

国内第一本详细介绍ChemOffice的图书

# ChemOffice 2008 实用教程

化学结构绘图

分子模拟

数据整合

曾 炜 孙延辉 李红霞 编著

## 优秀的软件

集成分子结构绘制、计算、预测及数据库的建立、检索等功能

## 全面的讲解

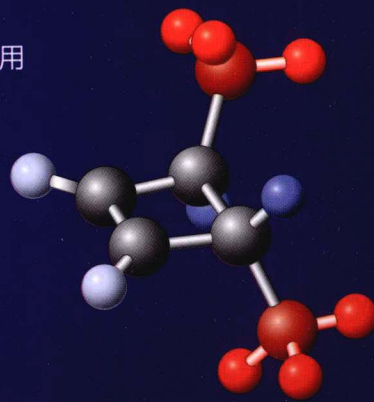
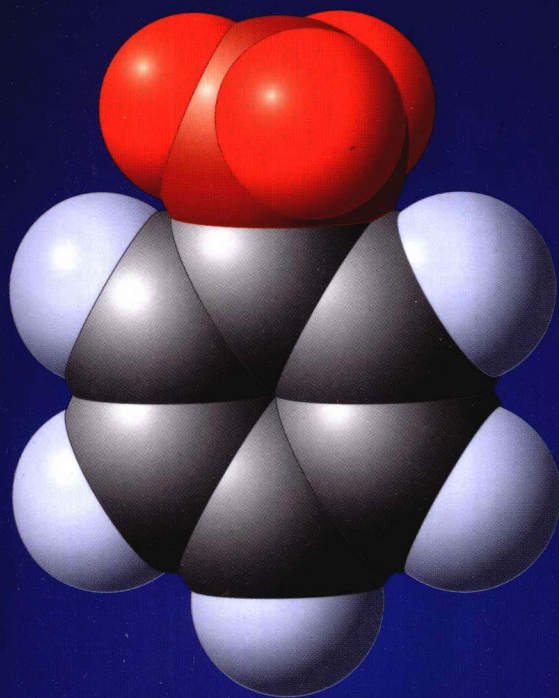
涵盖三个主要功能模块，图文并茂地介绍软件的使用方法

## 丰富的内容

凝聚作者多年的学习心得、使用经验及技巧

## 轻松的学习

内容编排由浅及深，易学易用



化学工业出版社

国内第一本详细介绍ChemOffice的图书

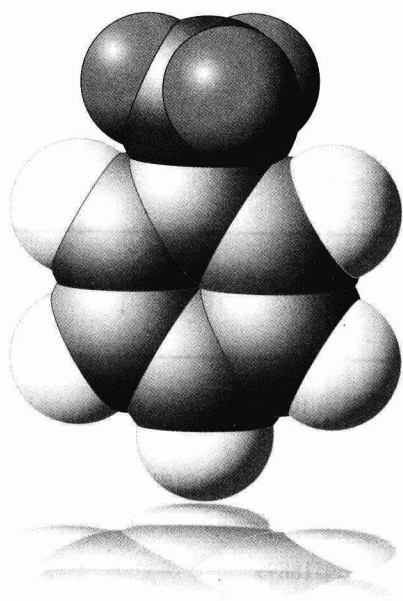
# ChemOffice 2008 实用教程

化学结构绘图

分子模拟

数据整合

曾 炜 孙延辉 李红霞 编著



化学工业出版社

· 北 京 ·

本书主要介绍利用 ChemOffice 2008 进行化学结构绘图、分子模拟以及化学信息搜寻整合等方面的内容。其中,详细介绍了绘制化学结构式、反应式、反应流程图,绘制化学结构式的 3D 图形,进行半经验计算以及预测分子轨道的形状、查询现有的化学信息、建立本地化学查询数据库等多方面的内容。各部分内容的介绍既有软件的应用与操作方法和技巧,又融入了 ChemOffice 基础知识和要点,还通过大量实例具体说明操作与绘图过程,语言通俗易懂、实例丰富、图文并茂,方便用户学习。

本书可作为化学化工专业人员学习 ChemOffice 2008 入门与提高的书籍,也可作为大专院校应用化学、材料学、生物医药等专业教师及学生、科研部门的化学工作者、各单位化学技术人员及化学界其他相关人士学习 ChemOffice 2008 的教材或教学参考书。

## 图书在版编目(CIP)数据

ChemOffice 2008 实用教程:化学结构绘图 分子模拟  
数据整合 / 曾炜,孙延辉,李红霞编著. —北京:化学  
工业出版社,2009.9

ISBN 978-7-122-06409-7

I. C… II. ①曾…②孙…③李… III. 化学-应用软  
件, ChemOffice 2008-教材 IV. 06-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 131388 号

---

责任编辑:陈 静 李 萃

装帧设计:尹琳琳

责任校对:王素芹

---

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印 装:化学工业出版社印刷厂

787mm×1092mm 1/16 印张 18<sup>1</sup>/<sub>2</sub> 字数 462 千字 2009 年 9 月北京第 1 版第 1 次印刷

---

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

---

定 价:39.80 元

版权所有 违者必究

# 序

随着信息社会的到来, 电脑正渗入到社会日常生活和工作的每个角落。使用过电脑的人大多很熟悉微软公司的著名软件 Office, 它可以帮助人们进行文字处理、统计数据、形象化演示等, 这不仅大大减轻了处理各种文件带来的负担, 并且扩展了传统文书处理的范围。由于文字、数据、图像有机地联系在一起, 使思想的表达和理解得以更好地进行。从这个意义上来看, 美国剑桥软件公司在其化学软件 ChemOffice 的名字中嵌入 Office, 使人很容易联想到微软的 Office 软件, 巧妙而又恰当地反映了这款软件的强大功能。

化学科学发展到今天, 已经形成一套独特的国际通用语言符号系统, 但要想在个人电脑使用这套系统, 没有专业软件的辅助是行不通的。ChemOffice 正是这样一款软件, 它含有 ChemDraw (化学结构绘图)、Chem3D (分子模拟分析绘图)、ChemFinder (化学信息搜寻整合系统) 几个组件, 可以直观理解为化学世界服务的办公自动化软件。

考虑到大型软件往往较难掌握和使用, 曾炜博士等编写了该书, 旨在帮助国内众多从事与化学教学和研究相关的人士了解和灵活运用 ChemOffice, 提高工作效率和质量。该书的编排由浅及深, 兼顾初学者和高级用户。第 1 章“ChemOffice 基础知识”首先介绍了 ChemOffice 的用途、功能以及安装和启动方法, 方便读者入门, 并对其他化学绘图软件进行了简要介绍。第 2 章“ChemDraw 操作基础”针对执行该软件后的操作展开讨论, 使读者对工作界面、文件和绘图的基本操作等有一个大概的了解。紧接着, 作者在第 3 章立即进入这款软件的核心也是最常用的功能, 即如何利用 ChemDraw 绘制图形, 详细介绍了绘图工具, 以及绘制结构式、反应式、生物分子、反应装置等的步骤。事实上, 除了绘制图形外, ChemDraw 还有其他一些扩展功能, 如预测某一化学结构物质的物理和热力学性质、进行结构式和 IUPAC 标准命名之间的转换等, 这些内容在第 4 章“ChemDraw 的扩展功能”中有详细的介绍。该书在第 5 章转入 ChemOffice 另一个组件——Chem3D, 由于它与二维的 ChemDraw 不同, 因而同样首先简单介绍了其工作环境和基本操作, 而具体如何利用 Chem3D 进行建模则安排在第 6 章介绍, 除了各种绘制方法外, 对模型进行操作、分析, 以及二维与三维图形之间的转换等也有论及。第 7 章“化学计算”集中介绍了通过 Chem3D 开展分子力学和量子力学计算的工作, 几种主流的计算方法均有详细的使用过程介绍。在掌握 Chem3D 的基本用法和功能之后, 第 8 章“Chem3D 综合实例”通过实际操作举例说明红外光谱和核磁谱图的预测、过渡态能量的计算等, 帮助读者了解 Chem3D 的整体运行。最后, 作者在第 9 章介绍了 ChemOffice 的第三个组件 ChemFinder, 充分利用本机和网络资源, 建立个性化数据库。

综观全书, 内容编排详略得当, 大量的电脑屏幕截图使人有身临其境之感, 读者按图索骥, 很容易上手并逐步掌握要领。作者曾炜博士等作为化学领域的专业人士, 能够深刻体会同行的需求和困难, 因此该书的实用性和可读性都十分强, 相信不同背景和不同需求的读者在阅读后都会有所收获。

章明秋

2009 年 6 月 29 日于康乐园

# 前 言

在信息技术日益发展的今天，化学化工软件已成为相关专业工作者日常工作中不可或缺的基本工具。它不仅可以解决化学计算中的复杂问题，而且可以利用虚拟的程序模拟化学世界的微观结构，并可以将微观结构的光谱形态等形象直观地展示出来，因此熟悉常用化学化工软件并掌握其使用方法便成为相关专业工作者必备的技能之一。

ChemOffice Ultra 是美国剑桥软件公司研究和开发的一款化学专业应用软件，是目前世界上最优秀的桌面化学软件之一。它集强大的应用功能于一身，提供了优秀的化学辅助系统，可使化学工作者的日常工作更加便捷。经过多年的发展，ChemOffice 系列软件已经成为国内、外化学化工领域的常用软件。迄今为止，该软件已经发布了 11 个版本，目前最新版本为 CambridgeSoft ChemOffice Ultra 2008（简称 ChemOffice 2008）。

ChemOffice 2008 主要包括 ChemDraw（化学结构绘图）、Chem3D（分子模拟分析绘图）和 ChemFinder（化学信息搜寻整合系统）模块，此外还加入了 E-Notebook、BioAssay Pro、量化软件 MOPAC、Gaussian 和 GAMESS 的界面，ChemSAR、Server Excel、ClogP、BioViz、CombiChem/Excel 等一系列完整的软件。

在 ChemOffice 2008 套件中，ChemDraw 模块是最受欢迎的化学结构绘图软件之一，是绘制化学结构最快速、最精确的工具，是各期刊杂志指定的化学结构绘图格式软件；Chem3D 模块是提供工作站级的 3D 分子轮廓图及分子轨道的特性分析，并能和数种量子化学软件结合在一起的软件；ChemFinder 模块是进行化学信息搜寻整合系统的软件，它既可以建立、储存及搜索化学数据库，也可以与 ChemDraw、Chem3D 联合使用，还可以使用现成的化学数据库。

目前，ChemOffice 在国内的应用主要集中于 ChemDraw、Chem3D 及 ChemFinder 模块，本书即由此入手，分 3 部分对 ChemOffice 进行介绍。其中，第 1~4 章主要介绍 ChemDraw 基础知识、如何绘制化学结构式、反应式、反应流程图等多个方面的内容，以及如何采用 ChemDraw 对化学结构式进行相关的物理、化学性质方面的表征等；第 5~8 章主要介绍 Chem3D 基础知识、如何绘制化学结构式的立体结构形式，以及用 MOPAC、Gaussian 或 GAMESS 运行半经验计算以及预测分子轨道的形状等；第 9 章主要介绍如何利用 ChemFinder 查询现有的化学信息、建立本地化学查询数据库等多方面的应用。

本书实例丰富，图文并茂，使软件的使用方法更为直观易懂，方便用户学习。本书可作为化学化工专业人员学习 ChemOffice 2008 的入门与提高的书籍，也可作为大专院校应用化学、材料学、生物医药等专业教师及学生、科研部门的化学工作者、各单位化学技术人员及化学界的其他相关人士学习 ChemOffice 2008 的教材或教学参考书。

本书由曾炜（现于香港理工大学从事博士后研究工作）、孙延辉（中国神华煤制油化工有限公司）、李红霞（塔里木大学）编著，同时参与编写工作的还有王坤杰（塔里木大学）、贾玉霞（西北师范大学附属中学）、武新波（香港理工大学）、赵斌（湘潭大学）、张薇（中国

化学工程集团总公司)。在本书的撰写过程中，他们付出了辛勤的劳动，在此一并表示衷心的感谢！此外，在本书的编写过程中得到了恩师章明秋教授（长江学者、中山大学特聘教授）的鼓励 and 大力支持，并于百忙之中抽出宝贵的时间对本书进行审阅并撰写序言，在此表示最诚挚的谢意！

由于编者水平有限，书中难免存在疏漏和不足之处，敬请各位读者批评指正。

编者

2009年6月

# 目 录

|                               |           |
|-------------------------------|-----------|
| <b>第 1 章 ChemOffice 基础知识</b>  | <b>1</b>  |
| 1.1 什么是 ChemOffice            | 1         |
| 1.2 发展历史                      | 1         |
| 1.3 应用领域                      | 2         |
| 1.4 组件                        | 2         |
| 1.4.1 ChemDraw                | 2         |
| 1.4.2 Chem3D                  | 3         |
| 1.4.3 ChemFinder              | 4         |
| 1.5 新增功能                      | 4         |
| 1.6 如何获得帮助                    | 5         |
| 1.7 安装与启动                     | 5         |
| 1.7.1 系统配置要求                  | 5         |
| 1.7.2 系统的安装、启动与退出             | 6         |
| 1.8 其他化学绘图软件                  | 8         |
| <b>第 2 章 ChemDraw 操作基础</b>    | <b>10</b> |
| 2.1 ChemDraw 的工作环境            | 10        |
| 2.1.1 工作界面                    | 10        |
| 2.1.2 标题栏                     | 11        |
| 2.1.3 菜单栏                     | 12        |
| 2.1.4 工具栏                     | 13        |
| 2.1.5 图形工具箱                   | 14        |
| 2.1.6 编辑/绘图区                  | 15        |
| 2.2 文件基本操作                    | 15        |
| 2.3 绘图操作基础                    | 17        |
| 2.3.1 图形基本操作                  | 17        |
| 2.3.2 “Undo”和“Redo”命令         | 19        |
| 2.3.3 插入对象                    | 19        |
| 2.4 自定义 ChemDraw 的工作界面        | 20        |
| 2.4.1 页面参数的设置                 | 20        |
| 2.4.2 文档的设置                   | 24        |
| 2.4.3 工具条的显示与隐藏               | 28        |
| <b>第 3 章 利用 ChemDraw 绘制图形</b> | <b>33</b> |
| 3.1 绘图工具                      | 33        |

|        |                                              |    |
|--------|----------------------------------------------|----|
| 3.1.1  | 键工具简介.....                                   | 33 |
| 3.1.2  | 绘图工具的使用.....                                 | 38 |
| 3.1.3  | 绘图实例.....                                    | 39 |
| 3.2    | 文本的操作.....                                   | 40 |
| 3.2.1  | 文本的输入.....                                   | 40 |
| 3.2.2  | 文本的编辑.....                                   | 41 |
| 3.2.3  | 原子标记.....                                    | 42 |
| 3.3    | 绘制箭头、弧及其他图形.....                             | 45 |
| 3.4    | 绘制结构式.....                                   | 48 |
| 3.4.1  | 绘制普通化学结构式.....                               | 48 |
| 3.4.2  | 绘制反应中间体.....                                 | 50 |
| 3.4.3  | 绘制复杂环结构.....                                 | 52 |
| 3.4.4  | 绘制 Fischer 投影式.....                          | 54 |
| 3.4.5  | 绘制透视图.....                                   | 55 |
| 3.4.6  | 绘制 Newman 投影式.....                           | 57 |
| 3.4.7  | 绘制立体化学结构式.....                               | 59 |
| 3.5    | 绘制反应式.....                                   | 60 |
| 3.5.1  | 绘制反应方程式.....                                 | 60 |
| 3.5.2  | 绘制反应历程.....                                  | 67 |
| 3.6    | 轨道和化学符号.....                                 | 69 |
| 3.6.1  | 轨道工具简介.....                                  | 69 |
| 3.6.2  | 轨道工具绘图实例.....                                | 69 |
| 3.6.3  | 化学符号工具简介.....                                | 71 |
| 3.7    | 绘制生物分子.....                                  | 73 |
| 3.7.1  | 生物分子模板工具简介.....                              | 74 |
| 3.7.2  | 绘制 DNA/RNA 分子图像.....                         | 74 |
| 3.7.3  | 绘制 $\beta$ -麦芽糖酶 ( $\beta$ -Maltose) 结构..... | 75 |
| 3.7.4  | 绘制 DNA 双螺旋结构.....                            | 76 |
| 3.8    | 绘制简单的反应设备.....                               | 79 |
| 3.9    | 绘制 TLC 图形.....                               | 81 |
| 3.10   | 化学查询工具.....                                  | 82 |
| 3.10.1 | 化学查询工具简介.....                                | 82 |
| 3.10.2 | 化学查询工具的使用.....                               | 83 |
| 3.11   | 高级绘图技巧.....                                  | 85 |
| 3.11.1 | 结构展开与调整.....                                 | 85 |
| 3.11.2 | 名称与结构之间的转化.....                              | 87 |
| 3.11.3 | 俗名的使用.....                                   | 87 |
| 3.11.4 | 多中心结构与多连接标记.....                             | 89 |
| 3.11.5 | 图形颜色调整.....                                  | 90 |

|                                       |            |
|---------------------------------------|------------|
| 3.11.6 获取结构式的 3D 图形 .....             | 91         |
| 3.12 综合实例 .....                       | 92         |
| 3.12.1 苯亲电取代反应进程 - 位能变化曲线图的绘制 .....   | 92         |
| 3.12.2 立体化学反应历程的绘制 .....              | 95         |
| <b>第 4 章 ChemDraw 的扩展功能 .....</b>     | <b>99</b>  |
| 4.1 显示分析信息 .....                      | 99         |
| 4.2 显示物理性质 .....                      | 101        |
| 4.3 显示元素周期表 .....                     | 102        |
| 4.4 预测 NMR 谱 .....                    | 103        |
| 4.4.1 $^1\text{H}$ -NMR 谱预测 .....     | 104        |
| 4.4.2 $^{13}\text{C}$ -NMR 谱预测 .....  | 105        |
| 4.5 结构式与命名互相转换 .....                  | 106        |
| 4.5.1 由结构式给出 IUPAC 标准命名 .....         | 107        |
| 4.5.2 由 IUPAC 标准命名给出结构式 .....         | 107        |
| 4.6 ChemDraw 与 Word 及 Chem3D 关联 ..... | 109        |
| 4.6.1 ChemDraw 与 Word 关联 .....        | 109        |
| 4.6.2 ChemDraw 与 Chem3D 关联 .....      | 110        |
| 4.7 ChemDraw 的在线工具 .....              | 111        |
| 4.7.1 在线查找 .....                      | 111        |
| 4.7.2 在线浏览 .....                      | 113        |
| 4.7.3 在线注册 .....                      | 113        |
| <b>第 5 章 Chem3D 操作基础 .....</b>        | <b>114</b> |
| 5.1 Chem3D 的工作环境 .....                | 114        |
| 5.1.1 工作界面 .....                      | 114        |
| 5.1.2 标题栏 .....                       | 115        |
| 5.1.3 菜单栏 .....                       | 115        |
| 5.1.4 工具栏 .....                       | 125        |
| 5.1.5 3D 图形显示区 .....                  | 126        |
| 5.1.6 消息显示窗口 .....                    | 126        |
| 5.1.7 动画工具栏 .....                     | 127        |
| 5.2 文件基本操作 .....                      | 127        |
| 5.3 图形基本操作 .....                      | 128        |
| 5.4 自定义 Chem3D 的工作界面 .....            | 129        |
| 5.4.1 页面参数设置 .....                    | 129        |
| 5.4.2 文档的设置 .....                     | 132        |
| 5.4.3 工具条的显示与隐藏 .....                 | 135        |
| <b>第 6 章 Chem3D 模型的建立及操作 .....</b>    | <b>136</b> |
| 6.1 3D 模型的建立 .....                    | 136        |
| 6.1.1 从已有文件中导入 .....                  | 136        |

|              |                                      |            |
|--------------|--------------------------------------|------------|
| 6.1.2        | 从 ChemDraw 中导入.....                  | 137        |
| 6.1.3        | 使用键工具绘制.....                         | 139        |
| 6.1.4        | 使用文本工具绘制.....                        | 143        |
| 6.1.5        | 使用绘图模板绘制.....                        | 145        |
| 6.2          | 对模型的操作.....                          | 149        |
| 6.2.1        | 平移及旋转.....                           | 150        |
| 6.2.2        | 轴的显示及隐藏.....                         | 153        |
| 6.2.3        | 模型的放大及缩小.....                        | 153        |
| 6.2.4        | 显示原子符号、编号及背景颜色.....                  | 153        |
| 6.2.5        | 模型显示模式.....                          | 155        |
| 6.3          | 利用 Chem3D 进行分析.....                  | 155        |
| 6.3.1        | 相关数据的显示.....                         | 156        |
| 6.3.2        | 结构调整.....                            | 159        |
| 6.4          | 2D 图形与 3D 图形的转换.....                 | 159        |
| 6.4.1        | 2D 图形与 3D 图形之间的立体关系.....             | 159        |
| 6.4.2        | 2D 图形转化为 3D 图形.....                  | 160        |
| 6.4.3        | 3D 图形转化为 2D 图形.....                  | 161        |
| <b>第 7 章</b> | <b>化学计算.....</b>                     | <b>163</b> |
| 7.1          | MM2 计算.....                          | 164        |
| 7.1.1        | 能量最低计算.....                          | 164        |
| 7.1.2        | 分子动力学计算.....                         | 165        |
| 7.2          | GAMESS 计算.....                       | 168        |
| 7.2.1        | Minimize Energy 计算.....              | 169        |
| 7.2.2        | Optimize to Transition State 计算..... | 170        |
| 7.2.3        | Compute Properties 计算.....           | 171        |
| 7.2.4        | Run Frequency 计算.....                | 173        |
| 7.2.5        | 预测 IR/Raman 光谱.....                  | 176        |
| 7.2.6        | 预测 NMR 谱.....                        | 178        |
| 7.3          | Gaussian 计算.....                     | 179        |
| 7.4          | Jaguar 计算.....                       | 179        |
| 7.5          | MMFF94 计算.....                       | 180        |
| 7.5.1        | 原子类型和电荷.....                         | 180        |
| 7.5.2        | 最小能量计算.....                          | 180        |
| 7.5.3        | 势能计算.....                            | 182        |
| 7.6          | MOPAC 计算.....                        | 182        |
| 7.6.1        | Minimize (Energy/Geometry) 计算.....   | 183        |
| 7.6.2        | Optimize to Transition State 计算..... | 184        |
| 7.6.3        | Compute Properties 计算.....           | 187        |
| 7.6.4        | 预测光谱.....                            | 190        |

|                            |            |
|----------------------------|------------|
| <b>第8章 Chem3D 综合实例</b>     | <b>192</b> |
| 8.1 实例一: 预测红外光谱            | 192        |
| 8.2 实例二: 预测核磁共振谱           | 197        |
| 8.3 实例三: 计算过渡态能量           | 200        |
| <b>第9章 ChemFinder 操作基础</b> | <b>203</b> |
| 9.1 ChemFinder 的工作环境       | 204        |
| 9.1.1 对窗体和数据库的理解           | 204        |
| 9.1.2 使用 ChemFinder 数据库    | 205        |
| 9.1.3 工作界面                 | 205        |
| 9.1.4 工具栏                  | 207        |
| 9.1.5 状态栏                  | 208        |
| 9.2 窗体                     | 209        |
| 9.2.1 创建及保存窗体              | 209        |
| 9.2.2 编辑窗体                 | 211        |
| 9.2.3 窗体安全性                | 216        |
| 9.3 数据库                    | 219        |
| 9.3.1 创建数据库                | 219        |
| 9.3.2 打开数据库                | 227        |
| 9.3.3 数据库检索                | 230        |
| 9.4 创建个性化的数据库              | 250        |
| 9.4.1 在窗体中关联已有数据库          | 250        |
| 9.4.2 增加记录                 | 253        |
| 9.4.3 BioViz 组件            | 258        |
| 9.4.4 设置子窗体                | 271        |
| 9.4.5 化合物剖面图               | 275        |



## 第1章 ChemOffice 基础知识

### 【本章知识要点】

- 🔧 ChemOffice 简介。
- 🔧 ChemOffice 2008 的组件。
- 🔧 ChemOffice 2008 的安装与启动。



### 1.1 什么是 ChemOffice

美国剑桥公司的 ChemOffice 软件是一款优秀的化学软件，它集强大的应用功能于一身，目前正被无数科学工作者使用。ChemOffice 软件是针对专业化学绘图所设计，可以绘制各式各样的化学键、环、轨道等，并可以与软件中的数据库链接；对于不明的结构组织，可以通过输入适当的搜寻条件，查出可用的结构式；可以将化合物名称直接转为结构图，省去绘图的繁琐；也可以对已知结构的化合物命名，给出正确的化合物名称。ChemOffice 完整的应用系统涉及各个研发领域，从合成路线、化合物库设计、药物合成、细胞试验到结果和报告分析。另外，也可以利用此软件所提供的样板功能，大幅缩短制作文件所需花费的时间。ChemOffice 作为一款优秀的化学软件，将使化学研究人员的研究工作达到一个新的高度。



### 1.2 发展历史

从 1985 年美国剑桥公司发布第一个 ChemDraw 1.0 以来，该公司几乎每年都会推出包括 Windows 和 Macintosh 的新版本。但是除 ChemDraw 外，ChemOffice 的其他组件只适合在 Windows 操作平台下使用。Macintosh 用户可以购买 ChemDraw 软件，其中包含最新、最有特点的 ChemDraw 版本。从 1994 年开始，ChemOffice 的功能更加完善，所包含的组件基本涵盖了桌面化学软件的各个方面，如图 1-1 所示。迄今为止，ChemOffice 已经发布了 11 个版本。

目前，ChemOffice 的最新版本为 ChemOffice 2008，主要包括 ChemDraw（化学结构绘图）、Chem3D（分子模型及仿真）和 ChemFinder（化学信息搜寻整合系统）。此外还加入了 E-Notebook、BioAssay Pro、量化软件 MOPAC、Gaussian 和 GAMESS 的界面、ChemSAR、Server Excel、CLogP、CombiChem/Excel 等。ChemOffice Pro 还包含了全套 ChemInfo 数据库，包括 ChemACX、ChemACX-SC、Merck 索引和 ChemMSDX 等一系列完整的软件。

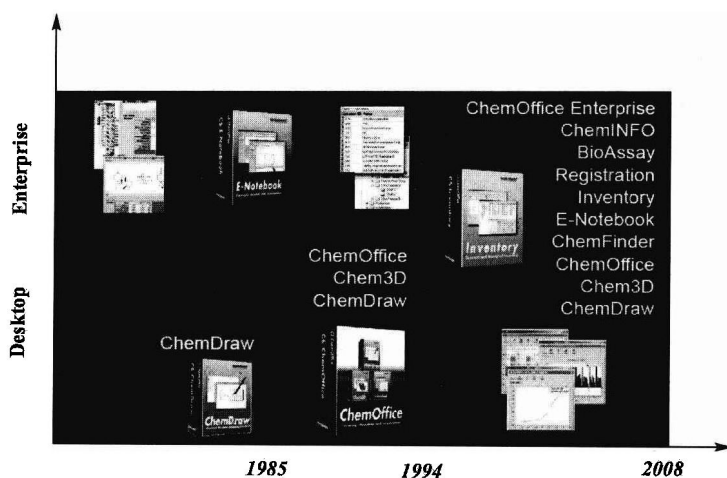


图 1-1 ChemOffice 发展历史

## 1.3 应用领域

对于各领域的化学化工工作者来讲, ChemOffice 的实用性和多功能性是无庸置疑的。ChemOffice 2008 化学办公系统将成为化学工作者成功的起点。化学工作者可以使用 ChemOffice 完成自己的想法, 与同事用自然的语言交流化学结构、模型和相关信息。在实验室, 可以使用 E-Notebook 整理化学信息、文件和数据, 并从中取得所需结果。ChemNMR 可预示分子化学结构的  $^{13}\text{C}$  和  $^1\text{H}$ -NMR 化学位移。ChemFinder/Word 通过用户的计算机或互联网, 可以在 Word、Excel、PowerPoint、ChemDraw 和 ISIS/Draw 等文件中搜索化学结构, 以便浏览或修改, 并输出到自己的目标文件中。ChemOffice 支持每一位化学工作者的日常工作和企业方案制订; 建立在 ChemOffice 服务器的数据库, 有助于各个研究部门的合作和信息的共享, 将促进科学研究的迅猛发展。

此外, ChemOffice 适用学科广泛, 覆盖了化学、化工、材料、生物、医药和环境等领域。

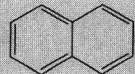
## 1.4 组件

ChemOffice 2008 主要包括以下 3 个模块。

- ☞ ChemDraw: 化学结构绘图 (Chemical Structure Drawing Standard)。
- ☞ Chem3D: 分子模拟分析绘图 (Molecular Modeling and Analysis)。
- ☞ ChemFinder: 化学信息搜寻整合系统 (Searching & Information Integration)。

### 1.4.1 ChemDraw

ChemDraw (化学结构绘图) 模块是世界上最受欢迎的化学结构绘图软件, 是各论文期



刊指定的格式。该模块包括以下几个组件。

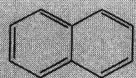
- ✿ AutoNom: 是 Beilsteiny 最强的软件, 现已包含于 ChemDraw Ultra 中, 它可按照 IUPAC 的标准自动命名化学结构。
- ✿ ChemNMR: 预测  $^{13}\text{C}$  和  $^1\text{H}$ -NMR 谱图, 节省实验费用。
- ✿ ChemProp: 预测沸点 (BP)、熔点 (MP)、临界温度 ( $T_c$ )、临界气压 (CP)、吉布斯自由能 (G)、logP、折射率 (n)、热结构 (HF) 等性质。
- ✿ ChemSpec: 提示用户输入 JCAMP 及 SPC 频谱数据, 以比较 ChemNMR 预测的结果。
- ✿ ClipArt: 高质量的实验室玻璃仪器图库, 用于搭配 ChemDraw 使用。
- ✿ Name $\leftrightarrow$ Struct: 输入 IUPAC 化学名称后可自动生成 ChemDraw 结构。

### 1.4.2 Chem3D

Chem3D (分子模拟分析绘图) 模块提供工作站级的 3D 分子轮廓图及进行分子轨道特性分析, 并与数种量子化学软件结合在一起, 可计算分子轨道的形状、显示分子表面及分子轨道。Chem3D 可以形象地描绘大分子化合物、蛋白质和核酸, 并突出其二级结构。同时 Chem3D 所具有的独特的模型浏览功能, 使用户能很容易地在一个庞大而复杂的模型中找到并高亮显示任何链、基团或原子。用户还可以方便地配置 Chem3D 的用户界面, 甚至可配置工具栏的布局, 以更方便地进行操作, 这些功能可实现工作环境的完全自定义化。更重要的是, 在新版的 Chem3D 11.0 中增加了 ChemDraw 面板, 可以更加容易地在 Chem3D 窗口中建立分子模型, 而且在 ChemDraw 面板中所进行的修改可以在 Chem3D 窗口中自动更新。另外, 用户可以把所绘制的模型粘贴到 Word 文件或 PowerPoint 演示文稿中, 也可以将其保存为不同的格式。

由于 Chem3D 提供完整的界面及功能, 已成为分子仿真分析最佳的前端开发环境。该模块包括以下几个组件。

- ✿ Excel Add-on: 与微软的 Excel 完全整合, 并可与 ChemFinder 联合使用。
- ✿ Gaussian Client: 量子化学计算软件 Gaussian 03W 的客户端接口, 可直接在 Chem3D 中运行 Gaussian, 并提供数种坐标格式 (需要安装 Gaussian 03W)。Gaussian 是做半经验计算和从头计算时使用最广泛的量子化学软件, 可以研究分子能量和结构、过渡态的能量和结构、化学键、反应能量、分子轨道、偶极矩和多极矩、原子电荷和电势、振动频率、红外和拉曼光谱、NMR、极化率和超极化率、热力学性质以及反应路径等。计算可以模拟在气相和溶液中的体系, 模拟基态和激发态。Gaussian 03 还可以对周期边界体系进行计算。Gaussian 是研究取代效应、反应机理、势能面和激发态能量的有力工具 (需另外获得 GAMESS)。
- ✿ CS GAMESS: 量子化学计算软件 GAMESS 的客户端接口, 可直接在 Chem3D 中运行 GAMESS 的计算。
- ✿ MOPAC: Fujitsu 公司的量子化学计算软件 MOPAC 已包含在 Chem3D Ultra 中, 搭配 Chem3D 的图形界面。分子计算的方法有 AM1、PM3、MNDO、MINDO/3 和新的 MINDO/d, 可以计算瞬时的几何形状及物理特性等。



### 1.4.3 ChemFinder

ChemFinder（化学信息搜寻整合系统）模块可以建立化学数据库、储存数据及搜索化学数据库，并可与 ChemDraw 和 Chem3D 联合使用，也可以使用现成的化学数据库。ChemFinder 是一个智能型的快速化学搜寻引擎，所提供的 ChemInfo 信息系统是目前世界上最丰富的数据库之一，包括 ChemACX、ChemINDEX、ChemRXN 以及 ChemMSDX，并不断有新的数据库加入。ChemFinder 可以从本机或网上搜寻 Word、Excel、PowerPoint、ChemDraw 和 ISIS 格式的分子结构文件。还可以与微软的 Excel 结合，可连接的关联式数据库包括 Oracle 及 Access，输入的格式包括 ChemDraw、MDL、ISIS、SD 及 RD 文件。

另外，ChemOffice 组件中还包括 ChemOffice WebServer——化学网站服务器数据库管理系统。用户可将 ChemDraw 和 Chem3D 发表在网站上，使用者可以使用 ChemDraw Pro Plugin 网页浏览工具在 Web 上查看 ChemDraw 的图形，或使用 Chem3D Std Plugin 网页浏览工具查看 Chem3D 的图形。同时 ChemOffice WebServer 提供 250000 种化学品数据库，包括 Sigma、Aldrich 和 Fisher Acros 等国外著名公司提供的信息。

## 1.5 新增功能

新版的 ChemOffice 2008 套件包括 ChemDraw Ultra 11.0、Chem3D Ultra 11.0、ChemFinder Ultra 11.0、E-Notebook Ultra 11.0 以及 ChemInfo 11.0 数据库，所有这些组件都增加了很多引人注目和更便捷的新功能。另外在 ChemOffice 11.0 的最新版本中还包括新的 Inventory Ultra 和 BioAssay Ultra。

下面简要介绍 ChemOffice 2008 的新增功能。

### 1. ChemDraw Ultra 11.0

该模块增强了 ChemNMR 功能，可更精确地预测分子化学结构的  $^{13}\text{C}$  和  $^1\text{H}$ -NMR 位移；整合了 BioDraw 模块，可方便地进行生物大分子绘图；增加了一个新的化学计量工具，让系统自动生成一个反应化学计量学的表格，可以自定义显示、变更单位和切换可见的相关信息，用户在绘图时，表格数据还可自动更新。

### 2. Chem3D Ultra 11.0

该模块具有更多和更好的视觉效果。新版本的 Chem3D 集成了新的 Gaussian 和 GAMESS 界面接口，并首次支持 Jaguar。另外，在新版的 Chem3D Ultra 11.0 中增加了 ChemDraw 面板，可以方便地在 Chem3D 中绘制分子图形。

### 3. ChemFinder Ultra 11.0

新的特性中增强了利用集成到系统的结构和数据储存库中的数据进行图形绘制以及可视化功能。绘图样式包括散点图、折线图和直方图，并有列表着色、数据筛选等功能。这样



用户就可以方便地分析数据, 预测趋势, 对同一个数据库中的多种各不相同的化合物进行计算和比较。而且ChemFinder Ultra 11.0配备了改进的ChemFinder/Oracle Cartridge连接, 使用新的CS Oracle Cartridge管理结构, 使得该软件具备Oracle的安全和效率, 方便在企业范围内共享Oracle的数据。

#### 4. Inventory Ultra 11.0

Inventory Ultra 11.0是一份全面的在线目录集, 包括目前405家行业领先化工厂商的产品信息, 如Sigma Aldrich、Fisher、Acros、Alfa Aesar、Lancaster、Novabiochem (EMD Biosciences, Inc.) 以及TCI America (所有厂商可以参见ChemACX.)。ChemACX能为用户快速地提供352300余种特殊化学物质(其中13420种是新物质)的订购信息和超过733100种产品(其中13420种是新产品), 并且每半年更新一次。Inventory Ultra 11.0为用户提供了一个完整的桌面化学品搜索系统, 用户可以方便地组织、存储和搜寻化学品的库存信息, 同时可以结合ChemACX在线数据库直接在数据库中搜索化学品的来源、商家以及购买信息等。

另外, ChemOffice 2008还在许多细节上进行了更新, 如在ChemDraw Ultra 11.0中, 箭头的绘制比以前的版本多了更多的形态。现在用户可以添加曲线到几乎所有的箭头上, 并可通过采用淡化、阴影或填充颜色等方式改变箭头外观。

### 1.6 如何获得帮助

用户可以通过多种不同的方式轻松获得 ChemOffice 2008 的帮助: ①在 ChemOffice 窗口模式下的“Help”菜单获取帮助文件; ②登录美国剑桥软件公司的主页 (<http://www.cambridgesoft.com/>) 获取技术支持。

### 1.7 安装与启动

#### 1.7.1 系统配置要求

ChemOffice 2008 可以在 Windows 上运行 (ChemDraw 2008 可在 Macintosh 操作系统上运行)。操作系统要求 Windows 2000、Windows XP 或 Windows Vista。需注意的是, 到目前为止, ChemOffice 2008 只支持 32 位操作系统, 而不支持 64 位 Windows XP 或 Windows Vista 系统。除此之外, ChemOffice 2008 的运行还需 Internet Explorer 6.0 或更高版本的浏览器, 同时也可支持 Mozilla Firefox 1.5 (包括 Mozilla Firefox 2.0)、Netscape 7.x 和 Mozilla 1.x 等其他浏览器。需特别注意的是, 为了能顺利运行 Chem & Bio 3D, 显示器分辨率至少要设置为 800×600 或以上。

**【注意】**在本书的撰写过程中以 Windows XP 作为操作平台, 因此在后面的介绍中, 所有的软件安装及使用都以 Windows XP 作为默认操作平台。



## 1.7.2 系统的安装、启动与退出

### 1. 安装

ChemOffice 2008 的安装有多种方式,大致可分为本地安装和网络安装两种类型,而作为一般用户,大多选择本地安装的方式。安装时,用户可以直接将 ChemOffice 2008 的安装光盘置入光驱中,软件即可自动运行(如软件本身没有自动运行,可打开光盘,双击 install.exe 文件),安装启动界面如图 1-2 所示。

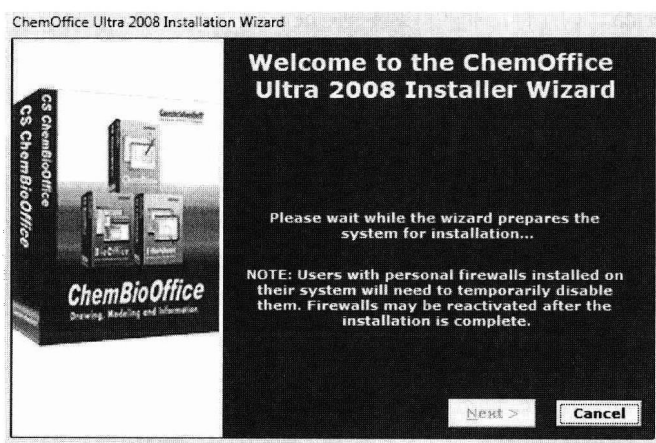


图 1-2 安装启动界面

用户可以按照安装向导一步步地对 ChemOffice 2008 进行安装及配置。程序默认安装目录为 C:\Program files\CambridgeSoft\ChemOffice2008,建议用户自定义安装路径,如图 1-3 所示,将程序安装到非系统盘中。

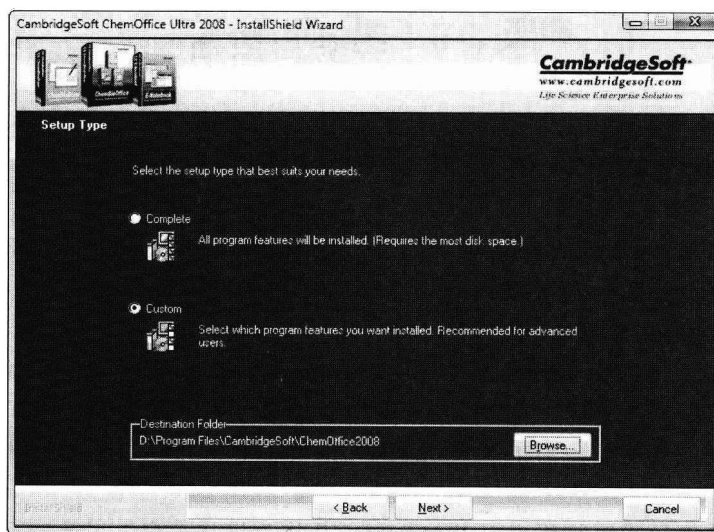


图 1-3 自定义安装路径