

Редактор Chemsketch, дополнительные возможности.

Задача.

Продолжаем изучать возможности редактора **ChemSketch**. Кроме создания структур "с нуля", в нем есть возможность использования достаточно объемной библиотеки готовых формул. Предоставляет редактор и некоторые возможности получения информации по веществам. Оформление документов **ChemSketch** можно существенно дополнить графическими объектами, надписями. С помощью специальной программы созданные в **ChemSketch** структуры можно представить в виде наглядных моделей.

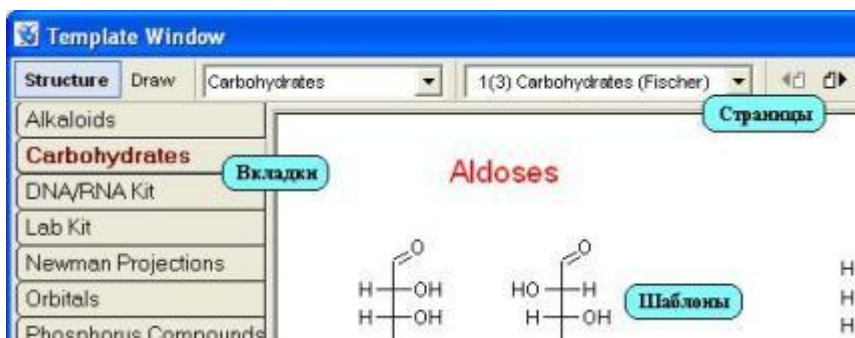
Библиотека шаблонов

Создание сложных формул даже в специализированном редакторе требует большой затраты времени. Для облегчения этой работы химический редактор **ChemSketch** содержит библиотеку готовых шаблонов наиболее сложных структурных формул, а также других рисунков, которые могут понадобиться в работе химика.



Для открытия окна библиотеки используется раздел меню **Templates** (Шаблоны), клавиша **F5**, или специальная кнопка на основной панели инструментов.

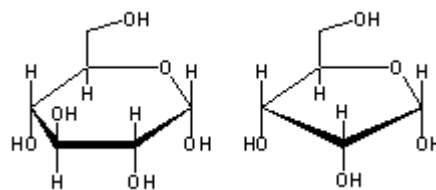
Окно Шаблонов содержит ряд вкладок, каждая из которых может состоять из нескольких страниц шаблонов. Шаблоны активной страницы представлены в основной части окна.



Чтобы использовать любой из шаблонов, достаточно щелкнуть по нему мышкой. При этом окно Шаблонов закроется, и курсор с прикрепленным шаблоном перейдет в рабочую область редактора. Там скопированную структуру можно вставить щелчком мышки столько раз, сколько это необходимо. Взятые из библиотеки

шаблонов формулы можно далее редактировать обычными приемами.

Откройте Окно Шаблонов, просмотрите содержание вкладок и страниц. Найдите формулу глюкозы на вкладке Carbohydrates (Углеводы) и перенесите ее на рабочий лист. Различные варианты формулы этого же вещества (под названием α-D-глюкопираноза) найдите на вкладке Sugars: alpha-D-Pyr (Сахара: α-D-пиранозы). Скопируйте эти формулы на рабочий лист редактора. Еще одну копию формулы глюкозы отредактируйте, превратив в формулу фуранозы (5-членный цикл). Создайте формулу дисахарида, содержащего фрагменты пиранозы и фуранозы



Характеристики молекул

ChemSketch позволяет определять и выводить на лист редактора надписи содержащие основные характеристики молекул. Так в строке состояния показывается молекулярная формула соединения и его молекулярная масса (FW - Formula Weight) Если формул на листе много, показываются некие суммарные характеристики, и нужно выделить определенную структуру.

С помощью меню **Tools-Calculate** (Инструменты-Рассчитать) можно получить различные характеристики соединения и нажатием кнопки **Copy to Editor** (Копировать в редактор) перенести их на лист.

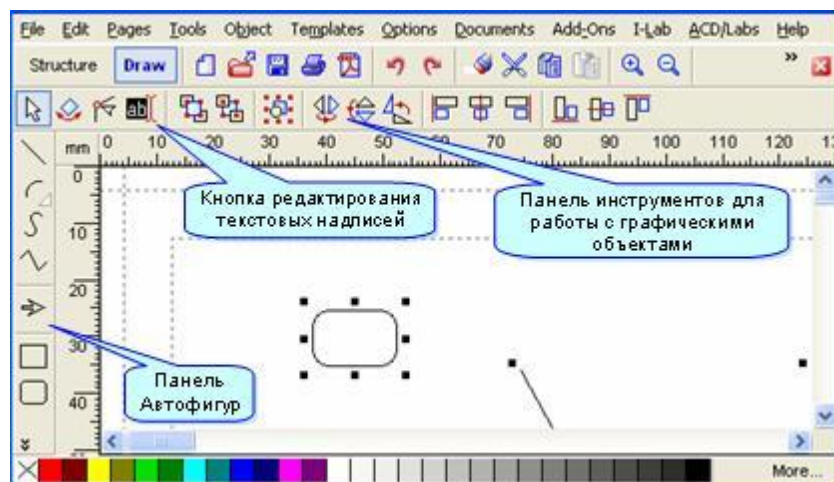
Используя команду меню **Tools-Generate Name from Structure** (Инструменты-создать название структуры) можно получить название соединения по международной номенклатуре (увы, на английском языке...). Разумеется, возможности программы ограничены, и для очень сложных структур не вся информация будет доступна.

Полученные надписи можно мышкой передвигать на любое удобное место страницы.

В дополнение к имеющимся на странице 1 формулам, создайте еще 2-3 формулы более простых соединений (углеводородов, их производных). Выведите названия и доступные характеристики соединений, представленных на странице 1, разместите их подходящим образом.

Режим Draw (Рисование)


Этот режим позволяет работать в редакторе с графическими и текстовыми объектами. Для перехода в режим

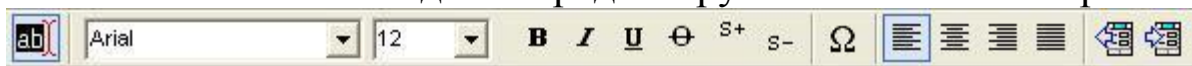


Draw (Рисование) надо нажать соответствующую кнопку на основной панели инструментов. При этом появляются новые панели инструментов: для создания автофигур и надписей и для работы с уже имеющимися графическими объектами.

Перейдите в указанный режим, рассмотрите новые панели инструментов, определите назначение основных кнопок на них.


Редактирование и создание надписей

Для изменения существующей надписи ее надо выделить,  и на панели инструментов нажать кнопку **Редактирование текста**. При этом панель инструментов снова изменится, там появятся необходимые поля и кнопки, а в рамке надписи появится курсор. После этого текст надписи редактируется обычными приемами.



Дополнительные возможности форматирования надписей возможны при двойном щелчке мышкой по надписи, а также через меню **Tools-Update Object Style Panel**. При этом открывается панель для установки различных параметров надписи. Параметры отдельных фрагментов текста можно изменить, вызвав **Tools-Font Panel** (Шрифт) и **Tools-Paragraph Panel** (Абзац).

ACD/ChemSketch использует два типа надписей: с обычным форматируемым текстом и **Artistic Text**. Если надпись создана с атрибутом **Artistic text**, то размер шрифта будет автоматически изменяться при изменении размеров надписи.

Для создания новых надписей на панели Автофигуры  выберите инструмент **Text** (Надпись). Маленький уголок на кнопке позволяет сделать выбор: обычная надпись или в стиле **Artistic text**. Затем щелкните мышкой в нужном месте страницы и можете вводить текст. Вертикальные границы надписи можно раздвигать мышкой, а горизонтальные раздвигаются автоматически, по мере появления новых строчек текста.

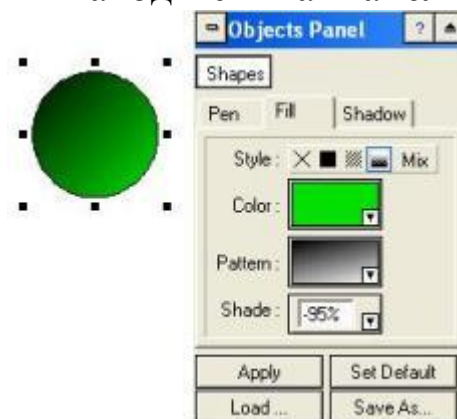
Отредактируйте надписи на странице 1, переведя их на русский язык. Создайте новую надпись, введите в нее свою фамилию, имя, отчество, задайте формат (16 пунктов, курсив, цвет Красный). Переместите эту надпись в верхнюю часть страницы. Сохраните файл.

Создание графических объектов

Для создания графических объектов могут быть использованы различные инструменты с панели Автофигуры, аналогичные инструментам WORD'a. К созданным объектам можно применять различные операции: вращение, изменение порядка, выравнивание,

группировка и др. Кнопки этих операций находятся на панели инструментов.

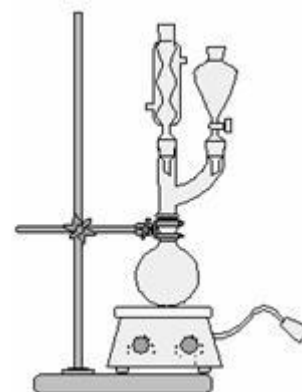
Для форматирования созданных объектов можно использовать меню **Tools-Update Object Style Panel** или двойной щелчок мышки по любому графическому объекту. При этом открывается панель форматирования объекта (Objects Panel), позволяющую настроить различные параметры линий (Pen) и заливки (Fill), тени (Shadow) автофигур.



При работе с этими панелями нужно установить требуемые параметры, затем нажать кнопку **Apply** (Применить). Панели форматирования можно передвигать в удобное место, сворачивать.

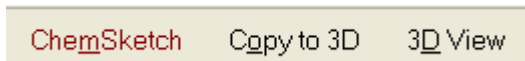
При создании графических изображений удобно использовать шаблоны рисунков, доступ к которым можно получить, используя кнопку **Open Template Window** (Открыть окно шаблонов), или соответствующую команду меню **Templates**. Работа с шаблонами рисунков аналогична работе с шаблонами химических структур.

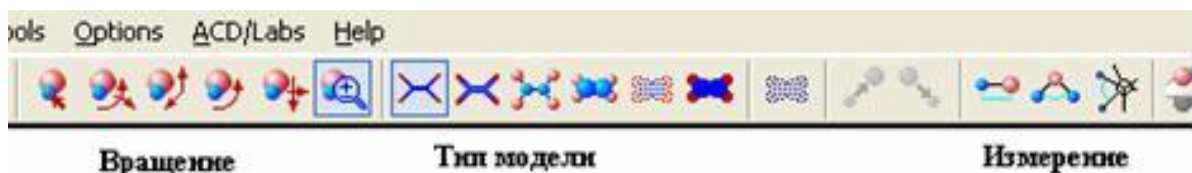
На странице 2 создайте рисунки нескольких линий и автофигур. Задайте им различные параметры (цвет, толщину линий, характер заливки и т.п. Опробуйте операции вращения, изменения порядка, выравнивания, группировки. Откройте окно шаблонов, рассмотрите образцы рисунков, представленных на вкладках Figures, Labels, Lab Kit (учтите, что последняя вкладка содержит 7 страниц). На странице 3 создайте, используя шаблоны, рисунок установки для синтеза. Сгруппируйте элементы рисунка.



Компьютерные модели молекул

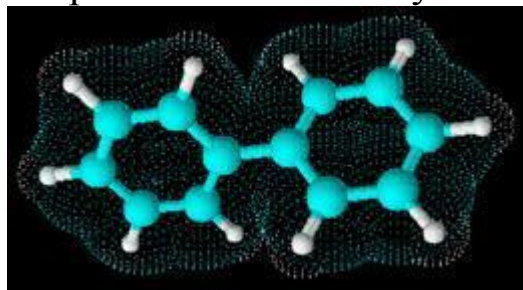
Для создания и исследования трехмерных компьютерных моделей молекул служит вспомогательная программа **3d-Viewer**. Для запуска этой программы из Chemsketch можно использовать команду меню **ACD-Labs - 3D Viewer**. После запуска программы в нижней части окна появляются кнопки **Copy to 3d** и **View 3d**. Для передачи структуры в просмотрщик надо ее выделить и нажать кнопку **Copy to 3d**. При этом модель выделенной молекулы открывается в окне **3d-Viewer**'а. Для работы с созданной моделью доступны большое число операций, осуществить которые можно с помощью меню или панелей инструментов.





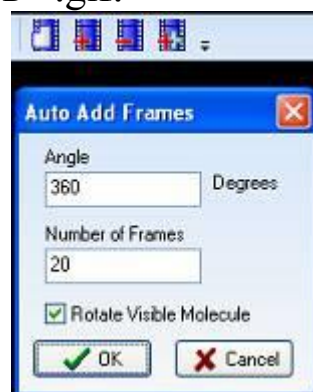
На панели инструментов 3d-Viewer'a есть группы кнопок, позволяющие менять размеры и вращать модель, устанавливать определенный тип модели, проводить измерение длин связей и углов. Специальными кнопками и командами меню можно настроить цвет фона, атомов, размеры. Можно запустить автоматическое вращение модели.

Запустите 3d-Viewer, скопируйте в него одну из структур, опробуйте возможности различные варианты изображения модели. Измерьте длину одной из химических связей, одного из валентных углов, сравните с теоретическими данными. Измените цвета модели так, чтобы она хорошо смотрелась на белом фоне. Сохраните изображение модели в gif-файл.



Компьютерные модели могут быть сохранены в специальном формате (*.s3d). Они могут быть также распечатаны, и сохранены в виде графических файлов. В том числе возможно создание и анимированных файлов *.gif.

Анимированные рисунки - это файлы содержащие несколько изображений, кадров (Frame), последовательность которых показывает перемещение объекта. Для создания таких рисунков в есть несколько команд, наиболее простой из которых является автоматическое создание (Auto Add Frames). Щелчок по этой кнопке открывает окно, где можно задать угол поворота модели и число кадров, на которое будет разбито это движение. После нажатия кнопки Ok, происходит запись анимации в память компьютера. Для ее сохранения в формате gif, используется команда меню File-Save As, с выбором формата файла Animated GIF images. Надо учитывать, что чем больше размеры модели и чем больше кадров задано при создании анимации, тем больше будет размер файла.

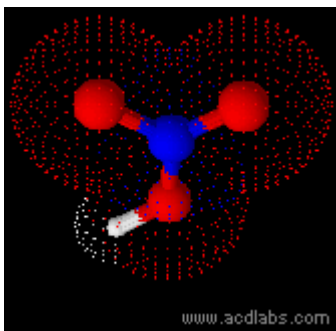


В любой момент модель может быть возвращена в окно Chems sketch (кнопка Copy to Chems sketch), где возможно ее дальнейшее редактирование.

*Сохраните модель в формате *.s3d под именем Фамилия-Название вещества.s3d. Сохраните изображение модели в gif-файл (Фамилия-Название вещества.gif). Создайте анимацию и сохраните ее в анимированный файл (Фамилия-Анимация-Название вещества.gif).*

Использование объектов Chems sketch.

Страницы документов Chems sketch могут быть сохранены и в нужный момент распечатаны (меню **File-Print**). Эти документы могут быть экспортированы, преобразованы в файлы других форматов (меню **File - Export**), например в файлы рисунков *.gif.



Отдельные объекты со страниц Chems sketch могут быть обычными приемами скопированы в буфер и вставлены в документы других программ, в презентации или в документы WORD'a. Двойной щелчок на таких объектах в Word'овском документе запустит Chems sketch и откроет структуру для редактирования (разумеется, если Chems sketch установлен на данном компьютере). Аналогичные возможности существуют и в программе 3d-Viewer.

Редактор Chems sketch может не только сохранять, но и открывать для редактирования файлы других химических редакторов. Конечно, если страница сохранена как рисунок, дальнейшее ее редактирование будет возможно только как графического объекта.

Сохраните документ Chems sketch в основном (.sk2) и в других форматах. Учтите, что в некоторых случаях, сохраняется только текущая страница. Откройте новый документ WORD'a. Скопируйте в него рисунок установки и несколько формул, созданных в Chems sketch. Сохраните файлы в рабочей папке. Опробуйте возможность открытия созданных файлов в Chems sketch. Подготовьте архив созданных файлов для отчета.*