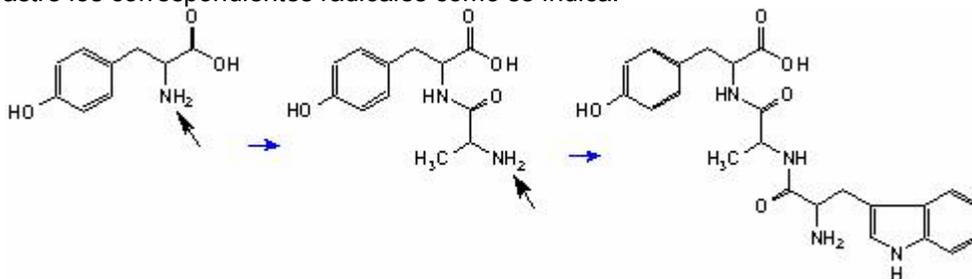
6.2.2 Creando la Estructura de un Péptido Cíclico

 Esta sección se basa en la película **pept.exe** que puede bajarse de nuestro sitio web o encontrarla en la carpeta películas.

Dibujemos el ciclo Tyr-Ala-Trp. De nuevo encontramos que se usa el botón **Depurar Estructura** (**Clean Structure**).

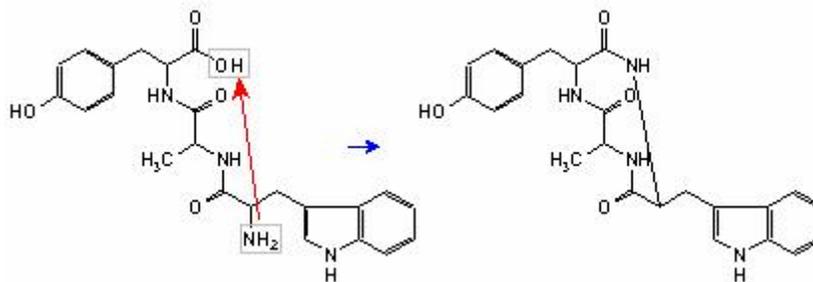


1. Seleccione el modo Estructura **Structure** y borre todas las estructuras presionando CTRL+A y luego BORRAR.
2. Desde la **Ventana Plantilla**  escoja el tabulador **Amino Acids**.
3. Desde la serie de aminoácidos, haga clic en **Tirosina** y luego en el espacio de trabajo para copiarla.
4. En la **Tabla de Radicales** , escoja secuencialmente **Alanina** **Ala-** y **Triptófano** **Trp-** y arrastre los correspondientes radicales como se indica:

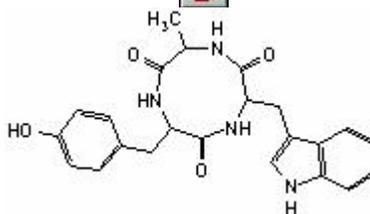


Nota Necesitará girar la plantilla sombreada antes de localizarla en la zona de trabajo presionando la tecla TAB.

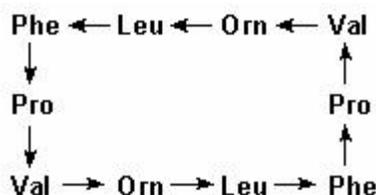
5. Con el botón derecho escoja la herramienta **Seleccionar/Mover**  y arrastre el grupo NH₂ hacia el grupo OH como se muestra:



6. Haga clic en el botón **Depurar Estructura**  para obtener la siguiente estructura:



Intente dibujar cualquier otro péptido cíclico, por ejemplo la Gramicidina S:



6.3 Notas SMILES - *Nuevo en 5.0!*

La versión 5.0 de ACD/ChemSketch puede convertir hileras a estructuras SMILES Introducción a la Línea de Entrada para la Especificación Molecular Simplificada (Simplified Molecular Input Line Entry Specification) y convertir estructuras a SMILES. Más detalles acerca de este formato pueden encontrarse en el sitio web Sistemas de Información Química de Luz Natural (Daylight Chemical Information Systems, Inc.) en la siguiente dirección [www](http://www.daylight.com/dayhtml/smiles/smiles-intro.html):

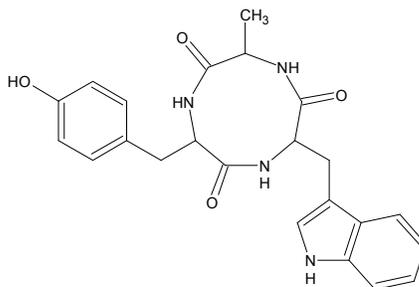
<http://www.daylight.com/dayhtml/smiles/smiles-intro.html>

6.3.1 Generando Notas SMILES

Ahora trataremos de crear una hilera SMILES para el péptido cíclico dibujado en la Sección 6.2.2.

1. Si tiene varias estructuras dibujadas en una página, Seleccione una a la que le quiera generar la hilera SMILES, en nuestro caso este es el péptido cíclico.

- Del menú **Herramientas** escoja el comando **Generar Nota SMILES**. La hilera generada aparece en la estructura de abajo:



C4(=O)C(Cc1ccc(cc1)O)NC(=O)C(NC(=O)C(Cc2cnc3c2cccc3)N4)C

- Puede copiar el texto seleccionándolo y presionando CTRL+C para copiarla en el portapapeles de Windows. Luego pegar en cualquier editor de texto externo como un texto usando el comando menú o CTRL+V.

Nota Si tiene varias estructuras dibujadas en una página y quiere generar la hilera SMILES para todas ellas, no tiene que seleccionarlas todas—solo quite la selección (desactive) y escoja el comando **Generar Nota SMILES**. La notación SMILES aparece para todas las estructuras dibujadas como un hilera donde cada notación se separa por un punto.

6.3.2 Generando Estructuras desde Notas SMILES

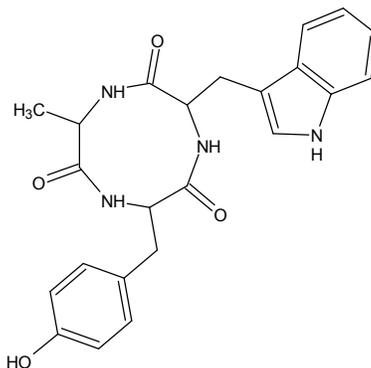
Ahora trataremos de hacer la tarea opuesta—generación de la estructura a partir de la hilera SMILES. Primero generaremos la estructura de la notación creada en la sección previa.

- Seleccione el texto creado como hilera en la sección anterior:

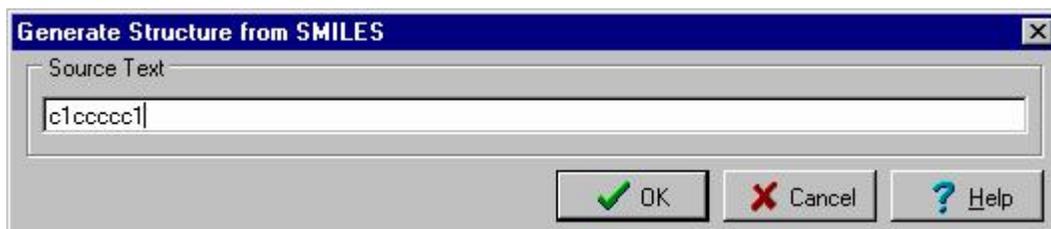
■ C4(=O)C(Cc1ccc(cc1)O)NC(=O)C(NC(=O)C(Cc2cnc3c2cccc3)N4)C ■

- Del menú **Herramientas** escoja el comando **Generar Estructura desde SMILES**. La estructura generada se ubica abajo del texto hilera. Como puede ver, esta es la misma estructura que se generó desde la notación SMILES en la sección previa:

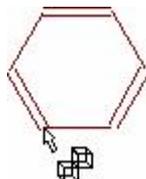
C4(=O)C(Cc1ccc(cc1)O)NC(=O)C(NC(=O)C(Cc2cnc3c2cccc3)N4)C



3. Si no tiene el texto hilera insertado en la zona de trabajo o no esta seleccionado, seleccionando el comando Generar Estructura desde SMILES desplazará la siguiente caja de dialogo donde usted puede teclear la hilera manualmente:



4. Haga clic en OK y la estructura generada aparece como una plantilla adjunta en el cursor:



5. Haga clic en el espacio de trabajo para localizar la estructura.

6.4 Optimización 3D

Esta sección explica como crear estructuras que tengan ángulos y longitudes de enlace “reales”. No es necesario explicar que tan difícil es dibujar moléculas proporcionalmente. Las opciones Optimización y la Rotación 3D le ayudarán rápidamente a cumplir esta tarea. Estas opciones permiten crear estructuras complejas con facilidad en ACD/ChemSketch.

El algoritmo de la optimización 3D es propiedad de la versión de mecánica molecular con campos de fuerza inicialmente basada en la parametrización CHARMM³. Las modificaciones envuelven algunas simplificaciones y fueron proyectadas para incrementar la estabilidad y velocidad de cómputo. Note que el optimizador 3D no es un artefacto de mecánica molecular completo. Su diseño apunta confiablemente a reproducir conformaciones razonables (posiblemente nada razonables) de dibujos en 2D, más que precisamente optimizar estructuras en 3D.

Si el optimizador 3D produce una conformación diferente a la que usted esperaba, no se sorprenda. Es que en esencia en el análisis conformacional de las moléculas, estas típicamente tienen muchas conformaciones. El optimizador muestra solo una, y puede no ser la esperada. Por ejemplo, probablemente esperaba un fragmento de ciclohexano en silla, pero el optimizador lo generó en bote, el cual es una de sus conformaciones propias (realmente, en muchas estructuras este fragmento existe en una forma retorcida). En tal caso, puede intentar corregir la conformación (por ejemplo, moviendo manualmente los átomos en la dirección deseada y optimizando en 3D de nuevo la estructura).

Puede desear hacer el análisis conformacional de su molécula usando un paquete de mecánica molecular especial o un paquete de optimización de química cuántica. La estructura ChemSketch optimizada en 3D servirá como dato de entrada.

Nota Las Estructuras únicamente pueden ser modeladas de esta forma si contiene átomos de C (IV), H(I), F(I), Cl(I), Br (I), I (I), N (III, IV), O (II), S (II, IV, VI) con estados de valencia estándar y estados enlazantes. Las Estructuras con átomos cargados (excepto azidas y grupos nitro) no pueden optimizarse.

³ B. R. Brooks, R. E. Bruccoleri, B. D. Olafson, D. J. States, S. Swaminathan, and M. Karplus. CHARMM: Un programa para energía macromolecular, minimización y cálculos dinámicos. *J. Comput. Chem.* 4 187-217 (1983).

6.4.1 Creando la Estructura del Biciclo[2.2.2]octano

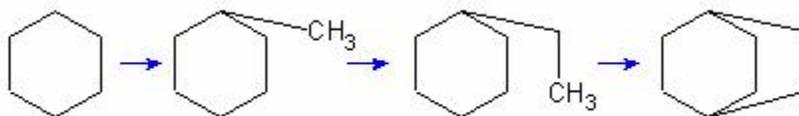


Esta sección se basa en la película **bicyc.exe** que puede bajarse de nuestro sitio web o encontrarla en la carpeta películas.



Seleccione el modo **Structure** y borre cualquier estructura dibujada previamente o moverla a una página nueva.

1. Del menú **Opciones** seleccione **Preferencias** y escoja el tabulador **Estructura**.
2. Limpie la caja de chequeo **Adicionar Hidrógenos** y haga clic en **OK**.
3. Escoja de la **Tabla de Radicales** **Ciclohexano**. Haga clic en la hoja de trabajo para ubicar el anillo de ciclohexano.
4. Haga clic en la herramienta **Dibujo Normal** y dibuje el Puente de carbonos arrastrando como se muestra en el siguiente esquema:



5. Haga clic en el botón **Optimización 3D** para obtener un modelo 3D de la estructura dibujada.

Nota Si hay más de una estructura en la zona de trabajo debería seleccionar la estructura que quiere optimizar en 3D utilizando cualquiera de las herramientas de selección (**Seleccionar/Mover**, **Seleccionar/Mover/Redimensionar** o **Rotación 3D**).

6. Si se selecciona la caja de chequeo del **Interruptor para el modo de Rotación 3D** en el tabulador **Estructura** de la caja de dialogo **Preferencias** (menú **Opciones**), usted estará automáticamente apto para el modo de rotación 3D después que la optimización 3D se complete. Si no se ha seleccionado, escoja la herramienta **Rotación 3D**. Ubique el cursor del ratón sobre cualquier átomo o enlace en la estructura y arrastre el ratón sobre la hoja de trabajo para rotar la estructura hasta que esta se localice como se muestra



Nota Del menú **Opciones**, seleccione **Preferencias** y haga clic en el tabulador **Estructura** de la caja de dialogo. Puede escoger si el enlace del fondo debería estar suelto o no, seleccionando o depurando en la caja de chequeo **Habilitar** en la sección **Intersección de Enlaces**.

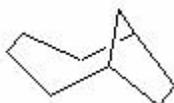
Puede cambiar la posición de los enlaces cruzados aplicando los comandos **Traer Enlace al Frente** (CTRL+F) o **Enviar Enlace al Fondo** (CTRL+K) (menú **Herramientas**) para el enlace seleccionado. Puede también traer el enlace del fondo al frente haciendo clic sobre este con la herramienta **Cambiar Posición** activa mientras mantiene presionada la tecla SHIFT.



Intente dibujar las siguientes estructuras usted mismo usando las técnicas anteriores



Biciclo[2.2.1]heptano

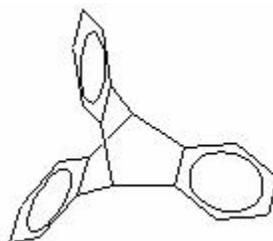


Biciclo[4.2.1]nonano

6.4.2 Creando la Estructura del Tripticeno



Esta sección se basa en la película **triptyc.exe** que puede bajarse de nuestro sitio web o encontrarla en la carpeta películas.

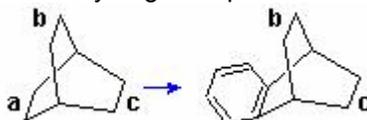


Escoja el modo **Structure** y borre cualquier estructura diseñada previamente o moverla a una página nueva.

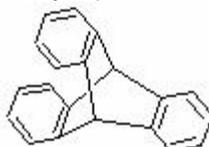
1. Dibuje la estructura del **biciclo[2.2.2]octano** como se describió arriba O haga clic en el botón **Ventana Plantilla**  en la barra Estructura, luego haga clic en el tabulador **Biciclos** **Bicyclics**, y seleccione la estructura apropiada.

2. Escoja de la **Tabla de Radicales**  **Benceno** .

3. Posicione el cursor sobre el enlace **a** y haga clic para unir el benceno a este enlace:

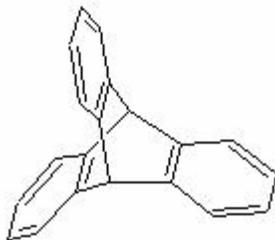


4. Repita los pasos 2--3 para los enlaces **b** y **c** para obtener la siguiente estructura:

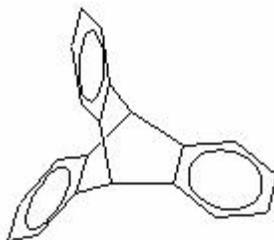


5. Si hay más de una estructura en la zona de trabajo, Seleccione la estructura que quiere optimizar en 3D usando cualquiera de las herramientas de selección (**Seleccionar/Mover** , **Seleccionar/Rotar/Redimensionar**  o **Rotación 3D** ).

6. Haga clic en el botón **Optimización 3D**  para obtener un modelo 3D de la estructura dibujada:



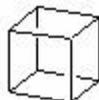
7. Si se selecciona el interruptor **Modo de Rotación 3D** en el tabulador **Estructura** de la caja de dialogo **Preferencias** (menú **Opciones**), el programa automáticamente activará el modo Rotación 3D después que se haya completa la optimización 3D; si no esta seleccionado, seleccione la herramienta **Rotación 3D** . Ubique el cursor del ratón sobre cualquier átomo o enlace de la estructura y arrastre el ratón sobre la zona de trabajo para obtener la proyección que quiera.
8. Escoja del menú **Herramientas** **Mostrar Aromaticidad** para mostrar los anillos aromáticos:



6.4.3 Creando la Estructura del Cubano

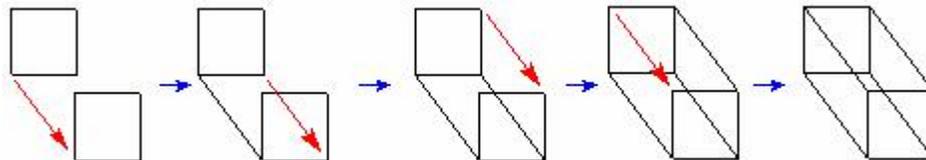


Esta sección se basa en la película **Pr_cub.exe** que se puede bajar de nuestro sitio web o encontrarla en la carpeta películas.



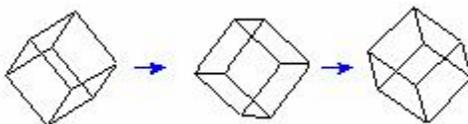
Seleccione el modo **Structure**  y borre cualquier estructura o muévela a una página nueva.

1. De la **Tabla de Radicales**  escoja **Ciclobutano** . Haga clic dos veces en la zona de trabajo para ubicar dos Anillos de cuatro miembros uno bajo el otro. Escoja la herramienta **Dibujo Normal**  y conecte las esquinas de la molécula de ciclobutano con enlaces arrastrando desde un átomo al otro como se muestra en la figura:



2. Haga clic en el botón **Optimización 3D**  para obtener el modelo 3D de la estructura dibujada.
3. Seleccione la herramienta **Rotación 3D**  si no esta seleccionada.

4. Ponga el cursor del ratón sobre cualquier átomo o enlace de la estructura y arrastre el ratón sobre la zona de trabajo para obtener la proyección que quiera:



Nota Del menú **Opciones**, seleccione **Preferencias** y haga clic en el tabulador **Estructura** de la caja de dialogo. Puede seleccionar si el enlace de fondo esta separado o no seleccionando o depurando en la caja de chequeo **Habilitar de la sección Intersección de Enlaces**.

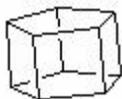
Puede cambiar la posición de los enlaces cruzados aplicando los comandos **Traer Enlace al Frente** (CTRL+ F) o **Enviar Enlace al Fondo** (CTRL+ K) (menú **Herramientas**) para el enlace seleccionado. Puede traer el enlace del fondo al frente haciendo clic sobre este con la herramienta **Cambiar Posición**  activa mientras mantiene presionada la tecla SHIFT.



Intente dibujar las siguientes estructuras con las técnicas anteriores



Prismano

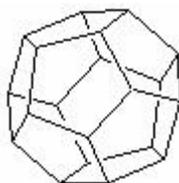


Hexaciclo[4.2.0.0^{2,5}.0^{3,9}.0^{4,8}.0^{7,10}]decano

6.4.4 Creando la Estructura del Dodecahedrano ([5]Fullerene-C₂₀)

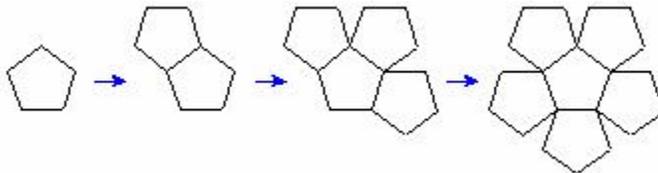


Esta sección se basa en la película **fuller.exe** que puede bajarse de nuestro sitio web o encontrarla en la carpeta películas.



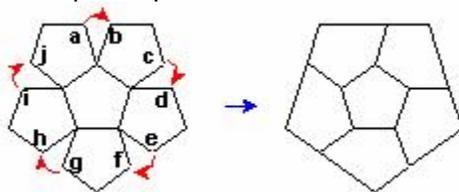
Seleccione el modo **Structure**  y borre cualquier dibujo previo o muévelo a una página nueva.

1. De la **Tabla de Radicales**  escoja **Ciclopentano** . Haga clic en la zona de trabajo para ubicar el anillo de ciclopentano.
2. Consecuentemente posicione el puntero del ratón sobre cualquier enlace del anillo y haga clic para unir otros cinco anillos:

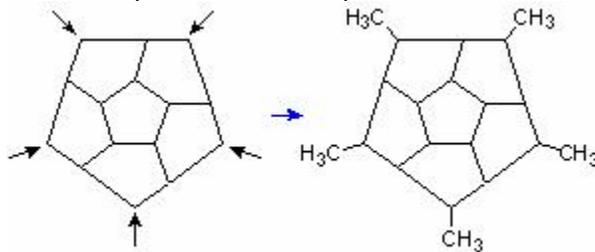


3. Con el botón derecho haga clic para activar la herramienta **Seleccionar/Mover** .

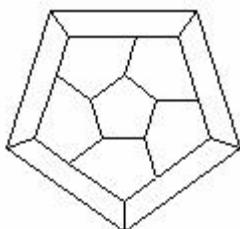
4. Arrastre moviendo los átomos **a, c, e, g, i** hacia los átomos **b, d, f, h, j** de acuerdo a como se muestra en el siguiente esquema para combinarlos:



5. Seleccione el botón **Carbono**  sobre la barra Átomos y haga clic directamente sobre los puntos indicados por flechas para adicionar más átomos y enlaces:

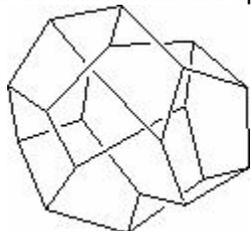


6. Conecte el grupo metilo adyacente con un enlace simple arrastrando desde un átomo terminal a otro para obtener la siguiente estructura:



7. Haga clic en el botón **Optimización 3D**  para obtener el modelo 3D de la estructura dibujada.

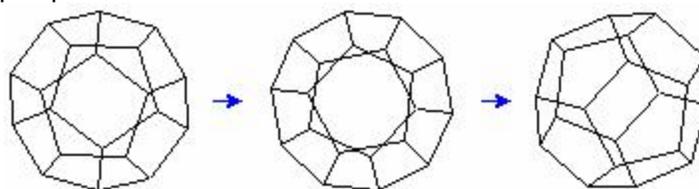
Importante Si la optimización produce una estructura geométrica tipo “Moebius” en lugar de una estructura tipo fullereno



la optimización ha convergido a un valor no usual. Use el botón **Deshacer** para regresar a su estructura pre-optimizada. Luego, aplique la herramienta **Depurar Estructura** o, usando la herramienta **Seleccionar/Mover**, mueva alguno de los átomos ligeramente y optimice de nuevo.

8. Seleccione la herramienta **Rotación 3D** . Ubique el cursor del ratón sobre cualquier átomo o enlace en la estructura u arrastre el ratón sobre la zona de trabajo para obtener la

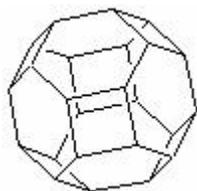
proyección que quiera.



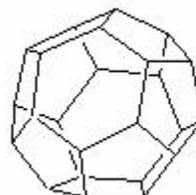
Nota Desde el menú **Opciones**, seleccione **Preferencias** y haga clic en el tabulador **Estructura** de la caja de dialogo. Puede seleccionar si el enlace de fondo esta separado o no seleccionando o depurando en la caja de chequeo **Habilitar** de la sección **Intersección de Enlaces**.
Puede cambiar la posición de los enlaces cruzados aplicando los comandos **Traer Enlace al Frente** (CTRL+F) o **Enviar Enlace al Fondo** (CTRL+K) (menú **Herramientas**) para el enlace seleccionado. Puede traer el enlace del fondo al frente haciendo clic sobre este con la herramienta **Cambiar Posición**  activa mientras mantiene presionada la tecla SHIFT.



Intente dibujar las siguientes estructuras con las técnicas anteriores



[4,6]Fullerene-C₂₄



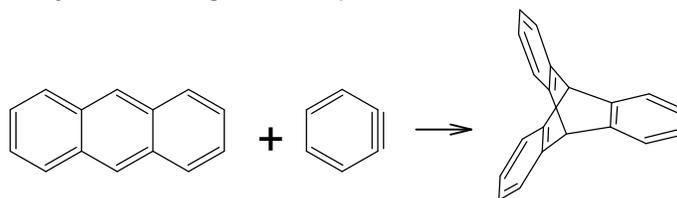
[5,6]Fullerene-C₂₄

6.5 Dibujando Esquemas de Reacción

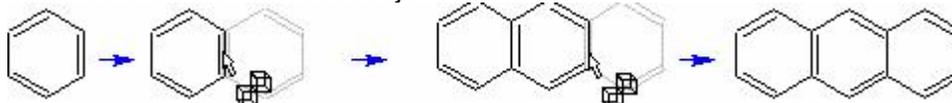


Esta sección se basa en la película **reaction.exe** que puede bajarse de nuestro sitio web o encontrarla en la carpeta películas.

En esta sección dibujaremos el siguiente esquema de reacción:

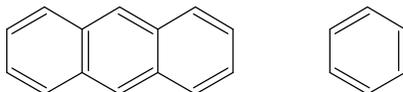


1. De la **Tabla de Radicales**  escoja **Benceno**  (si previamente ha usado esta plantilla, puede encontrarla al lado derecho de la barra Referencia).
2. Presione la tecla TAB para girar la plantilla sombreada y dibuje la siguiente estructura haciendo clic en la zona de trabajo varias veces:

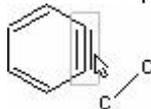


Nota Para dibujar Anillos fusionados, ubique el cursor directamente sobre el enlace de un anillo y haga clic.

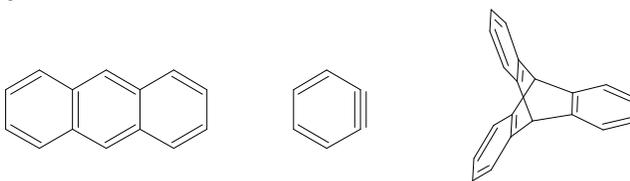
3. Presione TAB para girar la imagen de Nuevo y luego haga clic al lado de la estructura dibujada para posicionar un anillo separado. Con el botón derecho oculte la plantilla.



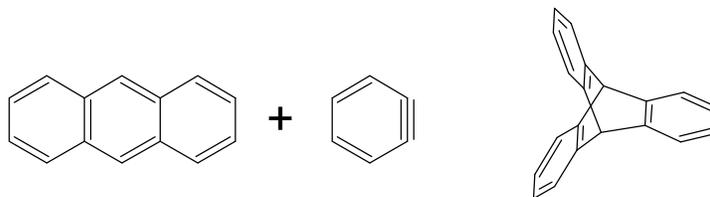
4. Haga clic en la herramienta **Dibujo Normal** en la parte superior de la barra Estructura y haga clic sobre el enlace del anillo para generar un triple enlace:



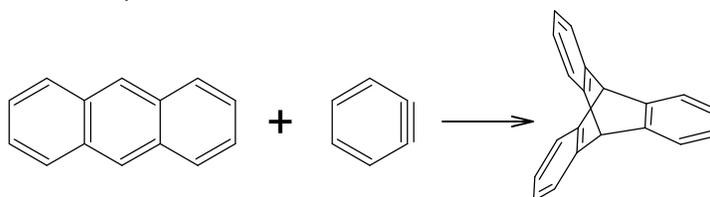
5. Dibuje la estructura del Tripticeno como se describió en la Sección 6.3.2 y póngalo al lado de la otra estructura dibujada:



6. De la barra Estructura escoja la herramienta **Más de Reacción**  y haga clic entre la primera y segunda estructura para colocarla:



7. Haga clic en la herramienta **Flecha de Reacción**  y luego haga clic o arrastre para posicionarla donde se quiera:



Nota Haciendo clic en la esquina del botón **Flecha de Reacción** puede escoger una variedad de flechas. Algunas flechas son tratadas como objetos Gráficos, sin embargo, pueden no exportarse adecuadamente.

8. Para mover el signo más o la flecha, en la herramienta **Seleccionar/Mover** , con el puntero en el objeto arrastre.

7. Dibujo Avanzado: Plantillas

7.1 Objetivos

Este capítulo presenta otros pasos para adquirir experiencia en dibujo avanzado, una vez que usted haya dominado la potencia de las características de las plantillas. Usted aprenderá a:

- Algunos usos de las plantillas que le pueden ayudar;
- Cómo aplicar la herramienta **Plantilla Instantánea** para dibujar estructuras que contengan fragmentos repetidos;
- Más formas de uso de la Tabla de Radicales;
- Cómo usar la Ventana Plantilla para dibujar moléculas de ADN y biomoléculas complejas;
- Cómo crear sus propias plantillas; y
- Qué plantillas están disponibles en nuestro sitio Web.

7.2 Resumen

ACD/ChemSketch incluye 3 herramientas de plantillas para estructuras:

- Tabla de Radicales ;
- Plantilla Instantánea ; y
- Ventana Plantilla .

Mientras que el punto de enlace de cualquier plantilla en la **Tabla de Radicales** es fija (invariable), la **Ventana Plantilla** y la herramienta **Plantilla Instantánea** le permite especificar cualquier átomo o enlace para enlazarlo a un punto simplemente con un clic sobre este. Sin embargo, no importa cual sea la fuente de la plantilla, los principios de asociación son los mismos. Hay varios caminos para asociar las plantillas con la estructura dibujada:

- ⇒ Usando los enlaces de la estructura y la plantilla: ponga el puntero del ratón sobre el enlace así que los correspondientes enlaces y la plantilla se unan, entonces haga clic
- ⇒ Ligando o uniendo la plantilla a la estructura: ponga el puntero del ratón sobre el correspondiente átomo de la estructura así que los enlaces conectados aparezcan y entonces haga un clic
- ⇒ Haciendo una conexión cíclica entre la plantilla y la estructura: ponga el puntero del ratón sobre el átomo que quiere enlazar y mantenga presionada la tecla SHIFT.

▮ **Nota** Usted puede girar la plantilla sombreada antes de fijarla presionando la tecla TAB.

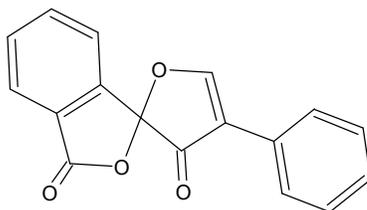
7.3 Tabla de Radicales

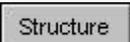
La Tabla de Radicales es un conjunto de radicales químicos para dibujar estructuras. Sus nombres y en algunos casos abreviaturas se listan para ayudarlo a trasladar rápidamente “taquigrafía química” dentro de una molécula significativa.

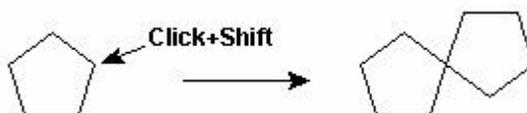
7.3.1 Creando la Estructura de Fluorescamina



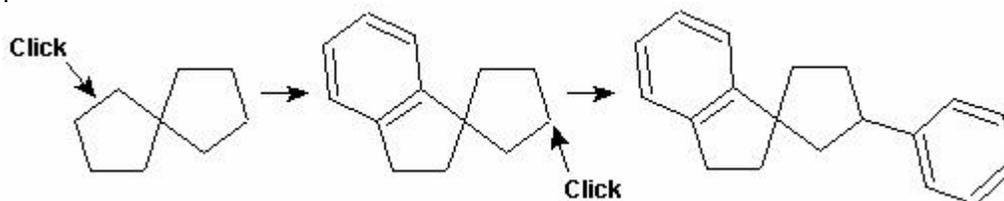
Esta sección esta basada en la película **fluor.exe** la cual puede bajarse de nuestro sitio web o encontrarla en la carpeta películas.



1. Escoja el modo Estructura  y borre todas las estructuras.
2. Haga clic en el botón **Tabla de Radicales**  en la esquina superior derecha de la ventana de ChemSketch. Haga clic en **Ciclopentano** .
3. Haga Clic en la zona de trabajo de ChemSketch para copiar el anillo.
4. Haga clic en el átomo indicado mientras mantiene presionada la tecla SHIFT para obtener la conexión cíclica con el segundo anillo de ciclopentano:

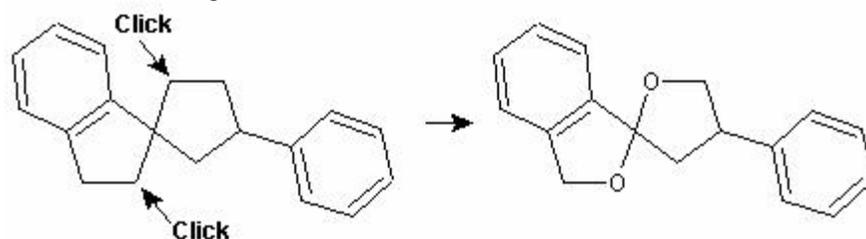


5. Desde la **Tabla de Radicales**  escoja **Benceno** . Primero haga clic sobre el enlace indicado para unir el anillo de benceno, entonces haga clic sobre el átomo indicado para conectar el radical fenilo:

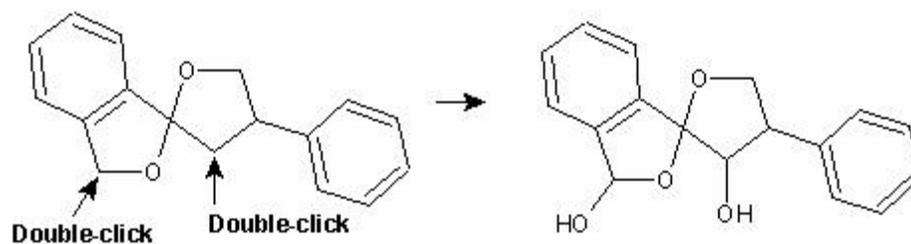


6. Escoja el botón **Oxígeno**  de la barra Átomos (note que la herramienta **Dibujo Normal**  automáticamente se habilita). Haga clic sobre los átomos indicados para remplazarlos

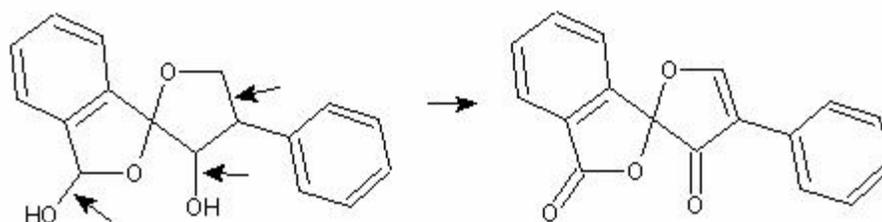
con los átomos de oxígeno:



7. Oprima el botón derecho para seleccionar rápidamente la herramienta **Dibujo Continuo** . Haga doble clic sobre los átomos indicados para unir los grupos OH a ellos:



8. Haga clic sobre el enlace simple indicado para remplazarlo por un doble enlace:



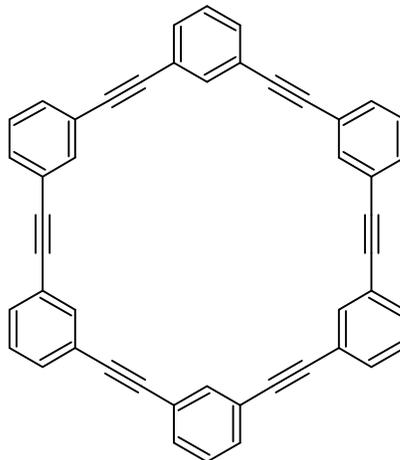
7.4 Herramienta Plantilla Instantánea

Si usted quiere copiar un fragmento molecular que no este en la Tabla de Radicales. Usted debe pensar en la herramienta **Plantilla Instantánea**  como un comando "Pegar". Esto es mejor que el simple pegado, porque usted puede especificar el punto de unión.

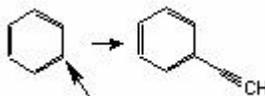
7.4.1 Creando la Estructura de un Oligómero Cíclico



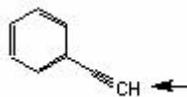
Esta sección se basa en la película **oligomer.exe** que puede bajarse de nuestro sitio web o encontrarla en la carpeta películas.



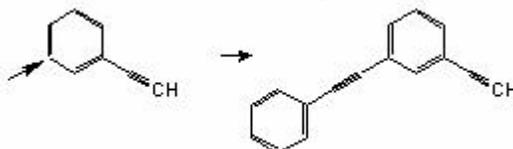
1. Escoja el modo Estructura  y borre todas las estructuras presionando CTRL+A y DELETE.
2. Desde la **Tabla de Radicales**  escoja **Benceno** . Ponga el cursor en la mitad superior de la zona de trabajo y haga clic para localizar el anillo de benceno.
3. Desde la **Tabla de Radicales** escoja **Etilino**  y haga clic sobre el átomo indicado con la flecha para unirlo al anillo:



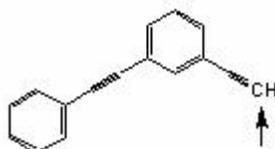
4. Escoja la herramienta **Plantilla Instantánea**  y haga clic sobre el átomo indicado para crear una plantilla instantánea



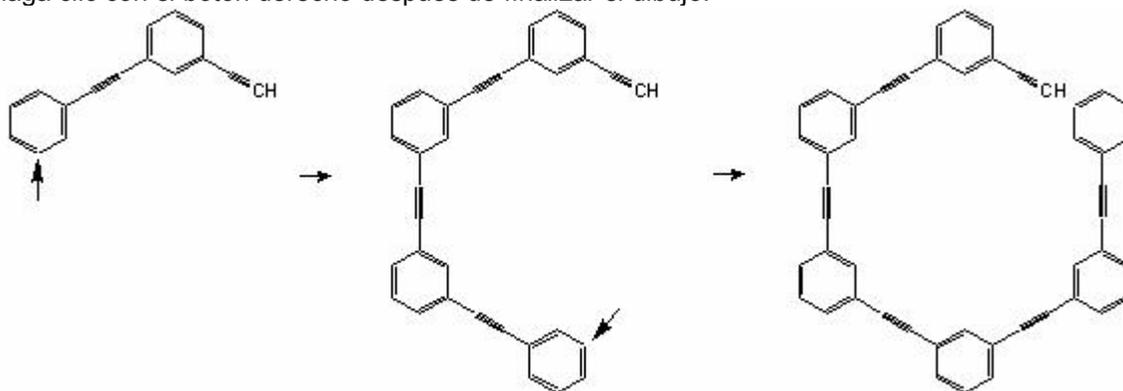
5. Haga clic sobre el átomo indicado con la flecha y una la plantilla:



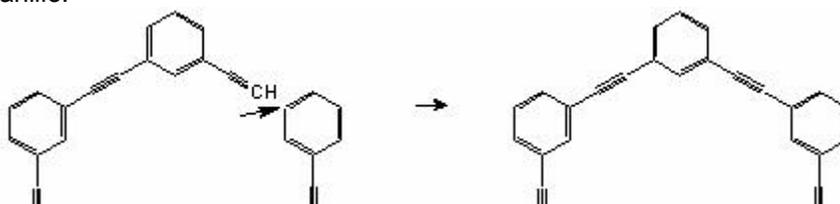
6. Haga clic  de Nuevo y clic sobre el átomo para crear la plantilla del fragmento completo:



7. Haga clic sobre los átomos para unir la plantilla como se muestra. Para ocultar la plantilla haga clic con el botón derecho después de finalizar el dibujo:



8. Escoja la herramienta **Dibujo Normal**  y haga clic sobre el átomo indicado para completar el anillo:



7.5 Ventana Plantilla

La característica de la Ventana Plantilla es la más sofisticada de las tres plantillas en ChemSketch porque permite organizar y almacenar estructuras o dibujos que se quieran copiar más tarde.

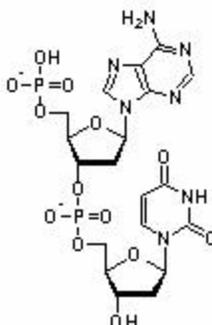


Un breve tour de plantillas ChemSketch disponibles se muestran en la película **templ_st.exe** que puede bajarse de nuestro sitio web o hallarse en la carpeta películas.

7.5.1 Creando un Fragmento de Molécula de ADN



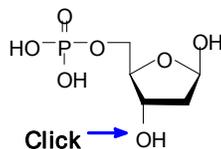
Esta sección se basa en la película **dna_st.exe** que puede bajarse desde nuestro sitio web o encontrarla en la carpeta películas.



Escoja el modo **Structure**  y borre las estructuras previamente dibujadas.

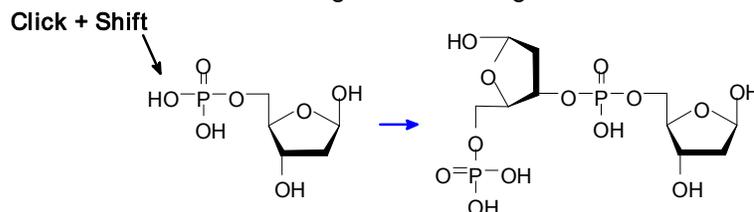
7.5.1.1 Dibujar un Fragmento de la cadena Desoxirribosa-5-fosfato

1. Abra la **Ventana Plantilla** . Del tabulador **DNA/RNA Kit** escoja **2-Desoxirribosa-5-fosfato** (forma cadena) haciendo clic sobre el átomo indicado:



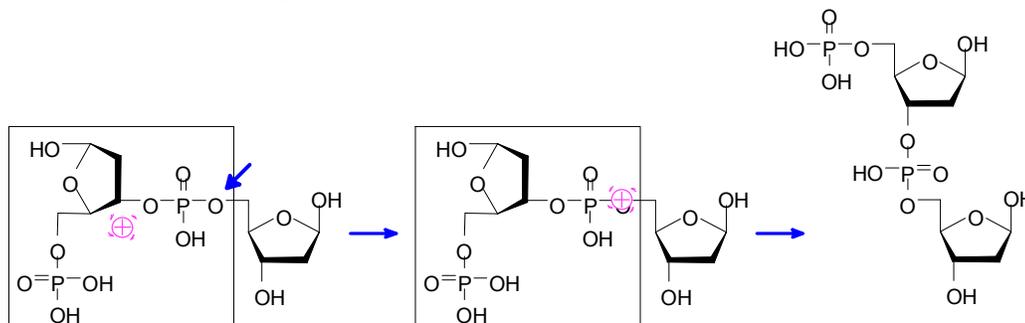
2-Deoxyribose-5-phosphate

2. Haga clic en la zona de trabajo para pegar la plantilla escogida.
3. Posicione el puntero del ratón sobre el átomo indicado y mientras mantiene presionada la tecla **SHIFT** una el siguiente fragmento 2-Desoxirribosa-5-fosfato:



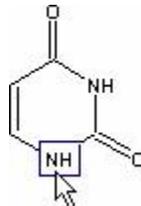
4. Escoja la herramienta **Seleccionar/Rotar/Redimensionar** .
5. Seleccione la parte indicada de la estructura arrastrando la selección rectángulo alrededor de

este. Arrastre el centro de acción  sobre el átomo de oxígeno indicado por la flecha. Entonces mantenga presionada la tecla **SHIFT** y arrastre la parte de la estructura seleccionada para girarla 90° en el sentido de las manecillas del reloj:

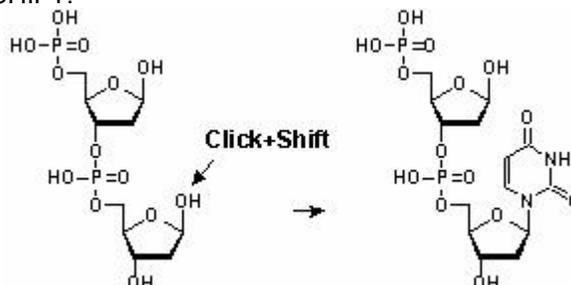


7.5.1.2 Adicionando las Bases

1. Abra la **Ventana Plantilla** . Desde el tabulador **DNA/RNA Kit**  escoja la base que usted necesita haciendo clic sobre el átomo que será el punto de enlace. Por ejemplo, escoja uracilo, haga clic sobre el átomo de N mostrado que será el punto de enlace:

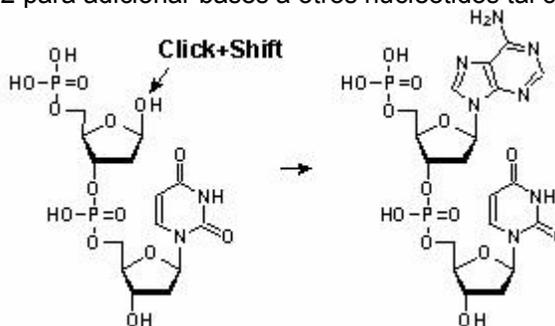


2. Posicione el puntero del ratón sobre el átomo indicado abajo y haga clic mientras mantiene presionada la tecla SHIFT:



Importante Usted puede girar la plantilla sombreada antes de fijarla presionando la tecla TAB.

3. Repita los pasos 1 y 2 para adicionar bases a otros nucleótidos tal como la adenina:



Ahora intente dibujar fragmentos de ADN o ARN de cualquier longitud.

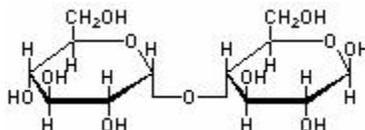
7.6 Dibujando Biomoléculas Complejas

Aquí hay algunos ejemplos para crear biomoléculas complejas usando diferentes herramientas de ACD/ChemSketch.

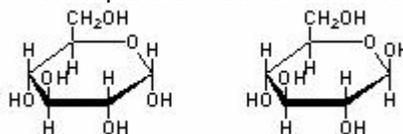
7.6.1 Creando la Estructura de β -Maltosa



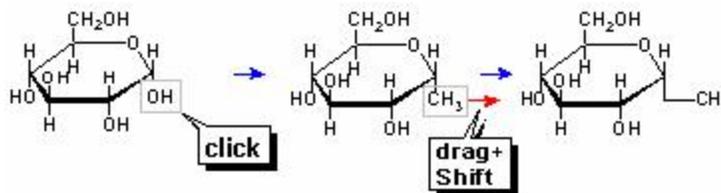
Esta sección se basa en la película **maltose.exe** que puede bajarse de nuestro sitio web o encontrarla en la carpeta películas.



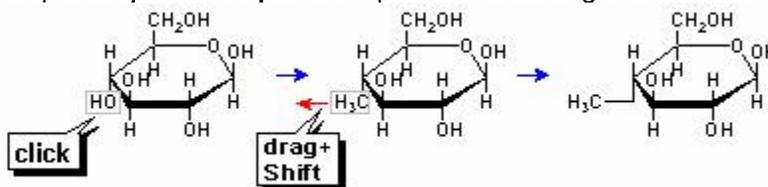
1. Escoja el modo **Structure** y borre cualquier estructura previamente dibujada.
2. En la **Ventana Plantilla** seleccione el tabulador **Sugars: alfa-D-Pyr** y confirme que usted esta viendo en la página la fórmula de Haworth : **1(4) Haworth Formulae**. Si no, haga clic sobre la flecha de la derecha de la caja de texto y escoja la correcta.
3. Haga clic una vez sobre **α -D-Glucopiranososa** para seleccionarla y haga clic en la zona de trabajo para copiarla.
4. Repita los pasos 1-3, pero esta vez seleccione la beta-D-piranososa **Sugars: beta-D-Pyr** y escoja **β -D-Glucopiranososa**
5. Haga clic en la ventana ChemSketch para ubicarla a la derecha de la primera estructura.



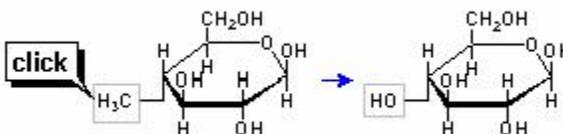
6. Escoja el botón **Carbono**. Haga clic en el átomo indicado en la estructura de la **α -D-Glucopiranososa** para remplazarla con un grupo CH_3 y entonces arrastre desde el grupo CH_3 hacia la derecha mientras mantiene presionada la tecla SHIFT para dibujar el enlace con un ángulo recto:



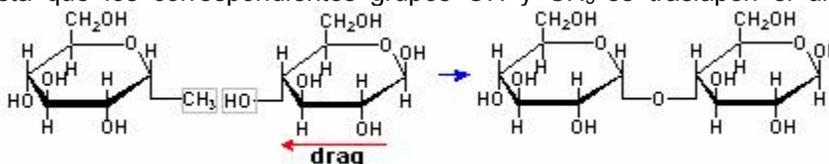
7. Repita el paso 3 para la **β -D-Glucopiranososa** para obtener la siguiente estructura:



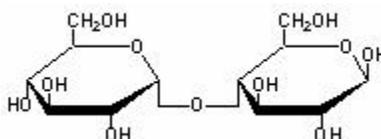
8. Escoja el botón **Oxígeno**  y haga clic en el átomo indicado en la estructura β -D-Glucopiranosas:



9. Escoja la herramienta **Seleccionar/Mover**  Haga clic en la zona de trabajo adyacente a la anterior pero no tocando la β -D-Glucopiranosas para seleccionarla. Ponga el cursor del ratón sobre cualquier átomo o enlace de la estructura seleccionada y arrástrelo hacia la izquierda hasta que los correspondientes grupos OH y CH₃ se traslapen el uno al otro:



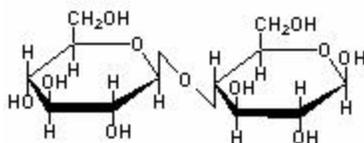
10. Si decide, oculte los hidrógenos en la estructura seleccionada escogiendo el comando **Remove Hidrógenos Explícitos** del menú **Herramientas**:



Nota Aunque los átomos de carbono enlazados al oxígeno central están ocultos, ellos están presentes. Si el significado químico es importante para su tarea (por ejemplo, en el cálculo del peso fórmula) usted puede remover estos átomos de la siguiente forma. Con la herramienta **Seleccionar/Mover**  activa haga doble clic sobre los átomos ocultos. Cuando el panel **Propiedades** aparece, haga clic sobre el tabulador **Atom** luego sobre el botón **Símbolo de Átomo**  y desde la caja **Valor** en la lista desplegable escoja **Vacío** . Haga clic sobre **Aplicar**.



Intente dibujar la siguiente estructura usando la técnica descrita arriba:



β -Celobiosa

7.7 Definiendo una Plantilla de Usuario

Es fácil asignar archivos ChemSketch como una plantilla. Desde la primavera de 1998, nosotros estamos ofreciendo plantillas libres, excepto aquellas incluidas con el paquete de instalación de ChemSketch, estas pueden bajarse desde nuestro sitio web.⁴ Esta es una página que intercambia plantillas, así que si usted tiene un conjunto de estructuras o dibujos que puedan ayudarle a la comunidad ChemSketch considere compartirlas!

Para designar un archivo ChemSketch como una plantilla, recomendamos que usted:

1. Guarde las estructuras que ha dibujado como archivos SK2 en la carpeta **Plantillas** O abra el archivo SK2 de interés en ChemSketch.
2. Desde el menú **Plantillas** escoja el comando **Salvar Plantilla de Usuario**.
3. En la caja de dialogo **Salvar Plantilla de Usuario** escriba el nombre para su plantilla, tal como "Alcaloides", y busque para obtener el camino para guardar su archivo, tal como "C:\ACD45\Plantillas\alcaloides.sk2." Clic en **OK**.

Nota Si usted entra cualquier nombre para su documento (por ejemplo, para el documento b_d_fur.sk2 el siguiente nombre -Azucares: beta-D-Furanosa—debería ser más apropiado).

Una vez que su documento esta guardado como una plantilla de usuario, el nombre que le puso se adiciona automáticamente a la lista de plantillas en la **Ventana Plantillas** (accesible desde el menú **Plantillas**).

Nota Usted puede crear una plantilla de usuario de cualquier documento aún si este esta cerrado. Desde el menú **Plantillas**, seleccione **Organizador de Plantillas**. Haga clic en el botón **Nuevo...** , encuentre el documento necesario y asígnele su nombre.

7.7.1 La Ventana Organizador de Plantillas

La **Ventana Organizador de Plantillas** es un camino muy conveniente para manejar archivos de plantillas: las incluidas con el software y aquellas que usted haya decidido crear. Justamente le tomará un minuto para salvar su documento ChemSketch como una plantilla. Note que la unica diferencia entre el archivo como plantilla y el archivo regular *.SK2 es el hecho de que el archivo plantilla es asignado como una plantilla en la Ventana Organizador de Plantillas. Guardando archivos por este camino tiene varias ventajas:

- Sus archivos *.sk2 esparcidos en diferentes directorios y discos serán reunidos en un solo lugar (en la Ventana Organizador de Plantillas).
- Usted puede asignar un nombre a la plantillas de tal forma que sean más descriptivas que el nombre del archivo real. Esto reflejará mejor los contenidos del documento y le permite rápidamente hallar el documento que necesite.
- Usted puede halla rápidamente el documento previsualizando sus contenidos en el Área Previsualización de la Ventana Plantillas.
- Puede abrir o seleccionar un documento de la lista justamente haciendo clic en el botón **Abrir Documento** en la Ventana Organizador de Plantillas.
- Hasta 15 plantillas pueden accederse a través de la Ventana Plantillas.

⁴ Verifique primero en la carpeta "Plantillas" del software libre ACD/ChemSketch para la plantilla escogida. Si no la encuentra, vaya a, http://www.acdlabs.com/download/download_templates.html.

Usted puede hacer las siguientes tareas con la Plantilla de Usuario:

- ⇒ Modificar la plantilla. Escoja desde la Lista de Plantillas (**Organizador de Plantillas**) la plantilla que necesita y haga clic en el botón **Abrir Documento**. Haga los cambios necesarios y guarde.
- ⇒ Copiar alguna parte de su plantilla en la zona de trabajo (Modos Estructura o Dibujo) sin abrir el documento completo. Para hacer esto, encuentre su plantilla en la Lista de Plantillas (**Ventana Plantillas**) y haga clic sobre el elemento para ubicarlo en la zona de trabajo.

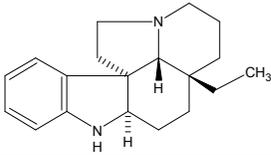
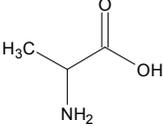
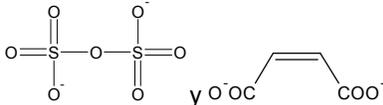
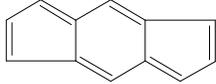
7.7.2 El Archivo Plantilla.cfg

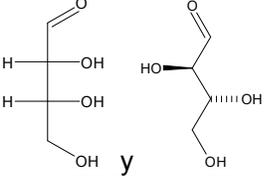
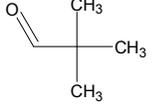
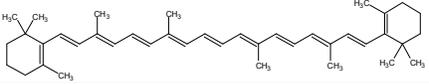
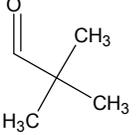
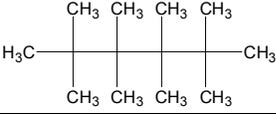
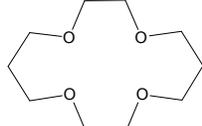
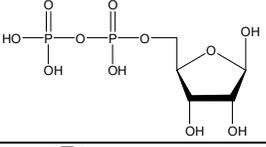
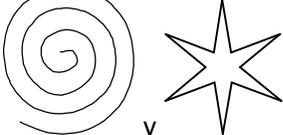
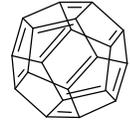
La clave de manejo de las plantillas en ACD/ChemSketch es el archivo **plantilla.cfg**. este archivo le permite a ChemSketch conocer que un archivo .SK2 es un archivo de plantilla mejor que un simple archivo de usuario. Puede abrirse y leerse con cualquier editor de texto, aunque nunca necesitará hacer esto. La Ventana Plantilla accede a "plantilla.cfg" para permitirle saber que archivos se muestran como plantillas. Si un archivo .SK2 no se muestra en la Ventana Plantillas, este se añadirá a "plantilla.cfg" cuando usted abra el SK2 como un archivo normal de ChemSketch y seleccione el comando salvar como una plantilla de usuario.

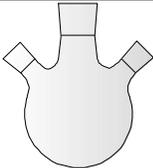
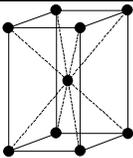
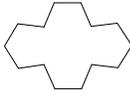
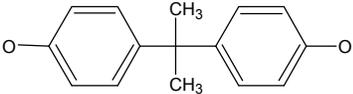
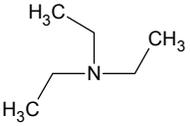
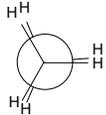
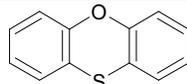
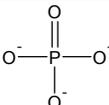
Si la **plantilla.cfg** es movida o perdida, la **Ventana Plantilla no mostrará ninguna plantilla**. Si el archivo plantilla.cfg se encuentra (por el Explorador de Windows, por ejemplo, o por la utilidad del sistema "Buscar Archivo") este puede ser recuperado al directorio por defecto o al directorio privado del usuario. Si ni se puede encontrar, puede ser recuperado reinstalando ChemSketch o adicionando cada plantilla como se detalla enseguida.

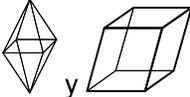
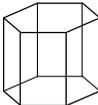
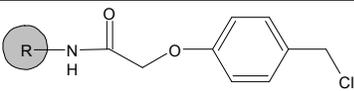
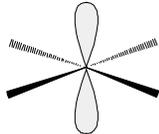
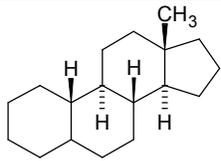
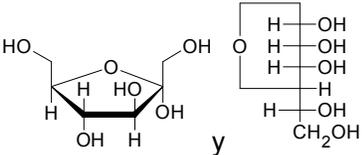
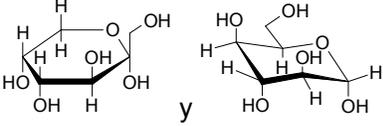
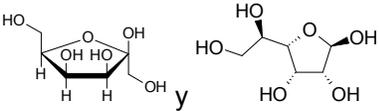
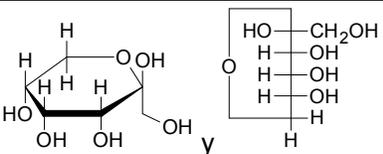
7.7.3 Plantillas Disponibles

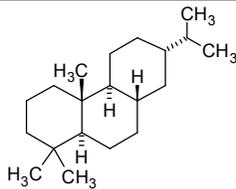
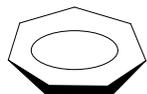
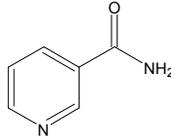
Desde el otoño del 2000, esta es la lista de plantillas que se han incluido tanto en la versión libre como comercial de ChemSketch. Puede encontrarlos en la carpeta Plantillas después de la instalación. Si no ve la plantilla necesita listar la Ventana Plantillas para hacer la asignación. (Solo se dispone de 15 espacios para plantillas al tiempo y nosotros proveemos muchos más archivos SK2.)

Contenidos	Nombre de Archivo	Comentarios	Muestra
Alcaloides	alkaloid.sk2	11 páginas, listadas alfabéticamente por el nombre común.	
Amino Acidos	aminacid.sk2	2 páginas, con nombres de moléculas y C-radicales, y con abreviaturas de 3 letras.	
Aniones - Nuevo!	anions.sk2	2 páginas, de aniones inorgánicos y orgánicos con nombres y fórmulas moleculares.	
Aromaticos	aromatic.sk2	1 página, principalmente con anillos de 5- y 6-miembros con sus nombres.	
Flechas	arrows.sk2	2 páginas de flechas largas, curvas, coloreadas y complejas.	

Contenidos	Nombre de Archivo	Comentarios	Muestra
Biciclos	bicycles.sk2	1 página con estructuras de dos o más ciclos, muchos de ellos con nombres.	
Carbohidratos	sugars.sk2	3 páginas con proyecciones de Haworth, Fisher, con nombres. (Ver también 'Azúcares' abajo.)	
Carbonilos	carbonyl.sk2	1 página de fragmentos estructurales que contienen el enlace C=O; sin nombres.	
Carotenos	carotene.sk2	5 páginas de alquenos conjugados con nombres.	
Groups C	c_groups.sk2	1 página de fragmentos estructurales con formula.	
Cadenas	chains.sk2	2 páginas de cadenas saturadas (con nombre) y de insaturadas (sin nombre).	
Exámen Chem	chemquiz.sk2	2 páginas de texto y figuras, que muestran varias preguntas ejemplo dibujadas de otras plantillas.	
Eteres Corona	crowns.sk2	1 página de éteres cíclicos, con nombre y solamente en 2D.	
Kit ADN/ARN	nucleo.sk2	2 páginas de componentes estructurales ADN. Ver también el constructor de Utilidades(Goodies) (Sección 13.3).	
Figuras	set.sk2	1 página de elementos ordenados como lazos de ADN, micelas y espirales.	
Fulerenos	fuller.sk2	1 página de fulerenos saturados e insaturados.	

Contenidos	Nombre de Archivo	Comentarios	Muestra
Lab Kit - Exhaltado!	kit.sk2	7 páginas de piezas comunes de laboratorio con sus nombres.	
Etiquetas	labels.sk2	1 página de etiquetas de seguridad.	
Rejillas	lattice.sk2	1 página de redes cristalinas estándar, con sus nombres.	
Estructuras de Lewis	lewistr.sk2	1 página que describe como dibujar diagramas de Lewis y una página con diagramas de Lewis.	$:\ddot{\text{Cl}}: \text{Mg}^{2+} : \ddot{\text{Cl}}:$
Alcanos Monociclicos	cycloalk.sk2	1 página de anillos de carbono, entre 3-20 átomos.	
Plantilla Monomeros	monomers.sk2	3 páginas de bloques construidos de polímeros comunes, sin nombre.	
Grupos que contienen N.	n_groups.sk2	1 página de fragmentos estructurales que contienen Nitrógeno.	
Proyecciones de Newman	newmans.sk2	2 páginas de conformaciones anti, gauche, eclipsadas y alternadas.	
Anillos con N	n_rings.sk2	3 páginas de anillos mono-, bi- y triciclicos que contienen nitrógeno.	
Anillos con O y S	os_rings.sk2	1 página de anillos mono-, bi- y triciclicos que contienen oxígeno y azufre.	
Orbitales	orbitals.sk2	2 páginas de orbitales s, p, d, sigma y pi grandes y pequeños.	
Compuestos con Fósforo	phosphor.sk2	1 página de estructuras con nombre que contienen fósforo.	

Contenidos	Nombre de Archivo	Comentarios	Muestra
Policiclos	polycycl.sk2	1 página de puentes saturados y/o estructuras fundidas, con nombres.	
Poligonos	polygons.sk2	1 página de sólidos geométricos.	
Polilineas	polyline.sk2	1 página con otros sólidos geométricos.	
Simbolos de Reacción	reacsym.sk2	1 página de símbolos comunes.	ΔG^\ddagger
Anillos	rings.sk2	1 página con anillos de 5- y 6-miembros.	
SP Sintesis de Resinas	linkers.sk2	1 página de fragmentos de resinas con nombre, todas unidas en fase sólida.	
Plantillas Estereo	conform.sk2	1 página de dibujos (no estructuras) para mostrar conformaciones estereo.	
Esteroides	steroid.sk2	3 páginas de esteroides, con nombre trivial	
Azúcares: alfa-D-Fur	a_d_fur.sk2	3 páginas de azúcares de 5-miembros, con proyecciones de Haworth, estereo y Fisher, con nombre.	
Azúcares: alfa-D-Pyr	a_d_pyr.sk2	4 páginas de azúcares de 6 miembros, con proyecciones de Haworth, estereo, silla y Fisher, con nombres.	
Azúcares: beta-D-Fur	b_d_fur.sk2	3 páginas con azúcares de 5-miembros, con proyecciones de Haworth, estereo y Fisher, con nombres.	
Azúcares: beta-D-Pyr	b_d_pyr.sk2	4 páginas de azúcares de 6 miembros, con proyecciones de Haworth, estereo, silla y Fisher, con nombres.	

Contenidos	Nombre de Archivo	Comentarios	Muestra
Terpenoides	terpen.sk2	5 páginas de terpenos comunes, con nombres.	 <chem>CC(C)C[C@H]1CC[C@@H]2[C@@]1(CC[C@H]3[C@H]2CC=C4[C@@]3(CC[C@@H](C4)C)C)C</chem>
Anillos Inclinados	tipped.sk2	1 página de Anillos mostrados en perspectiva.	 <chem>C1CCCCC1</chem>
Vitaminas - Nuevo!	vitamins.sk2	3 página de vitaminas desde la A hasta la U con nombres.	 <chem>NC(=O)c1cccnc1</chem> Vitamina B ₃

8. Creando Objetos Gráficos

8.1 Objetivos

Este capítulo lo familiarizará con la creación de objetos gráficos, así que escoja el modo Dibujo antes de proceder con cualquier ejercicio en este capítulo.

Aprenderá cómo usar el modo Dibujo para crear los siguientes objetos:

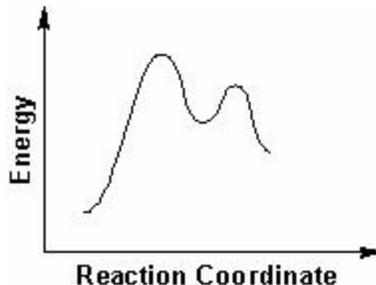
- un diagrama de energía de reacción;
- diferentes tipos de orbitales;
- aparato de destilación al vacío;
- una trenza de la cadena de ADN;
- lípidos y micelas; y
- anuncios en arreglos multipáginas.

También aprenderá cómo sacar archivos PDF, una tarea que puede hacerse para gráficos u objetos químicos.

8.2 Dibujar un Diagrama de Energía de Reacción



Esta sección se basa en la película **diagram.exe** que puede bajarse de nuestro sitio web o hallarla en la carpeta Películas.

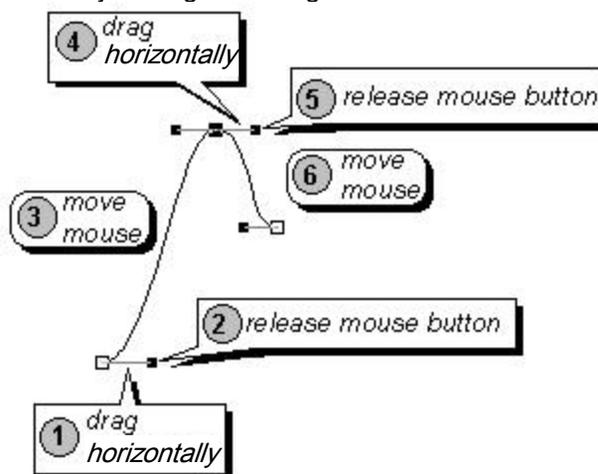


Escoja el modo **Dibujo** y seleccione la herramienta **Poli Línea**



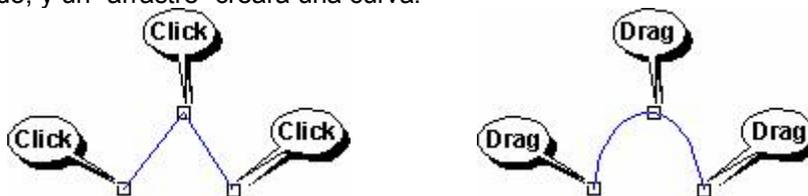
8.2.1 Dibujar una Curva

1. Arrastre horizontalmente hacia la derecha del punto de inicio de la curva para extender la línea de control.
2. Libere el botón del ratón.
3. Mueva el ratón hacia arriba para dibujar el primer segmento de la curva.
4. Arrastre horizontalmente hacia la derecha para extender la línea de control. Cambiando la longitud de la línea de control puede modificar un segmento de la curva.
5. Libere el botón del ratón.
6. Mueva el ratón hacia abajo para dibujar el siguiente segmento.



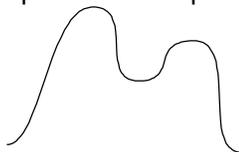
7. Repita los pasos anteriores para dibujar los dos segmentos siguientes.
8. Haga clic con el botón derecho para finalizar la curva.

Importante Cuando se dibuja con la herramienta poli línea, esta le ayuda a recordar que debe hacer un “clic” que creará un punto final, una cúspide, o un ángulo agudo, y un “arrastre” creará una curva:



8.2.2 Modificando una Curva

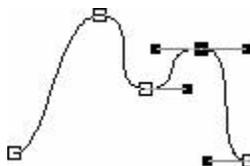
La primera vez que usted dibuja con la herramienta **Poli línea** tendrá algunos errores haciendo la curva que usted quiere. Por ejemplo, el primer intento puede producir algo así como:



1. Si la curva no está seleccionada, haga clic en la herramienta **Seleccionar/Mover**  y entonces haga clic sobre la curva.
2. Haga clic en la herramienta **Editar Nodos** . Esto mostrará todos los nodos de la poli línea que pueden ser modificados:



3. Haga clic en el tercer nodo y verá el nodo seleccionado y aparecen las líneas de control:



4. Mueva las líneas de control y seleccione y modifique otros nodos hasta que la curva muestre el camino que usted quiere.

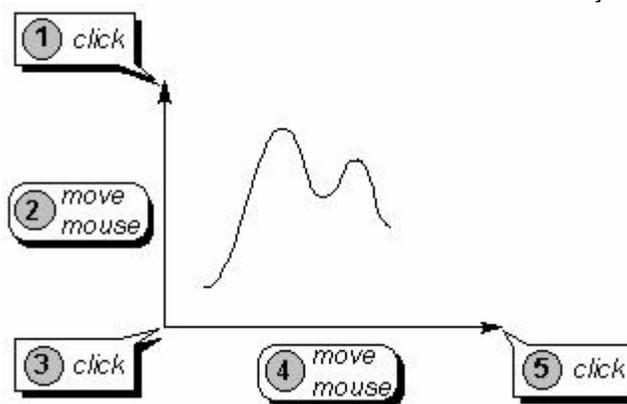
Importante Cuando se usa la herramienta **Editar Nodo**, usted puede manipular nodos usando los botones sobre la barra Nodos que aparece. Por ejemplo, usted puede seleccionar varios nodos haciendo clic sobre ellos con SHIFT y entonces alinearlos escogiendo el correspondiente botón sobre la barra de herramientas.

8.2.3 Dibujando los ejes X y Y

Asegúrese que la herramienta **Poli línea**  esta seleccionada.

Seleccione la herramienta **Dibujar Flecha** . En el panel **Flecha** de la opción **Tipo de Flecha** despliegue la lista  escoja la flecha de doble vía .

1. Haga clic en el punto final del eje Y.
2. Mueva el ratón hacia abajo verticalmente para dibujar los ejes.
3. Haga clic para fijar el punto de intersección de los ejes.
4. Mueva el ratón horizontalmente hacia la derecha para dibujar el eje X. Haga clic para fijar el punto del eje X.



5. Con el botón derecho finalice el dibujo de los ejes.

Importante Puede fácilmente dibujar los ejes en ángulo recto escogiendo previamente el comando **Escoger (Snap) sobre Rejilla y/o Mostrar Rejilla** (menú **Opciones**).

6. Adicione inscripciones usando la herramienta **Texto**  y **Rotando 90°** .

 *Aquí tiene un reto.* Use la herramienta **Texto** para imprimir una palabra en la zona de trabajo. Selecciónela y cambie el tamaño de fuente a 36 puntos y de color Amarillo. Ahora use la herramienta **Poli línea** para escribir la palabra encima. (Sugerencia: “escriba” la palabra como mejor pueda, entonces utilice la herramienta **Editar Nodos** libremente.)

Chemistry

8.3 Dibujar Diferentes Clases de Orbitales



Esta sección se basa en la película **orbital.exe** que puede bajarse de nuestro sitio web o encontrarla en la carpeta películas.

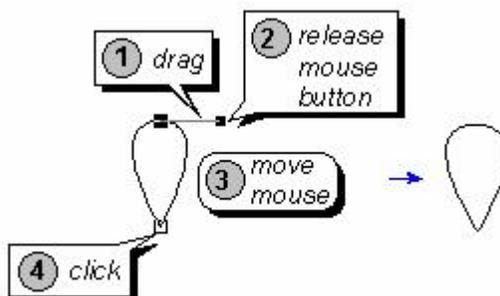
Escoja el modo .

8.3.1 Dibujar un orbital p

Para dibujar este orbital  haga lo siguiente:

Seleccione la herramienta **Polígono** .

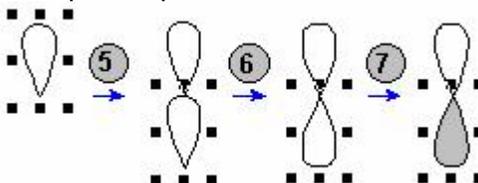
1. Arrastre horizontalmente hacia la derecha del punto de inicio del orbital para extender la línea control.
2. Libere el botón del ratón.
3. Mueva el ratón hacia abajo para dibujar el cuerpo del orbital.
4. Haga clic para fijar el orbital.



Nota Si la forma de la curva no es la que usted quiere, use la herramienta **Editar Nodos**



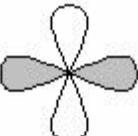
5. Haga clic dos veces con el botón derecho para finalizar el dibujo del orbital y para escoger rápidamente la herramienta **Seleccionar/Mover/Redimensionar** . Posicione el cursor sobre el orbital seleccionado; mientras mantiene presionada la tecla CTRL arrastre hacia abajo para hacer una copia del orbital dibujado.
6. Escoja el botón **Girar de Arriba Hacia Abajo (Flip Top to Bottom)**  para girar el segmento inferior del orbital. Alínie los segmentos moviéndolos.
7. Escoja el botón del color gris en la **Paleta Colores** (en la parte inferior de la zona de trabajo) haga clic con el botón izquierdo para cambiar el color de relleno del segmento de orbital.



Importante Para centrar rápidamente el segmento de orbital, selecciónelo y haga clic en el botón **Centrar Horizontalmente** .

8. Seleccione los dos segmentos del orbital y haga clic en el botón **Agrupar** . Ahora usted puede manipular los segmentos como un simple objeto, por ejemplo, rotarlo usando la herramienta **Seleccionar/Mover/Rotar** .

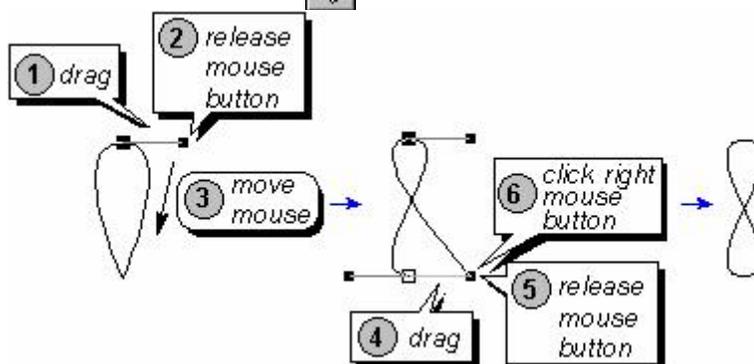
8.3.2 Dibujar un orbital d

Para dibujar el orbital  haga lo siguiente:

Seleccione la herramienta **Polígono** .

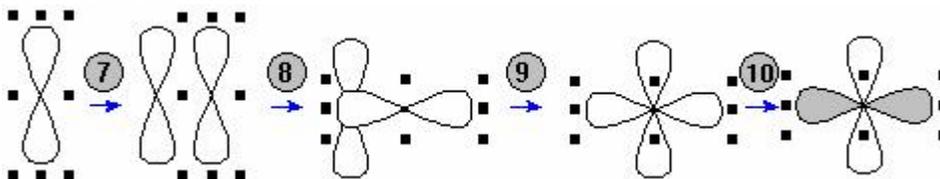
1. Arrastre horizontalmente hacia la derecha desde el punto de inicio del orbital para extender la línea de control.
2. Libere el botón del ratón.
3. Mueva el ratón hacia abajo para dibujar el cuerpo del orbital.
4. Arrastre horizontalmente hacia la derecha para extender las líneas de control. Note que para hacer los dos segmentos del orbital idénticos, debe hacer las líneas de control iguales.
5. Libere el botón del ratón.
6. Con el botón derecho finalice el dibujo del orbital y escoja la herramienta

Seleccionar/Mover/Redimensionar .



Importante Usted puede dibujar el orbital simétrico fácilmente escogiendo previamente el comando **Escoger sobre Rejilla** (menú **Opciones**).

7. Seleccione el orbital y mantenga presionada la tecla CTRL arrastre para hacer una copia.
8. Escoja el botón **Rotar 90°**  para rotar la copia del orbital.
9. Mueva la copia arrastrandola.
10. Escoja el botón color gris de la **Paleta de Colores** y haga clic con el botón izquierdo para cambiar el color del orbital:



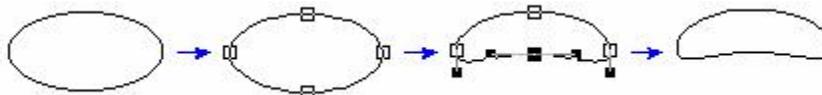
Importante Para centrar rápidamente los orbitales, selecciónelos y haga clic en el botón **Centrar Horizontalmente** .

11. Seleccione los dos orbitales y haga clic en el botón **Agrupar** . Ahora usted puede manipular los orbitales como un simple objeto gráfico, por ejemplo, rotar usando la herramienta **Seleccionar/Mover/Rotar** .

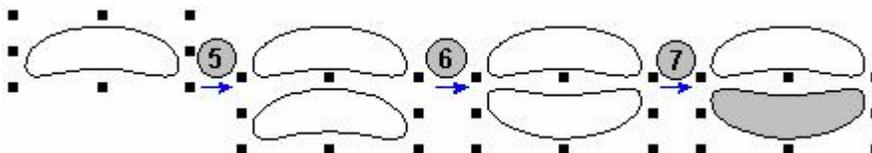
8.3.3 Dibujar un orbital tipo pi

Para dibujar este orbital  haga lo siguiente:

1. Seleccione la herramienta **Elipse**  y arrastre en la zona de trabajo para dibujar una elipse.
2. Desde el menú **Objetos** escoja el comando **Convertir a Poli línea**.
3. Seleccione la herramienta **Editar Nodos** .
4. Arrastre el nodo inferior hacia arriba.



5. Con el botón derecho escoja la herramienta **Seleccionar/Mover/Redimensionar**  y selecciones el orbital sobre su contorno y manteniendo presionada la tecla CTRL arrastre para hacer una copia de este.
6. Escoja el botón **Girar de Arriba hacia Abajo**  para girar el orbital inferior.
7. Active el botón color gris en la **Paleta de Colores** y haga clic con el botón izquierdo del ratón para cambiar el color del orbital.



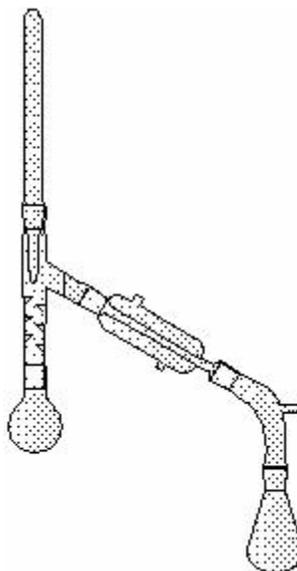
Importante Para centrar rápidamente los orbitales, selecciónelos y haga clic en el botón **Centrar Horizontalmente** .

8. Seleccione ambos orbitales y haga clic en el botón **Agrupar** . Ahora usted puede manipularlos como un objeto simple.

8.4 Dibujar un Aparato de Destilación al Vacío



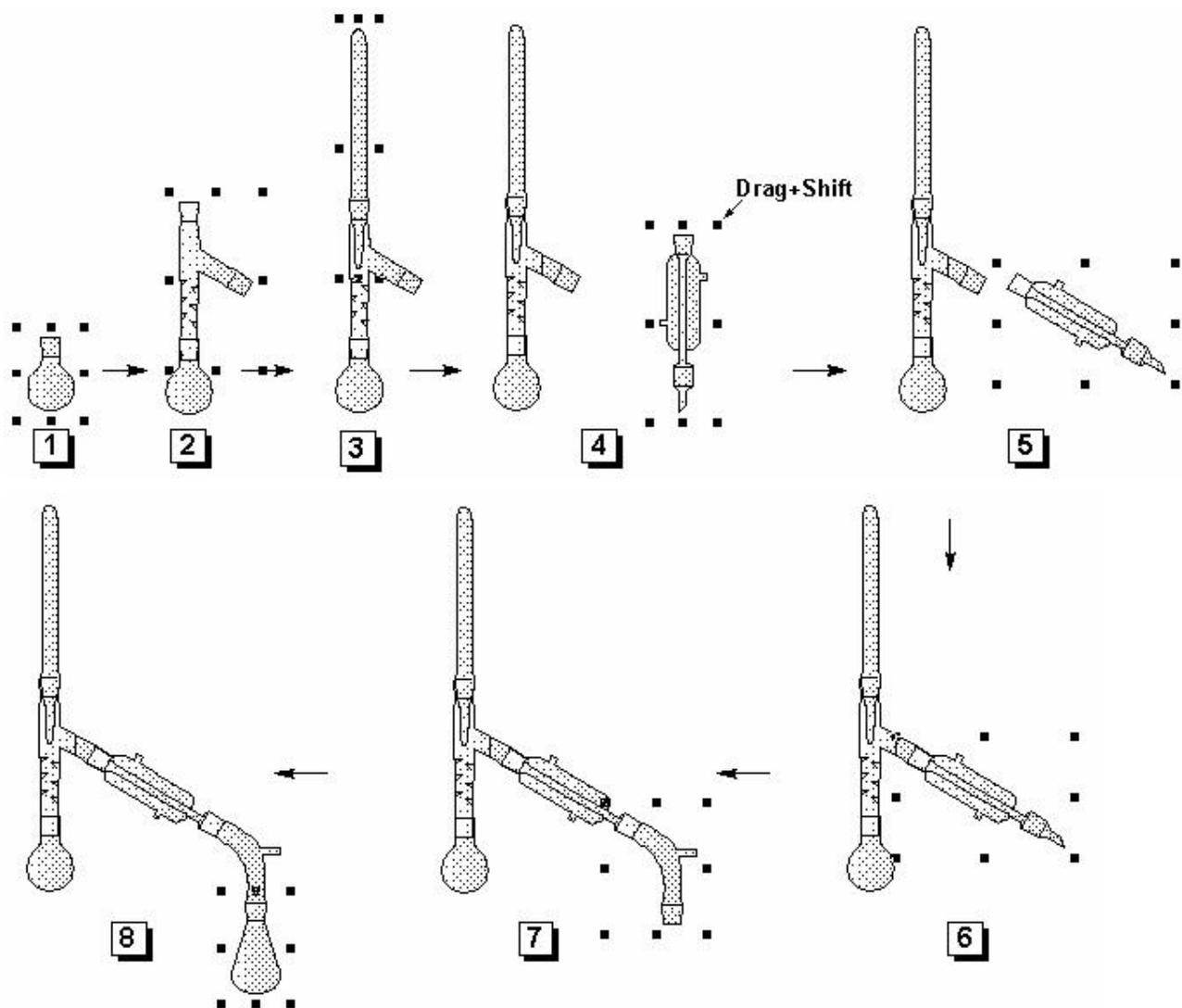
Esta sección se basa en la película **apparat.exe** que puede bajarse de nuestro sitio web o encontrarla en la carpeta películas.



Active el modo **Dibujo** y seleccione una ampliación de 50%.

En la **Ventana Plantillas**  escoja el tabulador **Kit de Laboratorio** desde la **Lista de Plantillas**.

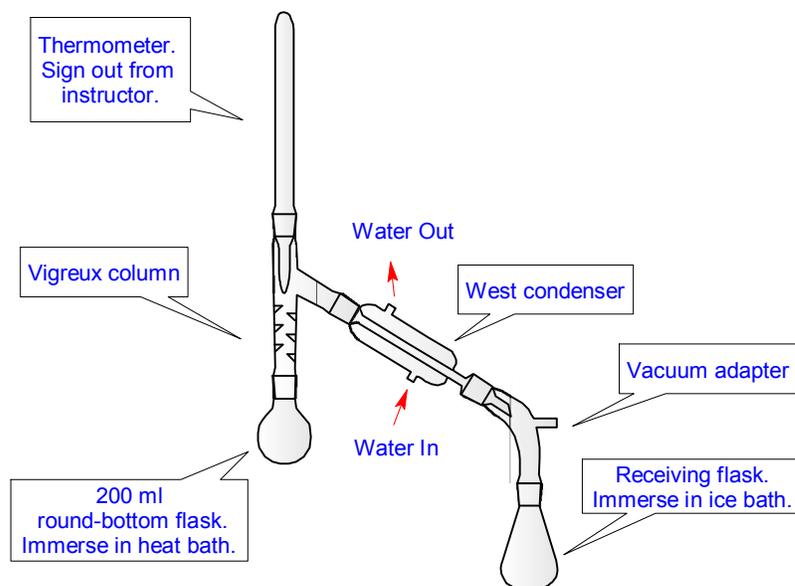
1. Seleccione el balón de fondo Redondo haciendo clic en él. Haga clic en la zona de trabajo para posicionar la plantilla seleccionada. Luego con el botón derecho oculte la plantilla usada.
2. Abra la **Ventana Plantillas**. Seleccione el adaptador de tres vías (Columna de destilación Vigreux con adaptador de conexión). Conéctelo al balón y con el botón derecho oculte la plantilla sombreada.
3. Desde la Ventana Plantillas escoja termómetro y conéctelo hacienda clic como se muestra. Oculte la plantilla sombreada.
4. Desde la Ventana Plantillas escoja el condensador de Liebig y ubíquelo en la zona de trabajo cerca del aparato haciendo un clic. Con el botón derecho oculte la plantilla sombreada y escoja la herramienta **Seleccionar/Mover/Redimensionar** .
5. Haga clic tocando en cualquier parte (un cuadro negro aparece alrededor de la columna) para escoger rápidamente la herramienta **Seleccionar/Mover/Rotar** . Rote el objeto seleccionado cerca de 73° hacia la derecha arrastrando y tocando la selección. El cursor le informa el ángulo de rotación (si la opción correspondiente ha sido seleccionada en el tabulador **General** de la caja de diálogo **Preferencias** (menú **Opciones**)).
6. Mueva la columna arrastrándola para unirla al aparato.
7. Desde la Ventana Plantillas seleccione el adaptador de destilación al vacío y únalo al aparato.
8. Complete el dibujo conectando el balón de recepción (balón de fondo redondo).



8.4.1 Anotaciones en un Diagrama

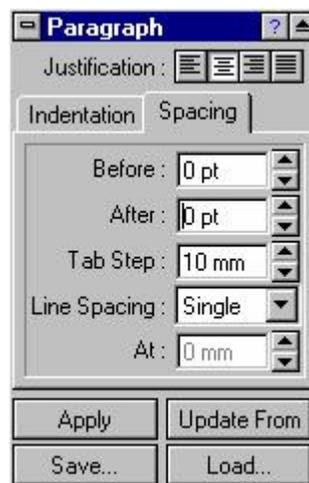
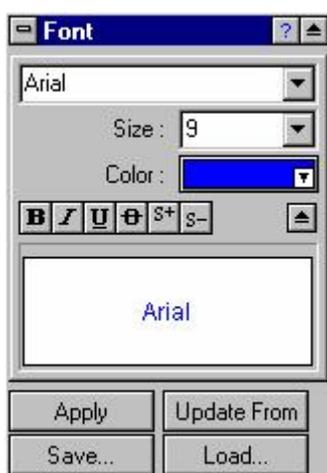
ACD/ChemSketch lo habilita para dibujar elegantes y detallados juegos de sus montajes de vidrio. La plantilla Lab Kit ha sido recientemente actualizada para incluir buretas, beakers, placas de calefacción, mecheros bunsen etc. de esta forma usted será capaz de dibujar un experimento desde el comienzo hasta el final.

Le comentamos que si usted está preparando el diagrama para una instrucción manual en un laboratorio de pregrado, puede dirigir la atención de los estudiantes para ciertos aspectos del montaje, igualmente posible para recordar el nombre de las partes, o donde se guardan en el laboratorio:



8.4.1.1 Adicionar Texto Capturado

- Primero, hay que escoger la fuente para el texto que será usado. Desde el menú **Herramientas** escoja **Panel Fuente** y **Panel Párrafo**. Especifique el siguiente escenario y cierre el panel:

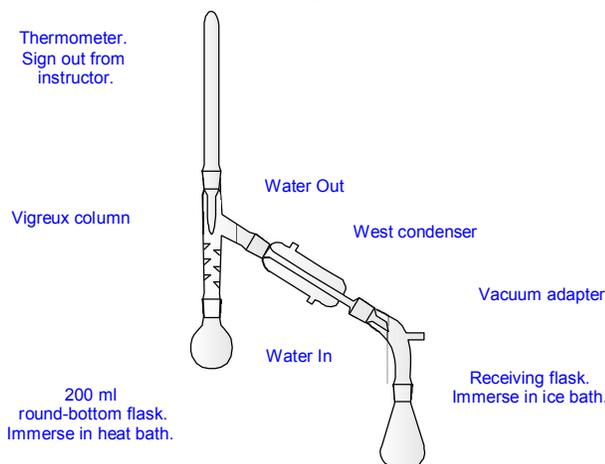


- Escoja la herramienta **Texto**  en la parte izquierda de la barra Dibujo y haga clic a la izquierda del termómetro. *Señalado desde el instructor.* Para estrechar la caja de texto, arrástrelo hacia el borde derecho:



Importante Si ha hecho clic accidentalmente fuera de la caja de texto esto no finaliza aún con el texto, escoja la herramienta **Editar Texto**  en la barra superior de Edición. El texto seleccionado estará ubicado dentro de la caja de texto. Si el no ha sido seleccionado, simplemente haga clic sobre el texto con esta herramienta activa.

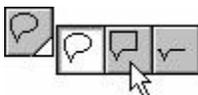
- Haga clic fuera del texto para salir del modo Texto y fijar la captura.
- Repita los pasos 2 y 3 para adicionar otros textos.
- Si es necesario mover las capturas para arreglarlas alrededor del aparato:



8.4.1.2 Insertar Llamadas

Ahora incluiremos las capturas dentro de las llamadas.

- En el lado izquierdo de la barra Dibujo, haga clic al lado derecho del botón Llamadas  para expandir los otros botones (por ejemplo el triangulo blanco pequeño). De los estilos disponibles, escoja la llamada tipo cuadro:



- Si usted mueve alrededor de este el cursor, verá que aparece la llamada sombreada alrededor de cualquier objeto que este puntuando. Apunte el próximo texto capturado así que la llamada sombreada aparezca alrededor de este y haga clic para fijarlo:



- Subsecuentemente señale las otras capturas y haga clic para fijar las llamadas. Para salir del modo llamada, con el botón derecho haga clic en la zona de trabajo.

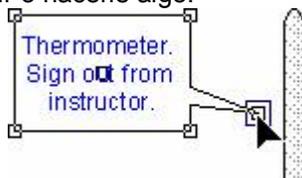
8.4.1.3 Reformar Llamadas

Ahora modificaremos las llamadas de tal forma que las puntadas finales están dirigidas a los objetos requeridos.

1. Seleccione cualquiera de las llamadas dibujadas haciendo clic sobre ella y escoja la herramienta **Editar Nodos**  de la barra superior Edición. Los nodos aparecerán en la llamadas:



2. Arrastre el nodo inferior a una nueva ubicación de tal forma que el final del puntero apunte al objeto que usted quiere decir o hacerle algo:



Importante Arrastre el nodo izquierdo para modificar el tamaño de la llamada.

3. Sin salir del modo Editar Nodos haga clic en otra llamada y repita los dos pasos las veces que sea necesario.
4. Tan pronto como la llamada sea redireccionada, haga clic con el botón derecho en la zona de trabajo para salir del modo Editar Nodos.
5. Usando la herramienta **Dibujar Flecha** , adicione flechas para indicar la salida y entrada de agua.
6. Seleccione ambas flechas y haga doble clic para desplegar el Panel Objetos. Seleccione el color de lápiz a rojo y haga clic en **Aplicar**.

8.4.1.4 Agrupar/Desagrupar Elementos

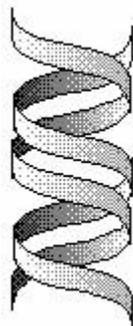
Para ser capaz de manipular estos dibujos como simples objetos, seleccione todos sus componentes presionando CTRL+A y haga clic en el botón **Agrupar**  en la Barra Edición. Ahora puede mover y /o redimensionar los dibujos como uno solo sin el riesgo de perder o dejar de lado cualquier elemento.

Si más tarde decide editar cualquiera de los componentes del dibujo, seleccione la figura y libere el botón **Desagrupar** .

8.5 Dibujar una Trenza de dos Cadenas de ADN

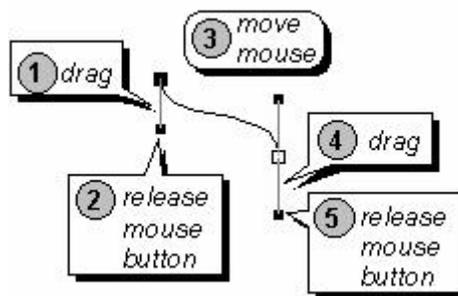


Esta sección se basa en la película **dna_ch.exe** que puede bajarse de nuestro sitio web o encontrarla en la carpeta películas.

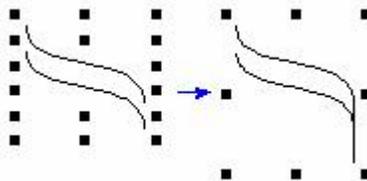


Escoja el modo **Draw** y seleccione la herramienta **Poli línea**.

1. Arrastre verticalmente hacia abajo desde el punto de inicio de la curva para generar la línea de control.
2. Libere el botón del ratón.
3. Mueva el ratón hacia la derecha para dibujar la curva.
4. Arrastre verticalmente hacia abajo para generar las líneas de control. Cambiando la longitud de las líneas de control puede modificar la forma de la curva.
5. Libere el botón del ratón y haga clic dos veces con el botón derecho para finalizar el dibujo de la curva, entonces escoja la herramienta **Seleccionar/Mover/Redimensionar**.

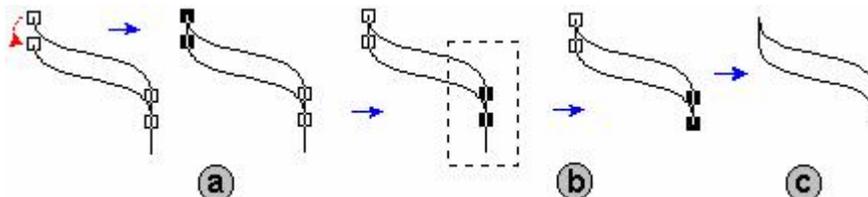


6. Ubique el puntero del ratón sobre la curva seleccionada y mientras mantiene presionadas las teclas CTRL+SHIFT arrastre hacia abajo (manteniendo presionada la tecla CTRL mientras se arrastra deja al lado una copia del objeto y manteniendo presionada la tecla SHIFT fuerza al objeto a moverse estrictamente en forma horizontal o vertical).
7. Seleccione ambas curvas arrastrando la selección rectángulo alrededor de ellos o haciendo clic en cada una de las curvas mientras se presiona la tecla SHIFT, entonces escoja **Conectar Líneas** (en el menú **Objeto**) para conectar la parte derecha de las curvas.

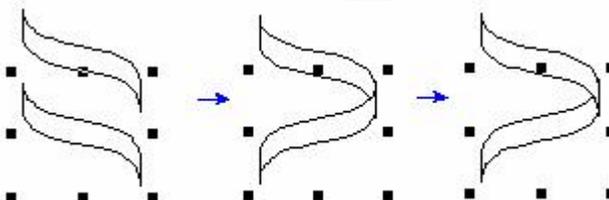


8. Escoja la herramienta **Editar Nodos**  de la Barra Edición (arriba en el lugar de trabajo). Proceda con el siguiente segmento de dibujo:

- Haga clic en el botón **Conectar Vértices**  para conectar el final de los nodos con una línea.
- Seleccione los dos nodos de la derecha arrastrando la selección rectángulo alrededor de ellos y haga clic en el botón **Convertir a Línea** .
- Haga clic con el botón derecho para salir del modo **Editar Nodos** y escoja la herramienta **Seleccionar/Mover/Redimensionar** .

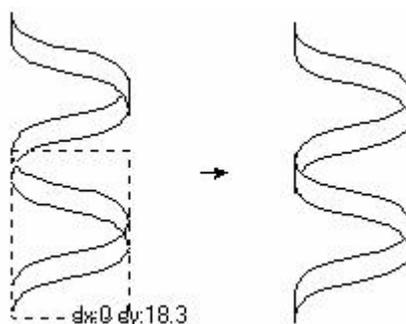


9. Haga una copia del segmento obtenido arrastrándolo con CTRL+SHIFT como se describió en el paso 6. haga clic en el botón **Girar de Izquierda a Derecha**  para girar el segmento y luego haga clic en el botón **Enviar Atrás**  para enviar el segmento al fondo.



Importante Esto puede tomar algún tiempo cuando se quiere corregir la posición de los segmentos manualmente. Para alinear esta posición automáticamente, seleccione los dos segmentos y aplique el botón **Centrar Horizontalmente**  a los segmentos.

10. Seleccione los dos segmentos arrastrando o haciendo clic mientras mantiene presionada la tecla SHIFT y haga una copia de ellos (CTRL+ arrastre). Corrija la posición usando las directrices del paso anterior:



11. Seleccione los segmentos marcados con gris en el cuadro de abajo haciendo clic sobre ellos mientras mantiene presionada la tecla SHIFT. Haga doble clic en cualquiera de ellos para abrir el panel **Objetos**. En el tabulador **Fill** especifique la siguiente situación:

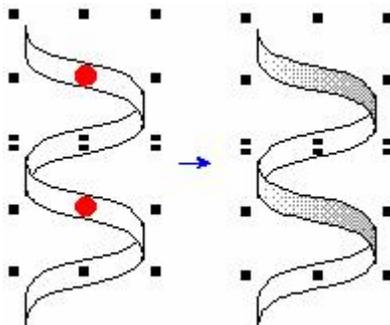
Estilo - *Sombreado*  ;

Color - blanco;

Patrón -  ;

Matiz - 

Y haga clic en **Aplicar**:



12. Seleccione los otros dos segmentos (ellos están marcados con cruces en la figura de abajo) y especifique el siguiente escenario en el panel **Objetos**:

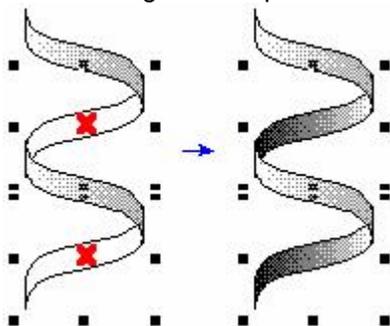
Estilo - *Sombreado*  ;

Color - blanco;

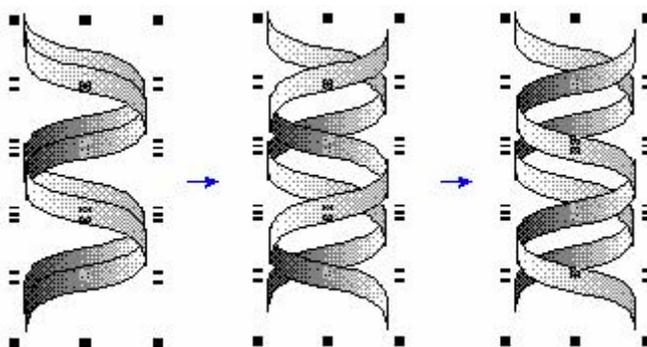
Patrón -  ;

Matiz - 

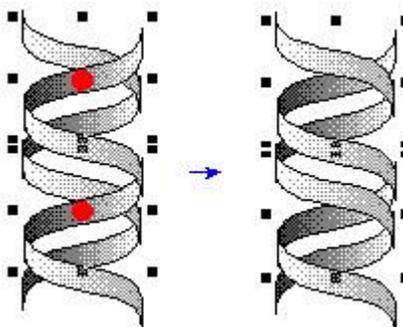
Y haga clic en **Aplicar** para obtener el siguiente espiral:



13. Seleccione todo el espiral arrastrando con la selección rectángulo para que se incluyan todos los segmentos y haga una copia arrastrando + CTRL. Haga clic en **Girar de Izquierda a Derecha**  y luego en el botón **Girar de Arriba hacia Abajo** .



14. Seleccione los segmentos marcados con gris en el cuadro de abajo haciendo clic y presionando SHIFT; luego seleccione el botón **Enviar Atrás** .



8.6 Dibujando Lípidos y Micelas



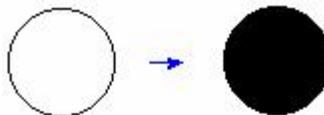
Esta sección se basa en la película **lipid.exe** que puede bajar de nuestro sitio web o encontrarla en la carpeta películas.

8.6.1 Dibujando el lípido

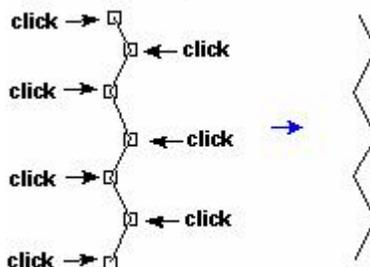


Asegúrese de escoger el modo .

1. Seleccione la herramienta **Elipse** . Arrastre en el espacio de trabajo presionando la tecla SHIFT para dibujar un círculo.
2. Haga clic en el color negro de la **Paleta de Colores** para rellenar el círculo.

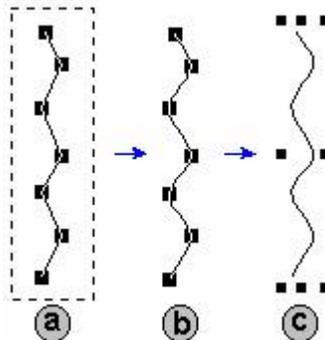


3. Escoja la herramienta **Poli Línea** . Haga clic repetidamente en la zona de trabajo cerca del círculo para dibujar la cola de carbonos y clic con el derecho para finalizar.

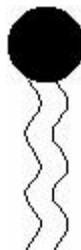


Importante Para dibujar fácilmente la línea asimétrica en zigzag, puede escoger previamente el comando **Morder en la Rejilla** y/o **Mostrar Rejilla** (menú Opciones).

4. Escoja la herramienta **Editar Nodos**  y suavice la línea zigzag de la siguiente forma:
- Seleccione todos los nodos de la poli línea dibujada arrastrando con la selección rectángulo alrededor de esta. Note que los nodos seleccionados se ponen negros.
 - Haga clic en el botón **Convertir a Curva**  y luego en el botón **Suavizar** .
 - Con el botón derecho escoja la herramienta **Seleccionar/Mover/Redimensionar** .

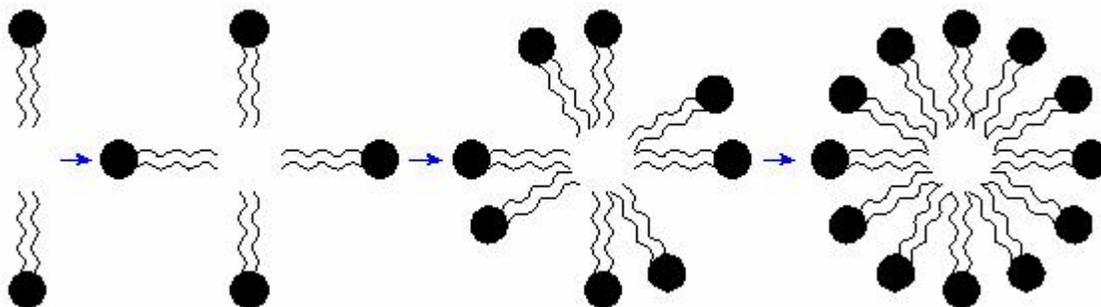


- Posicione el puntero del ratón sobre la curva y arrastre presionando CTRL para finalizar la copia de la curva.
- Arregle las colas como se muestra arrastrándolas.



Importante Si selecciona todos los elementos del fosfolípido y hace clic en el botón **Agrupar** , podrá manipularlo como un simple objeto, por ejemplo, rotar usando la herramienta **Seleccionar/Mover/Rotar** .

-  Intente dibujar la micela del cuadro usando la característica de copiado (CTRL + arrastre), Agrupar, Rotar 90°, Seleccionar/Mover/Rotar como las herramientas de alineación y giro:



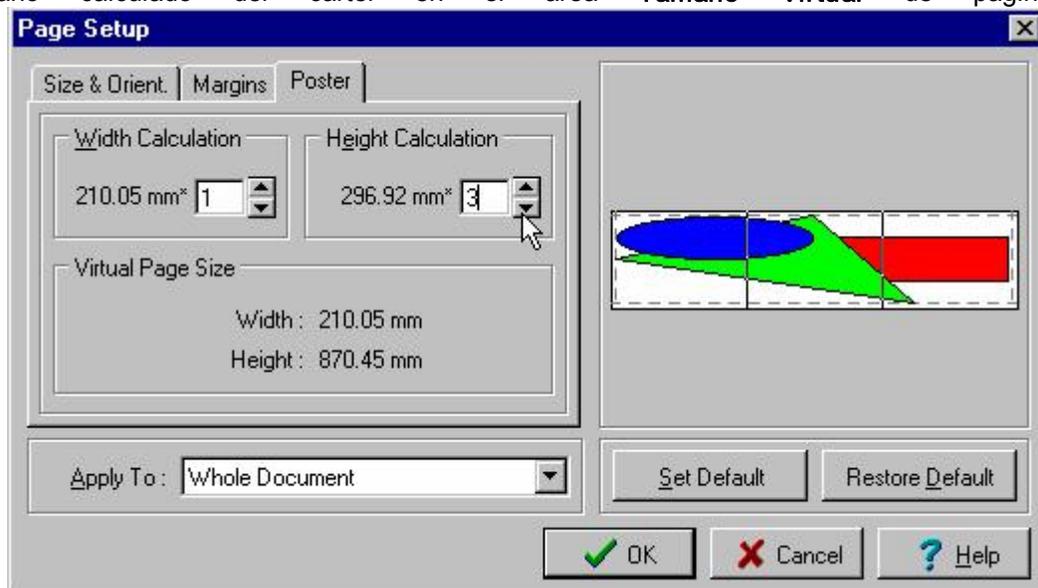
8.7 Crear un Cartel

Usando ChemSketch puede rápidamente dibujar un cartel (poster) e imprimirlo en papel de cualquier formato. ACD/ChemSketch automáticamente separará el cartel en páginas; la única cosa que tiene que hacer (además de diseñarlos) es vincularlos.



Esta sección se basa en la película **poster.exe** que puede bajarse de nuestro sitio web o encontrarlo en la carpeta películas.

1. Desde el menú **Archivo (File)** escoja el comando **Arreglo de Página (Page Setup)**.
2. En el tabulador **Tamaño y Orientación (Size & Orient)** escoja el formato del papel y la opción paisaje (**Landscape**).
3. Seleccione el tabulador **Cartel**. Escoja el número de páginas estándar que quiere para su cartel haciendo clic en el botón composición (giro). Note que puede ver automáticamente el tamaño calculado del cartel en el área **Tamaño Virtual** de página:



4. En el tabulador **Márgenes** escoja las márgenes de la hoja y haga clic en **OK**.
5. Dibuje su cartel usando las herramientas de los modos Estructura y Dibujo. Use el botón **Página Completa (Full Page)**  par ver la disposición general que usted preparó.

Importante Usted puede usar los comandos **Pegar** y **Pegado especial** desde el menú **Editar** para insertar los objetos (texto, cuadros y etc.) creados en otras aplicaciones Windows. Puede editar estos objetos usando OLE.

6. En la caja de dialogo **Preferencias** (menú **Opciones**) del tabulador **General**, seleccione **Area de Impresión** luego chequee en la sección **Bordes** si quiere ver como se divide su cartel en páginas individuales mientras se esta imprimiendo.
7. Escoja el comando **Opciones de Impresión** desde el menú **Archivo**.
8. De la caja de dialogo **Seleccione Impresora** escoja el botón **Ajustes (Set Up)** y el tabulador **Fuente** seleccione la opción **Imprimir Fuentes como Gráficos**. Note que este paso puede ser diferente para cada impresora. Haga clic en **OK**.
9. Escoja el comando **Imprimir** del menú **Archivo** o haga clic en el botón **Imprimir**  en la barra General para imprimir su cartel y unir sus páginas.

8.8 Convertir a Adobe PDF – *Nuevo en 5.0!*

ACD/ChemSketch ahora incluye una herramienta para convertir archivos sk2 a formato Adobe PDF. Tan pronto como haya dibujado un objeto gráfico como se describe en este capítulo, usted puede convertir su documento en un archivo Adobe PDF.

Nota Para poder exportar a PDF desde ChemSketch no tiene que tener instalado el Adobe Acrobat o Acrobat Reader en su computador, aunque para ver los archivos PDF debe tener instalado uno de ellos. Puede encontrar la versión gratuita de Adobe Acrobat Reader en la carpeta de instalación de ACD/Labs.

1. Estar seguro de que los Objetos y las estructuras están arregladas en la pantalla de la forma que usted quiere verlas en el archivo PDF.

Importante Use el botón **Página Completa**  par ver la página total.

2. Haga clic en el botón **Exportar a PDF** . El programa apuntará la ubicación y el nombre del archivo *.pdf.
3. Teclee el nombre, por ejemplo, *Capítulo8.pdf* y haga clic en **OK**.
4. En el momento de finalizar la conversión, encuentre el archivo recientemente creado y ábralo con Adobe Acrobat Reader para ver los resultados.

Nota Algunos Objetos insertados por el servidor OLE (menú **Editar** > comando **Insertar Objeto...**) pueden no ser convertidos a PDF. En este caso, aparece la caja de mensajes informándole sobre ello.

9. Trabajando con Estilos en Modo Estructura

9.1 Objetivos

Si a menudo muestra sus estructuras con un conjunto particular de atributos, tales como tamaño de fuente, estilo de fuente, grosor de líneas de enlace, etc, usted puede hacer que ChemSketch recuerde estas características guardándolas todas como un "Estilo." Esta es una ayuda especial si quiere mostrar moléculas de una forma cuando esta trabajando con ellas, y para hacerlas de acuerdo a una forma particular de estilo diario cuando envíe un artículo para publicación.

En este capítulo aprenderá cómo hacer:

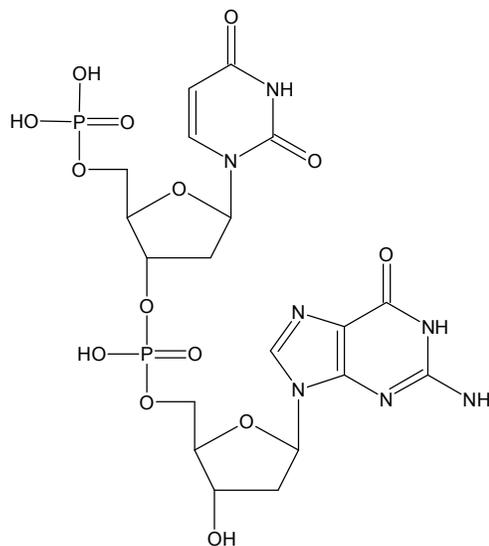
- Cambios en el estilo de estructuras;
- Guardar su estilo;
- Aplicar un estilo existente; y
- Escoger un estilo por defecto.

9.2 Cambiar el Estilo de Estructuras

Un estilo es una colección de atributos para mostrar (átomos y enlaces para estructuras; lápiz, flechas, relleno, fuente, párrafo para objetos y texto) a los cuales les puede asignar un nombre y guardarlos.

Usando la técnica descrita en el Capítulo 7 dibuje la siguiente estructura que representa un fragmento de la molécula de ADN. Guárdela como *dnafrag.sk2*.

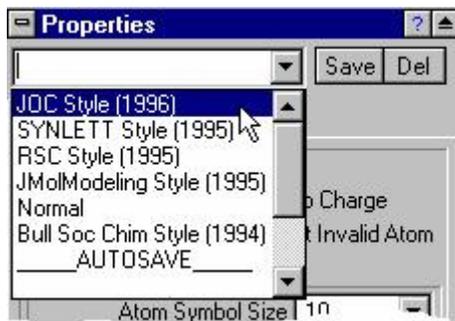
Importante Esta estructura puede dibujarse con la ayuda de la **Ventana Plantilla > Kit ADN/ARN**. Use los compuestos 2-desoxirribosa-5-fosfato, uracilo y guanina. Cuando utilice una plantilla, use SHIFT + clic para usarla sin crear un enlace adicional. Para más detalles sobre cómo usar la Ventana Plantilla referirse a la sección 7.5



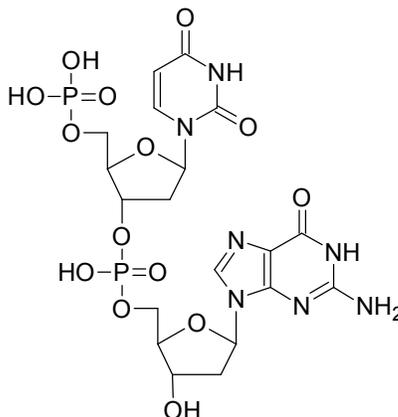
9.2.1 Aplicar un Estilo de Revista (Diario)

Usted ha escrito un artículo científico y para acompañarlo usted quiere enviar el dibujo de la molécula al *Journal of Organic Chemistry*.

1. Seleccione la molécula usando la herramienta **Seleccionar/Mover** .
2. Mueva el cursor sobre uno de los marcadores de selección para que pasen de cuadritos a cuadrados sólidos negros. Haga doble clic en la caja de dialogo **Propiedades** que aparece.
3. Haga clic en la flechita al lado de los estilos y desplaze el menú que aparece. Seleccione **JOC Style (1996)** de la lista:



4. Haga clic en **Aplicar** y verá los cambios de la molécula en el estilo diario. Haga clic al lado de la molécula para deseleccionarla, de tal forma que la pueda ver más claramente:



5. Desde el menú **Archivo**, seleccione **Guardar como** y guárdela como *dnafrag2.sk2*.
6. Seleccione toda la molécula de Nuevo y desde el menú **Estilo** en la caja de dialogo **Propiedades** seleccione **Normal**.
7. Haga clic en el botón **Aplicar** para que la molécula aparezca como antes.

9.2.2 Preparar una Publicación

Además de hacer su dibujo estructural de acuerdo a los lineamientos de un diario, revista o periódico en particular, hay muchas otras formas de preparar un manuscrito. Por esta razón, Desarrollos en Química Avanzada (Advanced Chemistry Development) ha incluido **Instrucciones para Autores**, un hipervínculo de pautas de unos 80 artículos.

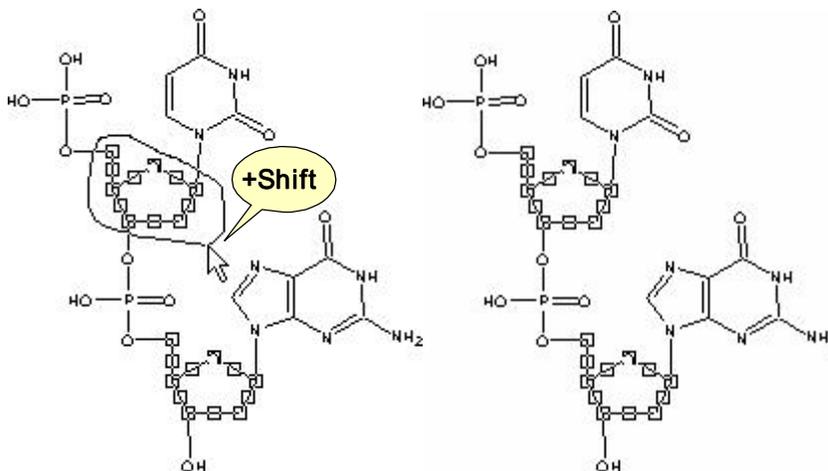
1. Por ejemplo, desde el menú **Ayuda**, seleccione **Instrucciones para Autores**.
2. Encuentre el **Journal of Organic Chemistry** en la lista.
3. Haga clic en el archivo Adobe PDF para mostrarlo.
4. Use el botón **Contenidos** para regresar a la lista de otras revistas para que pueda ver otras orientaciones.

Nota No todas las revistas tienen instrucciones explícitas para dibujo de estructuras de tal forma que no aparecen como estilos definidos en la caja de dialogo Propiedades de Estructuras.

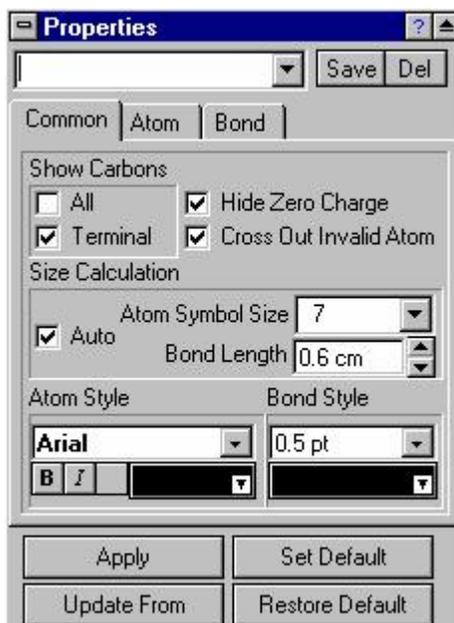
9.3 Creando su propio Estilo

Si quiere hacer una presentación en la cual quiera distinguir con colores entre grupos azúcar, fosfato y amino ácidos de la porción de AND, usted deberá.

1. Abrir el archivo *dnafrag.sk2* (o dibujar el fragmento ADN mostrado en la Sección 9.2) y confirmar que esta en el Modo Estructura.
2. Escoja la herramienta **Lazo**  y Seleccione la herramienta **Seleccionar/Mover** .
3. Seleccione los componentes de azúcares arrastrando alrededor de ellos (presionando la tecla SHIFT cuando seleccione componentes separados):

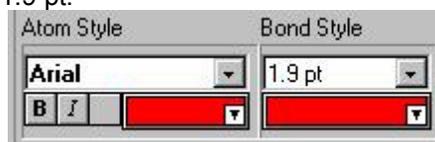


4. Mueva el cursor sobre cualquier parte del fragmento seleccionado para que el cuadrado de selección se ponga negro. Hacer doble clic para mostrar el panel **Propiedades**:



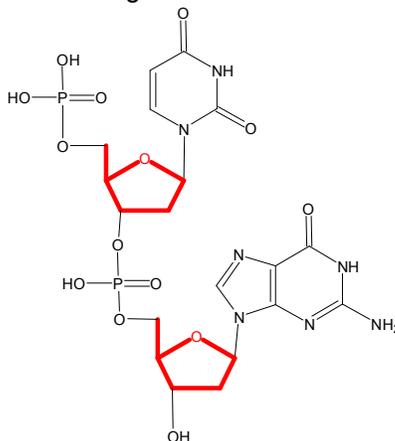
9.3.1 Estilo definido por el Usuario: Azúcar

1. En las secciones **Estilo Atomo** y **Estilo Enlace** haga clic en el área de colores y escoja otro color para los fragmentos seleccionados, por ejemplo, rojo.. escoja el ancho de enlace con un valor diferente, por ejemplo 1.9 pt.



Nota Las unidades de medida usadas en muchos de los paneles diferentes a ChemSketch corresponden al conjunto de la caja de dialogo **Preferencias** (menú **Opciones**). Puede escoger valores para el ancho, longitud, etc, en puntos/pulgadas/centímetros. Teclee los valores y adicione la unidad que quiera (pt/in/mm/cm), por ejemplo, 5 pt. Los valores serán recalculados en las correspondientes unidades de medida.

2. Haga clic en **Aplicar**. Como ve los segmentos seleccionados están coloreados con rojo:



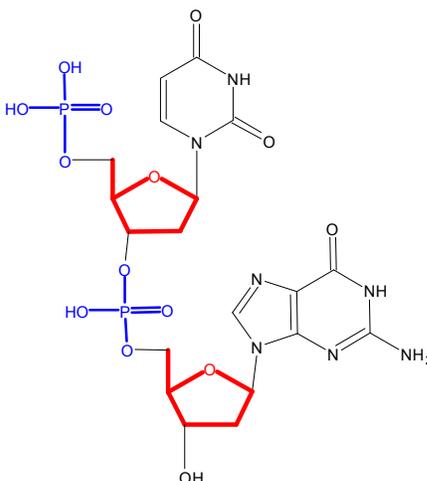
- Para guardar este estilo para usos futuros, en la caja de Listas de Estilos de la caja **Propiedades**, teclee **Azúcar** y **Guarde**:



- Usted será avisado si quiere guardarlo como estilo definido por el usuario. Haga clic en **Si**.

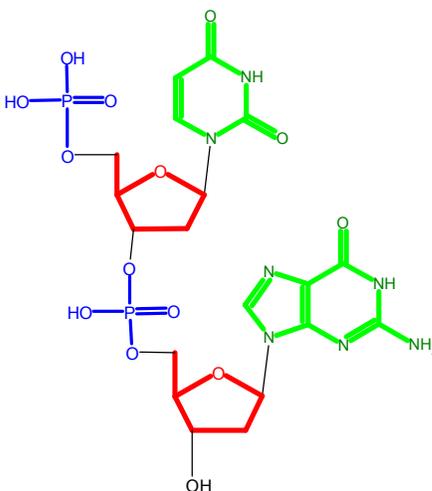
9.3.2 Estilo definido por el Usuario: Fosfato

- De forma similar, Seleccione la parte del fosfato y defina enlaces gruesos de color azul para los enlaces y átomos fuente.
- Guardar** este estilo como *Phosphate* y haga clic en **Aplicar** para asignarlo a la molécula:



9.3.3 Estilo definido por el Usuario: Base

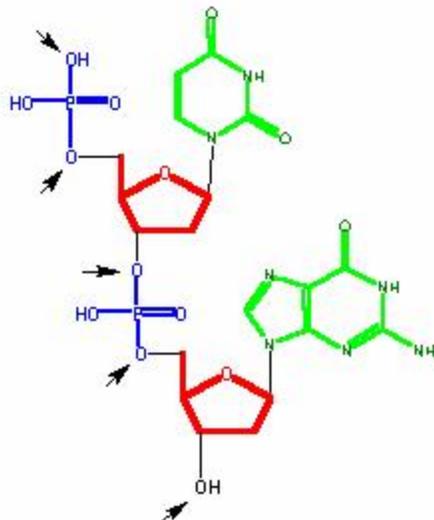
- Para las bases, escoja el color del átomo a gris oscuro y los enlaces verde neón.
- Guarde** el estilo como *Base* y haga clic en **Aplicar** para asignarlo a la molécula:



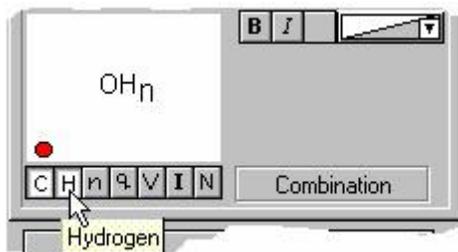
9.3.4 Estilo definido por el Usuario: Resaltado

Quizás, durante el curso de su presentación usted quiere llamar la atención de la audiencia para los átomos de oxígeno. Crearemos un cuarto estilo, *Resaltar*.

1. Use SHIFT+ clic para seleccionar los átomos de oxígeno indicados abajo con las flechas:

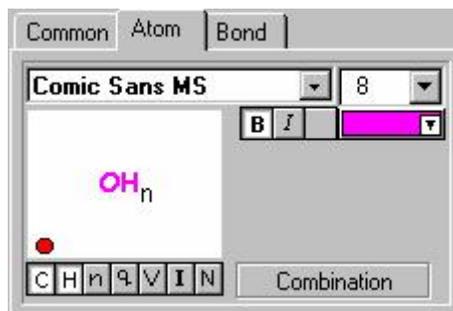


2. Haga doble clic en cualquiera de los átomos seleccionados y en el panel **Propiedades**, escoja el tabulador **Atomo**.
3. Para cambiar el color y el tamaño de los átomos (oxígeno en este caso) e hidrógeno, haga SHIFT+clic en los correspondientes botones en la línea inferior del área Previsualización:



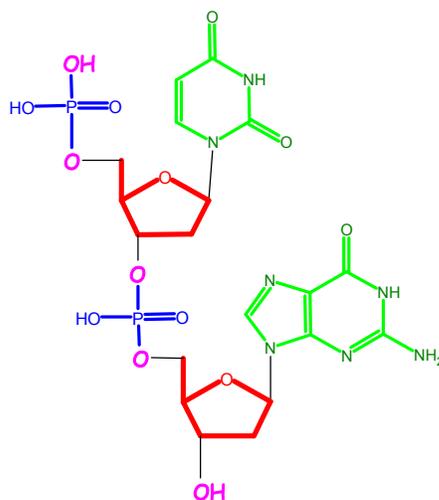
Nota Puede cambiar también otros atributos de átomos (hidrógeno índice, carga, valencia, isótopo, número) haciendo clic en los correspondientes átomos.

4. Cambie el color, tamaño y otros atributos, por ejemplo, haciendo las siguientes configuraciones:



Nota De manera similar puede cambiar los atributos de los enlaces.

5. Haga clic en **Aplicar** para obtener la siguiente estructura:



6. Guarde el estilo como *Highlight*.

9.4 Aplicar Estilos Existentes

Para practicar con los estilos que usted ha creado, abra *dnafrag2.sk2*.

1. Use la herramienta **Lazo** para seleccionar el anillo de azúcar de cinco miembros como se mostró en la Sección 9.3.
2. Haga Doble clic en esos fragmentos O escoja el comando **Propiedades de Estructuras** desde el menú **Herramientas**.
3. En el panel **Propiedades** que aparece, desde la lista de despliegue (el área superior del panel) escoja Azúcar (*Sugar*):



4. Haga clic en **Aplicar**. Escoja el estilo que será aplicado a la estructura o fragmento seleccionado.
5. Escoja el grupo fosfato. Escoja *Phosphate* de la lista de estilos. Haga clic en **Aplicar**.
6. Similarmente, seleccione las dos bases en el fragmento de ADN y escoja **Aplicar** para el estilo *Base*. La información acerca del estilo definido por el usuario es almacenada en su disco duro en el directorio de Windows o en el directorio WinNT, con el archivo llamado USERSTL.SK. Si quiere compartir el Estilo a sus amigos y colegas, dígalos para ubicar una copia de su USERSTL.SK en su directorio Windows (o WinNT).

9.5 Haciendo un Estilo para usarlo por Defecto

1. En el panel Propiedades de la lista de estilos escoja el estilo requerido.
2. Haga clic en **Usar por Defecto (Set Default)** para que el estilo seleccionado quede por defecto y cualquier estructura dibujada asuma ese estilo.

Nota Para seleccionar por defecto, no tiene que guardar su estilo. Puede especificar los atributos requeridos en el panel tabuladores haciendo clic en **Usar por Defecto**. Sus atributos quedarán por defecto.

10. Trabajando con Estilos en el Modo Dibujo

10.1 Objetivos

En el Modo Dibujo, pueden incluirse a uno o varios Objetos los atributos: lápiz, relleno, flecha, fuente y párrafo. Esto le permitirá crear diferentes estilos para texto, Relleno de Objetos, flechas y líneas.

En este capítulo aprenderá cómo hacer:

- Cambios en el estilo de un objeto;
- Guardar un estilo; y
- Escoger el estilo por defecto.

10.2 Cambiar el Estilo de un Objeto

En el capítulo 8, el cual describe cómo dibujar una cadena de ADN y orbitales, hay una breve introducción para cambiar los estilos de objetos. En esta sección daremos un procedimiento general.

1. Seleccione el objeto (o los objetos) a los cuales les quiere cambiar el estilo.
2. Haga doble clic sobre la selección para mostrar el panel **Objetos**. Dependiendo de la clase de objeto seleccionado (forma, objeto lineal, flecha, texto, espectro, tabla o estructura) el panel Objeto puede contener diferentes botones:



3. Combine sus elecciones desde el tabulador y de la lista emergente para crear sus estilos y haga clic en **Aplicar** para aceptar los cambios.

Nota El escenario desde la sección **Común** se aplicará a todos los objetos. Por ejemplo, cambiando color del lápiz a rojo afectará las formas, líneas y estructuras. Si cambia cualquier atributo en la sección **Formas** únicamente, esto afectará solamente las formas.

10.3 Guardando un Estilo

1. Para guardar las condiciones especificadas, haga clic en **Guardar como Nuevo Estilo** en el

panel **Objetos**.

2. En la caja de dialogo **Salvar Estilo de Usuario** que aparece, Seleccione el atributo que será incluido en su estilo. Por ejemplo si quiere crear un estilo especial para texto, escoja y seleccione **Estilo de Fuente** y **Estilo Párrafo**.
3. Teclee el nombre de su estilo y haga clic en **OK**. El estilo se adicionará a la lista de estilos y puede entonces cargarlo en el panel **Objetos** y aplicarlo a objetos seleccionados o condiciones por defecto.

10.4 Aplicar un Estilo existente

Puede aplicar los estilos guardados (si están contruidos o definidos por el usuario) a cualquier objeto seleccionado.

1. Seleccione el objeto(s) para el cual quiere cambiarle el estilo.
2. Haga doble clic en la selección para abrir el panel **Objetos**.
3. Haga clic para **Cargar** y desde la lista de estilos escoja el estilo requerido. Los atributos del estilo serán cargados dentro del panel.
4. Haga clic en **Aplicar**.

10.5 Configurando un Estilo Predefinido

Las configuraciones por defecto pueden especificarse en un estilo especial de paneles desde el menú **Herramientas**:

- **Panel Estilo de lápiz (Pen Style Panel)**
- **Panel Estilo de relleno (Fill Style Panel)**
- **Panel Estilo de flecha (Arrow Style Panel)**
- **Panel Fuente (Font Panel)**
- **Panel Párrafo (Paragraph Panel)**

Las configuraciones especificadas en cualquiera de estos paneles se tomarán inmediatamente por defecto.

Puede cargar cualquier estilo existente de cualquiera de estos paneles haciendo clic en **Cargar**. Los estilos cargados automáticamente en los paneles de estilo se tomarán por defecto.

Puede también cargar atributos de estilo de Objetos dibujados en cualquiera de los Paneles de Estilos. Haga clic en **Actualizar desde (Update From)** y luego haga clic en el objeto. Los atributos de los estilos de objetos son cargados en todos los paneles de estilos y se toman automáticamente por defecto.

Nota Si quiere cambiar el estilo de un objeto especifico dibujado sin efectuar estilos predefinidos, use el panel **Objetos** (ver Sección 12.2).

10.6 Manejando Estilos

Para manejar estilos (guardar, aplicar, renombrar, borrar o configuraciones predefinidas), puede usar el **Panel Estilo** que puede abrirse con el comando **Panel Organizador de Estilos** el menú **Herramientas**:



Puede hacer lo siguiente en este panel:

Acción Deseada	Botón para hacer clic
Ver los estilos que contiene un atributo específico (lápiz, flechas, relleno, fuente, párrafo).	Haga clic en el botón apropiado en la parte superior del panel. (Para ayudarlo a seleccionar el botón, se despliega un tabulador Amarillo cuando el cursor pasa sobre cada uno.)
Ver toda la lista de estilos.	Haga clic en los botones al inicio del panel para que ellos sean seleccionados:
Aplicar el estilo al objeto seleccionado(s).	Resaltar el estilo que se necesita en la lista y hacer clic en Aplicar .
Configuración de estilos predefinidos.	Resaltar el estilo que se necesita en la lista y hacer clic en el botón Configuración predefinida (Set Default) .
Crear un Nuevo estilo basado en la actual configuración.	Haga clic en el botón Nuevo....
Renombrar el estilo.	Resaltar el estilo que se necesita en la lista y hacer clic en Renombrar.... Note que los estilos construidos (aparecen en la lista con color gris) no pueden ser renombrados.
Borrar el estilo.	Resaltar el estilo que se necesita en la lista y hacer clic en Borrar.... Note que los estilos construidos (aparecen de color gris en la lista) no pueden ser borrados.

11. Calculando Propiedades Macroscópicas

11.1 Resumen

ACD/ChemSketch es tan versátil en sus capacidades de dibujo que es posible dominar las predicciones de propiedades macroscópicas que se construyen aquí. Se incluyen predicciones de

- Peso fórmula;
- Porcentaje de composición;
- refractividad molar;
- volumen molar;
- parachor;
- índice de refracción;
- tensión superficial;
- densidad;
- constante dieléctrica;
- polarizabilidad; y
- masa monoisotópica, nominal y promedio.

En este capítulo, se describe un significado simple para calcular las propiedades que se enuncian. Los algoritmos para calcular estas propiedades están descritas brevemente. Se muestra un resumen de acuerdos entre valores calculados y experimentales para varios cientos de compuestos.

Note que en este capítulo, “propiedades” se usan para significar valores fisicoquímicos, en contraste al uso general de “propiedades” en los documentos ChemSketch, donde las características de la pantalla gráfica están referidas. Por ejemplo, en el menú **Herramientas**, el comando **Propiedades de Estructura** permite escoger tamaño de fuente, grosor de enlaces, color, *etc.* En el mismo menú **Herramientas**, usted también hallará **Calcular > Todas las Propiedades**.

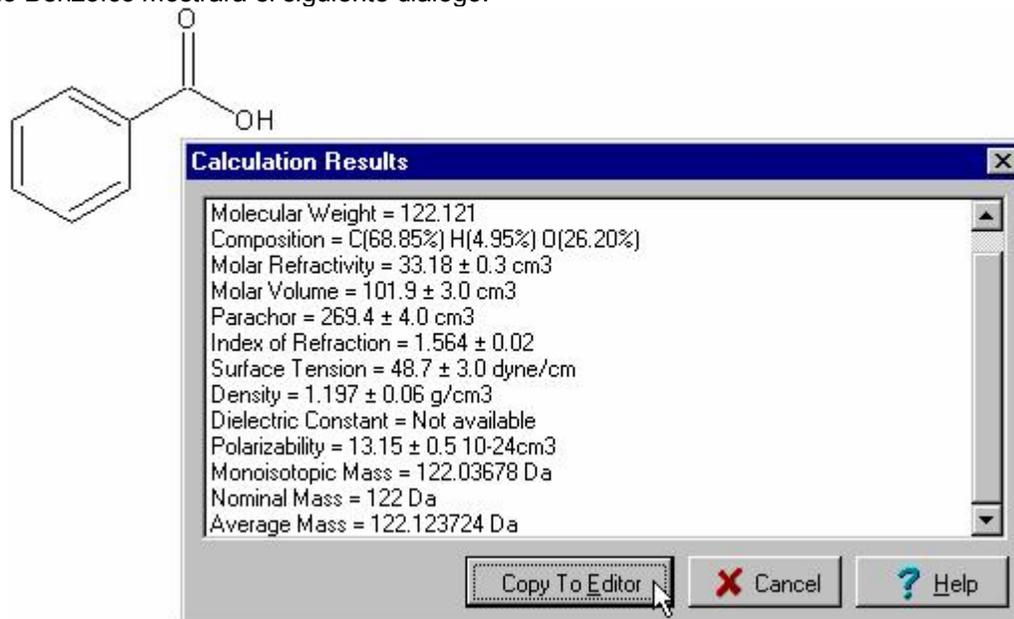
11.2 Calculo de Propiedades Macroscópicas

11.2.1 Comando Menú

Para determinar una o todas las siguientes propiedades moleculares.

1. Cuando este en el modo Estructura, dibuje una estructura.
2. Desde el menú **Herramientas** seleccione **Calcular...** y entonces desde el sub menú escoja **Todas las Propiedades** o una de las propiedades mencionadas arriba.

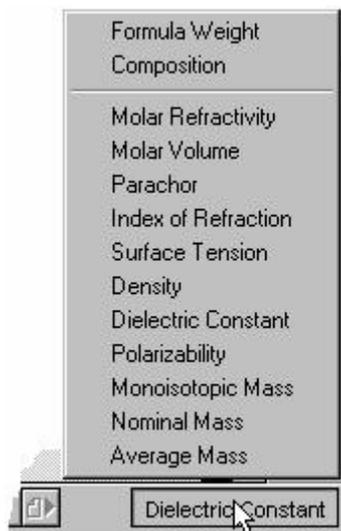
3. Una vez escogidas, el cálculo de Propiedades se muestra en la caja de dialogo **Resultados del Cálculo**. Por ejemplo, escoja **Herramientas>Calcular...>Todas las Propiedades** para el ácido Benzoico mostrará el siguiente dialogo:



4. El contenido del texto puede ser pegado en la pantalla de ChemSketch si se decide haciendo clic en el botón **Copiar al Editor**.

11.2.2 Despliegue Automático en la Barra de estado

Es posible también ver las Propiedades Macroscópicas directamente en la barra de estado como se muestra:



Haga clic al lado derecho de la caja en la barra de estado y escoja la propiedad decidida. Por defecto, esta en la configuración del peso fórmula. En el ejemplo mostrado, la constante dieléctrica, ϵ^{20} , se ha especificado.

11.3 Algoritmos para el Cálculo de Propiedades Macroscópicas

Para el centro del agregado constitutivo de los algoritmos de todas las Propiedades fisicoquímicas en ChemSketch se permite la presunción de que estas propiedades pueden estimarse usando agregados atómicos o grupos de incrementos. Aparte del peso molecular (WM), el cual es elemental para calcular, los algoritmos pueden dividirse en tres grupos generales:

- propiedades macroscópicas básicas: Volumen Molar (VM), Refractividad Molar (RM) y Parachor (P_r);
- propiedades Macroscópicas derivadas: densidad (d), índice de refracción (n), tensión superficial (γ); y
- la constante dieléctrica ϵ (Permitividad).

Las Propiedades Macroscópicas Básicas como Volumen Molar (VM), Refractividad Molar (RM) y el Parachor (P_r) (no hay un término adecuado en español para esta propiedad) son calculados primero para la estructura que se entra. El agregado atómico se incrementa tal como un algoritmo dependiente de los enlaces (simple, doble, aromático, *etc.*) de sus átomos y de los átomos vecinos. ChemSketch rápidamente analiza la estructura entrante para determinar la clase de cada uno de los átomos, por ejemplo., si es cíclico, aromático, alifático, *etc.*

El algoritmo de predicción para la densidad (d), índice de refracción (n) y tensión superficial (γ) se hayan de fórmulas fisicoquímicas bien conocidas las cuales pueden encontrarse en muchos textos de físico química. Estas expresiones d , n y γ como funciones de VM, RM o P_r . Una vez que el VM, RM o P_r han sido predecidos por agregados, están aptos para predecirse la d , el n y la γ usando esta fórmula.

La determinación de los constitutivos de agregados de incrementos atómicos para VM, RM y P_r fueron obtenidos internamente por ACD usando grandes bases de datos experimentales que relacionan la estructura a la densidad, al índice de refracción y a la tensión superficial. El VM, la RM y el P_r fueron recalculados desde la d , el n y la γ . Estos parámetros son informaciones de propiedad de Advanced Chemistry Development.

La predicción de la constante dieléctrica ϵ (permitividad) se asemeja de forma muy cercana a la predicción del Punto de Ebullición, el cual es un producto separado de ACD ChemSketch. Científicos mayores de ACD descubrieron una función agregada, la cual relaciona la constante dieléctrica a otras Propiedades Macroscópicas que pueden ser tratadas sumativamente, como el VM. Desde que esta relación fue descubierta, el incremento del agregado atómico para esta función se obtuvo usando grandes bases de datos de estructuras moleculares y sus constantes dieléctricas observadas. Usando la función y el VM estimado para una estructura, su constante dieléctrica puede predecirse rápidamente.

11.3.1 Volumen Molar, VM

Por definición,

$$MV = \frac{MW}{d}$$

ChemSketch calcula el volumen molar desde los incrementos aditivos. Los incrementos atómicos aditivos fueron obtenidos usando una base de datos de densidad y pesos moleculares calculados (WM).

11.3.2 Refractividad Molar, MR

La ecuación de Lorentz-Lorenz relaciona el índice de refracción, densidad y el peso molecular:

$$MR = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \cdot \frac{MW}{d}$$

ChemSketch calcula la refractividad molar desde incrementos aditivos. Los incrementos atómicos aditivos fueron obtenidos usando bases de datos de densidad, índice de refracción y pesos moleculares calculados (WM).

11.3.3 Parachor, P_r

Por definición,

$$P_r = \left(\frac{MW}{d} \right) \gamma^{1/4}$$

ChemSketch calcula el parachor con incrementos aditivos. Los incrementos atómicos aditivos fueron obtenidos usando bases de datos de densidad, tensión superficial y peso molecular (WM).

11.3.4 Densidad, d

Por definición,

$$d = \frac{MW}{MV}$$

ChemSketch calcula la densidad con el peso molecular y el volumen molar calculados (ver arriba).

11.3.5 Índice de Refracción, n

Por la ecuación de Lorentz-Lorenz,

$$n = \sqrt{\frac{2 \cdot MR + MV}{MV - MR}}$$

ChemSketch calcula el índice de refracción con el volumen molar y la refractividad molar, las dos calculadas como se muestra arriba.

11.3.6 Tensión Superficial, γ

Por definición,

$$\gamma = \left(\frac{P_r}{MV} \right)^4$$

ChemSketch calcula la tensión superficial desde el VM calculado (ver arriba) y el parámetro P_r (ver arriba).

11.3.7 Constante Dieléctrica, ϵ (Permitividad)

$$f(\epsilon) = f(MV, AdditiveFunction)$$

ChemSketch calcula la constante dieléctrica del VM calculado (ver arriba) y una apropiada función aditiva empírica.

11.3.8 Polarizabilidad

Esta propiedad es calculada con la Refractividad Molar (RM) (ver Sección 11.3.2) como sigue:

$$Polarizability = 0.3964308 \cdot MR$$

11.3.9 Masa Monoisotópica, Nominal y Promedio

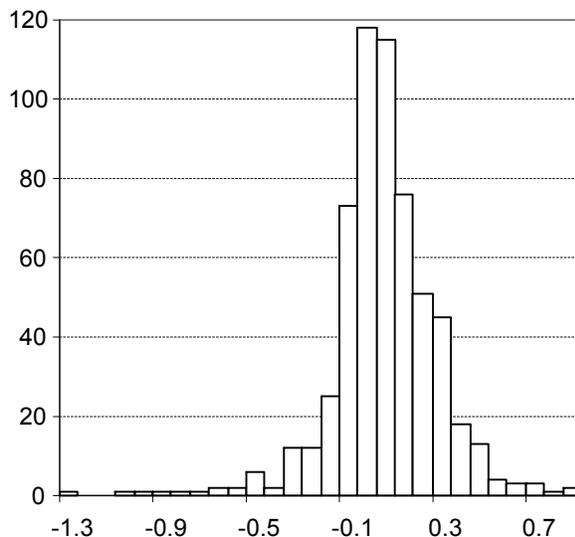
La masa Monoisotópica (M_{mi}) es la masa exacta de muchos isótopos estables abundantes que pueden ocurrir naturalmente.

La masa Nominal (M_n) es la suma de las masas monoisotópicas aproximadas de los elementos que forman la molécula.

La masa Promedio (M_{av}) es la masa calculada de una partícula basada en los pesos atómicos de los elementos de acuerdo a su composición.

11.4 Correlación Estadística con datos Experimentales

11.4.1 Distribución de la predicción del error en la Refractividad Molar



Escala Vertical:

Escala Horizontal:

Número de estructuras examinadas:

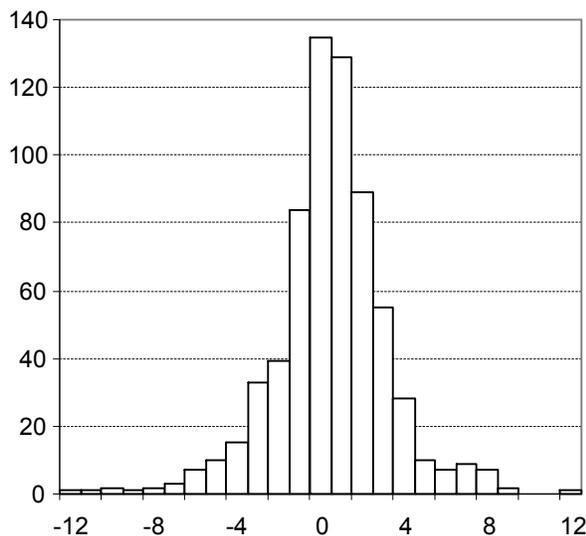
Número de Estructuras Examinadas

Estimación del error ACD de la Refractividad Molar

592

$$MR_{exp} = 0.99901(\pm 0.00067) MR_{calc} + 0.026(\pm 0.025) \quad R=0.999867, \text{ StD}=0.23$$

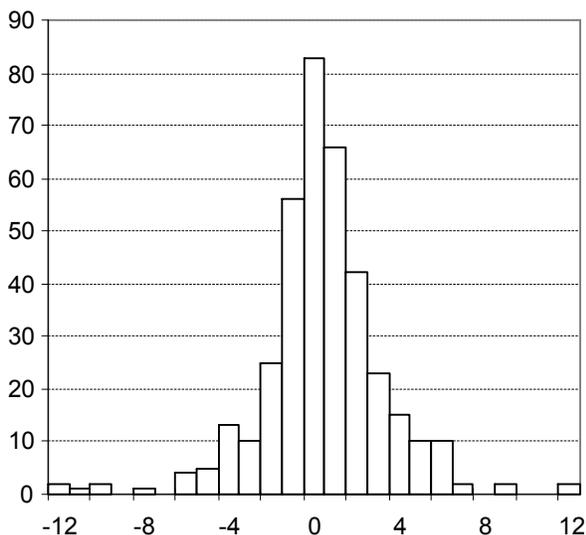
11.4.2 Distribución de la Predicción del error del Volumen Molar



Escala Vertical: Número de Estructuras examinadas
 Escala Horizontal: Estimación del error del ACD/Volumen Molar
 Número de estructuras examinadas: 671

$$MV_{exp} = 0.9989(\pm 0.0020) MV_{calc} + 0.18(\pm 0.29) \quad R=0.998626, \text{ StD}=2.74$$

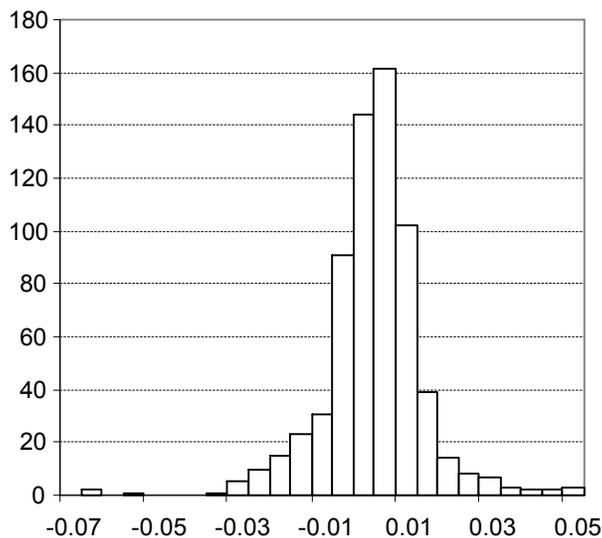
11.4.3 Distribución de la predicción del error del Parachor



Escala Vertical: Número de Estructuras examinadas
 Escala Horizontal: Estimación del error ACD/Parachor
 Número de estructuras examinadas: 377

$$Pr_{exp} = 0.9978(\pm 0.0015) Pr_{calc} + 0.68(\pm 0.46) \quad R=0.99958, \text{ StD}=3.11$$

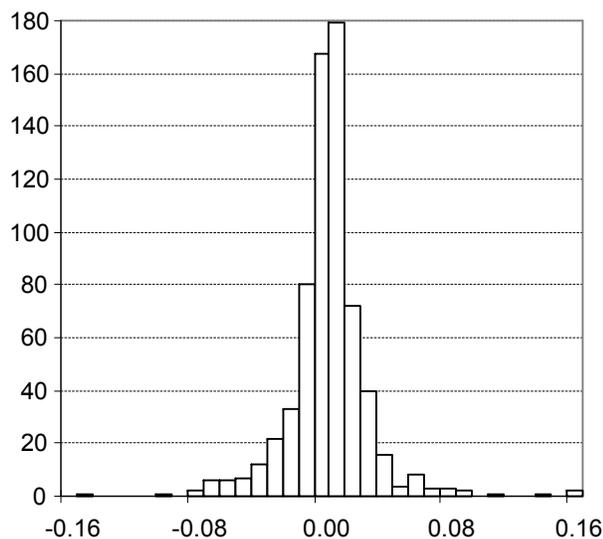
11.4.4 Distribución de la predicción del error en el Índice de Refracción



Escala Vertical: Número de estructuras examinadas
 Escala Horizontal: Estimación del error del Índice de Refracción
 Número de estructuras examinadas: 665

$$n_{exp}^{20} = 0.98035(\pm 0.0073) n_{calc}^{20} + 0.028(\pm 0.011) \quad R=0.982, \text{StD}=0.012$$

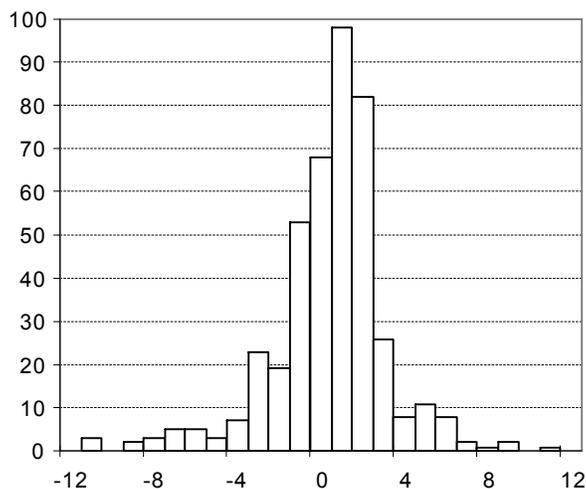
11.4.5 Distribución de la predicción del error de la Densidad



Escala Vertical: Número de estructuras examinadas
 Escala Horizontal: Estimación del error ACD/Densidad
 Número de estructuras examinadas: 671

$$d_{exp}^{20} = 0.9947(\pm 0.0036) d_{calc}^{20} + 0.0052(\pm 0.0036) \quad R=0.995683, \text{StD}=0.028$$

11.4.6 Distribución de la predicción del error para la Tensión Superficial



Escala Vertical:

Número de estructuras examinadas

Escala Horizontal:

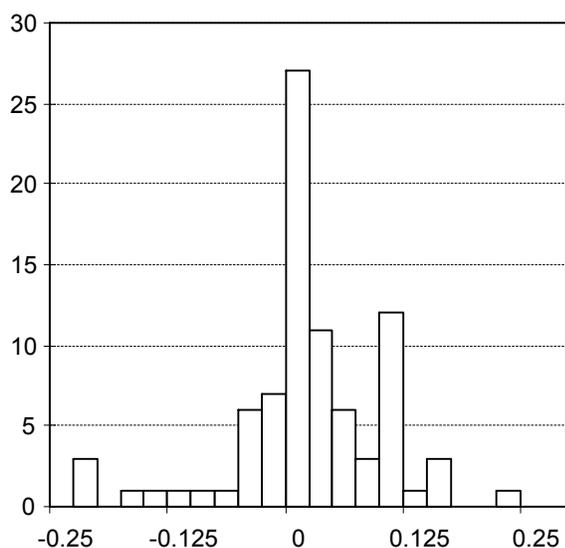
Estimación del error de la Tensión Superficial

Número de estructuras examinadas:

432

$$st_{exp}^{20} = 0.998(\pm 0.018) st_{calc}^{20} + 0.08(\pm 0.53) \quad R=0.934720, \quad StD=2.84$$

11.4.7 Estimación del Error de la constante Dieléctrica (Permitividad)



Escala Vertical:

Número de estructuras examinadas

Escala Horizontal:

Constante Dieléctrica Estimación del Error

Número de estructuras examinadas:

85

Nota: Derivado solo para hidrocarburos

$$\epsilon_{exp} = 1.005(0.033)\epsilon_{exp} - 0.013(0.072) \quad R=0.9588, \quad StD=0.079$$

12. Teclas de Funciones Especiales

12.1 Objetivos

La ventana ChemSketch es un editor de estructuras moleculares extremadamente versátil. Por esta razón, varios elementos del software ACD son accesibles con un simple botón desde su interfase. Este capítulo describe dos módulos de adición especiales que pueden accederse desde la interfase ChemSketch. Los Tautómeros/ACD ahora se incluyen con las dos versiones de ACD/ChemSketch la comercial y la gratuita; y el Diccionario/ACD está disponible solamente con la versión comercial de ACD/ChemSketch.

12.2 Tautómeros

Para ciertos compuestos, hay una mezcla de dos o más estructuras distintas que pueden existir en equilibrios rápidos en solución. En muchos casos los tautómeros resultan de una forma de transferencia de protones. Los Tautómeros/ACD se designan para generar las más razonables formas tautómeras de estructuras orgánicas dibujadas. Esta disponible con el comando

Chequear Forma Tautómerica a través del menú **Herramientas** o con el botón .

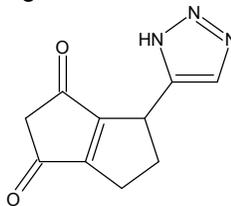
La posibilidad de las formas tautómeras alternativas deberían considerarse siempre con mucho cuidado, si la estructura orgánica dibujada contiene dos o más dobles o triples enlaces conjugados con o unidos a oxígeno, nitrógeno, azufre u otro heteroátomo. El presente algoritmo de Tautómeros/ACD provee solamente las formas tautómeras sugeridas, pero no necesariamente son las correctas. Consulte otras Fuentes de información para tomar una decisión final.

Los algoritmos de Tautómeros/ACD no proceden con las siguientes clases de estructuras químicas:

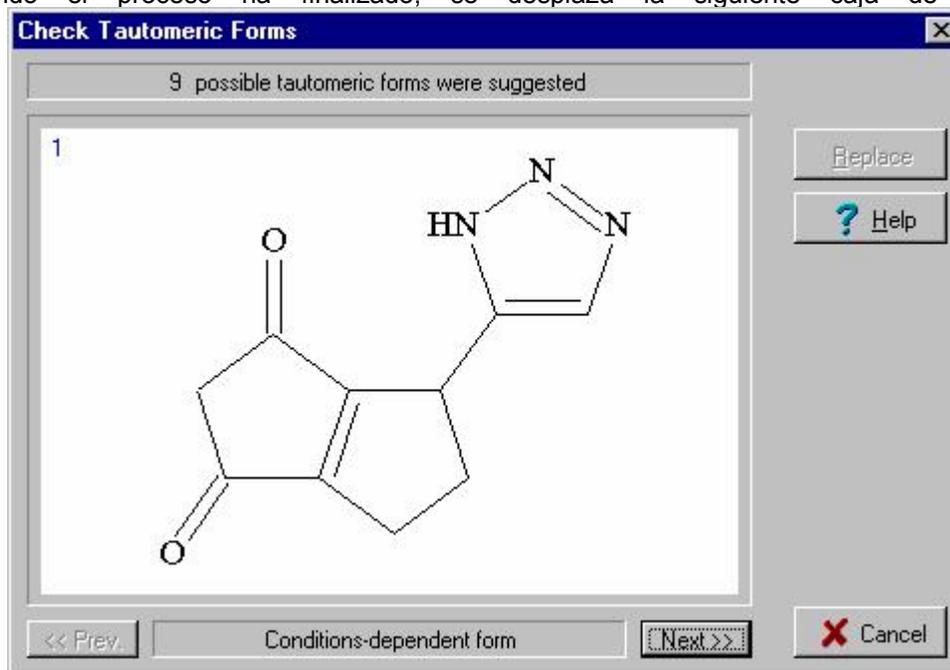
- estructuras que contienen átomos metálicos;
- estructuras que contienen átomos cargados, otros en donde el derivado no iónico del nitrógeno de valencia IV (+) está enlazado al oxígeno (-);
- estructuras que contienen elementos en sus valencias atípicas;
- estructuras con enlaces coordinados; y
- estructuras que contienen más de 255 átomos.

Ahora intentaremos esta opción sobre el ejemplo ilustrado:

1. Usando la técnica anterior dibujar la siguiente estructura:



2. Seleccione la estructura (use la herramienta **Seleccionar/Mover** ) , haga clic en el botón **Chequear Formas Tautómeras**  en la parte superior de la barra herramientas. El programa comienza a generar y a verificar formas tautómeras de la estructura dibujada y cuando el proceso ha finalizado, se desplaza la siguiente caja de diálogo:

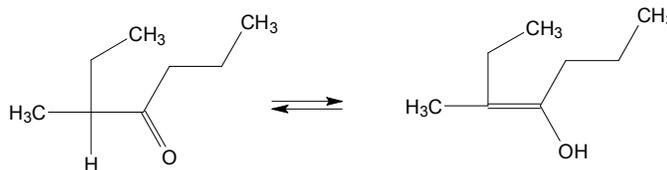


3. Para navegar a través de todas las estructuras generadas, haga clic en los botones **Próximo (Next >>)** o **<< Anterior (Prev.)**.
4. Para reemplazar la estructura dibujada con la estructura mostrada, haga clic en el botón **Reemplazar**.

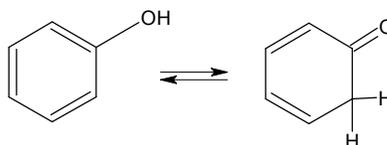
12.2.1 Ejemplos

Aquí hay unos cuantos tipos de tautómerismos “clásicos” los cuales puede intentar hacerlos con el botón Tautómeros en la Ventana de ChemSketch.

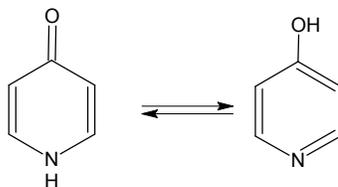
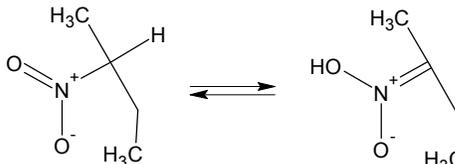
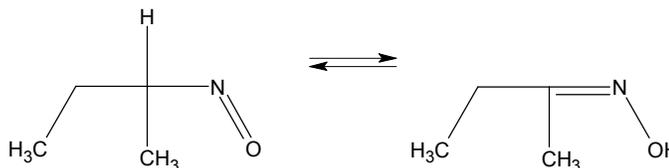
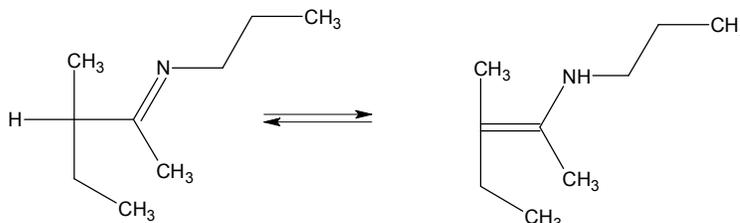
Tautómerismo Ceto-Enólico



Tautómerismo Ceto Fenólico

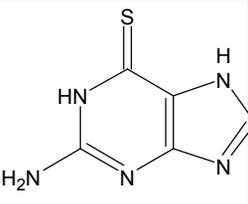
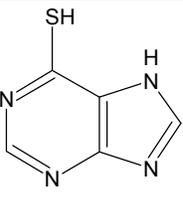
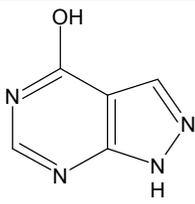
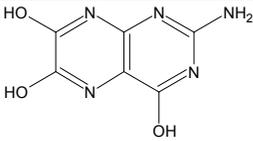


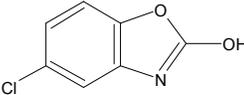
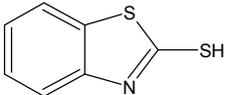
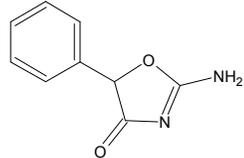
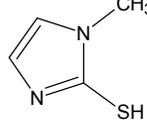
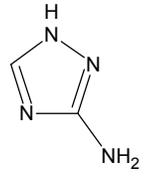
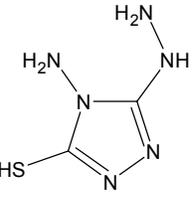
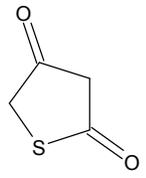
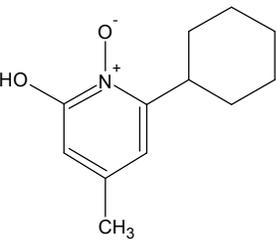
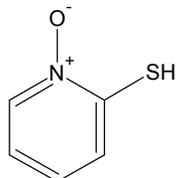
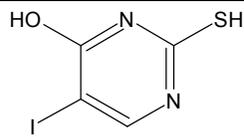
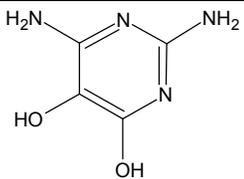
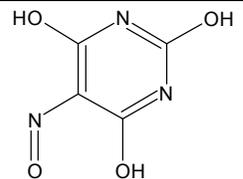
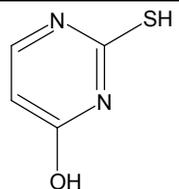
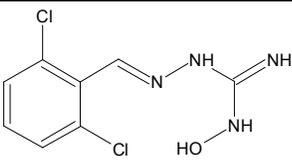
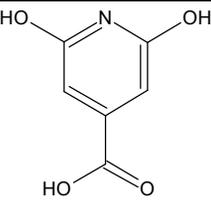
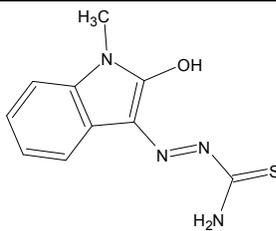
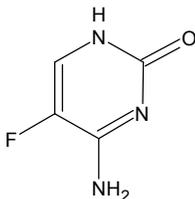
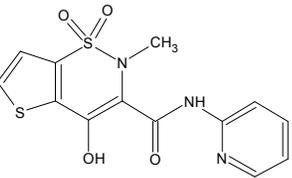
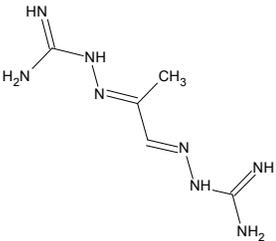
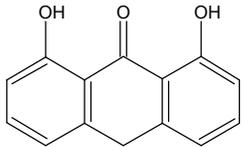
Tautómerismo anillo Heterocíclico

**Tautómerismo forma Nitro-ácido****Tautomerismo Nitroso-oxima****Tautomerismo Imina-Enamina****12.2.2 Errores en la Literatura Química**

Las estructuras Químicas frecuentemente se dibujan incorrectamente y las formas tautómeras son ignoradas.

Todas las estructuras de abajo han sido tomadas respetando la publicación. Muchas contienen errores o tienen asignados formas tautómeras ambiguas bajo las condiciones experimentales descritas. Con Tautómeros/ACD, usted no corre un gran riesgo de examinar una forma tautómeras común para el compuesto que esta tratando, al interpretar los datos observados, cuando corra sobre predicciones/ACD o planea publicarlo (tal como el pKa).

Estructuras Dudosas de varias Publicaciones			
 <p>Thioguanine (antineoplastic) 4 posibles formas</p>	 <p>6-Mercaptopurine (antineoplastic) 5 posibles formas</p>	 <p>Allopurinol (antiurólítico) 5 posibles formas</p>	 <p>Leucopterin 3 posibles formas</p>

Estructuras Dudosas de varias Publicaciones			
 <p>Chlorzoxazone (skeletal muscle relaxant) 2 posibles formas</p>	 <p>2-Mercaptobenzothiazole 2 posibles formas</p>	 <p>Pemoline (CNS stimulant) 2 posibles formas</p>	 <p>Methimazole (antihyperthyroid) 2 posibles formas</p>
 <p>Amitrole (herbicide) 3 posibles formas</p>	 <p>Purpald 2 posibles formas</p>	 <p>Thiotetronic acid 3 posibles formas</p>	 <p>Ciclopirox (antifungal) 2 posibles formas</p>
 <p>Pyriithione (antibacterial) 2 posibles formas</p>	 <p>Iodothiouracil (thyroid inhibitor) 2 posibles formas</p>	 <p>Divicine 3 posibles formas</p>	 <p>Violuric acid (chelating agent) 2 posibles formas</p>
 <p>2-Thiouracil (thyroid inhibitor) 2 posibles formas</p>	 <p>Guanoxabenz (antihypertensive) 3 posibles formas</p>	 <p>Citrazinic acid 2 posibles formas</p>	 <p>Methisazone (antiviral) 2 posibles formas</p>
 <p>Flucytosine (antifungal) 2 posibles formas</p>	 <p>Tenoxicam (anti-inflammatory, analgesic) 2 posibles formas</p>	 <p>Mitoguazone (antineoplastic) 4 posibles formas</p>	 <p>Anthralin (antipsoriatic) 2 posibles formas</p>

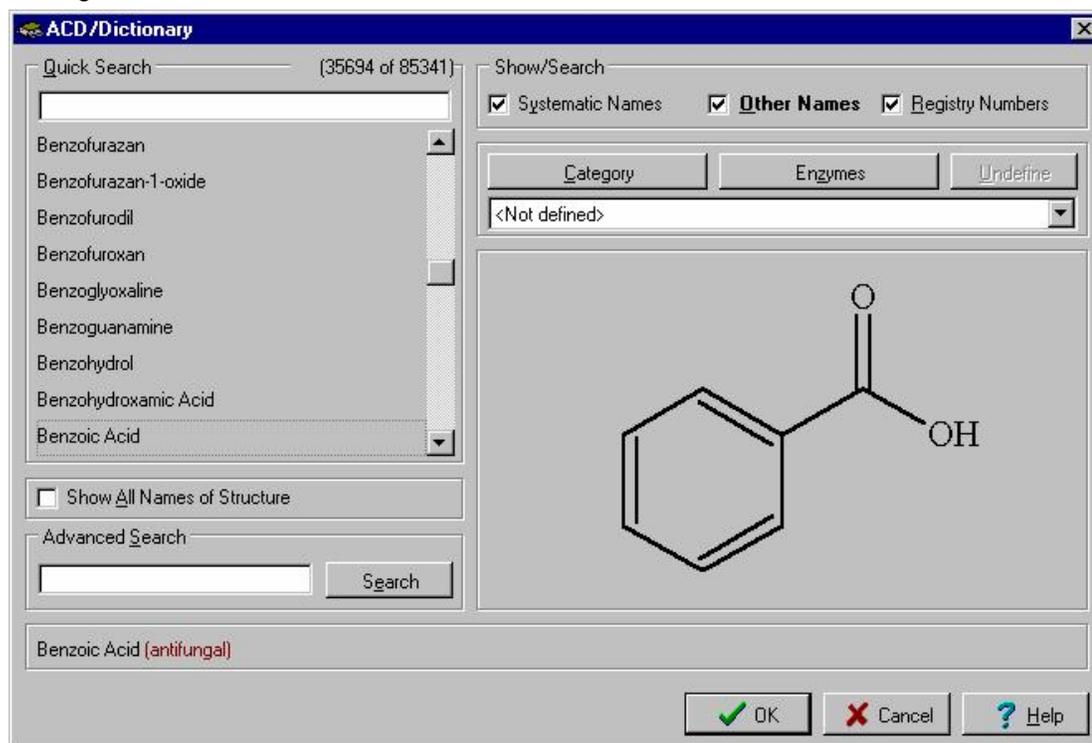
12.3 Diccionario

El ACD/Diccionario es un módulo adicional, ahora incluido con la versión comercial de ACD/ChemSketch. Es extraordinariamente usado para buscar “químicos” por su nombre común.

El ACD/Diccionario encuentra estructuras químicas de acuerdo a su nombre químico. Contiene unos 48,000 nombres sistemáticos y no sistemáticos y sus correspondientes estructuras moleculares. En el diccionario las búsquedas se hacen por el nombre químico completo o por el nombre de fragmentos.

Aunque las diferentes características del ACD/Diccionario están cubiertas en la *ACD/Dictionary User's Guide*, nosotros introducimos esta breve guía:

En la derecha de la barra **Referencias**, haga clic en el botón **Diccionario**  para ver la caja de diálogo **ACD/Diccionario**:



Nota Si ha comprado ACD/ChemSketch pero no ve el botón **Diccionario**  en la ventana ChemSketch cuando esta en el modo Estructura, verifique que ha entrado correctamente los DOS números de registro en el momento de la instalación—uno para ACD/ChemSketch, y el otro para la adición ACD/Diccionario.

Refiérase a la Guía de Usuario (*ACD/Dictionary User's Guide*) para más información!

12.4 Adición Gratuita ACD/Nombre—*Nuevo en 5.0!*

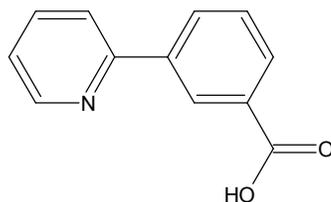
En la versión 5.0 ahora es posible usar gratuitamente la adición ACD/Nombre en la Interfase de ChemSketch. Esta funcionalidad extra esta disponible como un botón arriba en la barra general:



Esta herramienta es fácil de usar: dibuje la(s) estructura(s) para ser nombradas, haga clic en el botón y el nombre para una estructura o una mezcla se insertará como un texto en hilera en la zona de trabajo.

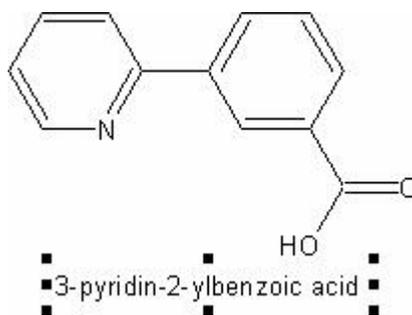
Intente nombrar algunos ejemplos.

1. Usando las herramientas ChemSketch, dibuje la siguiente estructura:

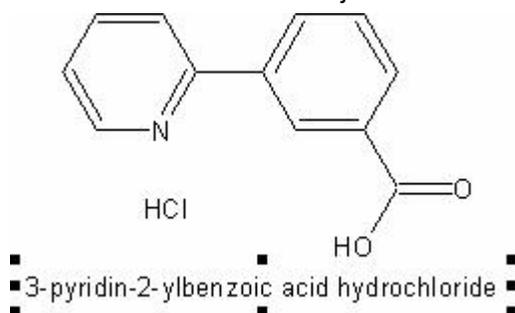


2. Si hay más de una estructura dibujada en el espacio de trabajo, Seleccione solamente la estructura anterior.

3. Haga clic en el botón **Generar Nombre desde Estructura**  o desde el menú **Herramientas** escoja **Generar Nombre desde Estructura**. El nombre aparece debajo de la estructura dibujada:



4. Mueva el nombre tipo hilera un poco hacia abajo arrastrándolo.
5. Seleccione el botón átomo de cloro  y haga clic una vez cerca de la estructura para dibujar HCl.
6. Seleccione las dos estructuras y haga clic de nuevo en **Generar Nombre desde Estructura**. Esta vez el nombre para la mezcla se ubica en la caja de texto:



12.4.1 Limitaciones del ACD/Nombre Gratuito

El ACD/Nombre gratis tiene las siguientes limitaciones:

- Las Estructuras para ser nombradas no pueden tener más de 50 átomos, incluyendo los hidrógenos.
- Las Estructuras únicamente pueden contener los siguientes elementos H, C, N, P, O, S, F, Cl, Br, I, Li, Na, K en sus valencias comunes.
- Las Estructuras no pueden tener más de tres ciclos.
- La versión gratuita no permite cambiar el nombre en las preferencias. Este usa las preferencias que corresponden a los nombres preferidos por la IUPAC.

Nota Para más información sobre la versión comercial del ACD/Nombre, que no tiene estas limitaciones, visite nuestro sitio web en:
http://www.acdlabs.com/products/name_lab/iupac/.

13. Goodies

13.1 Qué son los utilitarios "Goodies"?

Qué son los "goodies"? Ellos son botones adicionales que extienden la funcionalidad de ChemSketch. Están actualmente implementados como programas ACD/ChemBasic asociados con 22 nuevos botones ChemSketch. El ACD/ChemBasic es un lenguaje de programación especial que lo habilita para adecuar el software ACD, y pensamos que esta es una Buena opción para mostrarle cual es su utilidad—y al mismo tiempo hacer que su ChemSketch sea más versátil!

Note que no necesita conocer nada acerca de ACD/ChemBasic (aunque, si desea, puede aprenderlo usando los códigos Goodies como ejemplo).

13.2 Dónde puedo encontrarlos?

Estos botones de ayuda están incluidos en las instalaciones de ChemSketch 4.5. para verificar que usted realmente los tiene mire todos los archivos *.BAS en su carpeta ChemSketch. Si no los encuentra, puede bajarlos desde nuestro sitio web libre de carga

http://www.acdlabs.com/products/chem_dsn_lab/goodies.html

Ellos son fáciles de instalar y de usar. Sólo siga las instrucciones de instalación provistas en la página web y disfrute estas características nuevas de ChemSketch.

Note que puede remover los nuevos botones de la barra de herramientas de ChemSketch en cualquier momento.

Nota Los botones Goodies de ChemBasic solamente están disponibles cuando esta en el modo Estructura.

13.3 Goodies

Abajo encuentra una lista de botones Goodies que están disponibles en este momento en nuestro sitio web:

Botón	Función	Cómo usarlos
Insertar Página 	Inserte páginas en blanco en cualquier lugar dentro de su documento ChemSketch. Note que la forma usual—es a través de página/nueva en el menú—adicione una página al final del documento.	<ul style="list-style-type: none">Vaya a donde quiera insertar una página en blanco y haga clic en el botón Insertar Página.
Clonar Página 	Clone la página actual (además de su contenido) un número de veces—es muy usada para llenar el documento con plantillas, tablas, títulos, etc. Las nuevas páginas se adicionan al final del documento.	<ol style="list-style-type: none">Active la página que quiere clonar.Haga clic en el botón Clonar Página.En la caja de dialogo que aparece especifique el número de veces a clonar y haga clic en OK.
Mover/Copiar	Mueva y copie páginas— <i>p.ej.</i> cambia el orden de la página en	<ol style="list-style-type: none">Vaya a la página que desea mover o copiar.

Botón	Función	Cómo usarlos
Página 	su documento.	<ol style="list-style-type: none"> Haga clic en el botón Mover/Copiar Página. En la caja de dialogo que aparece teclee el número de páginas que quiere colocar después de la página actual y haga clic en OK. Seleccione Si en el mensaje que aparece si quiere copiarla en la página actual. Seleccione No si solamente quiere moverla. Haga clic en Cancelar para detener la ejecución del programa.
Borrar Páginas 	Borrar un rango de páginas al mismo tiempo.	<ol style="list-style-type: none"> Haga clic en el botón Borrar Páginas. En la caja de dialogo que aparece teclee la secuencia de las página a borrar. Se le avisará acerca de inhabilitar la acción Deshacer después de la ejecución del programa. Escoja OK si desea borrar las páginas. Haga clic en Cancelar para abortar la ejecución del programa.
Anotar en Documento 	Anotar en sus documentos el contenido en la zona superior izquierda de cada página. Esto es muy conveniente para manejar documentos y presentaciones largas.	<ol style="list-style-type: none"> Abra o cree un documento. Haga clic en el botón Anotar en Documento. Después de la ejecución del programa haga clic en el contador de páginas al final en la barra de estado para ver nombres de páginas.
Boceto (Sketch)- para- Convertir a VRML 	Exporta todas las moléculas a una página dentro de un archivo VRML 2.0, que puede verse con Cosmo, GLView, o cualquier otro visualizador VRML.	<ol style="list-style-type: none"> Dibuje las estructuras que desee para exportarlas a una página. Haga clic en el botón Sketch-To-VRML Converter. Seleccione OK en el mensaje Listo para exportar... que aparece (o Cancelar para abortar el programa). Teclee el nombre del archivo y la ruta y haga clic en OK. Note que si ha tecleado solo el nombre, el programa ubicará el archivo WRL en el mismo directorio como sk2vrml.bas. Especifique la presentación de la estructura escogida tecleando la correspondiente letra en la siguiente caja de dialogo y haga clic en OK.
SDF-para Convertir a Sketch 	<p>Importe los datos (moléculas, textos, etc.) desde un archivo en formato MDL SDF a un documento ChemSketch. Cada registro en el archivo SDF se traslada a la página.</p> <p>LIMITACION: no se pueden importar más de 100 registros (los documentos ChemSketch pueden contener hasta 100 páginas). Si el archivo SDF contiene más de 100 registros entonces se le avisará acerca de la conversión parcial (y del número de registros exitosamente importados).</p>	<ol style="list-style-type: none"> Haga clic en el botón SDF-To-Sketch Converter. En la caja de dialogo teclee la ruta completa y el nombre (los signos—“*” y “?” se aceptan en el archivo mascara) del archivo SDF que quiere importar y haga clic en OK. Si teclea el nombre del archivo sin especificar la ruta completa, el programa buscará su archive SDF en el directorio del programa ChemBasic. Así, que si ubica el archive SDF que necesita en el mismo directorio con el sdf2sk.bas entonces simplemente especifique el nombre sin la ruta. Si ubica el archivo SDF en un sub directorio del programa ChemBasic's entonces usted necesita solamente teclear el nombre del sub directorio. Si busca los resultados contenidos en más de un archivo, el programa le sugiere que Seleccione uno, entonces le pregunta por el campo de datos que contiene el texto que quiere mostrar a lo largo de la molécula. Especifique el nombre del campo y haga clic en OK.
Documento Navegador (Browser) 	Mire a través de los directorios y encuentre el documento ChemSketch especificado así como se buscan documentos para el texto hilera sin abrirlos.	<ul style="list-style-type: none"> Haga clic en este botón y siga las instrucciones que aparecen en los mensajes. Esta es una herramienta muy utilizada para búsqueda y Previsualización de documentos ChemSketch.

Botón	Función	Cómo usarlos
Tabla Mágica (Wizard) 	Cree tablas y/o Objetos alineados de acuerdo al número especificado de filas y columnas	Para crear una tabla y colocar el objeto dibujado en esta: <ol style="list-style-type: none"> Haga clic en el botón Tabla Mágica. Se le avisará sobre el número de Objetos en la página y algunas sugerencias sobre como alinearlos. Seleccione Si. Especifique el número de filas y columnas en la tabla. Escoja entonces si quiere crearle bordes a la tabla. Para crear una tabla Vacía: <ul style="list-style-type: none"> Corra la Tabla Mágica en una página en blanco. O <ul style="list-style-type: none"> Seleccione No en la caja de mensaje donde se le sugiere alinear los objetos.
Reemplazar Elementos 	Reemplace una clase de átomo con otro. Esta acción es muy utilizada, por ejemplo, para estructuras perfluoradas.	Note que esto solo puede hacerse con estructuras simples en una página. <ol style="list-style-type: none"> Dibuje o saque solo una estructura en la hoja y haga clic en este botón. En la caja de dialogo que aparece especifique el elemento que quiere emplazar y haga clic en OK. En el siguiente dialogo escoja el elemento con el que va a hacer el reemplazo y haga clic en OK.
Solución Calculadora 	Calcular los pesos de un compuesto para preparar una solución de volumen y concentración molar definida por el usuario.	Note que la ejecución del programa es posible solo con una estructura simple en la página. <ol style="list-style-type: none"> Dibuje o saque una estructura en la página y haga clic en este botón. Especifique la concentración molar requerida y el volumen de solución en la caja de dialogo. Vea los resultados en la caja de mensaje que aparece.
Imprimir etiquetas 	Rápidamente cree rótulos o etiquetas para reactivos químicos e imprímalos en los Formatos Estándar (Avery Standard) (se incluyen 45 hojas de plantillas) o imprímalos en sus propias hojas	<ol style="list-style-type: none"> Dibuje las estructuras a las que quiere crearles las etiquetas y haga clic en el botón Imprimir Etiqueta. Puede crear etiquetas para estructuras desde el archivo SDF si esta corriendo este programa en una página vacía. Para más información vea lprinter.txt provista en el directorio Goodies.
Constructor de Péptidos 	Construya estructuras de péptidos en 3D para las secuencias de amino ácidos.	<ul style="list-style-type: none"> Refiérase al archivo <i>pepbuid.sk2</i> provisto en el directorio Goodies para una guía del uso de este botón.
Constructor de Carbohidratos 	Construya un carbohidrato con el nombre abreviado.	<ul style="list-style-type: none"> Para información acerca de cómo trabajar con este botón referirse al archivo <i>sugarsk.txt</i> que puede encontrar en el directorio Goodies.
Reordenar Páginas 	Le permite cortar y pegar o copiar y pegar secuencias de páginas dentro del mismo documento.	<ol style="list-style-type: none"> Abra el documento al que quiere reordenar las páginas. Haga clic en este botón y siga las instrucciones en los mensajes.
Renombrar Páginas 	Cambie el nombre de las páginas	<ol style="list-style-type: none"> Abra el documento. Haga clic en este botón. Teclee el número de página que usted quiere renombrar

Botón	Función	Cómo usarlos
		<p>y haga clic en OK.</p> <p>4. Teclee el nombre y haga clic en OK.</p> <p>5. Los nombres de las páginas se muestran cuando usted hace clic en la página "Página 1/1" en la parte inferior de su ventana ChemSketch.</p>
<p>Insertar Números de Página/ Notas</p> 	<p>Inserte números de página o notas complejas en su documento. Observe que la nota será insertada en la parte inferior izquierda de la página.</p>	<p>1. Abra o cree un documento</p> <p>2. Haga clic en el botón Notas de Página</p> <p>3. Teclee en la caja de dialogo que aparece que es una plantilla para notas de página y haga clic en OK.</p> <p>Claves de la Plantilla Notas:</p> <ul style="list-style-type: none"> * \$P—inserta números de página * \$N—inserta nombres de páginas (que pueden insertarse usando la utilidad Renombrar Página o usando el comando Renombrar/Páginas) <p>Puede también incluir cualquier texto fijo en su plantilla notas.</p> <p><i>Por ejemplo:</i></p> <p>La Plantilla "\$P" insertará números de página</p> <p>La Plantilla "\$N" ubicará nombres de páginas en la esquina izquierda de cada página</p> <p>La Plantilla "Page \$P" insertará las notas "Página 1", "Página 2", <i>etc.</i></p> <p>La Plantilla: "Page \$P: \$N" insertará las notas "Página 1: Nombre de Página.</p> <p>La Plantilla que no contiene ninguna clave insertará textos fijos para cada página- usted puede, por ejemplo, señalar todas las páginas con su nombre.</p>
<p>Crear HTML</p> 	<p>Exporta todas las páginas especificadas de un documento actual en un archivo HTML, el cual podrá ver en su explorador.</p> <p>Nota: Requiere ChemSketch 4.01 o posterior.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Todos los de talles pueden encontrarse en el archivo FillTmpHelp.doc provisto en el directorio Goodies.
<p>Convertidor Sketch-a-SDF</p> 	<p>Exporte todas las estructuras de la página actual o desde todo el documento a un archivo SDF.</p>	<p>1. Abra la página con las estructuras que quiere exportar.</p> <p>2. Escoja este botón y Seleccione que quiere importar—la página actual o todo el documento. Haga clic en OK.</p> <p>3. Especifique el nombre y la ruta para el archivo SDF. Observe que si usted teclea únicamente el nombre del archivo, el programa pondrá los archivos SDF resultantes en el mismo directorio con el archivo expsdf.bas.</p>
<p>Mostrar Hidrógenos</p> 	<p>Explícitamente muestra hidrógenos en las estructuras dibujadas.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Dibuje estructuras en la página y haga clic en este botón. <p>Nota: usted puede usar el comando estándar ChemSketch —Herramientas/Remove Hidrógenos Explícitos—para reversar la acción.</p>
<p>Remove Iones Espectador (Desalt)</p> 	<p>Un archivo SDF que contiene uno o más estructuras Salinas pueden cambiarse a "una molécula por ingreso" archivos SDF. Este botón remueve los iones pequeños ya sea por FW o por número de átomos. Por ejemplo, el acetato</p>	<p>1. Especifique el nombre y la ruta para el archivo SDF. Note que si teclea solamente el nombre del archivo, el programa lo direccionará en el directorio Goodies.</p> <p>2. Luego defina un criterio para partes pequeñas: masas o átomos.</p> <p>3. El archivo SDF resultante se guardará en el mismo directorio con el nombre que especificó bajo el nombre</p>

Botón	Función	Cómo usarlos
	de sodio tendrá el átomo de sodio removido y el ácido acético lo mantendrá. (Nota: la molécula anterior se coloca en su forma neutral.)	newfile.sdf . Un archivo muestra especial, "salts.sdf" con 5 sales en este se encuentra en el directorio Goodies para pruebas. SUGERENCIA: use la utilidad "Importar SDF" para revisar el Newfile.sdf.
Constructor de Acidos Nucleicos 	Construya un ácido Nucleico en 3D (ADN, ARN) (una o dos cadenas) para su secuencia de entrada.	<ul style="list-style-type: none">Haga clic en este botón y siga las instrucciones de los mensajes.

14. Conclusión

Gracias por haber escogido ACD/ChemSketch. Estamos esforzándonos para producir lo más fácil de usar, dentro de los más potentes programas de dibujo para química disponibles en este momento. Desde mayo del 2001, unas 100,000 copias de ACD/ChemSketch están en circulación y pensamos que hay razones para su creciente popularidad!

El Complemento del capítulo 3 de esta guía debería haberle dado las herramientas necesarias para comenzar a trabajar con este programa. El complemento del capítulo 4 de esta guía debería haberlo habituado con una nueva dimensión de ACD/ChemSketch, el I-Lab. El complemento de los capítulos restantes de esta guía lo ha hecho altamente eficiente como usuario ChemSketch y de hecho le damos la bienvenida al "club" de expertos ChemSketch.

Este resumen, combinado con una ayuda en línea debería ser suficiente para ejecutar muchas cosas con este potente e intuitivo paquete. Para cualquier ocasión posterior en la que se requiera asistencia o si nos retroalimenta sobre este manual o cualquier otro aspecto del software, estaríamos contentos de escucharlo. Esperamos que se contacte por alguna de las formas descritas en el capítulo 1.8.

Y además...

Una vez que ha usado esta guía, esperaríamos su comentario. Cómo podemos mejorar la documentación para este producto? Tenemos un pequeño cuestionario que nos gustaría que respondiera. Todas los remitentes de los dibujos se almacenarán para poder recibir un premio de ACD/ChemFolder (o equivalente descuento para comprar cualquier software ACD). Por favor use MS Word 6.0 o posterior para abrir el archivo "survey.doc" o use Adobe Acrobat Reader para abrir "survey.pdf" en la documentación del CD que ha recibido con este software, o visite la página "Feedback" en nuestro sitio web, <http://www.acdlabs.com/feedback/guides.html>. el ganador del dibujo será anunciado al final de cada calendario anual.