

Лекція 2

Тема. Спеціальний редактор хімічних формул ChemDrawPro.

Мета. Оволодіти навичками набору і редагування хімічних формул в редакторі ChemDrawPro. Навчити студентів використовувати сучасні інформаційні системи.

Вступ.

Редактор Word вважається одним із основних інструментів для ведення текстової документації. Він має широкі можливості з використання різних шрифтів, символів, внесення в документ графічних об'єктів, таблиць, баз даних тощо. Однак серйозні труднощі можуть виникнути при необхідності включити в документ велике число формул хімічних сполук чи рівнянь реакцій. І тут на допомогу приходять спеціальні редактори хімічних формул.

Розвиток сучасної комп'ютерної техніки дав можливість створення електронних мультимедійних підручників, енциклопедій та інших спеціалізованих програмних продуктів. В програмному забезпеченні такого типу поєднуються звичні текстові документи, фотографії, звуко- та відеозаписи реального часу, різноманітні інтерактивні пошукові та експертні системи. Електронні мультимедійні підручники, енциклопедії – принципово новий крок в розвитку як хімічної освіти, так і практичних аспектів.

План.

1. Загальна характеристика.
2. Запуск програми та її налаштування.
3. Вивчення меню програми.
4. Вивчення інструментів (Tools).
5. Вправи для оволодіння основними навичками роботи.

Зміст лекції.

1. Загальна характеристика.

ChemDrawPro від фірми Sembrige soft є одним з найбільш зручних та ефективних редакторів хімічних структур. Програма має розвинуті можливості для створення, редагування та оформлення хімічних формул, схем, рівнянь реакцій практично будь-якої складності. Зокрема, є можливість малювати проекції Фішера та Ньюмана, а також проводити аналіз зображених формул з метою виявлення помилок.

Призначений для користувача інтерфейс ChemDraw представляє три основні прийоми створення структурних формул:

а) безпосереднє зображення при активуванні кнопки "Bond" для зображення хімічного зв'язку. Для вписування знаку хімічного елементу кінець зв'язку виділяють подвійним клацанням лівої кнопки мишки;

б) генерація за назвою ІЮПАК. Активують функцію "Convert Name to Structure";

в) використання формул заготовок (кнопки "Templates", "Acyclic Chain", "Rings").

При активній кнопці "Check Structure" програма перевіряє виділену молекулярну структуру на наявність помилок, а при активній кнопці "Clean Structure" – на відповідність параметрів молекули звичайним довжинам зв'язків і валентних кутів з автоматичним їх виправленням.

ChemOffice містить велику базу даних за номенклатурою органічних сполук, що дозволяє легко вирішувати як прямі завдання: «назвати сполуку» (кнопка "Convert Structure to Name"), так і зворотні: «написати структурну формулу за назвою» "Convert Name to Structure". Тут важливо знайти розумний компроміс у використанні традиційних і нових форм навчання.

2. Запуск програми та її налаштування.

Запустити програму ChemDrawPro можна командою головного меню: "ПУСК – Програми – CS Chem Office – CS ChemDraw Pro".

Далі потрібно відкрити вікно налаштувань програми командою меню "File-Preferences"; для пункту "Units" встановити значення "cm", а для "Tolerance" – "5 pixels". Після цього слід натиснути кнопку "OK" для підтвердження.

Для візуальної зручності можна включити відображення лінійок в документі та координатної сітки. Для цього в меню "Tools" потрібно поставити відмітку навпроти пункту "Show Rulers". Для відображення координатної сітки можна поставити відмітку навпроти пункту "Show Crosshair" меню "Tools".

3. Вивчення меню програми.

Головне меню програми включає такі пункти: File, Edit, Tools, Object, Structure, Text, Curves, Color, CLogP, Online, Estimate, Window, Help (рис. 2.1).

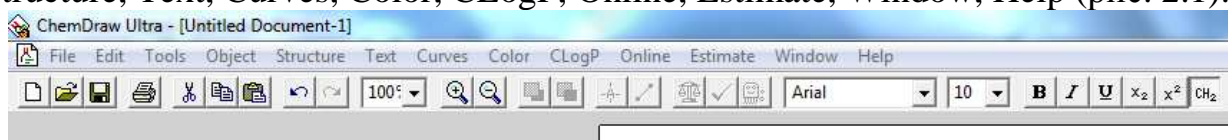


Рис. 2.1. Вигляд головного меню редактора ChemDraw.

File (Файл) дає можливість створювати документи ChemDraw, налаштовувати їх та зберігати (рис. 2.2).

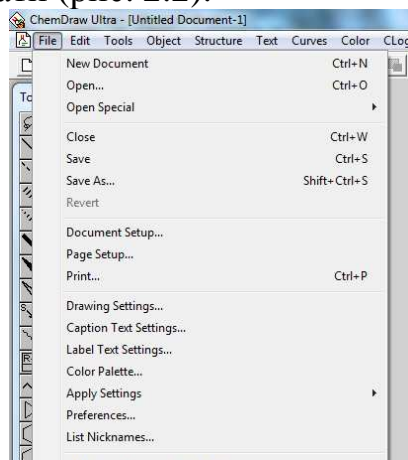


Рис. 2.2. Підпункт меню Файл редактора ChemDraw.

Edit (Правка) дає можливість працювати з фрагментами та структурами в цілому (вирізати, копіювати, вставляти, виділяти тощо) (рис. 2.3).

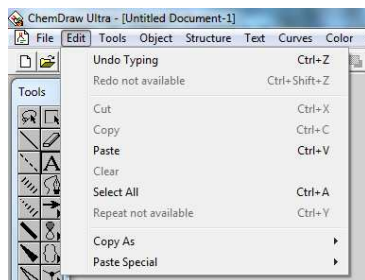


Рис. 2.3. Підпункт меню Правка редактора ChemDraw.

Tools (Інструменти) – цей пункт меню допомагає налаштувати робочий стіл для роботи в ChemDraw відповідними інструментами та встановити деякі параметри зображення формул (фіксовані довжини зв'язків, фіксовані кути тощо) (рис. 2.4).

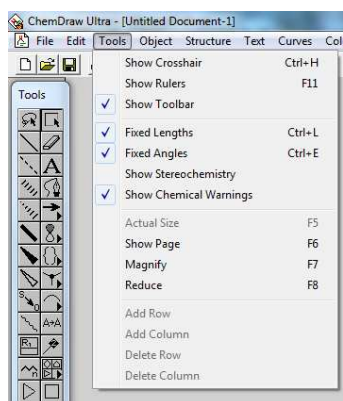


Рис. 2.4. Підпункт меню Інструменти редактора ChemDraw.

Object (Об'єкт). За допомогою цього пункту меню користувач має можливість зручно для себе розмітити об'єкти на сторінці, повернути їх, відобразити тощо (рис. 2.5).

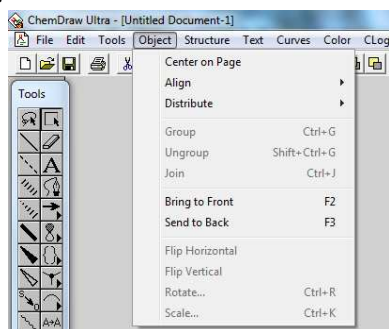


Рис. 2.5. Підпункт меню Об'єкт редактора ChemDraw.

Structure (Структура). Цей пункт меню дає можливість користувачу працювати зі структурою сполуки, варіювати її вигляд, аналізувати її, показувати властивості, виправляти помилки, а також за назвою сполуки генерувати її структуру "Convert Name to Structure" та навпаки "Convert Structure to Name" (назви потрібно вказувати англійською мовою) (рис. 2.6).

Text (Текст). Цей пункт меню дає можливість формувати текстові фрагменти (змінювати вигляд та тип шрифту, вирівнювати текст тощо) (рис. 2.7).

Curves (Криві). Опції цього пункту активуються після зображення кривих у документі. Користувач може змінювати їх вигляд та форму (рис. 2.8).

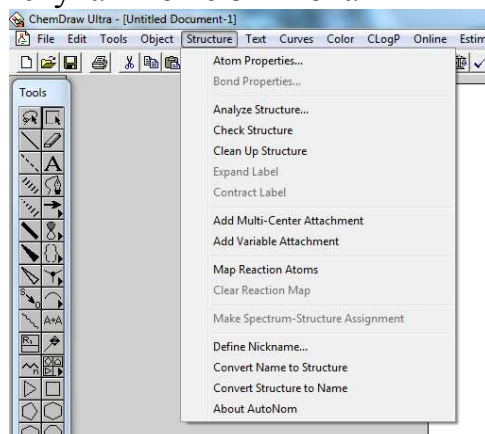


Рис. 2.6. Підпункт меню Структура редактора ChemDraw.



Рис. 2.7. Підпункт меню Текст редактора ChemDraw.

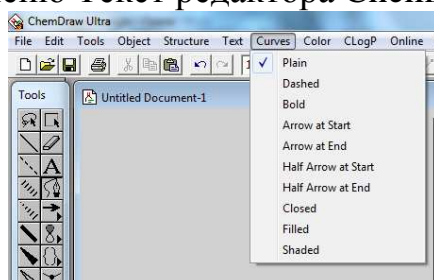


Рис. 2.8. Підпункт меню Криві редактора ChemDraw.

Color (Колір) – цей пункт меню дає можливість змінювати колір фону та шрифту.

CLogP – дає можливість розрахувати параметри CLogP (Фактор ліофільності) та CMR (Ефект колосального магнітоопору (КМО) (CMR в англійському варіанті).

Online – дає можливість знайти інформацію на відповідних сайтах в Інтернеті.

Window (Вікно) – дає можливість працювати з декількома вікнами одночасно, зручно розміщувати їх на робочому столі.

Help (Допомога) – містить загальні відомості та пояснення різних прийомів роботи з редактором.

4. Вивчення інструментів (Tools).

Розширене меню **Tools** із зображенням кожного інструмента міститься в лівій частині робочого стола у вигляді двох стовпців. У разі вибору почергово кожного інструмента можна зобразити відповідний елемент на сторінці (рис. 2.9).


	Lasso	Marquee
	Solid Bond	Eraser
	Dashed Bond	Text
	Hashed Bond	Pen
	Hashed Wedged Bond	Arrow
	Bold Bond	Orbital
	Wedged Bond	Drawing Elements
	Hollow Wedged Bond	Chemical Symbols
	Dative Bond	Arcs
	Wavy Bond	Reaction Atom-Atom Map
	Alternative Group	Attachment Point
	Acyclic Chain	Templates
	Rings	

Рис. 2.9. Інструменти (Tools) редактора ChemDraw та їх назви.

5. Вправи для оволодіння основними навичками роботи.

1. Зображення схеми реакції.

1. Намалюйте схему реакції хлорування метану (загальну та окремими стадіями).

2. Створіть новий документ. Намалюйте схему реакції нітрування пропану. Отриманий документ збережіть, вказавши в назві файлу власне прізвище з поміткою 1.

2. Зображення формул циклічних хімічних сполук.

1. Намалюйте хімічну формулу бензену; трансформуйте її в толуен→п-крезол.

2. Намалюйте хімічну формулу бензену; трансформуйте її в анілін→п-фенілендіамін.

3. Створіть новий документ. Намалюйте хімічну формулу нафталену, трансформуйте його в β-нафтол. Отриманий документ збережіть, вказавши в назві файлу власне прізвище з поміткою 2.

3. Створення структурних формул за назвою.

1. Генерація за назвою ІЮПАК. Наберіть текст **propane (пропан)**, виділіть його та згенеруйте структуру цієї сполуки, активуючи функцію "Convert Name to Structure".

2. При активній кнопці "Check Structure" перевірте виділену молекулярну структуру на наявність помилок.

3. Зробіть зміни у довжинах зв'язків у структурі пропану. Виділіть сполуку. Кнопкою "Clean Structure" перевірте структуру на відповідність

параметрів молекули звичайним довжинам зв'язків і валентних кутів з автоматичним їх виправленням.

4. За допомогою активування кнопки "Bond" для зображення хімічного зв'язку зобразіть структуру етану. Назвіть сполуку за допомогою кнопка "Convert Structure to Name" у меню Structure.

4. Вивчення властивостей сполук.

1. Зобразіть за допомогою шаблонів (Templates) амінокислоту α -аланін.

2. Проаналізуйте її будову (Structure \rightarrow Analyze Structure \rightarrow Analysis)

(рис. 2.10).

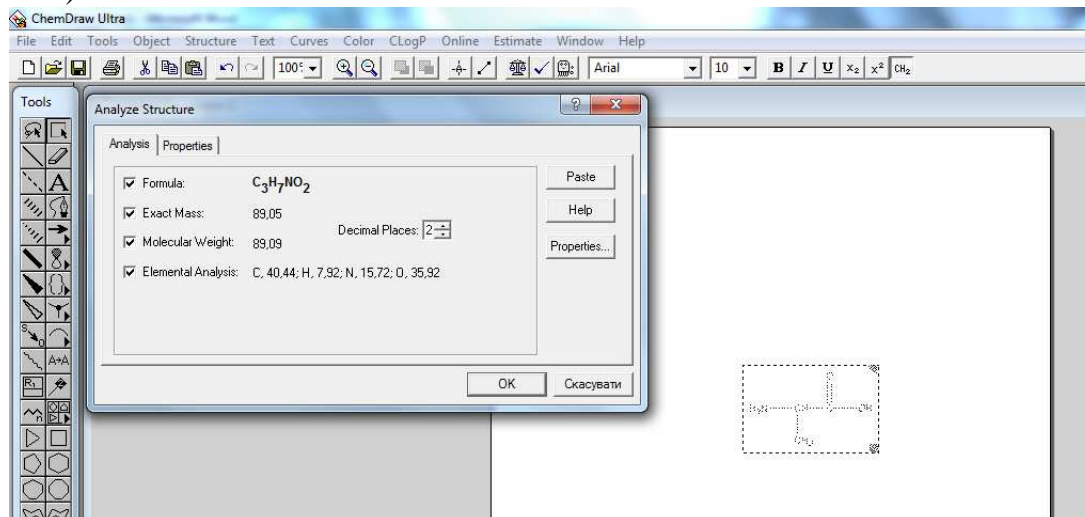


Рис. 2.10. Аналіз будови α -аланіну.

3. Розгляньте властивості цієї речовини (Structure \rightarrow Analyze Structure \rightarrow Properties) (рис. 2.11).

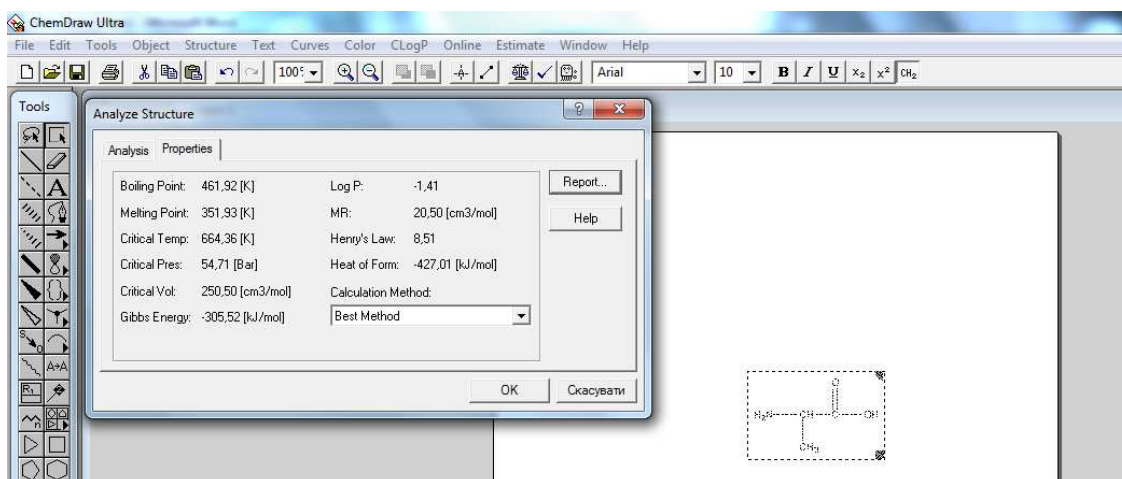


Рис. 2.11. Аналіз властивостей α -аланіну.

4. Натисніть кнопку Report та збережіть інформацію про цю речовину у тестовому редакторі «Блокнот» (в деяких версіях ОС AkelPad) (рис. 2.12).

5. Збережіть документ. Зробіть висновки.

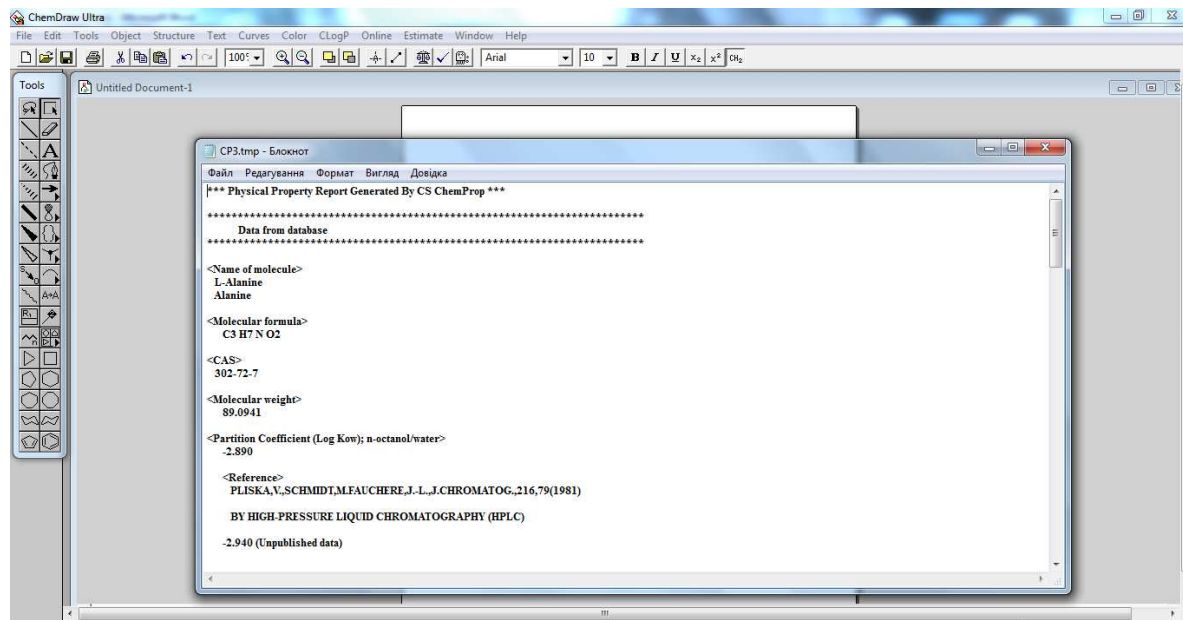


Рис. 2.12. Збереження інформації у тестовому редакторі «Блокнот».

Висновки.

Досвід використання інформаційних технологій в процесі викладання хімічних дисциплін студентам природничих спеціальностей свідчить про появу нових можливостей, які не досягаються іншими традиційними засобами.

При вивченні хімії комп'ютер слід використовувати, враховуючи особливості цієї науки. Виділяють три основні напрями його застосування: моделювання хімічних процесів і явищ; контроль і обробка даних хімічного експерименту; програмна підтримка курсу хімічних дисциплін.

ChemDrawPro від фірми Cambridge soft є одним з найбільш зручних та ефективних редакторів хімічних структур. Програма має розвинуті можливості для створення, редагування та оформлення хімічних формул, схем, рівнянь реакцій практично будь-якої складності. Зокрема, є можливість малювати проекції Фішера та Ньюмана, а також проводити аналіз зображених формул з метою виявлення помилок.

Література.

1. Ахметов М.А., Денисова О.Ф. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №1. -С. 35.
2. Литвак М.М., Литвак Н.В. //Химия: методика преподавания. - 2005. - №4. - С. 47.
3. Программа по биоорганической химии. - М.: ГОУ ВУНМЦ МЗ РФ, 2000, - 18 с.; МО РФ, 2004.
4. Рощупкин С.И. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №1. - С. 46.
5. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. // Компьютерная химия. - М.: СОЛОН-Пресс, 2005. - 536 с.
6. Тюкавкина Н.А., Бауков Ю.И. //Биоорганическая химия: Учебник для вузов. - М.: Дрофа, 2004. - 544 с.: ил.
7. Шабаршин В.М. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №2. - С. 33.
8. ChemOffice (Ultra Version 9.0) - пакет программных средств фирмы CambridgeSoft Corporation, 2005.

Запитання для самоперевірки.

1. Охарактеризуйте можливості програми **ChemDrawPro**.
2. Вкажіть три основні прийоми створення структурних формул.
3. Як запустити програму ChemDrawPro?
4. Як включити відображення лінійок та координатної сітки в документі?
5. Які пункти включає головне меню програми? Дайте їм коротку характеристику.