

Е. В. Воробьева

Биологический факультет,

кафедра химии

КРАТКИЙ ОБЗОР РЕДАКТОРОВ ХИМИЧЕСКИХ ФОРМУЛ

Стремительное развитие информационного общества, широкое распространение электронных информационных ресурсов, сетевых технологий позволяют использовать информационные технологии в качестве средства общения, воспитания и обучения. Каждому преподавателю известны программы MS Office (Excel, Power Point, Word, Word Pad), основные графические редакторы (Picture Manager, Corel Draw), программы для отправки-получения электронной корреспонденции (Outlook Express). Кроме них существуют программы, которые упрощают рутинную работу преподавателей в конкретной сфере знаний, расширяют возможности профессиональной работы. Так, например, для химиков раньше большую сложность и трудоемкость представлял процесс изображения сложных органических и биохимических формул для методических пособий или научных статей. В настоящее время

для решения таких задач созданы специальные программы – редакторы химических формул. Химические редакторы различаются своими возможностями, специализацией (органическая химия, неорганическая химия), степенью сложности интерфейса и работы в них. Цель работы – сделать краткий обзор существующих в настоящее время редакторов химических формул, показать их основные возможности и сделать некоторые рекомендации по использованию этих программ преподавателями химии и студентами-химиками.

Очень легкая в использовании программа для рисования химических структур **ChemPen (ShareWare)**, ее пакет установки всего 1,3 Мб. Нарисованные химические структуры можно копировать в буфер обмена, а затем вставлять в документы Microsoft Word или PowerPoint. Она может использоваться для подготовки рефератов, докладов, презентаций и т. п., но для публикаций в научных журналах и издательствах её лучше не использовать, так как ChemPen не поддерживает общепринятые форматы (*.cdx и *.skc).

Существует несколько версий онлайн редакторов или конструкторов химических формул, например **1.0 beta**. Доступность таких программ с любого компьютера является их главным и, пожалуй, единственным достоинством. В таких программах часто нет возможности сохранения информации в отдельном файле, а разрешение полученных формул и химических структур очень низкое.

Если назвать самую известную и популярную программу для построения структурных формул органических и неорганических веществ, то это – **Chem Draw**. Среди ее достоинств можно отметить то, что она содержит встроенную таблицу Менделеева, создает расчетные ЯМР и ПМР спектры для различных веществ, генерирует названия веществ по их структурным формулам, содержит обширную базу шаблонов химических структур. Для химиков заслуживают внимания следующие элементы пользовательского интерфейса: кнопка (Atom properties) вызывает окно со свойствами атомов, аналогичную функцию, только для связей, выполняет кнопка (Bond Properties). Кнопка (Check Structure) проверяет выделенную молекулярную структуру на наличие ошибок, а кнопка (Clean structure) проверяет соответствие молекулы обычным длинам связей и углам. Есть еще одна функция, о которой следует упомянуть, – возможность называть молекулярные структуры по внешнему виду, также осуществима и обратная операция – преобразование имени в структуру. Кнопка (Atom-to-Atom mapping) позволяет отобразить реакционные центры молекул, но это возможно только для одностадийных реакций. Chem Draw входит в состав целого пакета химических приложений Chem Office Ultra. Кроме Chem Draw

в этот пакет входят еще Chem3D, Chem Finder, Chem Finder for Office. Chem3D – программа для создания и просмотра трехмерных химических структур, также программа рассчитывает физические свойства химических структур различными квантово-химическими методами. Chem Finder позволяет просматривать и создавать базы данных химических структур, а программа Chem Finder for Office представляет собой инструмент для поиска химических структур в документах Microsoft Office (*.rtf, *.doc, *.xls и др.), файлах химических структур [1]. **Авторское право на эту программу принадлежит CambridgeSoft Corp. – <http://www.cambridgesoft.com>**

Редактор химических формул **Chem Sketch** из пакета программ ACD/Labs канадской фирмы Advanced Chemistry Development (<http://www.acdlabs.com>) по функциональным возможностям не уступает редактору Chem Draw. В отличие от Chem Draw (объем памяти 60 мегабайт) Chem Sketch занимает всего около 20 мегабайт дискового пространства. Документы, созданные с помощью Chem Sketch, также занимают небольшой объем – всего несколько килобайт. Этот химический редактор больше ориентирован на работу с органическими формулами, но в нем также удобно составлять химические формулы неорганических веществ. С его помощью можно оптимизировать молекулы в трехмерном пространстве, вычислять расстояния и валентные углы между атомами в молекулярной структуре и многое другое. Программа может сохранять файлы в обоих форматах: документ ChemDraw (*.cdx) и эскиз ISIS/Draw (*.skc). Кроме ChemSketch в пакет установки также входит 3D Viewer – программа, позволяющая создавать объемные модели молекул. На сайте фирмы <http://www.acdlabs.com> можно найти как профессиональную, так и бесплатную версии пакета. Бесплатная версия обладает меньшими возможностями, чем платная профессиональная, но потребности студента, учителя химии, преподавателя вуза, она во многом удовлетворит. Кроме собственно редактора в пакет входит система программирования ChemBasic, программа просмотра трехмерных моделей молекул ACD/3D Viewer, программа обработки ЯМР-спектров ACD/CHNMR Viewer, руководства по работе с программами. В учебной работе наиболее ценной является программа 3D Viewer, позволяющая увидеть различные модели молекул, формулы которых нарисованы в Chem Sketch, скопировать изображения этих моделей и сами модели в различные документы, в том числе и в презентации лекций, докладов.

Программа ChemSketch содержит и инструменты для создания векторных изображений, поэтому позволяет создавать графические иллюстрации. Создание сложных формул и рисунков облегчается наличием альбома шаблонов формул и рисунков. В методической литературе

опубликованы статьи по работе с этим редактором, его использованию в учебном процессе [1, 2].

Еще одна программа для рисования химических формул ISIS Draw абсолютно бесплатна и также предназначена для рисования структурных формул. Она является продуктом **MDL Information Systems, Inc.** – <http://www.mdli.com>. Файлы сохраняются в формате *.skc, который распознает программа Chem Draw. В свою очередь, с помощью программы Chem Draw легко сохранить файл в формате ISIS/Draw. Таким образом, не происходит потери данных, что очень важно при переносе структур из одного формата в другой (*.cdx → *.skc). Программа позволяет строить полные и сокращенные химические формулы, схемы химических реакций и многое другое [3].

Кроме специальных программ, ввод химических формул можно осуществлять и MS Word, но этот процесс может весьма облегчить плагин **Chemistry Add-in for Word (или Chemistry & Word)**. При установке плагина в панели инструментов Microsoft Office добавляется еще одна вкладка «Chemistry». Программу можно найти на странице продуктов компании Microsoft: <http://soft.softline.ru/microsoft>. Это приложение предусматривает возможность использования химических формул и другой информации в текстовых документах, а также допускает редактирование химических данных. Приложение совместимо с новыми версиями Word 2007 и Word 2010, оно позволяет создавать точечные электронные формулы, а также электронную модель атома, используя квантовые ячейки или электронные орбитали.

Таким образом, рынок редакторов химических формул достаточно разнообразен. Выбор программы для работы должен быть продиктован потребностями и притязаниями самого пользователя (преподавателя химии или студента-химика). При этом все же хочется отметить высокие возможности программ ChemSketch, ChemDraw и рекомендовать их освоение всем, кто хочет реализовать себя в химической науке или методике обучения химии.

Список использованной литературы

1 Курзин, А. В. Химические редакторы: учебное пособие / А. В. Курзин, Л. М. Попова, А. Н. Евдокимова. – СПб: ГТУРП, 2014. – 125 с.

2 Шабаршин, В. М. Интерфейс и функции специализированного химического редактора ACD ChemSketch / В.М. Шабаршин, В.А. Мазур // Химия: методика преподавания. – 2004. – № 2. – С. 33–46.

3 Наумов, А. Р. Основы эффективной работы с графическим редактором структурных химических формул ISIS/Draw: практическое пособие / А. Р. Наумов, И. И. Молчанова. – Кострома: КГУ им. Н. А. Некрасова, 2004. – 108 с.