

Chemistry Add-in

Οδηγίες

Το Chemistry Add-in εξασφαλίζει ένα πρόσθετο για γραφή χημικών τύπων διαφόρων στο περιβάλλον του Word .

Απαιτήσεις

Hardware Requirements

Για Windows με Office 2010, Office 2013 or Office 2016.

Software Requirements

Your computer must have the following software:

- Windows 7 or later, including Internet Explorer 11. Word 2010 through to Word 2016.

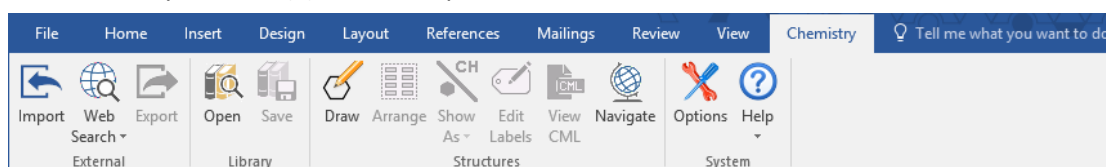
Για ολοκληρωμένη λειτουργία απαιτείται σύνδεση internet. Το Chem4Word δεν δουλεύει με Word for Mac.

Εγκατάσταση

Το Chemistry Add-in εγκαθίσταται εκτελώντας το :

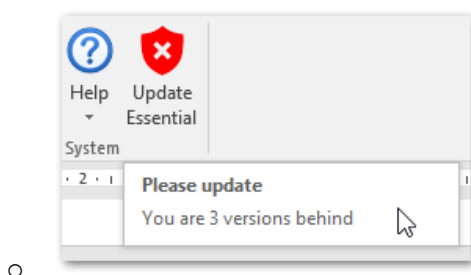
Για την εγκατάσταση του Chemistry Add-in

1. Κλείνετε όλα τα αρχεία Word
2. Κατεβάσετε το αρχείο Chem4Word-Setup.exe από το <https://github.com/Chem4Word/Version3/releases>
3. Εκτελείτε το Chem4Word-Setup.exe
5. Αν η εγκατάσταση έχει γίνει σωστά θα εμφανίζεται στο μενού του Word όταν το ανοίξετε, η δυνατότητα Chemistry tab όπως φαίνεται παρακάτω.



Edit Labels Auto Update

Το Chemistry Add-in for Microsoft Word αναζητά ενημερώσεις κάθε 7 μέρες.

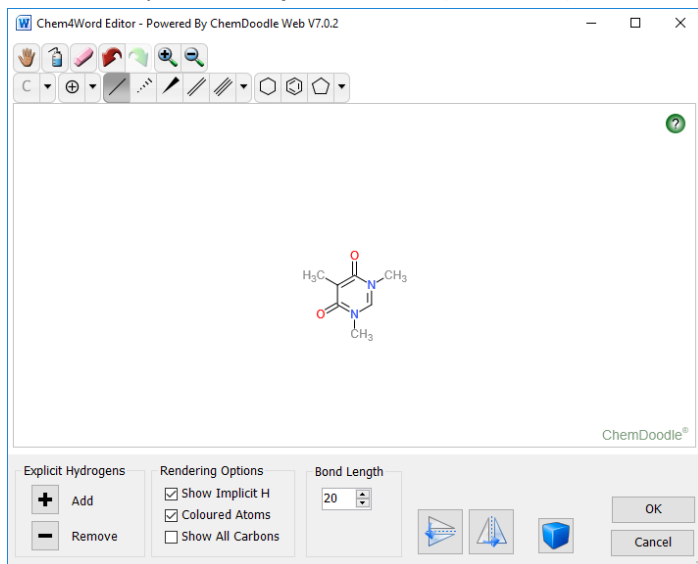


Πώς να προσθέσετε ένα χημικό τύπο στο αρχείο σας

Χημικοί τύποι μπορούν να προστεθούν σε αρχείο Microsoft Word με πολλούς τρόπους. Μπορούν να σχεδιασθούν με χρήση του Chem4Word Editor tool, μπορούν να προστεθούν από τα PubChem και ChEBI (Chemical Entities of Biological Interest).

Δημιουργία μιας χημικής δομής

1. Επιλέγετε το **κουμπί Draw** στη δυνατότητα Chemistry. Θα ενεργοποιηθεί το εργαλείο Chem4WordEditor.



2. Τσεκάροντας την επιλογή All Carbon atoms εμφανίζονται τα άτομα του άνθρακα.


3. Τσεκάροντας την επιλογή Hydrogen counts εμφανίζονται τα άτομα του υδρογόνου. Έτσι με αυτόν τον τρόπο έχετε γράψει το Μεθάνιο. Αν πατήσετε το Ok εισάγετε το μεθάνιο στο έγγραφο σας.

4. Επιλέγετε το **κουμπί Draw** στη δυνατότητα Chemistry. Πλησιάζοντας τον κέρσορα κοντά στο άτομο του άνθρακα εμφανίζεται ένας κόκκινος κύκλος και στη συνέχεια αν κάνετε κλικ και σύρσιμο δημιουργείται και δεύτερο άτομο άνθρακα ενώ συγχρόνως αλλάζει ο αριθμός των υδρογόνων. Έτσι εμφανίζεται το Αιθάνιο. Αν πατήσετε το Ok εμφανίζεται το παράθυρο Edit labels. Τρέχει το Chem Spider για να ελεγχθεί αν η δομή που σχεδιάσατε


είναι γνωστή. Περιλαμβάνονται διάφορες εκφράσεις για αυτήν την δομή. Επιλέγοντας Add names μπορείτε να καταχωρίσετε και μια νέα ετικέτα (πχ. Αιθάνιο στα ελληνικά). Στη συνέχεια κάνετε Save.

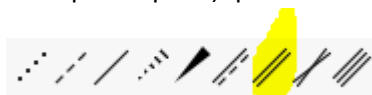
5. Επιλέγετε ξανά το **κουμπί Draw** στη δυνατότητα Chemistry. Εμφανίζεται πάλι το Αιθάνιο (ή το δημιουργείτε). Αν στη γραμμή εργαλείων επιλέξετε τον διπλό δεσμό και κάνετε κλικ στον υπάρχοντα δεσμό του αιθανίου, τότε αυτός θα γίνει διπλός και θα μετατραπεί σε αιθένιο αλλάζοντας και τον αριθμό των υδρογόνων.

6. Αν πατήσετε το Ok εμφανίζεται το παράθυρο Edit labels. Και στη συνέχεια εισάγετε την δομή στο έγγραφο σας.

7. Επιλέγοντας το  μπορείτε να επιλέξετε τη μορφή που θέλετε να εμφανίζονται αυτές οι δομές.

8. Επιλέγετε ξανά το **κουμπί Draw** στη δυνατότητα Chemistry. Εμφανίζεται το Μεθάνιο. Αποεπιλέγετε το Hydrogen counts. Κάνετε κλικ και σύρσιμο στον άνθρακα έτσι ώστε να δημιουργήσετε δύο άνθρακες. Στη

συνέχεια στη σειρά των στοιχείων  επιλέγετε το Οξυγόνο. Κάνετε κλικ και σύρσιμο στον δεύτερο άνθρακα και εμφανίζεται ένα άτομο οξυγόνου. Με τον ίδιο τρόπο εισάγετε και δεύτερο άτομο οξυγόνου στον ίδιο άνθρακα.



9. Στη συνέχεια επιλέγετε από την γραμμή εργαλείων τον διπλό δεσμό και επιλέγετε τον δεσμό μεταξύ του άνθρακα και του ενός οξυγόνου έτσι ώστε να γίνει διπλός. Επιλέγετε το Hydrogen counts ώστε να εμφανισθούν και τα υδρογόνα. Αν πατήσετε το Ok εμφανίζεται το παράθυρο Edit labels. Με Save εισάγετε στο έγγραφό σας το οξικό οξύ.

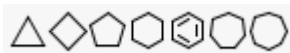
10. Στο έγγραφό σας αν κάνετε 2πλό κλικ πάνω στο οξικό οξύ θα βρεθείτε στο περιβάλλον του Chem4Word Editor. Κάνοντας κλικ στο Coloured atoms, τα άτομα αποκτούν διαφορετικά χρώματα.

11. Αν επιλέξετε το Mode: Multi μπορείτε στο χώρο δημιουργίας να σχεδιάσετε πολλές δομές.

* Είναι δυνατό να αλλάξετε το προεπιλεγμένο μήκος ενός δεσμού με το εργαλείο Bond Length.

ΑΣΚΗΣΗ 1:

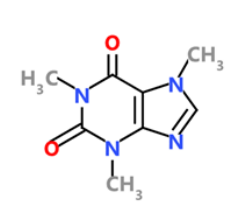
Δημιουργήστε το αιθέριο, 2-βουτένιο και φορμαλδεύδη



Δακτύλιοι - Αφού επιλέξετε έναν τύπο δακτυλίου, τοποθετήστε τον κέρσορα και κάνετε κλικ για να αρχίσετε να σχεδιάζετε ένα νέο δακτύλιο αυτού του τύπου. Η ζώνη βελτιστοποίησης (μπλε κύκλος) παρέχεται για να βοηθήσει τον δακτύλιο στη βέλτιστη θέση όταν ο δείκτης του ποντικιού βρίσκεται μέσα στα όρια του κύκλου. Τοποθετήστε τον δεσμό και πατήστε το ποντίκι προς τα κάτω για να ξεκινήσετε να σχεδιάζετε ένα δακτυλίδι από αυτόν τον δεσμό. Κρατήστε πατημένο το πλήκτρο shift για να τροποποιήσετε τα κανονικά μήκη και κρατήστε πατημένο το πλήκτρο alt για να τροποποιήσετε τις τυποποιημένες γωνίες.

ΑΣΚΗΣΗ 2:

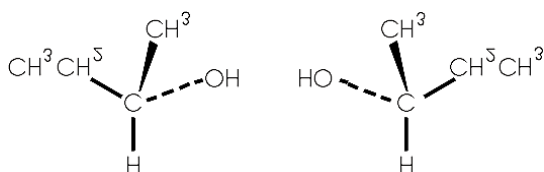
Δημιουργήστε τον παρακάτω συντακτικό τύπο και να το «καφείνη».



εισάγετε σαν συνώνυμο

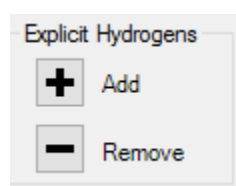
ΑΣΚΗΣΗ 3:

Δημιουργήστε τα εναντιομερή:



Υδρογόνα

Μπορούν να προστεθούν ή να αφαιρεθούν υδρογόνα επιλέγοντας το + και το - που βρίσκονται στο πλαίσιο Hydrogen αν δεν έχετε προκαθορίσει την εμφάνιση υδρογόνων.



Flip και κατοπτρικές δομές

Τα Flip και Mirror κουμπιά επιδρούν στην κατακόρυφη και οριζόντια αναστροφή της δομής:



Μήκος δεσμών

Το **bond length** καθορίζει το μήκος σε pixel ενός δεσμού.

Η αλλαγή του μήκους των ομολόγων επηρεάζει τους υπάρχοντες και τους νέους δεσμούς.

ChemDoodle Web εντολές



Move – Μπορείτε επίσης να κάνετε κλικ και να σύρετε για να μετακινήσετε ολόκληρο το μόριο στο φόντο. Εάν το πλήκτρο Shift κρατηθεί ενώ σύρετε το φόντο, ολόκληρο το μόριο θα περιστραφεί. Με το διπλό κλικ στο φόντο θα κεντραριστεί το μόριο



Clear – Σβήνει την υπάρχουσα δομή.



Erase – Λειτουργία διαγραφής. Η διαγραφή ενός δεσμού θα αφαιρέσει αυτόν τον δεσμό και η διαγραφή ενός ατόμου θα αφαιρέσει εκείνο το άτομο και τυχόν συνδεδεμένους δεσμούς.



Periodic Table – Εμφανίζει έναν περιοδικό πίνακα για να επιλέξετε ένα σύμβολο. Αφού επιλέξετε ένα σύμβολο, τοποθετήστε τον κέρσορα και κάντε κλικ στο χώρο δημιουργίας. Πατήστε το κουμπί Close για να το κλείσετε.

Charges – Μετά την επιλογή ενός σημείου φόρτισης, τοποθετήστε τον κέρσορα και κάντε κλικ στο ποντίκι για να προσθέσετε ή να αφαιρέσετε το ποσό από το ποσό φόρτισης αυτού του ατόμου.



Ζεύγη – Αφού επιλέξετε ένα εικονίδιο με ένα ζευγάρι, τοποθετήστε το δείκτη του ποντικιού σε ένα άτομο και κάντε κλικ στο ποντίκι για να προσθέσετε ή να αφαιρέσετε ένα ζεύγος από το άτομο αυτό



Radicals – After a lone pair icon has been selected, hover an atom and click the mouse to add or remove a lone pair from that atom.

Για εισαγωγή μιας χημικής δομής από αρχείο




Το Chemistry Add-in for Microsoft Word υποστηρίζει εισαγωγή τριών τύπων αρχείων CML, MolFile and SDFFile.



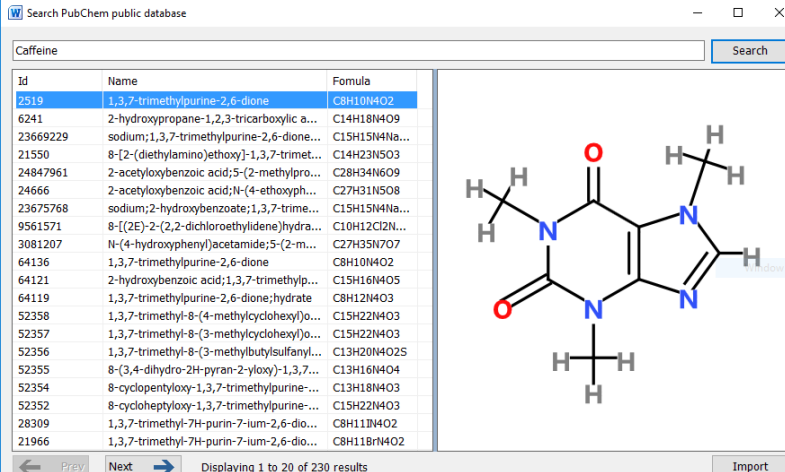
Εισαγωγή δομής από το web-search

1. Στη δυνατότητα Chemistry επιλέγετε το Web Search.

Υπάρχουν τρεις δυνατότητες για εισαγωγή δομών

	<p>PubChem is a public repository of chemical structures and biological data maintained by National Center for Biotechnology Information (NCBI).</p>
	<p>Chemical Entities of Biological Interest (ChEBI) is a freely available dictionary of molecular entities focused on 'small' chemical compounds maintained by the European Molecular Biology Laboratory (EMBL).</p>
	<p>OPSIN is a tool developed at the University of Cambridge that converts chemical names into chemical structures</p>

Η αναζήτηση PubChem

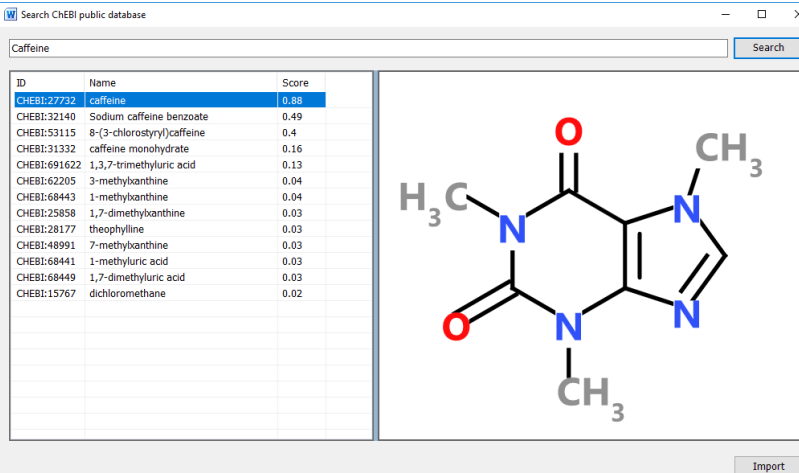


Η αναζήτηση PubChem σας επιτρέπει να αναζητήσετε με βάση το όνομα ή τον τύπο στη βάση δεδομένων PubChem. Πολλαπλές εγγραφές μπορούν να ανακτηθούν από τέτοιες αναζητήσεις και ταξινομούνται ανάλογα με τη συνάφεια. Η επιλεγμένη δομή μπορεί να προστεθεί στο έγγραφο στην τρέχουσα θέση κάνοντας κλικ στο κουμπί Εισαγωγή.

Π.χ. αναζητήστε methane

Η αναζήτηση ChEBI

Η αναζήτηση ChEBI σας επιτρέπει να κάνετε αναζήτηση με βάση το όνομα για δομές στη βάση δεδομένων ChEBI.



Πώς να επεξεργαστείτε μια υπάρχουσα χημική δομή

Όταν επιλέγετε ένα χημικό τύπο σε ένα έγγραφο, μπορείτε να το επεξεργαστείτε κάνοντας διπλό κλικ σε αυτό.

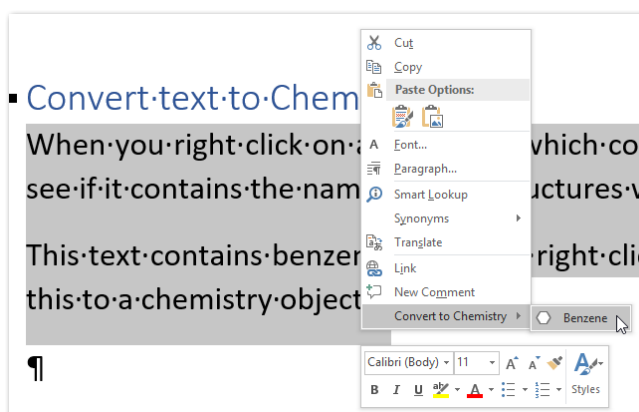
Αν η χημική δομή αλλάξει μετά την επεξεργασία σας, το πρόσθετο τρέχει αυτόματα την αναζήτηση ChemSpider για να διαπιστώσει εάν είναι γνωστή η νέα δομή. Θα σας δοθεί η δυνατότητα να προσθέσετε / αλλάξετε / διαγράψετε ετικέτες που σχετίζονται με τη νέα δομή.

Μετατροπή κειμένου σε χημική δομή

Όταν κάνετε δεξί κλικ σε μια επιλογή (η οποία περιέχει έως και 5 προτάσεις απλού κειμένου) αναλύεται για να φανεί αν περιέχει ονόματα οποιωνδήποτε δομών.

Αυτό το κείμενο περιέχει βενζίνη όταν κάνετε δεξί κλικ στο μενού θα εμφανίσει ένα κουμπί για τη μετατροπή του σε ένα αντικείμενο χημείας.

Convert·text·to·Chemistry¶
When·you·right·click·on·a·selection
see·if·it·contains·the·names·of·any·s
This·text·contains·Benzene·when·y
this·to·a·chemistry·object.¶



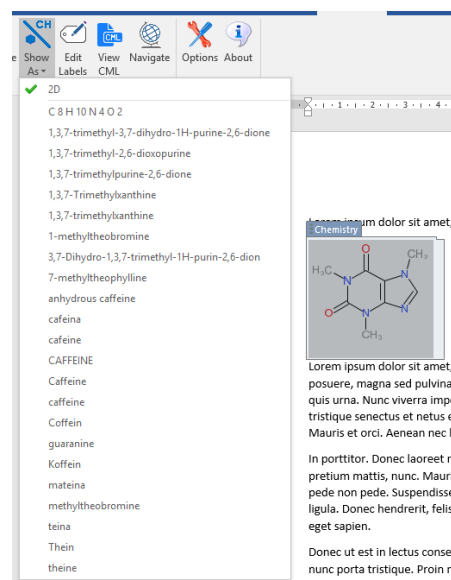
Επιλογές εμφάνισης για τη Chemistry

Το Chemistry Add-in για το Microsoft Word επιτρέπει τη χημεία να αναπαριστάται με πολλαπλές μορφές. Για δομές που εισάγονται από αρχεία και πηγές ιστού, τα αντικείμενα χημείας ενδέχεται να έχουν συσχετισμένα ονόματα και συνώνυμα καθώς και τύπους.

Όταν σχεδιάζετε μια δομή σε ένα έγγραφο, το πρόσθετο ChemSpider ψάχνει για να διαπιστώσει εάν είναι γνωστή η δομή και ανακτώνται όλα τα γνωστά ονόματα και συνώνυμα.

Μπορείτε επίσης να προσθέσετε τα συνώνυμά σας και τους τύπους σε οποιαδήποτε δομή χρησιμοποιώντας το κουμπί Edit Labels.

Το παράδειγμα στα δεξιά δείχνει όλες τις επιλογές απεικόνισης για την καφεΐνη όταν αυτό το αντικείμενο χημείας εισάγεται από το ChEBI. Η χημική δομή που εμφανίζεται αυτήν τη στιγμή μπορεί να αλλάξει για να εμφανίσει οποιαδήποτε από αυτές τις εναλλακτικές απεικονίσεις.

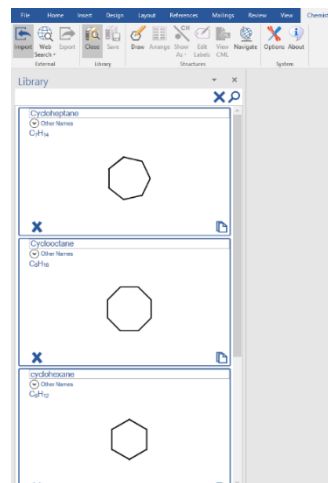


Η Βιβλιοθήκη

Η Βιβλιοθήκη μπορεί να ανοίξει και να κλείσει χρησιμοποιώντας τα αντίστοιχα κουμπιά.

Υπάρχει ένα κουμπί αναζήτησης στο επάνω μέρος του πλαισίου της Βιβλιοθήκης, για να σας βοηθήσει να βρείτε τις δομές με το όνομα. Πληκτρολογήστε το όνομα για αναζήτηση και κάντε κλικ στο μεγεθυντικό φακό. Για να εμφανίσετε όλα τα μόρια στη Βιβλιοθήκη, κάντε κλικ στον σταυρό δίπλα στο μεγεθυντικό φακό.

Για να εισαγάγετε ένα αντίγραφο μιας δομής από τη Βιβλιοθήκη στο έγγραφο στην τρέχουσα θέση δρομέα, απλά κάντε κλικ στο εικονίδιο επικόλλησης στο κάτω δεξιό μέρος της δομής που θέλετε να προσθέσετε.



Για να προσθέσετε μια δομή που έχετε σχεδιάσει στο έγγραφό σας στη βιβλιοθήκη σας, απλά επιλέξτε τη δομή στο έγγραφο και κάντε κλικ στο κουμπί Αποθήκευση στην κορδέλα.

Μπορείτε επίσης να διαγράψετε δομές από τη βιβλιοθήκη σας κάνοντας κλικ στο σταυρό στο κάτω αριστερό μέρος της δομής. Η διαγραφή δομής από τη Βιβλιοθήκη δεν μπορεί να ανακληθεί!

Ο Navigator

Ο Navigator εμφανίζει όλες τις χημικές δομές του εγγράφου και σας επιτρέπει να βρείτε τη θέση τους σε όλο το έγγραφο.

Ο Navigator περιέχει ένα παράθυρο για κάθε μοναδική δομή στο τρέχον έγγραφο. Κάθε παράθυρο στο Navigator παρουσιάζει τη χημική δομή και τον τύπο κάθε μορίου. Στο κάτω μέρος κάθε παραθύρου υπάρχουν τέσσερα κουμπιά που χρησιμοποιούνται για να εισαχθούν στο έγγραφο είτε δημιουργώντας ένα συνδεδεμένο αντίγραφο είτε επικολλώντας ένα νέο αντίγραφο μιας υπάρχουσας δομής στην τρέχουσα θέση.

Τα κουμπιά πλοήγησης σας επιτρέπουν να εντοπίσετε μεμονωμένες και συνδεδεμένες δομές στο έγγραφο μετακινώντας προς τα πίσω ή προς τα εμπρός μέσω του τρέχοντος εγγράφου.



Διπλασιάστε τη δομή και προσθέστε την στο έγγραφο στην τρέχουσα επιλεγμένη θέση.



Προσθέστε ένα συνδεδεμένο αντίγραφο της δομής στο έγγραφο στην τρέχουσα επιλεγμένη θέση.



Μεταβείτε στην προηγούμενη συνδεδεμένη δομή στο έγγραφο.



Μεταβείτε στην επόμενη συνδεδεμένη δομή στο έγγραφο.