

# ChemScript mit Python

In der Schulung werden die Grundlagen der Programmierung mit Python vermittelt, mit dem Ziel, selbstständig Skripte für ChemScript zu erstellen bzw. zu verändern. Der Kurs richtet sich an Chemiker\*innen, die ihre immer wiederkehrenden Arbeitsvorgänge in der ChemOffice-Suite gerne automatisieren möchten.

## Kursinhalte

### 1. Teil

Python als Programmiersprache

- Was ist Python? Überblick und Entwicklungsumgebung
- Syntax, Datentypen und Zeichenketten, Operatoren
- Sets, Listen, Tupel und Dictionaries
- Kontrollstrukturen: bedingte Anweisungen und Schleifen
- Errors und Exceptions
- Dateiverarbeitung: Input und Output von Dateien
- Funktionen erstellen
- Eine GUI programmieren/verwenden

ChemScript als Erweiterung der ChemDraw-Produktfamilie

- Was ist ChemScript?
- Laden des Moduls, Einbindung weitere Bibliotheken
- Objekte erstellen oder einlesen mit ChemScript
- Strukturen bereinigen
- SD-Dateien einlesen und in ChemDraw-Dateien umwandeln
- Structure-to-Name und Name-to-Structure verwenden
- 2D- und 3D-Strukturen erstellen
- SMILES und InChI verwenden

### 2. Teil

Praxisbeispiele verstehen, erstellen, anpassen

- "Standalone" ChemScripts
  - Konvertieren
  - Detektieren
  - Suchen nach funktionellen Gruppen
  - Beispiel für GUI-Anwendungen
- "Add-On" ChemScripts in ChemDraw
  - Dendrimer-Generierung
  - selektierte ChemDraw-Struktur im "ChemSpider" suchen
  - "Maximum Common Substructure" berechnen
  - Tanimoto-Abstand berechnen
  - Test auf Chiralität, Identität, Substrukturrelation, Tautomerie
  - Einbindung externer API-Funktionen (u. a. Mathematica)

**Beginn:**

Dienstag, 14. Mai 2024, 09:00 Uhr

**Ende:**

Dienstag, 14. Mai 2024, 12:30 Uhr

**Veranstaltungsort:**

61381 Friedrichsdorf

Deutschland

**Website & Anmeldung:**

Email [academy@additive-net.de](mailto:academy@additive-net.de)

<https://www.additive-net.de/de/training/schulungen/perkinelmer/chemscript-mit-python>