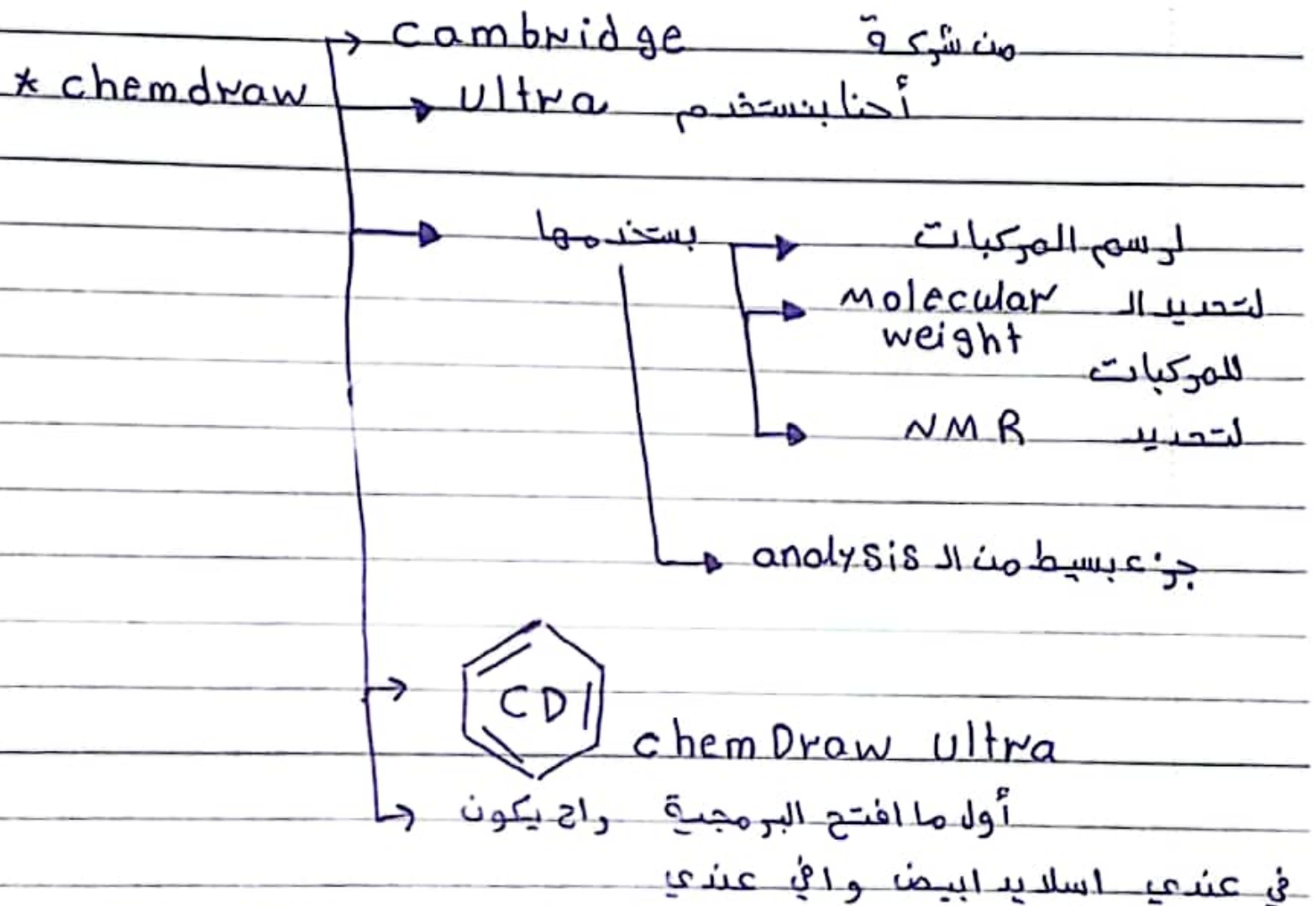


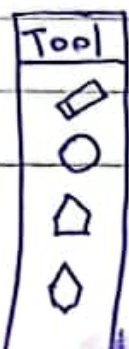
* CADD = Computer Assisted drug design

هيه تصميم واكتشاف الأدوية باستخدام الكمبيوتر

* أهم برمجية احنا بنستخدمها في بيائنا في اكتشافات جميع
الأدوية هية ← chemdraw



file - Edit - view - object - structure - Text - curve
color - online - window - help .



برضه في عندي ← Tools هيه من شايته (متحركة).
بقدر أغير مكانها باستخدام الفأرة

Tool

A

* حتى تستبدل ذرة الكربون (C) بذرة أخرى
بمضغ على [A] بيمين بخط السهم على
المكان التي بدى استبدل في ذرة الكربون

* most stable form = clean up structure

* clean up structure

→ is used to neaten the appearance of molecules by standardizing bond lengths and angles.

① → select the structure or part of structure to clean up.

② → navigate to structure → clean up structure.

or

<shift> + <control> + <K>

* نوع ال Font الى استعماله الذكور ← Time New Roman

* بعد ما ارسم المركب على ال chemdraw ممكن اتقلقه على ال word
 ال word انه بحدرك المركب وابعمله copy والصق على ال word

* المركب الي استغلته عليه الدكتوراه على ال chemdraw
 هو ال  Phenytoin ~~Phenytoin~~

سؤال

what the icon used for transport or repositioning writing?

 Lasso Tool (selection tool)

سؤال

* الدكتوراه بتحب اتحفظ الملف بـ MDL Molfile ("mol") لاني
 يفتح في ال (Discovery Studio) اذا احدثته بأي صيغة ثانية مارج يفتح في

* Discovery studio 
 هي برمجية أكثر تطوراً
 في منها Visualizer
 بتكون For free
 بتكون ناقصا بعض ال tool
 For Drug Design.

* ال chemdraw ليس فقط اداة لرسم المركبات (✓)

chemdraw > view > show analysis window > paste

① molecular formula

راج يطلع عندي الـ

② Exact Mass → to 5 digit number

يعني مكون من 5 ارقام

[لازم يطابق الـ molecular mass الي بطلع عندنا من الـ mass spectroscopy]
 مع الـ Exact Mass → to 5 digit number ← حتى يتطابق

③ Mol. wt → to 5 digit number

④ elemental analysis

⑤ Spectroscopy
 Spectrum (m/e) بيظهرني برقة كيف لازم يكون

* chemdraw > view > show chemical properties window > paste

① Boiling point ② melting point. راج يطلع عندي :-

③ critical Temp ④ critical pres. ⑤ MR ⑥ Log P

⑦ Heat of form ⑧ Clog p ⑨ CMR. ⑩ critical Volum

⑪ Henry's Low ⑫ Gibbs Energy.

* Chemdraw > view > show object Toolbar

* chemdraw > structure > convert structure to name

* chemdraw > structure > Convert name to structure

* chemdraw > structure > Atom properties

~~XXXXXXXXXXXX~~

هديل الزعبي

* chemdraw > structure > Bond properties

- * chemdraw > structure > clean up structure

* $\text{H} > \text{C} > \text{N} > \text{O} > \text{F}$ Map Reaction Atoms

" > " > ~~HHHHH~~ H-NMR-shifts

 $\delta > \epsilon > \zeta$ C-NMR-shifts

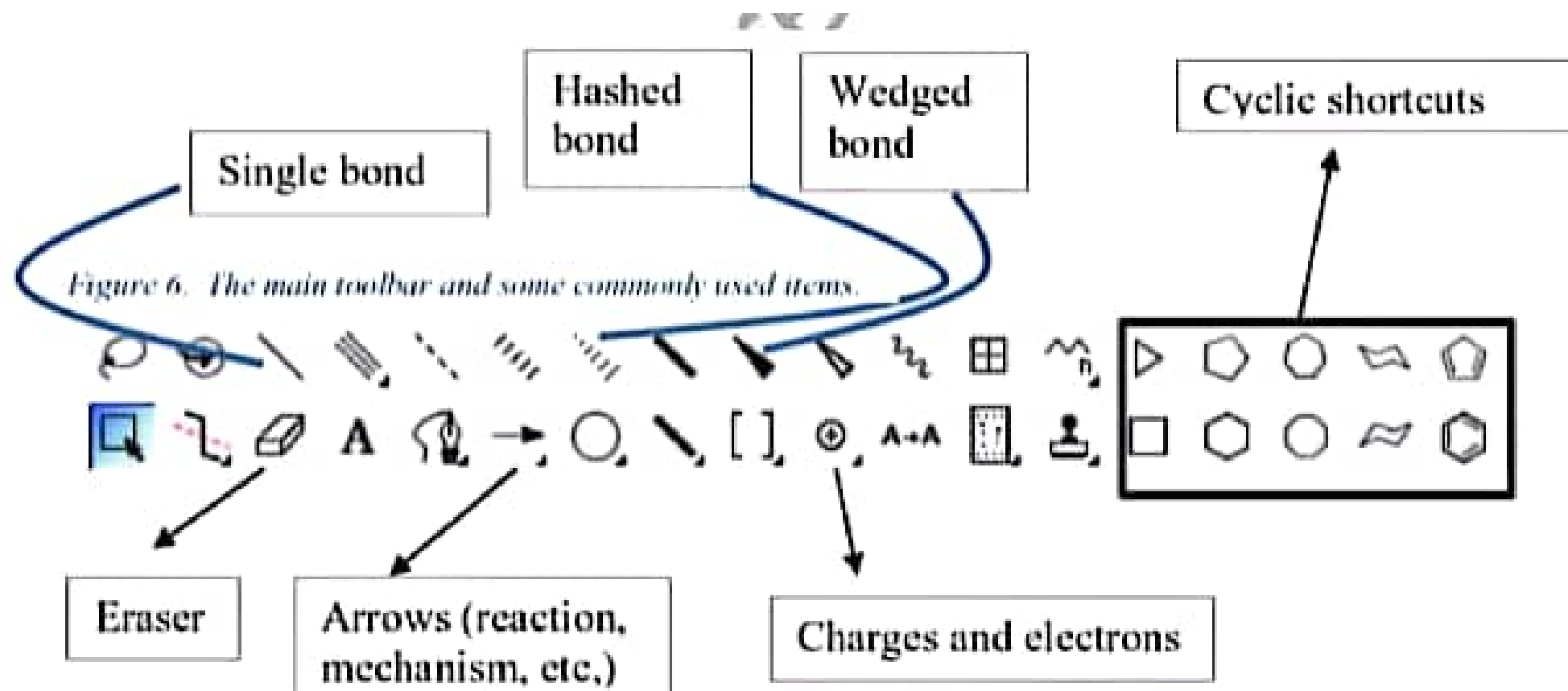


Times New... ▼

12 ▼



Times New Roman



ICON

Solid Bond

Eraser

Multiple
Bond toolbar

Text

TOOL



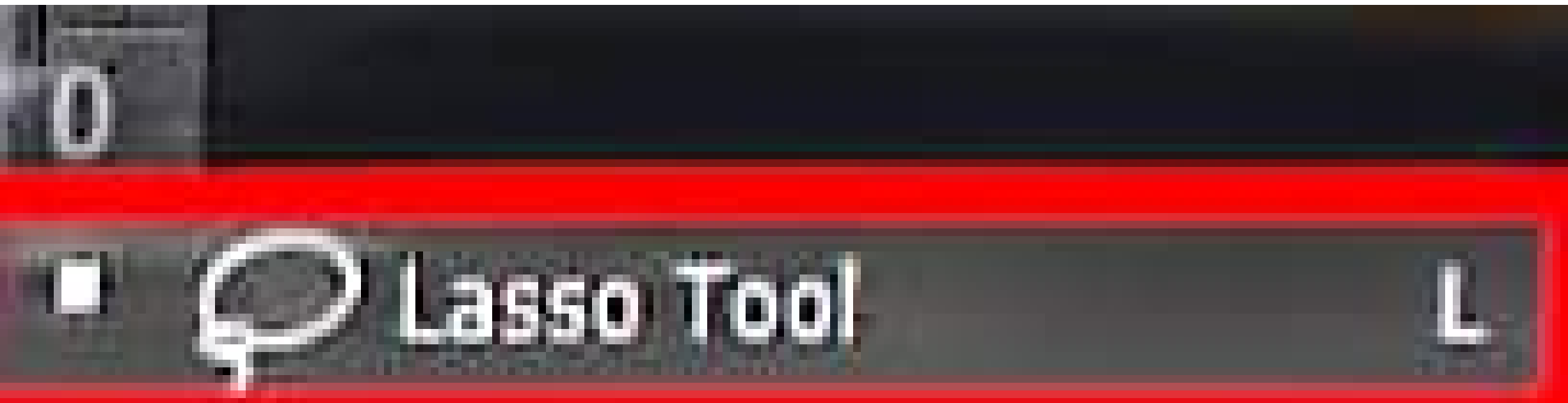
EXPLANATION

Draw bonds and set bond properties.

Delete objects. Click on an object delete; drag to delete multiple objects.

Draw multiple bonds and set bond properties. Bonds of different types can be selected from the Multiple Bonds tool palette.

Create atom labels and captions.



have multiple options that can be selected from a tool palette.

TOOL

Selection

ICON



EXPLANATION

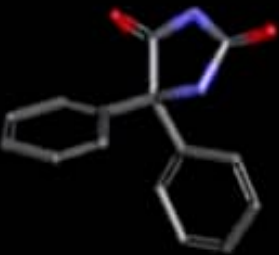
Lasso. Select objects by dragging around them.
Marquee. Select objects by dragging diagonally across them. Selected objects can be further manipulated using menu commands.

Discovery Studio Client

File Edit View Chemistry Structure Sequence Chart Scripts Tools Window Help

Macromolecules Simulation Receptor-Ligand Interactions Pharmacophores Small Molecules X-ray My Tools

DS Welcome Phenytoin



Structure Index Name Visible Tagged Visibility Locked Clean Energy

Structure	Index	Name	Visible	Tagged	Visibility Locked	Clean Energy
1	1	Phenytoin	☒ Yes	☐ No	☐ No	115.177

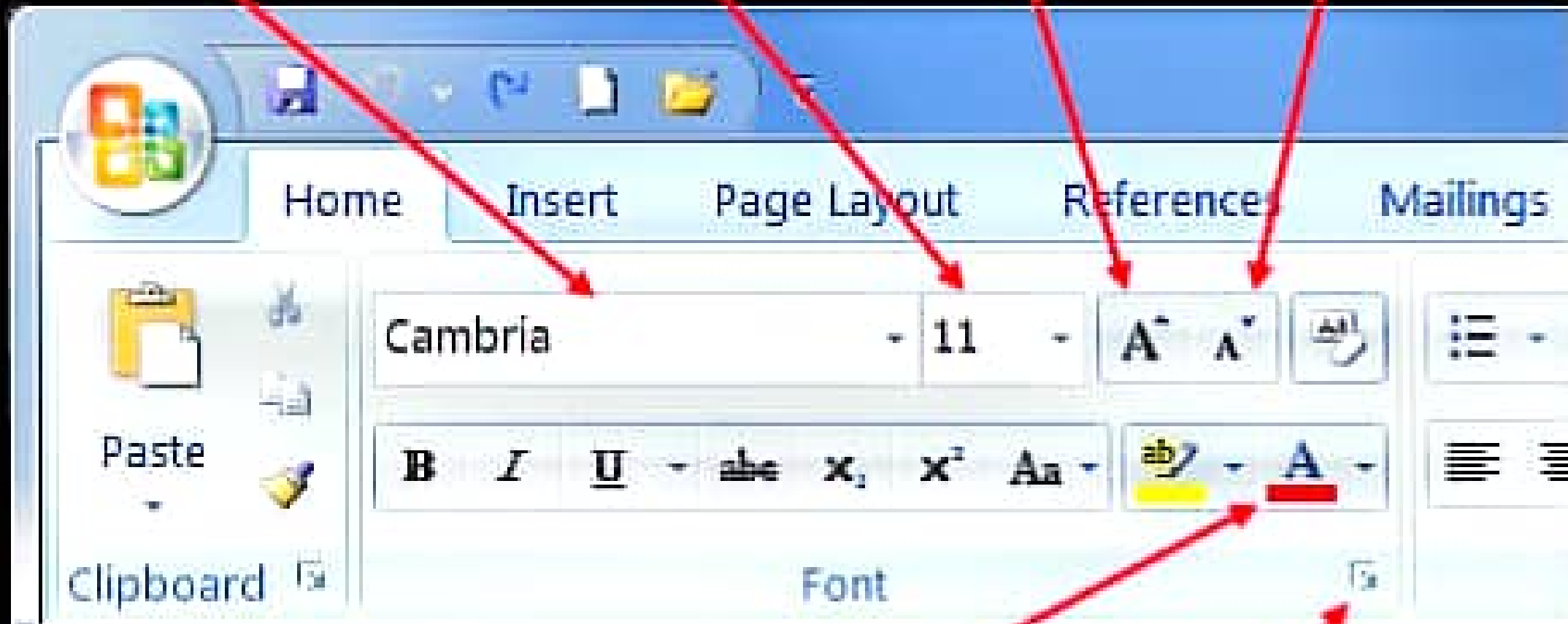
Discovery Studio

Font

Font Size

Grow Font

Shrink Font



Font Colour

Font Dialog Launcher