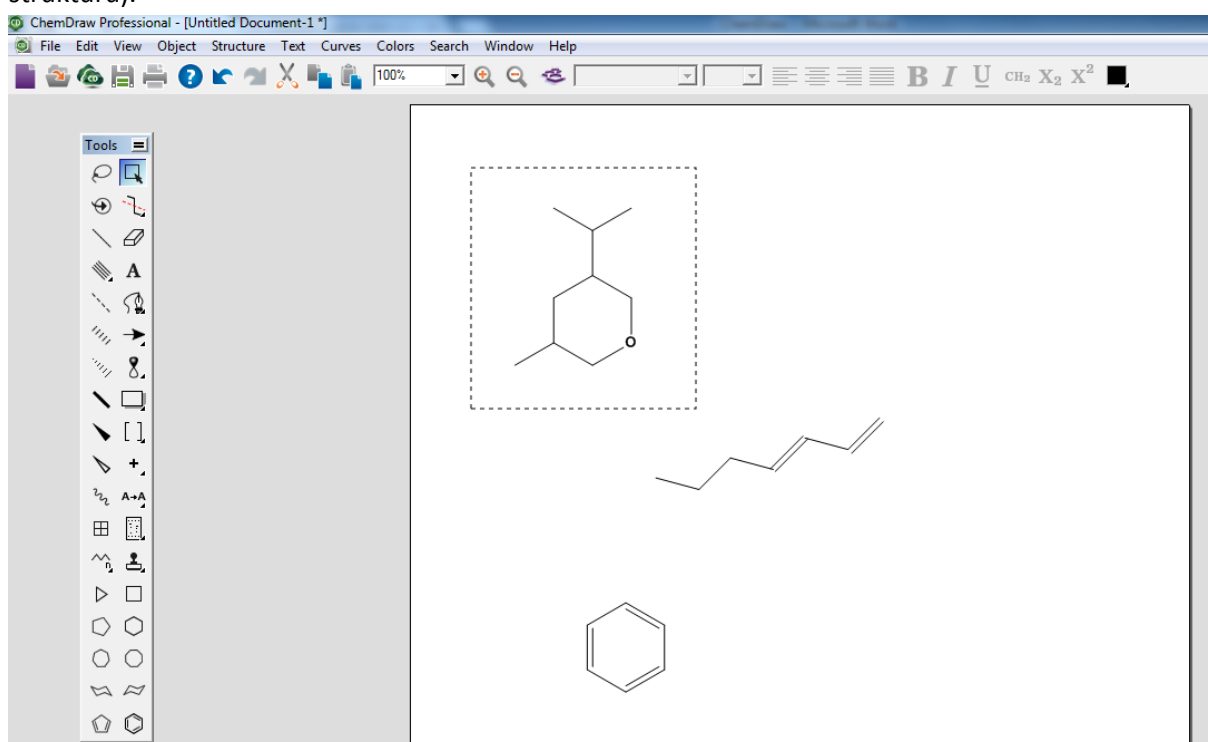


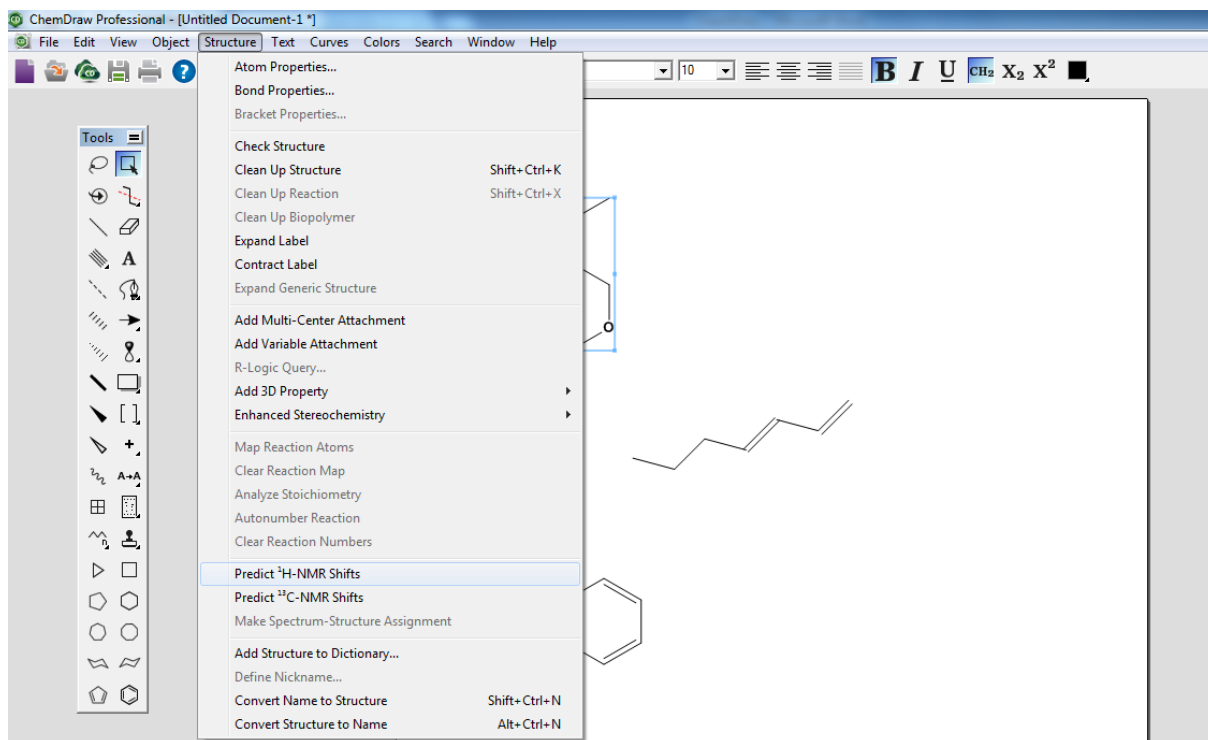
ChemDraw

Tento program se využívá pro kreslení strukturálních vzorců. Tvorba vzorců v tomto programu je velmi intuitivní. V okně *Tools* je možné vybrat požadovaný cyklus nebo vazbu a pomocí myši se tvoří struktura. Vazbu/cyklus můžete napojit na libovolný uhlík nebo pokud kliknete na prostředek vazby vytvořit násobnou vazbu/vytvořit více cyklické sloučeniny. Libovolný uhlík ve vytvořené struktuře je možné nahradit jiným prvkem. V okně *Tools* vybereme symbol **A** (text) a myší vybereme uhlík, místo kterého napíšeme značku požadovaného prvku.

Velká výhoda tohoto programu je, že umí predikovat 1D- NMR spektra a to jak vodíková tak i uhlíková. Pro predikci je potřeba vybrat požadovanou strukturu (okno *Tools Marquee* a myší označit strukturu).

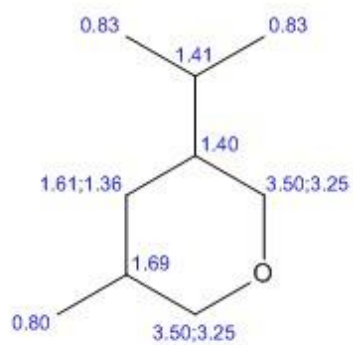


V Záložce *Structure* je možné vybrat je možné zvolit Predict $^1\text{H-NMR}$ Shift nebo Predict $^{13}\text{C-NMR}$ Shift.



Zobrazí se s trutkura s chemickými posuny a predikované spektrum. Pod spektrem je tabulka s chemickými posuny jednotlivých skupin a případně s komentářem. Strukturu s predikovanými chemickými posuny i predikované spektrum je možné uložit jako jednotlivé obrázky.

ChemNMR ^1H Estimation



Estimation quality is indicated by color: **good**, **medium**, **rough**

