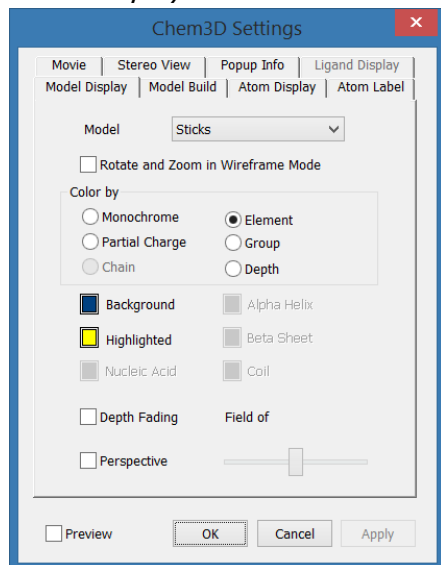


## 1. Βασικές ρυθμίσεις εγγράφου

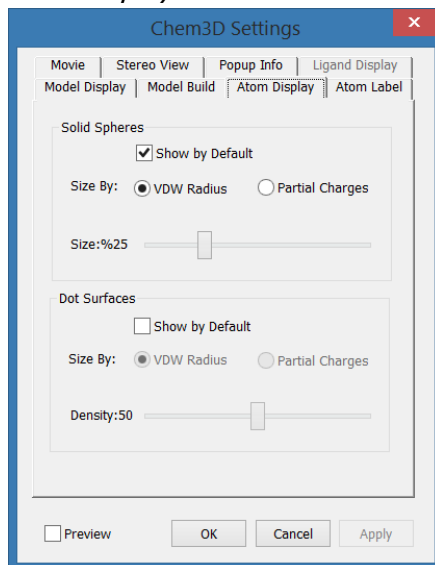
View > Settings...

### Model Display



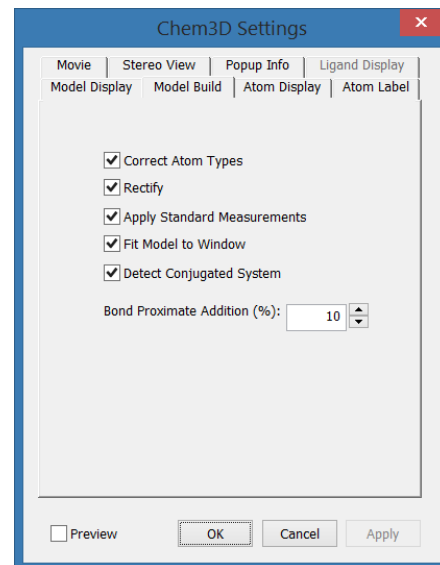
Αρχική εμφάνιση του μοντέλου

### Atom Display




Αρχική εμφάνιση των ατόμων

### Model Built



Πρέπει **όλα να είναι επιλεγμένα** ώστε να δομείται ένα σωστό μοντέλο με βάση τη βάση δεδομένων του Chem3D

## 2. Μεγέθυνση η σμίκρυνση του μοντέλου

Παλέτα εργαλείων: . Ομαλή μεγέθυνση η σμίκρυνση με κύλιση του ποντικού πάνω κάτω στην περιοχή του μοντέλου.

Κουμπιά αλλαγής μεγέθους: . Με κλικ μεγέθυνση η σμίκρυνση κατά 10%. Με συνεχές πάτημα ομαλή.

## 3. Διόρθωση του μοντέλου με βάση τα μεγέθη μηκών και γωνιών δεσμών της βάσης δεδομένων

*Object > Clean Up Structure.* Εφαρμογή στο επιλεγμένο μοντέλο μηκών και γωνιών δεσμών της βάσης δεδομένων.

*Object > Rectify.* Συμπλήρωση στο επιλεγμένο μοντέλο των τυχόν κενών σθενών με άτομα υδρογόνου.

## 4. Πολλαπλά μοντέλα σε ένα παράθυρο

Μπορούμε να δημιουργήσουμε πολλαπλά μοντέλα σε ένα παράθυρο με τα εργαλεία δόμησης ή με copy/paste από άλλα παράθυρα. Σε αυτήν την περίπτωση όλα τα μοντέλα έχουν ενιαία κλίμακα (Å/cm) και μπορούμε να μεταβάλλουμε το μέγεθος όλων.

## 5. Περιστροφές του μοντέλου περί άξονα

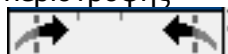
Περιστροφή περί τον x

Κύλιση του ποντικού στην κατακόρυφη δεξιά μπάρα περιστροφής



Περιστροφή περί τον y

Κύλιση του ποντικού στην οριζόντια κάτω μπάρα περιστροφής



Περιστροφή περί τον z

1. Επιλογή σφαίρας ελευθερης περιστροφής



2. Κυκλική κύλιση του ποντικού στην περιοχή του μοντέλου έξω από το χώρο της σφαίρας

Ελεύθερη περιστροφή

1. Επιλογή σφαίρας ελευθερης περιστροφής

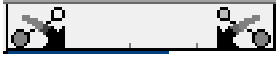



2. Κυκλική κύλιση του ποντικού στην περιοχή του μοντέλου εντός του χώρου της σφαίρας

Αν υπάρχουν πολλά μοντέλα και δεν έχει επιλεγεί κανένα περιστρέφονται όλα.

Αν υπάρχουν πολλά μοντέλα και έχει επιλεγεί ένα από αυτά περιστρέφεται μόνο αυτό.

## 6. Εσωτερικές περιστροφές του μοντέλου περί δεσμό

<p><i>Περιστροφή του μοντέλου περί δεσμό</i></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Επιλογή ενός δεσμού.</li> <li>2. Κύλιση του ποντικιού στην οριζόντια πάνω μπάρα περιστροφής</li> </ol> 	<p><i>Περιστροφή ενός μέρους του μοντέλου περί δεσμό</i></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Επιλογή ενός δεσμού.</li> <li>2. Κύλιση του ποντικιού στην κατακόρυφη αριστερά μπάρα περιστροφής</li> </ol> 
--	--

Αν υπάρχουν πολλά μοντέλα περιστρέφεται μόνο το μοντέλο στο οποίο έχει επιλεγεί δεσμός.

## 7. Περιστροφή ενός μόνο από τα μοντέλα σε ένα παράθυρο

1. Επιλέγουμε ένα άτομο από το μοντέλο που επιθυμούμε να περιστρέψουμε ανεξάρτητα από τα άλλα.
2. Περιστρέφουμε με οποιονδήποτε τρόπο (trackBall, μπάρες περιστροφής)

## 8. Δημιουργία μοντέλων με ενιαία κλίμακα (μέγεθος)

Όταν δημιουργούμε μοριακά μοντέλα σε διαφορετικά παράθυρα είναι προφανές ότι η κλίμακα τους δεν είναι ίδια (Å/cm). Έτσι όταν τα μοντέλα μεταφέρονται σε άλλες εφαρμογές (με copy/paste ή με αποθήκευση από το Chem3D ως γραφικό και εισαγωγή του γραφικού στην άλλη εφαρμογή) δεν έχουν την ίδια κλίμακα με αποτέλεσμα π.χ. το άτομο του C ή ένας απλός δεσμός C-C να εμφανίζονται με διαφορετικό μήκος σε δύο ανάλογες ενώσεις. Παρόλο που αυτό μπορεί να διορθωθεί με μεταβολή της κλίμακας κάθε γραφικού μετά την εισαγωγή του στην άλλη εφαρμογή προς επίτευξη ενιαίας κλίμακας, ο πιο εύκολος τρόπος είναι ο παρακάτω.

1. Στο Chem3D εισάγουμε όλα τα μοντέλα σε ένα έγγραφο με copy/paste.
2. Αποθηκεύουμε το έγγραφο ως γραφικό (TIFF, png, jpg,...).
3. Σε ένα πρόγραμμα γραφικών bitmap αποκόπτουμε το γραφικό - μοριακό μοντέλο και το μεταφέρουμε στην άλλη εφαρμογή με copy/paste ή με αποθήκευση και εισαγωγή του γραφικού στην άλλη εφαρμογή

## 9. Έλεγχος εγγραφής - αναπαραγωγής ταινιών



## 10. Δημιουργία ταινιών με διαδοχικές περιστροφές

1. Επιλέγουμε το κουμπί Record για έναρξη της εγγραφής.
2. Εκτελούμε μία ή περισσότερες περιστροφές. Για κάθε μια δημιουργείται ένα frame.
3. Επιλέγουμε το κουμπί Stop για λήξη της εγγραφής.

## 11. Δημιουργία ταινιών με spin

Analyze > Spin ....

Δημιουργούνται αυτόματα Frames μέχρι το/τα μοντέλα να περιστραφούν κατά 360° και στη συνέχεια συνεχίζει να αναπαράγεται.

Αν σταματήσουμε την ταινία παραμένουν όλα τα frames της περιστροφής.

## 12. Επεξεργασία ταινιών

1. Επιλέγουμε ένα frame σύροντας το δείκτη της ταινίας.
2. Edit > Clear Frames ....

## 13. Αποθήκευση ταινιών

File > Save as ... > Windows Avi Movie (\*.avi).

## 14. Εύρεση και οπτικοποίηση βελτιστοποιημένων δομών χημικών ενώσεων

1. Συνδεόμαστε στη βάση δεδομένων: *NIST Chemistry WebBook* (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>).

2. Επιλέγουμε αναζήτηση με βάση μοριακό τύπο (Formula).

## NIST Chemistry WebBook

NIST Standard Reference Database Number 69

View: [Search Options](#), [Models and Tools](#), [Special Data Collections](#), [Documentation](#), [Changes](#), [Notes](#)

## Credits

NIST reserves the right to charge for access to this database in the future.

Search Options [top](#)

- |  |  |
|--|--|
| <b>General Searches</b>  | <b>Physical Property Based Searches</b>  |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>• <a href="#">Formula</a></li> <li>• <a href="#">Name</a></li> <li>• <a href="#">IUPAC identifier</a></li> <li>• <a href="#">CAS registry number</a></li> <li>• <a href="#">Reaction</a></li> <li>• <a href="#">Author</a></li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>• <a href="#">Ion energetics properties</a></li> <li>• <a href="#">Vibrational and electronic energies</a></li> <li>• <a href="#">Molecular weight</a></li> </ul> |

3. Εισάγουμε το μοριακό τύπο της ένωσης που μας ενδιαφέρει.

## Search for Species Data by Chemical Formula

Please follow the steps below to conduct your search ([Help](#)):

- Enter the desired chemical formula (e.g., C<sub>4</sub>H<sup>+</sup>Cl):
- Select any desired options for the search:
  - Exactly match the specified isotopes. ([Help](#))
  - Allow elements not specified in formula. ([Help](#))
  - Allow more atoms of elements in formula than specified. ([Help](#))
  - Exclude ions from the search. ([Help](#))
- Select the desired units for thermodynamic data:
  - SI  calorie-based
- Select the desired type(s) of data:
 

<b>Thermodynamic Data</b>	<b>Other Data</b>
<input type="checkbox"/> Gas phase	<input type="checkbox"/> IR spectrum
<input type="checkbox"/> Condensed phase	<input type="checkbox"/> THz IR spectrum
<input type="checkbox"/> Phase change	<input type="checkbox"/> Mass spectrum
<input type="checkbox"/> Reaction	<input type="checkbox"/> UV/Vis spectrum
<input type="checkbox"/> Ion energetics	<input type="checkbox"/> Gas Chromatography
<input type="checkbox"/> Ion cluster	<input type="checkbox"/> Vibrational & electronic energy levels
	<input type="checkbox"/> Constants of diatomic molecules
	<input type="checkbox"/> Henry's Law
- Press here to search:

4. Από τη λίστα των ισομερών επιλέγουμε το ισομερές που μας ενδιαφέρει.

## Search Results

37 matching species were found.

For each matching species the following will be displayed:

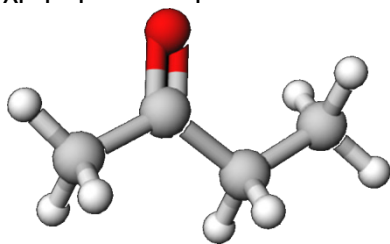
- Chemical name
- Chemical formula
- Structure image (if available)

Click on the name to see more data.

- 2-Butanone (C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O)
- Butanal (C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O)
- Propanal, 2-methyl- (C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O)

## 1η μέθοδος

5α. Επιλέγουμε οπτικοποίηση της δομής με τη χρήση Javascript.



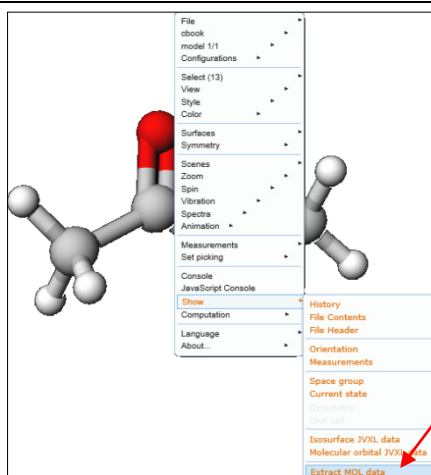
## 2-Butanone

- **Formula:** C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O
- **Molecular weight:** 72.1057
- **IUPAC Standard InChI:**
  - InChI=1S/C4H8O/c1-3-4 (2) 5/h3H2, 1-2H3
  - [Download the identifier in a file.](#)
- **IUPAC Standard InChIKey:** ZWEHNKRNPOVVGH-UHFFFAOYSA-N
- **CAS Registry Number:** 78-93-3
- **Chemical structure:**



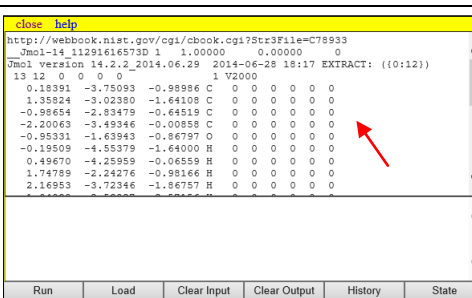
This structure is also available as a [2d Mol file](#) or as a [computed 3d SD file](#). The 3d structure may be viewed using [Java](#) or [Javascript](#).

6α. Με δεξί κλικ στο μοριακό μοντέλο επιλέγουμε στο αναδυόμενο μενού *Show > Extract MOL data*

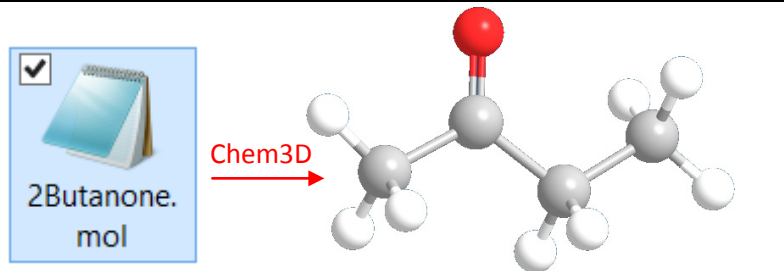


7α. Στο παράθυρο που ανοίγει αντιγράφουμε όλο το περιεχόμενο περιγραφής της δομής

8α. Επικολλούμε το περιεχόμενο περιγραφής της δομής σε ένα νέο αρχείο κειμένου και το αποθηκεύουμε με επέκταση: \*.mol (π.χ. 2Butanone.mol)



9α. Ανοίγουμε το αρχείο με το Chem3D



## 2η μέθοδος

5β. Επιλέγουμε την ανάκτηση του υπολογιζόμενου αρχείου 3d SD (computed 3d SD file).

6β. Αποθηκεύουμε το αρχείο με επέκταση: \*.mol (π.χ. 2Butanone.mol)

**2-Butanone**

- Formula: C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O
- Molecular weight: 72.1057
- IUPAC Standard InChI:
  - InChI=1S/C4H8O/c1-3-4(2)5/h3H2,1-2H3
  - Download the identifier in a file.
- IUPAC Standard InChIKey: ZWEHNKRNPVVGH-UHFFFAOYSA-N
- CAS Registry Number: 78-93-3
- Chemical structure:

This structure is also available as a [2d Mol file](#) or as a [computed 3d SD file](#). The 3d structure may be viewed using [Java](#) or [Javascript](#).

7β. Ανοίγουμε το αρχείο με το Chem3D

