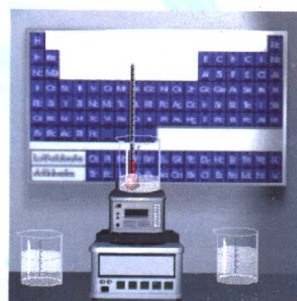
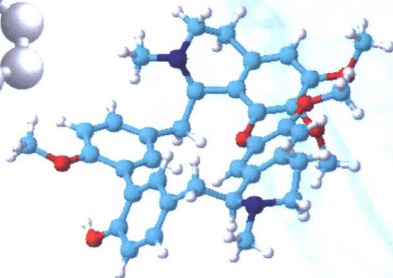
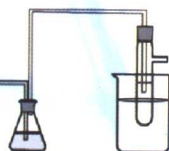
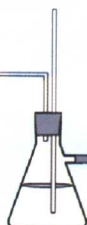
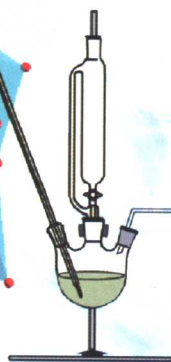
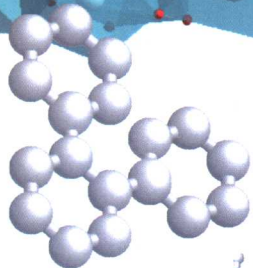
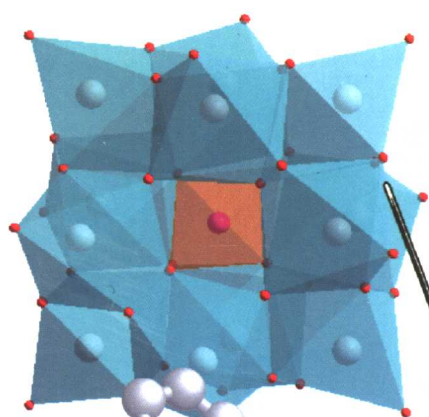


Chemical Tool Software for Education

化学教育工具软件

冉 鸣 主编

- ChemSketch5.0
- Diamond
- ChemWindows
- MSViewer
- ChemLab



化学工业出版社
教材出版中心

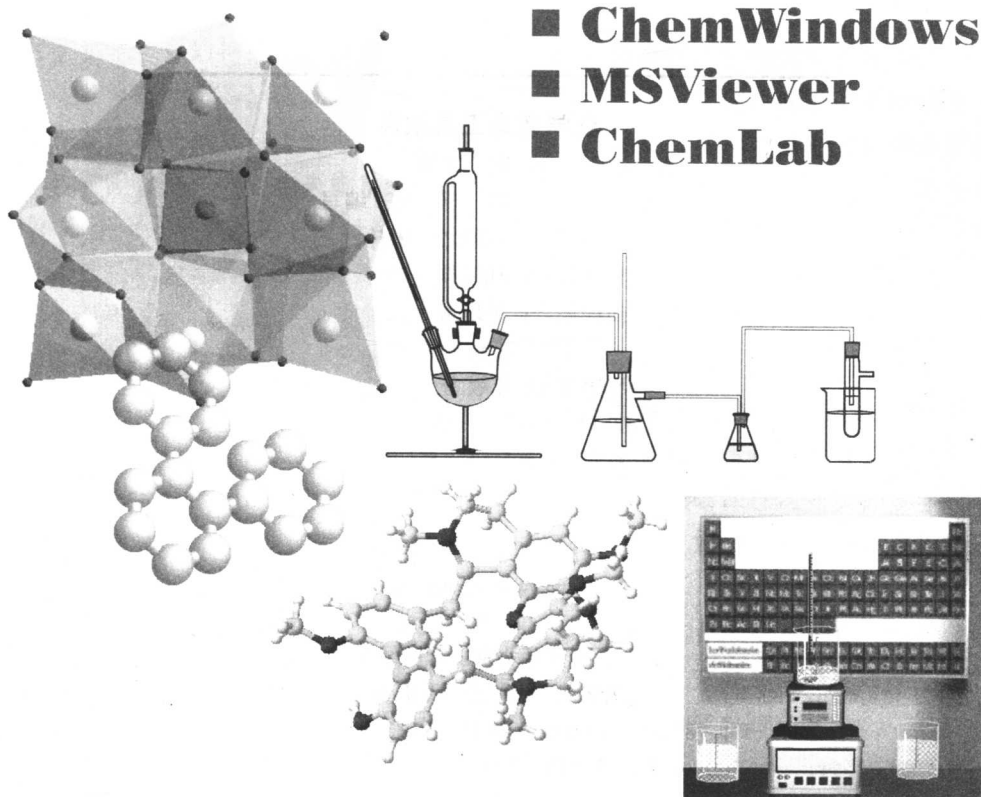
Chemical Tool Software for Education

化学教育工具软件

冉鸣 主编

黄 萍 娄珀瑜 李 立 编写

- ChemSketch5.0
- Diamond
- ChemWindows
- MSViewer
- ChemLab



化学工业出版社
教材出版中心

· 北 京 ·

图书在版编目(CIP)数据

化学教育工具软件/冉鸣主编. —北京: 化学工业出版社,
2006.6
ISBN 7-5025-9045-5

I. 化… II. 冉… III. 化学-多媒体-计算机辅助教学-软件
工具 IV. 06-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2006) 第 072674 号

化学教育工具软件

冉 鸣 主 编

黄 萍 娄珀瑜 李 立 编写

责任编辑: 刘俊之 宋林青

责任校对: 战河红

封面设计: 尹琳琳

*

化学工业出版社 出版发行
教 材 出 版 中 心

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

购书咨询: (010) 64982530

(010) 64918013

购书传真: (010) 64982630

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销

化学工业出版社印刷厂印装

开本 787mm×1092mm 1/16 印张 14 字数 342 千字

2006 年 8 月第 1 版 2006 年 8 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-9045-5

定 价: 29.80 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

前 言

20 世纪末计算机技术已渗透到各个学科领域之中。但是, 纵观大学化学专业的教学体系特别是师范类教学体系, 并未包含一门介绍化学专业计算机软件应用的课程, 导致学生到高年级进入学科实习和毕业论文阶段时还对化学工具软件知之甚少, 对化学中的各种符号如结构式、方程式、离子式、电子式、晶体与材料空间结构、各类三维空间表达形式以及实验装置图和各种专业流程图的绘制创建无从下手。在化学研究与化学教育方面缺失了重要的应用手段和工具, 为学生将来可能从事的化学相关工作如化学出版物的编辑、电子教案的录入、化学专业报告的书写以及化学 CAI 课件制作等造成不利影响, 甚至影响其化学综合能力的发挥和就业前景。

由于化学专业的特殊性, 所涉及的专业符号复杂而多样, 使得化学类软件的研制十分困难, 目前多为国外产品, 因其软件的不断更新, 版本的不断变化, 功能的不断改善, 很难找到既适合各类符号录入, 又适合实验装置绘图以及三维旋转空间构象创建的综合型软件应用于化学教学, 致使许多学生未能系统地、深入地认识化学教育工具软件及其应用前景。笔者从 1996 年开始关注并从事有关研究, 经过多年的化学与计算机应用的教学实践, 现将常用的几款与化学教育有关的工具软件的使用方法汇编成册, 以飨读者。

本书主要讲述了 ChemSketch5.0、Diamond、ChemWindows、MSViewer 和 ChemLab 五款常用的、可通过网络免费下载的化学专业计算机软件。这些软件研制的共同特点就是解决化学知识传播和化学教育中的有关信息表示和分子结构参数预测。在信息时代的 21 世纪, 作为从事化学相关专业和化学教育的师范专业大学生, 了解并掌握上述化学教育工具软件是重要和必需的。因此该类课程已定位于化学专业信息技术技能的基础课程之一, 许多学校均有开设类似的专业课或专业选修课的计划。但是, 由于在教材建设方面的滞后, 严重影响了该课程的建设。

本教材的编写按照计算机软件学习的规律从软件的结构到软件的功能, 从软件的功能到具体的应用, 逐一通过典型案例来说明各个软件在化学教育中的具体应用与实际操作, 并深入浅出、循序渐进地通过经典案例来训练读者, 提高其掌握技术的水平。

本书的主要内容包括六个部分: (1) 化学平面符号的录入软件 ChemSketch5.0。这是一款更适合高级化学工作者的专业软件, 其主要解决有机化学, 生物化学中常见的化学论文、化学试卷以及平面化学教学课件中化学符号、反应方程式、轨道反应方程式和结构式的构建与表达问题。同时提供三维空间结构表示与化学实验装置图构建功能。(2) 晶体与材料结构创建与表示软件 Diamond。该软件主要用于构建、绘制和探索晶体结构, 具有较强的兼容性,

支持多种格式的输入和导出,可用于分子结构和材料科学的物质特征显示与表征。该软件不仅能创建晶体结构模型,还能以各种形式(线状、球棍状或空间堆积状、多面体形式等)展示晶体模型和分子结构模型,且模型可以根据需要被自由地旋转、移动和缩放,可以用着色方案对某些原子进行强调与渲染,并可对晶体模型进行文字标注。(3) ChemWindows 软件。这是一款常用的化学专业软件,其主要解决无机化学、有机化学,生物化学中常见的分子与大分子的录入。提供简单的三维空间结构表示与化学实验装置图构建功能。(4) 常用的三维化学空间结构的构建与表示软件 MSViewer。其主要用于有机高分子、生物大分子和各类氨基酸、蛋白质立体空间的表示,其在化学教育和科学普及中的作用十分明显。(5) 介绍有关上述软件之间以及它们与其他应用软件之间的信息资源交换与共享的实用知识。(6) 虚拟化学实验室 COREL ChemLab 软件,该软件具有模拟实验仿真功能的多媒体化学游戏学习软件,它模拟现代化学实验室的功能,使软件操作者可以像在实验室做实验一样操作其中的各种仪器和设备来进行各种预设的实验,也可利用该软件提供的实验平台进行用户自己设计的实验。通过使用该软件可使学生进一步熟悉各种化学实验操作,培养学生自主探究的能力,在一定程度上弥补实验室条件的限制。

本书第 1、6 章由冉鸣、黄萍编写,第 2 章由李立编写,第 3、4 章由娄珀瑜编写,第 5 章由娄珀瑜、冉鸣编写,黄萍对本书进行全文校审。

本书在编写过程中得到了四川师范大学研究生樊敏、任建华、陈琰君、张勇、李光大、杨曦、顾静、毛玉环、王晓军、马莉和贾飞云等同学的大力帮助。本书是大家共同努力的结晶。

由于作者水平有限,书中必然存在许多不足。读者一旦发现,请与作者联系,我们必将及时改正。

编 者
2006 年 5 月

目 录

第 1 章 ChemSketch 化学工具软件	1
1.1 ChemSketch 的运行及其在化学教育应用中的主要功能	1
1.1.1 ChemSketch 的下载、安装与启动	1
1.1.2 ChemSketch 在化学教育应用中的主要功能	2
1.2 ChemSketch 使用基础	3
1.2.1 工作界面及其工作模式间的切换	3
1.2.2 常用工具及功能按钮介绍	6
1.2.3 文件操作	11
1.3 化学分子结构的绘制	14
1.3.1 分子结构绘制工具	14
1.3.2 特殊化学键绘制与操作	22
1.3.3 分子结构的标识	23
1.3.4 简单化学反应方程式的编辑	24
1.4 绘图 (Draw) 模式的使用	26
1.4.1 绘图编辑常用工具	27
1.4.2 绘图工具	28
1.4.3 图层与位置调整工具	32
1.5 ChemSketch 的三维演示功能	33
1.6 ChemSketch 模板库的进一步使用	35
1.6.1 化学反应装置图的构建	35
1.6.2 有关轨道图形的创建	41
1.6.3 将创建的内容保存到模板中	43
1.7 ChemSketch 计算分子物性与结构参数的功能	44
1.7.1 物性参数的计算	44
1.7.2 分子结构参数的计算	45
习题一	46
第 2 章 Diamond 化学工具软件	48
2.1 Diamond 的运行及其在化学教育应用中的主要功能	48
2.1.1 Diamond 的下载、安装与启动	48
2.1.2 Diamond 在化学教育应用中的主要功能	49
2.2 Diamond 软件基础知识	49
2.2.1 工作界面及其工作模式间的切换	49
2.2.2 常用工具及功能按钮介绍	50

2.3 各类工作场景介绍	52
2.3.1 阅读手册	52
2.3.2 打开文档	52
2.3.3 浏览范例文件	53
2.3.4 创建新文件	53
2.4 晶体结构的展示与美化	60
2.4.1 原子及键数据的查看	60
2.4.2 晶体模型的展示形式	61
2.4.3 测量键长、键角和扭矩	63
2.4.4 对原子或键进行编辑	64
2.4.5 晶体结构添加文字和标注	64
2.4.6 为晶体添加多面体结构	65
2.5 特殊功能介绍	66
2.5.1 将晶体结构制成动画	66
2.5.2 为晶体结构设置材质和相应的彩色背景	68
2.5.3 在 Diamond 软件中观看分子结构	71
2.6 其他功能介绍	79
2.6.1 对未知结构进行研究	79
2.6.2 复杂结构的构建	86
2.7 几种晶体结构展示以及一些晶体的参数	93
2.7.1 几种晶体结构模型的实例展示	93
2.7.2 几种常见晶体的相关参数	93
2.7.3 本软件的不足之处	93
习题二	95
第3章 ChemWindow 化学工具软件	96
3.1 ChemWindow 的安装和启动	96
3.2 ChemWindow 在化学教育中的应用	97
3.3 ChemWindow 界面结构	100
3.4 工具栏中工具简介	100
3.5 ChemWindow 的文件操作	105
3.6 化学分子结构的绘制	105
3.6.1 键的构建	106
3.6.2 环的构建	109
3.6.3 MS 工具	112
3.6.4 模板工具的使用	113
3.6.5 对齐和组合	115
3.6.6 颜色的修改	115
3.7 化学方程式与图形的构建	115
3.7.1 箭头工具	115
3.7.2 绘图工具	116
3.7.3 图形的颜色	122
3.8 文本的输入	123

3.8.1 标签工具	123
3.8.2 说明工具	125
3.8.3 注释工具	126
3.8.4 表格工具	129
3.9 绘制轨道和化学符号	129
3.9.1 轨道工具	129
3.9.2 化学符号工具	130
3.10 图库的调用	132
3.10.1 图库的使用	132
3.10.2 使用库中的内容	133
3.10.3 编辑仪器	136
3.10.4 图库的建立	136
3.11 光谱分析	137
3.11.1 光谱曲线处理	137
3.11.2 光谱解释工具	137
3.12 3D 效果分子图形的功能	140
3.12.1 SymApps 界面结构	140
3.12.2 观察 (View) 三维立体结构	141
3.12.3 分子点群和特征表的计算	142
习题三	144
第 4 章 WebLab Viewer 工具软件	148
4.1 WebLab ViewerPro 的运行及其在化学教育中的应用	148
4.1.1 WebLab ViewerPro 安装与启动	148
4.1.2 WebLab ViewerPro 在化学教育中的应用	149
4.2 WebLab ViewerPro 使用基础	150
4.2.1 WebLab ViewerPro 界面结构	150
4.2.2 工具栏的调用	151
4.2.3 工具栏简介	152
4.2.4 WebLab ViewerPro 的文件操作	153
4.3 视图功能的使用	154
4.3.1 视图方式的选择	154
4.3.2 View (视图) 菜单的简介	154
4.3.3 Display Style (显示风格) 的设置	155
4.3.4 Color (颜色) 的设置	163
4.3.5 其他视图功能的选择	163
4.4 基本化学分子结构的绘制	163
4.4.1 链状分子绘制	163
4.4.2 设置键的类型	165
4.4.3 环状分子的绘制	165
4.4.4 设置原子类型	168
4.5 文本的使用	171
4.5.1 注解工具的使用	171

4.5.2 文本框	172
4.5.3 文本插图编号	172
4.6 手动检查及调整结构	174
4.6.1 键长	174
4.6.2 距离	175
4.6.3 键角	175
4.6.4 手动调整空间扭转角度	175
4.6.5 显示氢键	177
4.7 晶体结构的绘制	177
4.7.1 Cell Builder (晶体构建参数) 窗口	177
4.7.2 绘制晶体模型的基本方法	179
4.8 窗口菜单的使用	180
习题四	183
第5章 多个软件的信息资源共享	184
5.1 利用复制粘贴命令实现信息资源共享	184
5.1.1 与自身文档间的信息资源共享	184
5.1.2 ChemSketch、ChemWindow 与 WebLab Viewer 之间的信息资源共享	186
5.1.3 ChemSketch、ChemWindow 与 Flash 之间的信息资源共享	188
5.1.4 ChemSketch、ChemWindow 与画图、Photoshop 之间的信息资源共享	190
5.1.5 ChemSketch、ChemWindow 与 Word、PowerPoint 之间的信息资源共享	190
5.1.6 WebLab Viewer 与 Excel 之间的信息资源共享	193
5.2 利用选择相同的存储格式实现信息资源共享	195
5.2.1 保存为 MDL MolFile (*.mol) 格式	195
5.2.2 保存为图形格式(.bmp、.wmf 和 .gif 等)	195
5.3 利用抓图工具实现信息资源共享	196
习题五	196
第6章 虚拟化学实验室 COREL ChemLab	198
6.1 COREL ChemLab 概述	198
6.1.1 COREL ChemLab 的获取与安装	198
6.1.2 软件界面与功能	199
6.2 COREL ChemLab 使用基础	204
6.2.1 实验室设置	204
6.2.2 实验基本操作	206
6.3 COREL ChemLab 应用实例	208
6.3.1 强酸滴定曲线实验	208
6.3.2 阿佛加德罗定律实验	209
6.3.3 爆炸动力学验证实验	210
6.3.4 水的蒸发能测定实验	210
6.3.5 弱酸的 pK_a 值的测定实验	211
6.3.6 氧化还原滴定实验: 高锰酸钾滴定二价铁离子	212
6.3.7 自主设计性实验的相关问题	213
习题六	214

第1章 ChemSketch 化学工具软件

ChemSketch 是加拿大 ACD 公司 (Advanced Chemistry Development) 专门开发的用于编辑化学分子式、化学仪器等化学图形的工具软件。该软件经历了多个版本的不断改进, 以其强大的功能和简易方便的操作赢得了全世界广大化学与生物工作者的青睐。本章介绍的版本为 ChemSketch 5.0, 是 ChemSketch 中功能较为完善的版本, 也是目前普遍使用的版本, 它包含大量的分子结构库、实验仪器库和其他与化学相关的图形库, 只要稍加实践, 便会很容易地绘制出高质量的化学结构图形。因而, 可为化学出版物、手稿、报告、CAI 课件等提供高质量的结构图形、三维立体图形以及基本的化学反应装置图形等。

ChemSketch 的主要功能和特点表现如下:

(1) 具有大量的方便的编辑工具, 可以很容易地编辑出复杂的分子式反应式, 构建化学仪器图形和化学反应装置图;

(2) 具有内容丰富的数据库, ChemSketch 几乎包含了所有常见的有机化学分子、生物化学分子式, 而且这些库元素都是可编辑的, 可根据实际需要进行修改和补充;

(3) 具有一定的计算功能, 如自动计算密度, 熔点, 元素比例和分子表面张力等物性参数;

(4) 具有辅助的 3D 软件, 能快速生成画面非常精美的、多种表现方式的三维图形和动画, 而且能方便地在二维与三维之间进行转化;

(5) ChemSketch 生成的文件很小, 包括 3D 图形都只有 1k 左右, 便于保存和传输;

(6) 对那些本软件所没有的特殊符号和图形, ChemSketch 也可以通过与其他软件联合使用创建出来, 该软件还提供保存用户自己编辑的图形的功能。

1.1 ChemSketch 的运行及其在化学教育应用中的主要功能

1.1.1 ChemSketch 的下载、安装与启动

安装 ChemSketch 软件对系统的要求是: 运行在 486 (或 486 以上) CPU 的 IBM、PC 或相似类型的兼容机上。操作系统可以是 Microsoft Windows98、WindowsXP 以及 Windows NT, 也可以运行在多种操作系统中。这里介绍的操作方法均是基于 Windows XP Professional。至少需要 8MB 的内存和至少需要 10MB 以上的硬盘运行空间。

ChemSketch 软件可以从网上下载其免费试用版。下载网址为: www.acdlabs.com 和 www.591cn.com。具体操作如下。

(1) 进入上述网站, 在目录中找到下载文件, 打开下载文件的网页, 从软件名称中找到 ChemSketch5.0 并点击。

(2) 计算机先自动将文件下载到临时文件夹或自己设置的目录中(这个过程较慢), 然后进入 ChemSketch 的文件夹, 点击应用程序。

(3) 选中图标  并点击, 在以后弹出的对话框中均选择 next 或 yes (若不想将程序安装在 C 盘, 可将其改为 D、E、F 盘), 直到 Finish 为止。从而完成 ChemSketch5.0 的下载与安装。

ChemSketch 安装好后, 它会自动在 Windows 的 [开始] 菜单中创建程序组。打开 [开始] 菜单, 选择 [所有程序] / ACDLabes FreeWare / ChemSketch 选项, 即可启动 ChemSketch。

1.1.2 ChemSketch 在化学教育应用中的主要功能

对广大的从事化学及相关的工作者来说, 各种复杂的化学分子式、仪器设备图、符号等是每天不得不面对的问题, 它们的编辑随着信息时代的到来越来越显现出化学专业编辑工具软件的重要性。如何才能快捷、准确、方便地编辑这些化学图形, ChemSketch 就提供了这样一个良好的工作平台。它的使用可以大大提高化学专业符号和图形编辑工作的效率和质量, 是每一个化学工作者的必备工具, 尤其为广大的中学、高等学校的化学教师提供了一个方便之门。

ChemSketch 在化学教育应用中的主要功能如下。

(1) 构建分子结构 (见图 1-1)。

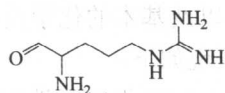


图 1-1 构建分子结构

(2) 编辑复杂的分子式反应式 (见图 1-2)。

(3) 构建化学仪器图形和化学反应装置图 (见图 1-3)。

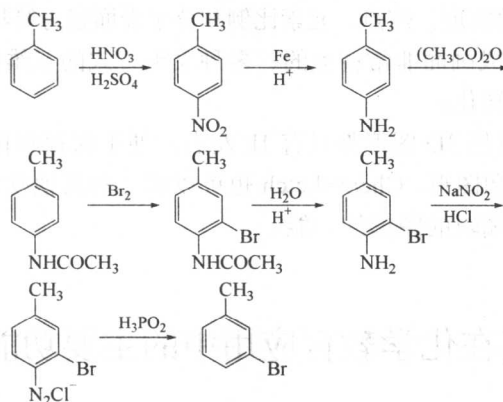


图 1-2 甲苯制间溴甲苯反应过程示意图

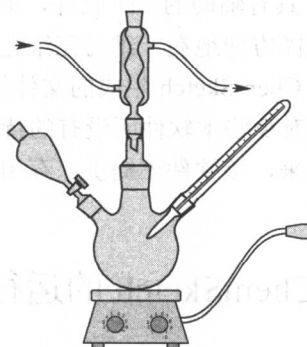


图 1-3 化学反应装置图

(4) 构建分子轨道图形 (见图 1-4)。

(5) 构建晶体结构图形 (见图 1-5)。

(6) 编辑复杂的反应能量变化曲线图 (见图 1-6)。

(7) 生成 3D 演示画面 (见图 1-7)。

(8) 计算分子的物性参数 (见图 1-8)。ChemSketch 软件提供物性参数计算功能, 能对所创建的分子进行诸如折射率、极化率、表面张力、密度、摩尔体积等的计算, 也可以对常见分子的结构参数如键长和键角等进行计算并显示。其作用相当于一本功能强大的化学手册, 在教学中的应用不可低估。

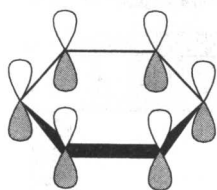
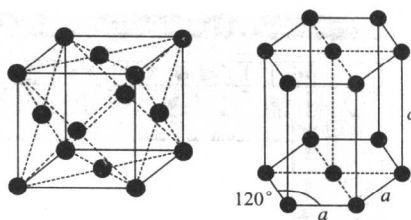
图 1-4 苯分子大 π 键轨道图形

图 1-5 晶体结构图形

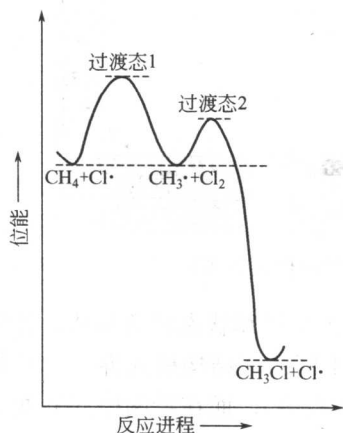
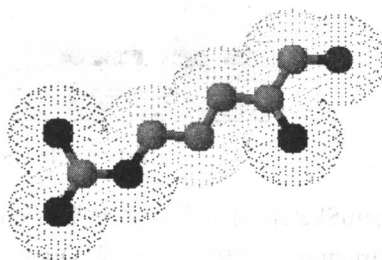
图 1-6 CH_4 和 $\text{Cl} \cdot$ 生成 CH_3Cl 反应的能量曲线图

图 1-7 具有电子云的 3D 分子结构

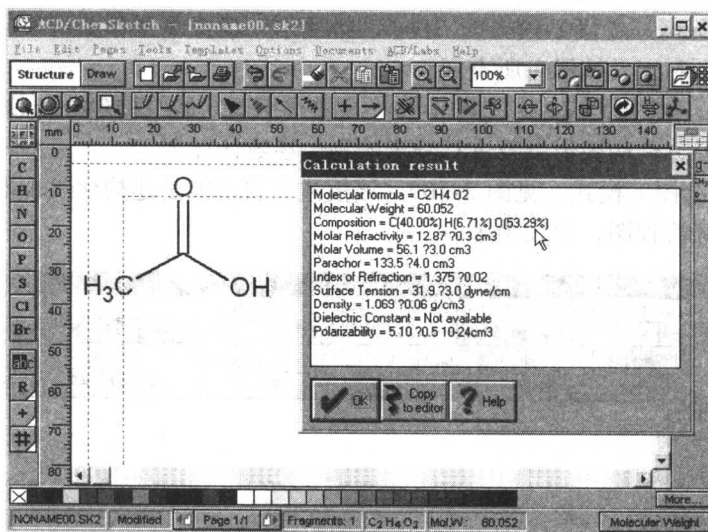


图 1-8 乙酸的物性参数

1.2 ChemSketch 使用基础

1.2.1 工作界面及其工作模式间的切换

启动 ChemSketch 并新建一个文件, 就进入了 ChemSketch 的工作界面, 如图 1-9。

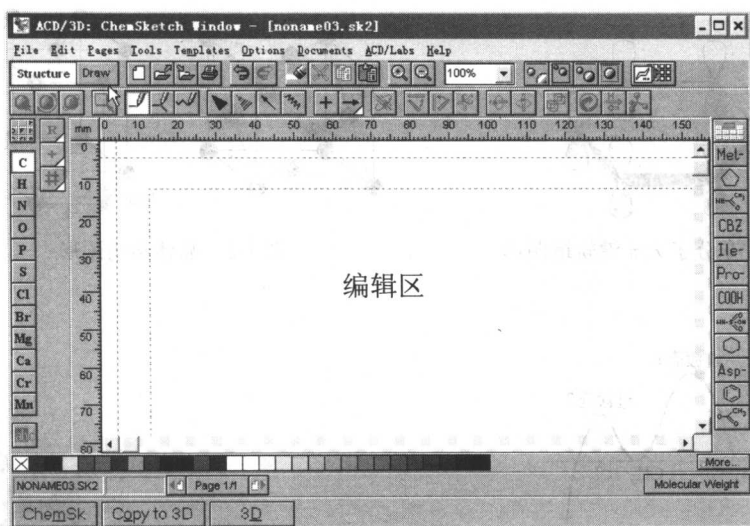


图 1-9 ChemSketch 工作界面（结构模式界面）

ChemSketch 的工作界面主要由标题栏、菜单栏、工具栏和状态栏等构成，其中工具栏因选择 Structure（结构）模式或 Draw（绘图）模式而不同；在结构模式界面含有常用元素工具（如图 1-9 左侧）和常用分子式库快捷键（如图 1-9 右侧），而在绘图模式界面只含有各种绘图工具（如图 1-10 左侧）。其具体的应用将在下面章节进行讲述。

ChemSketch 具有三种完全不同功能的工作模式，可通过模式转换按钮或命令，在 Structure（结构）模式、Draw（绘图）模式和 3D（三维演示）模式下工作并切换。在这三种工作模式下，它们的界面和工具按钮有所不同。

（1）Structure（结构）模式（见图 1-9）该模式主要功能是构建分子结构、反应方程式、分子轨道图形、晶体结构图形以及进行分子的物性参数计算等。

（2）Draw（绘图）模式（见图 1-10）该模式主要功能是建构化学仪器图形和化学反应装置图、绘制各种流程图、曲线图等。

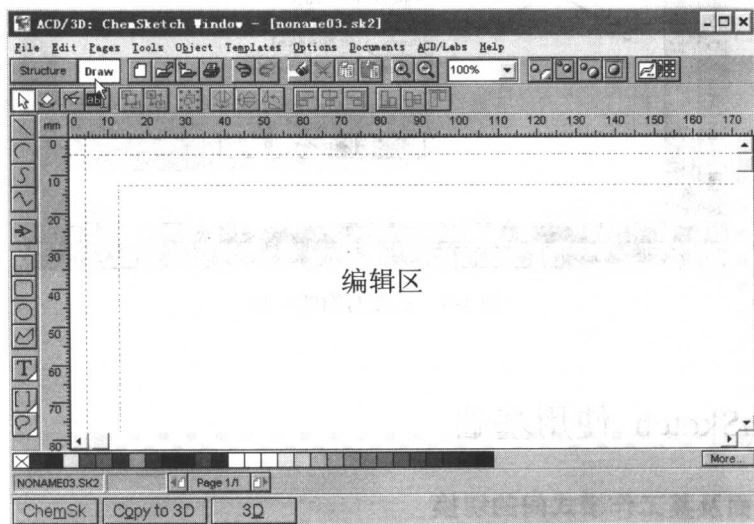


图 1-10 绘图模式界面

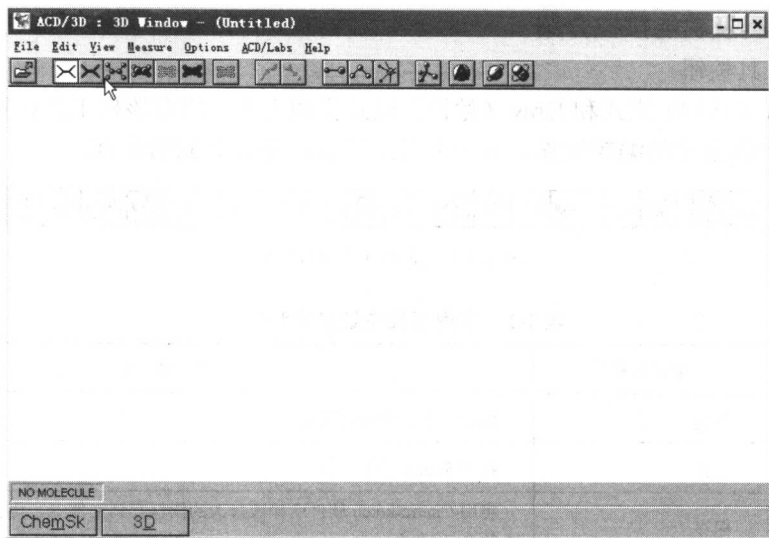


图 1-11 3D 模式界面

(3) 3D (三维演示) 模式 (见图 1-11) 该模式主要功能是对建构的分子结构进行三维动画演示。

(4) 工作模式的切换 Structure 模式和 Draw 模式的切换可通过点击图 1-9 左上角的模式转换按钮进行。

ChemSketch 的三维功能界面嵌套在 ChemSketch 的主工作界面中, 有两种方法可进入该界面。

① 从 ChemSketch 的主工作界面菜单栏中找到 [ACD/Labs], 并打开其下拉菜单, 如图 1-12 所示。选中 3D Viewer 命令即可。

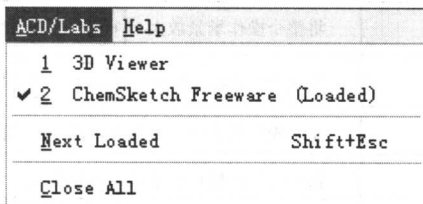


图 1-12 3D 工作模式与其他模式的切换

② 点击状态栏中的 按钮, 或先构建分子式再点击 按钮都可以进入 ChemSketch 的三维功能界面。

注意: ①如果是第一次进入 ChemSketch 的三维功能界面或是 ChemSketch 的三维功能界面已被关闭, 则 ChemSketch 的主工作界面中不会出现 这三个按钮, 则只能通过第一种方法进入 ChemSketch 的三维功能界面; ②在 ChemSketch 的主工作界面中对分子进行修改后, 若点击 , 只是回到先前的三维界面; 只有按下 按钮, 才会显示图形修改后的三维视图。如果仅选中主工作界面中的某个分子, 点击 后, 则只出现选中分子的三维视图。

1.2.2 常用工具及功能按钮介绍

1.2.2.1 常用工具按钮

在 Structure (结构) 模式和 Draw (绘图) 模式界面上方, 均有该栏工具按钮, 见图 1-13, 其主要功能是提供常用的编辑操作。表 1-1 列出了其功能和对应的名称。



图 1-13 常用工具按钮组

表 1-1 常用工具按钮名称和功能

按钮图标	按钮名称	按钮功能
	新建	新建一个操作编辑场景
	打开	打开 Sketch 图形文件
	保存	将用 ChemSketch 软件所绘或修改的图保存到文件中。功能同 [File] 菜单中的 Save 命令
	打印	打印所绘图形, 在弹出的对话框进行设置, 即可打印出所需的内容
	PDF 文件格式输出	以 PDF 文件格式输出
	撤销	撤销当前的操作, 返回上一步操作。相当于后退
	返回	返回下一步操作, 相当于前进
	橡皮擦	用于将选中图形擦去。先选中该按钮, 则鼠标呈箭头状, 将鼠标移到将要抹去的图上, 再单击鼠标左键即可擦去
	剪切	需先选中要剪切的对象, 再按此按钮
	复制	将选中的内容复制到剪贴板中
	粘贴	将剪贴板中的内容粘贴到编辑区
	放大	将整个操作场景放大。100% 下拉菜单可显示绘图的大小和比例
	缩小	将整个操作场景缩小。100% 下拉菜单可显示绘图的大小和比例
	实际场景	显示操作场景的真实大小, 即打印出的实际大小
	全部场景	将整页显示操作场景显示在屏幕上, 便于观看
	放大场景	把绘图栏中所有的图放大并充满整个屏幕
	选中放大	把所选中的图放大充满整个屏幕, 便于进行局部绘画或修改

1.2.2.2 ChemSketch 的模板库

点击 进入 ChemSketch 的模板库, 这是 ChemSketch 的一个重要特色, 库中含有 40 多个子模板可供选择, 覆盖了几乎所有的常见有机分子式、化学实验仪器、化学符号、图标等。给用户编辑化学图形提供了便捷的方法, 并可将用户自己编辑的图形存入该库中, 便于以后使用 (具体的方法将在后面的 1.6.3 节中详细阐述)。图 1-14 是其面板, 可以通过该窗口上面的两个下拉菜单进行子模板选择, 其中左侧的是子模板选项, 右侧的是该子模板的其他内容页面选项。例如选定 Lab Kit (实验仪器组件) 子模板时, 它有两个页面分别是 1 (2) Kit 和 2 (2) Kit 可供用户选择。

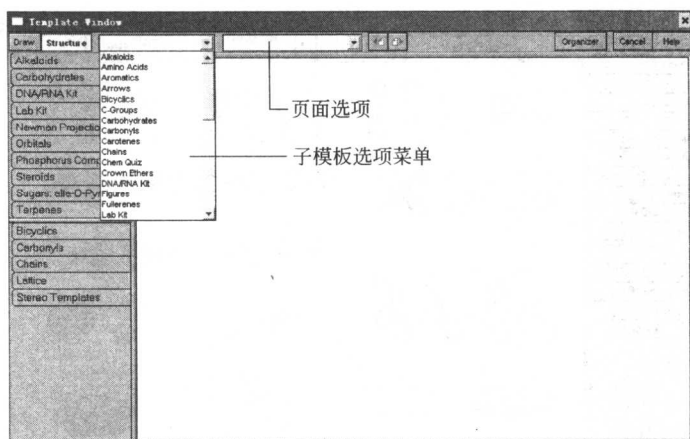


图 1-14 ChemSketch 的模板库界面

当选定某子模板选项后，该软件会在左侧窗口中添加该子模板的快捷按钮，方便以后选择。使用时只需点击该窗口的某图形，然后切换到编辑区中去，单击左键就完成了从库中引入图形的操作。图 1-15~图 1-18 列出了四种不同子模板的库元素。

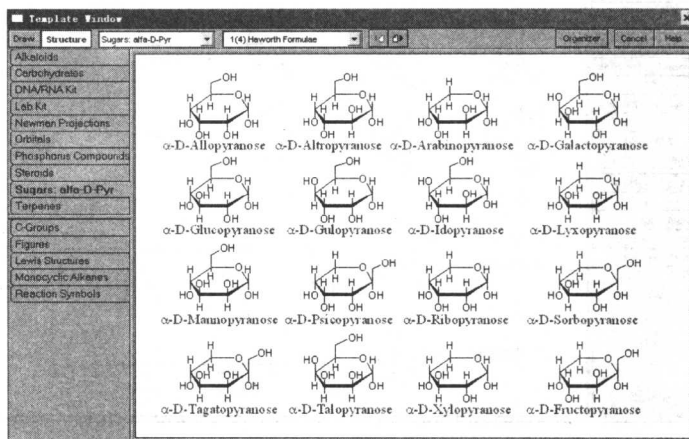
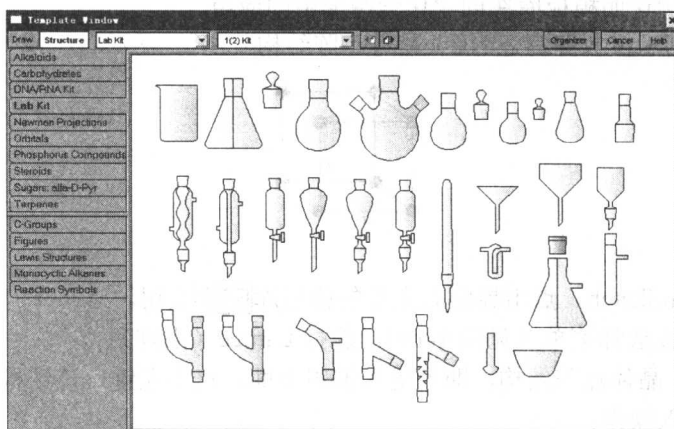
图 1-15 α -D 型糖类的子模板

图 1-16 实验仪器子模板

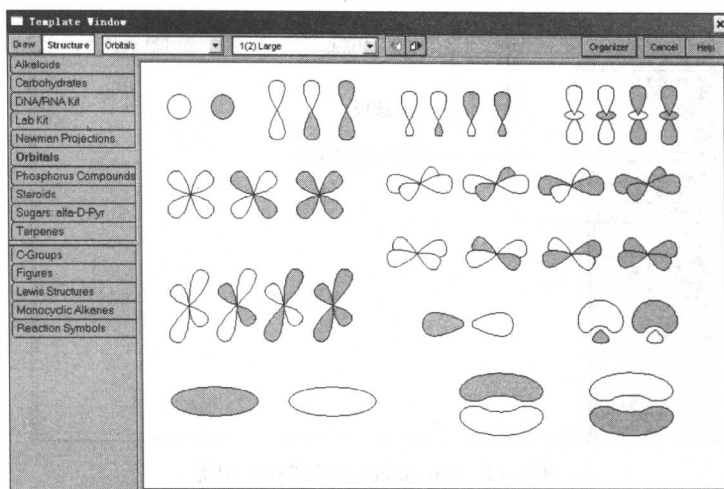


图 1-17 轨道电子云子模板

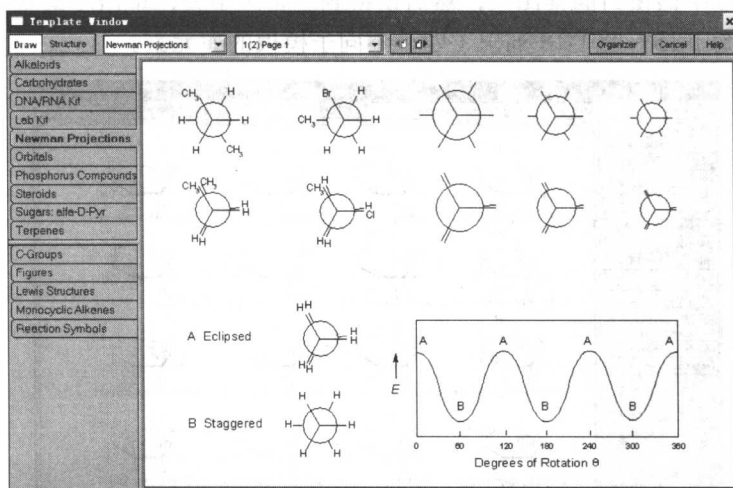
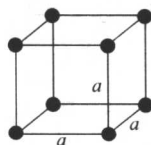


图 1-18 纽曼结构式子模板

下面以两个实例说明模板库在创建化学图形中的应用。

【实例 1-1】 利用模板库构建 NaCl 晶体点阵结构



【步骤】

- (1) 启动 ChemSketch, 点击界面右上角的模板库  按钮。
- (2) 通过子模板选择菜单 (见图 1-19), 选择 Lattice (点阵)。
- (3) 选中 NaCl 晶体点阵结构, 即刻进入编辑界面, 点击左键, 该结构即导入编辑区中; 点击右键将取消导入操作。
- (4) 利用  工具调整出最佳观看效果。