

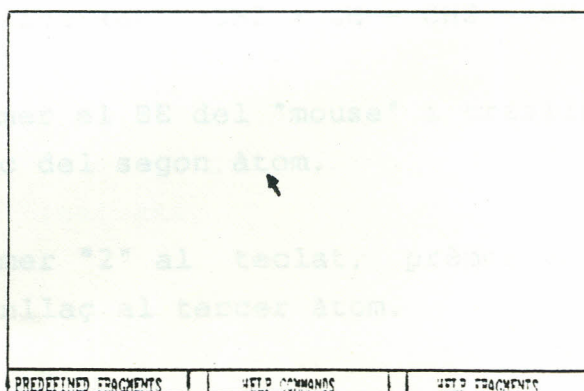
## GUIA DE L'USUARI DE SANDRA

SANDRA és un programa de recerca per estructura química que permet dibuixar gràficament una molècula orgànica i ens informa del volum i pàgines del BEILSTEIN on hauria d'estar citada dita molècula. Això vol dir que és possible que la molècula representada no s'hagi citat mai, però que en cas d'haver-ho estat, la referència es trobaria a les pàgines indicades.

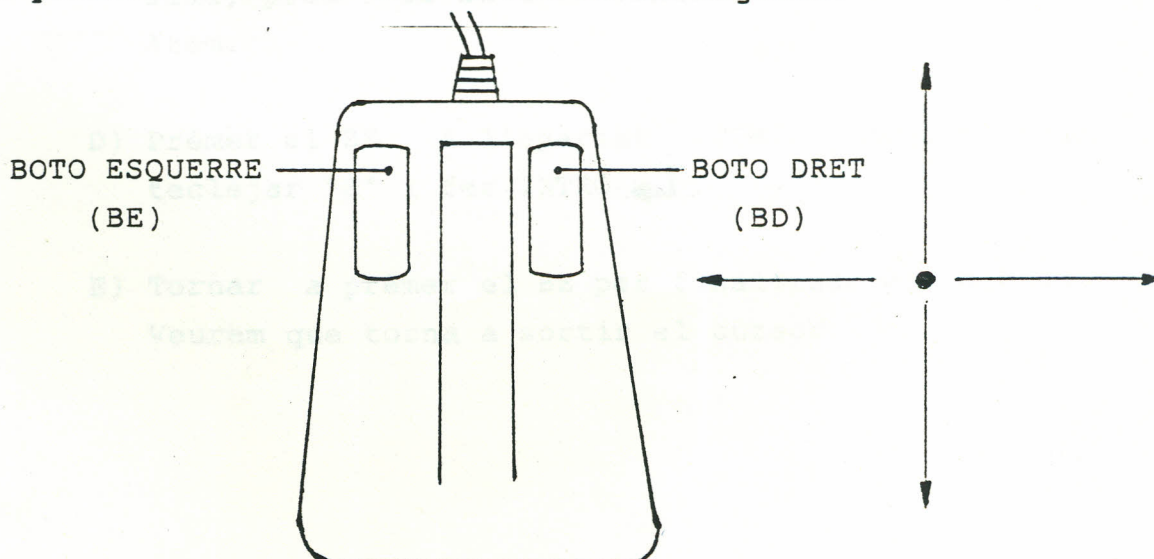
Per començar a dibuixar:

\* A partir de la pantalla de presentació del programa premeu qualsevol tecla.

\* Apareix una pantalla en blanc amb una fletxa (cursor) que es pot moure de lloc amb el "mouse".



\* La posició correcta del "mouse" és la següent:



\* Per definir un àtom a la pantalla s'ha de prémer el BE del "mouse" una vegada. Veurem que desapareix el cursor i si movem el "mouse" apareix una línia que representa l'enllaç amb el següent àtom. En aquest moment si desitgem que l'enllaç sigui doble o triple haurem de prémer "2" o "3" al teclat respectivament. Per fixar el següent àtom seguirem la mateixa operació.

La longitud que li donem a l'enllaç no té cap importància. Per defecte, cada àtom que definim serà un carboni amb els seus hidrògens corresponents, els quals mai surten representats.

\* Si volem canviar un carboni per un altre àtom, a l'apartat ATOMIC SYMBOL hem de teclejar el símbol químic de l'àtom desitjat i fer INTRO ↵.

seguint amb l'exemple anterior:

1            2            3            4

A) Traslladar el cursor al segon àtom

EXM.: Volem dibuixar  $\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{OH}$

A) Prémer el BE del "mouse" i traslladar l'enllaç al lloc del segon àtom.

per finalitzar.

B) Prémer "2" al teclat, prémer el BE i traslladar l'enllaç al tercer àtom.

des que volem esboçar un enllaç

C) Prémer "1" al teclat per tornar a l'enllaç senzill, prémer el BE i traslladar l'enllaç al quart àtom.

D) Prémer el BE. A l'apartat ATOMIC SYMBOL s'ha de teclejar "O" i fer INTRO ↵.

E) Tornar a prémer el BE per finalitzar el dibuix. Veurem que torna a sortir el cursor.

Si l'estructura que hem dibuixat és la correcta hem de teclejar "Q" al teclat perquè ens surti la referència del BEILSTEIN.

Si ens adonem que ens hem deixat alguna ramificació, podem traslladar el cursor al lloc desitjat i continuar dibuixant:

1 2 3 4

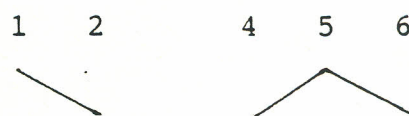
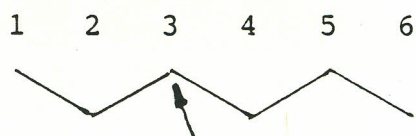
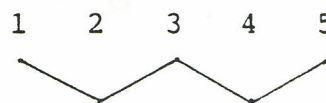
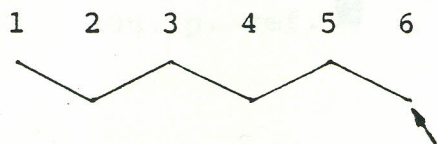
EXM.: Volem dibuixar  $\text{CH}_2 = \text{C} - \text{CH}_2 - \text{OH}$   
 $\quad \quad \quad \quad \quad \quad |$   
 $\quad \quad \quad \quad \quad \quad 5 \text{ CH}_3$

Seguint amb l'exemple anterior:

A) Traslladar el cursor al segon àtom i prémer el BE.

B) Traçar l'enllaç corresponent fins al cinquè àtom, prémer el BE per definir-lo i tornar a prémer el BE per finalitzar.

\* En cas que volguem esborrar un enllaç, col·locarem el cursor a un dels àtoms que intervingui a l'enllaç i apretarem el BD dues vegades. Hem de tenir en compte que se'ns esborraran tots els enllaços que conflueixin en el punt on hem posat la fletxa.

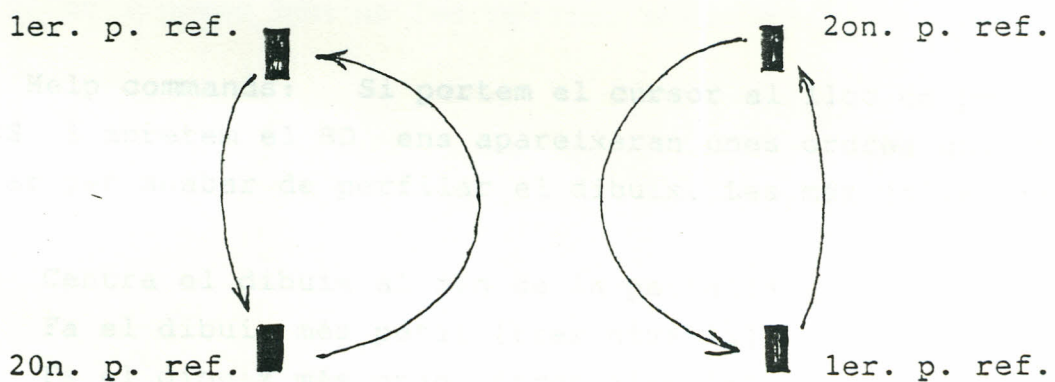


\* Estructures predefinides: Existeixen moltes estructures ja definides dins el programa (vegeu taula annexa).

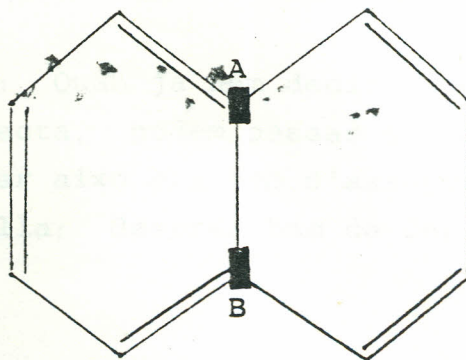
Per dibuixar qualsevol d'aquestes estructures hem de fer:

- A) A la pantalla hem de tenir el cursor lliure.
- B) Prèmer al teclat la funció predefinida de l'estructura escollida.
- C) L'ordinador ens demanarà quin és el primer punt de referència. Per fixar-lo hem de traslladar el cursor al lloc desitjat i prèmer el BE.
- D) Hem de fer el mateix amb el segon punt de referència.

En cas que l'estructura escollida sigui cíclica, el dibuix seguirà el sentit antihorari.



EXM.: Volem dibuixar



A) Dibuem el primer anell benzènic (F1).

B) Per dibuixar el segon anell tornem a premer F1 i el primer punt de referència l'hem de posar al punt A i el segon al punt B. Si ho féssim al revés, el segon anell sortiria dibuixat a sobre del primer i no el veuríem.

A la taula annexa on hi ha totes les estructures predefinides s'assenyala per cadascuna d'elles els dos punts de referència que reconeix l'ordinador (números 1 i 2).

\* Help commands: Si portem el cursor al lloc on posa HELP COMMANDS i apretem el BD ens apareixeran unes ordres que podem utilitzar per acabar de perfilar el dibuix. Les més útils són:

- C Centra el dibuix al mig de la pantalla
- D Fa el dibuix més petit (tres nivells)
- E Fa el dibuix més gran (tres nivells)
- M Mou el dibuix a qualsevol lloc de la pantalla (per això demana dos punts de referència)
- N Numera tots els àtoms de la molècula (excepte els H)
- S Posa els símbols químics a cada àtom (excepte els H)
- 1,2 i 3 Posa enllaços simples, dobles o triples.

\* Per trobar les referències: Quan ja hem decidit que l'estructura representada és la correcta, podem passar a demanar la referència del BEILSTEIN. Per fer això ens hem d'assegurar que tenim el cursor lliure a la pantalla; després hem de fer "Q" al teclat.

A la part superior esquerra se'ns indica la pàgina del volum H del BEILSTEIN (sèrie bàsica) on s'hauria de trobar la molècula representada, a més del seu número sistemàtic.

A la part inferior esquerra s'indiquen volums i subvolums de les ampliacions del BEILSTEIN (E I, E II, ...) on es cita la molècula. S'ha de tenir en compte que els volums de les ampliacions corresponen als de l'edició H.

A la part superior dreta se'ns pregunta si volem dibuixar una altra molècula o no.

\* En cas afirmatiu hem de prémer "Y" al teclat. Llavors veiem que es manté l'estructura que teniem representada; això és per si hem de treballar sempre amb el mateix tipus de configuració molecular i només hem de fer petites modificacions.

Però pot ser que desitgem representar una molècula totalment diferent, per tant haurem de fer desaparèixer l'estructura que tenim en pantalla. Per fer això hem de prémer "K" al teclat (instrucció que serveix per esborrar la pantalla). Com a mesura de seguretat l'ordinador ens pregunta si n'estem segurs, i si és així, hem de prémer "Y".

\* En cas negatiu hem de prémer "N" i s'esborrarà la pantalla. Per tornar a començar s'ha de teclejar SANDRA i fer INTRO .

# Predefined Fragments

1: first reference point  
2: second reference point

	F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8	F9	F10
	6-Ring (unsat.) 	n-Ring (unsat.) 	6-Ring (sat.) 	n-Ring (sat.) 	C-COOH 	C-CN 	C-SO3H 	O-SO3H 	O-SiMe3 	O-PO3H2 
<b>Ctrl (Strg)</b>	C-nitro 	C-diazo 	C-azido 	benzoyl 	benzyl 	trityl 	t-butoxy-carbonyl (Boc) 	benzyloxy-carbonyl (Z, Cbo) 	toluol-4-sulfonyl 	trifluor-acetyl 
<b>Alt</b>	Gly 	L-Ala 	L-Val 	L-Leu 	L-Asp 	L-Glu 	L-Pro 	L-Phe 	L-His 	L-Try 

## Help commands

A	Alternate Bond Order	M	Move Structure	Y	Dotted Line
B	Backup User-defined Fragment	N	Number the Atoms	Z	Wavy Line
C	Center Structure	P	Paint Screen after Erasing	1	Single Bond (Default)
D	Decrease Size of Structure on Screen	Q	Quit (end of structure input)	2	Double Bond
E	Enlarge Size of Structure on Screen	S	Symbols on Atoms	3	Triple Bond
F	Fischer cross	W	Without C-Symbols or Numbers		
K	Kill Structure without Backup	X	Bold Line		

