

Speciální software pro výuku chemie

Závěrečná práce

Vedoucí práce:

Ing. Ludmila Brestičová

Mgr. Pavel Lovas

Brno 2012



ZADÁNÍ ZÁVĚREČNÉ PRÁCE

Zpracovatel : **Mgr. Pavel Lovas**

Studijní program: Studium k výkonu specializovaných činností. Koordinace v oblasti ICT.

Konzultant: Mgr. Martin Dojiva

Název tématu: **Speciální software pro výuku chemie**

Zásady pro vypracování:

1. Specifika tvorby dokumentů pro výuku chemie
2. Editory chemických vzorců pro různé operační systémy, zhodnocení
3. Využití kancelářských aplikací pro zpracování vzorců
4. Vytvoření vlastního rozšíření pro zápis chemických vzorců v prostředí MS Word



Rozsah práce: 30 stran

Seznam odborné literatury:


1. BÍLEK, M. *ICT ve výuce chemie*. Hradec králové: Gaudeamus, 2005. ISBN 80-7041-631-9.
2. ROMAN, S. *Programujeme makra ve Wordu*. 1. vyd. Praha: Computer Press, 2000. 20 s. ISBN 80-7226-273-4.
3. ŠIMEK, P. *Programujeme makra*. Praha: GComp, 1995. 234 s. ISBN 80-85649-32-2.

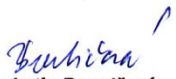
Datum zadání závěrečné práce: květen 2012

Termín odevzdání závěrečné práce: červenec 2012


Mgr. Pavel Lovas
Autor práce




doc. Ing. Dr. Jiří Rybička
Garant studijního programu


Ing. Ludmila Brestičová
Vedoucí práce


prof. Ing. Jana Stávková, CSc.
Děkanka PEF MENDELU

Děkuji vedoucí závěrečné práce Ing. Ludmile Brestičové za odborné vedení a cenné rady při vypracování mé práce. Rovněž si dovoluji poděkovat konzultantovi Mgr. Martinu Dojivovi za věnovaný čas a cenné připomínky.

Prohlašuji, že jsem tuto závěrečnou práci na téma „Speciální software pro výuku chemie“ vypracoval samostatně s použitím podkladů, které jsou v práci uvedeny.

V Kroměříži dne 31. července 2012

Abstract

Lovas, P. Special software for chemistry teaching. Final thesis. Brno: MUAF, 2012.

Making documents in chemistry teaching. Office software for chemical formulas, discusses of chemical programs. Expansion application MS Word for making chemical formulas (macros with VBA).

Keywords

Documents in chemistry teaching, Office software, Chemistry editors, Macros in Visual Basic for Word.

Abstrakt

Lovas, P. Speciální software pro výuku chemie. Závěrečná práce. Brno: MZLU v Brně, 2012.

Předložená práce se zabývá problematikou tvorby dokumentů ve výuce chemie. V teoretické části se zabývá využitím kancelářských aplikací pro zpracování vzorců. Praktická část obsahuje hodnocení zvolených editorů chemických vzorců v různých operačních systémech, dále přináší vlastní rozšíření aplikace MS Wordu pro zápis chemických vzorců, které bylo vytvořeno jako makro v jazyce VBA (Visual Basic for Word).

Klíčová slova

Dokumenty ve výuce chemie, kancelářské aplikace, editory chemických vzorců, makro v aplikaci MS Word.

Obsah

1	Úvod a cíl práce	17
1.1	Úvod	17
1.2	Cíl práce	17
2	Tvorba dokumentů pro výuku chemie	18
2.1	Textové editory	18
2.2	Podpůrné grafické nástroje.....	20
3	Chemické editory	21
3.1	OS Windows.....	21
3.1.1	Marvin	21
3.1.2	ChemSketch	23
3.1.3	Organická chemie	26
3.2	OS Linux.....	28
3.2.1	Kalzium	28
3.2.2	JChemPaint.....	29
3.2.3	ChemSketch	31
4	Kancelářské aplikace	33
4.1	MS Office.....	33
4.2	OpenOffice, LibreOffice.....	34
5	Rozšíření MS Word	37
5.1	Visual Basic	37
5.2	Visual Basic for Applications	38
6	Závěr	42
6.1	A na konec.....	42
7	Literatura	43
A	Makro chem_vzorce	46

Seznam obrázků

Obr. 1	Marvin, prostředí programu	21
Obr. 2	Marvin, práce se šablonami	22
Obr. 3	Marvin, 3D viewer	22
Obr. 4	ChemSketch, okno se šablonami	24
Obr. 5	ChemSketch, tvorba chemické struktury	24
Obr. 6	ChemSketch, 3D viewer	25
Obr. 7	ChemSketch, zápis anorganického vzorce (Edit Label)	25
Obr. 8	Organická chemie, prostředí programu	26
Obr. 9	Organická chemie, tvorba vzorců	27
Obr. 10	Organická chemie, ukládání souboru	27
Obr. 11	Prostředí Edubuntu, volba vzdělávacích programů	28
Obr. 12	Kalzium, prostředí programu, rotace molekuly	29
Obr. 13	Kalzium, editační možnosti	29
Obr. 14	Prostředí editoru JChemPaint	30
Obr. 15	Editor JChemPaint, ukládání souboru	30
Obr. 16	OS Linux, instalace prostředí Wine	31
Obr. 17	ChemSketch v prostředí Linuxu	31
Obr. 18	ChemSketch v Linuxu, tvorba chemické struktury	32
Obr. 19	ChemSketch v Linuxu, 3D viewer	32
Obr. 20	Prostředí MS Office 2000, práce s indexy	34
Obr. 21	Pracovní prostředí MS Office 2007	34
Obr. 22	OpenOffice, pracovní prostředí, práce s indexy	35

Obr. 23	OpenOffice, instalace rozšíření SuperbChemistry	35
Obr. 24	OpenOffice, Správce rozšíření	36
Obr. 25	OpenOffice, spouštění makra SuperbChemistry	36
Obr. 26	OpenOffice, ukázka práce makra SuperbChemistry	36
Obr. 27	Vývojové prostředí Visual Basicu	38
Obr. 28	Deklarační část makra	39
Obr. 29	Tvorba makra, využití funkce IF	39
Obr. 30	Nápověda k funkci MsgBox	40
Obr. 31	Praktické použití k funkce MsgBox	40
Obr. 32	Zdrojový text makra Chemicke_vzorce část 1	46
Obr. 33	Zdrojový text makra Chemicke_vzorce část 2	47
Obr. 34	Zdrojový text makra Chemicke_vzorce část 3	48
Obr. 35	Zdrojový text makra Chemicke_vzorce část 4	49
Obr. 36	Zdrojový text makra Chemicke_vzorce část 5	50

Seznam tabulek

Tab. 1	Programové vybavení kancelářského software	18
Tab. 2	Horké klávesy pro dolní a horní index	33

1 Úvod a cíl práce

1.1 Úvod

V současné době jsme svědky výrazného nasazení moderních informačních a komunikačních technologií do školství a vyučovacího procesu. Školy jsou vybaveny výpočetní technikou s dostatečným výkonem, ve vyučování se stále více používají moderní audiovizuální prostředky. Toto se samozřejmě dotýká i výuky chemie. Přesto je ale často k vidění situace, že zápis chemických vzorců je prováděn „klasicky ručně“.

Téma „Speciální software pro výuku chemie“ jsem si zvolil z toho důvodu, že chci poukázat jednak na možnosti vhodných chemických editorů, jednak na možnosti současného kancelářského software, které jsou k dispozici pod různými operačními systémy. V případě kancelářského balíku je nutno nainstalovat vhodné rozšíření, které je k dispozici na internetu. K vytvoření rozšíření pro zápis chemických vzorců v prostředí MS Word využívám vlastních zkušeností s programováním ve Visual Basicu. Jako inspirace mě sloužilo rozšíření kancelářského balíku OpenOffice s názvem SuperbChemistry.

1.2 Cíl práce

Cílem této práce je seznámit čtenáře s vhodným softwarovým vybavením, které je využitelné ke tvorbě dokumentů pro výuku chemie. Nejedná se o vyčerpávající přehled nabízeného software, použití konkrétního programu bude záležet na vlastním rozhodnutí pedagoga a jeho schopnosti aktivně využívat prostředky ICT. Kromě kancelářského balíku MS Office byl důraz kladen na využití zdrojů z oblasti freeware.

2 Tvorba dokumentů pro výuku chemie

2.1 Textové editory

Pro vytváření dokumentů ve výuce chemie v dnešní době využíváme vhodného kancelářského balíku. Vzhledem k rozšířenosti operačních systémů MS Windows a některé z distribucí Linuxu se jedná MS Office nebo OpenOffice (openoffice.org).

Vytvořené materiály ve kterémkoliv z uvedených programových balíčků dosahují velmi slušné tiskové kvality, disponují celou řadou pokročilých funkcí (automatické ukládání, formátování textu, automatická kontrola textu, ...). Z tohoto důvodu jsou pedagogy i studenty běžně využívány v administrativní oblasti, ke tvorbě tabulek a grafů, k vytváření prezentací, ke tvorbě testů (Bílek, 2005).

Porovnání obou výše uvedených programových balíčků z hlediska softwarové vybavy se nachází v následující tabulce:

Tab. 1 Programové vybavení kancelářského software

Komponenta	MS Office	OpenOffice
Textový editor	Word	Writer
Tabulkový procesor	Excel	Calc
Prezentace	Powerpoint	Impress
Databáze	Access	Base
Rovnice, vzorce	Editor rovnic	Math
Kreslicí nástroj	Kreslení	Draw

Při vlastní tvorbě dokumentů pro potřebu výuky chemie je třeba zvážit tři oblasti. Zda tyto dokumenty budou obsahovat sumární vzorce, rozvětvené chemické struktury nebo schémata či nákresy aparatur.

V případě sumárních vzorců je možno tyto přímo psát v textovém editoru a potom následně upravit číselné hodnoty (horní a dolní index). Zde nachází uplatnění myšlenka na použití vhodného rozšíření, které tuto činnost dokáže zautomatizovat. Dále je možno využít Editor rovnic (MS Word) nebo Math (OpenOffice), které výsledný vzorec vloží do dokumentu jako obrázek. Tato činnost se již jeví jako pracnější. V neposlední řadě lze využít prostředí chemického editoru, který umožní zápis sumárního vzorce a pracovní režim automaticky číselné hodnoty upraví do správného tvaru. Výsledný vzorec vložíme do dokumentu jako obrázek.

K vytváření rozvětvených chemických struktur je nejvhodnější využít některého z chemických editorů. Navíc řada z nich disponuje šablonami a tak získáváme nástroj, s jehož pomocí můžeme tvořit značně složité molekuly. Navíc tyto lze poměrně snadno dále editovat. Vytváření těchto vzorců v kreslicím nástroji

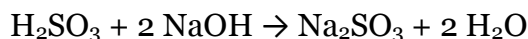
Kreslení (MS Word), Draw (OpenOffice) nebo snad Malování (OS Windows) je sice možné, ale velmi pracné a tedy časově značně náročné.

Ke tvorbě schémat nebo nákrešů aparatur je ideální využít pracovní prostředí příslušného chemického editoru přesto, že je zde nabídka ale velmi omezena. V ideálním případě máme k dispozici prostředí vybavené šablonami. V případě nasazení kreslicích nástrojů platí závěr předchozího odstavce, tzn. pracnost a časová náročnost. Jako o něco vhodnější se rysuje využití některého z vektorových editorů (např. CorelDraw, Inkscape, nebo Draw), o kterých se zmíním v kapitole „Podpůrné grafické nástroje“.

Jako pomyslná třesnička na dortu se jeví modelování vytvořených molekul v 3D prostředí s možností animace. Touto schopností disponují jen některé z chemických editorů. Využití animací se nabízí především ke tvorbě zajímavě vyhlížejících prezentací.

V této práci se ale hlavně zaměřuji na tvorbu chemických vzorců a z tohoto důvodu vynechám kromě textových editorů všechny ostatní výše uvedené položky příslušného kancelářského software. Správný zápis názvů chemických sloučenin a jejich vzorců je určován pravidly v materiálu Red Book (Connely, 2005).

Vzorce chemických sloučenin a značky chemických prvků se píší vždy stojatě (tj. i v kurzívním textu, např. v nadpisu). Je přípustné půltučné písmo. Číslice udávající počty atomů ve vzorcích mají povahu indexů. Ve vzorcích sloučenin se píší značky prvků vedle sebe bez mezer (toto pravidlo platí i u adičních sloučenin $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$). V chemické rovnici se ale mezi číselným koeficientem a vzorcem se vždy vynechává mezera.



Obecně platí, že matematické vztahy nebo chemické rovnice se v textu umísťují na zvláštní řádek, matematické výrazy a chemické vzorce do řádků textu. Toto pravidlo je poměrně volné a není důvod nenechat jednoduchou rovnici v řádcích textu, popřípadě neumístit složitý výraz nebo chemický vzorec na zvláštní řádek. Roli zde hraje estetické hledisko. Je-li vyjádření „příliš objemné“ a z tohoto důvodu dojde k tzv. „rozpálení“ mezery mezi řádky (např. zlomek), dochází ke zhoršení plynulosti čtení. Jestliže přesto požadujeme zápis do řádku, můžeme použít i některá zjednodušení. Viz několik příkladů:

píšeme	$k_{\text{A}}(\text{CH}_3\text{COOH}, 25\text{ °C})$	místo	$(k_{\text{A}})_{\text{CH}_3\text{COOH}}^{25\text{ °C}}$
	$\exp(-E/RT)$	místo	$\text{e}^{-E/RT}$

Rovnice na zvláštním řádku pak mohou být orientovány buď na střed, nebo zleva, odsazené odstavcovou zářádkou. Roli opět hraje estetické cítění autora anebo požadavky editora. Je nezbytné dodržovat jednotnou úpravu v celém dokumentu (Juláková, 2007).

2.2 Podpůrné grafické nástroje

Výstupem celé řady chemických editorů jsou vzorce, rovnice, nákresy aparatur, schémata. Tyto se v ideálním případě mohou umístit přímo, buď prostřednictvím schránky, nebo v rámci dialogu použitého textového editoru *Vložit* → *Obrázek* → *Ze souboru* (MS Office 2000-2003) nebo *karta Vložení* → *Obrázek* (MS Office 2007-2010), bez dalších úprav do vytvářeného dokumentu. Další oblastí je fotodokumentace realizovaných činností a zde se dá reálně předpokládat, že pořízený materiál bude nutno upravit, např. v případě tvorby návodu pro laboratorní cvičení. Jako velmi efektní se jeví využití animací. Tyto mohou být využity k získání větší názornosti o vytvářených chemických molekulách, nebo mohou být použity ke tvorbě tzv. tutoriálů, jenž názorně představují pracovní prostředí a pracovní postupy v používaném chemickém editoru.

Neustále se přikláním k využití grafických programů z oblasti freeware, takže vynechám profesionální placené programy vycházející z principů Adobe Photoshop (www.adobe.com) a CorelDraw (www.corel.com) a zaměřím se na volně dostupné programové vybavení. Z oblasti bitmapových editorů uvádím ty nejznámější Gimp (www.gimp.org), Paint.NET (www.getpaint.net), PhotoFiltre (www.photofiltre.com). Z kategorie vektorových editorů mám na mysli Inkscape (inkscape.org). Tento podporuje práci se soubory *.svg (Scalable Vektor Graphic, škálovatelná vektorová grafika).

Pro tvorbu animací a případně jejich úpravu je k dispozici několik možností. Buď nám toto umožňuje přímo pracovní prostředí chemického editoru (značné omezení freewarových verzí), nebo využijeme možností tzv. zachycení činností na obrazovce (screencapturing). Další variantou je možnost využití software dodávaného s interaktivními tabulemi, např. Active Studio. Úprava, export a další zpracování pořízených animací či videosouborů je mimo zaměření této práce.

3 Chemické editory

3.1 OS Windows

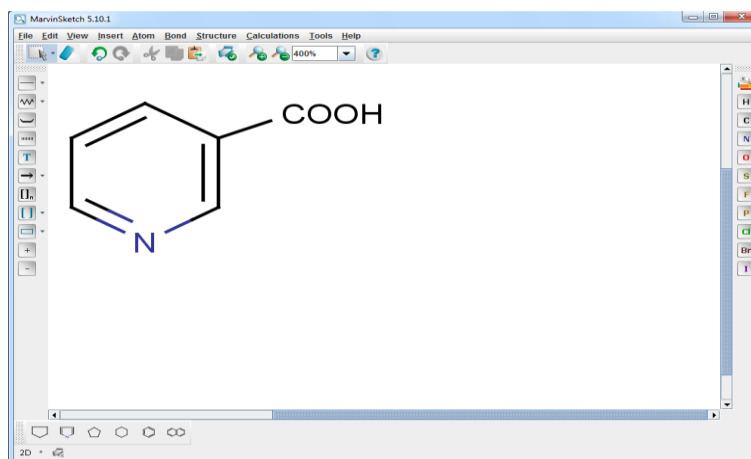
3.1.1 Marvin

Program vyvíjí firma ChemAxon (www.chemaxon.com) a na jejích stránkách je možno jej získat díky jednoduché registraci. Tento program je multiplatformní, a teoreticky je možno ho používat kdekoliv, kde se podaří zprovoznit jakoukoliv verzi běhového prostředí Java. Je tedy možno jej provozovat pod operačními systémy Windows, Linux i MAC-OS. Navíc na stránkách výrobce je k dispozici přímo instalátor pro OS Windows.

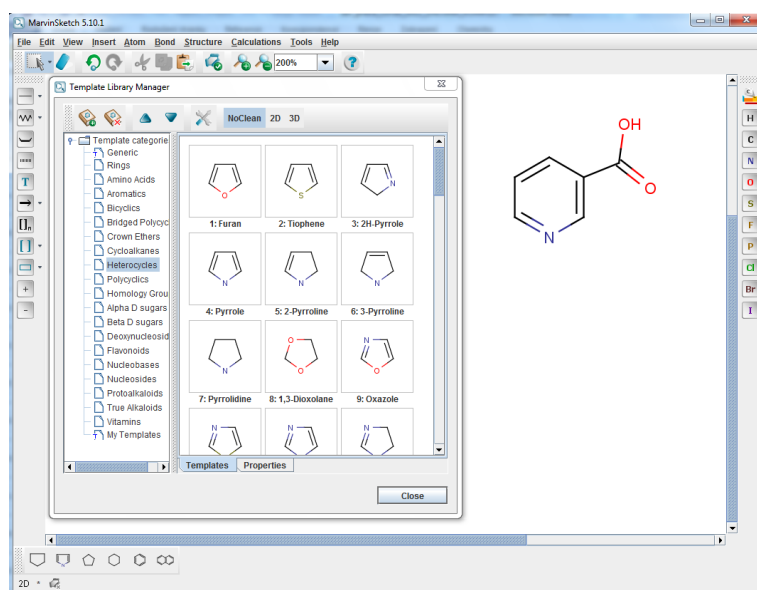
Plný název programu je Marvin Suite (Sketch, View, Space). Modul Sketch slouží k vytváření chemických struktur, modul View nabízí renderování vytvořených molekul ve 2D/3D režimu a modul Space disponuje pokročilými vizualizačními nástroji ve 3D. Na stránkách výrobce v oblasti dokumentace, průvodce uživatele, Marvin (Marvin User's Guide) je vytvořen podrobný manuál pro práci s jednotlivými moduly.

Na první pohled pracovní prostředí vypadá stroze, disponuje však bohatě vybaveným roletkovým menu. Součástí základní instalace je 20 šablon (templates). Nechybí možnost tvorby vlastní šablony. Editační schopnosti Marvina jsou značné, jen je zapotřebí seznámit se s nabídkami roletkového menu. Program nemá k dispozici kreslení aparatur a geometrických tvarů.

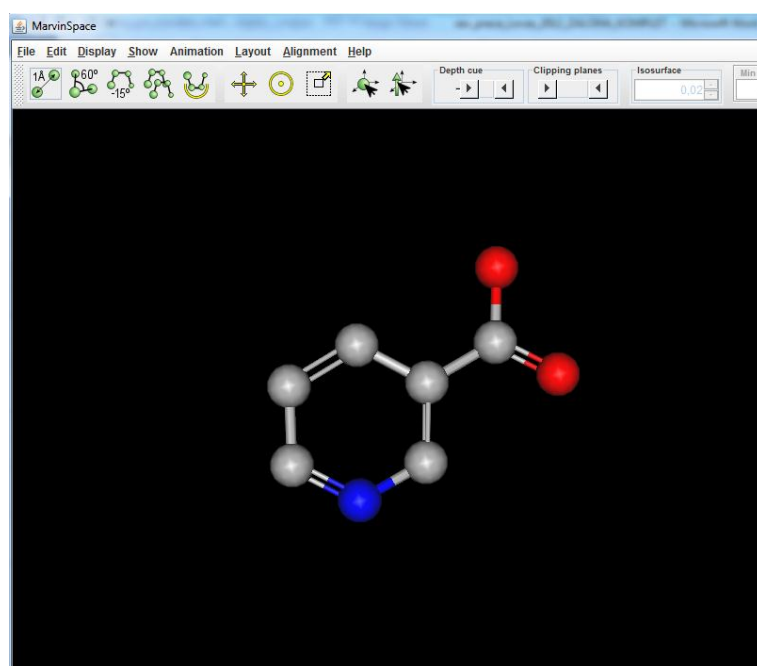
Škála výstupních formátů programu je hodně bohatá. Z modulu Sketch jsou to formáty pro různý chemický software (*.mrv, *.mol, *.skc, *.cml, *.smi, *.pdf), z modulu Viewer-2D/3D různé obrazové formáty (*.bmp, *.jpg, *.png, *.ppm, *.svg, *.emf), z modulu Space (*.mol, *.mrv, *.png, *.jpg, *.bmp).



Obr. 1 Marvin, prostředí programu



Obr. 2 Marvin, práce se šablonami



Obr. 3 Marvin, 3D viewer

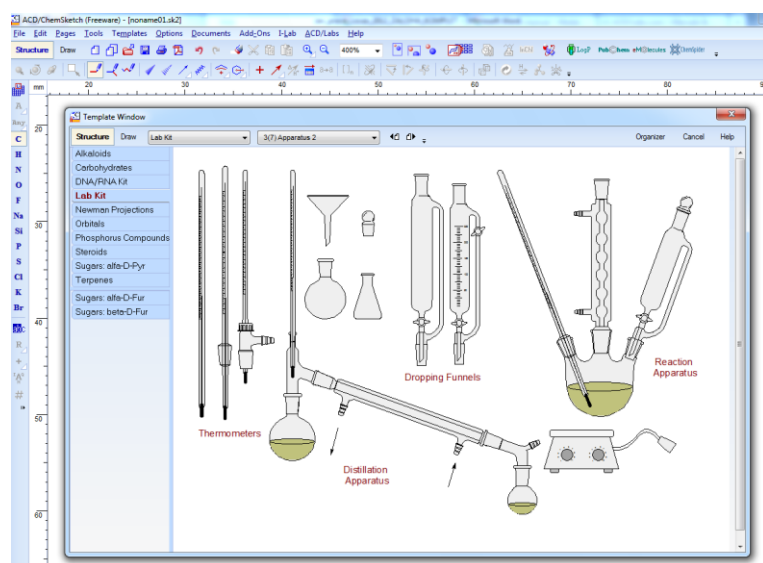
3.1.2 ChemSketch

Program vyvíjí firma ACD/Labs (www.acdlabs.com) a představuje absolutní špičku na úrovni freeware. K jeho stažení je třeba absolvovat jednoduchou registraci. Menu programu se dělí do dvou pracovních režimů, strukturního a kreslicího. ChemSketch disponuje výborným grafickým rozhraním, kterým se dobře ovládá, pro začátečníka může být až příliš bohaté. Pracovní nástroje jsou umístěny po stranách kreslicího pole programu. Ikony těch nástrojů, které patří k sobě vytváří logické bloky.

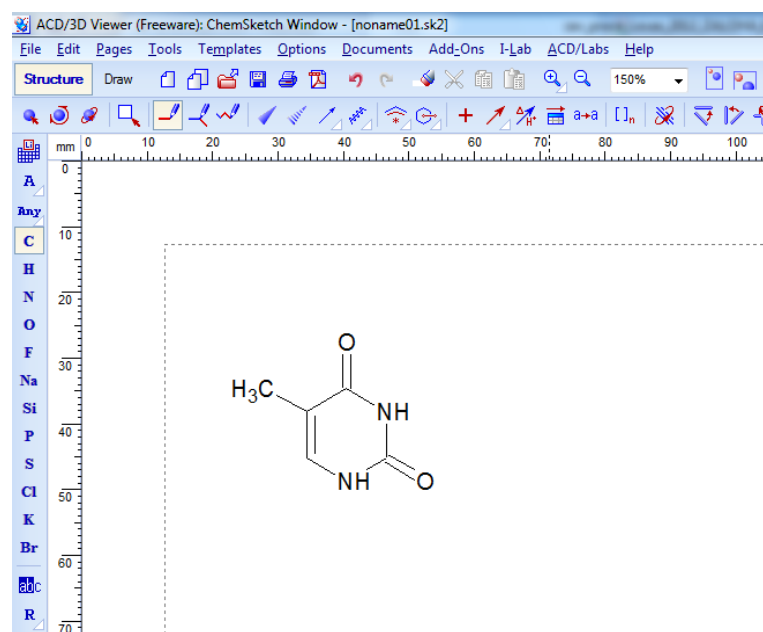
Kreslicí mód je vhodný ke kreslení různých schémat a aparatur, strukturní mód slouží k vytváření struktur molekul a chemických rovnic. ChemSketch je navíc vybaven 3D viewerem, kterým lze prohlížet vytvořené molekuly a tento disponuje širokou škálou možností jak bude molekula zobrazena (vytváří modely drátové, kuličkové, tyčinkové, kalotové). Program je vybaven rozsáhlou paletou šablon (templates), ve freewarové verzi je přímo k dispozici 10, k ostatním se dostanete přes položku template organizer (zde je k dispozici celkem 40 položek). Program disponuje propojením na databázi PubChem a díky tomuto je možno vygenerovat název vytvořené molekuly. Omezení freewarové verze se projevuje při optimalizaci a tvorbě názvu vytvořené molekuly, která může mít maximálně 50 atomů uhlíku a může obsahovat pouze nejběžnější chemické prvky (C, H, O, S, N, P a několik dalších). Pokud v položce Edit label zapisujeme anorganické a sumární organické vzorce, prostředí programu se postará o správný zápis čísel ve tvaru indexů.

Sada výstupních formátů, kterými program disponuje je obdivuhodná. Vedle využití v rámci chemického software (*.cml, *.skc, *.mol, *.rxn, *.sk2), přes různé grafické formáty (*.wmf, *.bmp, *.tif, *.gif, *.png) nabízí od verze 10 ukládání ve formátu *.pdf. Výstupem z prostředí 3D viewer kromě formátu pro chemický software (*.cml, *.mol, *.s3d, *.mop) dále nabízí grafické formáty (*.bmp, *.gif) včetně animovaného GIFu.

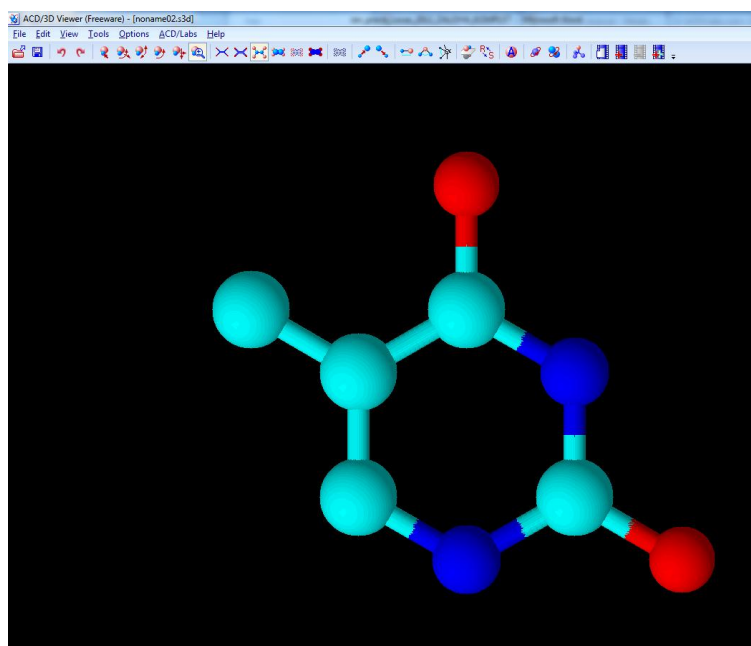
I když je ChemSketch v angličtině, je k dispozici český manuál (Drašar, 2007), který výrazně zpříjemní úvodní kroky v programu.



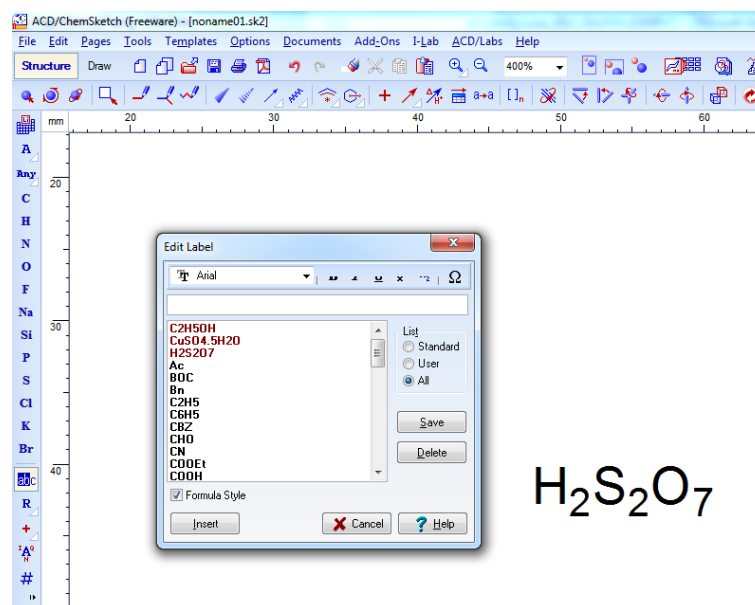
Obr. 4 ChemSketch, okno se šablonami



Obr. 5 ChemSketch, tvorba chemické struktury



Obr. 6 ChemSketch, 3D viewer



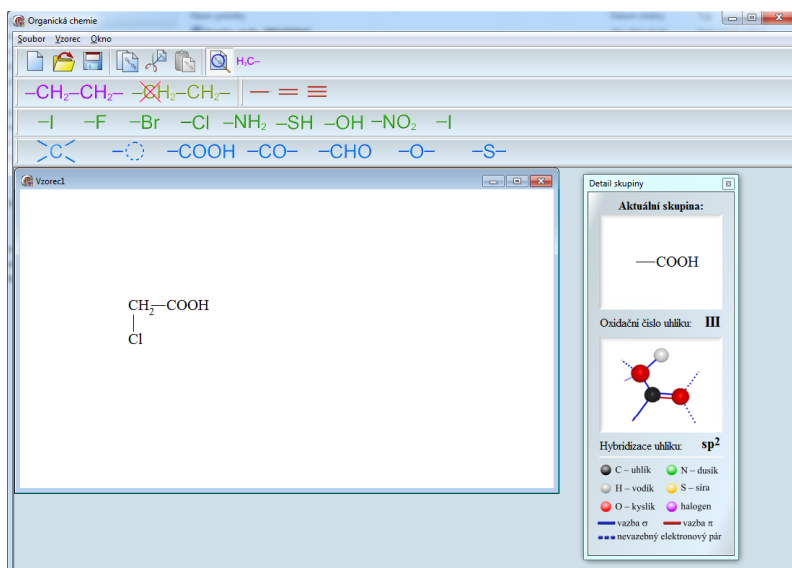
Obr. 7 ChemSketch, zápis anorganického vzorce (Edit Label)

3.1.3 Organická chemie

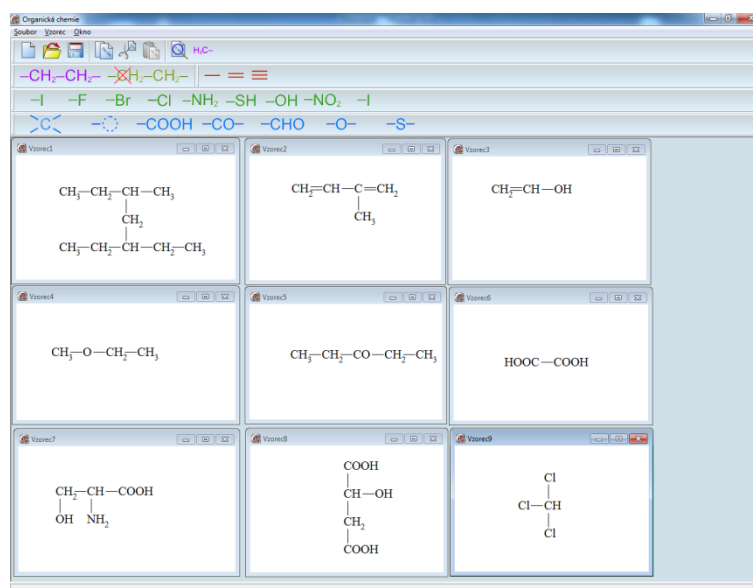
Program vznikl jako součást diplomové práce „Komponenty VCL pro vektorovou grafiku ve výuce chemie“. Na internetu byl publikován v srpnu 20012 (Katedra chemie a didaktiky chemie: UK - pedagogická fakulta. *Chemická informatika: Jednoduchá aplikace pro kreslení „školních“ vzorců* [online]. Praha [cit. 2012-09-02]. Dostupné z: <http://userweb.pedf.cuni.cz/wp/kch/vyuka/ke-stazeni/>). Další informace o něm se nacházejí jako součást textu diplomové práce (pro přístup je zapotřebí absolvovat jednoduchou registraci) v repozitáři Univerzity Karlovy v Praze (Adamec, 2006). Bohužel není dále vyvíjen. Autor tento editor věnoval mému pracovišti (www.vetkm.cz) k bezplatnému využití ve vyučovacím procesu v roce 2008. A čím mě tedy program oslovil? Způsobem zápisu vzorců se nejvíce blíží klasickému pojetí na základních a středních školách.

Program Organická chemie má jednoduché a velmi intuitivně ovládané pracovní prostředí. Slouží k zápisu vzorců základních chemických látek z oblasti organické chemie, které jsou necyklické. Tedy jedná se o alkany, alkeny, alkyny, alkadieny (rozvětvené, nerozvětvené) a dále obvyklé deriváty uhlovodíků (halogenderiváty, alkoholy, ethery, thioly, aldehydy, ketony, karboxylové kyseliny). Menu programu vybavené srozumitelnými ikonami je snadno použitelné, vlastní program po standardní instalaci v okně „Detail skupiny“ informuje uživatele o aktuální požadované skupině, v případě atomu uhlíku zobrazuje jeho hybridizaci včetně oxidačního čísla a přítomných chemických vazbách.

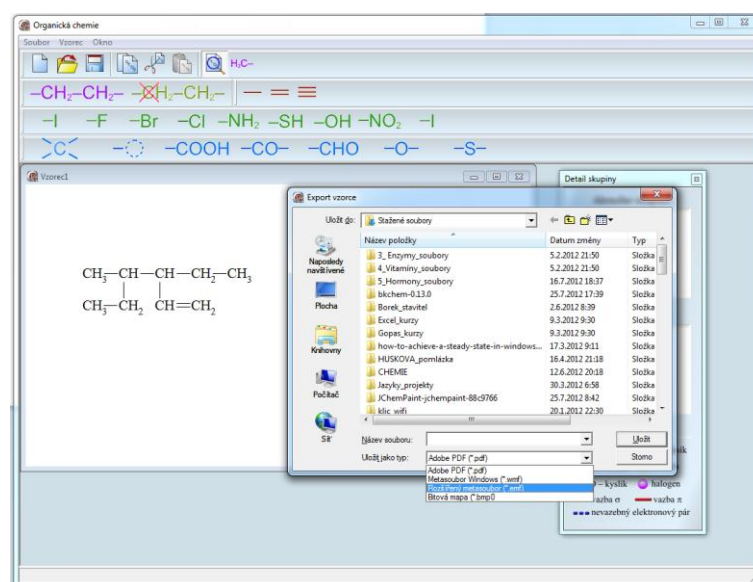
Výstupními formáty programu jsou obrazové soubory (*.bmp, *.wmf, *.emf) a dále *.pdf. Nativním formátem ukládaných souborů je *.fra (fractal graphic), který po opětovném načtení umožňuje jeho další editaci. Program Organická chemie umožňuje do jednoho souboru vytvořit jen jeden vzorec.



Obr. 8 Organická chemie, prostředí programu



Obr. 9 Organická chemie, tvorba vzorců



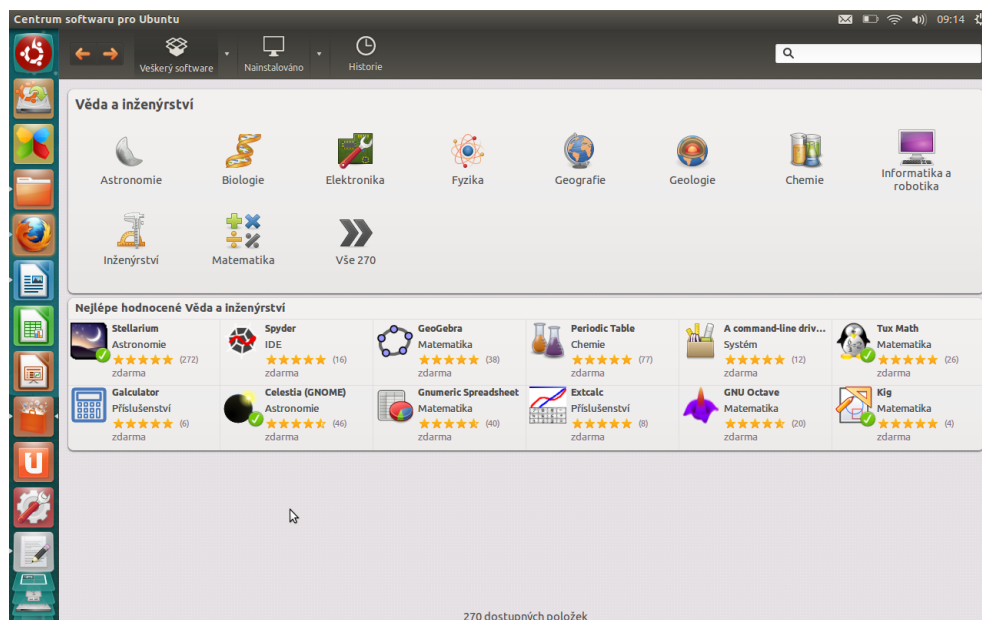
Obr. 10 Organická chemie, ukládání souboru

3.2 OS Linux

Za autora tohoto zajímavého operačního systému je považován Linus Thorvalds, který v roce 1991 uvolnil zdrojové kódy jeho jádra pod licencí GNU. Tento systém se setkal s velkou podporou počítačových nadšenců a dnes se na jeho vývoji podílí široká komunita.

Za zmínku stojí, že v dnešní době se setkáváme se dvěma oblastmi, ve kterých se desktopový OS Linux distribuuje a to bezplatná (Debian, Knoppix, Ubuntu, Fedora, Mandriva, OpenSuse) a placená (Red Hat Enterprise Linux, Novell Linux). Tento výčet není kompletní. Dále velkého uplatnění našel tento operační systém v oblasti serverů.

Pro demonstraci použitelných chemických editorů v tomto operačním systému jsem zvolil distribuci Edubuntu (Edubuntu.cz, 2012), která vychází z Ubuntu a je výrazným způsobem zaměřena na školství (Education). Obecně distribuce Ubuntu disponují bezproblémovou instalací, dobrou detekcí hardware, moderním vzhledem, se kterým bývá nadšena většina uživatelů.



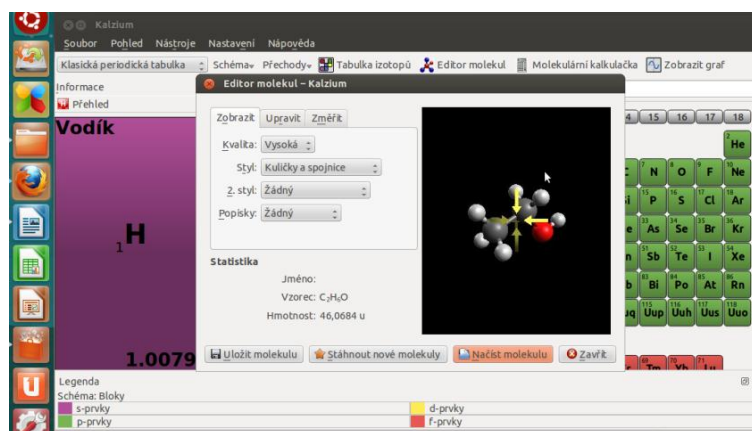
Obr. 11 Prostředí Edubuntu, volba vzdělávacích programů

3.2.1 Kalzium

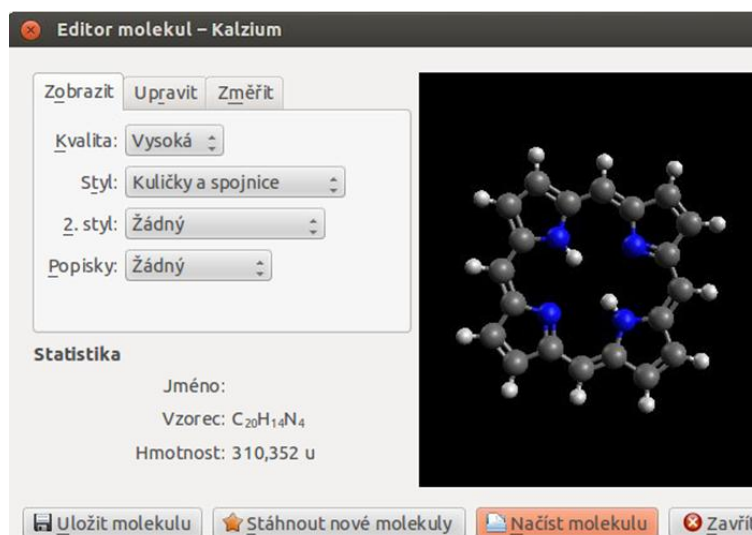
Hodně zajímavý program (Edu.kde.org), který je součástí projektu KDE-Edu. Má velmi dobře propracovanou periodickou tabulku s velkou škálou podrobných informací o jednotlivých chemických prvcích, kalkulačkou, která nabízí výpočet relativní molekulové hmotnosti molekul, nebo výpočet koncentrací roztoků, řešitelem chemických rovnic.

Ale pro potřebu mé práce umí jen tvorbu molekul a disponuje jejich editorem. Tento nabízí jejich částečnou editaci (styl zobrazení prvků a chemických

vazeb, rotaci). Součástí instalace je poměrně malý počet vytvořených molekul, tento je možno rozšířit dodatečným stažením ze stránek programu.



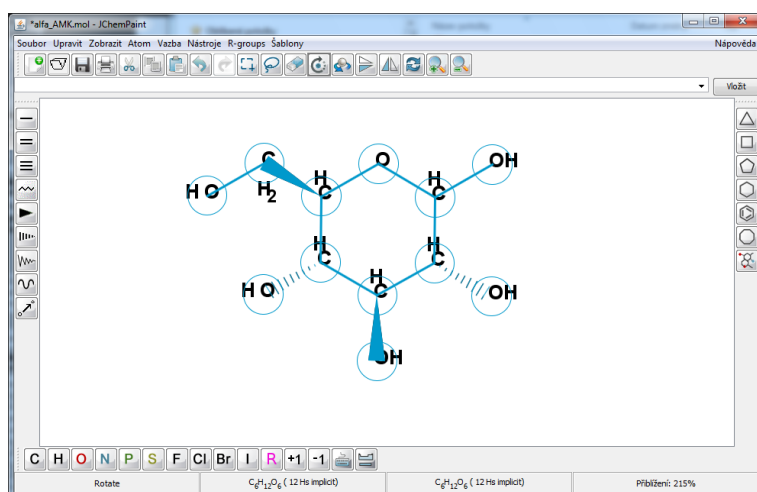
Obr. 12 Kalzium, prostředí programu, rotace molekuly



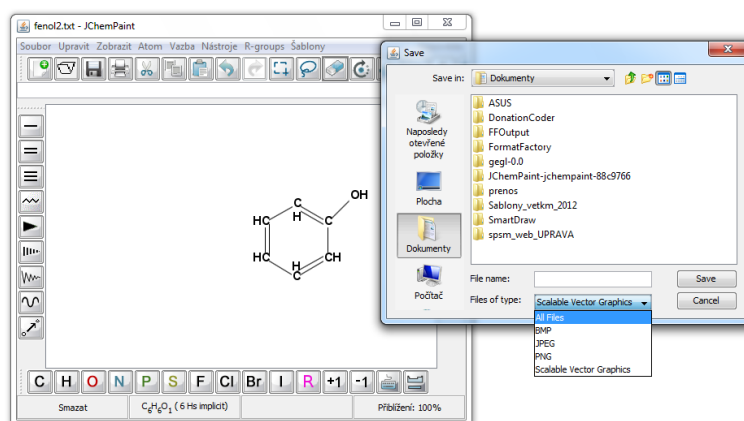
Obr. 13 Kalzium, editační možnosti

3.2.2 JChemPaint

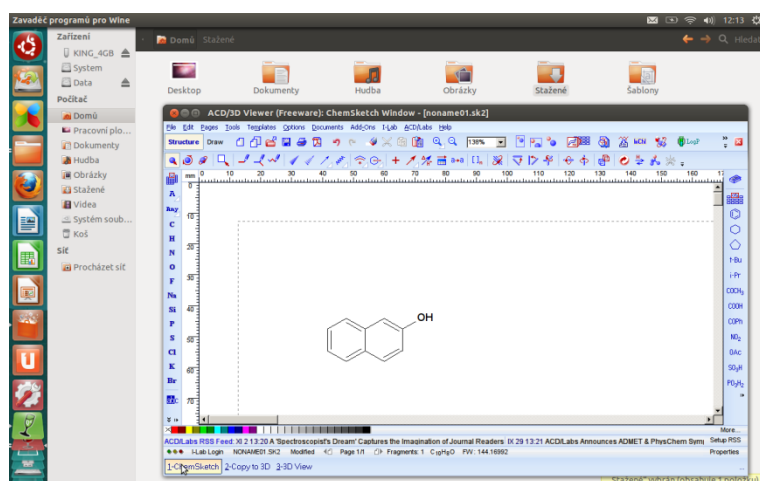
Na domovské stránce (Sourceforge.net) je k dispozici editor a prohlížeč chemických vzorců (především z organické chemie) ve 2D zobrazení. Tento program je opět multiplatformní a k provozu stačí běhové prostředí Java. Toto se týká OS Windows, Linux i dokonce MAC-OS. Výstupními formáty jsou buď obrazové soubory typu *.svg, *.bmp, *.png, *.jpeg nebo ve formátu *.cml (Chemical Markup Language) či Chemický identifikátor IUPAC. Ovládání programu je intuitivní a disponuje značnými editačními schopnostmi.



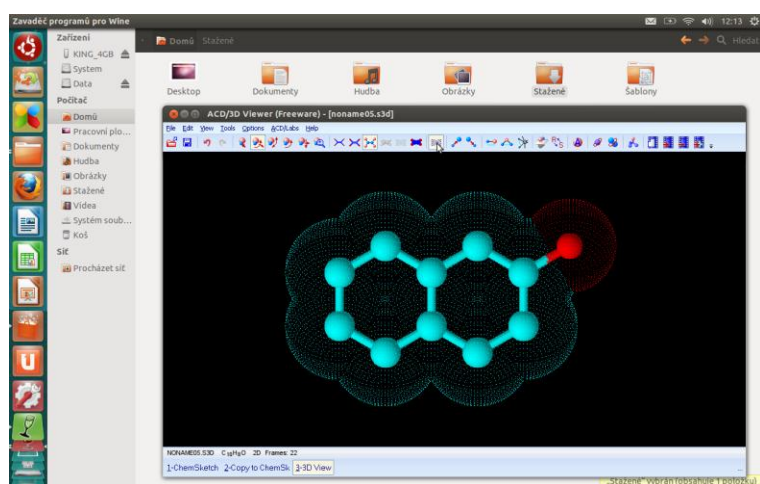
Obr. 14 Prostředí editoru JChemPaint



Obr. 15 Editor JChemPaint, ukládání souboru



Obr. 18 ChemSketch v Linuxu, tvorba chemické struktury



Obr. 19 ChemSketch v Linuxu, 3D viewer

4 Kancelářské aplikace

Pracovní prostředí v současnosti velmi rozšířeného kancelářského software MS Office a OpenOffice (LibreOffice) je velmi podobné. Z hlediska vlastního použití lze dosáhnout obdobných výsledků, jen je třeba si zvyknout na rozdílné uspořádání roletkového menu. Nutno podotknout, že převod dokumentů z jednoho balíku do druhého není zcela bez problému, určitě je zapotřebí překontrolovat jeho formátování. Lepších výsledků se dosahuje při použití posledních verzí. Oba kancelářské balíky disponují slovníky českého pravopisu, v OpenOffice tento není součástí instalace a je nutno jej doinstalovat.

Pro zápis anorganických vzorců a sumárních vzorců organické chemie v textové podobě je zapotřebí nastavit číselným hodnotám vlastnost správného indexu. Toto lze částečně zjednodušit použitím tzv. horkých kláves. Rozdílnosti pro zápis indexů uvádím v příložené tabulce.

Tab. 2 Horké klávesy pro dolní a horní index

Index	MS Office 2000	MS Office 2003-2010	OpenOffice LibreOffice
Dolní	CTRL + „=“	CTRL + „=“	CTRL + Shift + „b“
Horní	CTRL + „+“	CTRL + Shift + „=“	CTRL + Shift + „p“

V případě, že součástí vytvářeného textového dokumentu budou strukturní vzorce nebo modely molekul, je nutno tyto nejdříve vytvořit ve speciálním chemickém editoru.

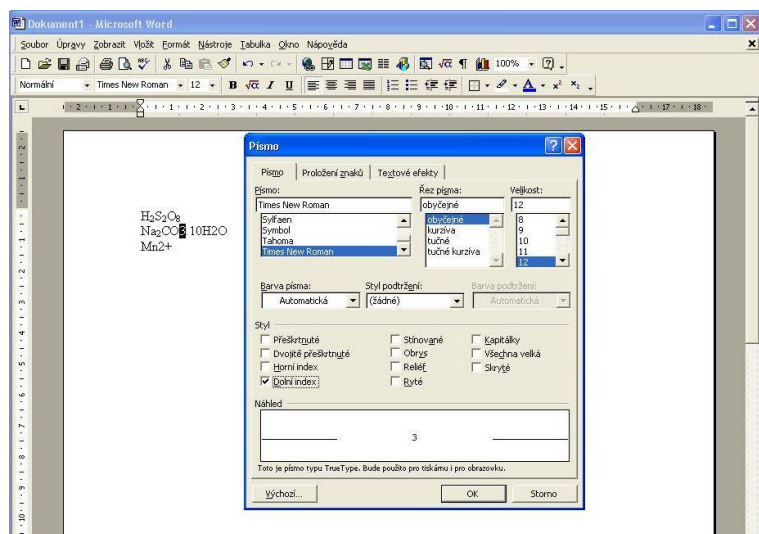
4.1 MS Office

Předchozí verze tohoto kancelářského balíku (MS Office 2000-2003) si poměrně dlouhou dobu udržovaly po vizuální stránce podobné pracovní prostředí. Toto doznalo značných změn s nástupem verze MS Office 2007 a vyšších, pro které je typický ribbon s pracovními kartami, které obsahují sady pracovních nástrojů. Jejich uspořádání se diametrálně liší od roletkového menu v předcházejících verzích.

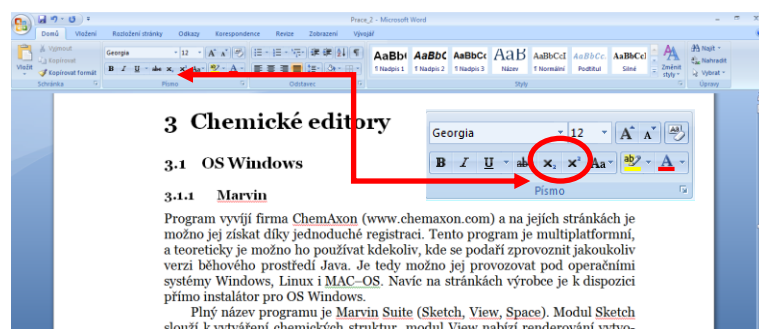
Tématem této práce je zápis chemických vzorců. Pro přímý zápis vzorců anorganických sloučenin a sumárních vzorců organických sloučenin je třeba naformátovat přítomné číselné hodnoty. Zde můžeme použít ikony pro horní a dolní index na kartě Domů (MS Office 2007 a vyšší), nebo roletkové menu *Formát* → *Písmo* → *horní (dolní) index* (MS Office 2000-2003). Další možností je rozšíření panelu nástrojů o tzv. vlastní panel a do něj ikony pro zápis indexů umístit.

V neposlední řadě stojí za úvahu myšlenka získat rozšíření, které by tuto činnost zautomatizovalo. Toto je vytvořeno jako makro v jazyce Visual Basic for Application (VBA), přesněji Visual Basic for Word a je součástí této práce. Jeho zdrojový text je obsažen v příloze a funkční varianta na příloženém CD-ROM

nebo jako příloha této závěrečné práce (příloha.zip) na is.mendelu.cz. Obě úložiště obsahují soubor Chemical_formula_H2SO4.doc.



Obr. 20 Prostředí MS Office 2000, práce s indexy



Obr. 21 Pracovní prostředí MS Office 2007

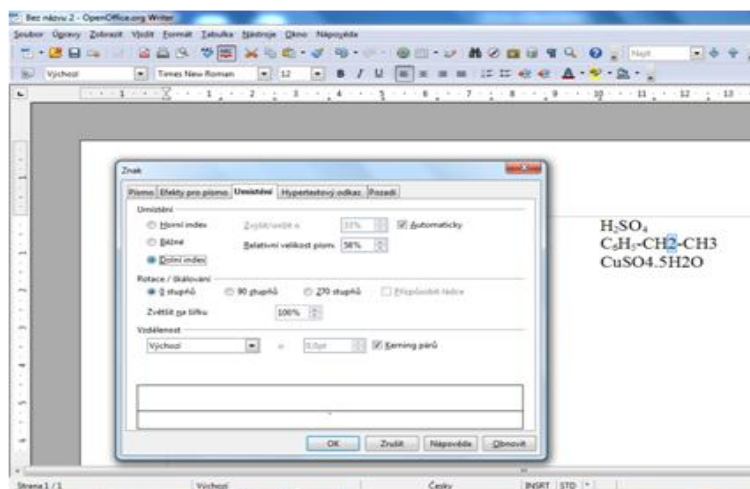
4.2 OpenOffice, LibreOffice

Rozdíl mezi OpenOffice (www.openoffice.cz) a LibreOffice (cs.libreoffice.org) je jen nepatrný. V současné době se zdá, že projekt LibreOffice se vyvíjí dynamičtěji a má silnější podporu. Velkou výhodou tohoto kancelářského balíku je, že se řadí mezi freeware. Dlouhodobě je součástí instalace Linuxu, pro který byl původně vytvořen. Později byl portován pro OS Windows. Z důvodu autorských práv je zapotřebí slovník pro kontrolu českého pravopisu doinstalovat manuálně. Od verze 3.4 je k dispozici kompletní instalace tohoto kancelářského balíku včetně slovníku.

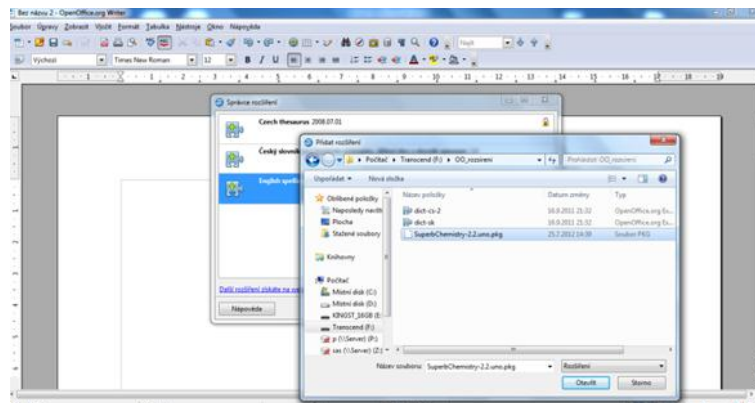
Pro formátování textu do tvaru horního a dolního indexu slouží horké klávesy (viz tabulka v předchozí kapitole), nebo lze použít roletkového menu *Formát* → *Znak* → *Umístění*.

Dále je k dispozici rozšíření SuperbChemistry, které se do pracovního prostředí přidá pomocí dialogu *Nástroje* → *Správce rozšíření*. Po instalaci je toto

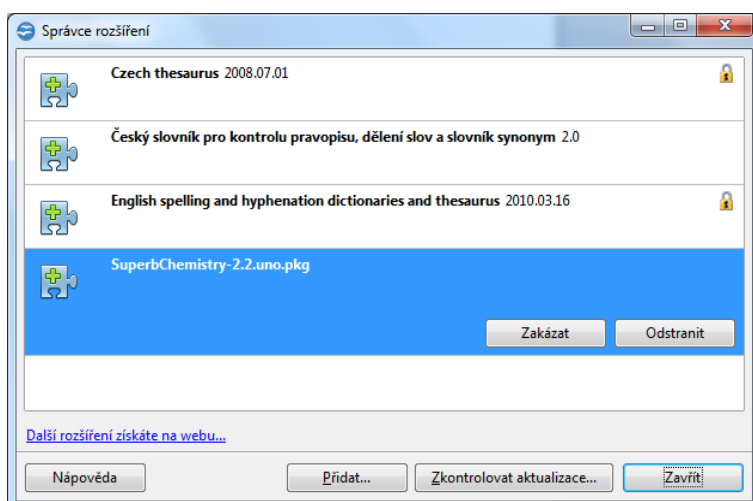
makro k dispozici v sekci *Nástroje* → *Makra* → *Spustit* → *Moje makra* → *SuperbChemistry* → *Main* → *FormatDocument*. Jedná se o velmi zdařilý produkt, aktuální dokument zpracovává kompletně jako celek a při práci je velmi rychlý. Je napsán v jazyku OpenOffice.org Basic. Náhled do zdrojového textu naznačuje, že tento jazyk má k dispozici velmi výkonné funkce. Princip práce makra SuperbChemistry je založen na tom, příslušné pasáže si označí svými specifickými symboly a na závěr provede hromadnou záměnu, která zajistí správné naformátování. Kromě jiného provádí náhradu typograficky chybně zapsaného záporného znaménka náboje aniontu (obvykle „mínus“ na numerické klávesnici). Předpokládám, že makro bylo vytvořeno na základě velmi kvalitní analýzy a ke své práci nevyžaduje žádných doplňujících dotazů.



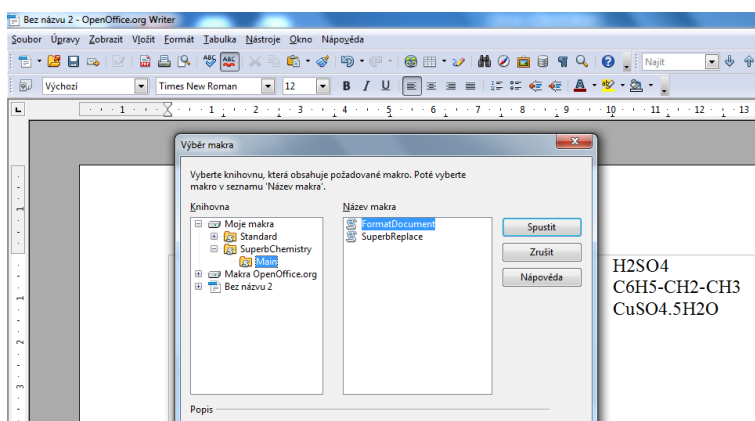
Obr. 22 OpenOffice, pracovní prostředí, práce s indexy



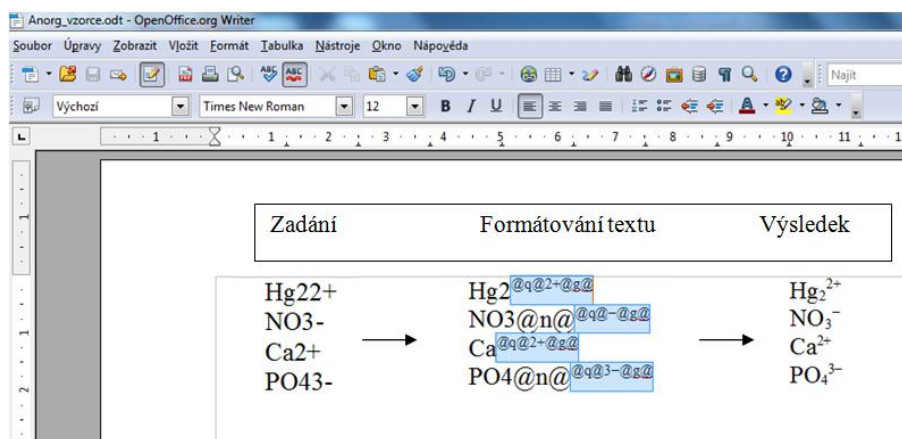
Obr. 23 OpenOffice, instalace rozšíření SuperbChemistry



Obr. 24 OpenOffice, Správce rozšíření



Obr. 25 OpenOffice, spouštění makra SuperbChemistry



Obr. 26 OpenOffice, ukázka práce makra SuperbChemistry

5 Rozšíření MS Word

5.1 Visual Basic

Autorem Visual Basicu je firma Microsoft. Jedná se o událostmi řízený programovací jazyk, který je odvozen od programovacího jazyka BASIC. Umožňuje rychlý vývoj aplikací s grafickým uživatelským rozhraním, přístup k databázím, práci se vzdálenými objekty nebo objekty ActiveX. Skriptovací jazyky, jako jsou VBScript a VBA, jsou syntakticky podobné Visual Basicu, ale výkonem rozdílné.

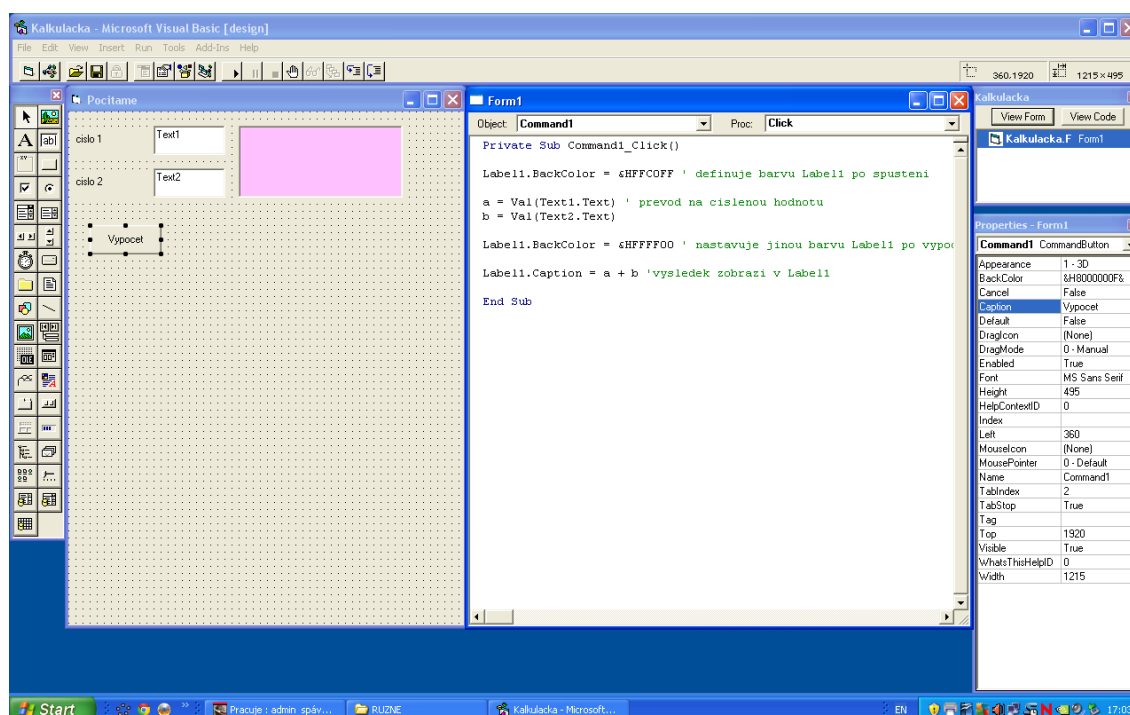
Programátor může napsat aplikaci, která bude používat komponenty poskytované Visual Basicem. Program napsaný ve Visual Basicu může tedy používat Windows API. Poslední vydaná byla verze 6 v roce 1998. Podpora Microsoftu skončila v březnu roku 2008 a následníkem byly Visual Studio Express a Visual Basic.NET.

Obdobně jako programovací jazyk BASIC byl navržen i Visual Basic tak, aby bylo jednoduché se ho naučit a používat (Halvorson, 1996). Jazyk je vhodný nejen pro programátory, kteří vytvářejí jednoduché GUI aplikace, ale umožňuje vytvářet i komplexní aplikace. Základem programování je práce na formuláři (form) se současným aranžováním ovládacích prvků (controls). Upřesněním vlastností a akcí u těchto prvků za současné možnosti zápisu doprovodných řádek kódu se přidávají další funkce. Toto způsobuje rozšíření možností výsledné aplikace. Programátor měl usnadněnou práci tím, že řada vlastností a akcí ovládacích prvků má předdefinované výchozí hodnoty. Ze začátku nebyl Visual Basic kladně hodnocen z hlediska výkonu, ale s příchodem rychlejších počítačů a kompilací do nativního kódu tyto problémy pominuly.

Vytvořené spustitelné aplikace vyžadují pro svůj běh přítomnost run-time knihoven. Tyto knihovny jsou implementovány ve Windows od verze 2000. Ve starších verzích tohoto systému musely být součástí dodávky vytvořené aplikace.

Vývojové prostředí obsahuje panel s ovládacími prvky (toolbox), které se přenášejí technikou drag-and-drop na formulář. Ovládací prvky mají přiřazeny celou řadu vlastností (atributů). Výchozí hodnoty jsou poskytovány ve chvíli, kdy je ovládací prvek vytvořen, ale jeho hodnoty, můžou být změněny i programátorem. Mnoho hodnot atributů může být modifikováno i za běhu programu na základě akcí vyvolaných uživatelem nebo změně prostředí, vyvolaných dynamickou aplikací. Například můžeme zapsat kód pro změnu velikosti formuláře, aby ovládací prvek zůstal ve formuláři vycentrovaný nebo můžeme zajistit převod informace z textového pole (textbox) na číselnou hodnotu.

Visual Basic může vytvářet spustitelné soubory EXE, ovládací prvky ActiveX, nebo dynamické knihovny (*.dll), ale primárně je používán k vývoji aplikací spouštěných v OS Windows (cs.wikipedia.org).



Obr. 27 Vývojové prostředí Visual Basicu

5.2 Visual Basic for Applications

Jazyk VBA je zkratka slov Visual Basic for Application. Jedná se objektově orientovaný interpretovaný programovací jazyk vytvořený společností Microsoft pro použití v rámci aplikací. Aplikacemi nejsou jen aplikace v rámci MS Office (Word, Excel, PowerPoint, Access a Outlook) ale i jiné aplikace spustitelné v prostředí OS Windows, například Microsoft Visio, AutoCAD a další. Jeho základem je jazyk Visual Basic, který je založen na jazyce BASIC (Nejedlová, Nahrávání makra).

Jazyk Visual Basic for Applications se skládá ze základních objektů a příkazů jazyka Visual Basic a objektů a příkazů specifických pro aplikace MS Office. VBA vždy pracuje s hostitelskou aplikací (například Word nebo Excel), což znamená, že hostitelská aplikace musí být vždy otevřena, když pracuje kód VBA.

V jazyce VBA se píše 2 základní typy programů. Jedná se o procedury (Sub Procedures začínající slovem Sub.) nebo funkce (User-Defined Functions začínající slovem Function.). Typickým použitím sub procedury je vykonání nějaké akce. Obvyklým použitím funkce je výpočet hodnoty a její předání do proměnné.

Jazyk VBA implicitně nevyžaduje deklarování proměnné před tím, než je použita. Proměnné je možné deklarovat kdekoli v kódu, ale je dobrým zvykem deklarovat je na začátku programu. Při deklarování proměnných je možné deklarovat pouze jméno proměnné a potom je tato proměnná typu Variant, což je univerzální datový typ. Výhodou je, že se dá rychle napsat program. Nevýhodou

je, že můžeme způsobit situace, při kterých vznikají špatně odhalitelné chyby. Toto nastane v okamžiku, kdy do jedné proměnné v průběhu chodu makra uložíme hodnoty různých datových typů (např. Integer a String). U větších projektů je lepší nastavit vývojové prostředí tak, aby vyžadovalo proměnné před jejich použitím deklarovat. Na začátek modulu se napíše „Option Explicit“.

```
Option Explicit

Public i As Integer
Public kolik As Integer

Sub Chemicke_vzorice()
'
' Chemicke_vzorice Makro
'
Dim pocet As Integer
Dim delka As Integer
```

Obr. 28 Deklarační část makra

Deklarování jména spolu s datovým typem proměnné je lepší než neúplná nebo žádná deklarace, protože při psaní kódu bude fungovat automatické dokončování (když je datovým typem objekt), při ladění kódu se bude kontrolovat, zda se do proměnné přiřazují hodnoty očekávaného typu a interpret VBA nemusí určovat typ proměnné za běhu programu a proto program bude běžet trochu rychleji.

Základními řídicími strukturami algoritmů jsou rozhodování (*If* → *Then* → *Else*) a cyklus (*For* *kolik* ≤ *max* → *příkazy* → *next* *kolik*). Pro lepší čitelnost zdrojového kódu se doporučuje používat odsazování řádků. Zde je dobré nechat se inspirovat příklady, které se nacházejí v nápovědě programu.

Dalším dobrou zvyklostí je používání komentářů. Tyto slouží k popisu programového kódu. Komentáře se interpretem VBA nevykonávají, začínají znakem apostrof. Pokud je komentář rozsáhlý na více řádcích, znak apostrof musí být na začátku každého řádku.

```
If kolik > 1 Then
For i = 2 To Selection.Characters.Count 'vsechny znaky v dokumentu
    If Selection.Characters(i) Like "[s,l,g,a,.]" Then ' test na vyskyt (s), (l), (g) (aq) skupen.stavu a tecky v hydrate
        If Selection.Characters(i - 1) Like "(" Then ' leva (
            If Selection.Characters(i + 1) Like ")" Then ' prava ) -> platí pro (s), (l), (g)
                Selection.Characters(i).Font.Subscript = wdToggle
                Selection.Characters(i - 1).Font.Subscript = wdToggle
                Selection.Characters(i + 1).Font.Subscript = wdToggle
                i = i + 1
            ElseIf Selection.Characters(i + 1) Like "q" And Selection.Characters(i + 2) Like ")" Then ' platí pro (aq)
                Selection.Characters(i).Font.Subscript = wdToggle
                Selection.Characters(i - 1).Font.Subscript = wdToggle
                Selection.Characters(i + 1).Font.Subscript = wdToggle
                Selection.Characters(i + 2).Font.Subscript = wdToggle
                i = i + 2
            End If
        ElseIf Selection.Characters(i) Like "." Then ' konec leva ( -> a zacatek tecka
            Selection.Characters(i).Font.Superscript = wdToggle
        End If ' konec .
```

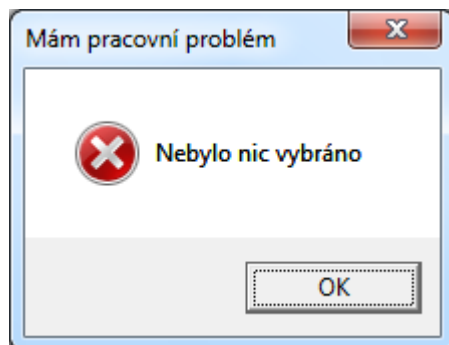
Obr. 29 Tvorba makra, využití funkce IF

Při tvorbě programu (makra) se velmi často využívají vestavěné procedury jazyka VBA. Autor programu definuje (nastavuje) hodnoty argumentů, přičemž některé jsou povinné a jiné nepovinné (obvykle uvozeny hranatými závorkami). Jako příklad byla vybrána funkce MsgBox.

```
MsgBox(Prompt, [Buttons As VbMsgBoxStyle = vbOKOnly], [Title], [HelpFile], [Context]) As VbMsgBoxResult
```

Obr. 30 Nápopěda k funkci MsgBox

MsgBox "Nebylo nic vybráno", vbOKOnly + vbCritical, "Mám pracovní problém"



Obr. 31 Praktické použití k funkce MsgBox

5.3 Popis rozšíření pro MS Word

Toto rozšíření bylo vytvořeno jako makro pod názvem „Chemicke_vzorce“. Tvoří součást souboru „Chemistry_Formula_H2SO4.docx“. Nápopěda k práci s tímto rozšířením je zpřístupněna použitím tlačítka HELP. Dialog k tomuto makru byl vytvořen v češtině (CZ) a angličtině (EN). Tato varianta rozšíření je použitelná ve verzi MS Office 2007 a vyšší.

Po otevření souboru je třeba povolit práci s makry, forma dialogu je závislá na verzi používaného kancelářského balíku.

V situaci, kdy je tato podmínka splněna, začíná makro pracovat. Vyhodnocování zapsaného textu probíhá v těchto krocích:

- Je spočítán počet znaků ve výběru.
- Je stanoven počet slov ve výběru.
- Testuje se, zda byla zvolena vhodná oblast ke zpracování. Minimální počet vybraných znaků je 2 (při menší hodnotě nemá smysl, aby makro vykonávalo jakoukoliv činnost).
- V případě, že toto nebylo splněno, je uživatel o této situaci informován pomocí dialogového okna a makro je ukončeno. V opačné situaci činnost makra pokračuje.
- Obsah výběru je přenesen do pracovního pole Slova, přičemž pozice klávesy „tabelátor“ a klávesy „enter“ jsou zaznamenány v pomocných pracovních

polí ProEnter a ProTabelator. Tyto klávesy jsou před uložením do pole Slova nahrazeny oddělovacím znakem „mezera“.

- Dále se pracuje s polem Slova. Zde se vyhodnocují jednotlivé položky tzn. vzorce, kterými se prochází znak po znaku.
- Je testována existence symbolů pro skupenské stavy [„(g)“, „(l)“, „(s)“, „(aq)“] v rámci jednoho slova.
- Je testována existence znaku „.“ (tečka) pro zápis hydrátů solí příslušných kyselin.
- Je testována existence znaků [„+“ a „-“] na konci slova. V případě, že před tímto znakem se vyskytuje číslice, je vyvolán dialog, zda tato číslice představuje hodnotu náboje příslušného iontu. Jinak je nastaven odpovídající index.
- Je testována existence zástupného znaku „_“ (podtržítka) pro zápis jednoduché chemické vazby ve vzorcích organických sloučenin.
- Je testována existence zástupného znaku „>“ (větší než včetně mezer) pro zápis šipky v chemických rovnicích.
- Je testována existence číslice a podle vyhodnocení je nastaven index, jinak je hodnota ponechána beze změny.
- Na závěr díky spolupráci s pomocnými poli ProEnter a ProTabelator je naformátovaný text vrácen do původního dokumentu na původní pozici.
- Základní pracovní pokyny se nalézají v záhlaví dokumentu.
- Pro snazší použití tohoto rozšíření v MS Office 2007 a novější verzích bylo vytvořeno prostředí ovládané tlačítky, které díky zvolené jazykové mutaci komunikuje s uživatelem ve zvoleném jazyce (CZ a EN). Nápovědu se zobrazí použitím tlačítka HELP.
- Pro využití tohoto rozšíření v předchozích verzích MS Office (2000-2003) příkládám soubory „Chemistry_Formula_H2SO4_Old_xx.Doc“. Zástupný znak „xx“ se mění v závislosti na jazykové variantě dokumentu (CZ nebo EN). Prostředí není vybaveno pracovními tlačítky, makro se spouští vyvoláním dialogu existujících maker v tomto dokumentu, např. ALT + F8.

Zdrojový text tohoto rozšíření je obsažen v příloze a funkční varianty na přiloženém CD-ROM nebo jako příloha této závěrečné práce (přiloha.zip) na is.mendelu.cz.

6 Závěr

Cílem závěrečné práce byla snaha představit několik vhodných programů, které mohou být použity ke tvorbě materiálů využívaných ve výuce chemie. V úvodní části se zabývám problematikou související s tvorbou materiálů pro tento obor.

V praktické části seznamuji čtenáře s několika použitelnými programy, které slouží ke tvorbě vzorců chemických látek a jsou použitelné v operačních systémech Windows nebo Linux.

Na závěr příkládám rozšíření aplikace MS Word, které překonvertuje chemické vzorce z oblasti anorganické chemie a sumární vzorce z organické chemie zapisované bez použití indexů do tvaru odpovídajícím současným požadavkům. Toto bylo vytvořeno za použití znalostí programování maker v oblasti VBA (Visual Basic for Application), konkrétně Visual Basic for Word.

6.1 A na konec

V případě, že naleznete nějakou chybu a přivítali byste, aby vytvořené makro obsahovalo nějaké další úpravy, pošlete zprávu na moji elektronickou adresu lovas@seznam.cz. Pokud bude v mých silách Vám vyhovět, rád tomu tak učiním.

Aktualizovaná verze tohoto makra se nachází na níže uvedené adrese ve složce chemistry. (LOVAS, Pavel. Chemistry_Formula_H2SO4: Macro for MS Word [online]. 2012 [cit. 2012-09-02]. složka chemistry. Dostupné z: <http://lovas.sweb.cz>).

7 Literatura

- BÍLEK, Martin. *ICT ve výuce chemie*. Hradec Králové: Gaudeamus, 2005. ISBN 80-7041-631-9.
- OPENOFFICE.ORG. *OpenOffice* [online]. [cit. 2012-07-31]. Dostupné z: www.openoffice.cz
- JULÁKOVÁ, Eva. *Jak řešit problémy při psaní odborných textů* [online]. [cit. 2012-07-25]. Dostupné z: <http://www.vscht.cz/anl/paci/PAC/prezentace/Navod.pdf>
- CONNELLY, Neil G. *Nomenclature of Inorganic Chemistry: IUPAC Recommendations*. 2005. vyd. ISBN 0-85404-438-8.
- WWW.ADOBE.COM. *Adobe Creative Suite 6* [online]. [cit. 2012-07-31]. Dostupné z: <http://www.adobe.com/>
- WWW.COREL.COM. *CorelDRAW Graphics Suite X6* [online]. [cit. 2012-07-31]. Dostupné z: <http://www.corel.com/corel/product/index.jsp?pid=prod4260069>
- WWW.GIMP.ORG. *Gimp: GNU Manipulation Program* [online]. [cit. 2012-07-31]. verze 2.8.0. Dostupné z: <http://www.gimp.org/downloads/>
- WWW.GETPAINT.NET. *Paint.NET* [online]. [cit. 2012-07-31]. verze 3.5.10. Dostupné z: <http://www.getpaint.net/download.html#download>
- WWW.PHOTOFILTRE.COM. *Photofiltre* [online]. free version. [cit. 2012-07-31]. verze 6.5.3. Dostupné z: <http://photofiltre.free.fr/>
- INKSCAPE.ORG. *Inkscape* [online]. [cit. 2012-07-31]. verze 0.48.2. Dostupné z: <http://inkscape.org/download/?lang=cs>
- WWW.CHEMAXON.COM. *Marvin* [online]. [cit. 2012-07-31]. version 5.10.2. Dostupné z: <https://www.chemaxon.com/download/marvin/for-end-users/>
- WWW.ACDLABS.COM. *ADC/ChemSketch (Freeware)* [online]. [cit. 2012-07-31]. Version 12. Dostupné z: <http://www.acdlabs.com/resources/freeware/index.php>
- DRAŠAR, Pavel. *ACD/ChemSketch: Kreslení chemických struktur a grafiky* [online]. Praha, 2007 [cit. 2012-07-31]. pro verzi 10. Dostupné z: <http://www.acdlabs.com/resources/freeware/index.php>
- ADAMEC, Martin. *Komponenty VCL pro vektorovou grafiku ve výuce chemie: editor Organická chemie* [online]. repozitář Karlovy University Praha. 2006 [cit. 2012-07-31]. Dostupné z: http://digitool.is.cuni.cz/R/?func=dbin-jump-full&object_id=105732&silo_library=GEN01
- WWW.VETKM.CZ. *Tauferova SOŠ veterinární Kroměříž: oficiální stránky školy* [online]. [cit. 2012-07-31]. Dostupné z: <http://www.vetkm.cz>
- EDUBUNTU.CZ. [online]. 2012 [cit. 2012-07-26]. Dostupné z: <http://www.edubuntu.cz/>

- EDU.KDE.ORG. *Kalzium* [online]. [cit. 2012-07-26]. Dostupné z:
<http://edu.kde.org/kalzium/>
- SOURCEFORGE.NET. *JChemPaint* [online]. [cit. 2012-07-26]. Dostupné z:
<http://sourceforge.net/apps/mediawiki/cdk/index.php?title=JChemPaint>
- WWW.OPENOFFICE.CZ [online]. [cit. 2012-07-31]. verze 3.4. Dostupné z:
<http://www.openoffice.cz/stahnout>
- CS.LIBREOFFICE.ORG [online]. [cit. 2012-07-31]. verze 3.5.5. Dostupné z:
<http://cs.libreoffice.org/download/>
- HALVORSON, Michael. *Microsoft Visual Basic 4 pro Windows 95*. 1. vyd. Praha: PLUS Publishing, 1996, 372 s. ISBN 80-852-9776-0.
- CS.WIKIPEDIA.ORG [online]. [cit. 2012-07-31]. Dostupné z:
http://cs.wikipedia.org/wiki/Visual_Basic
- NEJEDLOVÁ, Dana. *MS Office 2007 VBA: Nahrávání makra* [online]. [cit. 2012-07-31]. Dostupné z:
<http://multiedu.tul.cz/~dana.nejedlova/Informatika/Office2007VBA.html>

Přílohy

A Makro Chemicke_vzorce

Na následujících stránkách přikládám zdrojový text vyhotoveného rozšíření pro MS Word. Název souboru je Chemical_Formula_H2SO4.docx. Rozšíření umí upravit vzorce molekul a iontů, chemické rovnice a hydráty solí včetně vyznačení skupenských stavů reagujících látek. Po otevření souboru je zapotřebí povolit změnu obsahu. Vlastní spuštění se realizuje pomocí dialogu: *Zobrazení* → *Makra* → *Zobrazit makra*. Zde zvolte „Chemicke_vzorce“ (nebo rychlejší varianta ALT+F8).

```
Option Explicit

Public i As Integer, j As Integer
Public kolik As Integer
Public Slova As Variant
Public JedenZnak As String
Public ProEnter(), ProTabelator()
Public ent As Long, tabl As Long

Public Sub Chemicke_vzorce()
'
' Chemicke_vzorce Makro
'
Dim pocet As Integer
Dim delka As Integer
Dim CeklovyPocet As Long

CeklovyPocet = 0

kolik = Selection.Characters.Count + 1

If kolik > 0 Then

Call NactiJednotlivuSlovaVyberu

Selection.TypeText Text:=" "
Selection.MoveLeft unit:=wdCharacter, Count:=1 'stoupne si na pocatek mezerou prepsaneho vyberu

ent = 1
tabl = 1

For i = 0 To UBound(Slova) 'slova ve vyberu
    For j = 1 To Len(Slova(i))
        JedenZnak = Mid(Slova(i), j, 1) 'nacteni jednoho znaku retezce
        If j > 1 And JedenZnak Like "(" Then
            If Mid(Slova(i), j + 1, 1) Like "[s,l,g,a,.]" Then 'srovnani nasledujiciho znaku retezce
                Do Until Mid(Slova(i), j, 1) = ")" 'vlozeni retezce ohraniceneho zavorkou
                    JedenZnak = Mid(Slova(i), j, 1)
                    Selection.Font.Subscript = 1 'dolni index
                    Selection.TypeText Text:=JedenZnak
                    Selection.Font.Subscript = 0
                    j = j + 1
                Loop

                If Mid(Slova(i), j, 1) = ")" Then 'dokonceni vlozeni retezce ")"
                    JedenZnak = Mid(Slova(i), j, 1)
                    Selection.Font.Subscript = 1 'dolni index
                    Selection.TypeText Text:=JedenZnak
                    Selection.Font.Subscript = 0
                End If
            Else

```

Obr. 32 Zdrojový text makra Chemicke_vzorce část 1

```

        Selection.TypeText Text:=JedenZnak 'vlozi znak bezezmeny
    End If
    ElseIf JedenZnak Like "[+,-]" Then 'v pripade, ze je soucasti retezce posouva do h.indexu a dale resi jak
    If Len(Slova(i)) > 1 Then
        Selection.Font.Superscript = 1 'horni index
        Selection.TypeText Text:=JedenZnak
        Selection.Font.Superscript = 0
    Else
        Selection.TypeText Text:=" " 'vlozi znak bezezmeny a pred a za mezeru
        Selection.TypeText Text:=JedenZnak
        Selection.TypeText Text:=" "
    End If
    ElseIf JedenZnak Like "[_]" Then
        Selection.TypeText Text:=" " 'vlozi znak pomlcka a pred a za mezeru
        Selection.InsertSymbol Font:="Calibri", CharacterNumber:=8211, Unicode:=True 'vlozi pomlcku
        Selection.TypeText Text:=" "
    ElseIf JedenZnak Like "[.]" Then
        Selection.Font.Superscript = 1 'horni index
        Selection.TypeText Text:=JedenZnak
        Selection.Font.Superscript = 0
    ElseIf JedenZnak Like "[>]" Then
        Selection.TypeText Text:=" " 'vlozi znak sipka a pred a za mezeru
        Selection.InsertSymbol Font:="Calibri", CharacterNumber:=8594, Unicode:=True 'vlozi sipku
        Selection.TypeText Text:=" "
    ElseIf JedenZnak Like "#" Then
        If Len(Slova(i)) > 1 Then
            If j > 1 Then
                If Not Mid(Slova(i), j - 1, 1) Like " " And Not Mid(Slova(i), j - 1, 1) Like vbCrLf And Not M
                If j > 3 Then
                    If Not Mid(Slova(i), j - 2, 1) Like " " And Not Mid(Slova(i), j - 3, 1) Like "+" And
                    Call Numero
                Else
                    Selection.TypeText Text:=JedenZnak 'vlozi znak bezezmeny
                End If
            ElseIf j > 2 Then
                If Not Mid(Slova(i), j - 2, 1) Like " " And Not Mid(Slova(i), j - 2, 1) Like "." And
                Call Numero
            Else
                Selection.TypeText Text:=JedenZnak 'vlozi znak bezezmeny
            End If
        Else
            If Not Mid(Slova(i), j - 1, 1) Like "#" Then
                Call Numero
            Else
                Selection.TypeText Text:=JedenZnak 'vlozi znak bezezmeny
            End If
        End If
    Else
        Selection.TypeText Text:=JedenZnak 'vlozi znak bezezmeny
    End If
Else
    Selection.TypeText Text:=JedenZnak 'vlozi znak bezezmeny

```

Obr. 33 Zdrojový text makra Chemicke_vzorce část 2

```

        End If
    Else
        Selection.TypeText Text:=JedenZnak 'vlozi znak bezezmeny
    End If
    Else
        Selection.TypeText Text:=JedenZnak 'vlozi znak bezezmeny
    End If
Next j

CeklovyPocet = CeklovyPocet + j
If ent <= UBound(ProEnter) Or tabl <= UBound(ProTabelator) Then
    If CeklovyPocet = ProTabelator(tabl) And CeklovyPocet <= kolik Then
        Selection.TypeText Text:=vbTab 'vlozi tabelator na puvodni misto za dokoncene slovo
        If tabl < UBound(ProTabelator) Then
            tabl = tabl + 1
        End If
    ElseIf CeklovyPocet = ProEnter(ent) And CeklovyPocet <= kolik Then
        If Len(Slova(i)) > 0 Then
            Selection.TypeParagraph 'vlozi enter na puvodni misto za dokoncene slovo
            If ent < UBound(ProEnter) Then
                ent = ent + 1
            End If
        End If
    End If
End If
Else
    Selection.TypeText Text:=" " 'vlozi mezeru za dokoncene slovo
End If

Next i

If Selection.Characters.Last = " " Then 'maze pridanou mezeru
    Selection.Delete
End If

If Selection.Characters.First = vbCr Then 'maze pridany enter
    Selection.MoveLeft unit:=wdCharacter, Count:=1
    Selection.Delete
End If

Selection.Font.Subscript = 0 'vraci d.index do normalu
Selection.Font.Superscript = 0 'vraci h.index do normalu

End If

End Sub

```

Obr. 34 Zdrojový text makra Chemicke_vzorci část 3


```
Public Sub Numero()  
Dim response As String  
  
If Mid(Slova(i), j + 1, 1) Like "[+,-]" Then  
  
    response = MsgBox(Slova(i) + vbCrLf + "Je CISLO " + JedenZnak + " hodnotou naboje?", vbYesNo)   
  
    If response = vbYes Then      ' Uzivatelska odpoved Yes.  
  
        Selection.Font.Superscript = 1 ' cislo = h.index  
        Selection.TypeText Text:=JedenZnak  
        Selection.Font.Superscript = 0  
        j = j + 1  
        JedenZnak = Mid(Slova(i), j, 1)  
        Selection.Font.Superscript = 1 ' +/- = h.index  
        Selection.TypeText Text:=JedenZnak  
        Selection.Font.Superscript = 0  
  
    Else      ' Uzivatelska odpoved No.  
  
        Selection.Font.Subscript = 1 ' cislo = dol.index  
        Selection.TypeText Text:=JedenZnak  
        Selection.Font.Subscript = 0  
        j = j + 1  
        JedenZnak = Mid(Slova(i), j, 1)  
        Selection.Font.Superscript = 1 ' +/- = h.index  
        Selection.TypeText Text:=JedenZnak  
        Selection.Font.Superscript = 0  
    End If  
Else  
    Selection.Font.Subscript = 1 ' naboje 1+/1-  
    Selection.TypeText Text:=JedenZnak  
    Selection.Font.Subscript = 0  
End If  
  
End Sub
```

Obr. 35 Zdrojový text makra Chemicke_vzorce část 4

```

Sub NactiJednotlivuSlovaVyberu()
    Dim VybranyText As String
    Dim PoleVyberu() As String
    Dim m As Long
    Dim DelkaRetezce As Long
    Dim Znak As String
    Dim ZnakENT As String
    Dim ZnakTAB As String
    Dim Zamen

    Znak = " "
    ZnakENT = vbCr
    ZnakTAB = vbTab
    ent = 1
    tabl = 1
    VybranyText = Selection.Text + " "

    For m = 1 To Len(VybranyText)
        If Mid(VybranyText, m, 1) = ZnakENT Then
            ReDim Preserve ProEnter(ent)
            ProEnter(ent) = m 'nabere do pole puvodni cislo pozice umisteni Enter ve vybranem textu pro pozdejs
            ent = ent + 1
        End If
    Next m
    If ent = 1 Then
        ReDim Preserve ProEnter(ent)
        ProEnter(ent) = 0 'pokud vyber neobsahuje zadny enter nutno mit pole s jednim prvkem naplnenym 0
    End If
    For m = 1 To Len(VybranyText)
        If Mid(VybranyText, m, 1) = ZnakTAB Then
            ReDim Preserve ProTabelator(tabl)
            ProTabelator(tabl) = m 'nabere do pole puvodni cislo pozice umisteni Tabelatoru ve vybranem textu p
            tabl = tabl + 1
        End If
    Next m
    If tabl = 1 Then
        ReDim Preserve ProTabelator(tabl)
        ProTabelator(tabl) = 0 'pokud vyber neobsahuje zadny tabelator nutno mit pole s jednim prvkem napln
    End If
    Zamen = VybranyText
    Do Until Len(Zamen) = DelkaRetezce
        DelkaRetezce = Len(Zamen)
        Zamen = Replace(Zamen, ZnakENT, Znak) 'vymeni enter za mezeru
        DelkaRetezce = Len(Zamen)
        Zamen = Replace(Zamen, ZnakTAB, Znak) 'vymeni tabelator za mezeru
    Loop

    VybranyText = Zamen
    Slova = Split(VybranyText, " ") 'vytvori pole, oddelovacem je mezera
End Sub

```

Obr. 36 Zdrojový text makra Chemicke_vzorice část 5

