



EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání

MSMT
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



Moravskosleský
kraj

NOVÉ TRENDY V CHEMICKÉM VZDĚLÁVÁNÍ

**VYUŽITÍ SOFTWARE PRO KRESLENÍ
MOLEKUL A JEJICH MODELOVÁNÍ**

MARTIN MUCHA

OSTRAVA, 2020

ODBORNÉ, KARIÉROVÉ A POLYTECHNICKÉ VZDĚLÁVÁNÍ V MSK

REGISTRAČNÍ ČÍSLO PROJEKTU OKAP: CZ.02.3.68/0.0/0.0/16_034/0008507



EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání



Moravskosleský
kraj

Obsah

Úvod	2
1 Tvorba vzorců a rovnic na počítači v softwaru ACD/Chemsketch	3
1.1 Základní informace o programu	3
1.2 Instalace programu	3
1.3 Rozhraní programu.....	3
1.4 Tvorba vzorců	5
1.5 Tvorba rovnic	13
1.6 Knihovna šablon	17
1.7 3D zobrazení	18
2 Tvorba nákresů základních aparatur	20
3 Použitá literatura	30



EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání



Úvod

Pracovní text je určen učitelům ZŠ a SŠ, účastníkům pěti kurzů aktivity Nové trendy v chemickém vzdělávání.

Pro tvorbu chemických vzorců (hlavně organických struktur) a zápisů chemických rovnic existuje řada různých programů, které se liší nabídkou integrovaných funkcí, ale také licencí. Nejzákladnější funkce nabízí program Chem4word (<https://www.chem4word.co.uk/>), který je šířený pod licencí GNU/GPL. Jedná se o ad-on pro Word, tento program se tedy integruje přímo do rozhraní MS Word. Dalšími zástupci jsou např. Model ChemLab (<http://modelscience.com/>, placený software) nebo BK Chem (<http://bkchem.zirael.org/>) nebo Marvin (<https://chemaxon.com/products/marvin>). Typ operačního systému (MS Windows, MacOS, Linux) také ovlivňuje volbu software, ne každý software je možné provozovat na všech operačních systémech. V rámci tohoto kurzu bude probrán výborně vybavený software od společnosti ACD Labs, konkrétně freewarový ChemSketch (<https://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/>), který lze získat také např. ze slunecnice.cz (<https://www.slunecnice.cz/>). V tomto programu lze nejen vytvářet vzorce, rovnice, ale i nákresy aparatur. ChemSketch rovněž disponuje základními nástroji pro modelování 3D chemických struktur, což je výhodné pro názornou vizualizaci.

Účastníci kurzu:

- Naučí se pracovat se softwarem pro tvorbu chemických vzorců, rovnic a aparatur



1 Tvorba vzorců a rovnic na počítači v softwaru ACD/Chemsketch

1.1 Základní informace o programu

ACD/ChemSketch představuje program pro tvorbu vzorců, rovnic, reakčních schémat a nákresů aparatur. Jeho užívání je intuitivní, výstup lze kopírovat prostřednictvím schránky do různých textových editorů nebo programů pro tvorbu prezentací. Objekty se ve většině případů vkládají do dokumentů ve formě obrázků. Při tvorbě lze rovněž využívat knihovnu šablon obsahující řadu předpřipravených struktur.

1.2 Instalace programu

Po stažení instalačního souboru je potřeba tento spustit a následně se řídit pokyny na obrazovce. Instalace je na většině počítačů bezproblémová a nijak nevybočuje ze standardu. Na počítačích s MS Windows (7, 8, 10) je potřeba instalaci povolit v dialogovém okně **Řízení uživatelských účtů**, které se otevře po spuštění instalačního souboru. Drobné problémy mohou způsobovat také některé firewally, které hlídají i instalace souborů stažených z internetu. V případě blokace instalace ze strany firewallu je potřeba instalaci povolit.

1.3 Rozhraní programu

Rozhraní programu se nijak neodlišuje od jiných programů pro MS Windows a je zobrazeno na obr. 1. Úplně nahoře je lišta nabídek menu, pod ní se nacházejí tlačítka/ikony jednotlivých funkcí programu, které jsou k dispozici.

V levé části obrazovky se nachází nabídka nejpoužívanějších prvků pro tvorbu vzorců, a také možnost vybrat jakýkoli prvek periodické soustavy prvků. Rovněž je možné v levé části obrazovky najít funkce pro přidání popisků, tvorbu radikálů, iontů, nastavení

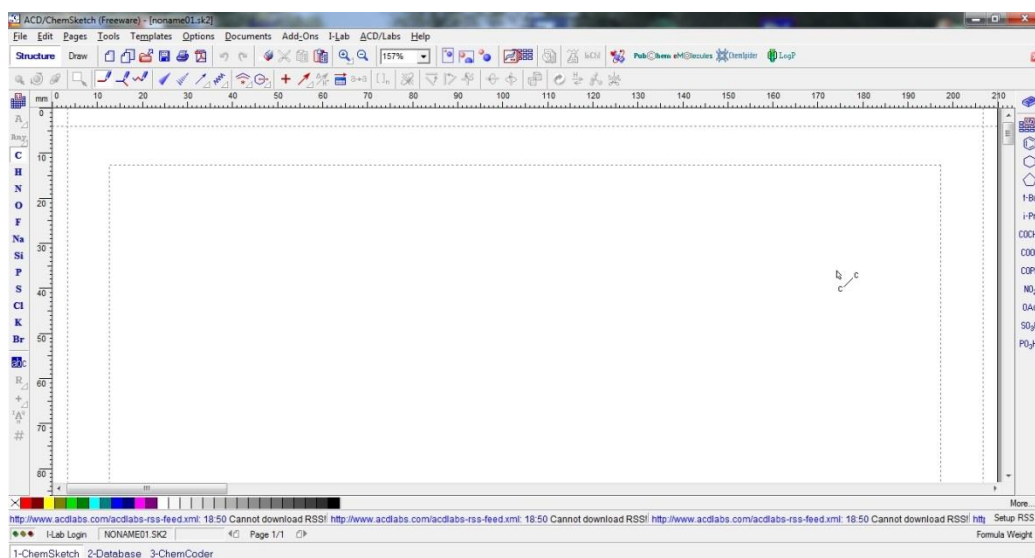


vlastností jednotlivých atomů. Tyto další funkce jsou ve většině případů dostupné až po výběru konkrétního atomu.

V pravé části obrazovky se pak nacházejí funkce pro přidávání celých organických skupin nebo zbytků různých uhlovodíkových řetězců a uhlovodíkových kruhů. Nejčastěji používané struktury se nacházejí přímo v základním okně programu. Pro zobrazení kompletního výběru je potřeba zvolit příslušnou ikonu, která otevře dialogové okno pro výběr požadované struktury.

Hlavní částí okna programu je pracovní plocha, do níž se klikáním vytváří požadovaná struktura (vzorec), rovnice nebo aparatura. Vytvořené struktury lze ukládat jak do firemního formátu, tak také do různých formátů pro ukládání molekul (jen vzorce/molekuly) nebo do formátů obrázkových. Je také možný export do PDF. Rovněž lze strukturu označit a klasickou technikou prostřednictvím schránky ji zkopírovat do textového editoru nebo do prezentačního softwaru, kam se vloží ve formě obrázku.

Při najetí myší nad kteroukoli ikonu v okně programu ChemSketch a chvíli čekání lze zobrazit název funkce, která se pod danou ikonou skrývá.

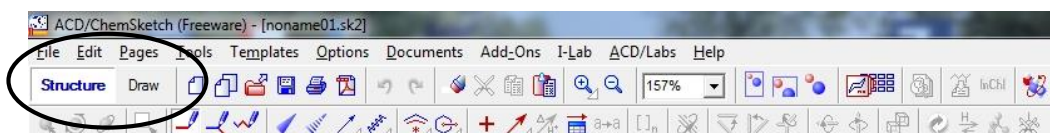


Obr. 1: Rozhraní programu ChemSketch



1.4 Tvorba vzorců



Program ChemSketch se hodí především pro tvorbu složitějších vzorců (především strukturních), základní vzorce a rovnice anorganické chemie lze jednodušeji vytvořit přímo v textovém editoru. ChemSketch lze s výhodou využít především pro tvorbu vzorců a rovnic organické chemie. Po spuštění programu je aktivní tvorba chemických struktur (vzorců a rovnic). Přepínání mezi funkcemi pro tvorbu vzorců a nákresů (viz dále v textu) je možné klepnutím na tlačítka **Structure/Draw** vlevo nahoře v okně programu (obr. 2). Vedle těchto tlačítek se nacházejí funkce pro vložení nového dokumentu nebo stránky, dále možnost pro otevření uloženého souboru, ukládání dat, funkce pro tisk a export do formátu PDF, tlačítka zpět a vpřed, možnosti vyjmutí, kopírování a vložení dat, řízení velikosti zobrazení a otevírání okna šablony. Ve spodní řadě tlačítek se pak nacházejí funkce pro výběr a posun, výběr a rotaci či změnu velikosti a výběr a 3D rotaci. Dále je zde funkce „laso“. V další části se nacházejí možnosti pro zadávání struktur: normální zadávání (**Draw normal**) – klepnutím se vloží základní část a pak se klepáním a tažením vytváří celý vzorec. Pomocí **Draw continuous** lze vkládat řetězce pouhým klikáním a pomocí **Draw chains** lze stiskem levého tlačítka myši a tažením vkládat jednoduše dlouhé řetězce. Další funkce umístěné v této části hlavního menu jsou určeny pro tvorbu pseudo 3D struktur (zobrazení vazeb jako plných nebo čárkovaných trojúhelníků, jsou zde umístěny možnosti tvorby delokalizovaných vazebných systémů u označených molekul a další funkce).

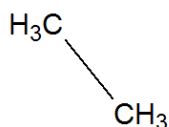


Obr. 2: Přepínání mezi tvorbou vzorců a kreslením tvarů

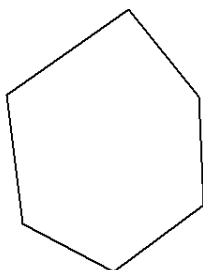


Postup tvorby strukturního vzorce molekuly si ukážeme na fenylalaninu:

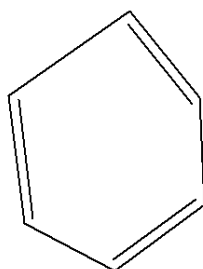
- 1) Vybereme mód **Draw normal** () a v levé části okna vybereme uhlík ()
- 2) Klepnutím kamkoli do pracovní plochy vložíme molekulu CH₄ (ChemSketch automaticky doplňuje atomy vodíku).
- 3) Stiskneme tlačítko levé tlačítko myši na atomu uhlíku a se stisknutým tlačítkem „vytáhneme“ vazbu k dalšímu uhlíku.



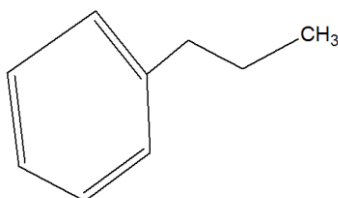
- 4) Opakováním bodu 3 vytvoříme šestičlenný kruh. Kruh uzavřeme tažením myši mezi 6. a 1. uhlíkem.



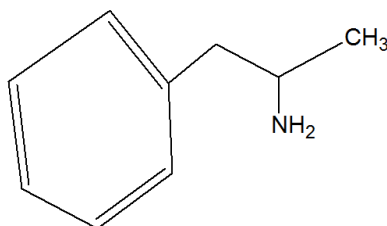
- 5) Kliknutím levým tlačítkem myši na vybranou vazbu ji lze změnit na dvojnou/trojnou. Vytvoříme tak benzenový kruh.



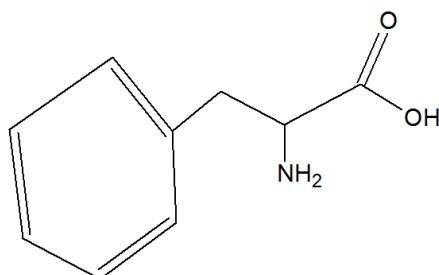
6) Dalším opakováním bodu 3 vytvoříme zbytek uhlíkové struktury fenylalaninu.




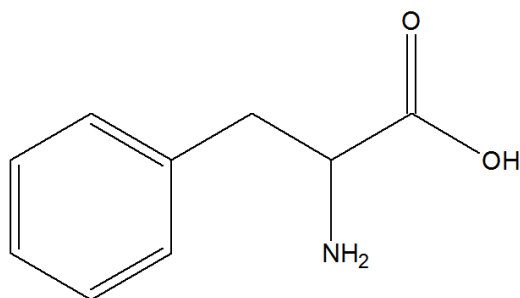
7) V levé části okna vybereme dusík (**N**) a vytvoříme skupinu -NH_2 postupem podle bodu 3.



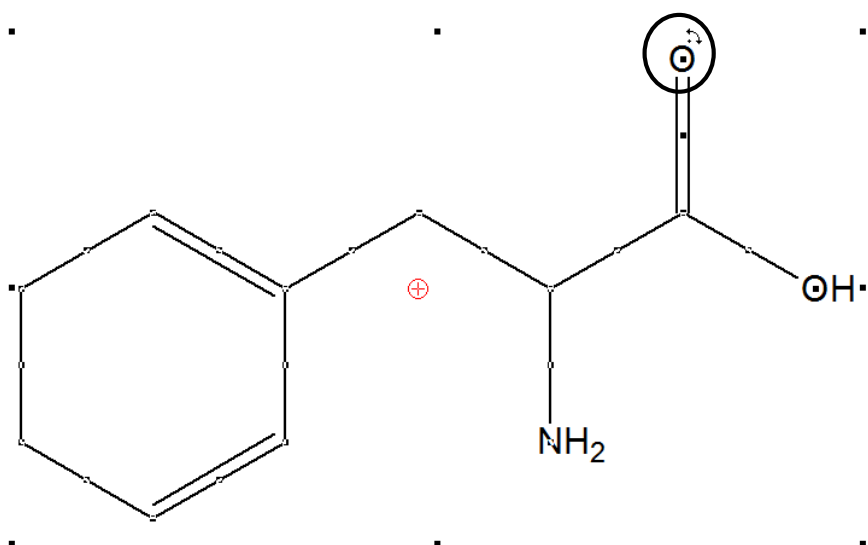
8) Podobným způsobem vybereme kyslík a vytvoříme skupinu -COOH . Dvojnou vazbu na jeden z kyslíků vytvoříme kliknutím na tuto vazbu.




9) Takto vytvořenou strukturu optimalizujeme pomocí funkce **Clean structure** ()




Vytvořenou strukturu je možné pootočit do požadované pozice, příp. ji posunout, zmenšit nebo zvětšit. Pro otočení je potřeba u označené struktury najetím na některou z krajních skupin dosáhnout změny kurzoru na kurzor pro otočení (obr. 3) a poté klepnutím a tahem strukturu otočit.



Obr. 3: Kurzor pro otáčení strukturou

Další možností manipulace je nastavení určité vazby do horizontální/vertikální polohy nebo překlápění molekuly (). Nejdříve je potřeba zvolit funkci a následně kliknout na danou vazbu v molekule.

Ze struktur lze samozřejmě jednotlivé skupiny či atomy odmazávat. Lze tak učinit dvěma způsoby. Buď se atom, nebo skupina označí a následně smaže stisknutím klávesy **Delete**, nebo lze zvolit nástroj **Delete** z hlavní nabídky (ikona ) a následně klikáním na patřičné atomy je odstranit.

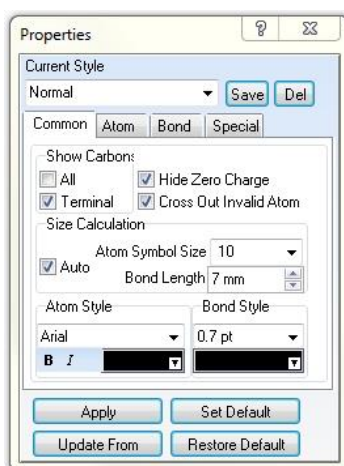
V levé nabídce jsou zobrazeny pouze nejpoužívanější prvky. Pokud je potřeba vložit atom, který není v levé nabídce zobrazen, lze zobrazit periodickou tabulku prvků a z ní vybrat požadovaný atom. Tabulku lze vyvolat tlačítkem umístěným nahoře v levém menu (obr. 4).



Obr. 4: Ikona pro otevření periodické tabulky prvků



V základním nastavení vytváří program ChemSketch zjednodušené racionální vzorce, kdy jsou vynechány všechny uhlíky až na koncové. Pokud je potřeba zobrazit všechny atomy uhlíku v řetězcích, je možné toto zobrazení nastavit v nabídce **Tools – Structure properties**. Po výběru této možnosti se otevře dialogové okno s nastaveními pro danou strukturu (obr. 5). Zaškrtnutím položky All na kartě Common v části Show Carbon lze nastavit zobrazení všech uhlíků ve struktuře. Strukturu, u které se nastavení upravuje, je samozřejmě nutné mít označenou. V této nabídce je možné také upravit strukturu (velikost písma značek prvků a délku vazeb). Pro úpravu je vhodné vypnout zaškrtnutí položky auto v okně **Properties**.



Obr. 5: Dialogové okno Structure properties

Někdy je potřeba (zvláště u rovnic) vložit ion nebo radikál. Jako jednoduchý příklad bude použit ion Cl^- a radikál chloru. V první řadě je potřeba do pracovní plochy vložit atom Cl. Kliknutím na Cl v levé části obrazovky a kliknutím kdekoli v pracovní ploše se vytvoří HCl. ChemSketch při přidávání atomů postupuje tak, aby byla vložena molekula se správným počtem valencí vůči oxidačnímu číslu. Nejčastěji se tak děje doplněním vodíků (nekovy, polokovy) nebo vložením iontu (kovy). Nyní je potřeba vybrat v levé části funkci pro změny náboje atomů (obr. 6). Po rozkliknutí je možné vybrat si, zda se má aplikovat zvýšení náboje (+) snížení náboje (-) nebo zda se má přidat znak pro radikál (tečka). Po výběru požadovaného



EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání

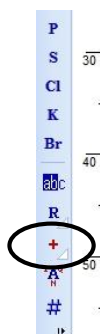
MSMT
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



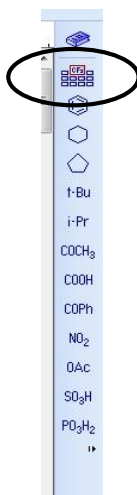
Moravskoslezský
kraj

symbolu se následně kliknutím na zvolený atom ve struktuře/vzorci tento převede na anion, kation nebo radikál. Funkce ovlivňuje tu část struktury, která byla původně vložena (v tomto příkladu chlór). ChemSketch se při změnách náboje snaží vždy dopočítat strukturu, aby zůstaly v platnosti obecné zákonitosti (např. čtyřvalný uhlík).

Pro vkládání základních organických struktur, jako jsou např. benzenový kruh, cyklohexan, cyklopentan, sulfoskupiny, karboxy skupiny a další lze využít ikon v pravé části obrazovky (obr. 7). Po výběru požadované struktury lze tuto klepnutím přidat do modelované struktury nebo jen tak do pracovní plochy a poté začít přidávat další atomy. Další dostupné struktury (uhlovodíkové zbytky) pro vkládání lze získat po klepnutí na tlačítko **Table of radicals**, které je na obr. 7 označeno elipsou.



Obr. 6: Funkce pro změnu náboje na atomu

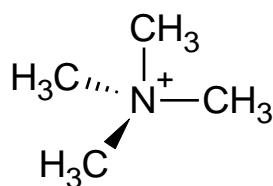


Obr. 7: Uhlovodíkové a další předpřipravené struktury

Další možnosti tvorby vzorců se nacházejí ve druhém řádku ikon hlavního menu. Zleva doprava se jedná v první řadě o tvorbu pseudo 3D struktur (obr. 8), tedy imitace prostorového uspořádání v rovině. Jednotlivé vazby lze znázornit jedním ze tří způsobů. Zaprvé klasicky čarou. Vazby znázorněné tímto způsobem leží v rovině obrazu. Dále je možné použít plný „trojúhelník“ (vazba směřuje před rovinu nákresu) nebo přerušovaný/čárkovaný „trojúhelník“ (vazba směřuje za rovinu nákresu). Příklad takového vzorce se nachází na obr. 9.



Obr. 8: Další možnosti úpravy a tvorby vzorců



Obr. 9: Pseudo 3D struktura



Dalšími funkcemi je znázorňování křivek u delokalizovaných elektronových systémů a π -komplexů (obr. 10). Tyto funkce nacházejí značné využití zvláště v organické chemii při tvorbě reakčních schémat, v nichž dochází k adici na aromatické kruhy. Funkce se aplikují na již předem vytvořené a označené struktury. Použití těchto funkcí bude podrobně popsáno v části *Tvorba rovnic*.



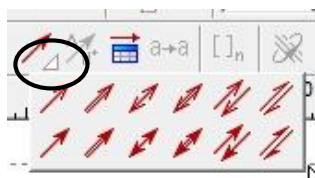
Obr. 10: Křivky delokalizace a tvorba π -komplexů

1.5 Tvorba rovnic

Tvorba rovnic a reakčních schémat vychází z tvorby vzorců. V první řadě je potřeba umět vytvářet všechny typy vzorců, které se budou v rovnici vyskytovat. V pracovní ploše se tedy vytvoří všechny potřebné vzorce a následně se pospojují do výsledné rovnice. K tomu jsou potřeba jen znaky "plus" a také samozřejmě reakční šipky. Vkládání těchto znaků je možné z hlavní nabídky. K základnímu použití stačí první tři ikony (+, vkládání šipek a popis nad a pod šipkou, obr. 11). Ikonou „+“ lze vložit klasické znaménko, kterým lze následně pohybovat jako kterýmkoli jiným objektem. Při vkládání šipek nejsme limitováni pouze základní šipkou zleva doprava. Po klepnutí na trojúhelník ve spodní části ikony se zobrazí nabídka různých typů šipek (obr. 12).

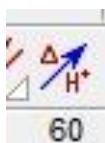


Obr. 11: Funkce pro tvorbu chemických rovnic

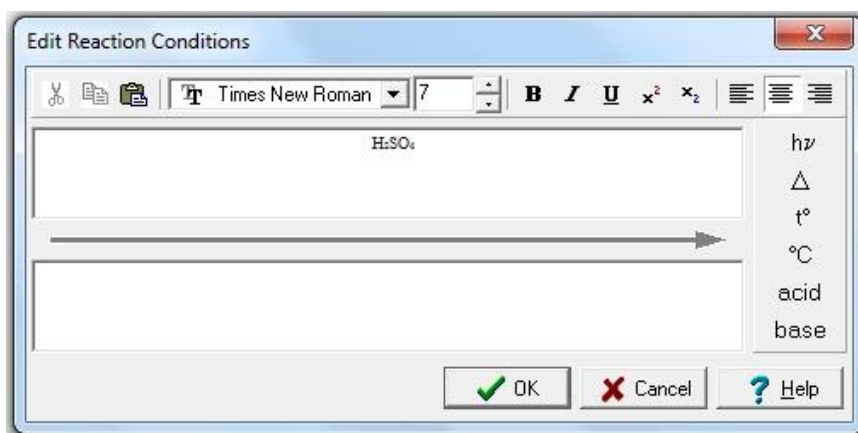


Obr. 12: Možnosti vkládání šipek

K reakční šipce se často přidává popis (nad šipku se píše podmínky reakce, příp. méně významný reaktant a pod šipku se píše méně významné produkty). Nejdříve je potřeba vytvořit samotnou rovnici vytvořením jednotlivých vzorců a následným pospojováním pomocí znaků + a šipek. Poté je nutné vybrat nástroj pro popis šipek (Reaction arrow labeling, obr. 13) a klepnout na šipku, u níž je potřeba vložit popis (reakční podmínky). Otevře se dialogové okno **Edit reaction conditions** (obr. 14), kde lze vložit popis nad a pod šipku.







Obr. 13: Nástroj pro vkládání popisu reakční šipky

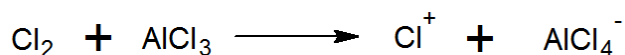


Obr. 14: Okno editace reakčních podmínek - popisu reakční šipky





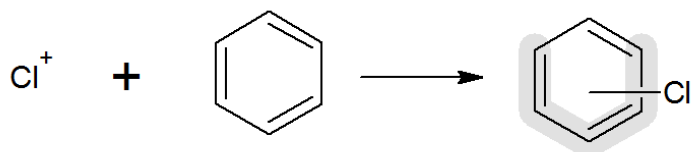
Postup tvorby rovnic elektrofilní substituce – chlorace benzenu:



- 1) Vytvoříme rovnici vzniku Cl^+ . V levé části okna programu vybereme Cl a kliknutím jej vložíme do pracovní plochy. Následně v levé části vybereme nástroj **Edit atom label** () , klikneme na vložený HCl a změníme vloženou strukturu na Cl_2 . Následně vložíme reakční + () a stejným způsobem jako Cl_2 vytvoříme vzorec AlCl_3 (vložením Al^{3+} a použitím Edit atom label). Následně vložíme do rovnice reakční šipku () . Dále musíme vložit Cl^+ . Do plochy si vložíme HCl (výběrem Cl z levé nabídky) a změníme náboj vložené struktury použitím nástroje **Increment charge** () z levé nabídky. Tímto způsobem se vytvoří H_2Cl^+ . Tuto strukturu je nutné označit a následně vybrat **Tools-Structure properties**. V otevřeném okně na kartě **Atom** zvolíme v olní části *H* a nastavíme barvu na bílou. Stejně postupujeme s indexem (symbol *n*). AlCl_4^- vložíme pomocí Edit atom label.

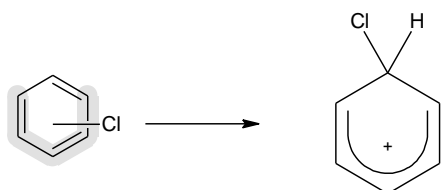



- 2) Rovnice tvorby π -komplexu. Vložte Cl^+ pomocí postupu uvedeného výše nebo už vytvořenou strukturu zkopírujte. Vložení reakčního + a reakční šipky je také popsáno výše. Pro vložení benzenu můžete tento buď vytvořit manuálně, nebo můžete využít předpřipravenou strukturu z pravé části okna. Vyberte benzen a klikněte do pracovní plochy. Vložte si molekulu 2x. Pro ukončení vkládání templaty stiskněte klávesu Esc.

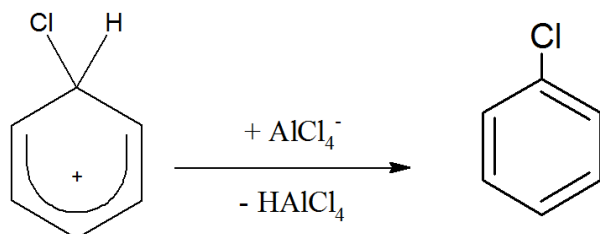
V levé části okna programu zvolte Cl a následně pomocí nástroje pro selekci () označte se stisknutou klávesou Shift 5 atomů uhlíku v benzenu (klikáním na jednotlivé atomy), na kterém má být vytvořen π -komplex. Po vybrání všech 5 atomů **Markush bond with shadow** () .



- 3) Vytvoření σ -komplexu. Zkopírujte si strukturu π -komplexu, přidejte reakční šipku. Vytvořte molekulu cyklohexanu nebo ji vložte z pravé části okna. Následně přidejte do molekuly chlór a explicitně jeden atom vodíku. Následně pomocí nástroje pro selekci označte 5 uhlíků, na nichž není vázán chlór, a zvolte funkci **Solid delocalization curve** () . Nakonec vyberte funkci **Increment charge** () a klikněte do středu delokalizační křivky.



- 4) Vznik chlorbenzenu. Zkopírujte si strukturu σ -komplexu. Vložte do pracovní plochy reakční šipku. Vyberte funkci **Reaction arrow labeling** () a klikněte na vloženou reakční šipku. V otevřeném okně vyplňte vedlejší reaktant a produkt. Nyní už zbývá jen vytvořit molekulu chlorbenzenu.





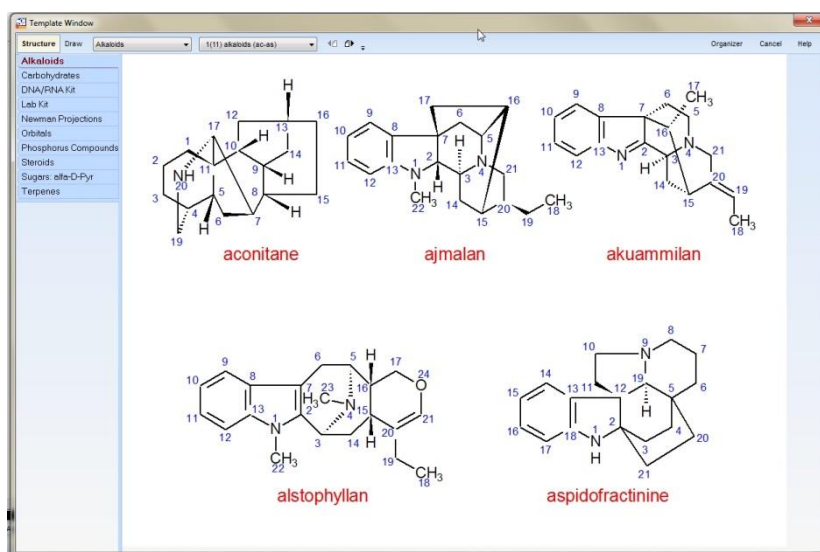
1.6 Knihovna templatů

Knihovna templatů neboli předpřipravených struktur obsahuje v základní instalaci programu relativně velké množství různých struktur, počínaje složitějšími molekulami a konče chemickými aparaturami. Dá se jí tedy s výhodou využít k ušetření času při vlastní tvorbě. Knihovnu lze vyvolat z horního menu ikonou **Open template window** (obr. 15). Po klepnutí na tuto ikonu se otevře dialogové okno (obr. 16), v němž lze vybírat z řady předpřipravených struktur, které jsou navíc rozdělené do tematických celků. Ty je možné volit z nabídky v levé části okna nebo pak z rozbalovacích seznamů v horní části okna.

Vybraný objekt pak lze vložit na pracovní plochu jednoduše kliknutím na objekt v okně templatů, čímž dojde k uzavření tohoto okna, a následným kliknutím na požadované místo v pracovní ploše, kam má být struktura vložena. Pro ukončení vkládání je potřeba stisknout klávesu Esc.



Obr. 15: Ikona pro otevření okna templatů



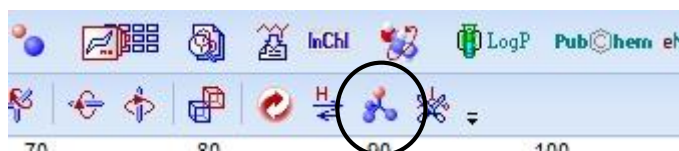
Obr. 16: Dialogové okno pro vkládání předpřipravených struktur



1.7 3D zobrazení

3D zobrazení v prostředí programu ChemSketch se týká pouze molekulárních struktur. Jeho využití je velmi jednoduché a vyžaduje pouze znalosti pro tvorbu vzorců. 3D zobrazení lze využít pro vizualizaci trojrozměrných struktur např. při výuce. Software obsahuje pouze nejzákladnější funkce pro práci s 3D modely molekul, tedy hlavně funkce pro vizualizaci. Pokud je potřeba pracovat s modely sofistikovanějším způsobem, je nutné zvolit specializovaný software pro molekulární modelování.

Tvorba 3D modelů molekul v programu ChemSketch je založena na tvorbě vzorců molekul. Nejdříve je tedy nutné vytvořit správně vzorec požadované molekuly. Opět není nutné dodržovat přesné délky vazeb a vazebné úhly, o ty se postará následná optimalizace. Po vytvoření struktury se v případě 3D modelů nepoužije funkce **Clean structure**, která slouží pro klasickou dvourozměrnou optimalizaci, ale funkce **3D Optimization** (obr. 17). Nejdříve je potřeba vzorec označit a následně klepnout na ikonu funkce. Po klepnutí se provede 3D optimalizace struktury a ChemSketch se rovnou přepne do režimu, v němž je možné s vytvořenou 3D strukturou rotovat ve všech třech osách.



Obr. 17: Ikona funkce 3D Optimization

Pro lepší nastavení vizualizace vytvořené 3D struktury je nutné spustit **Prohlížeč 3D struktur** (3D Viewer). Do prohlížeče se automaticky nahraje celá pracovní plocha ChemSketch, při vizualizaci jednotlivých molekul je proto potřeba pracovat postupně, v pracovní ploše mít jen jednu strukturu. Po klepnutí na ikonu **3D Viewer** (obr. 18) se otevře okno prohlížeče (obr. 19).



EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání

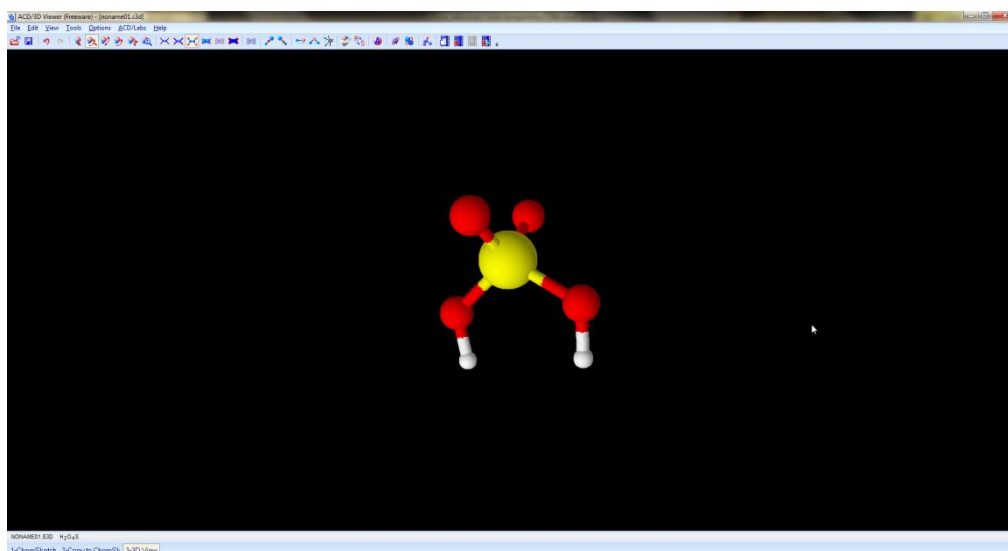
MSMT
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



Moravskoslezský
kraj



Obr. 18: Ikona pro spuštění 3D prohlížeče

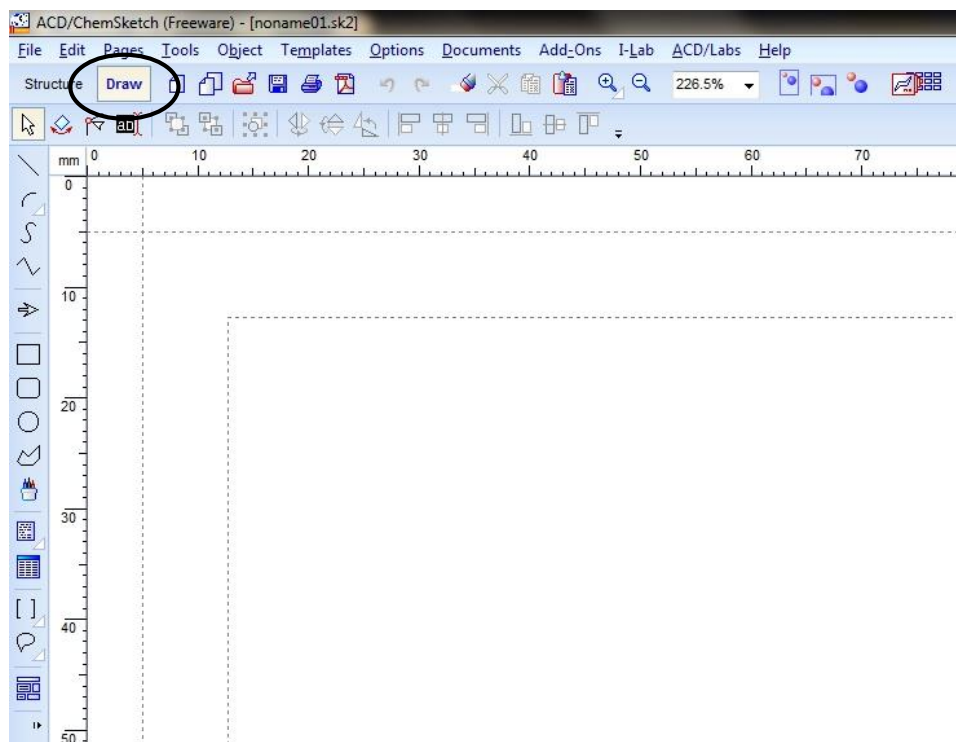


Obr. 19: Okno prohlížeče 3D struktur



2 Tvorba nákresů základních aparatur


Nákresy chemických aparatur lze tvořit například v jakémkoli grafickém editoru (InkScape, Scribus, GIMP, Krita ad). Pohodlnější je však využít program ChemSketch. V tomto programu lze náskres tvořit úplně od začátku (jedná se o jednoduchý vektorový editor nebo lze využít knihovnu templatů). Do režimu kreslení lze vstoupit klepnutím na tlačítko Draw v hlavní nabídce (obr. 20). V levé části okna se následně místo nástrojů pro tvorbu vzorců objeví nástroje pro kreslení různých druhů křivek, tvarů, šipek, vkládání bitmapových obrázků, textů, tabulek, závorek, bublin a dalších. Užití jednotlivých nástrojů je jednoduché a intuitivní, po výběru nástroje lze klepnutím a tažením vytvořit daný tvar v pracovní ploše. U vloženého objektu je pak možné upravit barvu výplně jednoduše výběrem barvy z nabídky, která se zobrazuje v levé spodní části okna programu.




Obr. 20: Nástroje pro kreslení



Po vložení všech požadovaných objektů s nimi lze jednoduše manipulovat, přesouvat je a otáčet. Jednotlivé operace lze volit z hlavní nabídky. Horní lišta hlavní nabídky i se všemi funkcemi je společná pro tvorbu vzorců i kreslení, její popis je uveden v předchozí kapitole. Odlišná je spodní lišta hlavní nabídky (obr. 21). Zleva se zde nacházejí funkce pro označení, posun a změnu velikosti (symbol šipky), označení, posun a rotaci. Dále je zde ikona pro editaci uzlových bodů při práci s mnohoúhelníky, ty se vkládají kliknutím na příslušnou ikonu v levém menu a následně klikáním v pracovní ploše. Po ukončení návrhu mnohoúhelníku je potřeba stisknout klávesu **Esc**. Tím dojde k ukončení režimu návrhu. Poté je možné pomocí nástroje **Editace uzlových bodů** upravovat polohu jednotlivých vrcholů mnohoúhelníku. Po dokončení úprav lze opět užít klávesy **Esc** pro přechod do základního režimu programu. Další funkcí ve spodní liště hlavní nabídky je editace textu u textových prvků. Opět se tak děje vybráním funkce a kliknutím na požadovaný textový prvek. Pro ukončení editace je nutné využít klávesu **Esc**.

Další dvě ikony slouží k přenosu vybraného prvku do popředí či do pozadí (). Lze tak řídit umístění jednotlivých prvků v ose Z. Pokud se některé prvky překrývají, pak se tímto nastavením řeší, který z prvků má být nahoře (celý viditelný) a který má být překrytý. V ChemSketchi je možné toto nastavení řídit pouze takto omezeně, v programech pro tvorbu grafiky nebo pro tiskovou sazbu lze umístění v ose Z řídit mnohem podrobněji např. pomocí hladin nebo vrstev.

Další velmi užitečnou funkcí je seskupení objektů (funkce **Group**, ). Pokud se pracuje s malým počtem objektů, není nijak nutné tuto funkci používat. Prostě se požadované objekty označí (tažením nebo klepáním na jednotlivé objekty se stisknutou klávesou **Shift**) a takto označené je lze společně přesouvat nebo rotovat. Tento postup je nepraktický v případě větších skupin objektů nebo v případě nákrešů, které už jsou z části hotové a je potřeba zachovat vzájemnou polohu jednotlivých částí (např. stojan, držáky, filtrační kruhy apod.). V tomto případě je dobré označit jednotlivé části složeného objektu a následně zvolit funkci **Group**. Tím dojde ke spojení jednotlivých částí virtuálně do jednoho celku a následná manipulace ovlivňuje tento celek. Je rovněž možné použít funkci **Group** pro spojení objektů, která jsou samy seskupené z dílčích částí, tedy hlavní objekt (skupina) bude obsahovat podskupiny a ty budou tvořeny dalšími podskupinami nebo jednotlivými částmi. Zrušení seskupení představuje opačný proces, kdy je potřeba označit seskupený objekt a následně pomocí ikony **Group** lze



tento objekt rozdělit na jednotlivé skupiny nebo základní stavební jednotky. Pomocí seskupování jsou tvořeny aparatury v knihovně šablon, pokud tedy vznikne potřeba použít jen část aparatury, je jí nejdříve nutné rozdělit na jednotlivé složky.

Další funkce v hlavním panelu pak slouží k převrácení či otočení vybraných objektů a dále pak k zarovnání objektů v horizontálním či vertikálním směru vůči největšímu z nich.




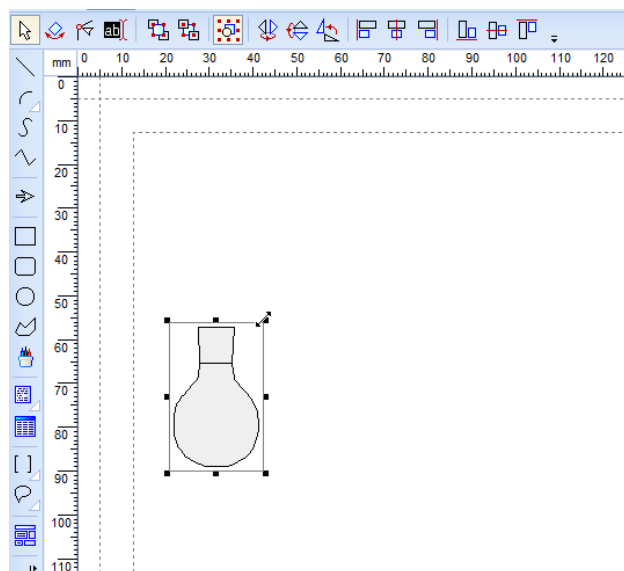
Obr. 21: Hlavní nabídka – funkce pro manipulaci s objekty

Je samozřejmě možné tvořit vše od začátku. Mnohem pohodlnější a rychlejší cestou je však vložení jednotlivých částí aparatur nebo celých aparatur z knihovny šablon a následná úprava těchto objektů. V základní nabídce se nacházejí různé laboratorní objekty – kádinky, baňky, nálevky a další, po rozbalení seznamu v horní části okna je možné vybírat z dalších nabídek, které obsahují separační, destilační, reakční aparatury, aparaturu pro titraci, chladiče a další. Většina objektů je tvořena jako skupina základních objektů nebo podskupin.

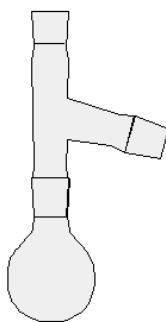
V rámci tohoto kurzu si vytvoříme destilační a filtrační aparaturu.


Začneme tvorbou destilační aparatury:

- 1) Z knihovny šablon () vybereme varnou baňku a kliknutím v pracovní ploše ji vložíme do této plochy. Následně stiskneme klávesu Esc. Baňku tažením za roh mírně zmenšíme.



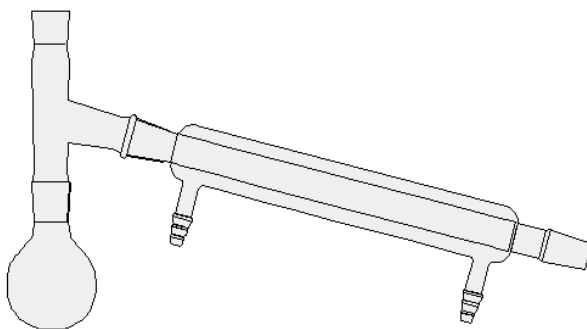
- 2) Z knihovny templatů vložíme destilační nástavec stejným způsobem, jako jsme vkládali baňku. Následně je potřeba změnit velikost nástavce tak, aby „pasoval“ do zábrusu na baňce. Nástavec „zasuneme“ tažením do baňky.



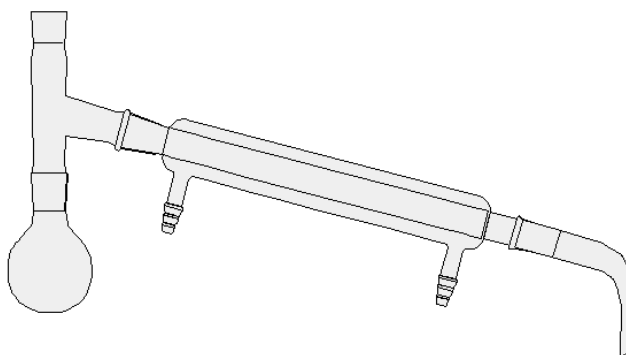
- 3) Stejným způsobem, jako v bodě 2 vložíme chladič. Chladič je nutné upravit nejen co do velikosti, ale také je potřeba jej správně natočit. Pro Otáčení objektů se používá funkce **Select/move/rotate** () . Zvolíme tento nástroj, najedeme na některý z kontrolních bodů (čtverečky v rozích a po stranách objektu) a se stisknutým levým tlačítkem myši otočíme chladič do správné polohy. Tažením si chladič můžeme přisunout k nástavci.




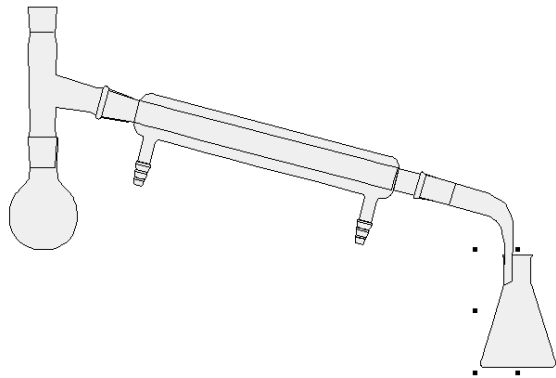
Následně přepneme na nástroj **Select/move/resize** () a upravíme velikost chladiče tak, aby pasoval na nástavec.



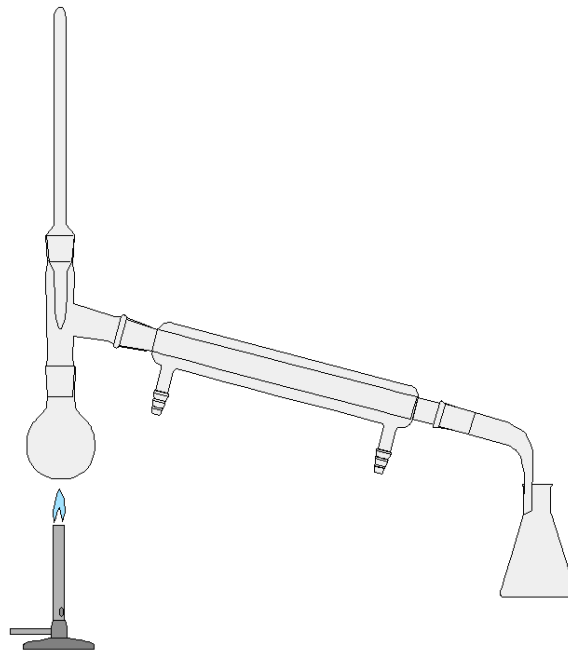
4) Do aparatury vložíme alonž. Opět můžeme upravit natočení a velikost objektu.



5) Dále můžeme přidat Ehrlenmeierovu baňku pod alonž. Aby byla vizuálně zachována průhlednost baňky, je potřeba ji přenést do pozadí (funkce Send to back, ). Označte baňku a klikněte na tlačítko.



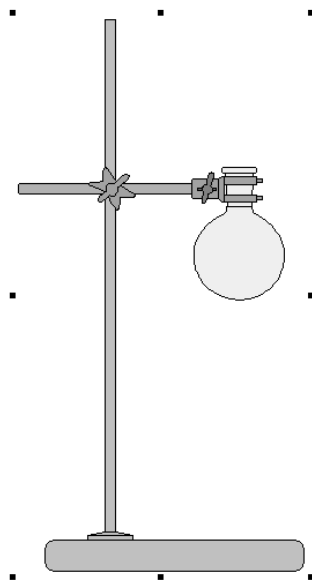
6) Do aparatury můžete ještě přidat teploměr a kahan.




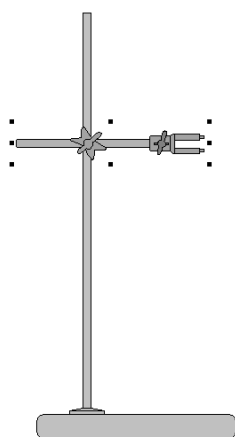


Druhá aparatura, kterou si „postavíme“ bude filtrace. Při tvorbě filtrační aparatury je možné vycházet z objektu stojanu s baňkou, který je v knihovně templatů.

- 1) Vložte si do pracovní plochy objekt stojanu s baňkou.

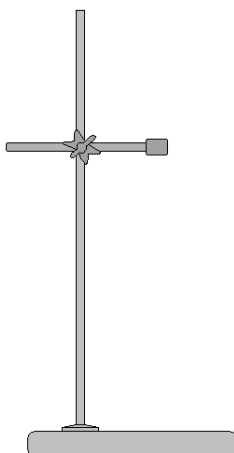


- 2) Při označeném objektu klikněte na tlačítko **Group** () , čímž celý objekt rozdělíte na jednotlivé podčásti. Nyní můžete označit baňku a smazat ji (klávesou Delete).

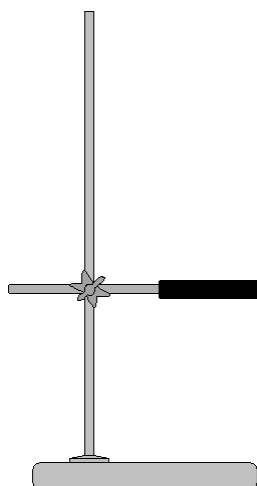




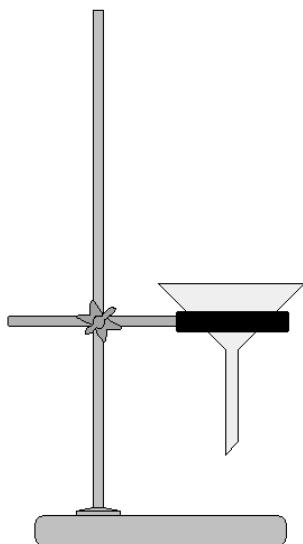
- 3) Dále musíme upravit držák na filtrační kruh. Z tohoto důvodu jej tedy označíme a opět zrušíme seskupení jeho jednotlivých částí tlačítkem Group. Následně můžeme smazat nepotřebné části držáku.



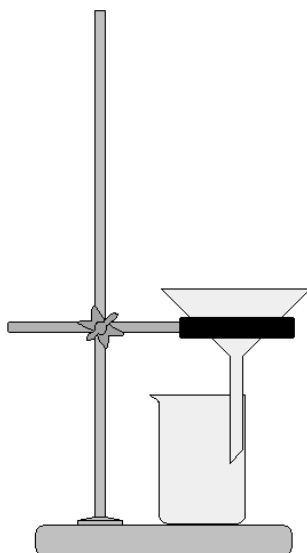
- 4) Označíme úplně pravou část držáku a tažením za kontrolní bod ji prodloužíme. Můžeme také změnit barvu na černou (kliknutím na černou ve spodní části obrazovky). Poté označíme všechny části nově vzniklého filtračního kruhu a zpátky je seskupíme stisknutím tlačítka Group. Kruh můžeme posunout na stojanu směrem dolů.



- 5) Nyní vložíme z knihovny templatů nálevku. Upravíme její velikost, umístíme ji na kruh. Posledním krokem by mělo být její přenesení do pozadí.



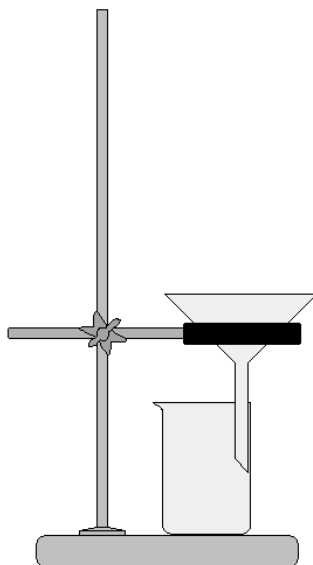
- 6) Nyní už zbývá jen přidat kádinku. Vložíme ji z knihovny templatů. Opět je potřeba upravit velikost kádinky a přenést ji tlačítkem **Send to back** do pozadí, aby byl vidět stonek nálevky.





- 7) Takto vytvořená aparatura však stále není úplně v pořádku, jelikož by se měla nálevka dotýkat kádinky opačnou stranou stonku (delší částí). Je tedy potřeba nálevku označit a

zvolit funkci **Flip left to right** ()





EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání



Moravskosleský
kraj

3 Použitá literatura

- [1] Mucha M., Kričfaluši D. Informační a komunikační technologie v chemii. Ostravská univerzita, Ostrava 2014
- [2] ACD/Labs ChemSketch, <https://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/> cit. 2020-03-16