



رسم ساختارهای شیمیایی

(راهنمای نرم افزار ISIS/Draw)

وحید حائری، دکتر علی پورجوادی



رسم ساختارهای شیمیایی (راهنمای نرم افزار ISIS/Draw)

تألیف وحید حائری، دکتر علی پورجوادی

طراح جلد: معصومه انوری

نسخه پرداز: فرح بشارتیان

حروفچین: داوود ریبعی، سیدامیر حسینی نیا

ناظر چاپ: جواد خسروی

مرکز نشر دانشگاهی

چاپ اول ۱۳۸۶

تعداد ۱۰۰۰

لیتوگرافی: عابد

چاپ: نماد

حق چاپ برای مرکز نشر دانشگاهی محفوظ است

فهرست نویسی پیش از انتشار کتابخانه ملی جمهوری اسلامی ایران

سرشناسه: حائری، وحید

عنوان و نام پدیدآور: رسم ساختارهای شیمیایی (راهنمای نرم افزار ISIS/Draw) / وحید حائری، علی پورجوادی.

مشخصات نشر: تهران: مرکز نشر دانشگاهی، ۱۳۸۶.

مشخصات ظاهری: دوازده، ۳۴۰ ص:، مصور، نمودار.

فروست: مرکز نشر دانشگاهی؛ ۱۲۶۷، شیمی و مهندسی شیمی؛ ۱۵۳.

شابک: 964-01-1267-4

وضعیت فهرست نویسی: تبیا

موضوع: شیمی - فرایندها - شبیه سازی کامپیوتری.

موضوع: مواد شیمیایی - فرمولها.

شناسه افزوده: پورجوادی، علی، ۱۳۲۷ -

شناسه افزوده: مرکز نشر دانشگاهی.

رده بندی کنگره: ۴۲۳/ح/TP۱۵۵

رده بندی دیویی: ۶۶۰/۲۸۱۵

شماره کتابخانه ملی: ۱۰۳۹۵۳۸

بسم الله الرحمن الرحيم

فهرست

صفحه	عنوان
۴	پیشگفتار
۱	۱ مقدمه و راهنمای نصب
۱	۱-۱ مقدمه
۳	۱-۲ نصب ISIS/Draw
۱۰	۱-۳ نصب و استفاده همزمان از ISIS/Draw 2.5 و نسخه‌های ISIS 2.4/2.3/2.2/2.1
۱۱	۱-۴ خارج کردن ISIS/Draw 2.5 از حالت نصب‌شده
۱۳	۲ راهنمای سریع ISIS/Draw
۱۳	۲-۱ صفحه‌نمایش
۱۴	۲-۲ رسم مولکولها
۳۳	۲-۳ رهایی از اشتباه
۳۳	۲-۴ تغییر حالت‌های پایه (settings) در ISIS/Draw
۳۳	۲-۵ رسم واکنشها
۳۵	۲-۶ کار با متون
۳۷	۳ کار با ابزارها و صفحات الگو
۳۷	۳-۱ استفاده از یک ابزار الگو
۳۸	۳-۲ اضافه کردن یک ابزار الگو به ردیف ابزارهای الگو

- ۲۳ حذف یک ابزار الگو از ردیف ابزارهای الگو ۲۴
- ۲۳ ساختن یک ابزار الگو و اضافه کردن آن به ردیف ابزارهای الگو ۲۴
- ۵۳ استفاده از یک صفحه الگو ۲۶
- ۶۳ اضافه کردن یک صفحه الگو به منوی Templates ۴۷
- ۷۳ حذف یک صفحه الگو از منوی Templates ۴۹
- ۸۳ تغییر نام یک صفحه الگوی موجود در منوی Templates ۵۰
- ۹۳ ساختن یک صفحه الگو و اضافه کردن آن به منوی Templates ۵۰
- ۱۰۳ تعیین فولدر مخزن صفحات الگو ۵۰

۴ رسم با صفحه کلید

- ۱۴ رسم یک پیوند ساده با استفاده از صفحه کلید ۵۲
- ۲۴ رسم یک حلقه به کمک صفحه کلید ۵۳
- ۳۴ رسم یک نماد اتمی به کمک صفحه کلید ۵۴
- ۴۴ وارد کردن ساختارهای خلاصه شده از پیش تعریف شده به کمک صفحه کلید ۵۵

۵ مدیریت شکلها

- ۱۵ ردیف کردن شکلها ۵۸
- ۲۵ تغییر اندازه شکلها ۶۸
- ۳۵ چرخاندن شکلها ۷۰
- ۴۵ حرکت دادن شکلها به کمک کلیدهای حرکتی ۷۳
- ۵۵ دسته کردن و جدا کردن شکلها ۷۳
- ۶۵ چرخش محوری شکلها ۷۴
- ۷۵ مشخص کردن چارچوب نمایش شکلها ۷۵

۶ کار با ساختارهای خلاصه شده

- ۱۶ ساختن یک ساختار خلاصه شده ۷۸
- ۲۶ باز کردن یک ساختار خلاصه شده ۷۹
- ۳۶ بستن یک ساختار خلاصه شده ۷۹
- ۴۶ ویرایش یک ساختار خلاصه شده ۷۹
- ۵۶ تغییر عنوان عبارت متنی ساختار خلاصه شده ۸۰
- ۶۶ وارد کردن ساختارهای خلاصه شده از پیش تعریف شده به کمک صفحه کلید ۸۰

۸۵	۷-۶ ساختن یک ساختار خلاصه شده از پیش تعریف شده
۸۸	۷ راهنمای رسم دقیق
۸۸	۷-۱ بزرگنمایی و کوچک نمایی صفحه نمایش
۸۹	۷-۲ پیش دید چاپ (Print Preview)
۹۰	۷-۳ رسم تصاویر به کمک خط کش
۹۱	۷-۴ رسم تصاویر به کمک صفحه مشبک
۹۴	۸ رسم برای چاپ در نشریات
۹۵	۸-۱ فعال کردن یک مجموعه حالت های پایه
۹۶	۸-۲ تغییر یک مجموعه حالت های پایه
۹۷	۸-۳ ساخت یک مجموعه حالت های پایه
۹۸	۹ بسپارها
۹۸	۹-۱ اصول نمایش بسپارها
۱۱۳	۹-۲ نمایش ساختار پایه بسپارها
۱۲۵	۹-۳ نمایش مبنای پایه بسپارها
۱۳۰	۹-۴ نحوه رسم یک بسپار
۱۳۷	۹-۵ ویرایش بسپارها
۱۴۱	۹-۶ ساختن و ویرایش اطلاعات پیوست
۱۴۷	۱۰ زیست بسپارها
۱۴۷	۱۰-۱ آشنایی با زیست بسپارها و اصطلاحات رایج
۱۵۰	۱۰-۲ مراحل رسم یک زیست بسپار
۱۶۶	۱۰-۳ مدیریت فهرست رمز باقیمانده
۱۷۲	۱۰-۴ مدیریت منوی Sequence
۱۷۳	۱۰-۵ نحوه قرار گرفتن ساختارهای باز باقیمانده ها در یک توالی
۱۷۵	۱۰-۶ وارد کردن یک توالی زیست بسپار موجود در یک ویرایشگر متنی به ISIS/Draw
۱۷۶	۱۱ رسم مخلوطها
۱۷۶	۱۱-۱ اصول نمایش مخلوطها
۱۸۱	۱۱-۲ رسم مخلوطهای نامرتب

۱۸۲	۳-۱۱ رسم مخلوطهای مرتب
۱۸۳	۴-۱۱ ویرایش مخلوطها
۱۸۵	۱۲ استفاده از Chem Inspector
۱۸۵	۱-۱۲ استفاده از Chem Inspector
۱۸۵	۲-۱۲ تعیین دامنه کنترل Chem Inspector
۱۹۰	۱۳ اصول مدیریت فایلها
۱۹۰	۱-۱۳ بازکردن یک صفحه‌نمایش جدید
۱۹۱	۲-۱۳ ذخیره صفحه‌نمایش جدید در یک فایل
۱۹۲	۳-۱۳ بازکردن یک فایل
۱۹۴	۴-۱۳ ذخیره تغییرات یک فایل صفحه‌نمایش
۱۹۴	۵-۱۳ داخل کردن محتوای یک فایل به صفحه‌نمایش فعال
۱۹۴	۶-۱۳ بستن یک صفحه‌نمایش
۱۹۵	۷-۱۳ چاپ صفحه‌نمایش فعال
۱۹۵	۸-۱۳ خروج از برنامه ISIS/Draw
۱۹۶	۹-۱۳ ورود (Import) اطلاعات به ISIS/Draw
۱۹۸	۱۰-۱۳ صدور (Export) اطلاعات از ISIS/Draw
۲۰۱	۱۱-۱۳ انتقال کپی تصاویر از ISIS/Draw به یک نرم‌افزار دیگر...
۲۰۳	۱۴ حالت‌های پایه
۲۰۳	۱-۱۴ تغییر در فایل مجموعه حالت‌های پایه فعال
۲۰۵	۲-۱۴ اعمال یک مجموعه حالت‌های پایه روی یک صفحه موجود
۲۰۶	۳-۱۴ ساختن یک مجموعه حالت‌های پایه
۲۰۶	۴-۱۴ فعال کردن مجموعه حالت‌های پایه موجود در یک فایل حالت‌های پایه
۲۰۷	۵-۱۴ انتخاب‌های موجود در پنجره Settings
۲۲۷	۱۵ برنامه کاربردی "Add-in Manager"
۲۲۷	۱-۱۵ تعاریف کلی
۲۲۸	۲-۱۵ نصب یک Add-in
۲۲۹	۳-۱۵ غیر فعال کردن یک Add-in
۲۳۰	۴-۱۵ دوباره فعال کردن یک Add-in غیر فعال شده

۲۳۱	۵-۱۵ حذف و وانصب یک Add-in
۲۳۲	۶-۱۵ به دست آوردن اطلاعاتی راجع به یک Add-in
۲۳۳	۷-۱۵ تعیین پیکربندی Add-in ها
۲۳۳	۸-۱۵ اضافه کردن یک فولدر مرجع فایل‌های Add-in
۲۳۴	۹-۱۵ تعیین فولدر نصب Add-in ها
۲۳۴	۱۰-۱۵ حذف یک فولدر مرجع فایل‌های Add-in
۲۳۵	۱۱-۱۵ به دست آوردن اطلاعات سیستمی
۲۳۶	۱۲-۱۵ بازکردن یک صفحه نمایش تازه استفاده شده
۲۳۷	۱۶ ابزارها در ISIS/Draw
۲۳۷	۱-۱۶ ابزارهای الگو
۲۳۹	۲-۱۶ ابزار آخرین ساختار الگو، 
۲۳۹	۳-۱۶ ابزار صفحه، 
۲۳۹	۴-۱۶ ابزار Chem Inspector، 
۲۳۹	۵-۱۶ ابزار انتقال به ISIS/Base، 
۲۳۹	۶-۱۶ ابزارهای انتخاب، 
۲۴۱	۷-۱۶ ابزار چرخش، 
۲۴۱	۸-۱۶ ابزار پاک کن، 
۲۴۲	۹-۱۶ ابزار رسم اتم، 
۲۴۲	۱۰-۱۶ ابزارهای رسم پیوند، 
۲۴۳	۱۱-۱۶ ابزارهای رسم پیوندهای فضایی، 
۲۴۴	۱۲-۱۶ ابزارهای رسم زنجیر، 
۲۴۵	۱۳-۱۶ ابزار، 
۲۴۵	۱۴-۱۶ ابزارهای رسم پیکان
۲۴۶	۱۵-۱۶ ابزارهای رسم نقشه اتم به اتم، 
۲۴۹	۱۶-۱۶ ابزارهای رسم زیست‌بپارها، 
۲۴۹	۱۷-۱۶ ابزار رسم کروش، 
۲۵۰	۱۸-۱۶ ابزار حروفچینی متون، 
۲۵۰	۱۹-۱۶ ابزارهای رسم خطوط، 
۲۵۱	۲۰-۱۶ ابزارهای رسم شکلهای هندسی، 



۲۱-۱۶ ابزار استفاده از AutoNom

۲۵۲

۱۷ منوها در ISIS/Draw

۲۵۳

File منوی ۱-۱۷

۲۵۳

Edit منوی ۲-۱۷

۲۵۷

Options منوی ۳-۱۷

۲۶۱

Object منوی ۴-۱۷

۲۶۶

Text منوی ۵-۱۷

۲۸۲

Templates منوی ۶-۱۷

۲۸۵

Chemistry منوی ۷-۱۷

۲۸۶

Window منوی ۸-۱۷

۲۹۳

Help منوی ۹-۱۷

۲۹۴

۱۰-۱۷ کلیدهای میان‌بر

۲۹۴

۱۱-۱۷ کلیک راست

۲۹۵

۱۸ آشنایی با دو نرم‌افزار جانبی AutoNom Standard و RasMol

۲۹۶

۱-۱۸ آشنایی با AutoNom Standard

۲۹۶

۲-۱۸ آشنایی با RasMol

۲۹۸

پیوست صفحات الگو ISIS/Draw

۳۰۳

واژه‌نامه

۳۲۷

نمایه

۳۳۲

پیشگفتار

در سالهای اخیر استفاده از نرم افزارهای متنوع در حیطه های مختلف علوم گسترش فراوان یافته است. در تمامی رشته های تحصیلی می توان نرم افزارهایی یافت که دانش آموزان، دانشجویان، پژوهشگران و صنعتگران در آن رشته را در انجام فعالیتشان یاری می رسانند.

در حیطه علم شیمی نرم افزارهای بسیاری توسط شرکتهای گوناگون به بازار عرضه شده اند. در میان این نرم افزارها برای رسم مولکولهای شیمیایی، نرم افزار ISIS/Draw یکی از پر قابلیت ترین و ساده ترین نرم افزارهاست.

یادگیری نحوه استفاده از این نرم افزار به دانشجویان و پژوهشگران برای رسم تصاویر شیمیایی، کمک شایانی می کند. شرکت MDL در سال ۱۹۹۱ اولین نسخه نرم افزار ISIS/Draw را به بازار ارائه کرد.

این نرم افزار قواعد و اصول پایه ای شیمی چون محدودیتهای لایه ظرفیت، زوایای پیوندی و سیستمهای حاوی حلقه های آروماتیک را می شناسد و این شناخت کاربر را قادر می سازد تا ساختارهای شیمیایی را سریع و به طور مستقیم رسم کند.

در کتاب حاضر نرم افزار ISIS/Draw نسخه ۲٫۵ آموزش داده شده است. در این کتاب همواره سعی شده است تا نحوه استفاده از این نرم افزار به شکل ساده و قابل فهم حتی برای کسانی که با رایانه آشنایی زیادی ندارند بیان شود.

در فصل اول این کتاب نحوه نصب نرم افزار را می آموزید. فصل دوم خلاصه ای از نحوه کار با نرم افزار است و از آن می توان به عنوان یک خودآموز مختصر و سریع استفاده کرد. پس از مطالعه این فصل می توانید با ISIS/Draw کار کرده و از قابلیت های عمومی آن استفاده کنید. فصل سوم پس از تعریف ابزار و صفحه الگو نحوه استفاده از این دو قابلیت بسیار پرکاربرد ISIS/Draw را به شما می آموزد. فصل چهارم شامل مطالبی است که به کمک آن می توانید با استفاده از صفحه کلید از این نرم افزار بهره گیرید. در فصل پنجم نحوه مدیریت شکل های ترسیمی شامل مرتب کردن، تغییر اندازه دادن و... را می آموزید.

پس از مطالعه فصل ششم تعریف ساختارهای خلاصه شده و نحوه استفاده از آنها را می آموزید. به کمک ساختارهای خلاصه شده می توان مولکول های بسیار پیچیده را به راحتی رسم کرد. فصل هفتم راهنمای رسم دقیق شکلهایست. پس از مطالعه این فصل، کاربر به راحتی می تواند به کمک ابزارهایی چون خط کش و صفحات مشبک شکلهای مورد نظر خود را به طور دقیق در اندازه ها و زوایای دلخواه رسم کند. فصل هشتم این کتاب به پژوهشگرانی که قصد ارسال آثار پژوهشی خود به مجلات مختلف بین المللی را دارند کمک می کند تا تصاویر مقالات خود را مطابق فرمت آن مجلات رسم و برای ایشان ارسال کنند. فصل های نهم، دهم و یازدهم به ترتیب قواعد مورد توافق برای رسم بسپارها، زیست بسپارها و مخلوطها را در بر دارد. در فصل دوازدهم با امکان جانبی Chem Inspector آشنا می شوید. Chem Inspector یک امکان جانبی در نرم افزار ISIS/Draw است که کاربر را قادر می سازد از جنبه های مختلف، صحت شکل ترسیمی خود را کنترل کند. فصل سیزدهم نحوه مدیریت فایلها را در ISIS/Draw به شما آموزش می دهد. فصل چهاردهم شامل آموزش حالت های پایه و نحوه استفاده از آنها می شود. حالت های پایه مجموعه پیش فرض هایی هستند که به هنگام رسم شکلهای شیمیایی توسط نرم افزار ISIS/Draw رعایت می شود. مواردی چون طول پیوند پهنای آن، زوایای پیوندی و... جزء حالت های پایه هستند. در فصل پانزدهم به کمک Add in Manager می آموزید که چگونه از نرم افزارهای جانبی ISIS/Draw بهره گرفته و آنها را مدیریت کنید. فصل شانزدهم و هفدهم به نوعی خلاصه قابلیت های ISIS/Draw است. در این دو فصل به ترتیب تک تک ابزارها و انتخاب های منوهای ISIS/Draw معرفی و نحوه استفاده از آنها شرح داده خواهد شد. فصل هیجدهم به معرفی دو نرم افزار جانبی ISIS/Draw شامل AutoNom Standard و RasMol و امکانات این دو نرم افزار می پردازد.

در پیوست این کتاب نیز صفحات الگوی موجود در ISIS/Draw، شکلهای از پیش ترسیم شده را در بردارد. کاربر می تواند بدون رسم مجدد این شکلهای از آنها در ترسیم

شکلهای موردنظر خود استفاده کند. در پایان مؤلفان از خانم محبوبه صفائیان نائینی به خاطر بازخوانی و تطبیق مطالب کتاب با نرم افزار تشکر می کنند. از خوانندگان محترم نیز درخواست می شود از سر لطف ما را با پیشنهادهای سازنده خود در تصحیح چاپهای بعدی این کتاب و تألیف کتابهای مشابه یاری رسانند.

بهار ۱۳۸۶

www.ketab.ir