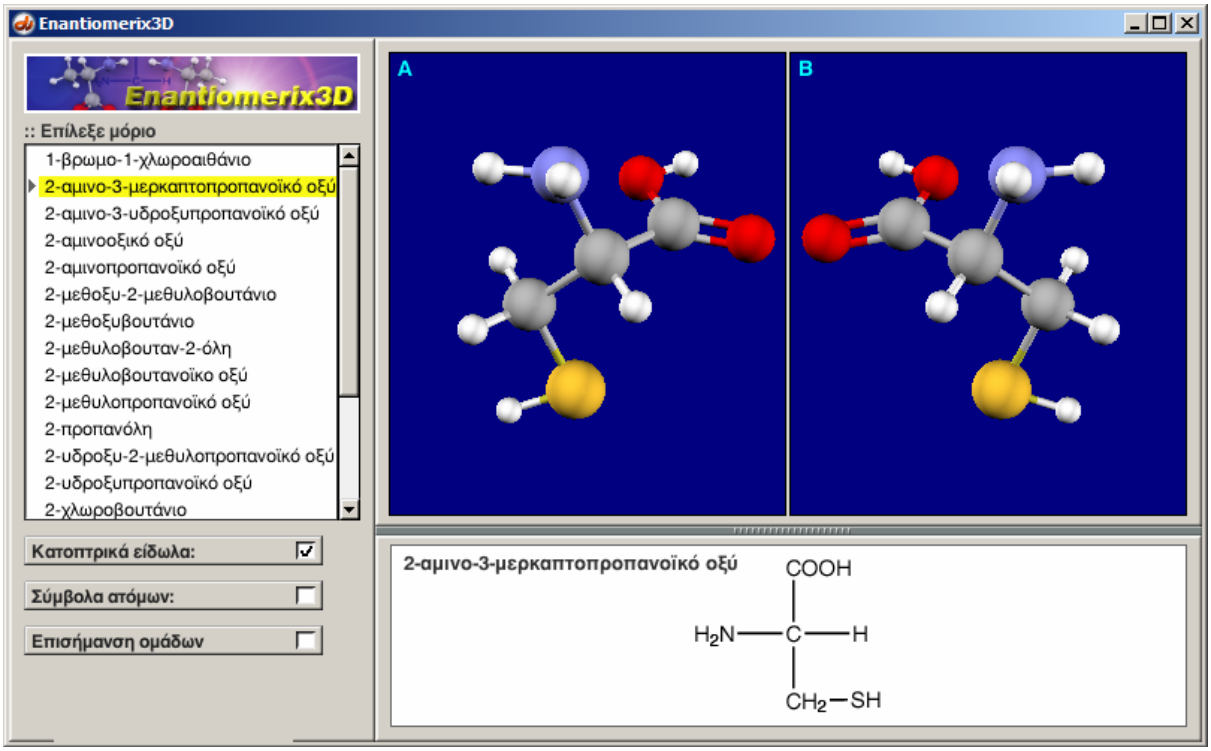
Εναντιομέρεια

Πρόγραμμα Enantiomerix3D – Οδηγίες χρήσης

Γενικά

Η εκκίνηση του προγράμματος γίνεται με διπλό κλικ στο αρχείο «*Enantiomerix3D*.exe».

Στο πρόγραμμα *Enantiomerix3D* έχετε στη διάθεσή σας μια λίστα στο αριστερό μέρος του παραθύρου από όπου επιλέγετε ένα μόριο.



Επιλογή ενός μορίου και εμφάνισή των κατοπτρικών μοντέλων του

Επιλέξτε στη λίστα στο αριστερό μέρος του παραθύρου ένα μόριο.

Στο δεξί μέρος του παραθύρου και στο χώρο **A** εμφανίζεται το μοντέλο του μορίου που επιλέξατε. Στο χώρο **B** εμφανίζεται το κατοπτρικό του είδωλο σε επίπεδο καθρέπτη που βρίσκεται στο μέσον των δύο χώρων και είναι κάθετος σε αυτούς.

Εμφάνιση πληροφοριών για το μόριο

Κάτω από τα μοντέλα εμφανίζονται οι παρακάτω πληροφορίες:

- Η ονομασία του μορίου
- Ο συντακτικός τύπος του μορίου

Χειρισμός μοριακών μοντέλων ως κατοπτρικών ειδώλων

Το μοντέλο του μορίου (**A**) καθώς ή το κατοπτρικό του είδωλο (**B**) μπορείτε να το περιστρέψετε ελεύθερα για να το εξετάσετε καλύτερα με ενεργοποιημένη την επιλογή *«Κατοπτρικά είδωλα»*. Προς τούτο πιέστε το <u>αριστερό</u> κουμπί του ποντικιού πάνω σε ένα από τα μοντέλα και σύρετε προς οποιαδήποτε κατεύθυνση (drag). Παρατηρείστε ότι όταν περιστρέφετε ένα από τα μοντέλα το άλλο περιστρέφεται ανάλογα πάντα ως κατοπτρικό είδωλο σε επίπεδο καθρέπτη που βρίσκεται

στο μέσον των δύο χώρων και είναι κάθετος σε αυτούς.

Ανεξάρτητος χειρισμός μοριακών μοντέλων

Αποεπιλέγοντας την επιλογή *«Κατοπτρικά είδωλα»* μπορείτε να περιστρέψετε ελεύθερα το μοντέλο του μορίου (**A**) ή (**B)** ανεξάρτητα για να τα εξετάσετε καλύτερα και να τα προσανατολίσετε στο χώρο χωρίς την ύπαρξη του καθρέπτη. Προς τούτο πιέστε το αριστερό κουμπί του ποντικιού πάνω σε ένα από τα μοντέλα και σύρετε προς οποιαδήποτε κατεύθυνση (drag). Παρατηρείστε ότι όταν περιστρέφετε ένα από τα μοντέλα το άλλο δεν περιστρέφεται.

Ενεργοποίηση των κατοπτρικών ειδώλων

Μετά από την ανεξάρτητη περιστροφή ενός μοντέλου (π.χ. **A**) μπορείτε να ενεργοποιήσετε την επιλογή *«Κατοπτρικά είδωλα»* για να διευθετήσετε το άλλο μοντέλο (π.χ. **B**) ως κατοπτρικό είδωλο του πρώτου σε επίπεδο καθρέπτη που βρίσκεται στο μέσον των δύο χώρων και είναι κάθετος σε αυτούς.

Μεταφορά, μεγέθυνση και σμίκρυνση των μοντέλων

Για να μεγεθύνετε ή να σμικρύνετε ένα μοντέλο πιέστε το δεξί κουμπί του ποντικιού πάνω σε ένα από τα μοντέλα και σύρετε (drag) κάτω ή πάνω αντιστοίχως.

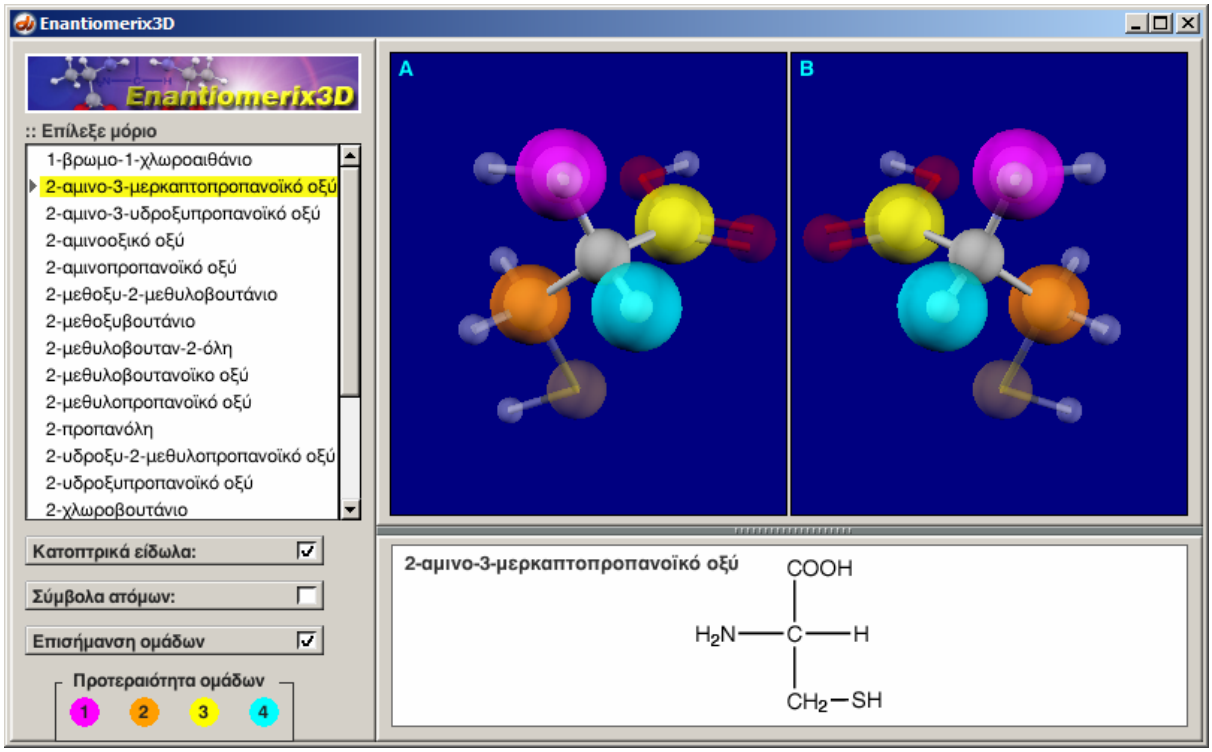
Για να μεταφέρετε στο χώρο ένα μοντέλο κρατώντας πατημένο το πλήκτρο «Shift» στο πληκτρολόγιο πιέστε το αριστερό κουμπί του ποντικιού πάνω σε ένα από τα μοντέλα και σύρετε (drag) προς οποιαδήποτε κατεύθυνση.

Εμφάνιση συμβόλων των ατόμων

Κάντε κλικ στο κουμπί *«Σύμβολα ατόμων»* για να εμφανιστούν τα σύμβολα των ατόμων του μοντέλου

Επισήμανση ομάδων

Κάντε κλικ στο κουμπί *«Επισήμανση ομάδων»* για να δείτε μια απλοποιημένη μορφή των μοντέλων όπου τα άτομα κάθε μιας από τις τέσσερις ομάδες που συνδέονται με τον κεντρικό άνθρακα επισημαίνονται με διαφορετικά χρώματα με βάση τη σειρά προτεραιότητας της μεθόδου στερεοχημικής απεικόνισης των Cahn, Ingold και Prelog.



Στο κάτω αριστερό μέρος του παραθύρου εμφανίζεται ένα υπόμνημα όπου κάθε χρώμα αντιστοιχίζεται με ένα βαθμό προτεραιότητας (1 > 2 > 3 > 4). Προσανατολίζοντας κατάλληλα κάθε μοντέλο με απενεργοποιημένη την επιλογή *«Κατοπτρικά είδωλα»* μπορείτε να προσδιορίζετε τη *R* ή *S* απεικόνισή του μοντέλου (**A**) ενός χειρόμορφου μορίου ή του κατοπτρικού του ειδώλου (**B**) με βάση τη μέθοδο στερεοχημικής απεικόνισης των Cahn, Ingold και Prelog.

Κατανομή χώρων μοντέλου και πληροφοριών

Σύρατε τη γκρι ράβδο που χωρίζει το χώρο των μοντέλων από αυτόν των πληροφοριών για να καθορίσετε το σχετικό ύψος τους.

Έξοδος από το πρόγραμμα

Κλείστε το παράθυρο του προγράμματος με κλικ στο κουμπί κλεισίματος του παραθύρου.