

## 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

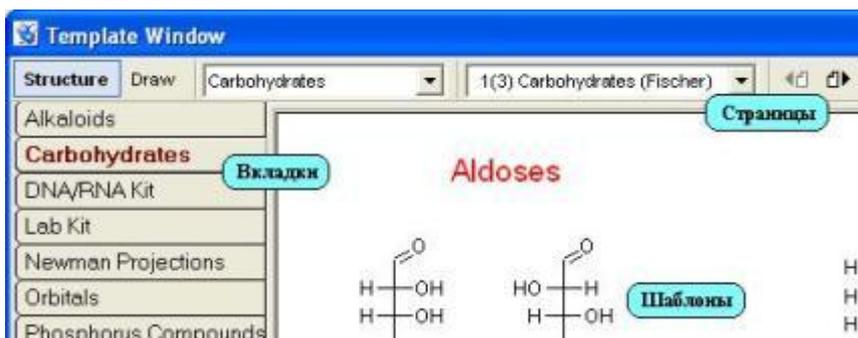
Создание сложных формул даже в специализированном редакторе требует большой затраты времени. Для облегчения этой работы химический редактор **ChemSketch** содержит библиотеку готовых шаблонов наиболее сложных структурных формул, а также других рисунков, которые могут понадобиться в работе химика.



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

Окно

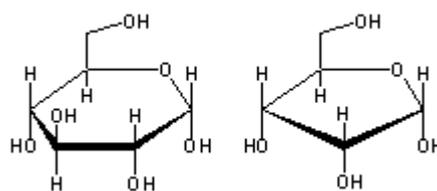
Шаблонов содержит ряд вкладок, каждая из которых может состоять из нескольких страниц шаблонов. Шаблоны активной страницы представлены в основной части окна.



Чтобы использовать любой из шаблонов, достаточно щелкнуть по нему мышкой. При этом окно Шаблонов закрывается, 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  $\alpha$ -D-глюкопираноза) найдите на вкладке Sugars:  $\alpha$ -D-Pyr (Сахара:  $\alpha$ -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.

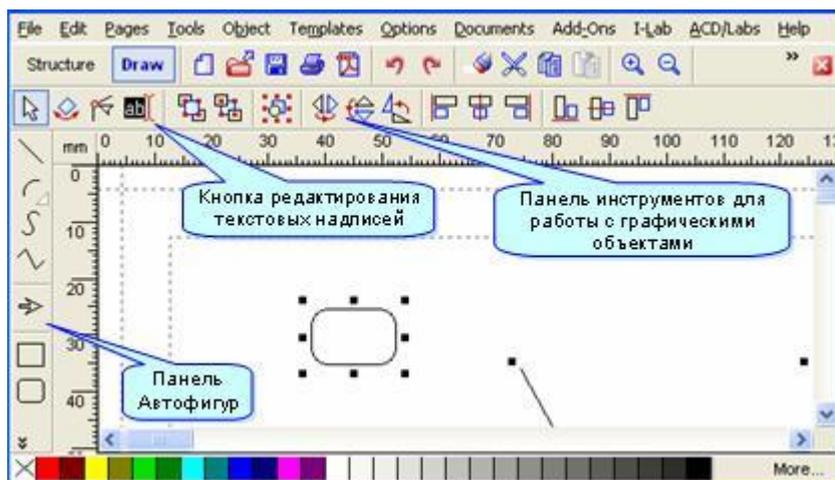
Полученные надписи можно мышкой передвигать на любое удобное место страницы.

*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

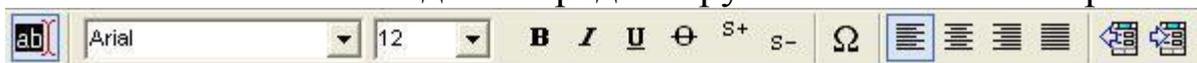


Draw (Рисование) надо нажать соответствующую кнопку на основной панели инструментов. При этом появляются новые панели инструментов: для создания автофигур и надписей и для работы с уже имеющимися графическими объектами.

*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 форматированным 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.

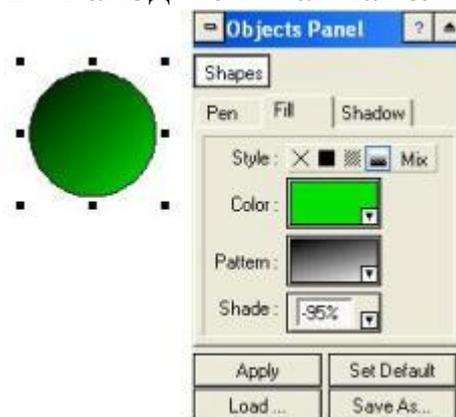
*Отредактируйте надписи на странице 1, переведя их на русский язык. Создайте новую надпись, введите в нее свою фамилию, имя, отчество, задайте формат (16 пунктов, курсив, цвет Красный). Переместите эту надпись в верхнюю часть страницы. Сохраните файл.*

## 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.

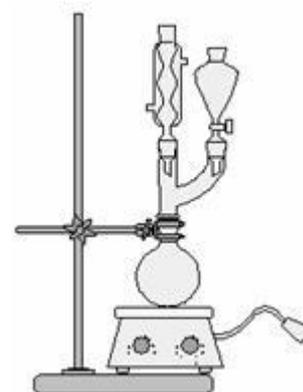
Для форматирования созданных объектов можно использовать меню **Tools-Update Object Style Panel** или двойной щелчок мышки по любому графическому объекту. При этом открывается панель форматирования объекта (Objects Panel), позволяющую настроить различные параметры линий (Pen) и заливки (Fill), тени (Shadow)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

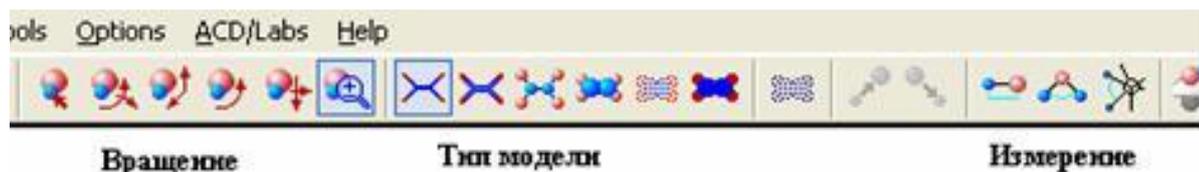
*На странице 2 создайте рисунки нескольких линий и автофигур. Задайте им различные параметры (цвет, толщину линий, характер заливки и т.п. Попробуйте операции вращения, изменения порядка, выравнивания, группировки. Откройте окно шаблонов, рассмотрите образцы рисунков, представленных на вкладках Figures, 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

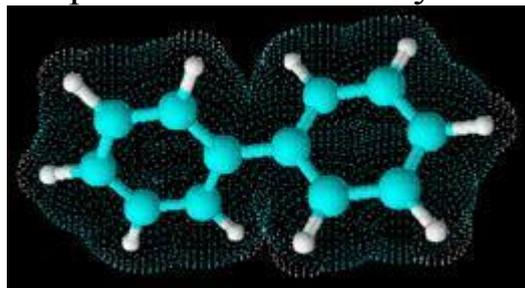
Для создания и исследования трехмерных компьютерных моделей молекул служит вспомогательная программа **3d-Viewer**. Для запуска этой программы из Chemsketch можно использовать команду меню **ACD-Labs - 3D Viewer**. После запуска программы в нижней части окна появляются кнопки **Copy to 3d** и **View 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.





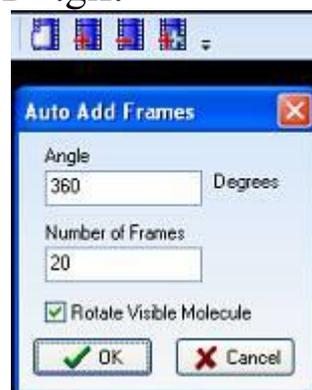
На панели инструментов 3d-Viewer'a есть группы кнопок, позволяющие менять размеры и вращать модель, устанавливать определенный тип модели, проводить измерение длин связей и углов. Специальными кнопками и командами меню можно настроить цвет фона, атомов, размеры. Можно запустить автоматическое вращение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

*Запустите 3d-Viewer, скопируйте в него одну из структур, попробуйте 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.

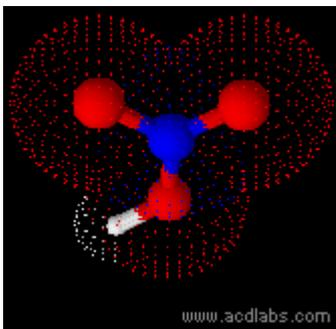


В любой момент модель может быть возвращена в окно Chems sketch (кнопка Copy to Chems sketch), где возможно ее дальнейшее редактирование.

*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.*