

Univerzita Karlova v Praze  
Pedagogická fakulta

Katedra chemie a didaktiky chemie

# **Komponenty VCL pro vektorovou grafiku ve výuce chemie**

Autor: Martin Adamec

Vedoucí práce: RNDr. Simon Cihelník, Ph.D.

Praha 2006

## **Abstrakt**

Předmětem práce je zhodnocení problematiky vzorců ve výuce organické chemie na střední škole, zhodnocení současného stavu softwaru pro kreslení chemických struktur a vývoj VCL komponent pro chemické kreslení. V současnosti dostupný software je na vysoké odborné úrovni a v chemické praxi má široké použití, nehodí se však pro použití ve výuce na druhém a třetím stupni. Výsledkem práce jsou komponenty pro vytváření, zobrazení a manipulaci s chemickými vzorci jednoduchých organických látek v souladu s požadavky střední školy. Součástí práce je také aplikace ukazující základní vlastnosti vyvinutých komponent. Komponenty i aplikace jsou vytvořeny v prostředí Borland Delphi 2005. CD s elektronickou verzí textu, zdrojovými kódy komponent i aplikace a spustitelnou verzí aplikace je přiloženo.

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci vypracoval samostatně pod vedením RNDr. Simona Cihelníka, Ph.D. V práci jsem použil informační zdroje uvedené v seznamu literatury.

V Praze 10. ledna 2006

.....  
podpis

## **Poděkování**

Na tomto místě bych rád poděkoval vedoucímu práce RNDr. Simonu Cihelníkovi, Ph.D., za trpělivost s mou prací, poskytnuté připomínky a podněty. Dále můj dík patří Ing. Věře Scheuerové za konzultace týkající se výuky chemie na střední škole a beta-testing ukázkové aplikace.

## Obsah

ÚVOD .....	8
<b>1 VÝCHODISKA .....</b>	<b>9</b>
<b>1.1 Vzorce v organické chemii na střední škole.....</b>	<b>9</b>
<b>1.2 Učebnice a jiné publikace používané při výuce .....</b>	<b>10</b>
1.2.1 Přehled středoškolské chemie .....	10
1.2.2 Chemie pro čtyřletá gymnázia (2. díl) .....	11
1.2.3 Chemie II v kostce pro střední školy (Organická chemie a biochemie).....	12
1.2.4 Úlohy ze středoškolské chemie .....	14
1.2.5 Odmaturuj z chemie .....	14
<b>1.3 Editory chemických struktur .....</b>	<b>15</b>
1.3.1 ISIS/Draw.....	16
1.3.2 ChemDraw Ultra .....	18
1.3.3 ACD/ChemSketch .....	20
1.3.4 DrawIt (ChemWindow).....	22
<b>1.4 Cíle práce .....</b>	<b>24</b>
<b>2 VÝSLEDKY PRÁCE.....</b>	<b>25</b>
<b>2.1 Komponenty VCL (projekt chemistry.bpl) .....</b>	<b>25</b>
2.1.1 Komponenta TChemData .....	25
2.1.2 Komponenta TFormulaImage .....	27
2.1.3 Komponenta TFormulaInspector .....	30
<b>2.2 Ukázková aplikace (projekt chemie.exe).....</b>	<b>31</b>
2.2.1 Formulář TMainForm .....	31

2.2.2 Formulář <i>TEditForm</i> .....	33
2.2.3 Formulář <i>TInspectForm</i> .....	34
2.2.4 Ovládání aplikace.....	34
<b>3 ZÁVĚR.....</b>	<b>37</b>
<b>SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY .....</b>	<b>38</b>

## Seznam obrázků

Obrázek 1: chybné žákovské zápisy pomocí zjednodušených racionálních vzorců .....	9
Obrázek 2: ukázka vzorců – Přehled středoškolské chemie .....	10
Obrázek 3: ukázka vzorců – Chemie pro čtyřletá gymnázia (2. díl) .....	11
Obrázek 4: ukázka vzorců – Chemie II v kostce .....	12
Obrázek 5: ukázka vzorců – Úlohy ze středoškolské chemie .....	13
Obrázek 6: ukázka vzorců – Odmaturuj z chemie.....	15
Obrázek 7: ISIS/Draw – základní nabídka a šablony vzorců sacharidů.....	17
Obrázek 8: ChemDraw Ultra – základní nabídka, dokument ze šablony, vzorce.....	19
Obrázek 9: ACD/ChemSketch – automatické vyrovnání vzorce, šablona struktur .....	21
Obrázek 10: DrawIt/ReportIt – základní nabídka, vzorce, šablona chemického nádobí.....	23
Obrázek 11: TChemData – úprava seznamu cyklů .....	25
Obrázek 12: TChemData – definice vlastností skupin .....	26
Obrázek 13: TChemData – ukázka připojeného seznamu 3D obrázků.....	26
Obrázek 14: TFormulaImage – operace drag and drop (přesun, změna skupin).....	27
Obrázek 15: TFormulaInspector, základní rozložení .....	30
Obrázek 16: Chemie.exe – návrh hlavního formuláře aplikace .....	32
Obrázek 17: Chemie.exe – návrh formuláře editačního okna.....	33
Obrázek 18: Chemie.exe – návrh formuláře s inspektorem.....	34
Obrázek 20: Chemie.exe – hlavní okno aplikace a panely nástrojů.....	35
Obrázek 21: Chemie.exe – připojování řetězce tažením .....	36
Obrázek 22: Chemie.exe – náhled karboxylové skupiny v inspektoru.....	36

## Seznam tabulek

Tabulka 1: TFormulaImage – přehled veřejných metod .....	27
Tabulka 2: TFormulaImage – přehled veřejných vlastností.....	27
Tabulka 3: TFormulaImage – přehled zveřejněných vlastností.....	28

## ÚVOD

Chemické názvosloví, včetně tvorby vzorců, je základním prostředkem dorozumívání v chemii. Má tedy své nezastupitelné místo i ve výuce chemie, zejména pak na střední škole, kde je větší podíl teoretického učiva. Žáci se zde setkávají s následujícími typy vzorců: stechiometrickým (empirickým), sumárním (molekulovým, souhrnným), funkčním (racionálním), konstitučním racionálním a konstitučním rozvinutým (strukturním). Při výuce anorganické chemie se pak klade důraz na vzorce stechiometrické a funkční. Naopak při výuce organické chemie jsou upřednostňovány vzorce konstituční (zejména racionální).

Práce se vzorci organických látek je vzhledem k jejich grafické složitosti obtížná jak pro žáky tak pro učitele. Kvůli hektickému tempu výuky pak často dochází k tomu, že žáci vzorce bezmyšlenkovitě překreslují z tabule nebo ještě hůře z promítaných prezentací. Tento stav potom vede k nepochopení významu vzorce jako nositele informace o struktuře a vlastnostech dané látky. Také učitelé jako by se vzorci v organické chemii bojovali. Při vlastním výkladu je používají v omezené míře, v psaných materiálech je pak se značným úsilím kreslí ručně, a to i když k tvorbě doprovodného textu používají prostředky výpočetní techniky, nebo kopírují stále stejné vzorce z učebnic.

Použití vhodného softwaru pro vytváření vzorců organických látek by mohlo být rozumným řešením výše nastíněného problému, pokud by došlo k výraznému usnadnění tvorby vzorců, a zbyl by tak čas na zamyšlení se nad jejich významem. Vývojem takového softwaru se zabývá tato práce.

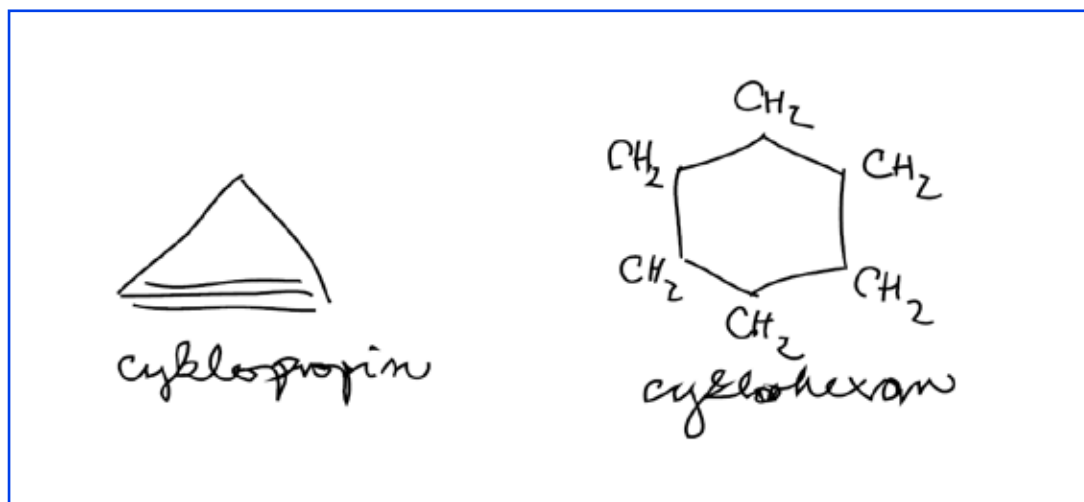


# 1 VÝCHODISKA

## 1.1 Vzorce v organické chemii na střední škole

V pátém ročníku studia jsem absolvoval souvislou pedagogickou praxi z chemie na Prvním českém gymnáziu v Karlových Varech. Ta probíhala mimo jiné i v septimách osmiletého gymnázia a ve třetích ročnících čtyřletého gymnázia, kde se na střední škole začíná s výukou organické chemie. Na základě vlastních poznatků a konzultací s ostatními pedagogy jsem dospěl k následujícím zjištěním:

- Žáci mají hlavně ze začátku tendenci používat k označování organických látek sumární vzorce místo vzorců konstitučních.
- Při výkladu organické chemie se používají většinou vzorce konstituční racionální s vypsánymi všemi skupinami včetně uhlíkatých řetězců. Tyto vzorce jsou také hojně používány v učebnicích pro základní i střední školy (viz kapitola 1.2).
- Se vzorci používajícími lomené čáry a mnohoúhelníky k vyjádření uhlíkatých řetězců a cyklů (zjednodušené racionální vzorce) se žáci setkávají jen v případě jednoduchých cyklů, ale i tam se projevuje značná míra abstrakce tohoto zápisu a často vede k tvorbě nesprávných vzorců nebo nesprávnému odvození struktury látky ze vzorce (viz obrázek 1).



Obrázek 1: chybné žákovské zápisy pomocí zjednodušených racionálních vzorců

## 1.2 Učebnice a jiné publikace používané při výuce

K výuce na středních školách se používá řada publikací. Jsou to zejména učebnice (s doložkou Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy, i bez ní), pracovní sešity, sbírky úloh a přehledy učiva. Je samozřejmé, že je-li nějaká publikace používána při výuce, dochází u učitele i žáků k přejímání jejího značení a terminologie. Pro moji práci bylo pak klíčové, jak jsou v těchto publikacích prezentovány vzorce organických sloučenin. V následujícím přehledu vybraných titulů se u každého budu podrobněji věnovat grafické reprezentaci vzorců. Pro názornost vždy připojuji charakterizující ukázkou.

### 1.2.1 Přehled středoškolské chemie

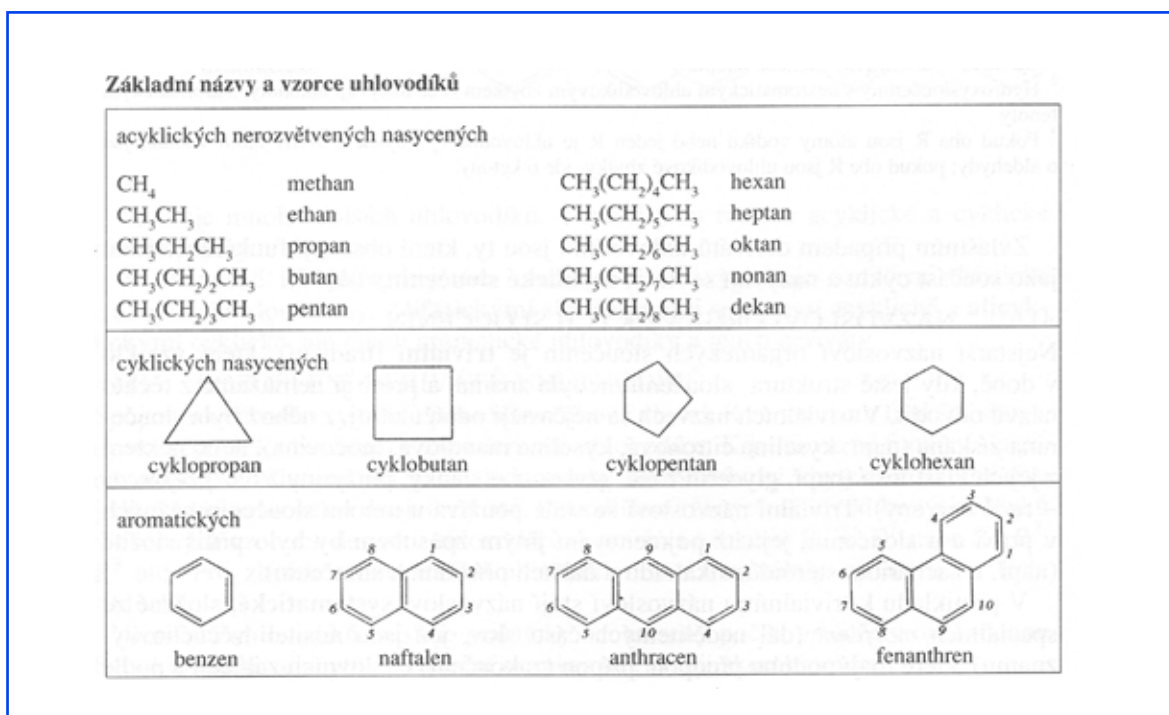
*Druh publikace:* učebnice pro střední školy (schváleno jako učebnice)

*Autoři:* Vacík, J.; Barthová, J.; Pacák, J. a kol.

*Vydavatel:* SPN – pedagogické nakladatelství, a. s.

*Rok vydání:* 1995

*ISBN:* 80-85937-08-5



Obrázek 2: ukázkva vzorců – Přehled středoškolské chemie

Tato učebnice postihuje celé učivo středoškolské chemie včetně chemie organické. Jsou v ní použity převážně konstituční racionální vzorce. Zjednodušené racionální vzorce zde téměř výhradně popisují cykly. Tam, kde je racionálních vzorce neposkytují potřebné informace o struktuře látky, jsou nahrazeny vzorci geometrickými, popřípadě příslušnou projekcí (Fisherova projekce, Haworthovy vzorce, ...). V racionálních vzorcích se většinou vyskytují kolmé vazby, u některých vzorců s dvojnou vazbou jsou vazby vedeny pod úhlem naznačujícím skutečný tvar molekuly. Psaní levých koncových methylových skupin kolísá, vyskytují se zde zápisy  $\text{CH}_3\text{—}$  i  $\text{H}_3\text{C—}$ , u karboxylových kyselin je použit zápis  $\text{HOOC—}$ .

### 1.2.2 Chemie pro čtyřletá gymnázia (2. díl)

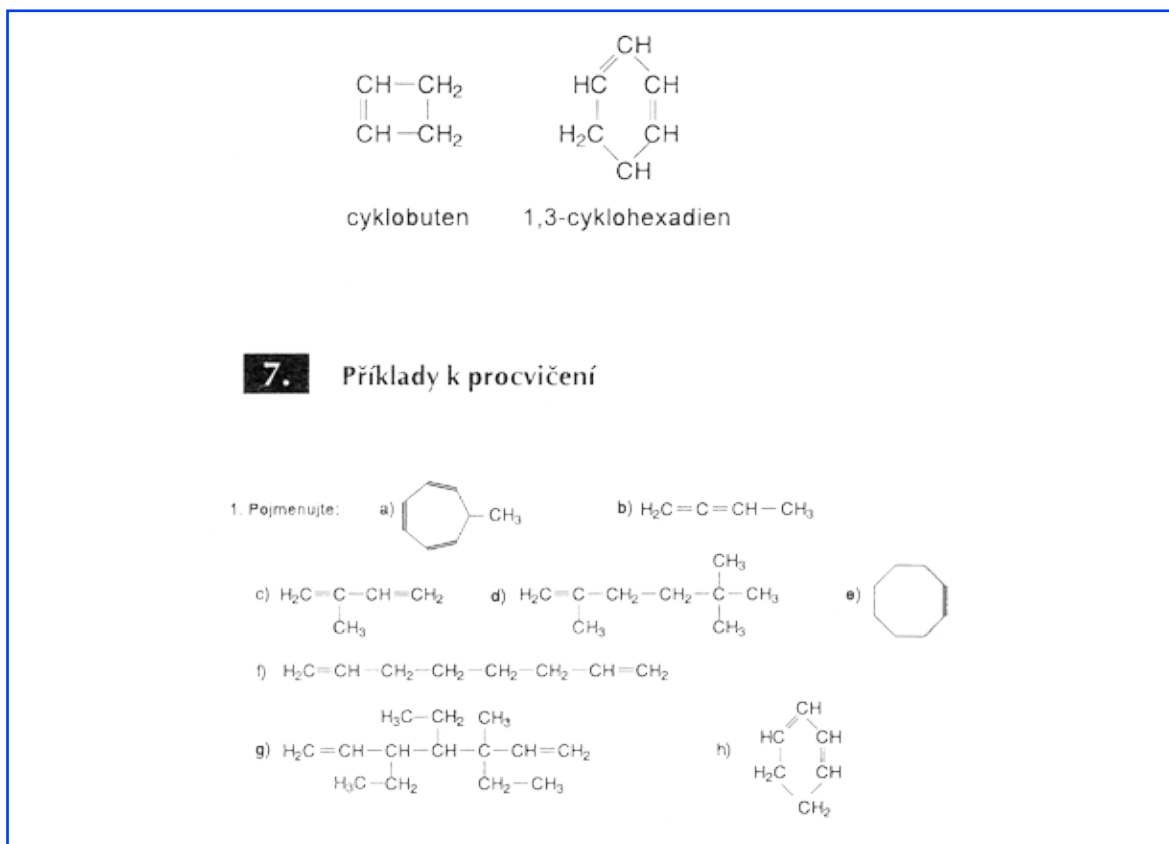
*Druh publikace:* učebnice pro střední školy

*Autoři:* Honza J., Mareček, A.

*Vydavatel:* Nakladatelství Olomouc

*Rok vydání:* 1998

*ISBN:* 80-7182-056-3



Obrázek 3: ukázka vzorců – Chemie pro čtyřletá gymnázia (2. díl)

V tomto díle učebnice je obsažen úvod do studia organické chemie – uhlovodíky a jejich názvosloví. Použity jsou konstituční racionální vzorce, převážně s kolmými vazbami. Zjednodušené racionální vzorce se zde téměř nevyskytují, pokud ano, pak v zejména souvislosti s aromatickými cykly, které jsou vyznačeny jako mnohoúhelník s kruhem uvnitř, naznačujícím delokalizaci elektronů. U koncových levých skupin je striktně dodržováno pravidlo, že vazba vždy vyháží z atomu uhlíku (např.  $\text{H}_3\text{C}-$ ,  $\text{H}_2\text{C}=\text{}$ ), a to i u cyklů a „zalomených“ řetězců (viz obrázek 3).

### 1.2.3 Chemie II v kostce pro střední školy (Organická chemie a biochemie)

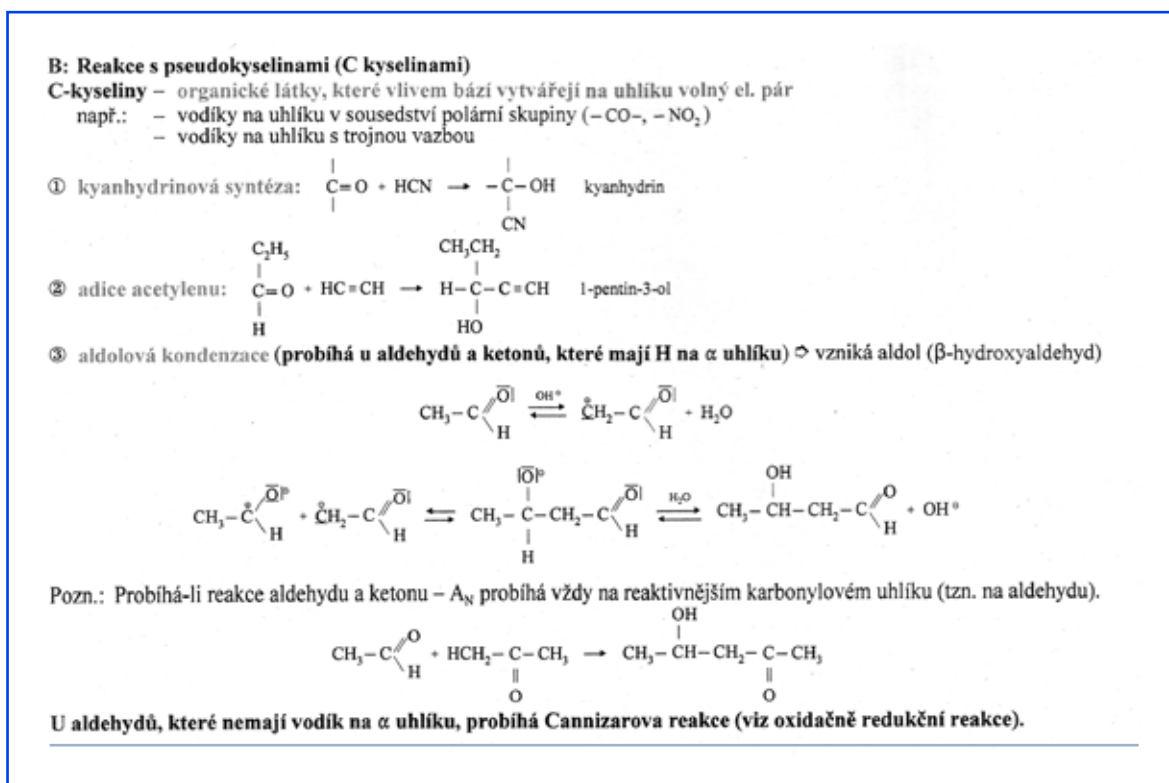
*Druh publikace:* přehled učiva chemie pro střední školy

*Autoři:* Kotlík, B.; Růžicková, K.

*Vydavatel:* Nakladatelství Fragment, Havlíčkův Brod

*Rok vydání:* 1997

*ISBN:* 80-7200-057-8




Obrázek 4: ukázka vzorců – Chemie II v kostce

Chemie v kostce je přehledová publikace určená pro přípravu studentů k maturitě a k přijímacím zkouškám na vysokou školu. Díl II obsahuje učivo organické chemie a biochemie. V zápisu vzorců opět převažují vzorce racionální, k vyznačení vazeb jsou však použity běžné znaky (/, \, |, =, -), což vede k optickému „rozbití“ vzorů a znesnadnění jejich čtení. Také při tisku došlo u některých vzorců k posunu vazeb způsobeném právě zvolenou tiskařskou technikou. Alkylové skupiny na levém konci řetězce autoři zapisují ve stejném pořadí jako u těchto skupin v jiné poloze ( $\text{CH}_3-$ ,  $\text{CH}_2=$ ). Pro karboxylovou skupinu je pak použit zápis  $\text{HOOC}-$ , i když se zde vyskytuje i  $\text{COOH}-$  (!). Podobně v zápisu vzorců aldehydů se můžeme setkat se skupinou  $\text{OCH}-$  a  $\text{OHC}-$ .

**2.2.25 Sacharidy**

I-A

a	$\text{HCO}-\text{CHOH}-\text{CH}_2\text{OH}$	glyceraldehyd
b	$\begin{array}{ccccccc} & \text{OH} & \text{OH} & \text{OH} & & & \\ &   &   &   & & & \\ \text{HCO}- & \text{CH} & -\text{CH} & -\text{CH} & -\text{CH}_2\text{OH} \end{array}$	ribosa
c	$\text{CH}_3\text{CHO}$	ethanal
d	$\text{CH}_3-\text{CHOH}-\text{CH}_3$	2-propanol
e	$\begin{array}{ccccccc} & \text{OH} & & \text{OH} & & & \\ &   & &   & & & \\ \text{HCO}- & \text{CH} & -\text{CH} & -\text{CH} & -\text{CH} & -\text{CH}_2\text{OH} \\ & &   & &   & \\ & & \text{OH} & & \text{OH} & \end{array}$	glukosa
f	$\text{CH}_3-\text{CH}_2\text{Cl}$	chlorethan
g		benzen
h	$\begin{array}{ccccccc} & & \text{OH} & & & & \\ & &   & & & & \\ \text{CH}_2\text{OH}- & \text{CO} & -\text{CH} & -\text{CH} & -\text{CH} & -\text{CH}_2\text{OH} \\ & & &   &   & \\ & & & \text{OH} & \text{OH} & \end{array}$	fruktosa

I-A

- (a), (b), (e), (h)
- $$\begin{array}{ccccccc} & \text{H} & & \text{H} & & \text{H} & \\ & | & & | & & | & \\ & \text{C} & - & \text{C} & - & \text{C} & - \text{OH} \\ & || & & | & & | & \\ & \text{O} & & \text{HO} & & \text{H} & \end{array}$$
 je opticky aktivní
- sacharosa (disacharid)

Obrázek 5: ukázka vzorců – Úlohy ze středoškolské chemie

### 1.2.4 Úlohy ze středoškolské chemie

*Druh publikace:* sbírka úloh pro střední školy (schváleno jako pomocná kniha)

*Autoři:* Čtrnáctová, H.; Klímová, H.; Vasilešská, M.

*Vydavatel:* Státní pedagogické nakladatelství v Praze

*Rok vydání:* 1991

*ISBN:* 80-04-25838-7

Sbírka je určena k opakování a procvičení učiva chemie na střední škole. Obsahuje úlohy z obecné chemie, anorganické chemie, organické chemie a biochemie. V části věnované organické chemii jsou používány hlavně konstituční racionální vzorce, bohužel však zapisované poměrně nekonzistentně. Objevují se zde skupiny  $\text{CH}_3-$  i  $\text{H}_3\text{C}-$ , dvojice  $\text{HC}\equiv$  a  $\text{CH}\equiv$ , či dokonce  $\text{HOOC}-$  a  $\text{HCOO}-$  jako karboxylové skupiny a  $\text{HOC}-$  ve významu aldehydu! Zjednodušené racionální vzorce opět hrají hlavní roli ve zobrazování cyklů, ty aromatické jsou pak vyznačeny delokalizačním kruhem. Některé skupiny jsou zapisovány poměrně nepřehledným až zavádějícím způsobem, např.  $\text{CH}_2\text{OHCHOHCH}_2\text{OH}$ . Snad nejkřiklavějším prohrěškem je pak použití běžných racionálních vzorců k označení sacharidů (viz obrázek 5).

### 1.2.5 Odmaturuj z chemie

*Druh publikace:* přehled učiva pro střední školy



*Autoři:* Benešová, M; Satrapová, H.

*Vydavatel:* Didaktis





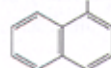
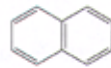

*Rok vydání:* 2002

*ISBN:* 80-86285-56-1

Publikace si klade za cíl poskytnout zájemcům celkový přehled učiva chemie na střední škole, zejména pak pomoci s přípravou pro maturitu. Racionální konstituční vzorce zde opět převažují, mezery kolem vazeb v nich však spíše navozují dojem matematických operátorů než vyznačení spojení atomů. Co se týče zápisu levých koncových skupin, převažuje pořadí uhlík, vodík, i když i zde najdeme zápis  $\text{H}_3\text{C}-$ . Ostatní skupiny připojené zleva pak zachovávají standardní zápis (např.  $\text{HO}-$ ,  $\text{H}_2\text{N}-$ ), při pozorném prostudování knihy můžeme objevit jeden výskyt skupiny  $\text{OH}-$ . Karboxylová skupina je zapisována na začátku řetězce  $\text{HOOC}-$ . Pro zápis aromatických cyklů autoři používají notaci s dvojnými vazbami.

PŘÍKLADY VZORCŮ UHLOVODÍKŮ	
2-methylbutan	$\begin{array}{c} 1 & 2 & 3 & 4 \\ \text{CH}_3 - & \text{CH} - & \text{CH}_2 - & \text{CH}_3 \\ &   \\ & \text{CH}_3 \end{array}$
2,4-dimethylpentan	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 & & \text{CH}_3 \\   & &   \\ 2 & 3 & 4 & 5 \\ \text{CH} - & \text{CH}_2 - & \text{CH} - & \text{CH}_3 \\   & &   \\ \text{CH}_3 & & \end{array}$
3-methylhex-2-en	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 - & \overset{3}{\text{C}} = & \overset{2}{\text{CH}} - & \overset{1}{\text{CH}_3} \\ &   & & \\ & \text{CH}_2 - & \overset{5}{\text{CH}_2} - & \overset{6}{\text{CH}_3} \end{array}$
propyn	$\text{CH} \equiv \text{C} - \text{CH}_3$
hexa-1,3,5-trien	$\overset{1}{\text{CH}_2} = \overset{2}{\text{CH}} - \overset{3}{\text{CH}} = \overset{4}{\text{CH}} - \overset{5}{\text{CH}} = \overset{6}{\text{CH}_2}$
cyklohexa-1,3-dien	
2,3-diethylbuta-1,3-dien	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 - \text{CH}_2 - & \overset{2}{\text{C}} = & \overset{3}{\text{C}} - & \text{CH}_2 - & \text{CH}_3 \\ &    &    & \\ & \text{CH}_2 & \text{CH}_2 & \end{array}$
3-methylcyklopenten	

methyl	$\text{CH}_3 -$
ethyl	$\text{CH}_2\text{CH}_3 -$
propyl	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2 -$
izopropyl	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3 \end{array} \text{CH} -$
butyl	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2 -$
izobutyl	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\   \\ \text{CH}_3 \end{array} \text{CH} - \text{CH}_2 -$
methylen	$-\text{CH}_2 -$
ethylen	$-\text{CH}_2\text{CH}_2 -$
propylen	$-\text{CH}_2 - \overset{1}{\text{CH}} - \text{CH}_3$
benzyl	
vinyl (ethenyl)	$\text{CH}_2 = \text{CH} -$
allyl (propen-2-yl)	$\text{CH}_2 = \text{CHCH}_2 -$
cyklopentyl	
cyklohexyl	
fenyl	
1-naftyl	
2-naftyl	
1,2-fenylen	

Obrázek 6: ukázka vzorců – Odmaturoj z chemie

### 1.3 Editory chemických struktur

Pro kreslení chemických struktur na PC existuje řada programů od nejjednodušších, umožňujících pouhé kreslení a ukládání vzorců, až po komplexní systémy využitelné v chemickém výzkumu či průmyslu. Ne všechny jsou však vhodné pro použití ve výuce, žádný z nich není dostupný v češtině a ani jejich cena není zanedbatelným faktorem. V následujícím přehledu uvádím čtyři celosvětově nejpoužívanější editory: ISIS/Draw, ChemDraw, ACD/ChemSketch a DrawIt, hodnocené zejména pro použití ve výuce.

### 1.3.1 ISIS/Draw

*Výrobce:* MDL Informations System, San-Leandro, California 94677, USA.

*URL produktu:* <http://www.mdl.com>

*Poslední verze:* 2.5

*Rok vydání:* 2003

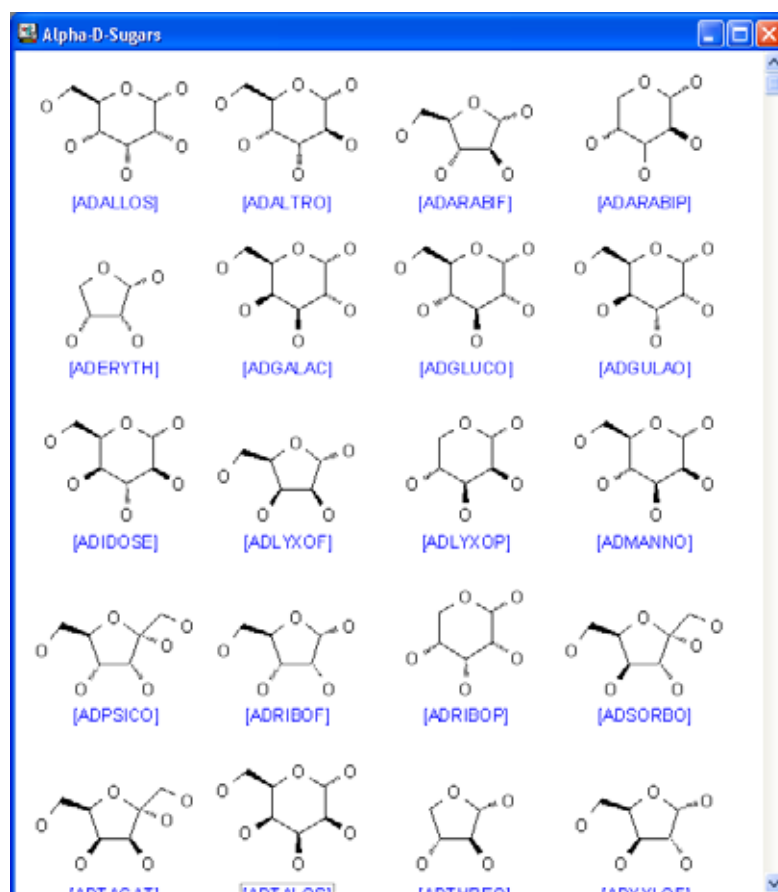
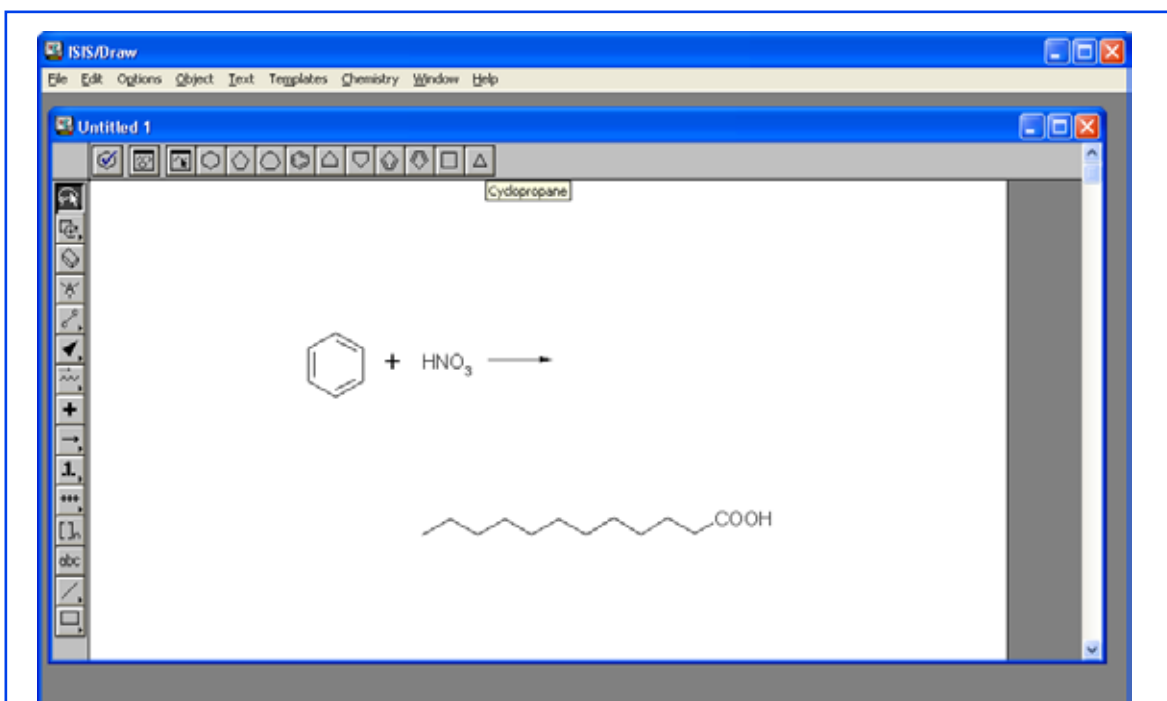
*Licence:* Freeware pro akademické a domácí použití, cena rozšířené komerční verze se pohybuje okolo 18.000 Kč (740 USD).

*Operace se soubory a daty:* Freewarová verze podporuje ukládání pouze v nativním formátu (.skc) a formátu TGF, ostatní formáty (např. MOL) jsou dostupné pouze v komerční verzi. Ke strukturám lze vložit obrázky v grafických formátech EMF a WMF, exportovat kresbu do běžných grafických formátů nelze. Editor podporuje technologii OLE (Object linking and embedding – připojování a vkládání objektů jiných aplikací dokumentů) jak pro vložení cizích objektů ke kresbám, tak pro vložení svých kreseb do cizích dokumentů s možností opětovné úpravy.

*Kreslení chemických struktur:* Základním principem kreslení je v ISIS/Draw umísťování předdefinovaných objektů (vazeb, atomů, cyklů, ...): Při přidávání dalších objektů jsou tyto přichytávány k již nakresleným objektům nebo k mřížce. Tento způsob je pohodlný pro rychlé kreslení s pevnou délkou vazeb. Výchozím typem vzorců jsou zjednodušené racionální, pro kreslení klasických racionálních vzorců je potřeba ručně nastavit zobrazování uhlíkových a vodíkových atomů a změnit délku vazby, aby nedocházelo k překrývání za sebou jdoucích skupin v řetězcích. Standardně je používáno bezpatkové písmo Arial. Editor podporuje vazby pro prostorové vzorce.

*Další funkce:* Program také umožňuje jednoduchý převod nakreslených struktur do 3D-zobrazení, ovšem pouze pro ilustrativní účely, není zde totiž používán žádný optimalizační algoritmus pro určení vzájemné polohy atomů a délky vazeb. Dále se zde vyskytuje řada pomocných nástrojů: kreslení čas a základních geometrických tvarů, vložení popisného textu, práce se vzorci polymerů a rovnic/reakčních schémat. Vlastnosti umístěných objektů (barva, velikost, typ písma, atp.) lze kromě celých objektů nastavovat jednotlivě i pro části struktur (atomy, vazby). Přidáním zásuvných modulů lze aplikaci dále rozšiřovat, jedním z takových modulů je například ADC/Name pro pojmenování struktury a pro vytvoření struktury z názvu.





Obrázek 7: ISIS/Draw – základní nabídka a šablony vzorců sacharidů

### 1.3.2 ChemDraw Ultra

*Výrobce:* CambridgeSoft Corporation, Cambridge CB5 8LA UK

*URL produktu:* <http://www.camsoft.com>

*Poslední verze:* 9.0

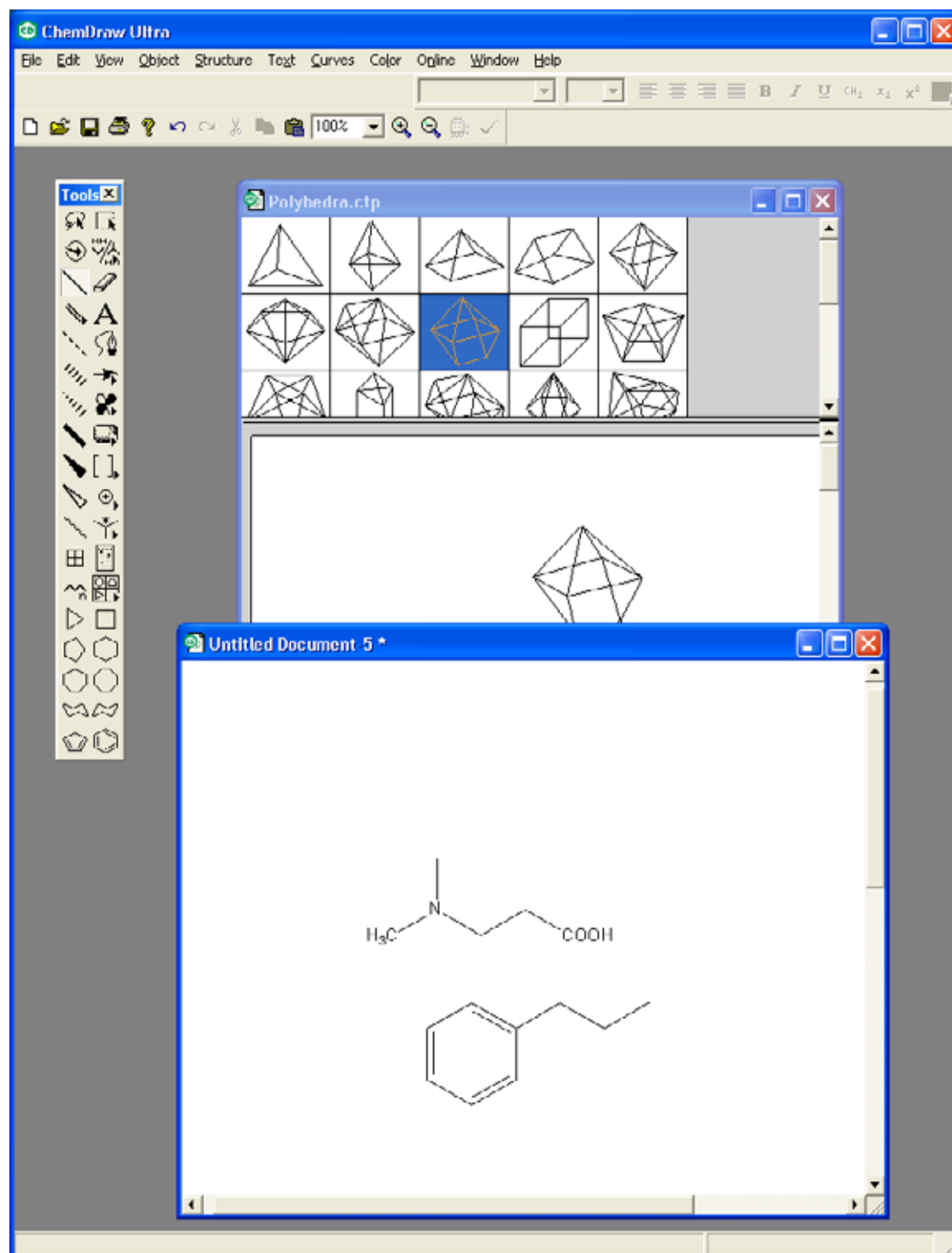
*Rok vydání:* 2005

*Licence:* Komerční nebo akademická licence. Cena komerční verze se pohybuje okolo 43.000 Kč (1.790 USD), licence pro školy do 5.000 studentů je nabízena za roční poplatek cca 135.000 Kč (5.600 USD).

*Operace se soubory a daty:* Program podporuje řadu formátů pro import a export vzorců („chemické“ formáty MOL, CML, ISIS sketch, grafické formáty: GIF, JPEG, WMF, EPS). Do dokumentů se dají vkládat OLE objekty jiných aplikací a taktéž nakreslené vzorce lze vložit do jiných dokumentů pomocí technologie OLE. Při vytváření nových dokumentů lze zvolit z řady šablon podle zaměření další práce (viz obrázek 8).

*Kreslení chemických struktur:* Základní operace vytváření vzorců je podobná jako u ISIS/Draw – vazby zachovávají pevnou délku a jejich úhel se mění po předdefinovaných krocích, standardně se nezobrazují atomy uhlíku. Změna označení atomu se provádí pomocí textového nástroje, který umožňuje nastavit na místo atomu jakýkoli text. Při kreslení se automaticky provádějí nejrůznější kontroly správnosti (vaznost atomů, zápis skupiny) a nalezené problémy jsou ihned vyznačeny. Upozornění se objeví dokonce v případě, že z neoznačeného atomu uhlíku vycházejí dvě vazby proti sobě a mohlo by tak dojít k jeho zneviditelnění. V nabídce je celá řada typů vazeb (např. vazby s neceločíselnou četností, prostorové vazby, ...), šablony orbitalů, reakčních šipek aj.

*Další funkce:* Editor umí pracovat s vícestránkovými dokumenty, téměř každou vizuální vlastnost nakreslených objektů lze upravovat (barvu, použité písmo, velikost, ...). Zvláštností je komplexní 3D editor (Chem3D – součást balíku ChemOffice nebo dodáván zvlášť), do kterého se dají převést všechny vzorce a jejich výsledný obraz lze opět vložit do stejného dokumentu. Nechybí možnost určení názvu ze vzorce a vytvoření struktury dané názvem. V programu je také obsažen zajímavý nástroj na zakreslování a vyhodnocování desek TLC a robustní výpočetní nástroje. Zjednodušená verze editoru (bez výpočetních částí) je volně dostupná jako zásuvný modul do internetových prohlížečů, čímž je umožněno vizuální zadávání vzorců v online dostupných chemických databázích (Organic synthesis, URL: <http://www.orgsyn.org>).



Obrázek 8: ChemDraw Ultra – základní nabídka, dokument ze šablony, vzorce

### 1.3.3 ACD/ChemSketch

*Výrobce:* Advanced chemistry development Inc., Toronto, Kanada

*URL produktu:* <http://www.acdlabs.com>

*Poslední verze:* 8.00

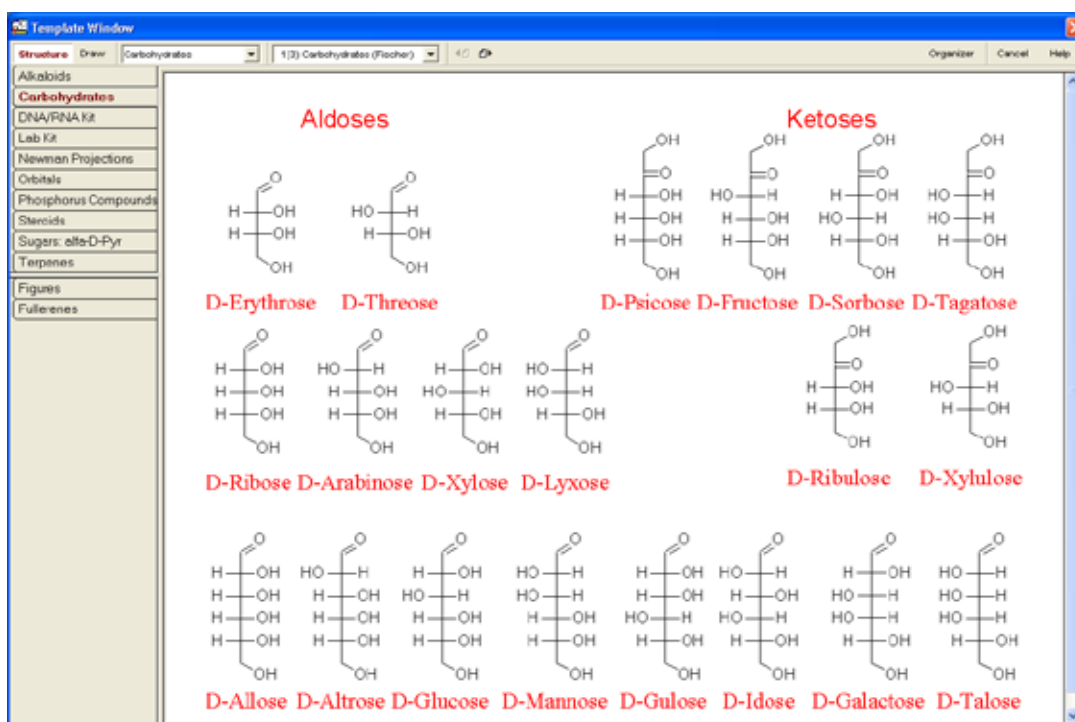
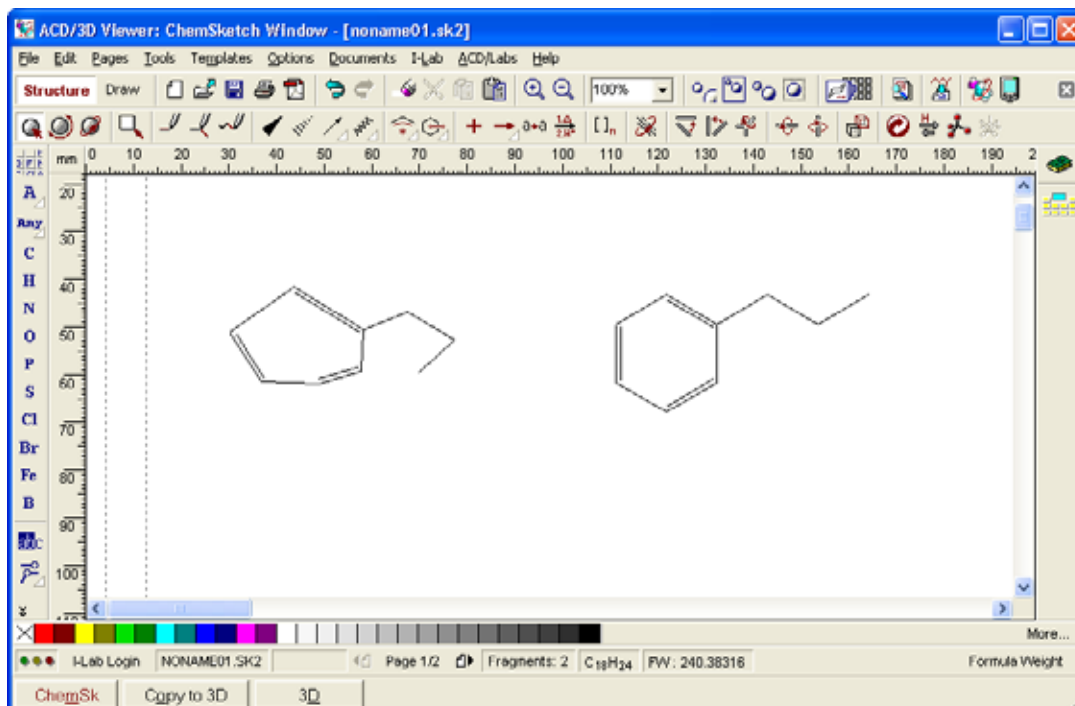
*Rok vydání:* 2005

*Licence:* Freeware s některými omezenými funkcemi nebo akademická licence pro jednotlivce za cca 3.500 Kč (149 USD).

*Operace se soubory a daty:* Spolu s ChemDraw patří ACD/ChemSketch k programům vybaveným největším počtem formátů souborů, s kterými umí pracovat. Kromě vlastního formátu (ChemSketch Document .sk2) podporuje i formáty MOL, kresbu ISIS/Draw a ChemDraw. Vytvořený dokument lze exportovat také do grafických formátů PCX, GIF, BMP, nebo WMF. S výhodou lze také využít formát Adobe PDF, který je však dostupný pouze v placené verzi. Importovat lze zmíněné „chemické“ formáty a vektorový formát WMF. Při ukládání do poslední zmíněného formátu se neukládají informace o chemické struktuře, ale pouze vizuální vlastnosti, při opětovném načtení takto uložené struktury se s ní pak dá nakládat jen jako s kresbou. Z rastrových formátů lze do dokumentu vložit pouze obrázek ve formátu BMP. Opět zde existuje možnost obsah dokumentu převést do jiné aplikace pomocí technologie OLE a vkládat OLE objekty do dokumentu.

*Chemické kreslení:* ChemSketch rozlišuje dva typy editace – strukturní a kresbu. Na rozdíl od předchozích dvou editorů je kreslení volné, přachycení do pevných poloh se dosahuje volbou v nabídce nebo použitím klávesových přepínačů *Ctrl* a *Shift*. Základní atomy jsou k dispozici přímo z panelu nástrojů (viz obrázek 9), není je tedy potřeba zadávat jako text., ostatní atomy lze vybrat z periodické tabulky. Lineární racionální vzorce lze zadávat po upravení délky vazeb, aby se skupiny nepřekrývaly a byly od sebe stejně vzdáleny. Skupina  $\text{CH}_2$  se tentokrát zobrazuje implicitně vodorovně, takže její úpravu není třeba provádět. Pro kreslení jednoduchých cyklů zde nejsou k dispozici šablony, je nutno použít funkci automatického vyrovnání struktury (viz obrázek 9).

*Další funkce:* V programu je k dispozici modul 3D viewer, kde se dají prohlížet a měřit prostorové modely nakreslených struktur. Pro dosažení „reálného“ vzhledu je použit interní optimalizační algoritmus, ten lze však použít pouze na struktury s běžnými atomy a vazbami. Generování názvů struktur je ve freewarové verzi omezeno. V placené verzi je také k dispozici řada nástrojů pro fyzikálně-chemické výpočty.



Obrázek 9: ACD/ChemSketch – automatické vyrovnání vzorce, šablona struktur

### 1.3.4 DrawIt (ChemWindow)

*Výrobce:* Bio-Rad Laboratories Inc., Informatics Division, Philadelphia PA 19104

*URL produktu:* <http://www.chemwindow.com> nebo <http://www.bio-rad.com>

*Poslední verze:* 5.0

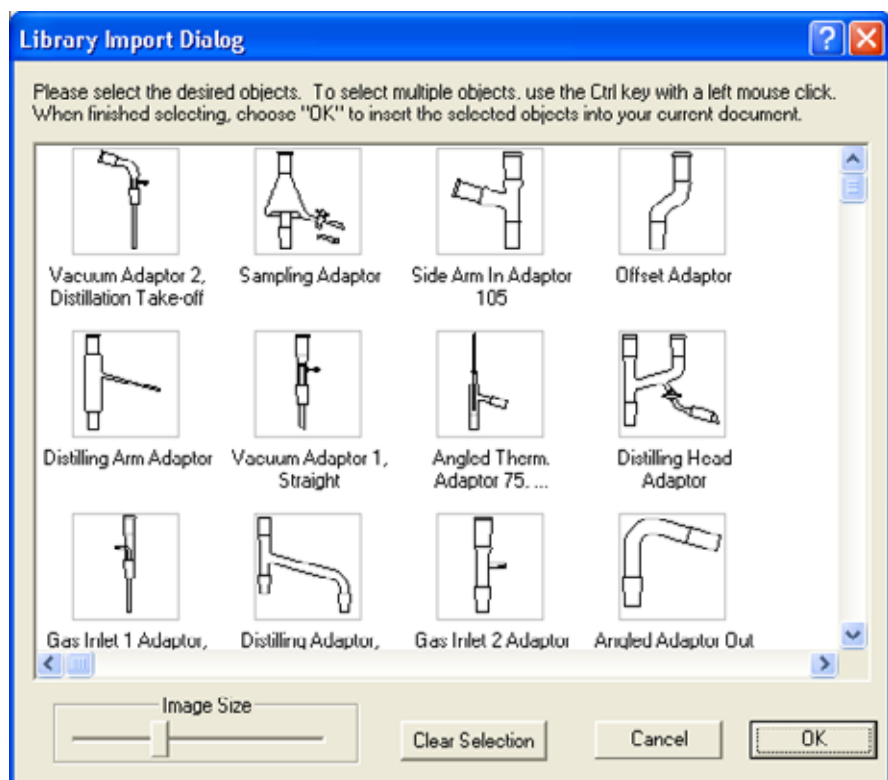
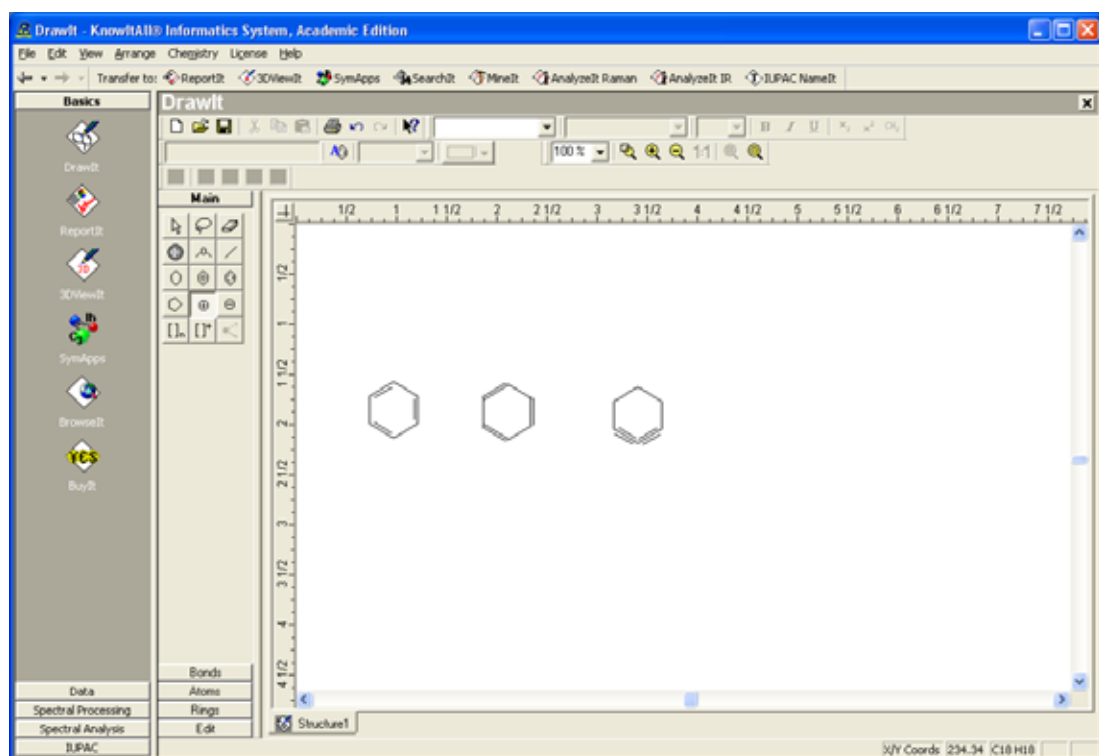
*Rok vydání:* 2005

*Licence:* Freeware pro akademické použití.

*Operace se soubory a daty:* Aplikace DrawIt je součástí balíku KnowItAll (nástupce ChemWindow), který obsahuje dalších třináct modulů pro práci s chemickými daty, spektry, názvy, fyzikálně-chemickými výpočty, aj. Každý z těchto modulů má svůj vlastní formát souborů, z cizích formátů však není mnoho podporováno (z běžně používaných jen MOL), grafické formáty pak vůbec. Technologie OLE je podporována obousměrně, objekty z DrawIt lze vkládat do cizích dokumentů a do dokumentů všech modulů lze vkládat OLE objekty jiných aplikací. Zvláštností tohoto editoru jsou úpravy DrawIt OLE objektů přímo v cizích dokumentech (podobný způsob jako např. MS Editor rovnic).

*Chemické kreslení:* Styl kreslení je opět podobný ISIS/Draw, s tím rozdílem, že v modulu DrawIt lze kreslit pouze chemické struktury, pro jejich kompozici a doplnění o další grafické prvky je pak určen modul ReportIt. Navigace je poněkud ztížena absencí kontextové nápovědy, přípdaně tipů. Zvláště se chovají násobné vazby, jinak vypadají při použití šablony a jinak při ručním kreslení (viz obrázek 10). Během editace se neprovádí kontroly chemické správnosti, takže lze snadno nakreslit chybné vzorce (viz obrázek 10). Provedení kontroly lze pak vyvolat z kontextové nabídky. Nakreslené sturkutry lze převést do jednořádkových racionálních vzorců, avšak kreslení větvených racionálních vzorců je velice nepohodlné – skupiny je třeba vypisovat ručně, ale jejich zobrazení není správné, vazby vycházejí vždy z okraje skupiny, nikoli ze správného atomu.

*Další funkce:* Program umožňuje generovat názvy struktur a naopak vytvářet vzorce z názvů podle doporučení IUPAC. Akademická verzde je omezena na maximální počet deset atomů (atomy vodíku nepočítaje). Při vytváření vzorce z názvu se však neprovádí kontrola správnosti, a lze tak vytvořit například buta-1,2-diyn.



Obrázek 10: DrawIt/ReportIt – základní nabídka, vzorce, šablona chemického nádobí

## 1.4 Cíle práce

Z předchozího vyplývá, že současný software pro chemické kreslení je na vysoké odborné úrovni a umožňuje celou řadu operací s vytvořenými strukturami. Jeho využití pro výuku na střední škole je více než omezené. Značnou nevýhodou je nedostupnost softwaru v češtině, přílišná složitost ovládání, pokud by měl být software používán přímo žáky. Zjednodušené racionální vzorce upřednostňované v chemii jako vědě, a tedy i v editorech, se při výuce příliš nepoužívají. U některých programů jsou také nezanedbatelné finanční náklady na jejich pořízení.

Cílem mé práce není nahradit současný software, ale vytvořit k němu alternativu lépe přizpůsobenou požadavkům výuky na středních eventuálně základních školách. Zvolil jsem formu VCL komponent s otevřeným zdrojovým kódem, aby bylo možné tyto dále rozvíjet a bez omezení používat při vývoji vlastních aplikací. K předvedení základních funkcí bylo pak nutné vytvořit ukázkovou aplikaci už s určitými možnostmi využití přímo při výuce chemie nebo pro přípravu podkladů pro výuku.



## 2 VÝSLEDKY PRÁCE

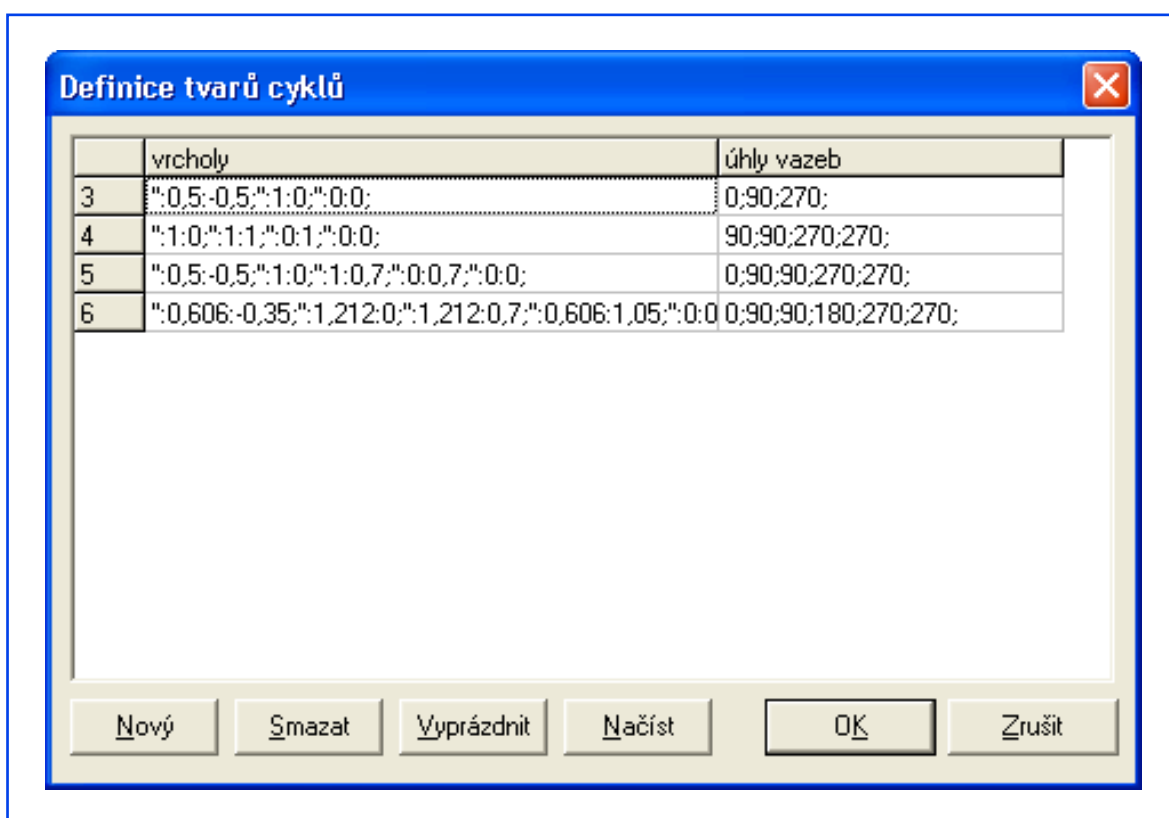
### 2.1 Komponenty VCL (projekt chemistry.bpl)

Výsledkem práce jsou dvě vizuální komponenty (*TFormulaImage*, *TFormulaInspector*) a jedna nevizuální komponenta (*TChemData*). Na přiloženém CD se nachází jak zdrojový kód, tak vytvořená knihovna (.bpl). Všechny komponenty jsou zahrnuty v jednotce *FormulaImage*, ta musí být uvedena v klauzuli *uses* případné aplikace, která některou z komponent používá. Součástí projektu je také datový modul, který obsahuje instanci komponenty *TChemData* s předdefinovanými hodnotami a instanci standardní komponenty *TImageList*, kde jsou uloženy 3D náhledy skupin atomů.

Jednotka *FormulaImage* je jádrem celé práce, jsou v ní definovány všechny konstanty, datové typy a třídy určené k začlenění do spustitelné aplikace.

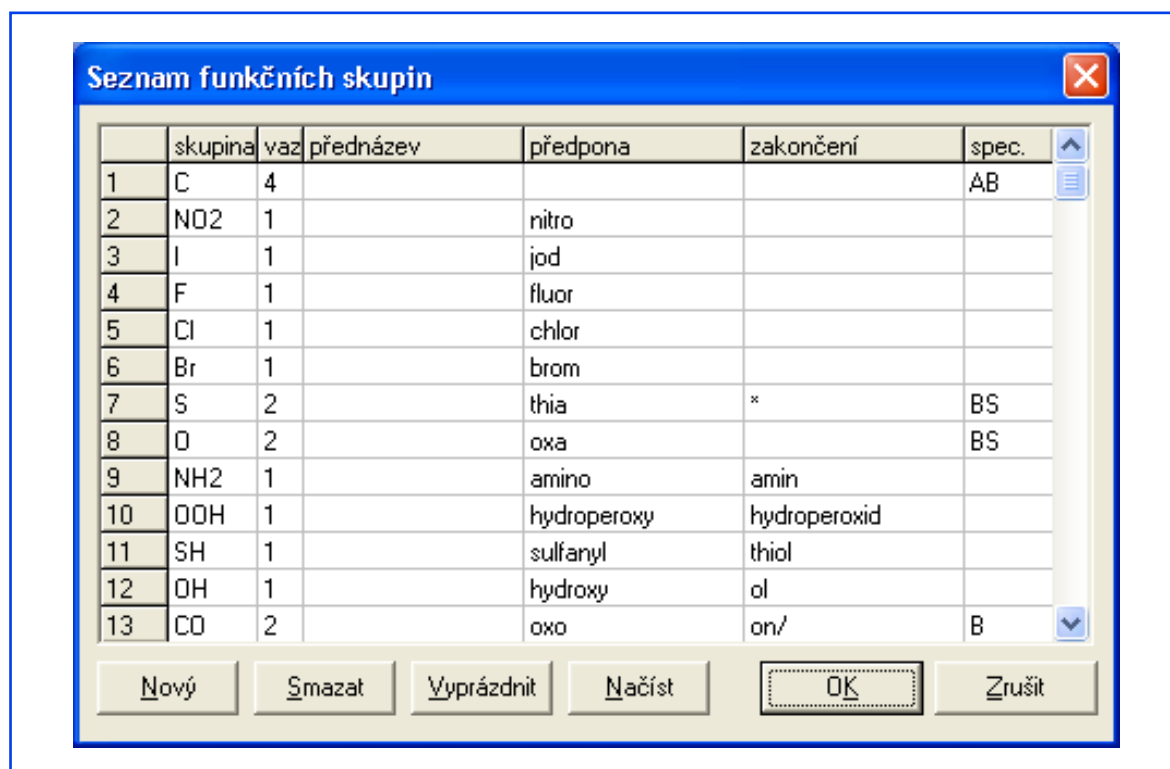
#### 2.1.1 Komponenta *TChemData*

Třída *TChemData* je přímo odvozena ze základní třídy pro vytváření VCL komponent *TComponent*. Představuje objekt poskytující chemická data komponentě *TFormulaImage*.

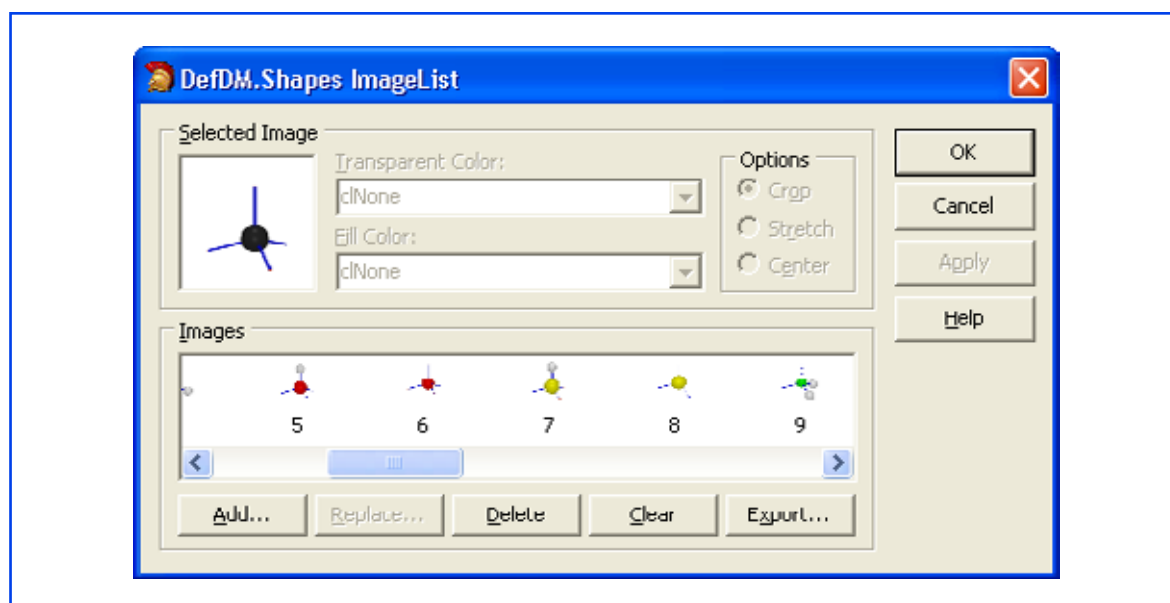


Obrázek 11: *TChemData* – úprava seznamu cyklů

Jsou zde definovány vlastnosti atomů a skupin začlenitelných do vzorce, tvary cyklů, seznam triviálních názvů (pro budoucí podporu názvosloví) a odkaz na seznam ukázkové obrázky skupin pro vizuální komponentu *TChemInspector*.



Obrázek 12: TChemData – definice vlastností skupin



Obrázek 13: TChemData – ukázka připojeného seznamu 3D obrázků

### 2.1.2 Komponenta *TFormulaImage*

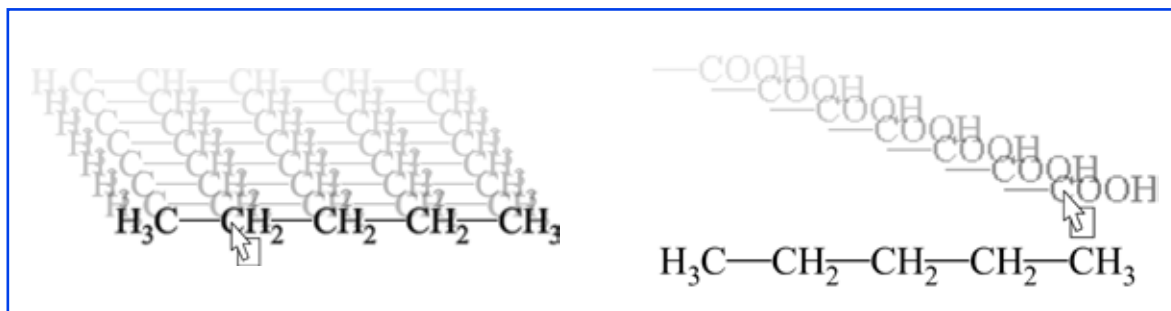
S touto komponentou se přímo setkává uživatel odvozené aplikace. Třída *TFormulaImage* je potomkem obecné třídy *TCustomControl*, která slouží jako základ viditelných ovládacích prvků. Komponenta zajišťuje vykreslování chemického vzorce, jeho úpravy pomocí technologie Drag and drop, a manipulaci s daty. Definuje události, které umožňují vývojářům komponentu účelně začlenit do svých aplikací a zajistit interaktivní odezvu.

Vzorec je v komponentě reprezentován ve dvou úrovních – chemické a grafické. Chemická úroveň vyjadřuje topologii struktury a nese informace o jednotlivých skupinách a vazbách. V této reprezentaci jsou cykly chápány jako dále nedělitelné jednotky – speciální případy skupin. Takto pojatá struktura tvoří z pohledu teorie grafů strom, kde uzly jsou tvořeny jednotlivými skupinami (včetně cyklů) a hrany představují vazby. K uchovávání struktury je použito větveného dvousměrného spojového seznamu. Pro usnadnění hromadných operací nad strukturou jsou jednotlivé uzly (třída *TNode*) ještě začleněny do kolekce (třída *TNodeList*).

Grafická úroveň je reprezentována obecným grafem (z pohledu teorie grafů). Uzly představují skupiny nebo vrcholy v cyklech (třída *TVertex*) a hrany představují vazby (třída *TEdge*). Graf je uložen ve seznamech vrcholů (třída *TVertexList*) a hran (třída *TEdgeList*). Každá hrana v sobě obsahuje odkazy na jí příslušející vrcholy. Tato struktura má pak přímou vazbu na zobrazený vzorec a výstup při exportu do grafických formátů. Naopak při ukládání do nativního formátu se nezachovává a po otevření je znovu vygenerována.

Komponenta podporuje úpravy vzorce pomocí technologie Drag and drop (v rámci aplikace). Pomocí této funkce lze měnit pozici vzorce v rámci hranice ovládacího prvku. Pokud má zdrojový ovládací prvek nastaven typ zpracování při tažení (vlastnost *DropType*), lze ho přesunout na jinou instanci *TFormulaImage*, kde je po vyhodnocení podmínek akceptován a je s ním provedena požadovaná kombinační operace: připojení jako skupiny, nahrazení skupiny, smazání uzlu (viz obrázek 13).

Operace se vzorcem lze provádět také pomocí veřejných metod a vlastností.



Obrázek 14: *TFormulaImage* – operace drag and drop (přesun, změna skupiny)

název metody	typ	parametry	popis
Create	konstruktor	AOwner: TComponent	Základní konstruktor
Destroy	destruktor	–	Základní destruktor
Paint	procedura	–	Vykreslí ovládací prvek.
DrawToCanvas	procedura	Canvas: TCanvas CreatBkg: Boolean	Vykreslí obsah na plátno dané parametrem <i>Canvas</i> .
BeginUpdate	procedura	–	Zahájí aktualizaci prvku a zabrání překreslování až do zavolání metody <i>EndUpdate</i> .
EndUpdate	procedura	–	Ukončí aktualizaci prvku a opět umožní překreslování.
Assign	procedura	Source: TPersistent	Duplikuje vzorec podle obsahu parametru <i>Source</i> , musí být potomek třídy <i>TFormulaImage</i> .
CopyToClipboard	procedura	CopyMode: TFrmCopyMode	V závislosti na parametru <i>CopyMode</i> zkopíruje vzorec do schránky Windows jako BMP, WMF a v nativním formátu.
GetDragImages	funkce	– (výsledek): TDragImageList	Vrací seznam obrázků pro zobrazení při operaci drag and drop.
SetBounds	procedura	ALeft: Integer ATop: Integer AWidth: Integer AHeight: Integer	Nastaví ohraničovací obdélník podle parametrů, překreslení se provede jen jednou.
IsEmpty	funkce	– (výsledek): Boolean	Vrací <i>True</i> , pokud je vzorec prázdný, jinak vrací <i>False</i> .
StartDragNew	procedura	–	Zahájí operaci drag and drop, hotspot nastaví na počáteční uzel.

**Tabulka 1: TFormulaImage – přehled veřejných metod**

název vlastnosti	datový typ	popis
Canvas	TCanvas	Kreslicí plátno
Nodes	TNodeList	Kolekce uzlů; Nastavení této vlastnosti způsobí změnu vzorce.
SelectMode	TFrmSelectMode	Typ výběru (žádný, volné pozice, použité pozice, vrcholy)
SelectedNode	TNode	Aktuálně vybraný uzel (nil = žádná)
SelectedPos	Integer	Aktuálně vybraná pozice (-1 = žádná)
CarbCouint	Integer	Udává počet uhlíkových atomů v řetězci (jen pro čtení).
RingCount	Integer	Udává počet cyklů (jen pro čtení).
DragNode	TNode	Při tažení určuje uzel, za který byl vzorec uchopen.
DragPos	Integer	Při tažení určuje pozici na uzlu, ve které byl vzorec uchopen.
FreeOnDrop	Boolean	Určuje, zda má být objekt při ukončení drag and drop uvolněn.
ChemData	TChemData	Ukazuje na komponentu s chemickými daty.
DropTarget	TFormulaImage	Při tažení nastaven na prvek, přes který je taženo.

**Tabulka 2: TFormulaImage – přehled veřejných vlastností**

název vlastnosti	datový typ	popis
Width	Integer	Udává šířku ovládacího prvku.
Height	Integer	Udává výšku ovládacího prvku,
AutoSize	Boolean	Nastavením na <i>True</i> bude prvek měnit velikost podle obsahu.
AutoCenter	Boolean	Nastavením na <i>True</i> bude prvek umisťovat počáteční uzel vzorce do středu prvku.
Align	TAlign	Určuje typ zarovnání vzhledem k rodičovskému prvku.
Visible	Boolean	Nastavením na <i>True</i> se prvek zobrazí.
Font	TFont	Určuje základní písmo pro popisky skupin.
DragMode	TDragMode	Určuje, zda lze prvek přetahovat (nastavením na <i>dmAutomatic</i> ).
Text	String	Textová reprezentace topologie vzorce.
StartX	Integer	Určuje vodorovnou pozici prvního uzlu.
StartY	Integer	Určuje svislou pozici prvního uzlu.
Modified	Boolean	Indikuje, zda byl vzorec změněn od posledního uložení.
DrawStyle	TItemDrawStyle	Ovlivňuje vykreslování vazeb a skupin.
Zoom	Double	zvětšení/zmenšení zobrazení (1 = normální velikost)
LineLength	Integer	Určuje délku vazeb (v bodech).
LineColor	TColor	Určuje barvu vazeb.
BkgColor	TColor	Určuje barvu pozadí.
ValSelColor	TColor	Barva povoleného výběru (mimo operací drag and drop).
InvSelColor	TColor	Barva zakázaného výběru (mimo operací drag and drop).
Inspector	TFormulaInspector	Odkazuje na komponentu pro náhled skupiny.

**Tabulka 3: TFormulaImage – přehled zveřejněných vlastností**

Vzorec lze vytvořit také pomocí textové reprezentace nastavením vlastnosti *Text*. Tato reprezentace používá rekurzivní zápis stromu, ve tvaru:

<skupina>[„(<četnost vazby><pozice vazby>[<strom>|„“])“...]

Pravoúhlé pozice jsou číslovány ve směru hodinových ručiček zleva od čísla nula. Methan by měl pak zápis „C“, butan „C(12C(12C))“ a kyselina 2-hydroxypropanová (s hydroxylem připojeným dolů a karboxylovou skupinou vpravo) zápis „C(12C(13OH)(12COOH))“. Při tomto způsobu vytváření vzorců není prováděna kontrola vaznosti ani překrytí vzorce, takže zodpovědnost je pouze na vývojáři. Vlastnost je určena pro rychlé vytváření předdefinovaných instancí třídy *TFormulaImage*, pro ukládání v textové reprezentaci nebo programové vytváření struktur. Tímto způsobem je zachován vzhled vzorce, co se rozšířené topologie týče. Grafická reprezentace se automaticky vytvoří na základě struktury. Pokud dojde při parsování textové hodnoty k chybě, zpracování se přeruší a vzorec zůstane v částečně vytvořeném stavu. Nastavením hodnoty dojde ke ztrátě původního vzorce.

### 2.1.3 Komponenta *TFormulaInspector*

Tato komponenta slouží k dynamickému zobrazování informací o skupinách vykreslených ovládacím prvkem *TFormulaImage*, který při každém pohybu myši nad sebou posílá informace o uzlu, nad nímž se právě nachází kurzor. Je odvozena přímo z třídy *TGraphicControl*, protože nepotřebuje nabývat zaměření (focus). K vlastní komunikaci mezi komponentami se používají veřejné vlastnosti *TFormulaImage.Inspector*, *TFormulaInspector.FormulaImage* a *TFormulaInspector.Node*. Nejprve je třeba nastavit vlastnost *Inspector* (lze pouze za běhu programu, nikoli v režimu návrhu), řízení pak probíhá automaticky z třídy *TFormulaImage*. Ta v reakci na zprávu Windows o pohybu myši vyhodnotí její pozici nad vzorcem a určí nejbližší uzel v rámci daného poloměru (konstanta *SnapThreshold*). Přiřazené komponentě pak nastaví hodnoty vlastností *FormulaImage* a *Node*. Pokud inspektor zjistí změnu aspoň jedné z nich, provede potřebné výpočty a zobrazí informace o skupině (dané uzlem označeným vlastností *Node*).

Základní rozložení informací na ploše inspektoru je zobrazeno na obrázku 14. Do horního obdélníku se přenáší obrazová kopie aktivní skupiny včetně poloh vazeb. V prostředním obdélníku se nachází 3D náhled skupiny uložený v komponentě *TChemData* připojené ke zdrojovému prvku *FormulaImage*. Pokud vývoář nevytvoří vlastní instanci této komponenty, použijí se ukázkové náhledy vytvořené v programu Cabri3D na základě idealizovaných proporcí odvozených z pravidelného rozložení elektronových párů. Skutečný tvar skupiny se samozřejmě mění v závislosti na připojených substituentech, ale výpočetní algoritmus daleko přesahuje rozsah této práce. Legenda k 3D náhledu je součástí obrázku pozadí, který se přiřadí do veřejné vlastnosti *Bitmap*.

Dalším zobrazovaným údajem je oxidační číslo uhlíku a jeho hybridizace. Oxidační číslo je určeno inspektorem na základě známých údajů o připojených skupinách. Hybridizace se určuje podle seznamu komponenty *TChemData* uložené ve vlastnosti *ShapeTxt*. Pokud tyto údaje nelze určit, nezobrazí se.



Obrázek 15: *TFormulaInspector*, základní rozložení

## 2.2 Ukázková aplikace (projekt chemie.exe)

Pro demonstraci použití vyvinutých komponent byla vytvořena ukázková aplikace. Jedním z důležitých faktorů pro nasazení programu do výuky je jeho uživatelská přívětivost a jednoduchost ovládání. Z tohoto důvodu byl zvolen barevně bohatý design a ovládací prvky umožňující změnu vzhledu (*TCoolBar*, *TToolBar*) místo standardních systémových prvků. Všechny ikony a obrazy pozadí byly vytvořeny ve vektorovém grafickém editoru *Xara Xtreme* firmy Xara, Ltd., a poté rastrovány do rozlišení obrazovky. Ovládání bylo voleno tak, aby manipulace se vzorci byla co nejvíce intuitivní a vyžadovala co nejméně operací (kliknutí myši, výběry v podnabídkách, atp.).

Vlastní kód aplikace obsahuje minimum výkonných částí, většina funkcí je přímo zajišťována použitými komponentami. Celý projekt obsahuje pouze tři formuláře a k nim příslušné jednotky (třídy *TMainForm*, *TEditForm* a *TInspectForm*).

### 2.2.1 Formulář *TMainForm*

Třída *TMainForm* popisuje hlavní okno aplikace. Umožňuje v sobě vytvářet editační okna a poskytuje základní ovládání aplikace. Obsahuje hlavní nabídku a šest panelů nástrojů. Jedním úkolem kódu třídy je obsluhovat události vyvolané kliknutím myši na jednotlivé ovládací prvky. Například kliknutí na tlačítko „Nový vzorec“ způsobí vytvoření instance editačního okna. Vzhledem k použitému typu formulářů (*MDIForm* a *MDIChild*) jsou základní operace s okny (umístění nových oken, kaskádování, vytvoření seznamu oken do nabídky) implementovány systémem.

Hlavní formulář zajišťuje otevírání dříve uložených vzorců. Kód je zde velice jednoduchý. Po kliknutí na tlačítko „Otevřít“ dojde ke zobrazení systémového dialogu pro výběr souboru, je vytvořen proud souboru a vyvolán konstrutor *TNodeList.ReadFromStream*, který vytvoří strukturu vzorce. Ta je poté předána prvku na novém editačním okně.

Specifický kód je potřeba pouze při reakci na stisknutí některého z tlačítek na panelech nástrojů se skupinami nebo vazbami. Jako příklad uvádím obsluhu události *OnClick* společně pro všechna tlačítka umožňující připojení skupiny:

```
procedure TMainForm.ToolBindClick(Sender: TObject);
var
  f: TFormulaImage;
  btn: TToolButton;
  grp: TGroup;

begin
  btn := Sender as TToolButton;
```

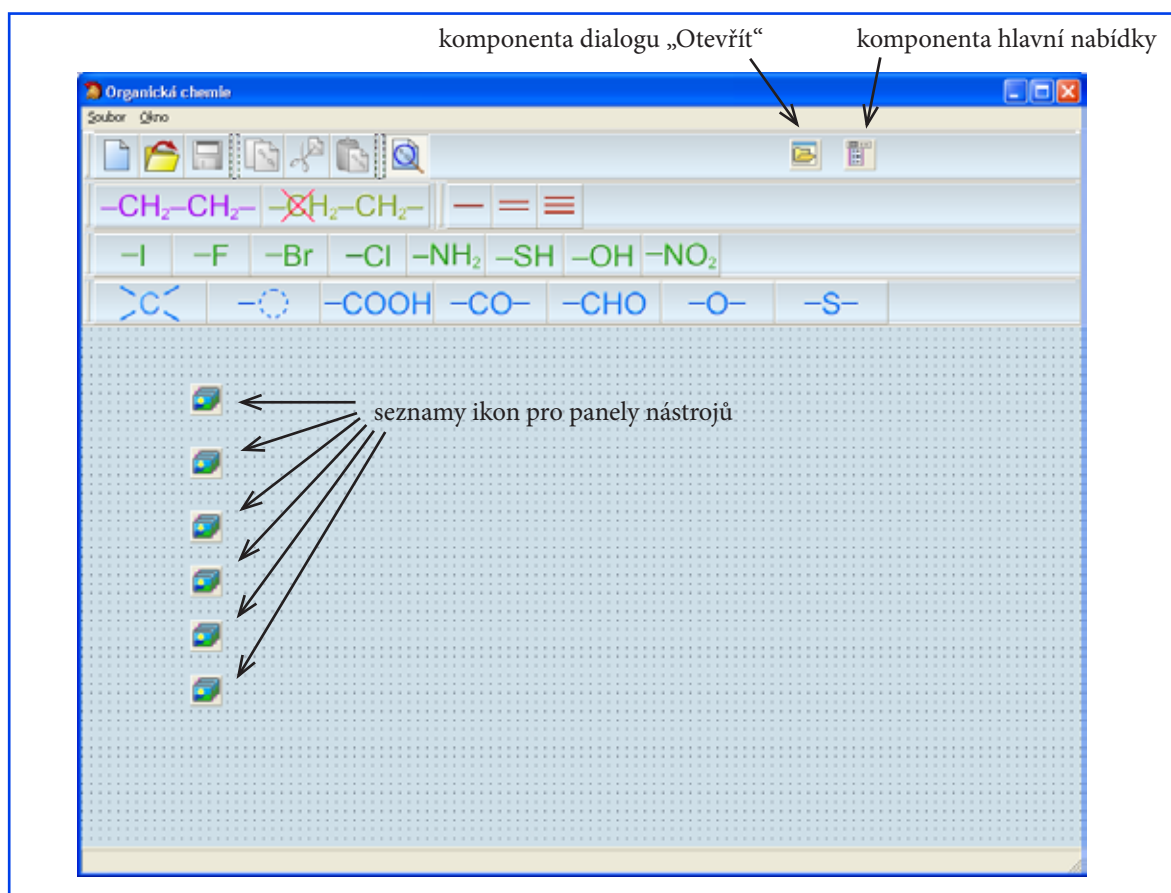


```

f := TFormulaImage.Create(nil);
f.Visible := False;
f.Parent := Self;
grp := DefChemData.Groups[btn.Tag];
case grp.Value of
  1: f.Text := grp.Name + '(10E)';
  2: f.Text := grp.Name + '(12E) (10E)';
  3: f.Text := grp.Name + '(10E) (11E) (12E) (13E)';
  else f.Text := grp.Name;
end;
f.DropType := dftBind;
f.FreeOnDrop := True;
f.StartDragNew;
end;

```

Nejprve dojde k vytvoření prázdné neviditelné instance prvku *TFormulaImage*. Po identifikaci funkční skupiny pomocí vlastnosti tlačítka *Tag* se běh rozdělí na čtyři případy podle vaznosti a ke příslušnému typu se vytvoří uzly vzorce pomocí jejich textové reprezentace. Nakonec se nastaví typ operace drag and drop, a ta se automaticky zahájí. Navenek se toto projeví změnou kurzoru myši a zobrazením průsvitné podoby skupiny. O další se již třída *TMainForm* nestará a vše je v režii systému a třídy *TFormulaImage*.



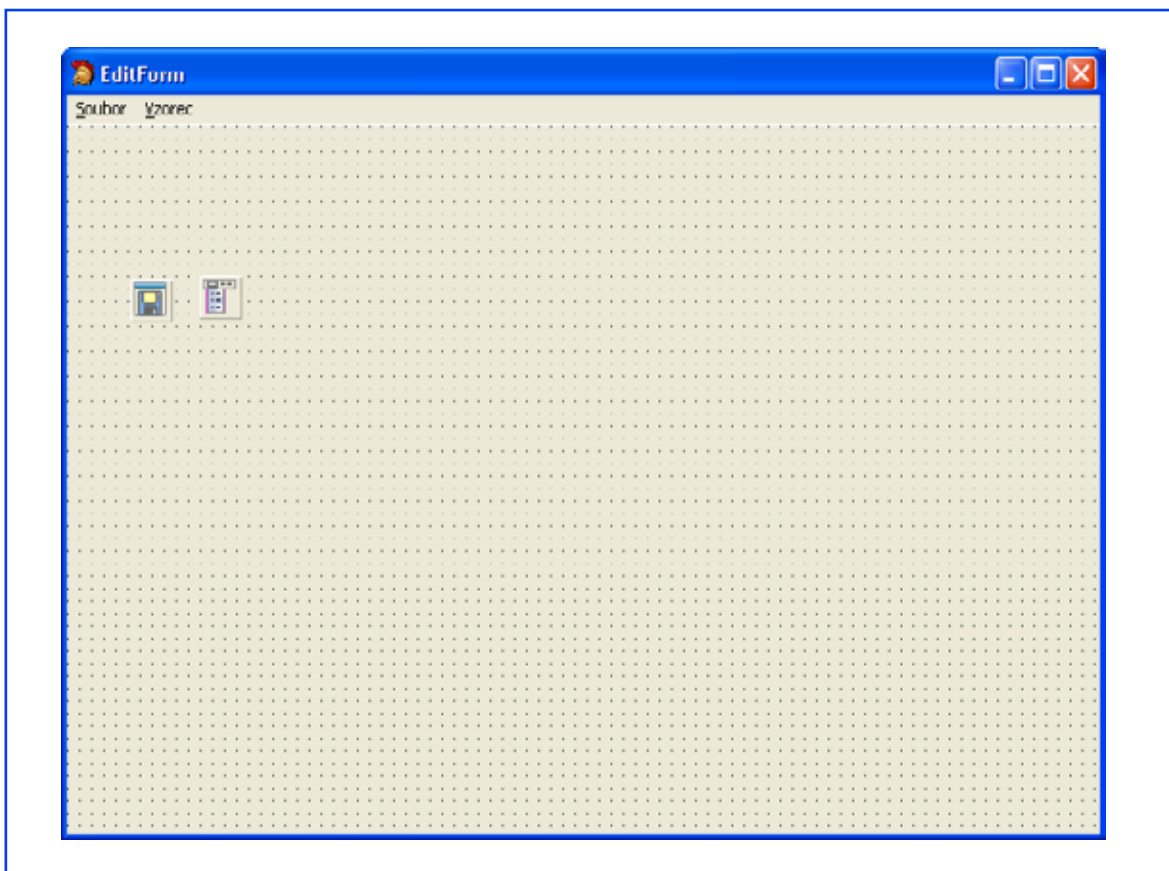
Obrázek 16: Chemie.exe – návrh hlavního formuláře aplikace



Aplikace také kontroluje, zda je ve schránce Windows k dispozici vzorec v nativním formátu. Používá k tomu zvláštní funkci Windows API *SetClipboardViewer*. Ta umožňuje zařadit okno aplikace do řetězu prohlížečů shránky. Každé okno je pak pomocí zpráv systému Windows upozorněno na změnu obsahu shránky nebo změnu v seznamu jejích prohlížečů. Při prvním vytvoření instance třídy *TMainForm* se zaregistruje hlavní okno aplikace ve Windows a pomocí metod *WMDrawClipboard* a *WMChangeCBchain* obsluhuje příchozí zprávy. V první z nich je vždy provedena kontrola formátů obsažených ve schránce, a pokud je nalezena shoda s nativním formátem vzorce, dojde ke zvýraznění tlačítka „Vložit“ a povolení odpovídající nabídky. V opačném případě se nabídka i tlačítko zakáže pro použití.

### 2.2.2 Formulář *TEditForm*

Hlavní funkcí tohoto formuláře je nést na sobě jednu instanci třídy *TFormulaImage*. Ta je vytvořena v obsluze události *OnCreate* při každém vytvoření nového editačního okna. Nastavením vlastnosti *Align* na hodnotu *alClient* je zajištěno, že je ovládací prvek automaticky rozmáhován na celou pracovní plochu rodčovského okna. Formulář dále rozšiřuje hlavní nabídku o funkci uložení vzorce, jeho vymazání a přesuny pomocí shránky Windows. Všechny tyto



Obrázek 17: Chemie.exe – návrh formuláře editačního okna

operace jsou však zajišťovány samotnou komponentou *TFormulaImage*, takže činnost kódu třídy *TEditForm* se omezuje na vyvolání příslušných metod v obsluze událostí.

Pro usnadnění práce s programem třída *TEditForm* kontroluje, zda při zavírání okna nedojde ke ztrátě neuloženého vzorce. Děje se tak v obsluze události *OnCloseQuery*, která je vyvolána po kliknutí na zavírací ikonu okna (křížek) nebo po aktivaci položky „Zavřít“ v systémové nabídce okna. V případě, že je hodnota vlastnosti *Modified* připojené komponenty *TFormulaImage* nastavena na *True*, formulář zobrazí systémový dialog s dotazem, zda si uživatel přeje změněný vzorec uložit. Pokud vybere možnost „Ano“ nebo „Ne“, okno se zavře (po případném uložení), vybere-li možnost „Storno“, zavření okna zabrání.

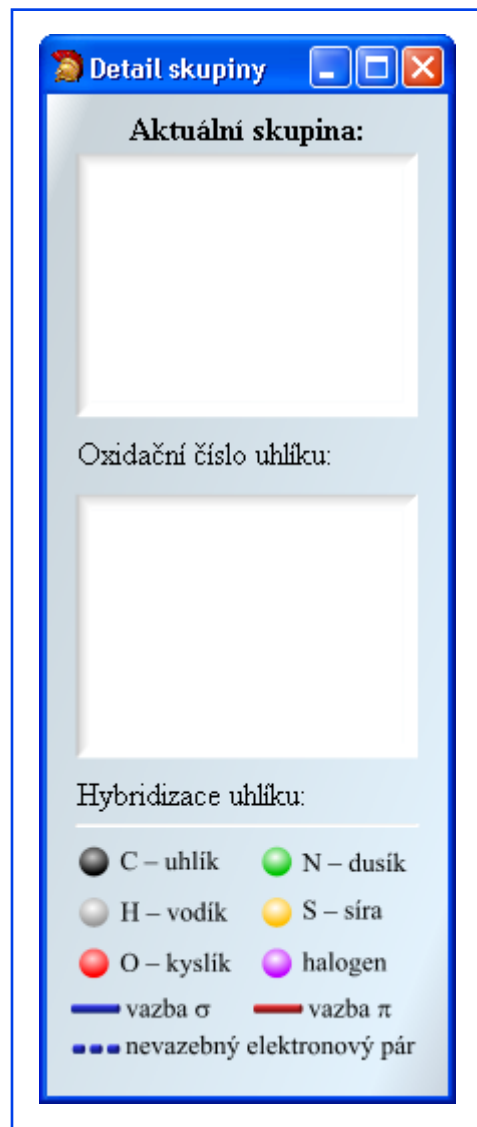
### 2.2.3 Formulář *TInspectForm*

Tento velice jednoduchý formulář pouze obsahuje ovládací prvek *TFormulaInspector*. V režimu návrhu byl do vlastnosti *Bitmap* nastaven podkladový obrázek, který také obsahuje legendu k 3D náhledu skupin.

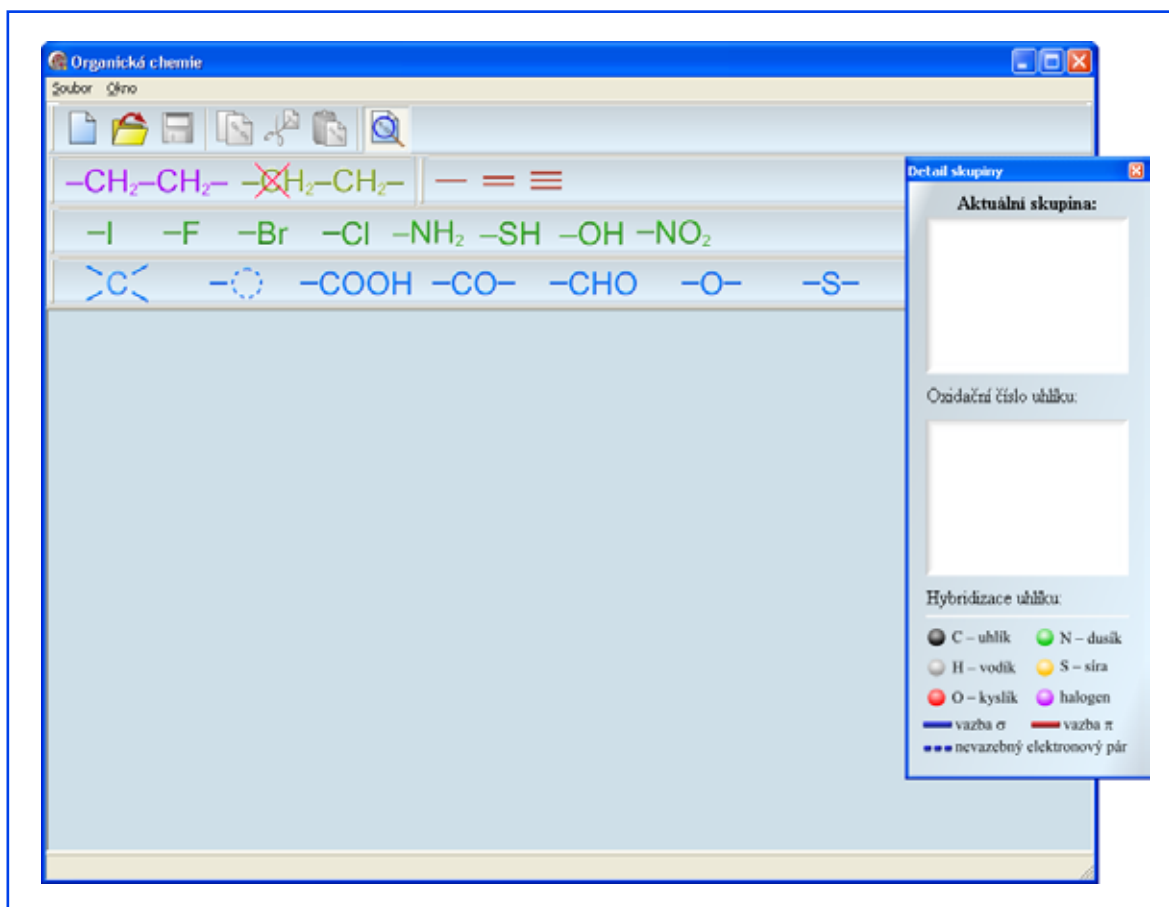
### 2.2.4 Ovládání aplikace

Po spuštění ukázkové aplikace se objeví hlavní okno a okno inspektoru skupin (viz obrázek 19). U každého tlačítka na panelech nástrojů se zobrazuje tip, který se objevuje při ponechání kurzoru myši nad prvkem.

První akcí, kterou je třeba provést, je vytvoření prázdného editačního okna nebo otevření souboru s uloženým vzorcem. K tomuto účelu slouží první dvě ikony na souborovém panelu nástrojů. Třetí ikona pak zajišťuje ukládání již vytvořených vzorců. Další operace se vzorcem jako celkem lze provádět pomocí zbývajících ikon na prvním panelu nástrojů. Jsou to: Kopírovat (do schránky), vložit a vyjmout. Poslední ikona pak zobrazuje okno inspektoru.



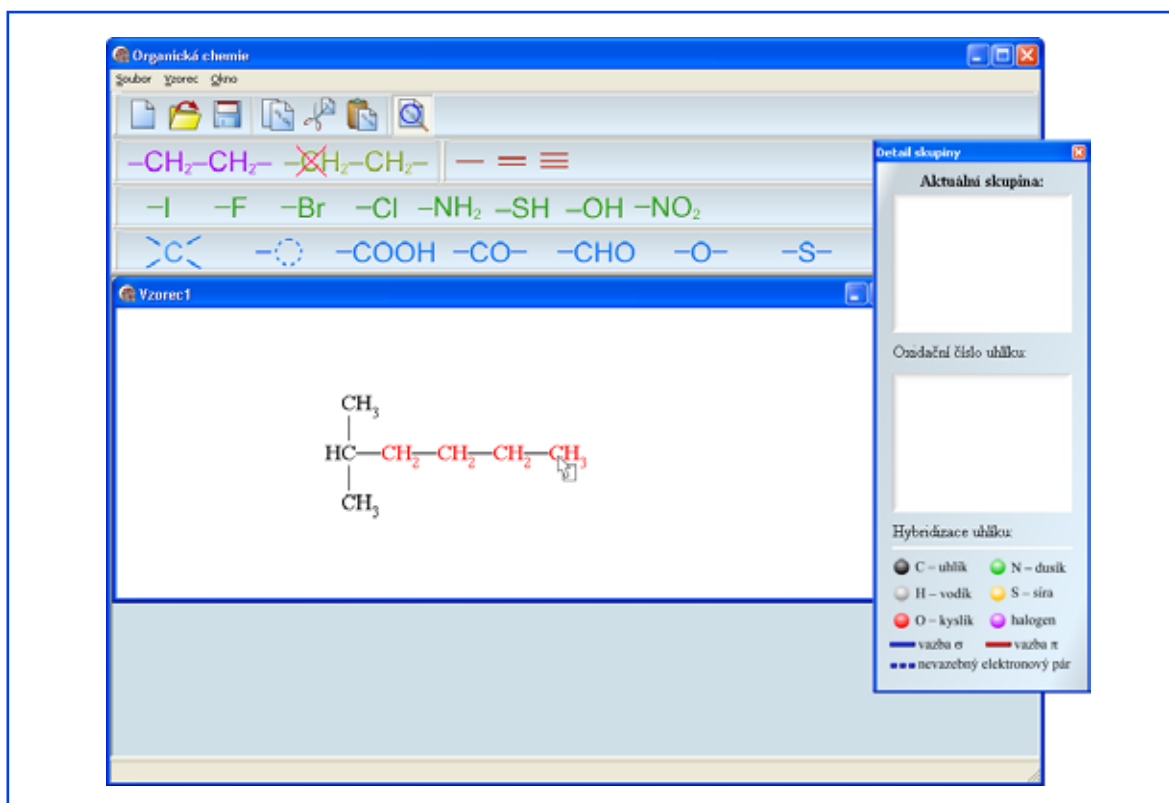
Obrázek 18: Chemie.exe – návrh formuláře s inspektorem



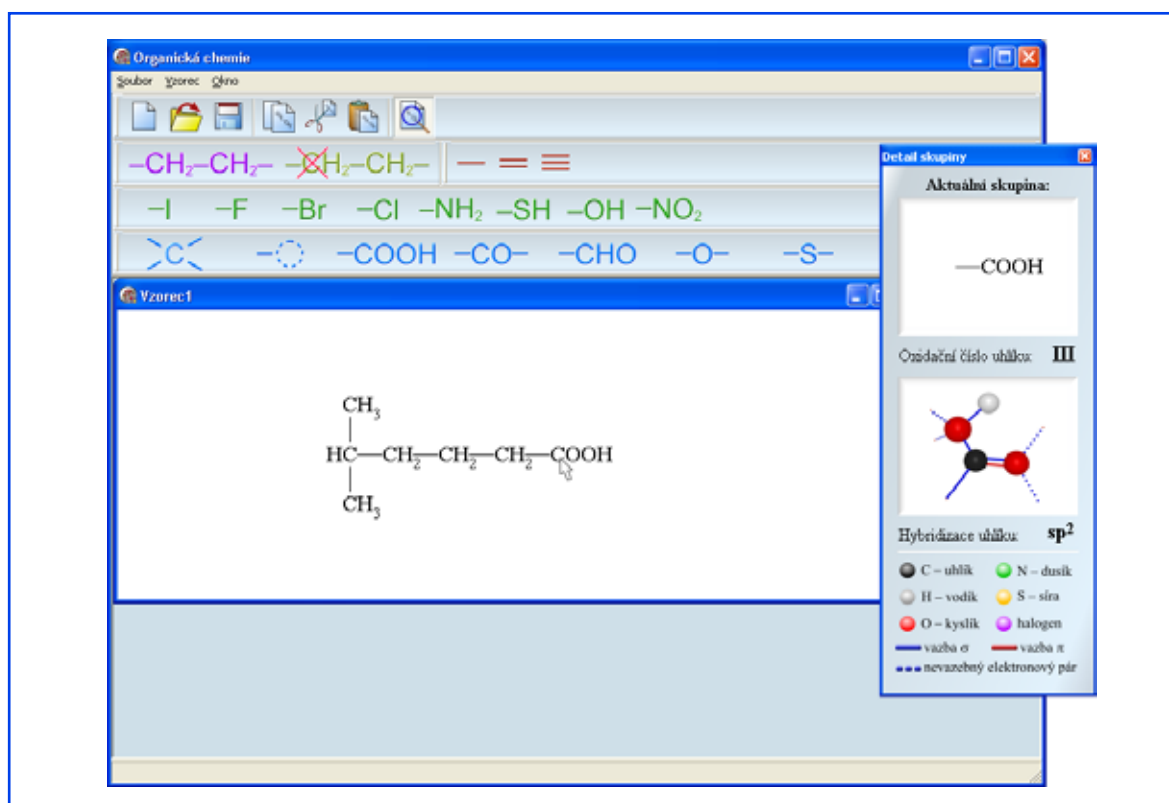
Obrázek 20: Chemie.exe – hlavní okno aplikace a panely nástrojů

Vytváření a všechny úpravy vzorce jsou prováděny pomocí technologie drag and drop (přetahování myši). Pokud chce uživatel například vytvořit uhlíkatý řetězec, klikne nejprve na ikonu tvorby řetězce (první ikona na druhém panelu), potom na počáteční místo v editačním okně a tažením myši řetězec vytvaruje do požadované podoby. Obdobným způsobem lze připojovat k existujícímu vzorci další řetězce. Vzorec má na všechny úkony, které ho mění, interaktivní odezvu, uživatel tedy získává hned představu o výsledku prováděné operace. Změněné části vzorce se pro ještě větší přehlednost vybarvují červeně.

Pokud je zobrazeno okno inspektoru a uživatel pohybuje myší nad otevřeným vzorcem, zobrazují se informace o skupině, nad kterou je kurzor (viz obrázek 22). Oxidační číslo uhlíku je určeno pouze tehdy, je-li atom uhlíku ve skupině přítomen a skupina neobsahuje volnou vazbu. (Ta se vytvoří náhradou skupiny „prázdným atomem“ – druhá ikona na posledním panelu nástrojů.)



Obrázek 21: Chemie.exe – připojování řetězce tažením



Obrázek 22: Chemie.exe – náhled karboxylové skupiny v inspektoru

### 3 ZÁVĚR

Výsledkem této práce jsou komponenty VCL umožňující kreslit jednoduché racionální vzorce (lineární) používané v současné školní praxi. Použití komponent je demonstrováno na ukázkové aplikaci s atraktivním designem ovládacích prvků a maximálně zjednodušeným ovládáním. Níže uvedená tabulka provádí srovnání klíčových vlastností zmiňovaných produktů s touto prací. Počet kliknutí, jako kritérium obtížnosti ovládání, bylo testováno na jednoduché struktuře 2-thiapropanu v lineární podobě. Výchozí pozicí byl příslušný editor nastavený co nejvíce pro vykreslování lineárních racionálních vzorců. Cena byla stanovena jako minimální pro jednu licenci pro akademické použití.

	tato práce	ISIS/Draw	ChemDraw	ChemSketch	DrawIt
uživatelské rozhraní	barevné	standardní	standardní	standardní	strohé
čeština	ano	ne	ne	ne	ne
možnost lokalizace	ano	ne	ne	ne	ne
počet kliknutí na testovací vzorec	3	5	7 + psaní všech skupin (7 zn.)	4	8 + psaní všech skupin (7 zn.)
výchozí typ vzorce	racionální	zjednodušené	zjednodušené	zjednodušené	zjednodušené
export	BMP, WMF	více formátů	více formátů	více formátů	více formátů
import	žádný	více formátů	více formátů	více formátů	více formátů
podpora OLE	ne	ano	ano	ano	ano
cena	0 Kč	0 Kč	43.000 Kč	0 Kč	0 Kč

V porovnání s dostupnými editory má tato práce řadu vlastností, které ji umožňují lépe použít při výuce chemie nebo při její přípravě. Práce není ovšem kompletní a заслужuje další vývoj. I v této podobě však představuje použitelnou pomůcku pro první fázi výuky organické chemie. Při používání žáky v nich také pomáhá budovat návyky, které jim později usnadní použití komplexních editorů struktur.

## SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

1. ACD/ChemSketch. [online] Advanced Chemistry Development, aktualizováno 20. 12. 2005 [cit 2005-28-12] Dostupné na WWW <[http://www.acdlabs.com/products/chem\\_dsn\\_lab/chemsketch/](http://www.acdlabs.com/products/chem_dsn_lab/chemsketch/)>.
2. BENEŠ, P.; PUMPR, V.; BANÝR, J.: *Základy chemie 1. (3. vyd.) Praha : Fortuna, 2002.*
3. BENEŠ, P.; PUMPR, V.; BANÝR, J.: *Základy chemie 2. (3. vyd.) Praha : Fortuna, 2003.*
4. BENEŠOVÁ, M; SATRAPOVÁ, H.: *Odmaturuj z chemie.* Brno : Didaktis, 2002. ISBN 80-86285-56-1.
5. CANTŮ, M.; *Myslíme v jazyku Delphi 6.* Praha : Grada Publishing, 2002. ISBN 80-247-0335-1.
6. CHEMDRAW. [online] Cambridge Soft, aktualizováno 2005 [cit 2005-11-05] Dostupné na WWW <<http://products.cambridgesoft.com/family.cfm?FID=2>>.
7. ČTRNÁCTOVÁ, H.; KLÍMOVÁ, H.; VASILESKÁ, M.: *Úlohy ze středoškolské chemie.* Praha : SPN, 1991. ISBN 80-04-25838-7.
8. FIKR, J.; KAHOVEC, J.: *Názvosloví organické chemie.* Olomouc : Rubico, 2002.
9. GASTEIGER, J.; ENGEL T.: *Chemoinformatics.* Wiley-VCH Verlag, 2002. ISBN 3-527-30681-1.
10. GUNDA, T. E.: *Chemical Drawing Programs* [online] Debrecen, Hungary : Univerzity of Debrecen, aktualizováno 16. 5. 2005 [cit 2006-01-05] Dostupné na WWW: <<http://dragon.klte.hu/~gundat/rajzprogramok/dprog.html>>.
11. HONZA J., MAREČEK, A.: *Chemie pro čtyřletá gymnázia (2. díl).* Olomouc : Nakladatelství Olomouc, 1998. ISBN 80-7182-056-3.
12. KOTLÍK, B.; RŮŽIČKOVÁ, K.: *Chemie II v kostce pro střední školy : Organická chemie a biochemie.* Havlíčkův Brod : Nakladatelství Fragment, 1997. ISBN 80-7200-057-8.
13. MDL ISIS/Draw. [online] Elsevier MDL, aktualizováno 2005 [cit 2005-11-05] Dostupné na WWW <[http://www.mdl.com/products/framework/isis\\_draw/index.jsp](http://www.mdl.com/products/framework/isis_draw/index.jsp)>.
14. PANICO, R.; POWELL W. H.; RICHER, J.-C.: *Průvodce názvoslovím organických sloučenin podle IUPAC.* Praha : Academia, 2000. ISBN 80-200-0724-5.
15. ŠILHÁNEK, J.: *Chemická informatika.* Praha : VŠCHT, 2002.

16. *Structure Drawing and Reporting – ChemWindow*. [online] Bio-Rad Laboratories, aktualizováno 2005 [cit 2005-11-05] Dostupné na WWW <<http://www.chemwindow.com>>.
17. VACÍK, J.; BARTHOVÁ, J.; PACÁK, J. A KOL.: *Přehled středoškolské chemie*. Praha : SPN, 1995. ISBN 80-85937-08-5.
18. ŽÁRA, J.; BENEŠ, B.; FELKEL, P.: *Moderní počítačová grafika*. Praha : Computerpress, 1998. ISBN 80-7226-049-9.