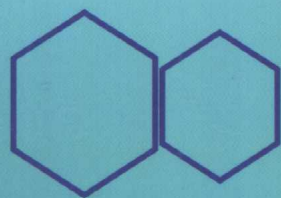
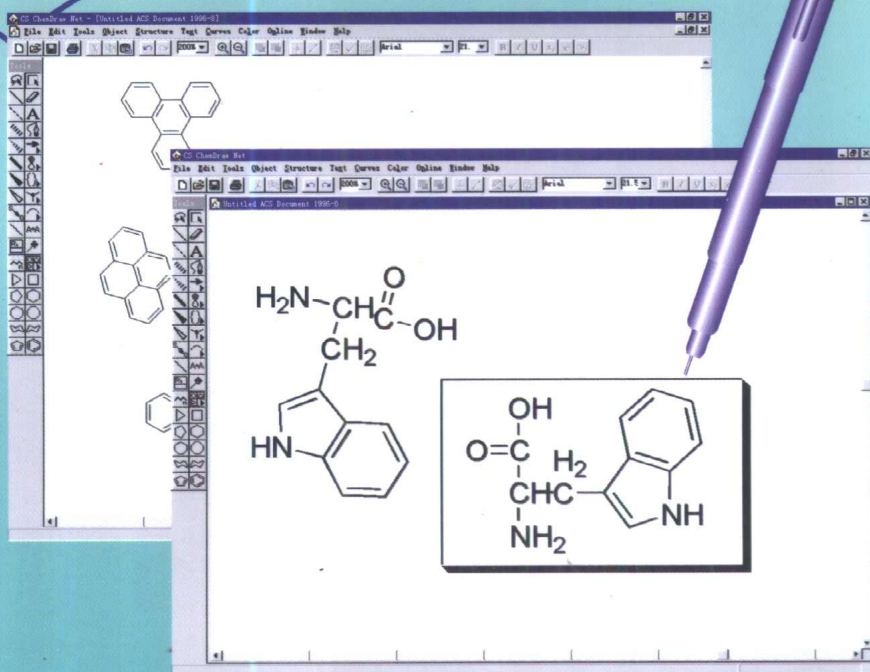
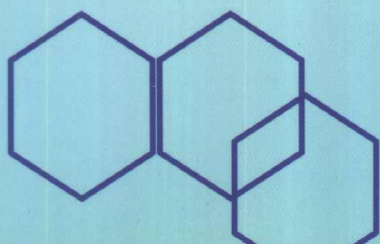


高等院校化学、化工、生物专业教学辅导



精通 *ChemDraw*

1.4

胡立江 等 编著



清华大学出版社
<http://www.tup.tsinghua.edu.cn>



764

TP31/4
H526

精通 ChemDraw

胡立江 等 编著

清华大学出版社

(京)新登字 158 号

内 容 简 介

美国 CambridgeSoft 公司为化学工作者和工程师开发提供了高质量的网络应用软件。其中, ChemDraw 软件是世界上最受欢迎、最有应用价值的化学绘图工具。

ChemDraw 最新版本所涉及的范围包括化学作图、分子模型生成、化学数据库信息管理等, 并附有在线菜单和多页文件特点演示, 增加了 ChemNMR、光谱化学工具等功能。ChemDraw 可编辑与化学有关的一切图形。例如, 建立和编辑各类分子式、方程式、结构式、立体图形、对称图形、轨道等, 并能对图形进行翻转、旋转、缩放、存储、复制、粘贴等多种操作。本书详尽介绍了此软件的各种功能, 同时提供了大量教学应用示例以便于读者理解。

本书适用于大专院校化学教师、本科生、硕士生、博士生, 科研部门化学工作者, 工厂企业化学技术人员及化学界其他各类人士。

版权所有, 翻印必究。

本书封面贴有清华大学出版社激光防伪标签, 无标签者不得销售。

书 名: 精通 ChemDraw

作 者: 胡立江 等

出 版 者: 清华大学出版社 (北京清华大学学研大厦, 邮编: 100084)

<http://www.tup.tsinghua.edu.cn>

责任编辑: 丁岭

印 刷 者: 北京密云胶印厂

发 行 者: 新华书店总店北京发行所

开 本: 787 × 1092 1/16 印张: 15.25 字数: 369 千字

版 次: 2002 年 4 月第 1 版 2002 年 4 月第 1 次印刷

书 号: ISBN 7-302-05281-6/TP · 3104

印 数: 0001 ~ 4000

定 价: 21.00 元

前 言

计算机软件的应用是计算机学科在化学领域中的最主要的应用之一，它不仅解决了化学计算中的复杂问题，而且利用虚拟的程序把化学世界的微观结构、光谱形态等形象地展现出来，以致把化学学科的教育和科研的革命推向一个崭新的阶段。

美国 CambridgeSoft (CS, <http://www.camsoft.com>) 公司为化学工作者和工程人员的研究和开发工作提供了高质量的应用软件，这些软件都已升级到含有网络和 3D 功能的版本。其中 Chem Office 是世界范围的最受欢迎、最有应用价值的 CS 化学软件系列产品。该软件所涉及的范围包括化学作图、分子结构模型、化学数据库信息等。例如，Chem Office Uptra 是一个世界通用的桌面化学软件，它是用于桌面环境最强的应用软件，为化学研究达到一个新的高度提供了最高级的系列工具；Chem Office Pro 是一个完整可靠的化学功能软件，它能够满足化学科研人员、教育工作者及学生的化学绘图、物质结构模型和信息管理的需要；Chem Office Net Plugin 可让用户浏览分子内部结构和用 ChemDraw 查询在网上的在线分子结构数据库，还可以用 Chem 3D Plugin 浏览和旋转 3D 分子。

Chem Office 所涉及的化学作用、分子结构模型和化学数据库信息的功能，是由其所包含的 ChemDraw、Chem 3D 和 ChemFinder 三种系列软件来完成的。本书主要详细论述了 Chem Draw Net 6.0 软件的操作方法。为了使用户对 Chem 3D 和 Chem Finder 的功能和使用有进一步的了解，本书在附录中做为“实例指导”，给出了两个软件操作和使用的方法。

ChemDraw 是为辅助专业学科工作者及相关科技人员的交流活动和研究开发工作而设计的。它给出了直观的图形界面，开创了大量的变化功能，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，可为化学界出版物、手稿、报告、CAI 软件、涉及化学结构图形的软件的编写制作等提供高质量的结构图形、3D 转换、基本的分子模型及化学数据管理功能等。ChemDraw 为此已成为世界上最流行、最受欢迎和最有应用价值的化学绘图软件。

2000 年 3 月 2 日 Chem Draw Net 6.0 最新版正式发行。此版本附有在线菜单和多页文件的特点演示，增加了 Chem NMR 光谱化学知识等，它可以建立和编辑与化学有关的一切图形。因而对化学工作者，特别是日常涉及化学结构的化学工作者来说是极其有用的必备工具。

ChemDraw 在国内应用前景广阔，此软件也可以在 CambridgeSoft 网站免费下载，因而出版做为该软件的配套指南也是当务之急，只有真正掌握了操作指南的内容，才能深深体会到该软件的奥妙，才能继续开发出指南中没有涉及到的功能。本书适用于大专院校化学教师、本科生、硕士生、博士生、科研部门的化学工作者、工厂企业化学技术人员及化学界相关的其他各类人士。

1. 下列术语在本书中经常接触的，这里给予说明。

点位：移动鼠标直到鼠标的光标放到所要进行操作的位置，如果选择的位置在图形结构中的键、原子、线等上面的，一般出现黑方块，称之为光标块，选择块或操作块。

单击：快速按下鼠标键（左或右键），然后快速抬起。

双击：快速操作二次单击。

拖动：由三部分动作组成—按下鼠标左键选择对象，移动鼠标，将被选的对象移动到指定位置后抬起鼠标键。

选择：用鼠标的光标选中某种选择，使对象产生光标。选择对象并不意味着动作，只是标记要操作的对象和点位。

“键 + 单击”：按下特殊的键和单击鼠标键。例如，“Shift + 单击”意思是按下 Shift 键和单击鼠标键。

“键 + 拖动”：按下特殊的键和鼠标键，移动鼠标。例如，“Shift + 拖动”意思是按下 Shift 键和移动鼠标光标。

2. CS ChemDraw 还包括 CS ChemDraw Pro 软件。本书中的记号 Pro 代表 CS ChemDraw Pro。

3. 安装 ChemDraw 对操作系统的要求：

- ChemDraw 大部分运行在 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 Windows(3.1 版本以上)、Windows NT(3.5 版本以上)和 Macintosh。本书介绍的操作系统主要是 Windows，部分内容涉及到 Macintosh。
- 在 Windows 3.1 操作系统下运行时，最少有 8MB 的内存，还必须安装 WIN32s DLLs；在 Windows 95 操作系统下运行时，最少有 8MB 的内存和打开 virtual memory（虚拟内存）。
- 至少需要 10MB 的硬盘和一定的运行空间。

4. 安装 ChemDraw

- 把 ChemDraw 光盘插入光盘驱动区；
- 从 Windows 的程序管理器中选择 RUN；
- 在命令栏中键入所用的驱动区，然后键入 install。

5. 启动程序

当启动程序时，只要在程序管理中双击 ChemDraw 图标即可。

编 者

2001 年 11 月于哈尔滨工业大学

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 安装 ChemDraw	1
1.1.1 安装 ChemDraw 对操作系统的要求	1
1.1.2 安装 ChemDraw	1
1.1.3 启动程序	1
1.2 ChemDraw 界面结构	1
1.2.1 文件窗口	2
1.2.2 图形工具图标板	2
1.3 菜单和操作命令	5
1.3.1 菜单中命令的选择	5
1.3.2 命令不同显示的意义	5
1.3.3 Undo 和 Redo 命令	5
1.4 对话框	7
1.4.1 对话框中命令的操作	7
1.4.2 对话框的组成	7
1.5 默认设置的变化	8
1.5.1 Preferences 命令	8
1.5.2 Document settings 命令	9
1.5.3 存储定型设置	11
1.5.4 其他文件的应用设置	11
1.6 ChemDraw 文件操作	11
1.6.1 ChemDraw 文件的建立	11
1.6.2 打开 ChemDraw 文件	11
1.6.3 存储 ChemDraw 文件	13
1.6.4 关闭文件	14
1.6.5 快速访问文件	14
1.6.6 打印文件	15
1.6.7 退出文件	15
第 2 章 实例指导	16
2.1 实例指导 1 反应方程式	16
2.1.1 绘制前的操作准备	16

2.1.2 绘制实例	17
2.2 实例指导 2 绘制中间体结构	22
2.3 实例指导 3 复杂环结构	25
2.4 实例指导 4 Fischer 葡萄糖结构图	27
2.5 实例指导 5 绘制透视图形	30
2.6 实例指导 6 Newman 结构	32
第 3 章 化学结构的绘制	36
3.1 单键工具	36
3.1.1 实键工具	36
3.1.2 楔键和配键工具	38
3.1.3 信息区域	39
3.1.4 单击加键和拖曳加键	39
3.2 多重键的绘制	40
3.2.1 绘制双键	40
3.2.2 绘制双抉择键	40
3.2.3 绘制叁键	40
3.2.4 单键和双键实例	41
3.3 环工具	42
3.3.1 环己烷环工具的选择	42
3.3.2 绘制环己烷	42
3.3.3 环己烷凳环工具	43
3.3.4 绘制不定域共轭环	43
3.3.5 环戊二烯环和苯环工具	44
3.4 无环链	44
3.4.1 无环链工具	44
3.4.2 加链	44
3.5 绘制设置	46
3.5.1 线的宽度	46
3.5.2 黑体的宽度	46
3.5.3 切割线间的距离	46
3.5.4 多重键的键间距离	46
3.6 编辑键	47
3.6.1 变化键的类型	47
3.6.2 楔键和配键的定位	48
3.6.3 双键线的定位	48
3.6.4 移动原子	48
3.6.5 键的前后交叉	49

第4章 文本说明和原子标记	50
4.1 文本	50
4.1.1 说明文本	50
4.1.2 说明文本的宽度	51
4.1.3 编辑说明的内容	51
4.1.4 说明文本的字体、字号和字形	52
4.1.5 格式对话框	54
4.1.6 变化默认设置	54
4.1.7 说明文本的调整和行间距	55
4.1.8 输入非罗马字体	55
4.2 原子符号的标记	56
4.2.1 原子符号的标记	56
4.2.2 原子标记的调整	59
4.2.3 原子标记行间距	62
第5章 绘制轨道和化学符号	63
5.1 轨道	63
5.1.1 轨道工具	63
5.1.2 s-轨道	63
5.1.3 σ -轨道	64
5.1.4 单瓣型轨道	64
5.1.5 p-轨道	64
5.1.6 杂化轨道	65
5.1.7 d-轨道	65
5.1.8 dz^2 -轨道	65
5.2 化学符号	65
5.2.1 化学符号工具	65
5.2.2 H-点和H-划	66
5.2.3 孤对电子	66
5.2.4 自由基	66
5.2.5 阳离子和阴离子	67
5.2.6 电荷	67
5.2.7 立体化学标旗	67
5.2.8 旋转化学符号	68
第6章 绘制箭头、弧及其他图形	69
6.1 箭头	69

6.1.1	箭头工具	69
6.1.2	绘制箭头	70
6.1.3	编辑箭头	70
6.2	基元	71
6.2.1	基元工具	71
6.2.2	方框	72
6.2.3	圆和椭圆	72
6.2.4	单括弧	73
6.2.5	对括号	73
6.2.6	线	73
6.2.7	短键	74
6.2.8	编辑结构基元	74
6.3	弧形工具	76
6.3.1	绘制弧	76
6.3.2	编辑弧	76
6.4	笔	77
6.4.1	笔工具	77
6.4.2	单击绘制	77
6.4.3	按动绘制曲线	78
6.4.4	编辑曲线	78
6.4.5	改变图形	79
6.4.6	添加一条线段	79
6.4.7	删除一条线段	80
6.4.8	曲线不同的应用类型	80
第7章	选择应用	82
7.1	使用选择工具	82
7.1.1	选择工具	82
7.1.2	选择局部结构	83
7.1.3	选择整体结构	84
7.1.4	选择所有的结构	84
7.1.5	添加选择	84
7.1.6	取消选择	85
7.1.7	删除被选择的结构	86
7.2	移动结构	87
7.2.1	一般移动操作	87
7.2.2	利用剪贴板移动	88
7.2.3	移动原子	89

7.3	复制结构	89
7.3.1	用选择工具复制结构	89
7.3.2	复制限制在水平或竖直方向	89
7.3.3	利用剪贴板进行复制	90
7.4	旋转结构	90
7.5	调整结构尺寸	91
7.5.1	调整结构尺寸	91
7.5.2	度量对话框	92
7.5.3	拉曲被选结构	93
7.6	连接结构	93
7.6.1	化学结构以键连接	93
7.6.2	化学结构以原子连接	93
第8章	高级绘制技巧	95
8.1	用快捷键标记原子	95
8.1.1	标记最后被绘制的原子(方法1)	95
8.1.2	定位快捷标记原子(方法2)	95
8.1.3	选择工具快捷变换原子(方法3)	96
8.1.4	标记被选结构中的原子(方法4)	96
8.1.5	运用默认的快捷键(方法5)	97
8.1.6	快捷键效果(方法6)	97
8.1.7	建立快捷键	97
8.2	俗名的使用	98
8.2.1	俗名	98
8.2.2	使用俗名	98
8.2.3	定义俗名	99
8.2.4	查看俗名	100
8.2.5	删除俗名	101
8.3	多中心结构与多连接标记	101
8.3.1	多中心结构	101
8.3.2	多连接标记	102
8.3.3	给原子符号加键	103
8.3.4	展开标记	103
8.3.5	结构整理	104
8.4	检查化学结构信息	104
8.4.1	检查结构	105
8.4.2	分析信息	105
8.5	不定连接结构	107

8.6 颜色	108
8.6.1 Color 菜单	108
8.6.2 给图形结构着色	108
8.6.3 给文本着色	109
8.6.4 改变调色板	109
8.6.5 给 Color 菜单增加颜色	111
8.6.6 删除颜色	111
第9章 绘制查询结构	113
9.1 查询结构	113
9.2 原子属性的操作	113
9.2.1 原子属性	113
9.2.2 取代基	115
9.2.3 隐含氢	116
9.2.4 环键数	116
9.2.5 不饱和度	117
9.2.6 反应变化	117
9.2.7 立体反应	118
9.2.8 特殊价态	118
9.3 键	119
9.3.1 键属性	119
9.3.2 键类型	120
9.3.3 拓扑	121
9.3.4 反应中心	121
9.4 通用俗名	122
9.5 元素列标记	123
9.6 元素非列标记	123
9.7 取代基和连接点	124
9.7.1 取代基	124
9.7.2 连接点工具	125
9.8 多连接点	126
9.9 匿名取代基	127
9.10 导出兼容性	127
第10章 模板图形	128
10.1 模板工具	128
10.2 用模板作图	130
10.3 建立模板和模板文档	131

10.3.1	建立模板窗口	131
10.3.2	建立模板图形	132
10.3.3	模板的方向	132
10.3.4	调整模板格的大小	132
10.3.5	模板面板	133
10.3.6	保存模板文档	133
第 11 章	反应标记	134
11.1	反应标记图	134
11.2	自动标记反应	134
11.3	手动标记	135
11.4	反应标记图的输出	136
11.5	反应标记图的清除	136
第 12 章	页面布局的处理	137
12.1	控制绘制区域	137
12.1.1	控制绘制区	137
12.1.2	在文档窗口内滚动	137
12.1.3	页面设置	138
12.1.4	变化透视效果	140
12.2	安排结构	141
12.2.1	使用标尺	141
12.2.2	使用交叉准线	142
12.2.3	结构图形居中页面	144
12.2.4	对齐物体	144
12.2.5	分布物体	145
12.2.6	层次排序	145
第 13 章	信息共享	148
13.1	ChemDraw 文档之间的信息传输	148
13.1.1	拷贝传输	148
13.1.2	剪切传输	148
13.1.3	粘贴传输	148
13.1.4	按动传输	149
13.1.5	自动调节设置	150
13.2	嵌入结构图形	151
13.3	导入和导出	152
13.3.1	用剪贴板导入和导出	152

13.3.2	建立 SMILES 字符串	153
13.3.3	剪贴板粘贴 SMILES	154
13.3.4	建立 SLN 字符串	154
13.4	用文件格式导入和导出	155
附录 A	ChemDraw 的化学意义	159
A.1	必备工具概述	159
A.1.1	必备工具	159
A.1.2	惯例限制	159
A.1.3	灵活利用工具	160
A.2	ChemDraw 中的化学分类	161
A.2.1	键	161
A.2.2	原子符号	161
A.2.3	化学-意义文本	162
A.2.4	电荷	163
A.2.5	同位素和元素	163
A.2.6	自由基	164
A.2.7	H-点/H-划	164
A.2.8	配合物	164
A.2.9	多中心连接	165
A.2.10	立体化学的标志	165
A.2.11	查询属性	166
A.2.12	分析信息	166
附录 B	指定路径	168
B.1	Windows 系统	168
B.2	Macintosh 系统	169
附录 C	技术支持	170
C.1	序列号	170
C.2	故障检查	171
C.2.1	启动	171
C.2.2	执行	171
C.2.3	系统崩溃	172
附录 D	文件设置	173
D.1	ACS-1996	173
D.2	Can. J. Chem	173

D. 3	J. Mol. Mod	174
D. 4	RSC-1995	174
D. 5	Synthesis/SYNLETT	175
D. 6	New Document	176
D. 7	New Slide	176
附录 E	Apple Events (Macintosh)	177
附录 F	化学文件格式	178
F. 1	Connection Table 格式文件	178
F. 1. 1	对 Cyclohexanol 结构文件的解释	178
F. 1. 2	Connection Table 格式的键类型	179
F. 2	Standard Molecular Data File 格式文件	180
附录 G	Chem3D 实例指导	183
G. 1	利用键工具建立模型	183
G. 1. 1	乙烷模型	184
G. 1. 1. 1	建立模型	184
G. 1. 1. 2	旋转模型	184
G. 1. 1. 3	模型结构信息	185
G. 1. 2	乙烯模型	186
G. 1. 3	环己烷模型	186
G. 1. 3. 1	氢原子的隐含	186
G. 1. 3. 2	添加原子	186
G. 1. 3. 3	添加序列编号和原子符号	187
G. 2	利用 Replacement Text 建立模型	188
G. 2. 1	替换元素	188
G. 2. 1. 1	单元素变换	188
G. 2. 1. 2	多元素变换	189
G. 2. 1. 3	利用不同的名存储模型拷贝	190
G. 2. 2	利用符号建立模型	190
G. 2. 2. 1	4-甲基-2-戊醇模型	190
G. 2. 2. 2	1, 2-双甲基环戊烷模型	191
G. 2. 3	利用子结构建立模型	191
G. 2. 3. 1	硝基苯分子模型	191
G. 2. 3. 2	Ibuprofen 分子模型	192
G. 2. 3. 3	十肽菌素分子模型	192
G. 2. 3. 4	十二丙氨酸醇分子模型	193
G. 3	检查结构能量	194

G. 4	检索结构信息	198
G. 5	ChemDraw 与 Chem3D 信息转换	200
G. 6	分子轨道	201
G. 7	绘制表面特性	202
附录 H	ChemFinder 实例指导	204
H. 1	数据库检索	204
H. 1. 1	子结构检索	204
H. 1. 1. 1	子结构检索	204
H. 1. 1. 2	检索结果验证	206
H. 1. 2	文本检索	207
H. 1. 3	数字检索	207
H. 1. 4	混合检索	208
H. 2	反应查询	208
H. 2. 1	反应物查询	209
H. 2. 2	产物查询	210
H. 2. 3	产物转变查询	210
H. 3	表单的制作	211
H. 3. 1	绘制空白表框	212
H. 3. 2	建立表框标签	213
H. 3. 3	制作图片	214
H. 3. 4	用选择工具编辑数据框	214
H. 3. 5	删除框	215
H. 3. 6	储存和关闭	215
H. 4	打开数据库	215
H. 4. 1	打开 Box Properties 对话框	215
H. 4. 2	打开 Box Properties: Database 对话框	216
H. 4. 3	添加内容	217
H. 5	建立自己的数据库	219
H. 5. 1	建立数据库表单	219
H. 5. 2	字段的建立	220
H. 5. 3	字段的分配	222
H. 5. 4	数据记录	223
H. 6	制作子表单	224
H. 6. 1	子表单数据框	224
H. 6. 2	分别打开主表单和子表单数据	224
H. 6. 3	建立主表单和子表单的数据联系	225
H. 6. 4	数据浏览	227

第1章 绪 论

1.1 安装 ChemDraw

1.1.1 安装 ChemDraw 对操作系统的要求

安装 ChemDraw 对操作系统的要求:

- ChemDraw 大部分运行在 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 Windows(3.1 版本以上)、Windows NT(3.5 版本以上)和 Macintosh。本书介绍的操作系统是 Windows。
- 在 Windows 3.1 操作系下运行时,最少有 8MB 的内存,还必须安装 WIN32s DLLs; 在 Windows 95 操作系下运行时,最少有 8 MB 的内存和开启 virtual memory(虚拟内存)。
- 至少需要 10 MB 的硬盘和一定的运行空间。

1.1.2 安装 ChemDraw

把 ChemDraw 软盘插入任何软盘驱动器,从 Windows 的程序管理器中选择 RUN 命令,在命令栏中键入所用的驱动器名,然后键入 install。

1.1.3 启动程序

只要在程序管理中双击 ChemDraw 即可启动程序。

1.2 ChemDraw 界面结构

ChemDraw 软件最大的特点就是界面结构很简单,包括文件窗口(菜单栏、工具栏、滚动栏、编辑区、状态/信息栏等)和图形工具板两大结构,如图 1-1 所示。

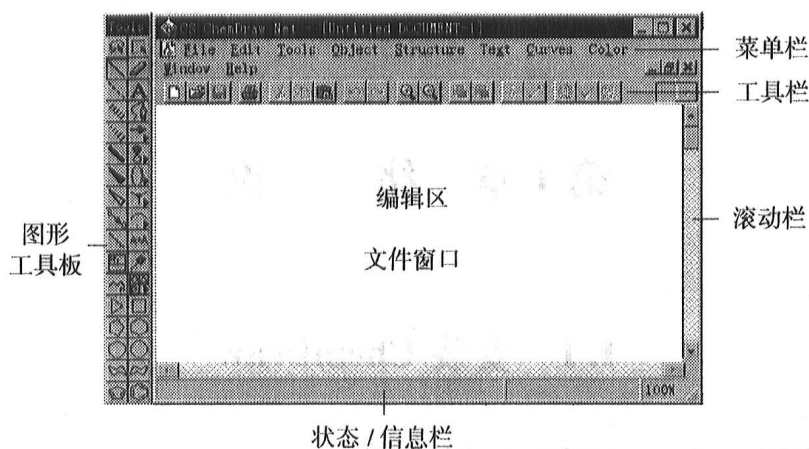


图 1-1 ChemDraw 软件的界面结构

1.2.1 文件窗口

ChemDraw 文件窗口的中心部分含有将来用来绘制图形结构的编辑区域。对于 ChemDraw 文件窗口的基本组成部分的功能,说明如下。

- 标题栏: 含有应用文件或操作文件的窗口标题。选中窗口标题栏可移动文件窗口。
- 编辑区域: 在 ChemDraw 文件窗口的中心部分, 供绘制图形结构的工作区。
- 菜单栏: 含有为操作 ChemDraw 应用文件和其内容的命令设置。
- 工具栏: 含有 Windows 常用命令图标, 当单击这些命令图标时, 其效果与选择菜单中相应的命令一样。
- 最小/最大化、还原/关闭按钮: 可使文件窗口最小化、最大化、还原或关闭。
- 滚动栏: 含有滚动框(以较小或较大幅度滚动文件的窗口)、滚动按钮(在箭头方向以较大幅度滚动文件的窗口)和滚动条(以较大幅度滚动文件的窗口)。
- 状态/信息栏: 含有描述绘制图形的简捷的信息, 例如, 键长和键角, 或窗口的放大信息。在 Windows 版本中, 信息栏是显示工具和放大信息的状态栏。

1.2.2 图形工具图标板

图形工具图标板(或称图形工具板)含有所有能够在文件窗口绘制结构图形的工具, 选择了这些工具的图标后, 光标将随之改变成相应的工具形状。工具板见图 1-2。

选择工具时, 一次只能选一个。在图标右下角有小黑三角的工具图标里, 含有进一步的子工具图标板。用鼠标按下含三角的图标时, 子工具图标板将显示出来。

工具板上的工具如下: