Edytor wzorów strukturalnych "ISIS Draw"

CHARAKTERYSTYKA PROGRAMU

Za pomocą programu "ISIS Draw" można rysować i modyfikować wzory strukturalne związków chemicznych i schematy mechanizmów reakcji. Na obrazy te składać się mogą opisane symbolami atomy, różnego typu wiązania, podpisy o różnorodnym kroju pisma, strzałki proste i zakrzywione, rysunki orbitali typu s, p, i d oraz orbitali zhybrydyzowane, a także nawiasy, ramki i łuki. Możliwe jest rysowanie kilku wiązań równocześnie jako pierścieni i łańcuchów. Istnieje także wiele sposobów edycji rysunku: przesuwanie, obracanie, skalowanie, powielanie i wymazywanie całości lub fragmentów. Wyniki działania programu mogą być drukowane na drukarce lub też przenoszone do innych programów, jak edytory tekstów lub edytory grafiki.

ZASADY OBSŁUGI PROGRAMU

Program zostanie uruchomiony po naprowadzeniu na ikonę lsisdraw wskaźnika myszy i dwukrotnym naciśnięciu lewego klawisza myszy. Po chwili na ekranie przedstawione zostanie środowisko pracy edytora:

😼 I S	ilS/Draw	- (R	EACTANT.	SKC]							_ 8 ×
📴 <u>F</u>	Eile <u>E</u> dit	Opti	ons <u>O</u> bject	S <u>t</u> yle	Te <u>m</u> plates	<u>C</u> hem	<u>W</u> indow <u>H</u> elp				_ & ×
	Molec	ule	Sketch	Y.S.		\Diamond		700	$\square $]	<u> </u>
×											
Ģ											
\Diamond											
T					1						
- <u></u> .											
°\					\nearrow		\sim /	\sim	\frown		
\square			ſ	Ť		\sim	~		~		
$\mathbf{\Sigma}$			\sim								
<u>\</u>											
\geq											
											•
.▲											Þ







ZADANIA PRZYKŁADOWE

Zadanie 1.

Przygotować wzory strukturalne cząsteczek aspiryny, witaminy C i kofeiny:



Zadanie 2. Przygotować równanie reakcji estryfikacji:



Zadanie 3. Przygotować schemat ze wzorem strukturalnym tłuszczu:







- 1. Z górnego zbioru narzędzi wybrać wskaźnikem symbol 💽 reprezentujący rysowanie pierścienia aromatycznego i nacisnąć lewy klawisz myszy.
- Naprowadzić wskaźnik na środek ekranu, nacisnąć lewy klawisz myszy. (Trzymając klawisz naciśnięty i przesuwając wskaźnik wokół punktu startowego można uzyskać różne ustawienia pierścienia).

W przypadku niepowodzenia wybrać Edit/Undo.

UWAGA ! Narzędzie zmazywania w programie "ISIS Draw" działa inaczej niż w programie "MS Paint". Po naprowadzeniu gumki a na np. wiązanie i naciśnięciu lewego klawisza myszy zmazane będzie całe wiązanie, a nie tylko część zasłonięta przez "gumkę" (jak to było w "MS Paint"). Niemożliwe jest także mazanie poprzez ciągłe przesuwanie wskaźnika z naciśniętym klawiszem myszy.

- 3. Z bocznego zbioru narzędzi wybrać symbol reprezentujący rysowanie wiązań 🖾 i naprowadzić wskaźnik na narożnik pierścienia aromatycznego, do którego ma być dołączony podstawnik (w miejscu tym pojawi się mały biały kwadracik). Nacisnąć lewy klawisz myszy.
- 4. Podobnie narysować linię wiązania do drugiego podstawnika.
- 5. Aby utworzyć łańcuch wiązań należy rysować kolejne wiązania od końca wiązania narysowanego uprzednio.
- 6. Wiązanie podwójne zostanie utworzone, gdy w miejscu, gdzie wiązanie jest już narysowane, podejmie się próbę narysowania tego samego wiązania po raz drugi po wybraniu opcji 🔝
- 7. Aby podać wzór podstawnika należy ze zbioru narzędzi wybrać symbol i reprezentujący dodawanie symboli do szkieletu i wskazać wskaźnikem miejsce, w których ma być dopisany podstawnik oraz dwa razy klikając myszą.
- W pojawiającym się oknie wybrać opcję Symbol:"O" i wskazać przycisk OK.
- 9. Wstawiając symbol "C" należy wybrać "C(show)".
- Wprowadzając symbol "COOH" należy wpisać go w pole Alias:.
- 11. W przypadku grupy "CH₃" należy wpisać "CH3" bowiem cyfra "3" automatycznie umieszczona zostanie w indeksie dolnym.
- 12. Ze zbioru narzędzi wybrać symbol 🔳 reprezentujący dopisywanie tekstu do rysunku poza szkieletem wiązań. Wskazać odpowiednie miejsce na ekranie i wpisać "aspiryna"
- 13. Powtórzyć podobne operacje dla struktury witaminy, rysując pierścień pięcioczłonowy z pomocą

70m 🗵								
F Symbol: F Charge: F Valence: F Valence:	C 5 0 8 0# 8	7 Isotope: <u>Off</u> 7 Radical: <u>None</u> 7 Number: 8						
E Alias:	сна							
Show		Position						
C Numbers	I₹ Valence	R Numbers: Auto						
☐ Hydroger	a IR Value	F Hydrogens: Auto						
CH ₃ Cuery Cancel								

opcji 🖾, oraz dla struktury kofeiny z pomocą narzędzi rysowania pierścieni sześcio i pięcioczłonowych: 🖸 🙆.

14. Z menu File wybrać opcję Save as... ukaże się wtedy okno dialogowe, w którym zamiast domyślnego "*.SKC" należy wpisać nazwę "ZADANIE1"i wybrać przycisk OK.

Realizacja zadania 2 :



- 4. <u>Z menu wybrać opcję Sketch.</u>
- 5. Ze zbioru narzędzi wybrać symbol 🔊 reprezentujący dodawanie do rysunku linii i umieścić linię stanowiącą podstawę strzałki w odpowiednim miejscu na rysunku.
- 6. Za pomocą opcji **Style/Arrorw** ustalić kierunek i rodzaj strzałki na jaką zostanie przekształcona narysowana linia.
- 5. Narysować wzór estru.
- 6. Korzystając z opcji I wypisać nad strzałką tekst "H₂SO₄", oraz "+ H₂O" a także znak "+". *UWAGA ! Indeksy dolne i górne wybrać należy korzystając z opcji Style/Font ze zbioru opcji.*
- 7. Dopisać tytuł rysunku.
- Z menu wybrać opcję File i podopcję Save as.... Zamiast domyślnego "*.SKC" wpisać nazwę "ZADANIE2" i wybrać przycisk OK.

Realizacja zadania 3 :

- 1. Z menu wybrać opcję File i podopcję New.
- 2. Wybrać opckę **Sketch**. Narysować dwie nachodzące na siebie ramki. Dobrać kolor (biały) za pomocą opcji: **Style/Fill Color** i wypełnienie za pomocą opcji: **Style/Fill Pattern**.
- 3. Na tle narysowanych ramek narysować wzór strukturalny cząsteczki tłuszczu.
- 4. Wskazując elementy rysunku przesunąć je tak, aby wzajemnie się uzupełniały.
- 5. Dorysować strzałki i litery schematu.
- 6. Zapisać rysunek na dysku.



Ogólne reguły rysowania wzoru strukturalnego

- 1) Należy **najpierw przygotować szkielet wiązań,** bezwzględnie dbając aby **linie wiązań były połączone**, a dopiero na końcu dodawać symbole pierwiastków na styku wiązań.
- 2) **Pojedyncza linia narysowana we wzorze oznacza jedno wiązanie**. Nawet jeśli linia ta wraz z linią kolejną tworzy optycznie całość należy je traktować jako obraz dwóch wiązań.
- 3) Narzędzie opisane symbolem: I służy do tworzenia opisów schematów lub podpisów pod wzorami. Nie należy go wykorzystywać do wprowadzania symboli pierwiastków do wzoru strukturalnego. Do tego celu służy narzędzie opisane symbolem .
- 4) Narzędzie opisane symbolem umożliwia w łatwy sposób wprowadzanie części wzorów sumarycznych, automatycznie ustawiając cyfry i liczby w indeksach dolnych. Narzędzie opisane symbolem tej automatyki nie posiada, lecz indeksy dolne można wtedy utworzyć stosując Opcję Styl. Nie należy ustawiać cyfr w indeksie dolnym przysuwając pola tekstu podobnie jak to robiono w programach graficznych.
- 5) Narzędzie zmazywania w programie "ISIS Draw" działa inaczej niż w programie "MS Paint". Po naprowadzeniu gumki np. na wiązanie i naciśnięciu lewego klawisza myszy zmazane będzie całe wiązanie, a nie tylko część zasłonięta przez "gumkę" (jak to było w "MS Paint"). Niemożliwe jest także mazanie poprzez ciągłe przesuwanie wskaźnika z naciśniętym klawiszem myszy.

ZADANIA PROBLEMOWE

Zadanie 1.



Zadanie 2.



Zadanie 3.



