

Univerzita Karlova v Praze
Přírodovědecká fakulta
Katedra učitelství a didaktiky chemie

Zhodnocení a porovnání některých programů pro kreslení chemických struktur a grafiky

Olga Kučerová



Bakalářská práce
Praha, 2007

Vedoucí práce: RNDr. Petr Šmejkal, Ph.D.

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracovala samostatně, pod vedením školitele RNDr. Petra Šmejkal, Ph.D., a že jsem všechny použité prameny řádně citovala.

Jsem si vědoma toho, že případné využití výsledků získaných v této práci, mimo Univerzitu Karlovu v Praze, je možné pouze po písemném souhlasu této univerzity.

V Praze dne *8.6. 2007*

..... *Mucronová Olga*

Podpis

Obsah

1. Úvod.....	4
2. Cíle práce.....	8
3. Recenzované programy.....	9
4. Zhodnocení programů.....	10
4.1 ACD/ChemSketch.....	10
4.2 BKchem.....	24
4.3 MDL ISIS/Draw.....	29
4.4 ChemWeb.....	34
5. Přehled a popis vybraných funkcí.....	39
5.1 ACD/ChemSketch.....	39
5.2 BKchem.....	52
5.3 MDL ISIS/Draw.....	56
5.4 ChemWeb.....	60
6. Srovnání nejdůležitějších funkcí jednotlivých programů.....	64
7. Slovníček.....	65
8. Závěr.....	66
9. Použité zdroje.....	67

1. Úvod

V dnešní době je k dispozici značné množství programů využitelných při výuce chemie jak na základní, střední, tak i na vysoké škole. Počítačový trh nabízí tzv. výukové programy, které musí studentovi předat informace a následně provedou kontrolu úrovně získaných vědomostí [1]. Hodnocením některých výukových programů se například zabývá ve své bakalářské práci Eva Nývltová [2]. Jako příklad výukového programu lze uvést např. multimediální výukovou počítačovou hru Chemicus firmy Heureka-Klett. Tato hra je prezentována jako adventura, což znamená herní žánr založený na příběhové linii a logickém uvažování hráče. Předmětem samotného hraní je řešení různých úkolů, logických hádanek nebo puzzlů. Chemická laboratoř 1, 2 firmy LANGMaster a YDP Interactive Publishing je typický výukový program, který částečně nahrazuje výklad látky ve škole. Učivo je zde rozděleno do několika témat a v rámci každého do jednotlivých kapitol, např. látky a jejich přeměna, molekuly a roztoky. Všechny tyto výukové programy se snaží zábavnou formou učinit výuku chemie atraktivnější, neboť je výukový text doplněn řadou obrázků a animací.

Další neméně důležitou skupinou programů vhodných k výuce chemie jsou tzv. chemické kreslicí programy. Takový chemický kreslicí program je zaměřen na kreslení takových grafických objektů, které souvisí s chemií, tedy např. molekul, laboratorních aparatur, reakčních schémat, reakčních diagramů, orbitalů, přičemž jeho uživatelské rozhraní, menu a způsob ovládání jsou optimalizovány tak, aby kreslení zmíněných objektů bylo co nejjednodušší a nejefektivnější. Lze je využít např. při psaní vědeckých prací, při vytváření písemných prací a nebo také pro přípravu podkladů na výuku chemie.

Nejnámějšími programy jsou zejména program ChemSketch, ISIS/Draw a ChemWeb. Na druhé straně mezi méně známé a také méně propracované patří programy KnowItAll, Chemtool, MarvinSketch a BKchem. Zmíněných programů se týká i řada publikací. Pavel Klouda napsal studijní příručku s názvem *Chemie na počítači*, která je podle něj vhodná pro studenty středních škol a dalších, kteří píšou chemické vzorce a kreslí aparatury. V knize jsou popsány základní kroky práce v programu ChemSketch [3]. Některé chemické kreslicí programy jsou využívány i na několika základních školách. Základní škola Jihlava, Kollárrova 30 nabízí ve svém školicím středisku kurzy práce s programy ChemSketch, ISIS/Draw a ChemWin [4]. Školicí středisko ZŠ Opava, Boženy Němcové 2 vyučuje kurz *Modelování v aplikaci ChemSketch*, vedený Rostislavem Salamonem, který sestává ze dvou čtyřhodinových cvičení a jeho cílem je rozvíjet kompetence učitelů chemie v oblasti tvorby

vzorců a modelů molekul v aplikaci ChemSketch a tím upevňovat již dříve získané ICT dovednosti a jejich aplikaci do výuky chemie [5]. Hana Cídllová ve svém článku *Využití programu ChemSketch ve výuce* píše o jeho charakteristice a využitelnosti ve výuce na základní škole, přičemž oceňuje fakt, že si s ním lze snadno připravit velmi bohaté podklady pro výuku [6]. Kreslicí programy zdomácněly i na některých středních školách. Zdeněk Janků se ve svém příspěvku *Program ACD-Labs ChemSketch při výuce chemie na gymnáziu* věnuje programu ChemSketch verze 5.0, kde popisuje, co v něm lze nakreslit, jaké má funkce a sám ho vyučuje na Gymnáziu Nymburk ve třetím a čtvrtém ročníku. Největší přínos vidí v optimalizaci prostorového uspořádání sloučeniny a doporučuje ho používat ve výuce i při tvorbě písemných prací, návodů na laboratorní cvičení atd. [7]. Kreslicí programy používá ve výuce také Tomáš Feltl z gymnázia v Novém Městě na Moravě, přičemž své zkušenosti a další poznatky popisuje ve svém článku *Výuka chemie nejen s interaktivní tabulí-užitečné programy pro zpestření výuky a podpoření samostudia žáků*. Píše, že studenti si rádi hrají s různými aplikacemi a zejména poukazuje na program ChemSketch a ISIS/Draw, které jsou vhodné pro každého chemika a uvádí příklady jejich využití [8]. Nicméně, své největší uplatnění chemické kreslicí programy nacházejí až na vysokých školách zaměřených na chemii, což je možná trochu škoda. Na Přírodovědecké fakultě UK v Praze, Katedře učitelství a didaktiky chemie se snaží na tento stav reagovat a proto zajišťují výuku předmětu *Počítače a internet v chemii*, který je zaměřený zejména na program ChemSketch a práci s ním [9]. Student se s ním naučí efektivně pracovat a používat ho ať už např. ve svých vědeckých pracích, protokolech a nebo v budoucnosti, kdy již bude sám učitelem. Na téže katedře je pořádána také řada kurzů a seminářů zaměřených na chemické kreslicí programy pro stávající středoškolské učitele chemie. O zmíněných kurzech podrobně pojednává příspěvek autorů Petra Šmejkal a Václava Martínka *Rozšířená výuka ICT pro studenty učitelských oborů s chemií na PřF UK*, ve kterém uvádí jejich obsah a popisují programy ChemSketch a ISIS/Draw, přičemž upozorňují na důležitost praktických cvičení [10]. V dalším článku Petr Šmejkal, Hana Čtrnáctová, Václav Martínek a Eva Urválková poukazují na programy ChemSketch a ISIS/Draw a uvádějí, že ChemSketch je nejlépe vybavený, lehce ovladatelný a intuitivní, tudíž ho doporučují i přes některá omezení [11]. Petr Šmejkal, Václav Martínek a Martin Bojkovský využili ChemSketch, mimo jiné, pro tvorbu výukového materiálu zaměřeného na termodynamiku, kde ho použili ke tvorbě schémat, modelů, částí aparatur a některých obrázků [12]. Karel Nesměrák ze stejné fakulty ve své přednášce *Informace o analytické chemii* zmiňuje program ISIS/Draw [13]. Podobný kurz jako je kurz *Počítače a internet v chemii* je vyučován také na Katedře organické chemie téže fakulty s názvem

Chemická informatika [14]. Hana Čtrnáctová, Pavlína Nová a Lenka Poláková ve svém článku *Přechodné prvky v učivu chemie-modelování struktury prvků a sloučenin* píše o programu ChemSketch, který lze využít k modelování struktur, přičemž model velmi usnadňuje vyučovací postupy [15]. Na Vysoké škole chemicko technologické se vyučuje předmět *Seminář chemického modelování*, který by měl studenty seznámit se základy molekulového modelování a s tím spojením predikce základních pozorovatelných veličin, které se strukturou molekul souvisí. Seminář se týká pouze programů ChemSketch a ISIS/Draw [16]. Univerzita Palackého v Olomouci zase nabízí cvičení zaměřené na práci s programem ChemSketch [17]. Ivan Raich z VŠCHT vytvořil PowerPointovou prezentaci s názvem *Strukturní databáze MDL*, ve které jsou shrnuty základní informace o firmě MDL, tvůrce programu ISIS/Draw. Autor uvádí, jaké produkty firma na svých stránkách nabízí a krátce charakterizuje program ISIS/Draw, přičemž jej nazývá inteligentním kreslákem [18]. Kreslicí programy jako takové jsou náplní několika monografií, referátů a odborných článků. Pavel Janderka napsal referát *Molekulové modelování a teoretická chemie na PC*, kde poukazuje na existenci kreslicích programů (ChemSketch, ISIS/Draw) pro vytváření chemických struktur [19]. Pavel Drašar zase ve svém článku *Markushovy strukturní vzorce* uvádí programy ChemSketch a ISIS/Draw jako pomocníky při kreslení vzorců sloučenin, u nichž Markushovy strukturní vzorce určoval. Dle jeho zkušenosti, ISIS/Draw umí nakreslit pouze vzorce, ale ChemSketch verze 5.0 umí nakreslit vzorce i Markushovy struktury, avšak nerozezná je v plné míře [20]. Ten samý autor a spoluautoři ve svém příspěvku *Grafické vyjádření chiralit chemických sloučenin* poukazují na chemický software, zejména na program ChemSketch, který umí vyčíst ze strukturního vzorce konfiguraci R/S a E/Z a dále na program ISIS/Draw, jež to ovšem neumí [21]. Josef Hlavatý a Jan Macháček napsali článek *Vizualizační programy ve výuce středoškolské chemie*, kde upozorňují na velké výhody počítačového modelu sloučenin s tím, že vizualizační programy jsou původně určeny pro vědecký výzkum, ale mohou najít i uplatnění v rámci výuky chemie při prezentaci nové látky, při samostatné práci studentů či dokonce při práci v laboratořích. Podotýkají, že největšími překážkami v rozšíření těchto programů není didaktická technika, ale sami učitelé. Ve své práci mimo jiné stručně charakterizují program ISIS/Draw verze 2.1.4, ChemSketch verze 4.04 a ChemWeb verze 3.1.4 [22]. Martin Slavík, Jan Grégr, Ivan Stibor ve svém článku *Vizualizační freeware pro výuku chemie* zmiňují špatnou prostorovou představivost současných žáků a proto doporučují program ChemSketch k výuce anorganické chemie i organické chemie, k doplnění přednášek i k samostatné práci studentů. Dále uvádějí přehled nabízených software firmy ACD Labs a popisují přehled možností programu ChemSketch verze 5.0 [23]. Ve svém příspěvku *Náměty*

pro využití molekulární grafiky ve výuce chemie uvádějí téměř titíž autoři možnost využití programu ChemSketch a 3D Viewer k výuce chemie na VŠ [24]. Ve svém dalším příspěvku *Využití ICT v učebně chemie* zmiňují programy pro modelování a vizualizaci, zejména ChemSketch verze 8.0, který díky jednoduchosti ovládání s úspěchem používají při výuce chemie handicapovaných žáků (dyslexie, dysgrafie) na ZŠ v Liberci [25]. Stejní autoři napsali také článek *Freeware pro výuku chemie*, kde porovnávají programy ChemSketch a ISIS/Draw z hlediska využití na základní, střední a vysoké škole a u ChemSketch verze 8.0 uvádějí jeho novinky oproti předchozím verzím a hodnotí ho jako jedničku na poli freewarových kreslicích programů [26]. Podobný kolektiv autorů ve svém článku *Rozvoj prostorové představivosti v chemii* uvádí vhodný software pro učitele i studenty, přičemž opět upozorňují zejména na program ChemSketch a na jeho některé funkce [27]. Vladimír Nápravník ve svém článku *ICT ve výuce chemie na katedře chemie FPE ZČU v Plzni* vede seminář, kde vyučuje ChemSketch a ISIS/Draw a poukazuje na to, že každý učitel chemie se dříve nebo později dostane do situace, kdy bude potřebovat nakreslit chemický vzorec, chemickou rovnici, schématický diagram nebo aparaturu pro laboratorní práci, přičemž použití nějakého chemického kreslicího softwaru se stane nezbytné [28]. Osobní zkušenosti s programem ChemSketch a ISIS/Draw popsali Li, Wan, Shi a Ouyang [29]. Gunda se pokusil porovnat program ISIS/Draw s ChemWindow [30]. Program ISIS/Draw formou recenze zhodnotili Hinchliffe [31], Tamas [32], Gunda [33] a Town [34]. Kreslicí a vizualizační programy, zejména ve svých komerčních verzích, jsou také využívány pro prezentaci vědeckých výsledků v impaktovaných časopisech. Např. ve svých vědeckých pracích program ChemSketch využili k predikci některých vlastností látek Xing, Zhang, Wang a Mi [35], dále Tantishaiyakul, Wongpuwarak [36] a také Spessard [37], Osterberg a Norinder [38]. Masui využil k predikci některých vlastností program ISIS/Draw [39].

2. Cíle práce

Kreslit rukou molekuly, chemické struktury, laboratorní aparatury, chemické reakce, reakční schémata a nejen to je pro většinu těch, kdo nejsou příliš výtvarně nadáni, velmi těžký úkol. Právě v tomto případě je účelné využít chemické kreslicí programy, jelikož se naše práce poté stane efektivnější a námi vytvořené materiály názornější a profesionálněji vypadající. Přestože jsou chemické kreslicí a vizualizační programy doporučovány pro výuku, nejsou mezi učiteli chemie na střední škole příliš rozšířeny. Důvodem může být strach z používání počítačové techniky, neznalost jejich ovládání a možností atd. Ačkoli existuje několik příruček a zhodnocení těchto programů, limitujícím faktorem může být jejich délka, relativní nesrozumitelnost a tím pádem nechut' je číst.

Z tohoto důvodu je cílem mé práce zhodnotit několik takovýchto chemických kreslicích programů a vytvořit jakési vodítko pro studenty a především pro učitele chemie na střední škole, kteří si s jeho pomocí mohou vybrat takový program, který bude vyhovovat jejich požadavkům nejen z hlediska přípravy na výuku, ale i pro samotnou výuku a ulehčit jim první kroky. Z tohoto důvodu byly vybrány programy z oblasti freeware, neboť i cena programu je pro učitele rozhodujícím faktorem, zda bude daný program používat či nikoli.

3. Recenzované programy

ChemSketch, 10.0, Advanced Chemistry Development, Kanada, www.acdlabs.com.

BKchem, 0.12.0, Bedřich Košata, Česká republika, <http://bkchem.zirael.org>.

ISIS/Draw, 2.5, MDL, USA, www.mdl.com.

ChemWeb, 3.1.4, Soft Shell International, USA, www.softshell.com.

4. Zhodnocení programů

Vzhledem k tomu, že existují manuály k jednotlivým programům, nemají být charakteristiky vyčerpávajícím materiálem, nýbrž pomůckou pro učitele, kteří se rozhodují k (resp. ve) výběru chemického kreslicího programu.

Čtyři freeware programy jsou zhodnoceny formou recenze obsahující krátký popis programu, upozornění na nejdůležitější funkce a možnosti doplněné číselným hodnocení, včetně uvedení kladů a záporů. Práce rovněž obsahuje srovnávací tabulku, která uvádí zastoupení řady funkcí a vlastností u popisovaných programů. V příloze práce je anglicko český slovník uvádějící nejfrekventovanější výrazy vyskytující se v jednotlivých programech, jež má neznalým anglického jazyka usnadnit první setkání s programem.

4.1 ACD CHEMSKETCH

➤ OBECNÁ CHARAKTERISTIKA:

Program ACD ChemSketch je určený ke kreslení chemických struktur, molekul, reakčních schémat, reakčních diagramů, aparatur a nejen toho. Jako takový je rozdělen do dvou módů. První z nich je Structure mode (strukturní mód, sloužící např. ke kreslení atomů, vazeb, strukturních vzorců, polymerů, reakčních schémat atd.) a druhý Draw mode (kreslicí mód, sloužící ke kreslení složitějších grafických objektů, jako jsou např. reakce, aparatury, reakční diagramy, orbitaly atd.). Každý mód nabízí své specifické funkce, o nichž si povíme dále v textu. Další součástí ChemSketch je ACD/3D Viewer, který umí převést strukturní vzorec látky na její 3D model a dále také ACD/ChemBasic, se kterým lze kromě jiného vytvořit štítky na chemikálie nebo vytvořit 3D nukleovou kyselinu ze zadané vstupní sekvence. Program lze použít pouze v operačním systému MS Windows.

➤ DOSTUPNOST:

ChemSketch je produktem firmy Advanced Chemistry Development, která poskytuje základní verzi programu zdarma na svých domovských stránkách www.acdlabs.com. Program lze stáhnout po registraci, při které je nutno povinně uvést email, jméno, příjmení, heslo, adresa, stát a dále nepovinně titul, telefonní číslo a povolání. Alternativně lze program získat i bez registrace např. z www.slunecnice.cz (nabízí verzi 10.0). ACDlabs nabízí i komerční

verzi, která oproti zdarma dostupné verzi nabízí navíc několik funkcí: generování názvu nakreslené sloučeniny bez omezení, funkce encyklopedie (ACD/Dictionary), která hledá chemické látky pod jejich obchodními triviálními názvy a funkce Search for Structure (prohledává nejružnější soubory bez jejich otevření a zjišťuje zda se v nich vyskytují nakreslené chemické vzorce). Cena komerční verze je pro neakademické a instituční pracovníky 595 USD a pro akademické pracovníky, učitele a instituce 149 USD.

➤ VERZE PROGRAMU:

V současné době jsou k dispozici tři verze programu ChemSketch: 5.0, 8.0 a nejnovější 10.0, přičemž program je zatím v neustálém vývoji. Verze 10.0 nabízí oproti předchozím verzím nové grafické rozhraní, možnost exportu do formátu .pdf, možnost vytvoření animace pohybu molekul ve 3D, možnost ukládání nakreslených struktur ve více formátech, generování struktur z řetězce InChI a kalkulátor reakčních dat. Díky více funkcím a prakticky nezměněným systémovým požadavkům doporučuji používat verzi 10.0. Všechny verze ChemSketch existují pouze v anglickém jazyce, nicméně po přeložení základních slovíček do českého jazyka nebude práce obtížná. Méně zdatným uživatelům může posloužit slovníček na str. 65.

➤ PODPORA PROGRAMU:

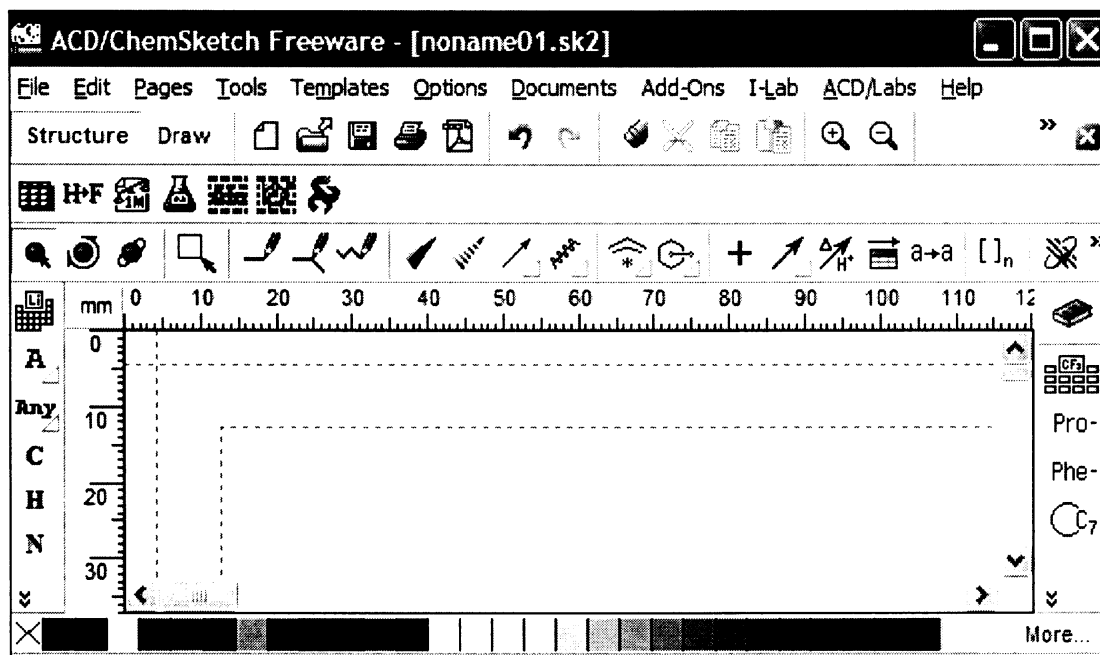
ACD/Labs neposkytuje klasickou technickou podporu, ale poskytuje mnohé dokumenty, které při práci s ChemSketchem pomůžou.

Na stránkách výrobce si lze zdarma bez registrace stáhnout také User's Guide pro verzi programu 5.0, což je uživatelská příručka napsaná v českém jazyce, která popisuje jednotlivé funkce a postup při kreslení různých struktur krok za krokem [40]. Doporučuji ji využít i u verze 10.0, jelikož mnohé funkce se dosud příliš nezměnily. Firma ACD/Labs nabízí dále zdarma a bez registrace ke stažení tzv. reference manual, příručku, která detailně popisuje jednotlivá tlačítka a funkce [41] a tzv. tutorial, učební pomůcku, ve které je popsáno krok za krokem kreslení různých struktur [42]. Reference manual existuje pro verzi 8.0 a 10.0 v anglickém a francouzském jazyce, tutorial pro verzi 8.0 v anglickém jazyce a pro verzi 10.0 v anglickém a českém jazyce. Uživatelská příručka pak existuje jen pro verzi 5.0 v anglickém, španělském, tureckém, čínském a českém jazyce. Rozhodně doporučuji stáhnout tutorial pro verzi 10.0 v českém jazyce, neboť je sepsán přehledně a po grafické i textové stránce je velmi zdařilý. S jeho pomocí se toho hodně naučíte. ACD/Labs nabízí také zdarma ke stažení tzv.

výuková videa (demo movies), kde vidíte jaké nástroje zvolit při kreslení dané struktury a slyšíte, jak při práci postupovat tak, aby byla co nejefektivnější [43]. Namluvení těchto videí je ovšem pouze v anglickém jazyce. K dispozici jsou např. tyto videa: kreslení cyklického peptidu, DNA, reakcí, reakčního diagramu, maltosy, laboratorního nádobí atd.

➤ UŽIVATELSKÁ PŘÍVĚTIVOST:

Při prvním otevření působí ChemSketch 10.0 na začínajícího uživatele jako složitý program, obsahuje mnoho na první pohled nic neříkajících tlačítek, příkazů a menu. Ačkoliv je program velmi motivující svým grafickým rozhraním (obr.1), pro začátečníky nemusí být práce v programu ChemSketch příliš intuitivní (příkladem může být volba možnosti zobrazení uhlíků ve struktuře, kdy se až po dvojitém kliknutí na daný atom zobrazí tabulka Properties, kde je teprve možné pro atom zvolit formu zobrazení). Na druhou stranu program nabízí širokou řadu funkcí. Jestliže se naučíte jednotlivé funkce správně ovládat a používat, budete mít dobrý pocit z výborně odvedené práce.



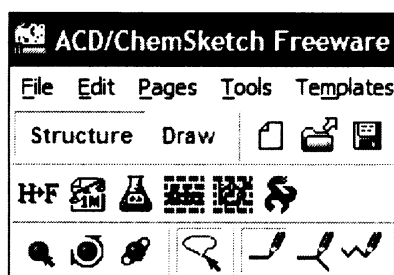
Obr.1: Ukázka grafického rozhraní ChemSketche.

➤ MOŽNOSTI PROGRAMU CHEMSKETCH 10.0:


Jak bylo řečeno, ChemSketch je chemický kreslicí program určený ke kreslení chemických struktur, molekul, reakčních schémat a diagramů, laboratorních aparatur, orbitalů, polymerů a nejen toho. Z praktických důvodů je rozdělen do dvou módů, strukturního (structure) a kreslicího (draw). Jak název napovídá, strukturní mód je určen

primárně ke kreslení chemických struktur, molekul, částic apod. Naopak, kreslicí mód disponuje řadou nástrojů a funkcí využitelných ke kreslení grafických objektů jako jsou např. laboratorní nádoby, aparatury, reakční schémata, diagramy atd. S objekty, které jsou vytvořeny ve strukturním módu pak kreslicí mód pracuje jako s obrázky. Kromě základních nástrojů a funkcí používaných při kreslení nabízí některé důležité a zajímavé funkce, které jsou uvedeny následovně.


STRUKTURNÍ MÓD (STRUCTURE MODE):

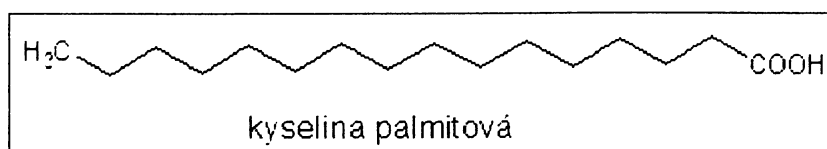


Obr.2: Tlačítko pro práci ve strukturním módu.


Strukturní mód vyvoláme stisknutím tlačítka Structure v levém horním rohu programu (obr.2). Přirozeně lze kreslit chemické vazby, od jednoduchých, přes dvojně, koordinační, stereo vazby až po vazby Markushovy. Ke kreslení atomů se využívá levé lišty se symboly prvků a nebo atom vybereme z periodické tabulky prvků skrývající se pod ikonou . Ke kreslení reakčních schémat jistě využijeme znaménko plus a velké množství reakčních šipek, pro rovnovážné reakce, zpětná, obousměrná atd. Se strukturami lze provádět několik operací jako jsou rotace a překlápění dle zvolené vazby, celého struktury nebo jen podle zvoleného fragmentu. Nakreslené sloučeniny lze následně optimalizovat ve 3D, poté se zobrazí všechny navázané vodíky.

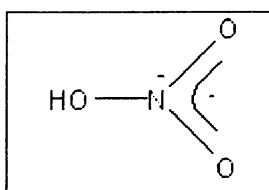
Kromě předchozích běžných funkcí strukturní mód nabízí i několik zajímavých, které mohou být i přes to hojně využívány a jistě je využije chemik vědec pro psaní svých odborných prací, ale mnohé z nich potěší i samotného učitele chemie.

Začínající i pravidelný uživatel programu určitě využije nástroj pro kreslení dlouhých uhlovodíkových řetězců  (např. mastných kyselin a jejích derivátů), který ušetří velké množství úkonů potřebných k nakreslení dlouhého řetězce (obr.3). Např. následující obrázek je nakreslen za několik vteřin.




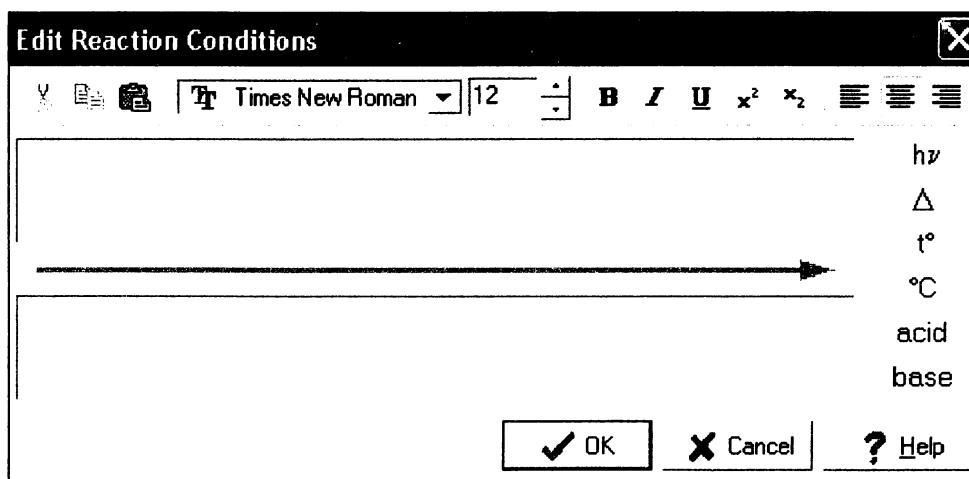
Obr.3: Příklad použití nástroje pro kreslení uhlovodíkových řetězců.

Funkcí, kterou většina jiných chemických kreslicích programů nemá, je nástroj pro kreslení delokalizačních křivek (Delocalization curve) , které reprezentují oblasti výskytu delokalizovaných elektronů v dané molekule (obr.4). Např. při výkladu o elektronové struktuře dusičnanového aniontu se stane tato funkce nepostradatelnou.





Obr.4: Kyselina dusičná a využití delokalizační křivky.

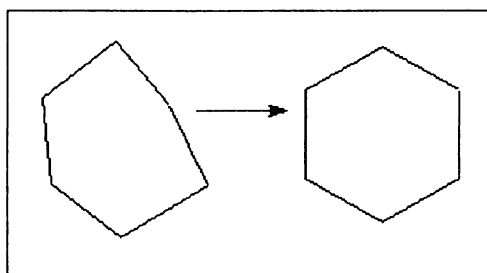
Velmi užitečnou funkcí pro ty, kteří často píšou reakční schémata, je doplnění reakce o reakční podmínky, nástroj Reaction Arrow Labeling , bez kterých nemají např. leckteré např. biochemické či organické reakce smysl. Kliknutím na tuto ikonu se zobrazí okno (obr.5). Text je vepsán do příslušných polí a program jej umístí nad a pod šipku automaticky. S takto umístěným objektem lze ovšem dále pohybovat.




Obr.5: Okno nástroje popisu šipek.


Funkce související také s chemickými reakcemi, je kalkulátor reakčních dat , který vygeneruje procentuální výtěžek produktu reakce vztažený na vybranou výchozí látku. Tuto funkci může využít student, ale i učitel chemie při procvičování výpočtů z chemických reakcí.

Každého uživatele jistě potěší nástroj k vyhlazení struktury , který umí u nakreslené struktury standardizovat všechny vazebné délky a úhly. Tudíž lze nakreslit i nepravidelné vazby, které se poté standardizují. Z graficky nepovedené struktury je tedy možné jediným kliknutím udělat oku lahodící strukturu (obr.6).

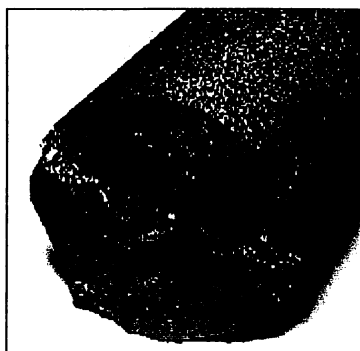


Obr.6: Změna strukturního vzorce po použití nástroje k vyhlazení struktur.

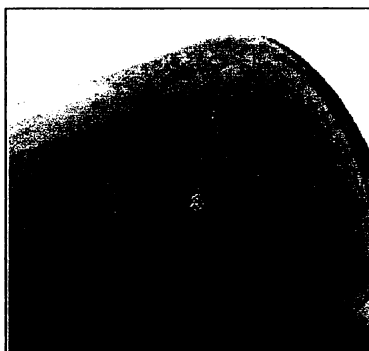
Náročnější uživatel zaměřený na organickou chemii s velkou pravděpodobností ocení nástroj pro generování tautomerních forem dané organické molekuly . Nástroj Tautomery ovšem poskytuje pouze teoretické tautomerní formy, některé navržené tautomerní struktury nemusí být správné, proto je vhodné navrženou tautomerní strukturu porovnat i s vhodnou odbornou literaturou. Nutno brát na vědomí, že jeho použití má určitá omezení (struktura nesmí obsahovat atom kovu, nabité atomy, prvek v netypickém valenčním stavu, koordinační vazby nebo více než 255 atomů).

Nadšená jsem byla z precizně propracované periodické tabulky prvků  (klávesa F7), sloužící primárně k vkládání atomů potřebných při kreslení sloučenin a která je např. také obohacená o mnoho informací o vybraném prvku, např. o jejich fotografie atd. (obr.7,8,9).

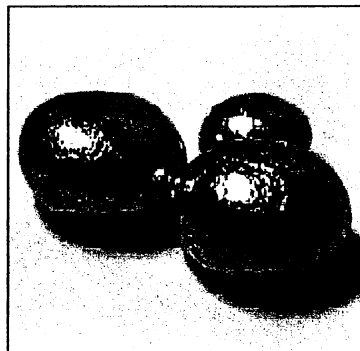
Křemík:



Brom:





Zlato:

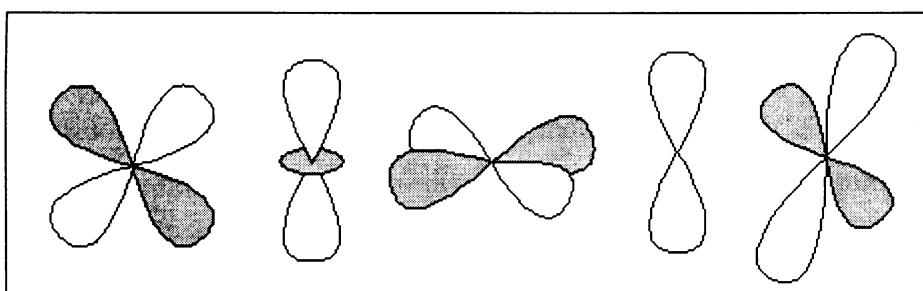


Obr.7: Křemík ve skutečnosti.

Obr.8: Brom ve skutečnosti.

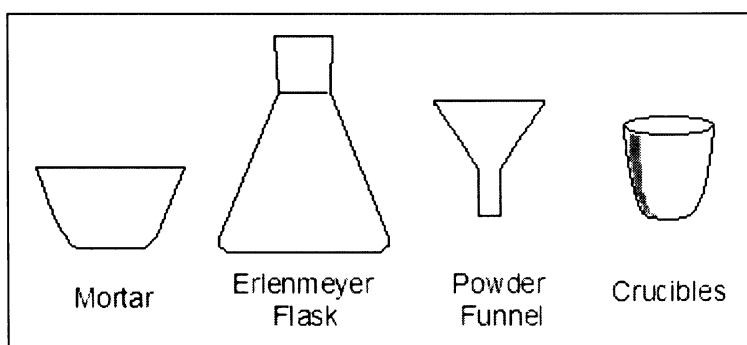
Obr.9: Zlato ve skutečnosti.

Hojně využívanou součástí ChemSketchu bude nesporně velmi bohatá databáze šablon, která je formálně rozdělena na tabulku substituentů  (klávesa F6) a na okno šablon  (klávesa F5). Obě dohromady obsahují snad téměř vše, na co si chemik jen vzpomene. Nakreslené struktury jsou připraveny ihned k použití po vyvolání z databáze a jediným kliknutím je přeneseme na kreslicí plochu. Netřeba zdůrazňovat, že tato možnost ušetří uživateli mnoho práce. Další šablony si lze samostatně vytvořit, popř. i úpravou objektů již existujících a následně je lze do této databáze opět uložit. Učitel chemie na střední škole bude mít radost z oddělení orbitalů, které již nebude muset kreslit ručně (obr.10).



Obr.10: Ukázka různých typů orbitalů uvedených v databázi šablon.

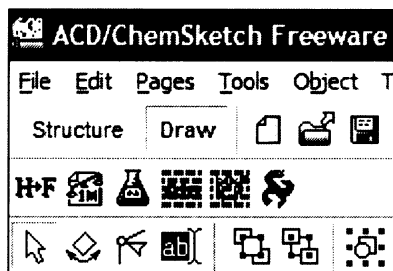
Oddělení laboratorní nádobí slouží prvotně k sestavení aparatur, ale může být využitelné i pro samotnou výuku anglického jazyka, neboť jsou všechny laboratorní nástroje a nádoby pojmenovány v anglickém jazyce (obr.11).



Obr.11: Příkladů laboratorního nádobí.

Pokročilá editace (tabulka vlastností Properties) je nedílnou součástí ChemSketchu, kterou lze vyvolat dvojitým poklikáním na zvolený atom, vazbu nebo celou molekulu. Lze měnit např. délku, tloušťku, typ a barvu vazby, u atomu jeho náboj, mocenství, isotop atd.





KRESLICÍ MÓD:

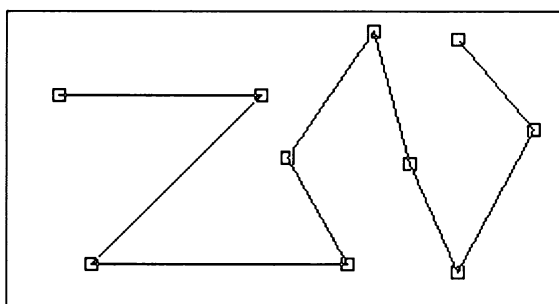


Obr.12: Tlačítko pro práci v kreslicím módu.

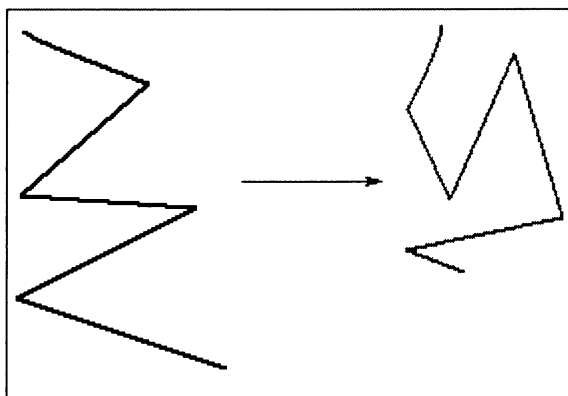
Kreslicí mód vyvoláme stisknutím tlačítka v levém horním rohu programu (obr.12). Hlavní funkcí tohoto módu je tvorba složitějších grafických objektů jako jsou laboratorní aparatury, reakční diagramy, reakční schémata, orbitaly atd. Samozřejmostí je také kreslení geometrických útvarů: čtverec, obdélník, elipsa, zaoblený čtverec a obdélník, ovšem je zde možné kreslit i nepravidelné útvary a to díky nástrojům Polyline a Polygon. Polygon slouží, podobně jako nástroje obdélník, čtverec, elipsa apod., ke kreslení uzavřených útvarů, které je možno i následně barevně vyplnit, narozdíl od otevřených útvarů nakreslených s nástroji Polyline, Arc (oblouk), Curve (křivka), které nelze barevně vyplnit. Součástí kreslicího módu jsou i tři druhy závorek a komiksové bubliny, do kterých lze vložit text a nebo nějakou strukturu. Všechny nakreslené objekty lze různě zarovnávat na kreslicí ploše, rotovat s nimi v rovině a seskupovat je do jednoho celku a opět rozpojovat zpět do individuálních struktur.

Navíc obsahuje kreslicí mód několik zajímavých a často využitelných funkcí, které jistě najdou své použití ať už ve vědecké práci nebo jen k přípravě materiálů k výuce atd.


Velmi zajímavým a důležitým nástrojem kreslicího módu je nástroj pro úpravu uzlových bodů (Edit Nodes) , s jehož pomocí lze měnit tvary křivek, uzavřených i otevřených tvarů a ostatních objektů. Při kliknutí na ikonku se na zvolené křivce zobrazí tzv. uzlové body (obr.13). Ty lze přidávat  i mazat , popřípadě měnit tvar a zakřivení čáry  mezi uzlovými body tažením těchto bodů a souvisejících křivek (obr.14).

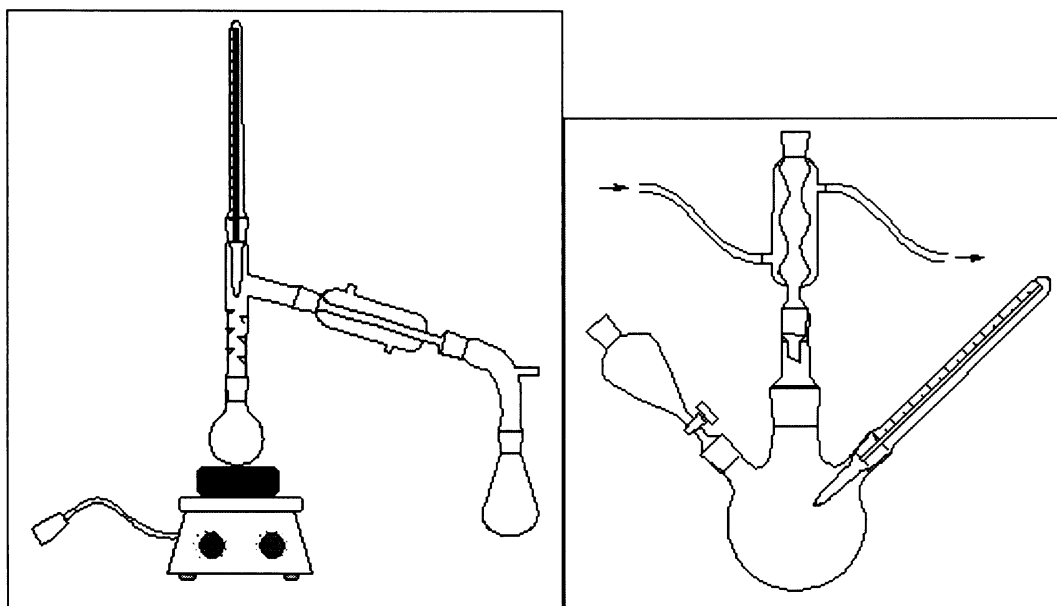


Obr.13: Zobrazení uzlových bodů.




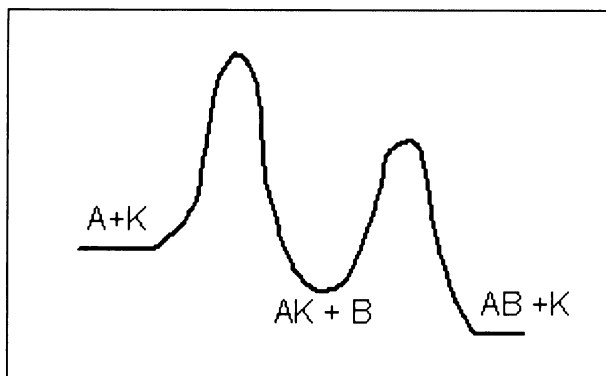
Obr.14: Změna tvaru křivky s pomocí Edit Nodes.

Každý uživatel si v tomto módu snadno a rychle samostatně nakreslí velmi pěkné laboratorní aparatury s pomocí okna šablon , které již hotové aparatury obsahuje (obr.15).

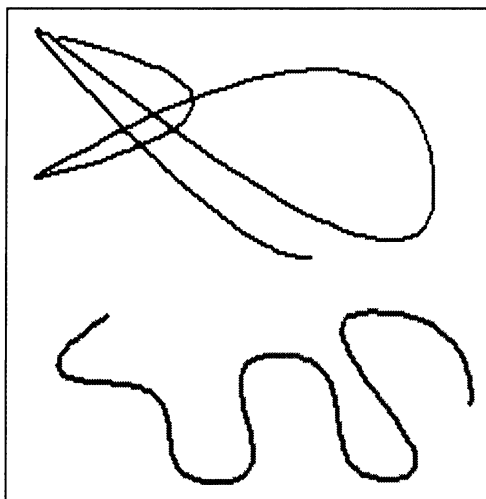


Obr.15: Laboratorní aparatury z databáze šablon.

Radost mi udělal již zmiňovaný nástroj Polyline , se kterým lze kreslit různé nepravidelné otevřené útvary, např. reakční diagram (obr.16) nebo rozmanitě tvarované útvary (obr.17).



Obr.16: Reakční diagram.



Obr.17: Rozmanité křivky nakreslené s Polyline.

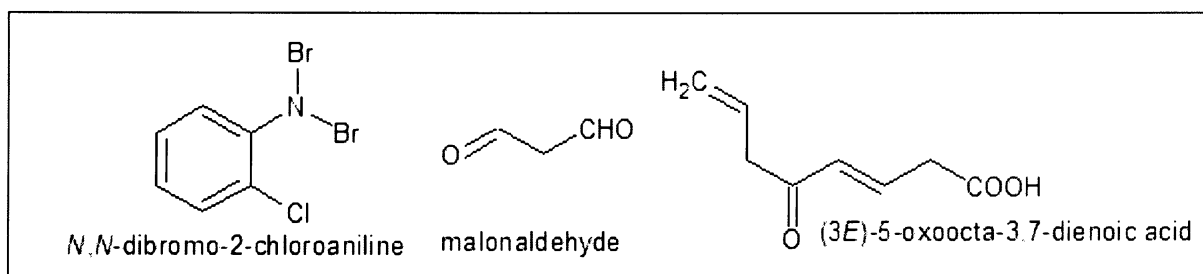
I zde je, podobně jako ve strukturním módu, možnost pokročilé editace (tabulka Object Panel), kterou vyvoláme dvojitým kliknutím na upravovaný objekt a s jejíž pomocí lze měnit např. velikost a barvu symbolu atomu, barvu a tloušťku vazby, u šipky barvu, styl a tloušťku čáry, u geometrických útvarů styl, barvu a tloušťku ohraničující čáry, barvu, vzorek a stínování výplně apod.

DALŠÍ MOŽNOSTI PROGRAMU CHEMSKETCH:

Náročnější uživatel ocení možnost exportu nakreslených struktur do formátu .pdf, který je v dnešní době hojně využíván a tato funkce je nová ve verzi 10.0. I uživatel začátečník bude mít radost z exportu nakreslené struktury jako tzv. OLE objekt, kdy se sloučenina po překopírování např. do Wordu a následných úpravách opět otevře v programu ChemSketch, pokud je v počítači nainstalován.

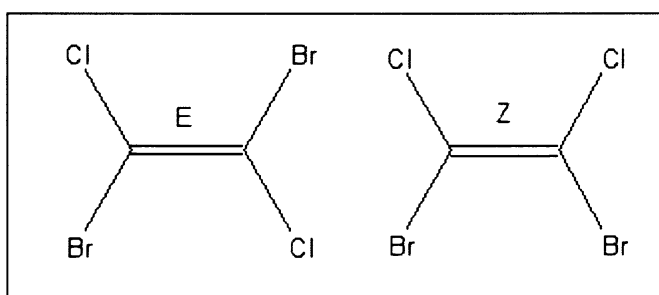
Každý uživatel ocení možnost změny velikosti a barvy kreslicí plochy. Program má v tomto ohledu velmi bohatou nabídku jednotlivých barev, celkem jich nabízí 256. Na kreslicí ploše lze také zobrazit pravidelnou mřížku pro přesnější kreslení. Pravítko je v ChemSketchi zobrazeno nastálo v horní a levé části kreslicí plochy.

Velmi zajímavou funkcí ChemSketch je vygenerování názvu nakreslené sloučeniny v anglickém jazyce (obr.18). Tato funkce má ovšem ve freeware verzi programu opět svá omezení: sloučenina musí obsahovat maximálně 50 atomů, maximálně 3 aromatické kruhy a pouze běžné atomy H, C, N, P, O, S, F, Cl, Br, I, Li, Na, K, což ale zajisté běžnému uživateli postačí.



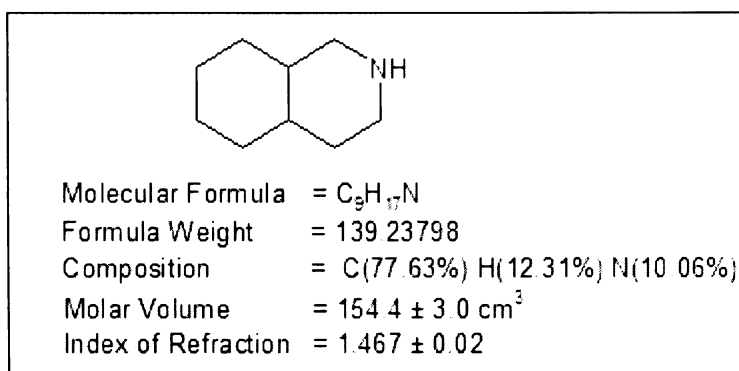
Obr.18: Příklad vygenerovaného názvu na uvedených sloučeninách.

Učitel chemie na střední škole jistě ocení funkci pro generování stereodeskriptorů E a Z na dvojně vazbě (obr.19).



Obr.19: Příklad vygenerování stereodeskriptorů na dvojně vazbě.

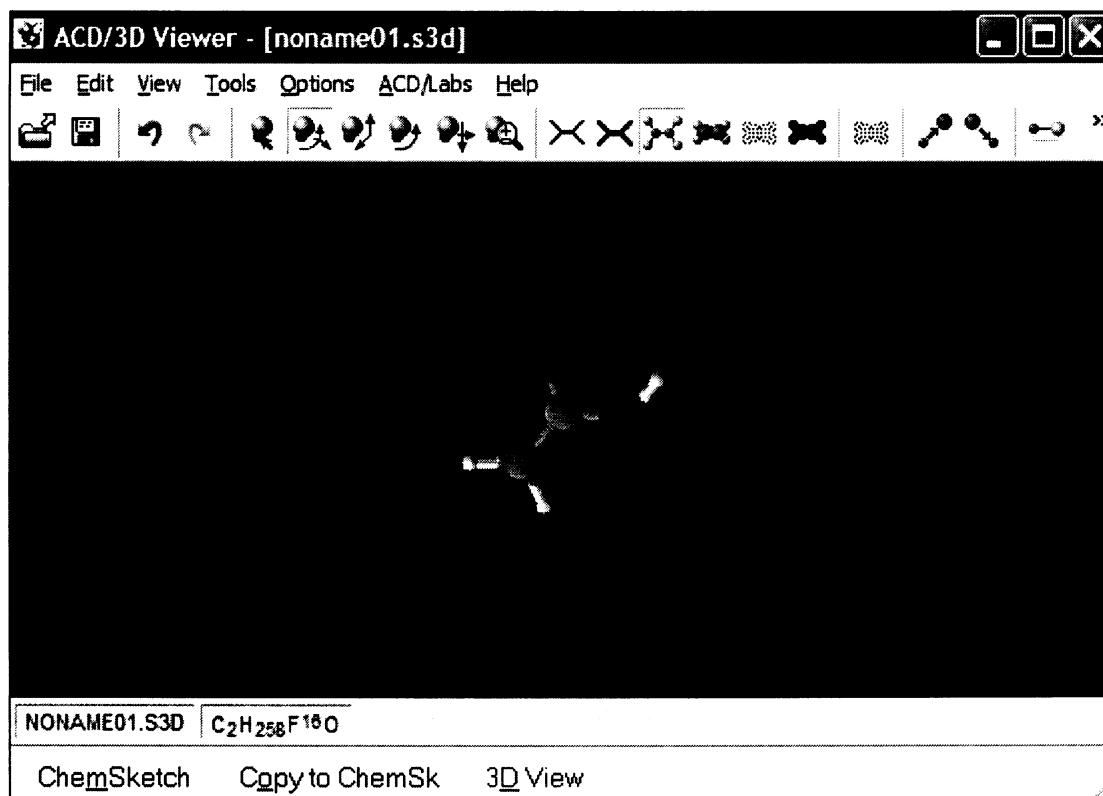
Důležitou a velmi využitelnou funkcí je vygenerování např. sumárního vzorce, relativní molekulové hmotnosti, procentuálního zastoupení jednotlivých prvků, molárního objemu, indexu lomu a mnohého dalšího (obr.20).



Obr.20: Predikce některých veličin u dané molekuly.

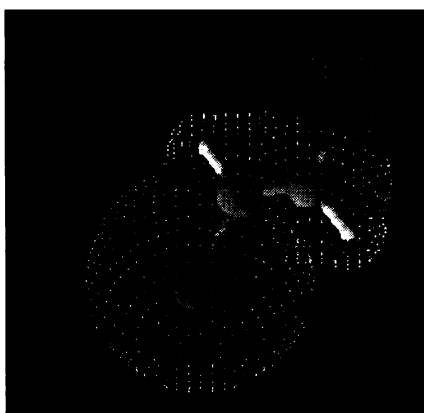
Významnou a ocenitelnou funkcí je upozornění na chybně nakreslenou sloučeninu. Např. při překročení vaznosti daného atomu je atom přeškrtnut. Sloučeninu lze ovšem s pomocí pokročilé editace zanechat v nákrese i chybně, např. do písemné práce, kde má student poznat chybně nakreslenou sloučeninu nebo ji následně opravit.

➤ ACD/3D VIEWER:



Obr.21: Grafické rozhraní ACD/3D Vieweru.

Základní funkcí 3D Vieweru (obr.21) je převod strukturních vzorců látek na jejich 3D modely. Program umí zobrazit nakreslené struktury v několika typech modelů: tyčinkový, kuličkový, drátový a kalotový. Velmi motivující svým vzhledem je také zobrazení Van der Walsových poloměrů kolem jednotlivých atomů v molekule (obr.22).






Obr.22: Zobrazení Van der Walsových poloměrů.

Molekuly lze nechat samovolně rotovat a během rotace měnit styly zobrazení, což je velmi dobrá funkce pro prozkoumání molekul ze všech stran.

Náročnější uživatel ocení zajímavou funkci pro změření délky vazby a vazebného úhlu mezi vybranými atomy. Vygenerované hodnoty ovšem mohou být nepřesné, proto je vhodné je následně konzultovat s odbornou literaturou.

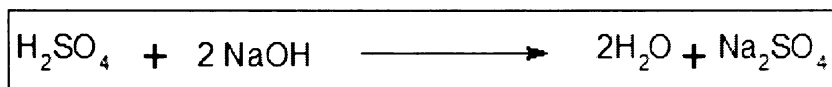
➤ ZAJÍMAVÉ FUNKCE ACD/CHEMBASICU:

ChemBasic je objektový jazyk pro prezentaci a manipulaci s molekulárními strukturami podobný VisualBasicu. Usnadňuje rutinní operace, umožňuje rozšiřovat ChemSketch, včetně přizpůsobení uživateli. ChemBasic možná nebudete využívat tak často jako jiné funkce ChemSketche, přesto nám autoři připravili v tomto jazyce několik funkcí, zobrazených na horní vodorovné liště programu, které občas své uplatnění najdou. Z těch nejzajímavějších lze jmenovat tvorbu štítků na chemikálie , tvorbu 3D struktury nukleové kyseliny ze zadané vstupní sekvence  a vytvoření 3D peptidové struktury ze sekvence aminokyselin  a mnohé další.

➤ NEDOSTATKY CHEMSKETCH 10.0:

Programu ChemSketch se toho nedá moc vytknout, ale některým chybám a drobným nedostatkům se autoři přece jen nevyhnuli, např.:

Při zarovnávání objektů na kreslicí ploše se vzorec obsahující index posune o něco výše než vzorec bez indexů, protože si program vybírá geometrický střed textu (obr.23).



Obr.23: Poukázání na vzorce s indexem, které jsou posunuty o něco výše.

Ve zdarma dostupné verzi nelze pojmenovat sloučeniny, které obsahují více než 50 atomů, více než 3 aromatické kruhy a obsahují jiné atomy než tyto: H, C, N, P, O, S, F, Cl, Br, I, Li, Na, K. Dále program neumí vygenerovat tautomery u organických sloučenin, které obsahují: atom kovu, nabitě atomy, prvek v netypickém valenčním stavu, koordinační vazby a více než 255 atomů. To ale nemusí učitelům chemie příliš vadit.

➤ KLADY PROGRAMU CHEMSKETCH 10.0:

- K dispozici zdarma na internetu.
- Program je zatím v neustálém vývoji.

- Zdařilé grafické rozhraní programu.
- Možnost změny barvy pracovní plochy.
- Výuková videa i manuály, které názorně popisují nakreslení některých objektů.
- Motivující 3D Viewer.
- Některé zajímavé funkce ChemBasicu.
- Upozornění na chybu ve chybně nakreslené struktuře.
- Velmi rozsáhlá databáze předkreslených šablon.
- Periodická tabulka prvků obohacená o mnoho informací.
- Podpora funkce OLE.
- Export do formátu .pdf.

➤ ZÁPORY PROGRAMY CHEMSKETCH 10.0:

- Existuje pouze v anglickém jazyce, což je nevýhoda pro neznalce anglického jazyka.
- Na první pohled působí velmi složitě díky velkému množství tlačítek, příkazů a menu.
- Některé rozšiřující funkce jsou k dispozici jen u komerční verze programu.

➤ ZÁVĚREČNÉ HODNOCENÍ: 90%

ChemSketch 10.0 jistě využije široká škála lidí, od studentů až po učitele chemie na základní, střední i vysoké škole. Učitelé, kteří nemají dobrý vztah k počítačům, se ho možná na první pohled zaleknou, ale již po objevení bohaté databáze šablon se stane jejich dobrým pomocníkem. Lze si s ním připravit hodně materiálů k výuce, písemné práce a ostatní.

V konkurenci všech ostatních programů zaměřených na stejnou problematiku mne oslovil nejvíce, a to nejen svým vzhledem, ale zejména zdaleka nejbohatší nabídkou funkcí a možností oproti ostatním podobným programům. Po zvládnutí základních principů je práce v něm velmi efektivní a výsledky nejprofesionálnější. Na jeho osvojení je ovšem potřeba delší doba. Při bližším prozkoumání jsem zjistila, že práce v něm není vůbec složitá. Navíc se domnívám, že jeho použití při výuce zaujme a motivuje studenty.

4.2 BKCHEM

➤ OBECNÁ CHARAKTERISTIKA:

BKchem je 2D molekulový editor, který slouží ke kreslení chemických struktur, molekul, reakčních schémat a nejen toho. Je napsán v jazyce Python a existuje ve verzích pro operační systém MS Windows, tak i pro Linux. Uživatel pracující v operačním systému Linux tuto jeho vlastnost jistě ocení, jelikož jde o jediný z mála chemických kreslicích programů, který lze v tomto prostředí použít.

Autorem programu je Čech Bedřich Košata. BKchem si lze stáhnout zdarma a bez registrace ze stránek <http://bkchem.zirael.org>.

➤ VERZE PROGRAMU:

Z domovské stránky je možno v současné době stáhnout dvě verze programu: 0.11.6 a 0.12.0. Program nebyl v posledním roce aktualizován, poslední verze tedy vznikla v roce 2006. Verze 0.12.0 obsahuje oproti předchozí verzi navíc několik funkcí využitelných při psaní textu a kreslení schémat: např. jsou to šipka vlevo, šipka vpravo a znaménko mínus. Systémové požadavky jsou stále velmi nízké, proto doporučuji používat verzi 0.12.0. BKchem si lze nainstalovat v německém, francouzském, polském, anglickém a českém jazyce.

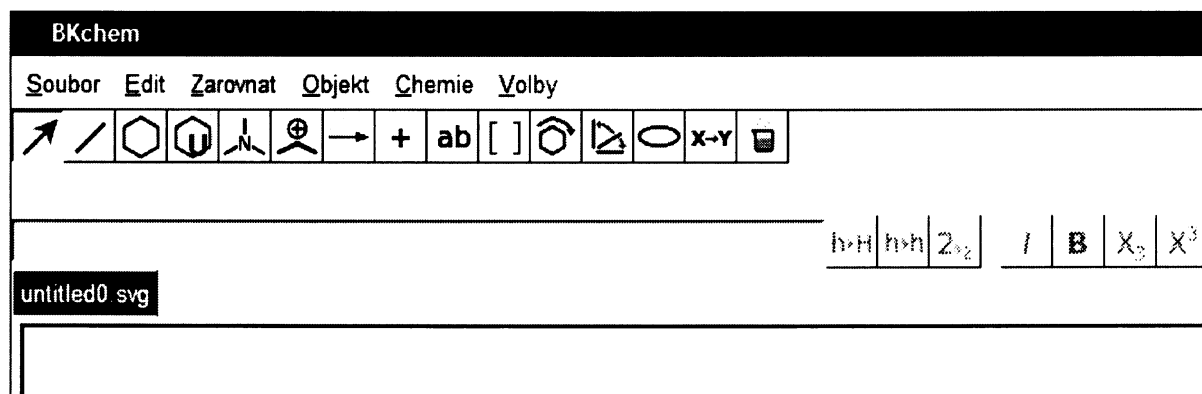
➤ PODPORA PROGRAMU:

Pro BKchem bohužel neexistuje manuál a součástí programu není ani help. V základní verzi obsahuje dvě přídatné funkce (pluginy), jedna změří úhel mezi vybranými vazbami a druhá barevně označí aromatické vazby v aromatických sloučeninách. Dříve bylo možné si z internetu stáhnout více přídatných funkcí, které nejsou součástí základní verze, ale nyní již nejsou tyto funkce bohužel k dispozici.

➤ UŽIVATELSKÁ PŘÍVĚTIVOST:

Při prvním otevření působí program velmi jednoduše (obr.24), protože obsahuje málo funkcí a plocha není zaplněná tlačítky, příkazy a menu. Naneštěstí není tak snadné se i malé množství funkcí naučit správně používat, neboť, jak již bylo zmíněno neexistuje manuál a je nutné se vše naučit samostatně metodou „pokus-omyl“. K dispozici není ani tzv. help, který by popisoval jednotlivé funkce a často bývá součástí programů. Pro začínajícího uživatele tak

není práce v tomto programu příliš intuitivní, ale po počátečních obtížích není problém program efektivně používat a nakreslit složitější struktury. Svým grafickým rozhraním bohužel není příliš motivující. Uživatel také může negativně reagovat na nemožnost změny barvy pracovní plochy.

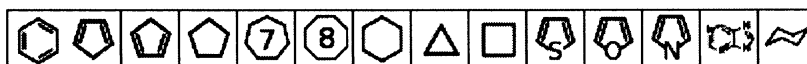


Obr.24: Grafické rozhraní BKchemu.

➤ MOŽNOSTI PROGRAMU BKCHEM 0.12.0:

BKchem je rovněž chemický kreslicí program zaměřený na kreslení molekul, chemických struktur, reakčních schémat, polymerů a nejen toho. Samozřejmostí je kreslení vazeb, od jednoduchých přes dvojně až po stereo vazby. Symboly atomů se píše ručně pomocí klávesnice bez použití periodické tabulky prvků, která zde není k dispozici. Ke kreslení reakčních schémat lze využít znamínko plus a několik reakčních šipek. Veškeré nakreslené struktury lze umístit do hranatých závorek, opatřit je popiskami, rotovat s nimi dle geometrického středu, zarovnat do horizontální nebo vertikální pozice a lze provést zrcadlení molekuly dle zvolené přímky.

Kromě výše uvedených běžných funkcí, obsahuje BKchem i několik zajímavějších, které budou také využívány řadou uživatelů. Začínající uživatel jistě ocení nedílnou, ale oproti ChemSketchi velmi chudou databázi šablon, která obsahuje pouze čtrnáct předkreslených objektů (obr.25). S tím nebude náročnější uživatel vůbec spokojen, ale někomu tento počet šablon bude bohatě postačovat.



Obr.25: Databáze šablon.

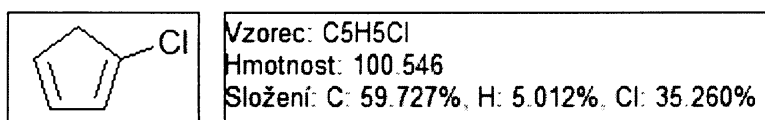
Při kreslení chemických reakcí mne překvapil nástroj Reaction $X \rightarrow Y$, který umístí jednotlivé složky reakce do barevných rámečků (obr.26). Tuto funkci lze využít při výuce chemie na ZŠ k vysvětlení a následnému pochopení, co je výchozí látka a produkt reakce.



Obr.26: Vzhled reakce po použití funkce Reaction.

Každý uživatel jistě ocení možnost exportu do dnes hojně využívaného formátu .pdf, která nebyla dříve u jiných programů běžná a bylo nutné ji řešit.

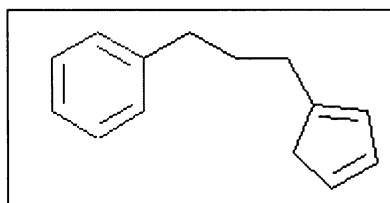
Důležitou funkcí, která nahradí hledání některých hodnot v chemických tabulkách, je vygenerování sumárního vzorce, relativní molekulové hmotnosti a procentuálního zastoupení jednotlivých prvků v molekule u vybrané sloučeniny (obr.27).



Obr.27: Predikce některých vlastností sloučeniny.

Často využívanou funkcí se jistě stane kontrola správnosti nakreslené sloučeniny, která je součástí menu. Při využití této funkce se na obrazovce zobrazí tabulka, která uvede možné chyby v nákresu. Program upozorní na možné chyby v nákresu nebo na překročenou vaznost u atomu. Na obrazovce se objeví varovná tabulka s textem: překročená maximální vaznost. Chybu lze následně opravit nebo ponechat sloučeninu s možnou chybou.

U kreslení aromatických sloučenin uživatel jistě využije zajímavou přídatnou funkci (Plugin), která barevně označí aromatické vazby (obr.28).



Obr.28: Barevné označení aromatických vazeb.

➤ NEDOSTATKY BKCHEMU 0.12.0:

Ačkoliv shledávám řadu funkcí BKchemu jako velmi užitečné, v programu lze objevit několik nedostatků. Program neobsahuje periodickou tabulku prvků, všechny prvky je třeba psát ručně, ale to není až tak složité a někomu to může vyhovovat více než hledání prvků v periodické tabulce jako u obdobných programů. I když je program nainstalován v českém jazyce, je i nadále řada funkcí pojmenována pouze v jazyce anglickém. BKchem neumí vygenerovat název nakreslené sloučeniny, i pokud funkce Informace tuto položku obsahuje. Náročný uživatel bude oproti ChemSketchi postrádat možnost změny barvy pracovní plochy. Při umísťování vybrané sloučeniny nebo objektu do závorek je k dispozici pouze hranatá závorka a kulatou a složenou závorku budete v BKchemu hledat marně. Program dále nepodporuje, na rozdíl od ChemSketche, export objektu jako tzv. OLE objekt do jiných programů, tzn. po překopírování zvoleného objektu např. do Wordu a následné úpravě se objekt v programu BKchem neotevře. Tuto funkci bude ovšem postrádat i uživatel začátečník.

➤ KLADY PROGRAMU BKCHEM 0.12.0:

- K dispozici zdarma na internetu.
- Program lze nainstalovat v českém jazyce. Na výběr je z pěti světových jazyků, včetně českého.
- Kontrola správnosti nakreslené struktury.
- Přídavné funkce (Pluginy).
- Nakreslené objekty lze exportovat do .pdf formátu.

➤ ZÁPORY PROGRAMU BKCHEM 0.12.0:

- Neexistuje žádný manuál, který by popisoval jednotlivé funkce.
- I když je program nainstalovaný v českém jazyce, zůstávají některé názvy funkcí v jazyce anglickém.
- Program příliš nemotivuje svým grafickým vzhledem.
- Nelze změnit barvu pracovní plochy.
- Neumí vygenerovat názvy nakreslených sloučenin, i když menu Informace tuto funkci zahrnuje.
- Obsahuje pouze třináct předkreslených šablon.
- Ze závorek jsou k dispozici jen hranaté.
- Neobsahuje periodickou tabulku prvků.

- Nepodporuje funkci OLE.

➤ ZÁKLADNÍ SROVNÁNÍ S PROGRAMEM CHEMSKETCH:

Program BKchem a ChemSketch se od sebe zásadně liší. První významné a viditelné rozdíly lze zaregistrovat při prozkoumání jednotlivého výčtu funkcí - ChemSketch jich nabízí mnohem více, disponuje vydařeným grafickým rozhraním a nabízí mnohem více možností kreslení. BKchem lze ovšem oproti programu ChemSketch nainstalovat i v českém jazyce. Oba jsou k dispozici zdarma na internetu, ChemSketch navíc prochází v poslední době neustálým vývojem. Ačkoliv je možné zvládnout práci v programu BKchem bez manuálu rychleji než v programu ChemSketch, profesionálnějších výsledků bezesporu dosáhneme v programu ChemSketch. Proto BKchem použijeme spíše k rychlému nakreslení jednodušších struktur, aniž bychom se chtěli dopodrobna zabývat všemi možnostmi programu.

➤ ZÁVĚREČNÉ HODNOCENÍ: 50%

BKchem 0.12.0 si své příznivce mezi studenty i učiteli chemie na základní, střední i vysoké škole určitě najde. Ze všech v práci zmíněných kreslicích programů je jediný, který lze používat i v prostředí Linuxu, tudíž ho využijí hlavně jeho Linuxoví uživatelé. Své uplatnění jistě najde u všech, kteří mají problémy s anglickým jazykem, protože je ho možno nainstalovat i v jazyce českém. Těm, co nejsou nakloněni počítačům poskytne pomocnou ruku při nakreslení jednoduchých chemických struktur a reakcí. Celkem snadno s ním lze připravit materiály k výuce, písemné práce atd. V konkurenci všech ostatních chemických kreslicích programů mne hlavně svým vzhledem a skromnou nabídkou funkcí moc neoslovil. Všechny funkce jsem se musela naučit ovládat samostatně, což zabralo dost času. I když jsem se v něm naučila pracovat, stejně bych si raději vybrala ChemSketch díky lepší technické podpoře a širším možnostem. Pokud to někdo myslí s kreslením chemických struktur, aparatur, schémat apod. vážně, nemůže volit jinak.

4.3 MDL ISIS/DRAW

➤ OBECNÁ CHARAKTERISTIKA:

ISIS/Draw je program zaměřený na kreslení chemických struktur, molekul, reakcí a nejen toho. Program je propojen s externím programem RasMol, který slouží k vizualizaci zvolené molekuly ve 3D. ISIS/Draw je funkční v operačním systému MS Windows a Macintosh.

➤ DOSTUPNOST:

ISIS/Draw je produktem firmy MDL, která ho nabízí ke stažení na svých domovských stránkách www.mdl.com oproti registraci, která vyžaduje tyto údaje: jméno, příjmení, stát, město, PSČ a email.

➤ VERZE PROGRAMU:

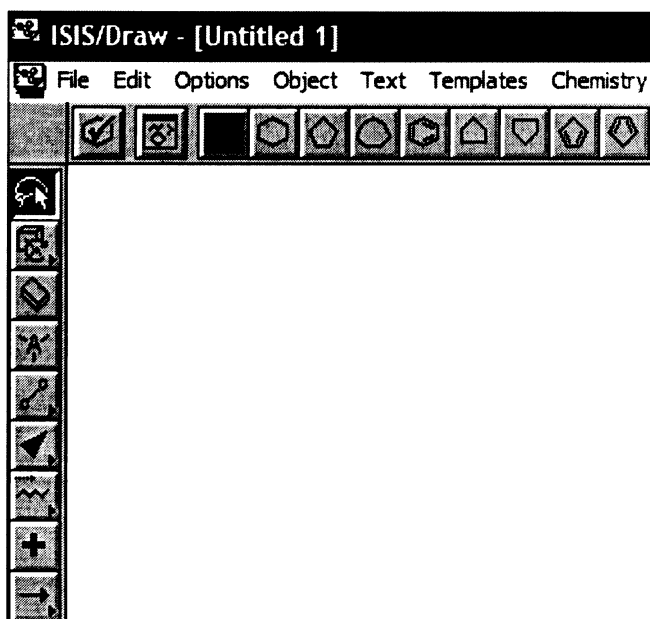
K dispozici je v tuto chvíli i verze 2.3 pro Macintosh, kterou majitel Macintoshe jistě velmi ocení. Dále verze 2.5 pro operační systém MS Windows. Obě verze existují pouze v anglickém jazyce.

➤ PODPORA PROGRAMU:

Manuál na ovládání není k dispozici, existuje pouze tzv. help, který je součástí programu. Help charakterizuje obecně jednotlivé funkce a dále popisuje krok za krokem, jak jednotlivé funkce programu používat.

➤ UŽIVATELSKÁ PŘÍVĚTIVOST:

ISIS/Draw působí při prvním otevření jako velmi jednoduchý program, protože obsahuje pouze dvě lišty s hlavními nástroji ke kreslení, má relativně málo tlačítek, příkazů a menu. Grafickým rozhraním rovněž uživatele příliš nemotivuje (obr.29), práce v něm je však docela intuitivní.




Obr.29: Grafické rozhraní ISIS/Draw.

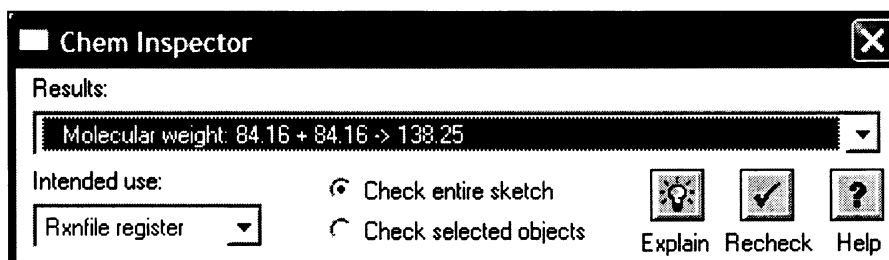
➤ MOŽNOSTI PROGRAMU ISIS/DRAW 2.5:

ISIS/Draw patří též mezi chemické kreslicí programy a lze s ním nakreslit chemické struktury, molekuly, reakční schémata, orbitaly a mnohé další.


Samozřejmostí je kreslení vazeb, od jednoduchých, dvojných až po stereo vazby. Při kreslení reakčních schémat lze použít znaménko plus a velké množství reakčních šipek. V programu lze také kreslit geometrické útvary, jako je elipsa, zakulacený obdélník a další nepravidelné útvary. Atomy se vkládají z periodické tabulky prvků, kterou lze vyvolat až po kliknutí na příslušný atom pravým tlačítkem myši a volbou položky Edit Atom. Vybrané struktury lze umístit do závorek, opatřit je popiskami, převrátit a seřadit je horizontálně nebo vertikálně, spojit je do jednoho celku a následně je opět rozpojit do jednotlivých struktur.

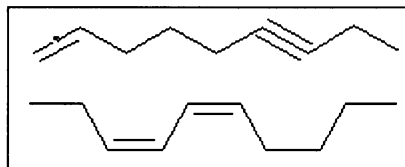
Oproti těmto základním a běžným funkcím program obsahuje i několik dalších zajímavých.

Náročnější uživatel jistě ocení zajímavou funkcí Chem Inspector , která podá informace o počtu výchozích látek a produktů, relativní molekulové hmotnosti a sumárním vzorci výchozích látek a produktů (obr.30).



Obr.30: Tabulka s informacemi o výchozích látkách a produktech.

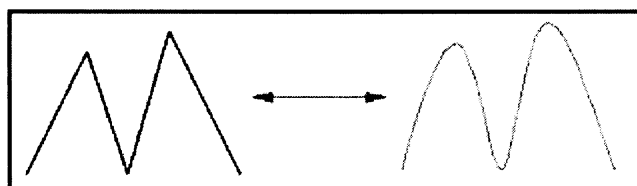
Další důležitou a hojně využívanou funkcí je kreslení dlouhých uhlovodíkových řetězců  (např. mastných kyselin), která uživateli ušetří spoustu času (obr.31).



Obr.31: Využití nástroje pro kreslení uhlovodíkových řetězců.

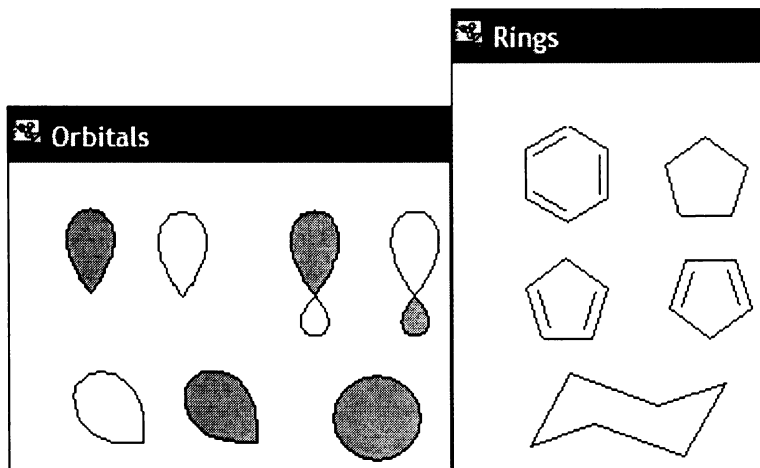
Již zmíněná periodická tabulka prvků je obohacena o následující informace: relativní molekulová hmotnost, typická oxidační čísla a pořadí prvku v tabulce. Její objevení mi naneštěstí trvalo delší dobu, jelikož je ukryta pod položkou Edit Atom.

Nadšená jsem byla z funkce, která uhladí vybraný nepravidelný útvar nebo nepřetržitou linku do zakulacených obrysů (obr.32). Opačná funkce je také k dispozici.



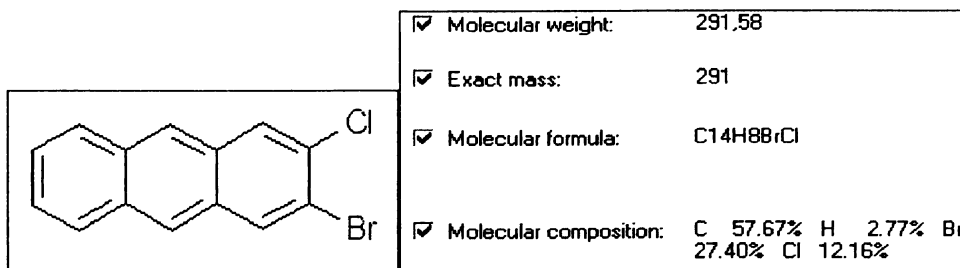
Obr.32: Vyhlazení křivky do zakulaceného útvaru.

Důležitou součástí programu je databáze šablon Templates, která obsahuje stejně jako ChemSketch velmi bohatou nabídku předkreslených struktur (obr.33). Další samostatně nakreslené struktury lze do databáze šablon uložit.



Obr.33: Příklad orbitalů a cyklických uhlovodíků z databáze šablon.

Velmi dobrou a podobnou funkcí jako má ChemSketch je kalkulace některých dat. U dané sloučeniny lze vygenerovat relativní molekulovou hmotnost, sumární vzorec a procentuální zastoupení jednotlivých prvků v molekule (obr.34).



Obr.34: Predikce některých veličin u dané molekuly.

Pokud uživatel nakreslí sloučeninu, v níž je po chemické stránce chyba, program ho upozorní na chybu v nákresu, kterou lze okamžitě odstranit, např. při překročení vaznosti se objeví tabulka Valence Warning, vzniklou chybu lze ihned opravit nebo ji zanechat.

➤ NEDOSTATKY PROGRAMU ISIS/DRAW 2.5:

ISIS/Draw obsahuje velké množství zajímavých funkcí, ale některých chyb se autoři přeci jen dopustili. Náročnější uživatel si rád volí barvu pracovní plochy, což zde není možné, pracovní plocha je tedy stále bílá. Program nenabízí možnost vygenerování názvu nakreslené sloučeniny, ale k dispozici je plugin, který je zdarma a který umí název bez omezení, narozdíl od programu ChemSketch, vygenerovat. Některým uživatelům bude možná scházet možnost exportu nakreslených struktur do formátu .pdf.

➤ KLADY PROGRAMU ISIS/DRAW 2.5:

- K dispozici zdarma na internetu.
- Podpora funkce OLE.
- Propojení na program RasMol a tím možnost 3D vizualizace.
- Kontrola správnosti nakreslené sloučeniny.
- Velmi bohatá databáze šablon.
- Plugin pro vygenerování názvu nakreslené sloučeniny.

➤ ZÁPORY PROGRAMU ISIS/DRAW 2.5:

- Program se již delší dobu nevyvíjí.
- Nelze změnit barvu pracovní plochy.
- K dispozici pouze v anglickém jazyce.
- Manuál, který by popisoval jednotlivé funkce, není k dispozici.
- Nakreslenou sloučeninu nelze exportovat do .pdf formátu.

➤ ZÁKLADNÍ SROVNÁNÍ S PROGRAMEM CHEMSKETCH:

Program ISIS/Draw a ChemSketch se od sebe velmi liší, ale ne tak zásadně jako u ostatních programů. Mnoho funkcí, které naleznete v programu ChemSketch se objevují i v programu ISIS/Draw byť v méně komfortní podobě. Každopádně, i tak, je ChemSketch na funkce bohatší. Oproti ISIS/Draw nabízí větší množství funkcí a disponuje vydařenějším grafickým rozhraním. Oba jsou k dispozici zdarma na internetu, ovšem pouze v anglickém jazyce. Na rozdíl od ChemSketche ISIS/Draw již delší dobu neprochází výrazným vývojem.

➤ ZÁVĚREČNÉ HODNOCENÍ: 70%

ISIS/Draw 2.5 si najde mezi studenty a učiteli na základní, střední i vysoké škole své pravidelné uživatele, někomu může vyhovovat dokonce více než ChemSketch. Pro vlastníky Macintoshe jde o téměř jedinou možnost, jak používat nějaký kreslicí program. S pomocí programu si lze připravit bohaté materiály k výuce, písemné práce a mnohé další.

V konkurenci všech ostatních kreslicích programů ho řadím na druhé místo hned za ChemSketch. Obsahuje zajímavé funkce, práce v něm je efektivní a není vůbec složitá. Doba na osvojení programu byla v mém případě kratší než např. u BKchemu a ChemSketche a proto mohu program jen a jen doporučit.

4.4 CHEMWEB

➤ OBECNÁ CHARAKTERISTIKA:

ChemWeb je program, který je určen ke kreslení chemických struktur, molekul, reakčních schémat apod. Jako takový je použitelný pouze v operačním systému MS Windows a je funkční pouze tehdy, je-li v počítači nainstalována (třeba i virtuálně) tiskárna. Obsahuje jednu hlavní lištu s mnoha funkcemi a nástroji ke kreslení daných struktur.

➤ DOSTUPNOST:

ChemWeb je produktem firmy Soft Shell International, která ho již na svých domovských stránkách www.softshell.com nenabízí, nicméně ho lze zdarma a bez registrace stáhnout např. z www.jergym.hiedu.cz/~canovm/.

➤ VERZE PROGRAMU:

K dispozici je pouze verze 3.1.4. Program se již dlouhou dobu nevyvíjí. ChemWeb je k dispozici pouze v anglickém jazyce, nicméně program neobsahuje tolik funkcí a zvládnutí několika anglických slovíček nebude pro uživatele takový problém.

➤ PODPORA PROGRAMU:

K dispozici není žádný manuál, který by jednotlivé funkce popisoval. Lze využít tzv. help (vyvolání klávesou F1), který je součástí programu a popisuje jednotlivé funkce i jejich použití.


➤ UŽIVATELSKÁ PŘÍVĚTIVOST:

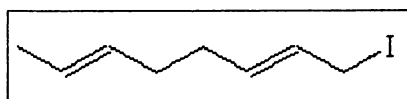
Vzhledem působí program velmi jednoduše (obr.37). Na ploše je umístěno jen několik tlačítek, příkazů a menu. Nutno zmínit, že ani jedno tlačítko na hlavní nástrojové liště není kontextově pojmenováno. I tak malé množství funkcí je tak třeba se naučit ovládat metodou „pokus“-„omyl“, což může uživatele odradit. Naneštěstí ani používání programu není moc intuitivní, nicméně po počátečních peripetiích nebude patrně problém jednotlivé funkce používat. Grafické rozhraní programu není nijak úžasné, což však odráží skutečnost, že se již dlouhou dobu nevyvíjí.

➤ MOŽNOSTI PROGRAMU CHEMWEB 3.1.4:

ChemWeb je chemický kreslicí program zaměřený na kreslení chemických struktur, molekul, reakčních schémat, orbitalů, polymerů a nejen toho.

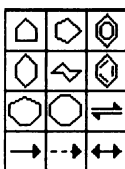
Samozřejmostí programu je kreslení vazeb, od jednoduchých přes čárkované až po stereo vazby. Atomy se vkládají z periodické tabulky prvků. Při kreslení reakčních schémat lze využít velké množství reakčních šipek. Můžeme zde nakreslit i některé geometrické útvary, obdélník, čtverec, trojúhelník a další nepravidelné útvary. Vybrané struktury můžeme umístit do závorek, opatřit je popiskami, spojit je do jednoho celku a následně je opět rozpojit zpět do jednotlivých struktur, překlopit a seřadit je dle horizontální a vertikální osy.

Program obsahuje i několik zajímavých funkcí. Každý uživatel jistě ocení nástroj pro kreslení dlouhých uhlovodíkových řetězců , využitelný např. při kreslení mastných kyselin a jejich derivátů (obr.35). S jeho pomocí ušetříme hodně času.



Obr.35: Využití nástroje pro kreslení uhlovodíkových řetězců.

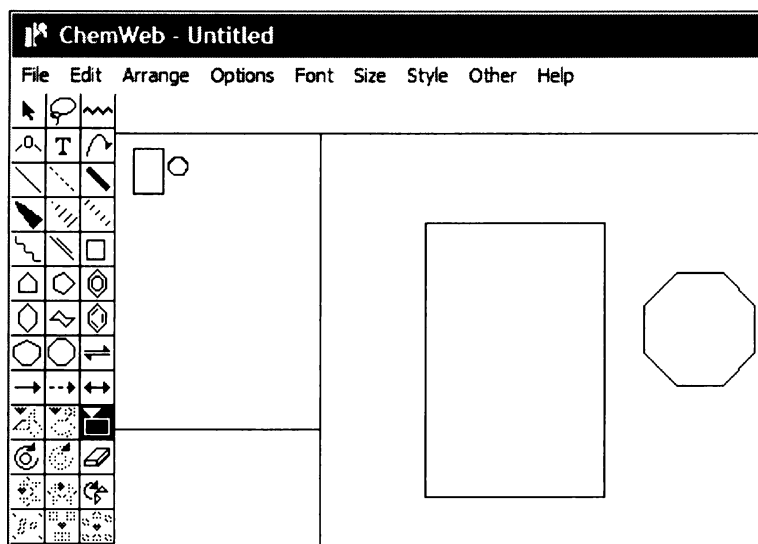
Nedílnou součástí ChemWebu je oproti ChemSketchi docela chudá databáze šablon (obr.36).



Obr.36: Ukázka z databáze šablon.

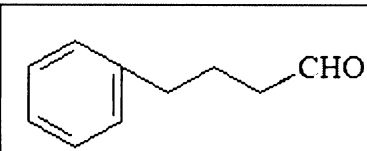
Náročný uživatel pak uvítá zobrazení pravítka kolem horní a levé části kreslicí plochy, sloužící zejména k přesnějšímu kreslení daných objektů. Barvu pracovní plochy lze také změnit, v nabídce je celkem 8 barev.

Potěšení mi přinesla funkce, která zobrazí v levém horním rohu kreslicí plochy malé okénko, v němž jsou vidět všechny zmenšené nakreslené struktury, čímž má uživatel přehled o celkovém vzhledu stránky (obr.37).



Obr.37: Zobrazení malého okénka.

Další užitečná funkce, nahrazující v některých případech hledání v chemických tabulkách, vygeneruje u zvolené sloučeniny např. sumární vzorec, relativní molekulovou hmotnost a procentuální zastoupení jednotlivých prvků v molekule (obr.38).

	Formula:	C10H12O
	Mass:	148.20
	Exact Mass:	148.088815
	Composition:	C 81.0% H 8.2% O 10.8%

Obr.38: Predikce některých vlastností dané sloučeniny.

ChemWeb také nabízí funkci pro kontrolu správnosti nakreslené sloučeniny. Při možném výskytu chyby v nákresu se na obrazovce objeví tabulka s upozorněním na možnou chybu, kterou lze ihned opravit nebo ji zanechat.

Program obsahuje velmi dobře propracovanou periodickou tabulku prvků, která u daného prvku poskytne informace o pořadí prvku v PSP, stabilních oxidačních číslech, relativní molekulové hmotnosti a u některých prvků uvádí skupiny, ve kterých se daný prvek vyskytuje.

➤ NEDOSTATKY CHEMWEBU 3.1.4:

I přes to, že ChemWeb nabízí relativně dost funkcí, autoři mnohé opomněli. Při kreslení reakčních schémat budete marně hledat znaménko plus, autoři na něj jednoduše zapomněli. Program také nenabízí funkci pro generování názvu zvolené sloučeniny, kterou by každý

uživatel hojně využíval. ChemWeb dále nepodporuje funkci OLE (po překopírování např. do Wordu a následné úpravě se objekt v programu ChemWeb neotevře), z čehož vyplývá, že nakreslený objekt vložený do jiného editoru nelze následně upravovat. I uživatel začátečník bude postrádat možnost exportu do formátu .pdf.

➤ KLADY PROGRAMU CHEMWEB 3.1.4:

- Zobrazení okénka, které obsahuje zmenšené nakreslené struktury na pracovní ploše.
- K dispozici zdarma na internetu.
- Kontrola správnosti nakreslené sloučeniny.
- Periodická tabulka prvků obohacená o řadu informací.
- Možnost změny barvy pracovní plochy (8 barev).

➤ ZÁPORY PROGRAMU CHEMWEB 3.1.4:

- Jednotlivé nástroje ke kreslení nejsou pojmenovány.
- Program není dlouhou dobu ve vývoji.
- K dispozici pouze v anglickém jazyce.
- Jednotlivé nástroje nejsou pojmenovány.
- Nepodporuje funkci OLE.
- Nakreslené objekty nelze exportovat do .pdf formátu.
- Nemotivující svým grafickým rozhraním.
- Neexistuje manuál, který by popisoval jak ovládat jednotlivé funkce.

➤ ZÁKLADNÍ SROVNÁNÍ S PROGRAMEM CHEMSKETCH:

Mezi programem ChemWeb a ChemSketch jsou velmi velké a zásadní rozdíly. ChemWeb je oproti ChemSketchi určen k rychlému nakreslení jednodušších struktur a lze se ho po delší době naučit ovládat i bez manuálu. Program ChemSketch obsahuje na rozdíl od ChemWebu velký počet rozmanitých funkcí, práce v něm je velmi efektivní, disponuje vydařeným grafickým rozhraním a prochází neustálým vývojem. Oba programy jsou k dispozici zdarma na internetu a existují pouze v anglickém jazyce.

➤ ZÁVĚREČNÉ HODNOCENÍ: 30%

ChemWeb 3.1.4 si možná své příznivce mezi studenty a učiteli najde, ale nebude jich určitě tolik jako v případě všech předchozích programů. Uplatnění pravděpodobně najde u učitelů chemie, kteří se ho někdy v minulosti naučili dobře ovládat a nechtějí se učit pracovat v jiném programu. Nicméně, vlastnosti pokročilejších chemických kreslicích programů již tento program nemá. Přesto s ním lze vypracovat jednoduché materiály k výuce, písemné práce, atd. V konkurenci všech ostatních chemických kreslicích programů zaměřených na stejnou problematiku mne nezaujal svým vzhledem, ale ani funkcemi. Oproti programu ChemSketch a dalším mi trvalo velmi dlouhou dobu, než jsem se v něm naučila pracovat. I když ChemWeb obsahuje některé zajímavé funkce, rozhodně doporučuji používat spíše všechny předchozí programy než tento.

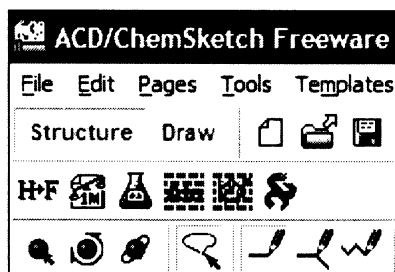
5. Přehled a popis vybraných funkcí

Následující uvedené programy jsou prvotně zaměřené na kreslení všelijakých chemických struktur. Nabízí uživateli velké množství nástrojů a funkcí (od základních až po zajímavé pro náročného uživatele). Pro lepší orientaci v daném programu uvádím výčet většiny nástrojů a funkcí, se kterými lze pracovat.

5.1 ACD CHEMSKETCH 10.0

Strukturní mód

Při práci v tomto módu je nutno přepnout na ikonu Structure (obr.39).






Obr.39: Ikonka pro práci ve strukturním módu.







HORNÍ VODOROVNÁ LIŠTA (obr.40):

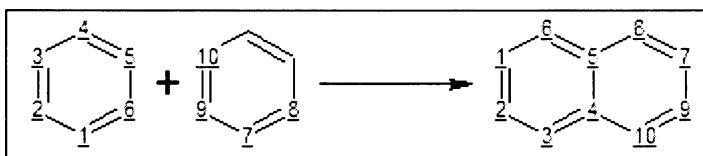


Obr.40: Vzhled horní vodorovné lišty.

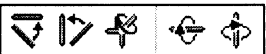


Zde jsou umístěny následující vybrané funkce a nástroje pro kreslení:



- Vazby: Jednoduché, dvojné, trojné, stereo, koordinační , nedefinované, tzv. Markushovy  (použitelné při kreslení struktur, kde není definován bod připojení jednotlivých substituentů) a delokalizované  (reprezentují oblast výskytu elektronu v dané sloučenině). Délku vazby a její orientaci na kreslicí ploše lze korigovat při práci s myší.

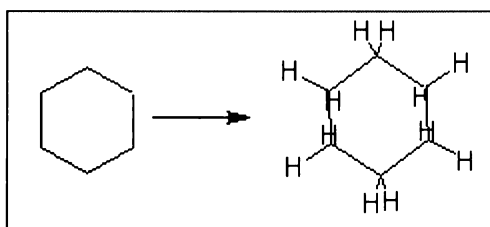
- Řetězce (Draw Chains) : Slouží ke kreslení dlouhých uhlovodíkových řetězců, které se skládají z více než šesti uhlíků. Využitelné například při kreslení mastných kyselin apod.
- Reakční schémata:
 - Znaménko plus .
 - Reakční šipky (Reaction Arrows) : Od jednoduché, přes obousměrnou, zpětnou až po dvojitou a mnohé další.
 - Reakční schémata lze doplnit o experimentální podmínky (°C, Δ, kyselina, báze, atd), které jsou uvedeny nad a pod reakční šipkou. Tuto funkci plní nástroj popisu šipek  (Reaction Arrow Labeling).
 - Kalkulátor reakčních dat (Reaction Calculator)  po zadání některých dat (látkové množství a hustota výchozích látek, hmotnost produktu reakce) vygeneruje procentuální výtěžek produktu reakce, který je vztažený na jednu z výchozích látek. Tabulka s reakčními daty se poté objeví pod nakreslenou reakcí.
 - Číslování atomů (Atom-Atom Map)  zobrazí atomy ve výchozí látce a odpovídající atomy v produktu (obr.41).



Obr.41: Ukázka očíslované reakce.

- Převrácení struktur podle vybrané vazby : horizontálně, vertikálně, podle vodorovné a svislé osy.
- Přímou použitelná šablona (Instant Template)  je určená pro kreslení struktur s opakujícím se motivem. Po vložení struktury na kreslicí plochu lze po zmačknutí tohoto nástroje vložit tu samou předchozí šablonu.
- Funkce Vyhlazení struktury (Clean Structure)  umí u nakresleného strukturního vzorce standardizovat všechny vazebné délky a úhly.


- Generování Tautomerů (Check for Tautomeric Forms)  : Program umí vygenerovat nejdůležitější tautomerní formy nakreslené organické molekuly. Možnost existence alternativních tautomerních forem by měla být vždy řádně uvážena, zejména pokud organická struktura obsahuje dvě nebo více dvojných či trojných vazeb konjugovaných nebo připojených k atomu kyslíku, dusíku, síry či jiným heteroatomům. Nástroj Tautomery ve free verzi nepracuje se strukturami, které obsahují: atom kovu, nabité atomy, prvek v netypickém valenčním stavu, koordinační vazby anebo mají více než 255 atomů.
- 3D Optimization  zobrazí všechny navázané vodíky v nakreslené struktuře (obr. 42).

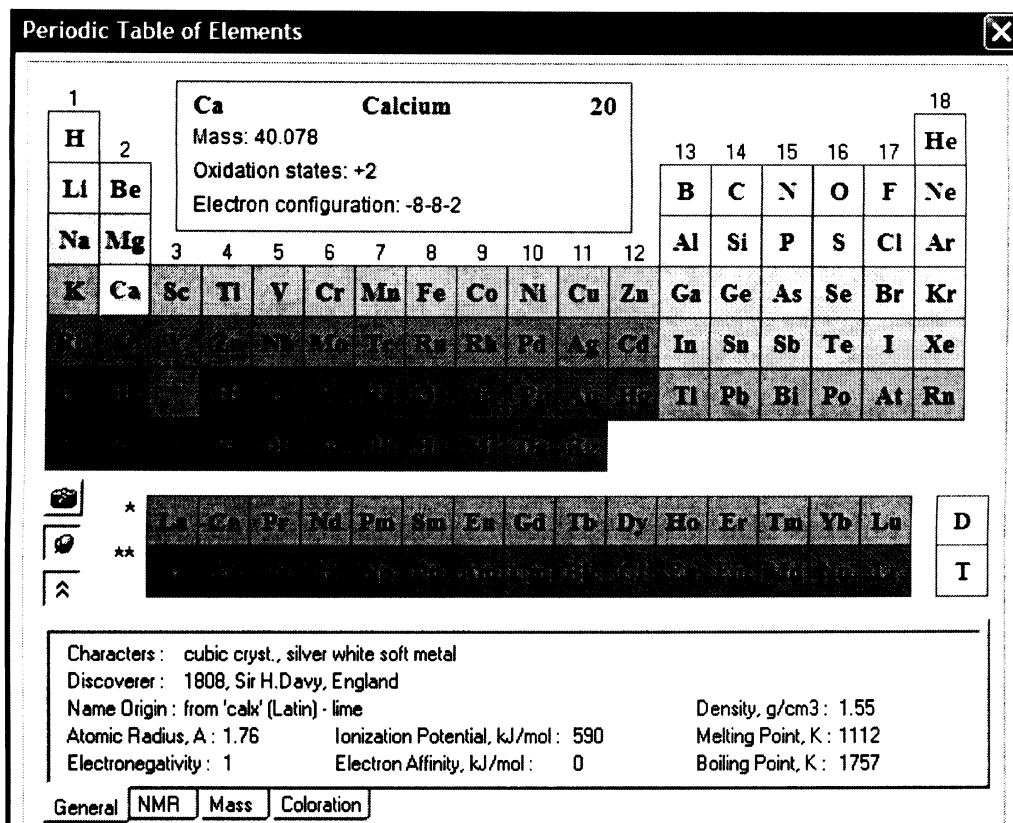


Obr.42: 3D optimalizace cyklohexanu.


LEVÁ SVISLÁ LIŠTA:

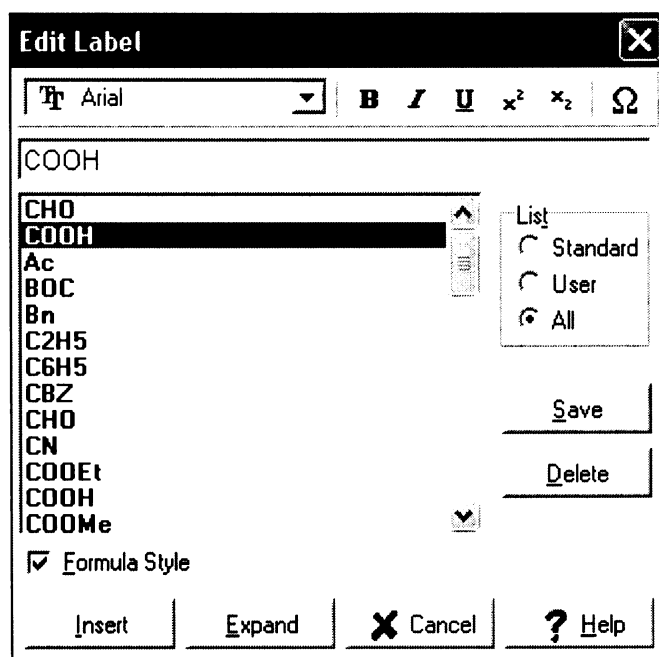
Obsahuje následující vybrané nástroje a funkce:

- Periodická tabulka prvků  nebo klávesa F7 obohacená o několik základních informací (základní vlastnosti, objevitele některých prvků, přírodní izotopy, izotopické směsi, vlastnosti důležité pro jadernou magnetickou rezonanci, barevné znázornění obsazení orbitalů, skupenství, radioaktivitu či zařazení do skupiny kovy/nekovy, fotografie prvků ve skutečnosti), dále sloužící zejména ke vkládání atomů potřebných ke kreslení struktur (obr.43).





Obr.43: Periodická tabulka prvků.

- Edit Atom Label  umožňuje psaní složitějších substituentů napsaných ve formě sumárních vzorců (např. COOH, Et, SCN, CHO), (obr.44). Podfunkce Expand, která je součástí Edit Atom rozepíše zvolený substituent na strukturální vzorec.



Obr.44: Tabulka Edit Atom Label.

- Lze nakreslit nabité atomy, anionty a kationty. V nabídce  je k dispozici kladný náboj, záporný náboj, radikál, kladný ion radikál a záporný ion radikál.
- Atom Chemical Properties  umí u zvoleného atomu změnit valenci, náboj a izotop.

PRAVÁ SVISLÁ LIŠTA:

Obsahuje dvě funkce, z nichž je využitelná pouze jedna:



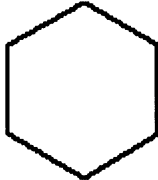
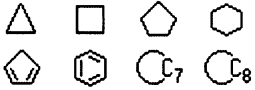
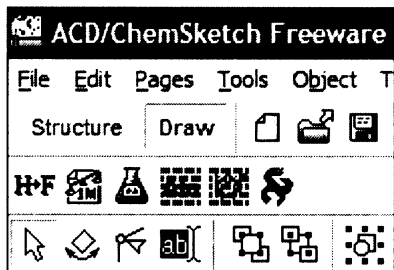
- Encyklopedie (ACD/Dictionary)  je přídatný modul, který je dodáván pouze s komerčními licencemi programu ChemSketch. Je mimořádně užitečný pro poskytnutí možnosti nalézt chemické látky pod jejich obchodními triviálními názvy. Encyklopedie hledá struktury tak, že prohledává databázi podle chemických názvů. Databáze obsahuje více než 125 000 názvoslovných i nenázvoslovných názvů látek, k nimž je přiřazena chemická struktura. Databáze je prohledávána podle celého názvu či jeho části.
- Tabulka substituentů (Table of Radicals)  (klávesa F6) obsahuje tyto předkreslené struktury: aminokyseliny, některé chránící skupiny, uhlovodíkové zbytky, skupiny obsahující uhlík, cyklické uhlovodíky atd., které kliknutím na vybranou strukturu převedeme na kreslicí plochu (obr.45).

Table of Radicals			
<p>Chains</p> <p>n-C₃ n-C₄ n-C₅ i-Pr i-Bu s-Bu t-Bu i-Am</p>	<p>Cyclohexane</p> 	<p>Amino Acids</p> <p>Ala- Gly- Phe- Arg- His- Pro- Asn- Ile- Ser- Asp- Leu- Thr- Cys- Lys- Trp- Gln- Met- Tyr- Glu- Orn- Val-</p>	
<p>Cycles</p> 			
<p>C-Groups</p> <p>CH=CH₂ $\begin{matrix} \text{CH}=\text{CH}_2 \\ \\ \text{CH}_2 \end{matrix}$ C≡CH CN CF₃ CCl₃ C(i-Pr)₃ CPh₃ CH₂Ph CPh Ph CO(i-Pr) CO(t-Bu) CHO COCH₃ CONH₂ COCl COOH COOMe COOEt COOPh</p>	<p>Miscellaneous</p> <p>NO₂ NCO OAc SO₃H PO₃H₂ ONO₂ NCS NHAc SO₂H OPO₂H₂ NO OCN OCHO SO₂NH₂ OPO₃H₂ ONO SCN NHCHO SO₂Cl OMe N₃ NC NHSO₃H OSO₃H SO₂CF₃</p>	<p>Protecting Groups</p> <p>BOC CBZ DAN TOS TFA ACA FMOC THP 9-BBN</p>	

Obr.45: Tabulka substituentů.

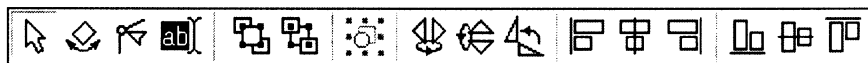
Kreslicí mód:

Pro práci v tomto módu je nutno přepnout na ikonku Draw (obr.46).






Obr.46: Ikonka kreslicího módu.

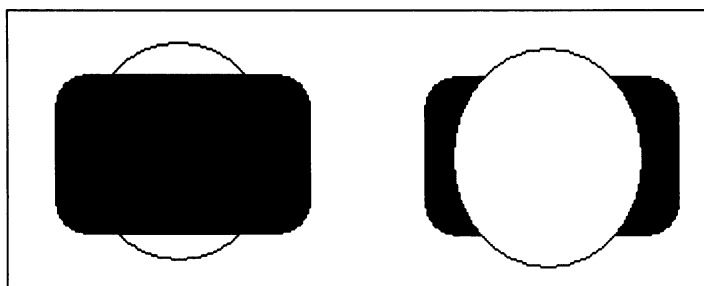
HORNÍ VODOROVNÁ LIŠTA (obr.47):




Obr.47: Vzhled horní vodorovné lišty.

Obsahuje tyto vybrané nástroje a funkce pro kreslení:

- Nástroj úpravy uzlových bodů (Edit Nodes)  umožňuje upravovat tvar a zakřivení nakresleného útvaru.
- Edit Text  v sobě skrývá psaní horního a dolního indexu, lze si navolit barvu, velikost a typ písma. Zde lze psát i písmena řecké abecedy.
- Bring to Front, Send to Back  slouží pro práci s vrstvami (obr.48). Využitelné, když se dva nakreslené objekty překrývají a je potřeba jeden umístit do popředí nebo naopak.







Obr.48: Ukázka práce s vrstvami.

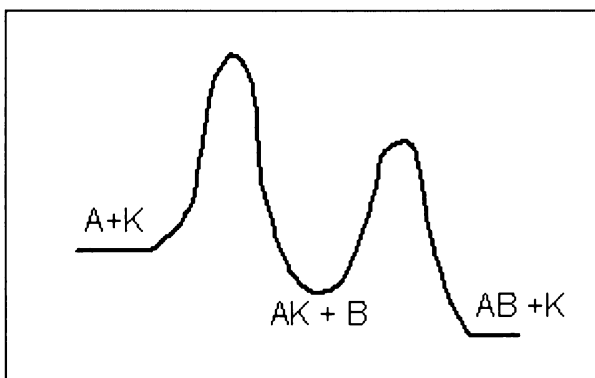
- Nástroj seskupování (Group)  spojí vybrané objekty do jednoho celku. Po seskupení lze kopírovat, pohybovat a měnit velikost všech objektů najednou.
- Seskupené objekty lze opět rozpojit do jednotlivých částí seskupování a to i několikanásobně.
- Nakreslený objekt lze zarovnat vlevo, vpravo, dle vodorovné nebo svislé osy atd.

LEVÁ SVISLÁ LIŠTA:




Zde jsou umístěny tyto vybrané nástroje a funkce:


➤ Geometrické útvary:

- Line  umožňuje nakreslit přímku.
- Arc  umí nakreslit oblouk. Na výběr je oblouk 90°, 120°, 180°, 240° a 270°.
- Curve  slouží k nakreslení libovolné křivky.
- S nástrojem Polyline  lze nakreslit nepravidelné útvary, např. reakční diagram (obr.49).





Obr.49: Reakční diagram.

- Lze nakreslit čtverec a obdélník (Rectangle), zaoblený čtverec a obdélník (Rounded Rectangle) a elipsu (Ellipse).
 - Nástroj Polygon  slouží k nakreslení složitějších grafických útvarů.
- ChemSketch poskytuje i nástroj pro tvorbu tabulek (Table) .
- Nástroj Brackets  umístí vybrané struktury a nakreslené objekty do závorek. V nabídce je kulatá, hranatá a složená závorka. Tato funkce je vhodná při kreslení polymerů.


- Nakreslené objekty lze popsat, popisky a cokoli dalšího lze vkládat do komiksových bublin (Callout) . Jejich velikost a tvar lze pozměnit s nástrojem úpravy uzlových bodů (Edit Nodes).

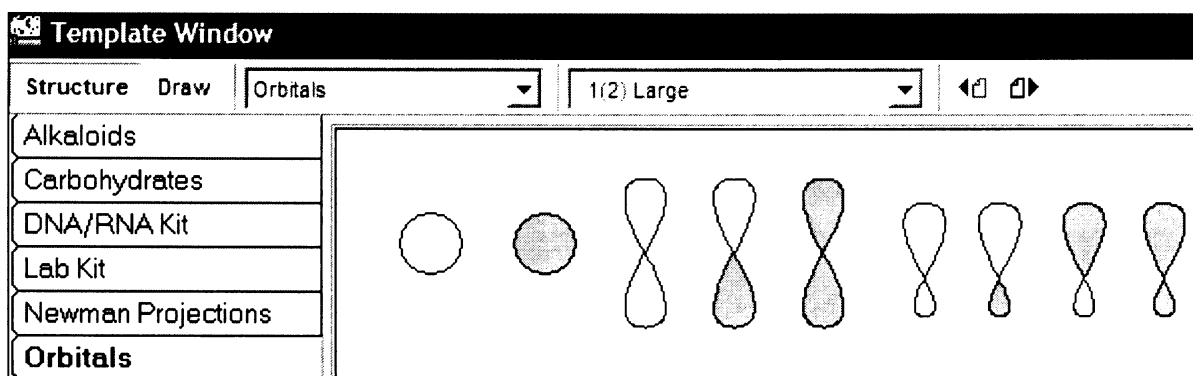
MENU PROGRAMU CHEMSKETCH:

- Menu File: Kromě běžných položek (open, close, save as, print atd.) obsahuje následující funkce:
- Export do formátů pro zobrazování molekul (mol, skc, rxn, chm, cdx, cml) a do grafických formátů pro obrázky (bmp, wmf, dif, gif, tif, pcx, pdf). Exportovat vybranou strukturu lze i jako tzv. OLE objekt (po překopírování např. do Wordu a následné úpravě se objekt otevře v programu ChemSketch).
 - Import lze provést z formátu .mol, .skc, .rxn, .chm, .cdx, .mst, .rpt, .wmf.
- Menu Pages: Obsahuje běžné položky (insert, delete, atd.) a také funkci:
- Color, se kterou lze měnit barvu pracovní plochy, na výběr je z 256 barev.
- Menu Tools:
- Show Aromaticity zobrazí v aromatických sloučeninách aromatický kruh. Opačná funkce Hide Aromaticity aromatický kruh nahradí konjugovanými dvojnými vazbami.
 - Add Explicit Hydrogens zobrazí u sloučeniny navázané vodíky. Opačná funkce Remove Explicit Hydrogens navázané vodíky skryje.
 - Auto Renumbering očísluje všechny atomy v molekule.
 - Generate :
 - Name for Structure  umí pojmenovat vybranou sloučeninu v anglickém jazyce. Tato funkce má několik podmínek použití: Sloučeniny, jež mají být pojmenovány, nemohou mít více než 50 atomů včetně vodíků, mohou obsahovat pouze atomy H, C, N, P, O, S, F, Cl, Br, I, Li, Na, K v jejich běžných vaznostech a mocnoství, mohou obsahovat maximálně tři aromatické kruhy.
 - Stereo Descriptors: Stereodeskriptory S a R k popisu absolutní konfigurace na chirálních atomech. E a Z k popisu konfigurace na dvojných vazbách. Malé r a s k popisu konfigurace pseudochirality.

- ChemSketch umí konvertovat řetězce SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry Specification) na struktury a naopak struktury na řetězce SMILES. Řetězce SMILES jsou řádkovým zápisem, který reprezentuje v jiné podobě zaznamenání toho, co je nakresleno jako strukturní vzorec. Lze říci, že jde o strukturní vzorec v řeči počítačů.
 - SMILES Notation vygeneruje řetězec SMILES
 - Structure from SMILES vygeneruje strukturu z řetězce SMILES.
 - Vygenerovaný řetězec SMILES pro benzen je např. c1ccccc1.
 - Podrobnější informace o řetězcích SMILES lze nalézt na stránce: http://www.epa.gov/medatwrk/Prods_Pubs/smiles.htm .
- ChemSketch umí také převádět řetězce identifikátoru InChI (IUPAC International Chemical Identifier) na strukturní vzorce a naopak převádět strukturní vzorce na řetězce InChI. Opět se jedná o řádkový zápis, který reprezentuje v jiné podobě zaznamenání toho, co je nakresleno jako strukturní vzorec. Řetězce InChI jsou dokonalejší než řetězce SMILES, například pokud jde o přepis absolutní konfigurace.
 - InChI for Structure vygeneruje pro strukturu řetězec InChI
 - Structure from InChI z řetězce vygeneruje strukturní vzorec.
 - Řetězec InChI pro benzen je: 1/C6H6/c1-2-4-6-5-3-1/h1-6H.
 - Detailnější informace o řetězcích InChI lze nalézt na stránce: <http://www.iupac.org/inchi/> .
- Search for Structure  dovoluje prohledávat nejrůznější soubory bez jejich otevření a zjišťovat zda se v nich vyskytují nakreslené chemické vzorce. Jakmile je nalezen strukturní vzorec, může být zobrazen v okně ChemSketch. Tato funkce je ovšem součástí pouze komerční verze programu.
- Calculate: Lze získat tabulku, která obsahuje informace o zvolené sloučenině: sumární vzorec, relativní molekulová hmotnost, procentuální zastoupení jednotlivých prvků, molární refraktivita, molární objem, parachor, index lomu, povrchové napětí, specifická hustota, dielektrická konstanta, polarizabilita a další.

➤ Menu Templates:

- Okno šablon (Template Window)  (klávesa F5) nabízí šablony ke kreslení řady sloučenin: alkaloidy, aminokyseliny, významné anorganické a organické anionty, aromatické sloučeniny, reakční šipky (s odbočkou, rozdvojená, klikatá, velké barevné šipky), bicykly, strukturní vzorce skupin obsahujících C, sacharidy, karoteny, uhlovodíkové řetězce, vše potřebné k sestavení DNA a RNA, fullereny, laboratorní nástroje a nádoby (kádinky, kahan, teploměr, Erlenmayerovy baňky, nálevky, redukce, chladiče, děličky, celá separační, ohřívací, destilační a titrační aparatura), obrázky se vztahem k nebezpečnosti chemických látek, krystalové mřížky, monocyklické alkany, strukturní vzorce skupin obsahujících dusík, heterocykly, nakreslené orbitaly (obr.50), strukturní vzorce sloučenin fosforu, polycykly, polygony, polymery, reakční symboly, steroidy, terpeny a vitamíny.



Obr.50: Ukázka orbitalů v okně šablon.

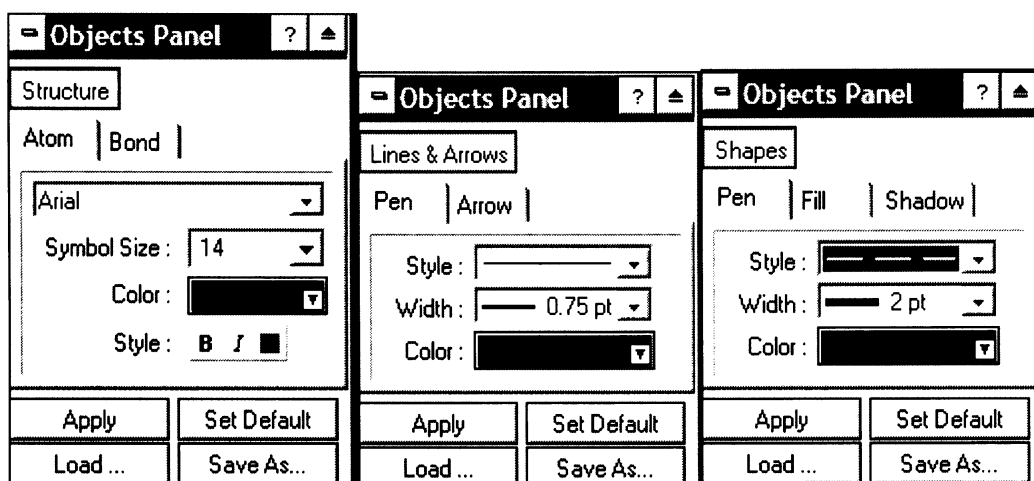
➤ Menu Options:

- Show Grid: Na pracovní ploše lze zobrazit pravidelnou mřížku pro přesnější kreslení.
- Show Palette: Ve spodní části pracovní plochy lze zobrazit paletu barev pro kreslení.

POKROČILÁ EDITACE:

- Při nakreslení sloučeniny, která není chemicky správně (např. se v ní vyskytuje pětivazný uhlík), program upozorní na chybu a uhlík bude ve sloučenině barevně přeškrtnut.

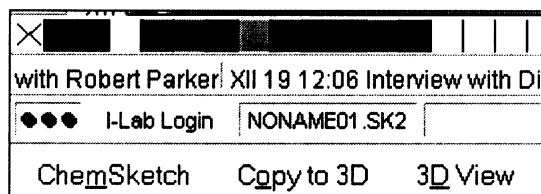
- Tabulka vlastností (Properties): Objeví se po dvojitém kliknutí na zvolený objekt. Nutno mít přepnuto na strukturní mód. Obsahuje tři záložky, ve kterých lze měnit některá nastavení:
 - Common (běžné funkce): Zde lze navolit délku, tloušťku a barvu vazby, zobrazení nebo skrytí všech nebo pouze koncových uhlíků ve struktuře.
 - Atom: Lze měnit např. barvu (na výběr je 256 barev) atomu, připojené vodíky, zobrazení nebo skrytí atomu, náboj, mocenství, isotop a číslování atomů v celé molekule.
 - Bond (vazba): Lze vybrat tloušťku, barvu a typ vazby.
- Tabulku Objects Panel (obr.51) lze získat po dvojitém kliknutí na uvedený objekt. Nutno mít přepnuto na kreslicí mód. V tabulce lze měnit některá nastavení:
 - Atom: Velikost symbolu atomu, barvu a styl písma.
 - Bond (vazba): Barvu a tloušťku vazby.
 - Arrow (šipka): Barvu, tloušťku a styl (tečkovaná, čárkovaná, plná) čáry, typ šipky a zda-li má být hrot šipky na začátku nebo na konci.
 - Line, Arc, Curve, Polyline: Barvu, tloušťku a styl čáry.
 - Rectangle, Rounded Rectangle, Ellipse, Polygon, Bracket: Barvu, tloušťku a styl ohraničující čáry, barvu výplně, stínování a vzorek (kostkovaný, proužkovaný atd.) dané barvy.



Obr.51: Vzhled tabulky Objects Panel.

ACD/3D Viewer:

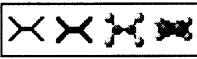








Umí převést strukturní vzorec látky na její model, se kterým lze dále pracovat. Pro práci ve trojrozměrném prohlížeči je nutné v menu ACD/Labs zatrhnout položku 3D Viewer. Poté se na dolní liště v levém rohu objeví ikona Copy to 3D (obr.52), jež umožňuje přechod do prostorového zobrazení molekuly.



Obr.52: Ikona 3D Viewer.

HORNÍ VODOROVNÁ LIŠTA:








Nabízí tyto vybrané nástroje a funkce pro práci s modelem:

- Model lze znázornit různými způsoby zobrazení : tyčinkový, kalotový, kuličkový a drátový. Lze zobrazit Van der Waalsovy poloměry kolem jednotlivých atomů v molekule.
- Increase/Decrease Atomic Radii  lze využít ke zvětšení/zmenšení velikosti atomů.
- Nástroj délka vazby (Bond Length)  slouží ke změření vazby mezi vybranými atomy, popř. k nastavení libovolné délky vazby v molekule či struktuře.
- Nástroj pro změření velikosti vazebného úhlu (Angle)  a torzního úhlu (Torsion Angle) , popř. k nastavení vazebného a torzního úhlu v molekule či struktuře.
- Pomocí funkce Invert Center  lze stereodeskriptor R pro chirální centrum změnit na S.
- Set Colors  umožňuje zvolit barvu pracovní plochy, barvu jednotlivých atomů, barvu vybraného fragmentu molekuly. Na výběr je z 16ti barev.
- Během rotace může sloučenina měnit styly zobrazení pomocí funkce Auto Rotate and Change Style .
- Model lze optimalizovat ve 3D , v molekule se zobrazí všechny navázané vodíky.

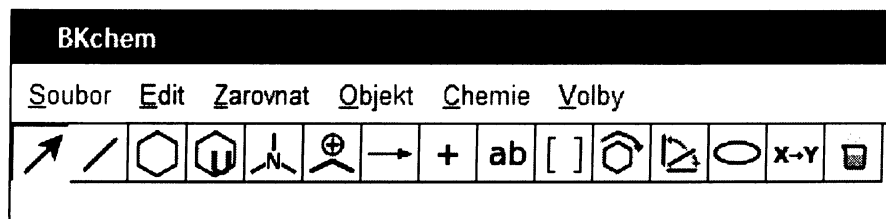
ACD/CHEMBasic:

ChemBasic obsahuje tzv. „goodies“-„dobrůtky“, které se projeví jako řada dalších speciálních funkčních ikon mezi ikonami ChemSketch, lze je nalézt ve vodorovném menu ChemSketch.

Jaké zajímavé funkce jsou k dispozici:

- Table Wizard : Vytváří tabulky nebo rovná objekty podle určeného počtu sloupců a řádek.
- Replace Element : Nahradí jeden druh atomů jiným.
- Solution Calculator : Vypočte hmotnost sloučeniny nutnou pro přípravu roztoku o daném objemu a molární koncentraci.
- Label Pointer : Vytváří štítky na chemikálie, které obsahují zvolenou nakreslenou sloučeninu a její název, relativní molekulovou hmotnost a sumární vzorec.
- Peptide Builder : Vytvoří 3D peptidovou strukturu ze sekvence aminokyselin.
- Carbohydrate Builder : Vytvoří strukturu oligosacharidu ze zkratkovitého zápisu.
- Nucleic Acid Builder : Vytvoří 3D nukleovou kyselinu (DNA, RNA) ze zadané vstupní sekvence.










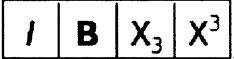
5.2 BKCHEM 0.12.0 (obr.53)








Obr.53: Ukázka z BKchem.

HORNÍ VODOROVNÁ LIŠTA:

Zde jsou umístěny zajímavé nástroje a funkce využitelné při kreslení:

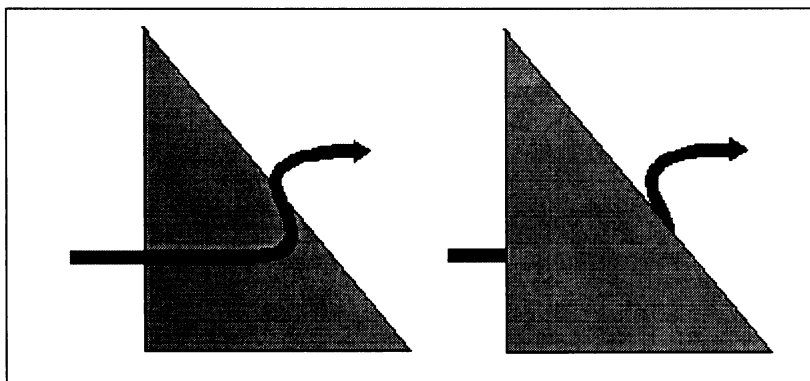
- Vazeb : Jednoduché, dvojné, trojné, stereo, čárkované a tečkované vazby.
 - Pevná délka : Délka kreslené vazby je zafixována na přednastavenou hodnotu.
 - Volný styl : Délku vazby a její orientaci si lze navolit s pomocí myši.
- Šablony : Obsahují 13 předkreslených šablon: benzen, cyklické uhlovodíky s 3-8 uhlíky, furan, pyrrol, thiofen, purin, židličková konformace cyklohexanu.
- Značka : Z atomu lze vytvořit radikál, biradikál, kationt, aniont a na atom lze přidat volný elektronový pár.
- Reakční schémata:
 - Reakční šipky : šipka s pevnou délkou, šipku s libovolnou délkou, šipku složená z pevných čar a různě zakřivené šipky.
 - Znaménko plus .
 - Nástroj Reaction : umístí všechny složky zvolené reakce do barevných rámečků.
- Text : Slouží k vytvoření popisek nakreslených struktur. Popisky jsou umístěny do rámečku. Zde jsou umístěna tlačítka pro volbu stylu písma (kurzíva, tučné) a pro psaní horního a dolního indexu .

- Závorky : Nakreslené objekty a vybrané struktury lze umístit do hranatých závorek. Vhodné při kreslení polymerů.
- Rotace 2D a 3D : Tažením označeného atomu či vazby lze otáčet molekulu okolo jejího geometrického středu.
- Transformační mód : Slouží k zarovnání zvolené vazby do horizontální nebo vertikální pozice, lze provést překlopení molekuly s centrem v zadaném atomu (středu vazby) a zrcadlení molekuly dle zvolené přímky.
- Vektorová grafika: Lze kreslit čtverec, obdélník, ovál, kruh a různé nepravidelné útvary pomocí nástroje Polyline  a Polygon .

MENU BKCHEMU:

Obsahuje následující vybrané funkce:

- Menu Soubor: Kromě běžných položek (otevřít, uložit, otevřít, konec) obsahuje:
 - Export lze provést do svg, .cml, .xml, .mol, .pdf, .eps, .zip, .png.
 - Import lze provést z formátu .mol, .cml, .xml.
- Menu Zarovnat:
 - Dva a více označených objektů lze vzájemně zarovnat nahoru, dolů, doprava, doleva, horizontálně nebo vertikálně.
- Menu Objekt:
 - Změna velikosti vybrané struktury.
 - Přenést dopředu a poslat dozadu (obr.54): Slouží pro práci s vrstvami, např., když se dva objekty překrývají a jeden nebo druhý je potřeba umístit do popředí.



Obr.54: Práce s vrstvami.

- Konfigurovat:
 - Atom: Lze provést změnu náboje, zobrazit nebo skrýt název atomu, zobrazit nebo skrýt vodíky.
 - Vazba: Lze změnit barvu (výběr ze 64 barev + možnost vytvoření dalších barev), šířku vazby a klínku u stereo vazeb, poměr délky dvojně vazby.
 - Molekula: Lze provést všechny změny jako u atomu a vazby.
 - Geometrické útvary: Lze provést změnu barvy a šířky ohraničující čáry, barvu výplně daného objektu.
 - Reakční šipka: Lze změnit barvu, velikost, směr a tloušťku čáry šipky. Dále, zda-li má být hrot šipky na začátku či na konci nebo na obou stranách a zda-li má být šipka vyhlazená (se zakulacenými rohy u zakřivené šipky).
 - Závorky: Lze zvolit jejich barvu, velikost a tloušťku čáry.
 - Rámeček s popiskami: Lze měnit barvu a velikost písma, barvu výplně.
- Menu Chemie:
 - Informace: Poskytuje údaje o označené molekule: sumární vzorec, relativní molekulová hmotnost, procentuální zastoupení jednotlivých prvků v molekule.
 - Kontrola chemie: Zkontroluje správnost nakreslené sloučeniny.
 - Spočítat oxidační čísla: Určí oxidační čísla u zvolených atomů.
 - Generuj řetězec SMILES a InChI pro vybranou sloučeninu. Opačná funkce není k dispozici.
 - BKchem umí vygenerovat řetězce SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry Specification) ze struktury. Řetězce SMILES jsou řádkovým zápisem, který reprezentuje v jiné podobě zaznamenání toho, co je nakresleno jako strukturní vzorec. Lze říci, že jde o strukturní vzorec v řeči počítačů. Podrobnější informace o řetězcích SMILES lze nalézt na http://www.epa.gov/medatwrk/Prods_Pubs/smiles.htm.
 - BKchem umí také vygenerovat řetězce identifikátoru InChI (IUPAC International Chemical Identifier) ze strukturního vzorce. Opět se jedná o řádkový zápis, který reprezentuje v jiné podobě zaznamenání toho, co je nakresleno jako strukturní vzorec. Řetězce InChI jsou dokonalejší

než řetězce SMILES, například pokud jde o přepis absolutní konfigurace. Detailnější informace o řetězcích InChI lze nalézt na stránce: <http://www.iupac.org/inchi/> .

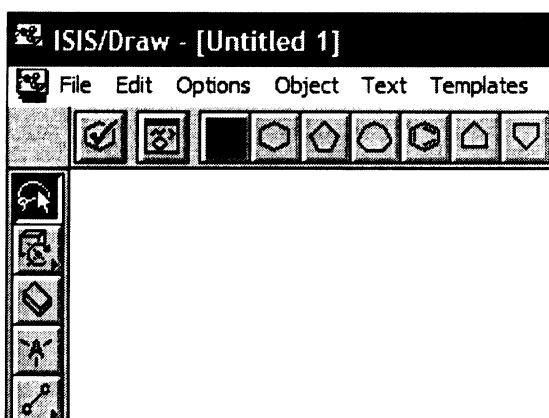
➤ Menu Volby:

- Jazyk: BKchem lze nainstalovat v německém, francouzském, polském, anglickém a českém jazyce.

➤ Přídavné funkce (Pluginy):

- Změření úhlu mezi vybranými vazbami.
- Barevné označení aromatických vazeb v aromatických sloučeninách.

5.3 MDL ISIS/DRAW 2.5 (obr.55)






Obr.55: Ukázka z ISIS/Draw.

HORNÍ VODOROVNÁ LIŠTA (obr.56):






Obr.56: Horní vodorovná lišta.







Obsahuje tyto vybrané nástroje a funkce pro kreslení:

- Run Chem Inspektor : U nakreslené reakce podá informace o počtu výchozích látek a produktů, relativní molekulové hmotnosti a sumárním vzorci výchozích látek a produktů apod.
- Open Last Template Page  otevře naposledy použitou stranu šablon.
- Draw Previous Template  slouží k nakreslení předchozí vybrané šablony.
- Šablony: Obsahuje tyto předkreslené šablony: cyklohexan, cyklopentan, cykloheptan, benzen, cyklopentadien, cyklobutan a cyklopropan.

LEVÁ SVISLÁ LIŠTA:

Jaké zajímavé nástroje a funkce obsahuje:

- Funkce 2D Rotate umožňuje rotovat s objektem v horizontální rovině. 3D Rotate slouží k rotaci objektu v prostoru .
- Vazby  : Jednoduchá, dvojná, trojná, stereo vazby. Délku vazby lze volit myší při stisknutí klávese Shift. Orientaci vazby na kreslicí ploše lze korigovat pouze s myší.

- Řetězce (Chain) : Slouží k nakreslení dlouhých uhlovodíkových řetězců obsahující dva a více uhlíků. Použitelné např. při kreslení mastných kyselin.
- Reakční schémata:
 - Znaménko plus .
 - Reakční šipky (Arrow) : Na výběr je mnoho druhů reakčních šipek, např. obousměrná, zakroucená, tečkovaná, čárkovaná, různě zakončené šipky, atd.
- Závorky (Brackets) : Nakreslené a vybrané objekty lze umístit do kulatých a hranatých závorek. Využitelné např. při kreslení polymerů.
- Text : Vytvoření popisek k nakresleným objektům.
- Geometrické útvary: 
 - Straight Line slouží k nakreslení přímky.
 - S Continuous Line lze kreslit nepravidelné útvary.
 - S Circular Arc je možno nakreslit zakulacený oblouk.
 - Eliptical Arc je určeno k nakreslení eliptického oblouku.
 - Lze kreslit obdélník (Rectangle), zakulacený obdélník (Rounded Rectangle), elipsu (Ellipse) a další nepravidelné útvary (Polygon).

MENU ISIS/DRAW:

V sobě skrývá uvedené vybrané nástroje a funkce:

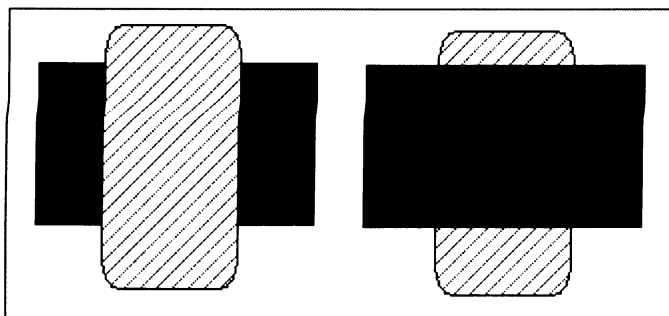
- Menu File: Kromě běžných funkcí (open, insert, save as, close atd.) nabízí:
 - Export do formátu .mol, .rxn, .tgf, .bsd, .jpg. Nakreslené obrázky lze exportovat jako tzv. OLE objekt (po překopírování např. do Wordu a následné úpravě se objekt otevře v programu ISIS/Draw).
 - Import z formátu .mol, .rxn, .tgf, .bsd, .seq.
- Menu Options:
 - Show Grid: Zobrazí na kreslicí ploše pravidelnou mřížku pro přesnější kreslení.
 - Show Ruler: Na horním a levém okraji kreslicí plochy se objeví pravítko pro přesnější kreslení.
- Menu Object:
 - Edit Objects:

- Atom: Lze provést změnu barvy (výběr ze 64 barev + další možnost vytvoření vlastních barev), velikosti, symbolu atomu, možných isotopů, náboje, oxidačních čísel a lze tvořit radikály.
 - Symbol atomu lze vybrat z Periodické tabulky prvků (obr.57), která je pod Edit Atom ukryta. Obsahuje informace o relativní molekulové hmotnosti, typických oxidačních číslech a pořadí prvku v tabulce.

Periodic Table																																															
H	C															6	He																														
Li	Be	Mass: 12.0112										B	C	N	O	F	Ne																														
Na	Mg	Val: 4										Al	Si	P	S	Cl	Ar																														
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr																														
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe																														
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn																														
Fr	Ra																																														
<table border="1"> <tr> <td>La</td><td>Ce</td><td>Pr</td><td>Nd</td><td>Pm</td><td>Sm</td><td>Eu</td><td>Gd</td><td>Tb</td><td>Dy</td><td>Ho</td><td>Er</td><td>Tm</td><td>Yb</td><td>Lu</td> </tr> <tr> <td>Ac</td><td>Th</td><td>Pa</td><td>U</td><td>Np</td><td>Pu</td><td>Am</td><td>Cm</td><td>Bk</td><td>Cf</td><td>Es</td><td>Fm</td><td>Md</td><td>No</td><td>Lr</td> </tr> </table>																		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu																																	
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr																																	

Obr.57: Periodická tabulka prvků.

- Vazba: Lze změnit typ vazby (jednoduchá, dvojná, trojná, aromatická atd.), velikost, délku, barvu a sílu čáry vazby.
- Molekula: Lze měnit vše, co je uvedeno u editace atomu a vazby.
- Geometrické útvary: Lze měnit barvu, tloušťku a styl (tečkovaná, čárkovaná, plná) ohraničující čáry, barvu a styl (např. proužkovaná, kostičkovaná) výplně.
- Reakční šipky: Lze si zvolit její orientaci na ploše, délku, barvu, tloušťku čáry a styl čáry (tečkovaná, čárkovaná, plná), velikost a tloušťku hrotu a jeho umístění na začátku nebo na konci šipky.
- Závorky: Lze změnit velikost, barvu, tloušťku a styl čáry (tečkovaná, čárkovaná, plná)
- Text: Lze si navolit typ, barvu a velikost písma.
- Bring To Front a Send To Back (obr.58): Slouží pro práci s vrstvami, např., když se dva útvary překrývají a je potřeba dát jeden do popředí.

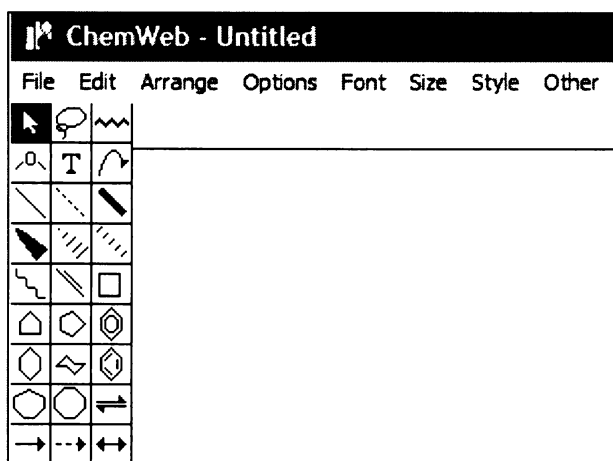


Obr.58: Ukázka práce s vrstvami.

- Align: Seřazení dvou a více nakreslených struktur. Struktury lze seřadit horizontálně nebo vertikálně: nahoru, dolů, na střed, vpravo a vlevo.
 - Clean Molecule: Zlepšení vzhledu vybrané struktury. Všechny vazby a úhly jsou stejně velké.
 - Flip: Převrácení celé vybrané struktury horizontálně nebo vertikálně.
 - Rotate: Rotace pouze podle vazby, horizontální nebo vertikální.
 - Group: Spojí vybrané objekty do jednoho celku, pak lze s nimi pracovat jako s jedním celkem.
 - Obrácenou funkcí je nástroj Ungroup, který spojené objekty rozpojí. S každým objektem lze pracovat opět individuálně.
 - Crop: Skryje části vně obdélníkové oblasti, kterou specifikujeme.
 - Smooth: Přebuduje a uhladí vybraný nepravidelný útvar nebo nepřetržitou linku do zakulacených obrysů.
 - Unsmooth: Opačná funkce k Smooth. Zakulacené obrysy převede na původní zašpičatělé.
- Menu Templates:
- Obsahuje mnoho předkreslených šablon ihned k použití. Jsou to např.: alfa a beta D-cukry, aminokyseliny, aromatické sloučeniny (benzen, naftalen, anthracen), mnoho druhů reakčních šipek, báze pro tvorbu DNA a RNA, bicyklické sloučeniny, karbonylové skupiny a sloučeniny, uhlovodíkové řetězce, funkční skupiny (PO_4^{3-} , NO_3^-), cyklické sloučeniny (benzen, cyklohexan), heterocykly (furan, pyridin, thiazol, pyrrol), skupiny s dusíkem (kyanid, azid, nitrát), nakreslené orbitály, skupiny obsahující fosfor (fosfit, fosfát) atd.
- Menu Chemistry:

- Residue: Zde lze tvořit názvy nebo jen zkratky pro nakreslené struktury. Například Ph pro fenyl, Met pro methyl, atd.
 - Calculate Mol Values: Nástroj k určení relativní molekulové hmotnosti, sumárního vzorce a procentuálního zastoupení jednotlivých prvků v molekule.
 - View Molecule in RasMol: Součástí ISIS/Draw je propojení na program RasMol, ve kterém lze vizualizovat a analyzovat molekuly.
 - Renumber Atoms: Tento nástroj umí přečíslovat atomy.
- Kontrola chemie: program upozorní na chybu v nákrese, kterou lze okamžitě odstranit. Při překročení vaznosti se objeví tabulka Valence Warning.


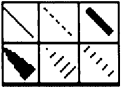
5.4 CHEMWEB 3.1.4 (obr.59)




Obr.59: Ukázka části ChemWebu.

SVISLÁ LIŠTA:

Obsahuje následující vybrané nástroje a funkce, které souvisí s kreslením a popř. jejich význam není zřejmý, ale jsou analogické jiným programům.

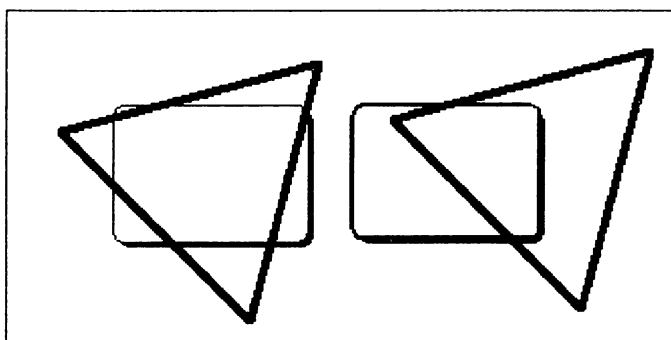
- Řetězce : Lze nakreslit dlouhé uhlovodíkové řetězce, např. při kreslení mastných kyselin a jejich derivátů.
- Vazby: jednoduchá, dvojná, trojná, čárkovaná a tučná, stereo vazby a nedefinované vazby. . Libovolně dlouhou vazbu lze nakreslit s držením klávesy Shift.
- Šablony: Cyklobutan, cyklopentan, cyklohexan a jeho židličková konformace, cykloheptan, cyklooktan a orbitaly.
- Reakční schémata:

- Reakční šipky: Jednoduchá, zpětná, obousměrná, jednoduchá čárkovaná. S nástrojem  lze nakreslit libovolně velkou a zakřivenou šipku, s hrotem na začátku/na konci nebo na začátku i na konci. Libovolně dlouhou reakční šipku lze nakreslit s držením klávesy Shift.
- Závorky: Lze nakreslit hranaté, kulaté a složené závorky. Využitelné např. při kreslení polymerů.
- Geometrické útvary: Obdélník, zaoblený obdélník, trojúhelník a nepravidelné útvary.
- Lze nakreslit anionty, kationy a radikály.

MENU CHEMWEB:

V sobě ukrývá vybrané nástroje a funkce:

- Menu File: Kromě běžných funkcí (new, open, save as) nabízí tyto funkce:
 - Nakreslené struktury lze exportovat do formátu .cw2, .wmf, .scf, .mol, .chm, .gif.
- Menu Arrange:
 - Bring to Front a Send to Back (obr.60) slouží pro práci s vrstvami. Využitelné při překrývání dvou struktur, z nichž je potřeba dát jednu do popředí.



Obr.60: Práce ve vrstvách.

- Nástroj Group spojí všechny vybrané objekty do jednoho celku, pak lze s nimi pracovat jako s jedním objektem.
- Opačnou funkcí je Ungroup, která spojené objekty rozpojí opět do jednotlivých struktur.
- Rotate: Nakreslenou strukturu lze pootočit dle zvoleného úhlu.
- Flip: Nakreslený objekt lze překloupat horizontálně nebo vertikálně.

- Nástroj Align slouží k seřazení dvou a více nakreslených struktur. Struktury lze seřadit do řady horizontálně nebo vertikálně: vpravo, vlevo, na střed, nahoru a dolů.
- Menu Options:
- Show Rulers : Lze zobrazit pravítko v horní a levé části kreslicí plochy, určené pro přesnější kreslení objektů.
 - Show Reduced View: Lze zobrazit malé okénko, které je součástí pracovní plochy a jsou v něm vidět všechny zmenšené nakreslené struktury.
 - Color: Změna barvy popisek, vazeb, atomů, struktur, ohraničujících čar nakreslených objektů. Na výběr je 8 barev.
 - Set Background Color: Změna barvy kreslicí plochy.
 - Line Width: Změna tloušťky vazby, ohraničující čáry, šipky, atd.
- Menu Style:
- Zde jsou k dispozici určité typy písma. Také je zde umístěný nástroj pro psaní horního a dolního indexu.
- Menu Other:
- Calculate mass: Funkce, která slouží k určení sumárního vzorce, relativní molekulové hmotnosti a procentuálního zastoupení jednotlivých prvků v molekule.
 - Check chemistry: Zkontroluje správnost nakreslené struktury a ukáže všechny chyby v zobrazení dle názoru programu, které lze ihned opravit.
 - Clean up: Upraví nakreslený objekt, který tak má následně stejně dlouhé vazby a stejně velké vazebné úhly.
 - Periodic table: K dispozici je periodická tabulka prvků (obr.61), která prvotně slouží k vkládání atomů potřebných ke kreslení struktur. U každého prvku se ukáže relativní molekulová hmotnost, pořadí prvku v periodické tabulce prvků a možná oxidační čísla. U některých prvků se zobrazí sloučeniny nebo skupiny. Např. u C: CH₂, Me, Et, C₆H₄; Hg: HgCl, HgBr; O: COOH, OH, CHO, CO; S: SH, SO, SOCl, SOBr.

H	7																3,5	He
Li	Be	N										B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg	14.00										Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac																
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

Obr.61: Periodická tabulka prvků.

6. Srovnání nejdůležitějších funkcí jednotlivých programů

VYBRANÉ FUNKCE	ChemSketch	BKchem	ISIS/Draw	ChemWeb
Pravítko na kreslicí ploše	ano	ne	ano	ano
Mřížka na kreslicí ploše	ano	ne	ano	ne
Kreslení iontů a radikálů	ano	ano	ano	ano
Kreslení stereo vazeb	ano	ano	ano	ano
Periodická tabulka prvků	ano	ne	ano	ano
Databáze šablon	ano	ano	ano	ano
Tvorba tabulek	ano	ne	ne	ne
Popisování nakreslených objektů	ano	ano	ano	ano
Číslování atomů	ano	ano	ano	ne
Určení sumárního vzorce a relativní molekulové hmotnosti	ano	ano	ano	ano
Generování názvu sloučeniny	ano	ne	ne	ne
Generování tautomerů	ano	ne	ne	ne
Generování stereodeskriptorů	ano	ne	ne	ne
Generování řetězce SMILES a InChI a naopak	ano	pouze generování	ne	ne
Znaménko plus	ano	ano	ano	ne
Reakční šipky	ano	ano	ano	ano
Experimentální podmínky	ano	ne	ne	ne
Kalkulátor reakčních dat	ano	ne	ne	ne
Převrácení struktur	ano	ano	ano	ano
2D a 3D rotace	ano	ano	ano	pouze 2D
Zarovnání objektů na ploše	ano	ano	ano	ano
Seskupení objektů	ano	ne	ano	ano
Kreslení a práce ve vrstvách	ano	ano	ano	ano
Upozornění na chybu v nákresu	ano	ano	ano	ano
Export do formátu .pdf	ano	ano	ne	ne
Podpora funkce OLE	ano	ne	ano	ne
Hodnocení celkem	90%	50%	70%	30%

7. Slovníček

ANGLICKY	ČESKY	ANGLICKY	ČESKY
add	přidat	new	nový
align	seřadit	open	otevřít
angle	úhel	paste	vložit
arc	oblouk	pattern	vzorek
arrow	šipka	polygon	uzavřený útvar
attach	přidělit	polyline	otevřený útvar
bold	tučné (písmo)	polymers	polymery
bond	vazby	print	tisknout
bracket	závorka	properties	vlastnosti
calculate	vypočítat	reaction	reakce
callout	bublina (popisky)	rectangle	obdélník
chain	řetězec	redo	o krok dál
check	překontrolovat	rename	přejmenovat
close	zavřít	renumber	přečíslovat
color	barva	remove	odstranit
copy	kopírovat	replace	nahradit
crop	oříznout	resize	změnit velikost
curve	křivka	rotate	rotovat
delete	vymazat	rounded	zaoblený
density	hustota	ruler	pravítko
draw	kreslit	save	uložit
edit	upravovat	scale	měřítka, stupnice
ellipse	elipsa	select	vybrat
eraser	guma	send	poslat
exit	zavřít	set	umístit
fill	vyplnit	shadow	stínování
flip	překlopit	show	ukázat
formula	vzorec	smooth	vyhladit
generate	generovat	subscript	dolní index
grid	mřížka	superscript	horní index
group	seskupit objekty	template	šablony
hide	skrýt	torsion	torzní
insert	vložit	underline	podtržené písmo
italic	kurzíva	undo	zpět
length	délka	ungroup	rozpojit ze skupiny
line	přímka	volume	objem
molar	molární	weight	hmotnost
move	pohybovat	width	šířka

8. Závěr

Bakalářská práce se zabývá čtyřmi zdarma dostupnými chemickými kreslicími programy, ChemSketch 10.0, BKchem 0.12.0., ISIS/Draw 2.5 a ChemWeb 3.1.4. Všechny programy jsou popsány formou recenze a jsou zhodnoceny dle nabízených důležitých a zajímavých funkcí. Byla vytvořena tabulka, která vzájemně porovnává popisované programy dle některých vybraných funkcí. Každý program je doplněn subjektivním procentuelním ohodnocením a dále jsou u něj uvedeny jeho klady a zápory. Pro snadnější zvládnutí programu je v dispozici malý slovníček, ve kterém jsou přeloženy některé vybrané názvy nástrojů a funkcí.

Každý program má své přednosti, ale bohužel i drobné či závažnější nedostatky.

ACD/ChemSketch nabízí v konkurenci všech ostatních programů nejvíce funkcí, disponuje velice vydařeným grafickým rozhraním a stále se, alespoň prozatím, objevují novější verze. Na druhou stranu je potřeba na osvojení všech jeho funkcí delší doba.

BKchem nabízí oproti programu ChemSketch velmi málo funkcí a jeho grafické rozhraní není tak zdařilé; již delší dobu neprochází vývojem. Výhodou programu BKchem je však kratší doba na osvojení a možnost instalace v českém jazyce. BKchem lze také jako jediný z recenzovaných programů použít v prostředí Linux.

MDL ISIS/Draw nabízí ve srovnání s ChemSketchem méně funkcí, jeho grafické rozhraní nepatří mezi nejhorskí. ISIS/Draw v porovnání s ostatními programy vyžadoval nejkratší dobu na osvojení.

ChemWeb obsahuje ve srovnání s ChemSketchem velmi strohou nabídku funkcí a jeho grafické rozhraní není vůbec zdařilé; již několik let neprochází žádným vývojem. Na osvojení programu je potřeba mnohem delší doba než u všech ostatních.

Všechny programy jsou dostupné v anglické verzi, jediný BKchem nabízí práci ve více jazycích, z nichž jeden je čeština.

Po vzájemném srovnání recenzovaných chemických kreslicích programů jsem dospěla k závěru, že díky mnoha funkcím, příjemnému uživatelskému prostředí a efektivní práci je momentálně nejlepší program ACD/ChemSketch.

9. Použité zdroje

- [1] Chemicus (verze z roku 2004): Media Trade, bvm a Heureka-Klett, distributor: Media Trade Interactive, s.r.o., Pod Vinohradem 2, Praha 4, 147 00 www.cd-rom.cz. Chemická laboratoř 1 a 2 (verze z roku 2006), autoři: LANGMaster, YDP Interactive Publishing, distributor: LANGMaster International, s.r.o., Branická 107, Praha 4, 147 00, www.langmaster.cz.
- [2] Nývltová, E.: Využití multimediálních aplikací ve výuce chemie. Bakalářská práce. Univerzita Karlova. 2007.
- [3] Klouda, P.: Chemie na počítači. 2001.
- [4] ZŠ Jihlava: Rudolf Chloupek, 2007. Kurz práce s chemickými programy. [online]. [cit. 2007-6-6]. Dostupný z URL: <http://www.sweb.cz/rchloupek/plan%20skolni%20modulu%20PM.doc>.
- [5] ZŠ Opava: Modelování v aplikaci ChemSketch. [online]. [cit. 2007-6-6]. Dostupný z URL: <http://www.zsnb.opava.cz/skoleni/chemsketch.html>.
- [6] Cídllová, H.: Využití programu ChemSketch ve výuce. [online]. [cit. 2007-6-6]. Dostupný z URL: <http://svp.muni.cz/>.
- [7] Janků, Z.: Program ACD-Labs ChemSketch při výuce chemie na gymnáziu. In: Chemické listy 97. 2003. s.57-78.
- [8] Feltl, T.: Výuka chemie nejen s interaktivní tabulí-užitečné programy pro zpestření výuky a podpoření samostudia žáků. [online]. [cit. 2007-6-6]. Dostupný z URL: <http://www.gynome.nmmn.cz/board/fls/chemie/>.
- [9] PŘF UK: Petr Šmejkal, Václav Martínek, 2007. Počítače a internet v chemii. [online]. [cit. 2007-6-7]. Dostupný z URL: <http://twinsen.natur.cuni.cz/sis/predmety/index.php?do=predmet&kod=C280S24>
- [10] Šmejkal, P., Martínek, V.: Rozšířená výuka ICT pro studenty učitelských oborů s chemií na PŘF UK. [online]. [cit. 2007-6-6]. Dostupný z URL: <http://www.everest.natur.cuni.cz/konference/2006/prispevek/smejkal.pdf>.
- [11] Šmejkal, P., Čtrnáctová, H., Martínek, V., Urválková, E.: Motivační prvky ve výuce středoškolské chemie. [online]. [cit. 2007-6-6]. Dostupný z URL: <http://www.otevrena-veda.cz/ov/users/image/default/C1/kurzy/chemie/26smejkal.pdf>.
- [12] Šmejkal, P., Martínek, V., Bojkovský, M.: Termodynamika-Nový elektronicky zpracovaný text pro výuku na SŠ a VŠ. [online]. [cit. 2007-6-6]. Dostupný z URL: <http://www.everest.natur.cuni.cz/konference/2007/prispevek/smejkal.pdf>.

- [13] Nesměrák, K.: Informace o analytické chemii. [online]. [cit. 2007-6-6]. Dostupný z URL: <http://www.natur.cuni.cz/analchem/nesmerak/iac0607_11.pdf>.
- [14] PŘF UK: Chemická informatika. Jindřich Jindřich, 2007. [online]. [cit. 2007-6-7]. Dostupný z URL: <<http://twinsen.natur.cuni.cz/sis/predmety/index.php?do=predmet&kod=C270P10>>.
- [15] Čtrnáctová, H., Nová, P., Poláková, L.: Přejídné prvky v učivu chemie-modelování struktury prvků a sloučenin. In: Mezinárodní seminář. Modelování ve výuce chemie. Hradec Králové: Gaudeamus, 2005, ISBN 80-7041-463-4.
- [16] VŠCHT Praha: Pavel Drašar, 2007. Seminář chemického modelování. [online]. [cit. 2007-6-7]. Dostupný z URL: <http://www.vscht.cz/eso/predmety/N342026_cze.html>.
- [17] Univerzita Palackého Olomouc: Cvičení s programem ChemSketch. [online]. [cit. 2007-6-7]. Dostupný z URL: <<http://fch.upol.cz/skripta/chemsoft/chemsoft.htm>>.
- [18] Raich, I.: Strukturní databáze MDL. [online]. [cit. 2007-6-7]. Dostupný z URL: <<http://www.VSCHT.cz/lam/new/prednaskaMDL.pdf>>.
- [19] Jandera, P.: Molekulové modelování a teoretická chemie na PC. In: Chemické listy 94. 2000. s. 28-38.
- [20] Drašar, P.: Markushovy strukturní vzorce. In: Chemické listy 96. 2002. s. 827-852.
- [21] Drašar, P., Valter, B., Paleta, O.: Grafické vyjádření chiralitv chemických sloučenin. In: Chemické listy 97. 2003. s.1027-1046.
- [22] Hlavatý, J., Macháček, J.: Vizualizační programy ve výuce středoškolské chemie. In: Profil učitele chemie. Hradec Králové: Gaudeamus, 2002, ISBN 80-7041-868-0.
- [23] Slavík, M., Grégr, J., Stibor, I.: Vizualizační freeware pro výuku chemie. In: Aktuální otázky výuky chemie XII. Hradec Králové: Gaudeamus, 2002, ISBN 80-741-437-5.
- [24] Slavík, M., Grégr, J., Bicanová, J.: Náměty pro využití molekulární grafiky ve výuce chemie. In: Informační technologie ve výuce chemie. Hradec Králové: Gaudeamus, 2004, ISBN 80-7041-198-8.
- [25] Slavík, M., Grégr, J., Jodas, J.: Využití ICT v učebně chemie. In: Aktuální otázky výuky chemie XV. Hradec Králové: Gaudeamus, 2005, ISBN: 80-7041-511-8.
- [26] Slavík, M., Grégr, J., Jodas, J.: Freeware pro výuku chemie. In: Aktuální otázky výuky chemie XV. Hradec Králové: Gaudeamus, 2005, ISBN: 80-7041-511-8.
- [27] Slavík, M., Grégr, J., Jodas, J., Příhonská, J.: Rozvoj prostorové představivosti v chemii. In: Aktuálně trendy vo vyučování přírodovědných predmetov. Bratislava: Science Edu, 2007, ISBN 978-80-88707-90-5.

- [28] Nápravník, V.: ICT ve výuce chemie na katedře FPE ZČU v Plzni. In: Soudobé trendy v chemickém vzdělávání (Aktuální otázky výuky chemie XVI.). Hradec Králové: Gaudeamus, 2006, ISBN 80-7041-560-6.
- [29] Li, Z., J., Wan, H., G., Shi, Y., H., Ouyang, P., K.: Personal experience with four kinds of chemical structure drawing software: Review on ChemDraw, ChemWindow, ISIS/Draw, and ChemSketch. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*. 44 (5): 1886-1890, 2004.
- [30] Gunda, T., E.: Chemical structure drawing programs. The comparison of Isis/Draw, ChemDraw and ChemWindow. *Magyar Kémiai Folyóirat* 104 (1): 25-33, 1998.
- [31] Hinchliffe, A.: ISIS/draw version 1.2W for Windows. *Electronic Journal of Theoretical Chemistry* 1: 79-80, 1996.
- [32] Tamas, G.: ISIS/DRAW-1.2. *Magyar Kémiai Folyóirat* 101 (4): 170-170, 1995.
- [33] Gunda, T., E.: ISIS - DRAW - Version 1.0. *Magyar Kémiai Folyóirat* 99 (5): 217-218, 1993.
- [34] Town, W., G.: ISIS DRAW for The Macintosh. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* 32 (4): 393-394, 1992.
- [35] Xing, E., H., Zhang, X., W., Wang, L. a Mi, Z., T.: Molecular dimensions of tetrahydrodicyclopentadiene isomers and shape selectivity of zeolitic catalysts. *Catalysis Communications* 6 (11): 737-741, 2005.
- [36] Tantishaiyakul, V., Wongpuwarak, W.: Prediction of Pgp-ATPase interaction and rhodamine 123 efflux inhibitory activities of propafenone analogs using PLS statistics. *Journal of Molecular Structure-Theochem* 718 (1-3): 183-189, 2005.
- [37] Spessard, G., O.: ACD Labs LogP dB 3.5 and ChemSketch 3.5. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* 38 (6): 1250-1253, 1998.
- [38] Osterberg, T., Norinder, U.: Prediction of drug transport processes using simple parameters and PLS statistics - The use of ACD/logP and ACD/ChemSketch descriptors. *European Journal of Pharmaceutical Sciences* 12 (3): 327-337, 2001.
- [39] Masui, H.: A prediction system for H-1-NMR and H-HCOSY spectra "SimCOSY". *Nippon Kagaku Kaishi* (7): 485-494, 2000.
- [40] ACDLabs: ACD/ChemSketch User's Guide. [online]. [cit. 2007-6-6]. Dostupný z URL: <<http://www.acdlabs.com/download/>>.
- [41] ACDLabs: ACD/ChemSketch Reference manual. [online]. [cit. 2007-6-6]. Dostupný z URL: <<http://www.acdlabs.com/download/>>.

[42] ACDLabs: ACD/ChemSketch Tutorial. [online]. [cit. 2007-6-6]. Dostupný z URL:
<<http://www.acdlabs.com/download/>>.

[43] ACDLabs: ACD/ChemSketch Demo movies. [online]. [cit. 2007-6-6]. Dostupný z URL:
<http://www.acdlabs.com/download//movies/mov_draw.html>.