

第六部分 高级绘制技巧

6.1 俗名的使用

6.2 多中心结构

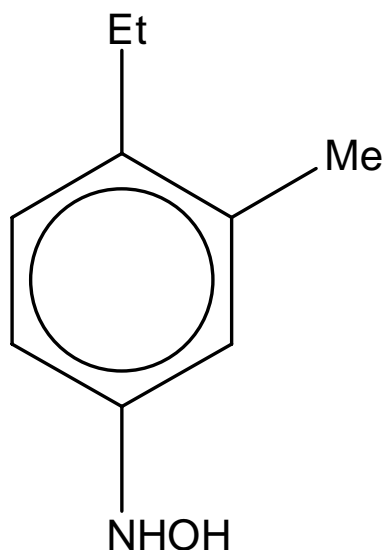
6.3 结构展开与调整

6.4 检查化学结构信息

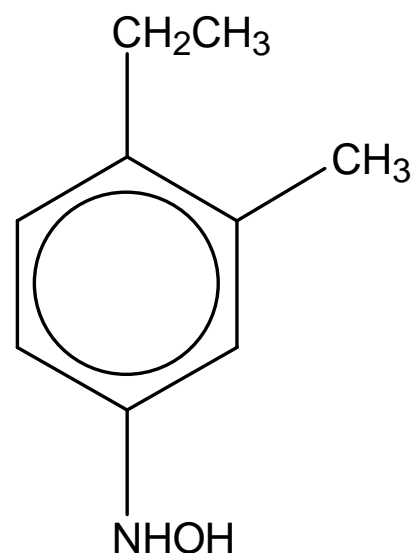
6.5 不定结构连接

第六部分 高级绘制技巧

6.1 俗名的使用

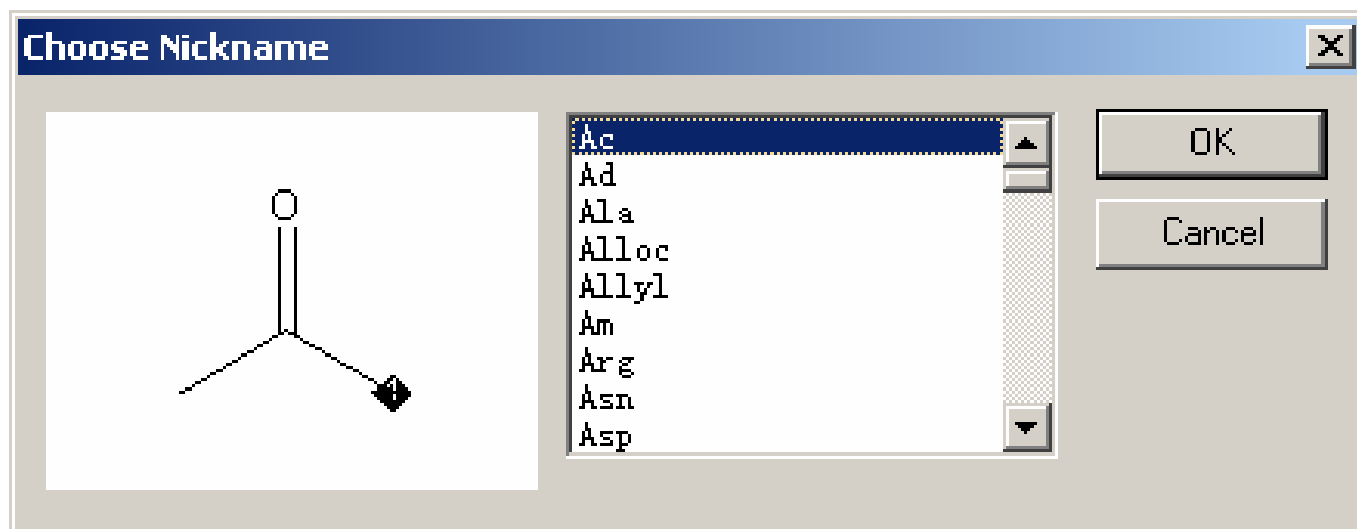


俗名式



普通式

第六部分 高级绘制技巧

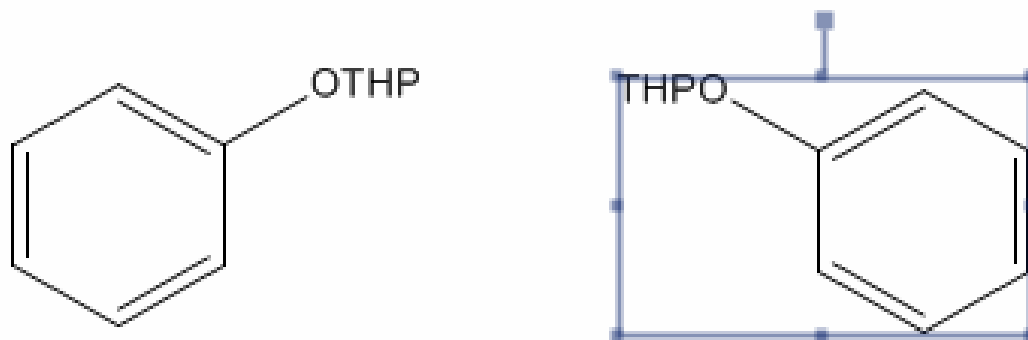


俗名列表对话框

第六部分 高级绘制技巧

注意：

- 1) 俗名只是一种代号
- 2) 用自动调整命令标记结构左面的官能团时，俗名字母位置发生变化

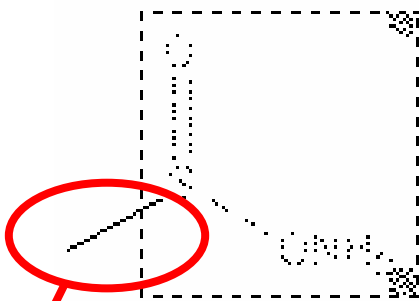


水平翻转

第六部分 高级绘制技巧

定义俗名

- 1) 建立一个结构，其中含有将定义为俗名的官能团；
- 2) 选择该官能团，其中必须有一个原子，它的一些键被选择，其余的键没被选择，表示官能团的连接键；



连接键

可定义俗名



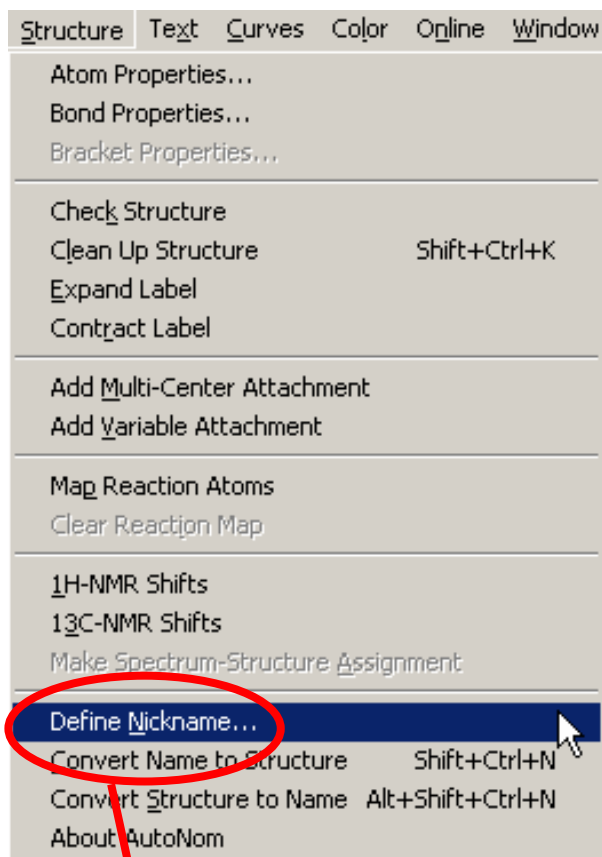
无连接键

不可定义俗名

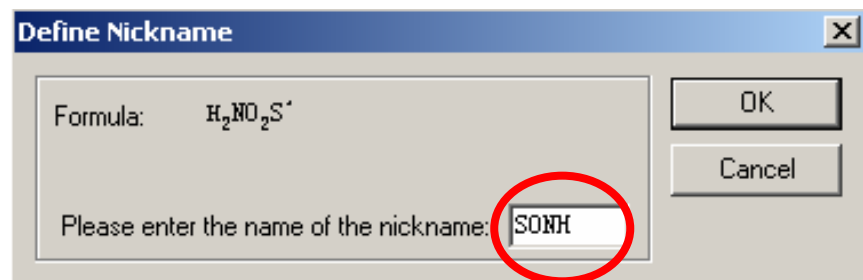
第六部分 高级绘制技巧

- 3) 从**Structure**菜单中，选择**Define Nickname**，出现**Define Nickname**对话框
- 4) 给俗名输入一个简短的名称
- 5) **OK**后，俗名被定义，即可用此俗名标记原子

第六部分 高级绘制技巧



定义俗名



输入俗名

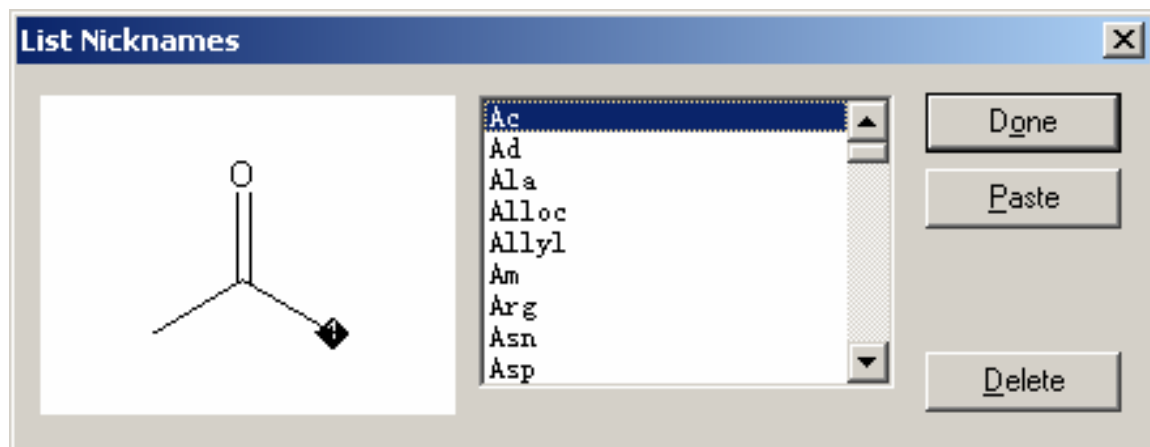
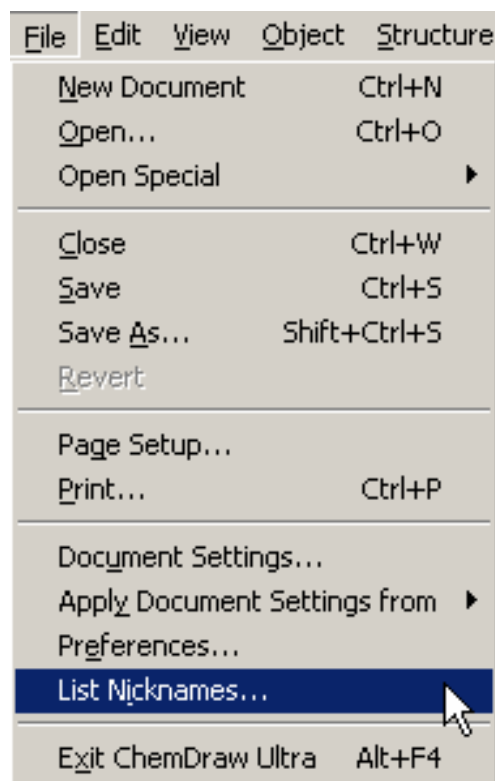
第六部分 高级绘制技巧

注意

- 1) 如果定义的俗名符号与元素符号相同，将被警告
元素符号被俗名符号取代
- 2) 要恢复元素的定义，从**File**菜单中选择
ListNicknames，可删除俗名定义

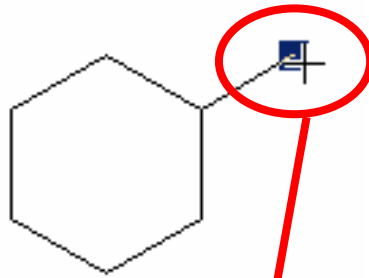
第六部分 高级绘制技巧

查看俗名



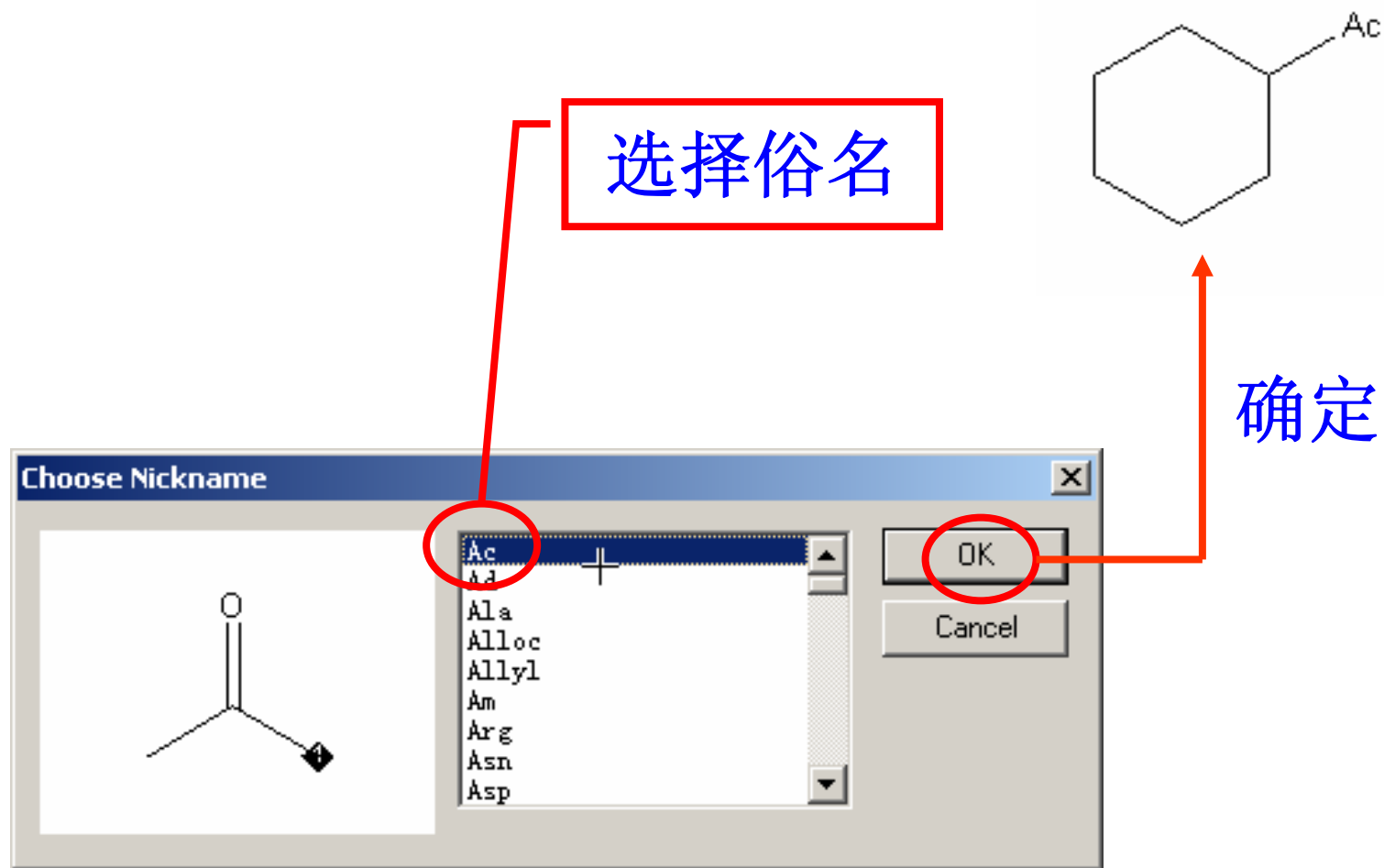
第六部分 高级绘制技巧

2) 使用快捷键 =，前提是编辑区必须有一个未被选择的键。



光标移至单键末端；
使用快捷键 =

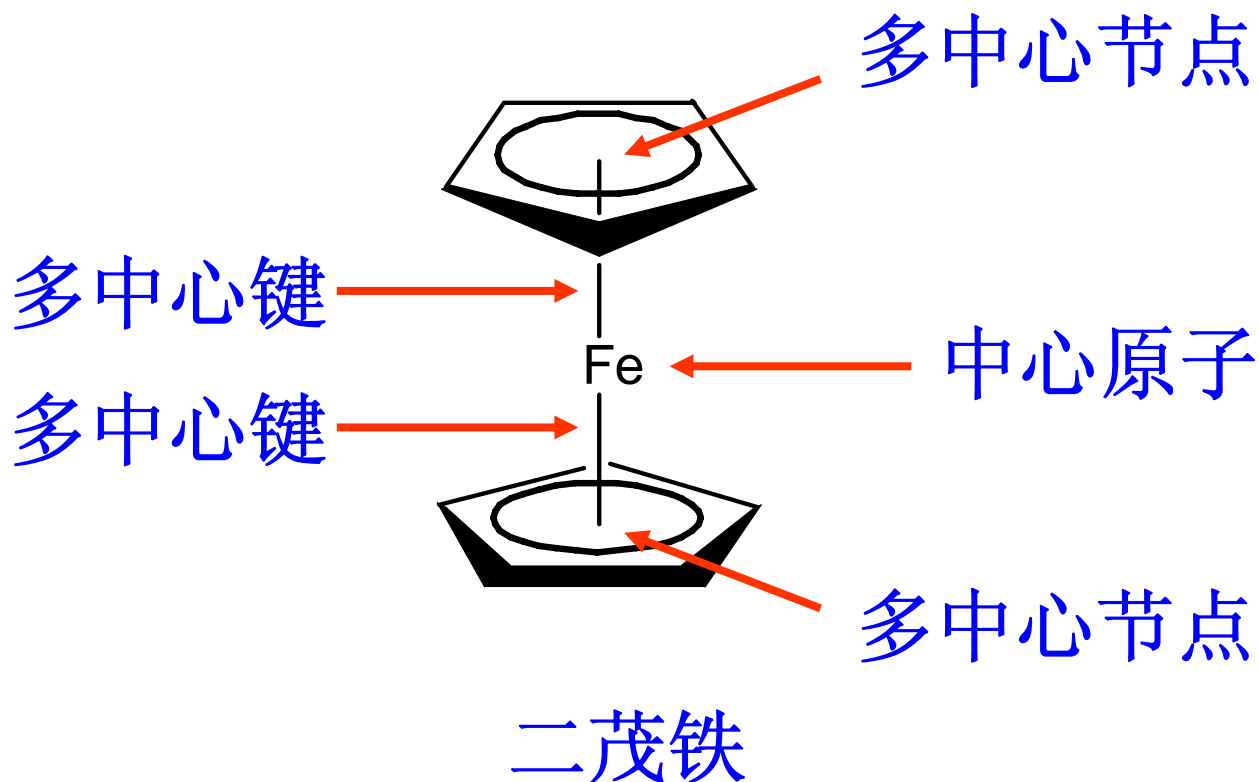
第六部分 高级绘制技巧



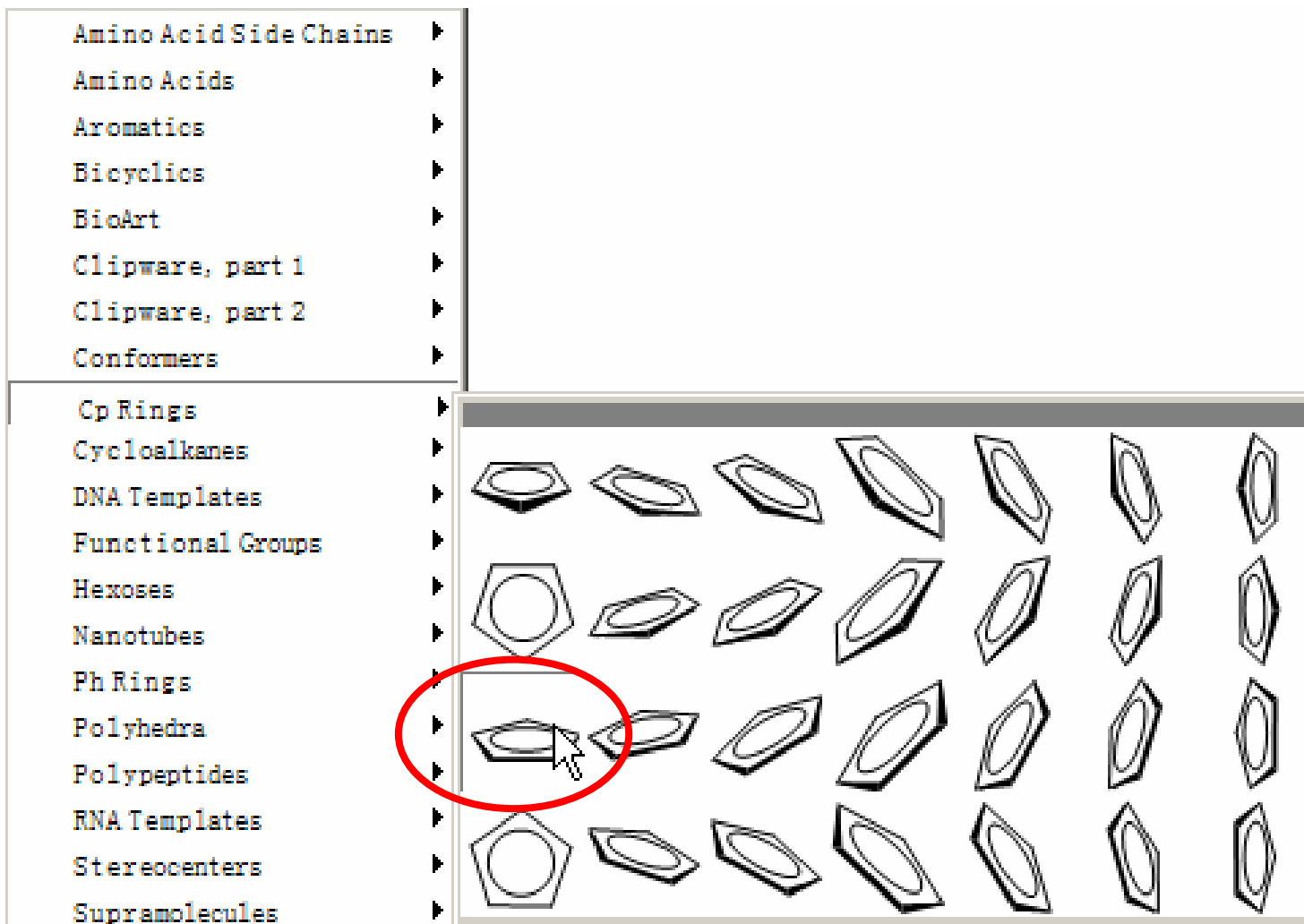
第六部分 高级绘制技巧

6.2 多中心结构

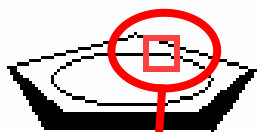
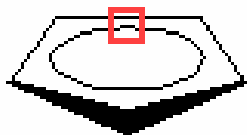
—绘制络合物结构



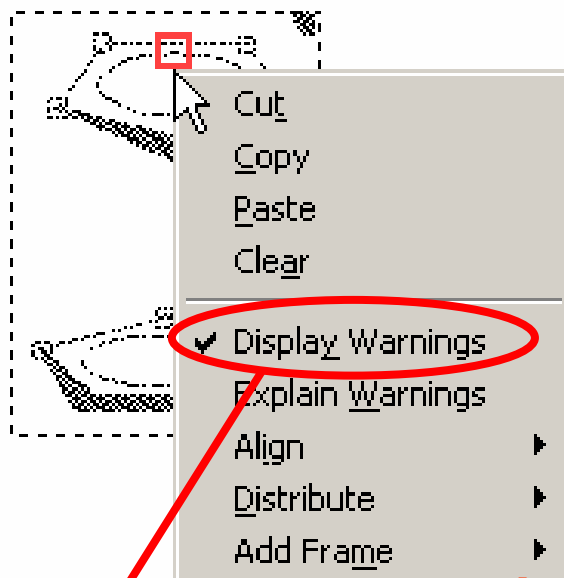
第六部分 高级绘制技巧



第六部分 高级绘制技巧



警示标志

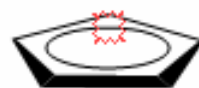
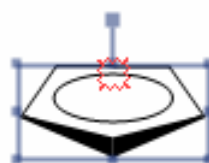
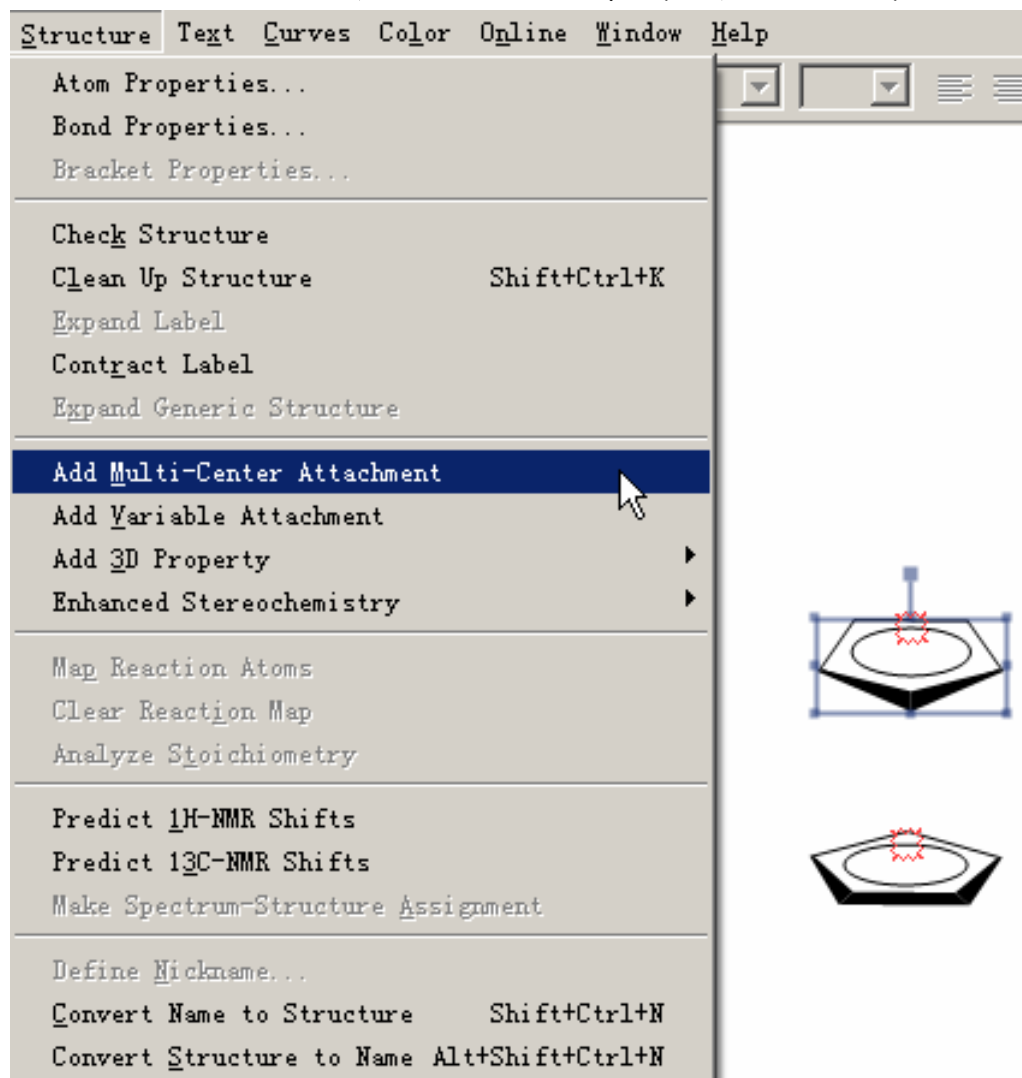


显示(去除)警示



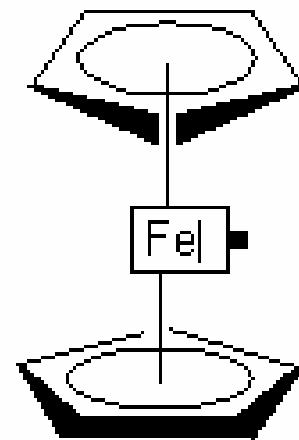
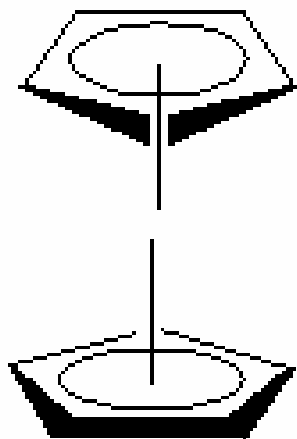
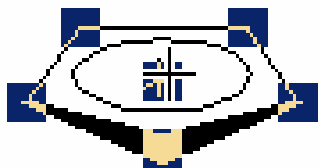
警示标志的去除与添加

第六部分 高级绘制技巧



分别添加多中心节点

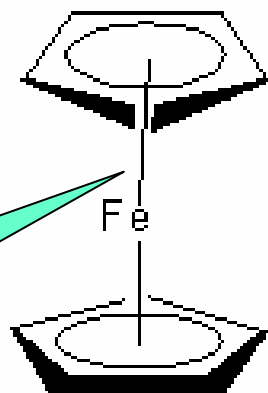
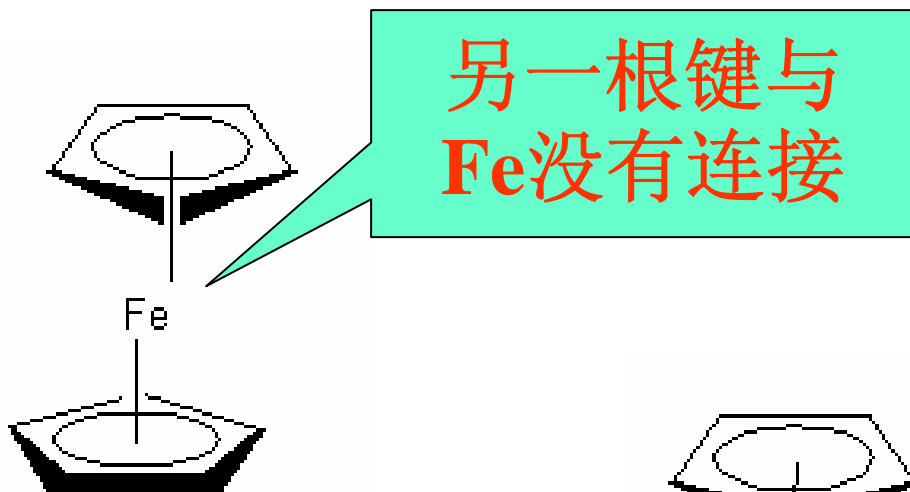
第六部分 高级绘制技巧



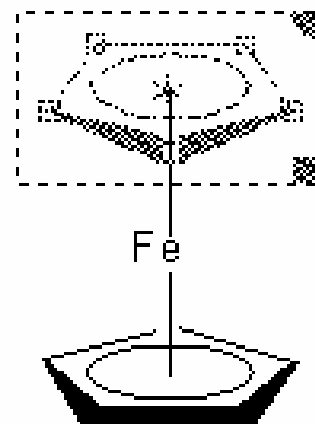
选择实键工具，在上下两个中心节点画出上下两根单键

在其中一根单键上标记Fe

第六部分 高级绘制技巧

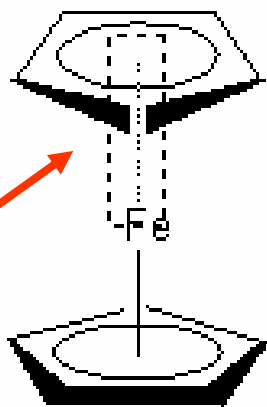


选择键的末端，
拉动与Fe连接

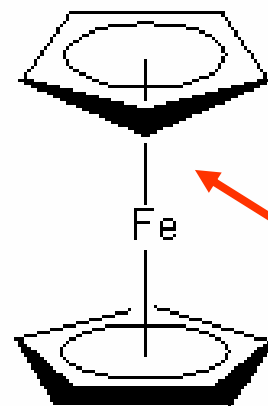


调整对齐

第六部分 高级绘制技巧



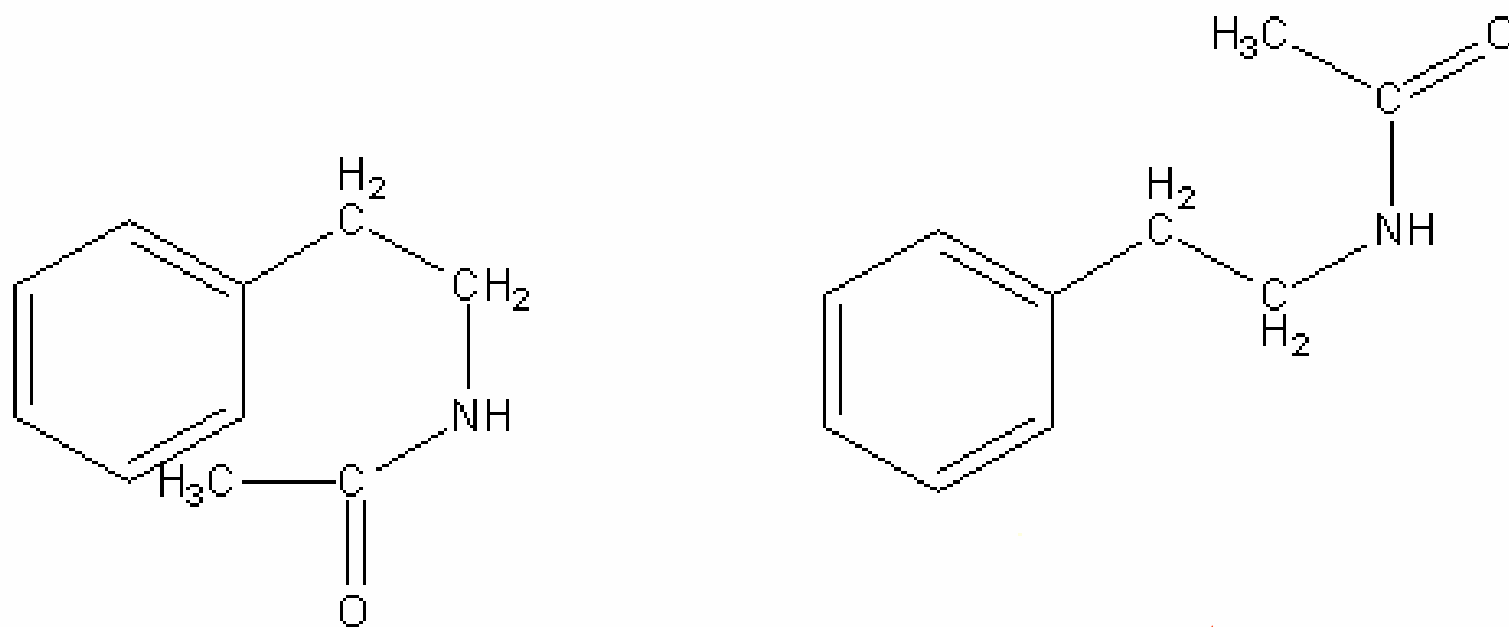
键的前后次序错误



键的前后次序正确

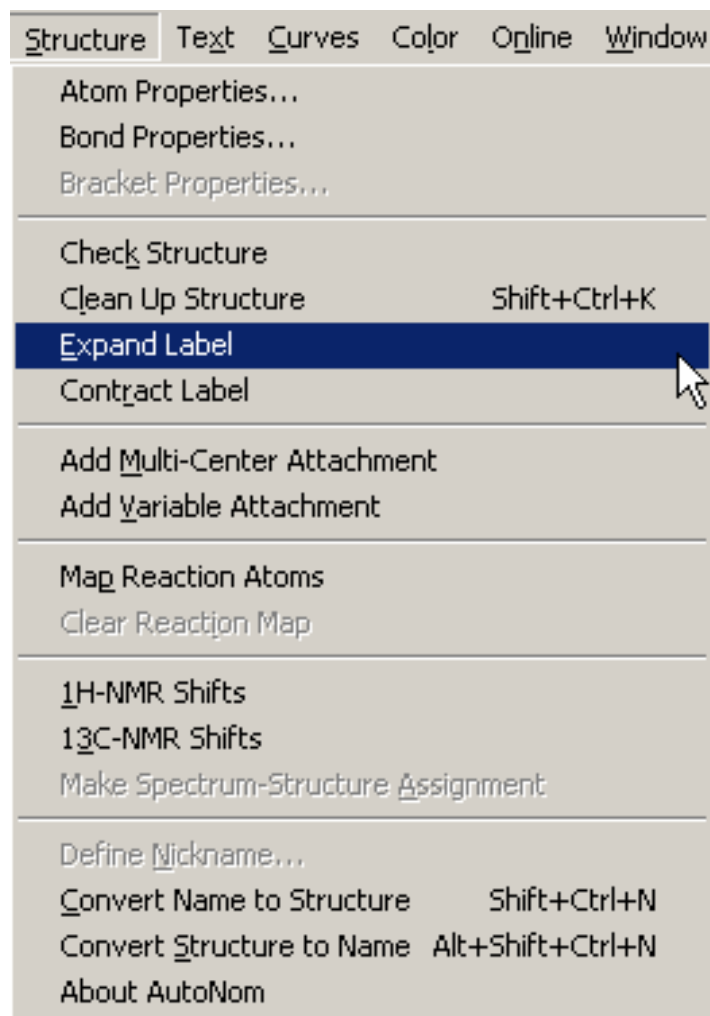
第六部分 高级绘制技巧

6.3 结构展开与调整

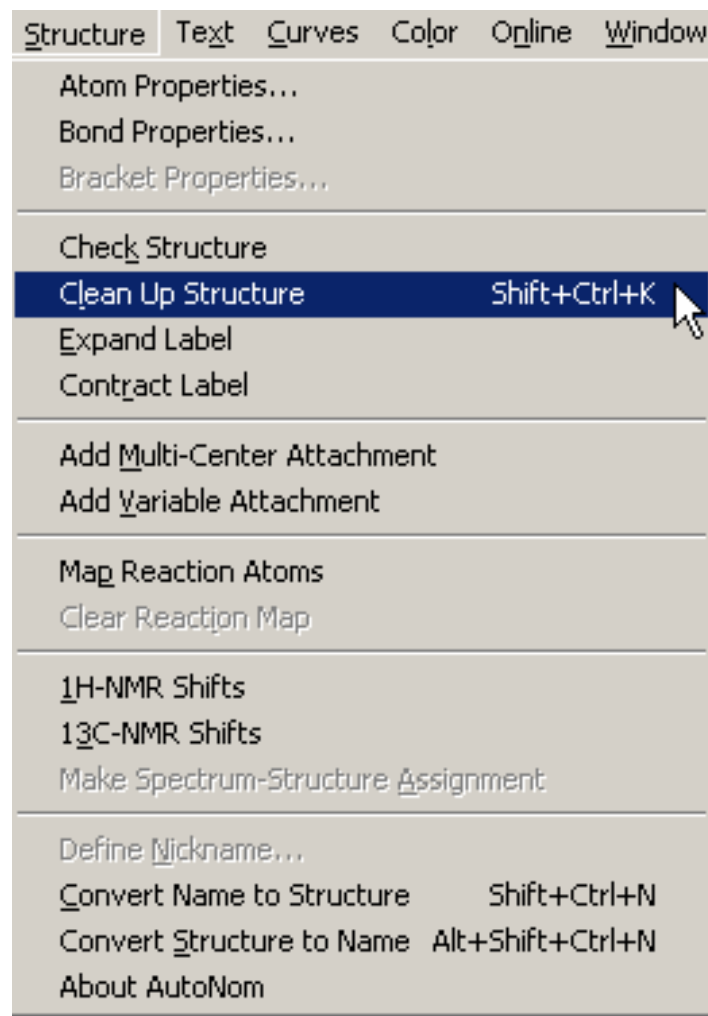


结构展开

第六部分 高级绘制技巧

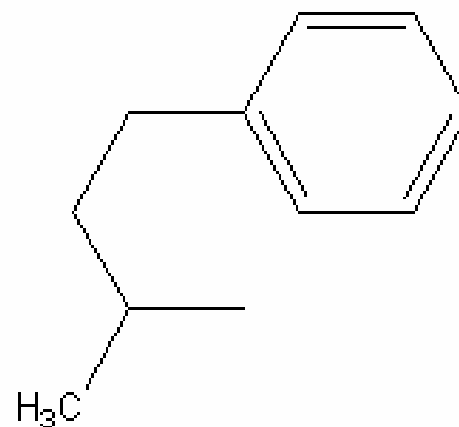
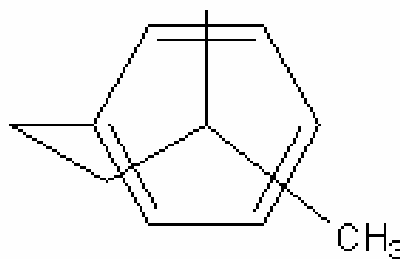
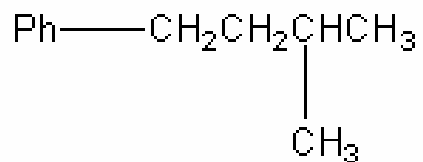


展开标记



结构调整

第六部分 高级绘制技巧

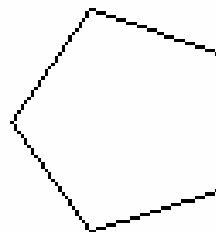
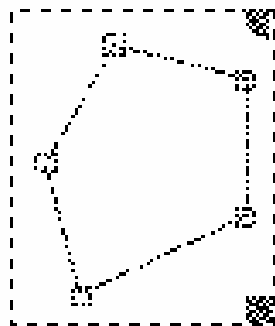


结构的符号形式

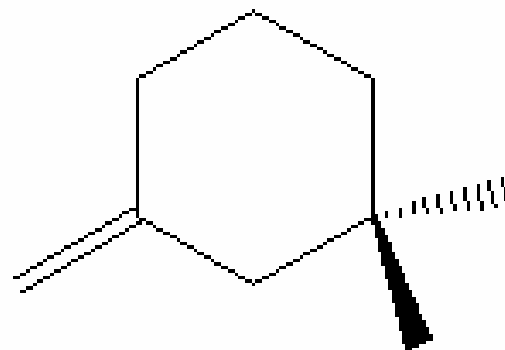
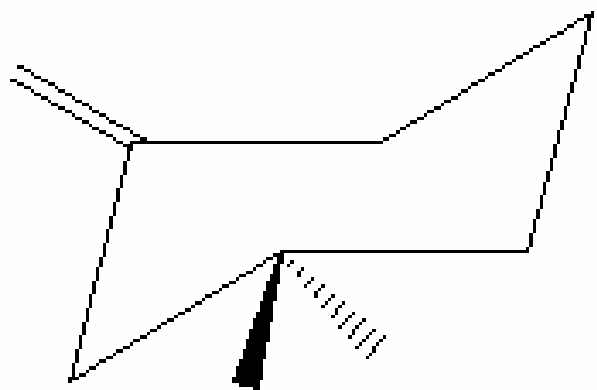
结构展开

结构调整

第六部分 高级绘制技巧



结构调整



第六部分 高级绘制技巧

结构整理的要点：

- 1) 目的是通过规范键长和键角生成一个更具美感的结构绘制图
- 2) 适合的键长由**Drawing Setting**对话框中的**Fixed Length**确定
- 3) 一个特定环只有在所有组成键都被选择时才会被重新绘制
- 4) 整理对某些环系统不合适(交叉双键、三键、多连接环、大环等)

第六部分 高级绘制技巧

5) 多连接原子标记和不定连接点不能被整理

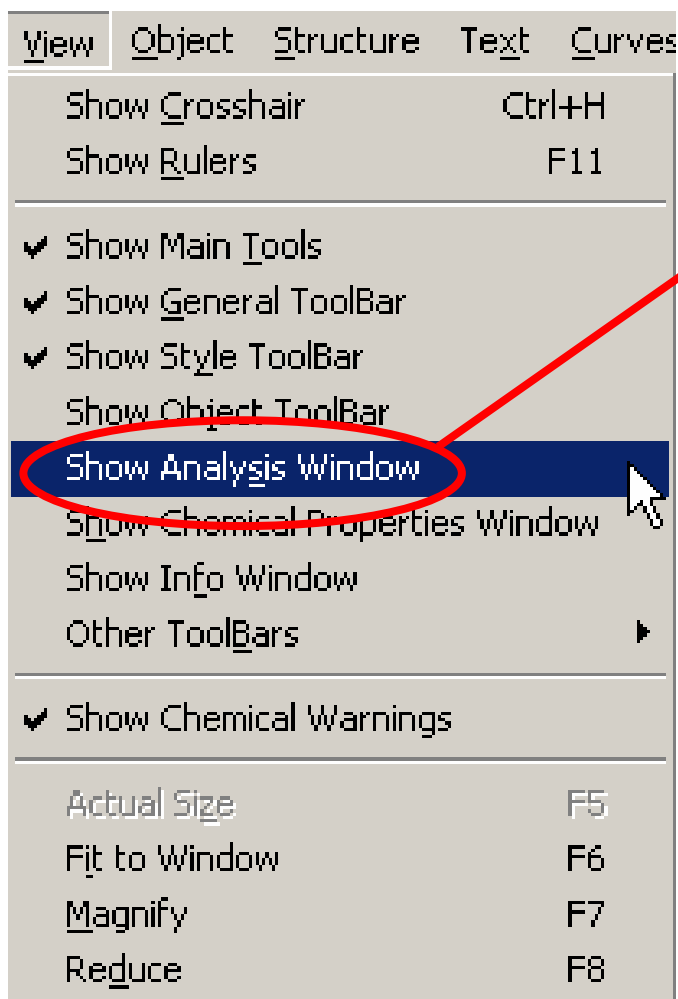
6) 多中心键不能被整理

6) 结构的旋转尽可能在以键角为15度的倍数下进行

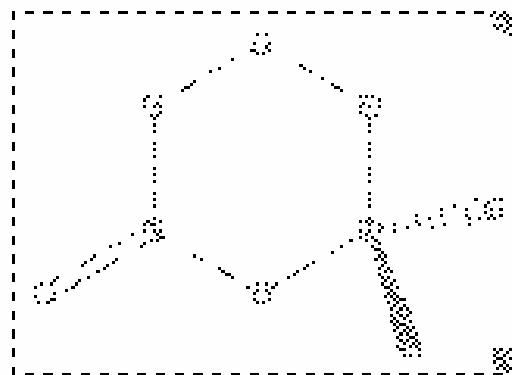
8) 整理会保留原立体化学特点，特别是楔键和切割键

第六部分 高级绘制技巧

6.4 检查化学结构信息



结构分析



第六部分 高级绘制技巧

分子式

精确质量

分子量

质谱分析

元素分析

Analysis

☒ Formula: C₉H₁₆

☒ Exact Mass: 124.13

☒ Mol. Wt.: 124.22

☒ m/e: 124.13 (100.0%), 125.13 (10.3%)

☒ Elem. Anal.: C, 87.02; H, 12.98

Decimals: 2

Paste

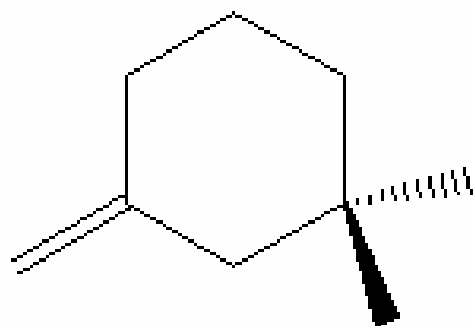
两位小数

质谱图

结果粘贴

分析结果窗口

第六部分 高级绘制技巧



C_9H_{16}

Exact Mass: 124.13

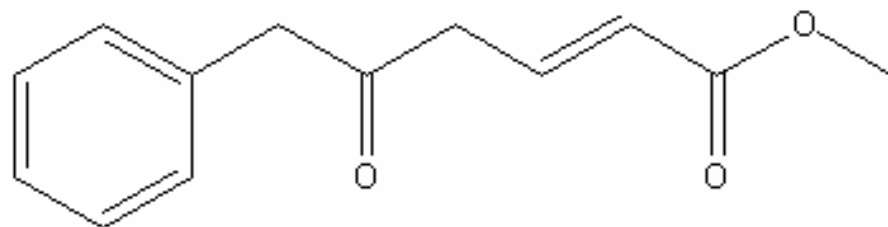
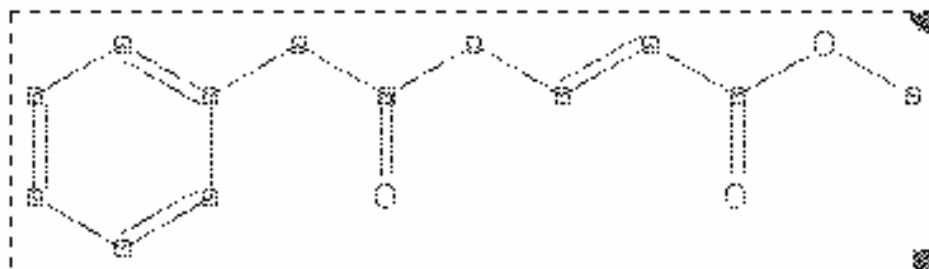
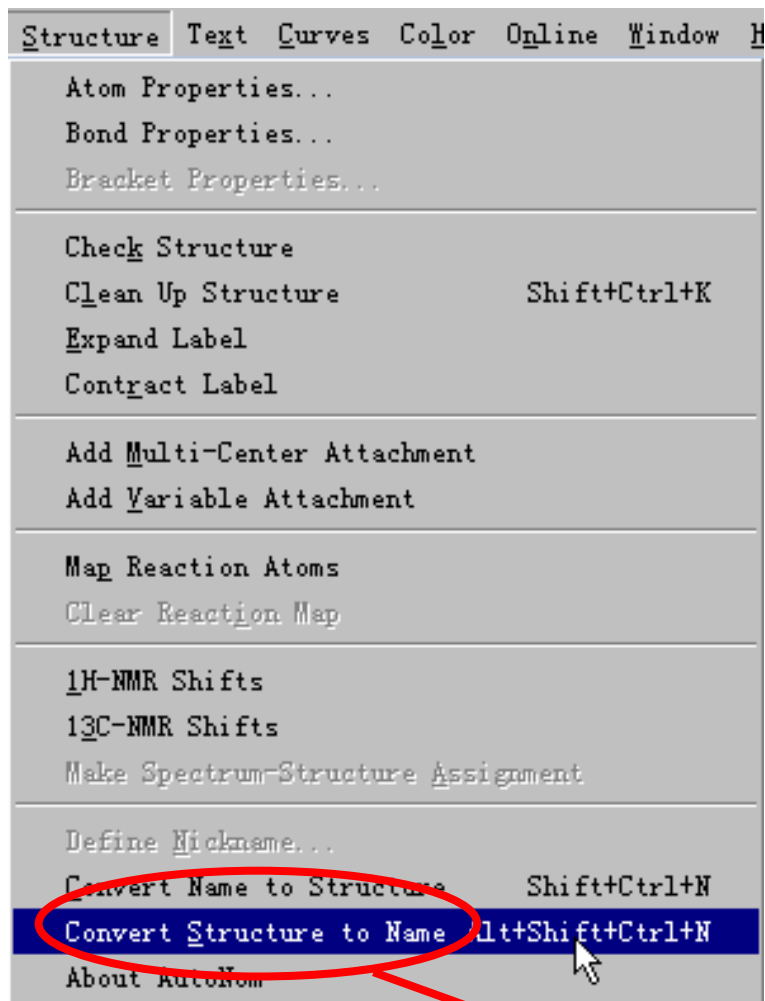
Mol. Wt.: 124.22

m/e: 124.13 (100.0%), 125.13 (10.3%)

C, 87.02; H, 12.98

结果粘贴

第六部分 高级绘制技巧



5-Oxo-6-phenyl-hex-2-enoic acid methyl ester

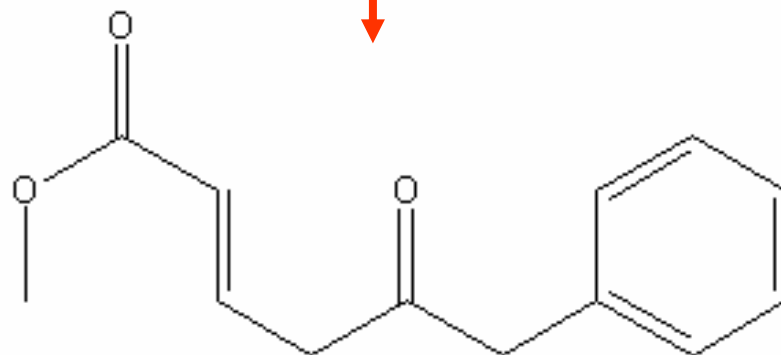
化合物命名

将结构转化成名称

第六部分 高级绘制技巧

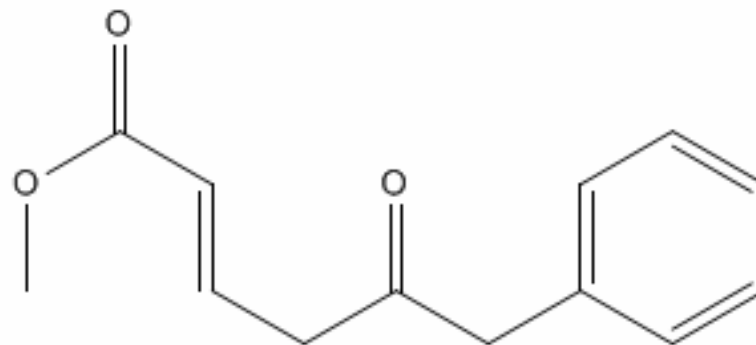
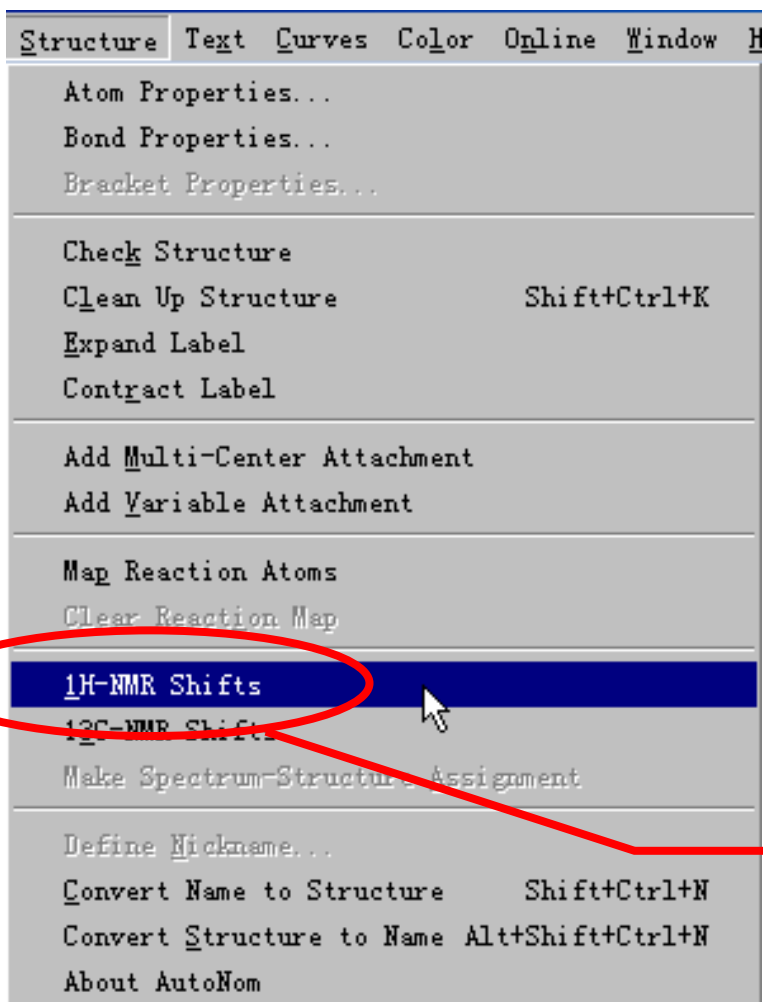


5-(2-methoxy-6-phenyl-hex-5-en-2-yl)-2-thiophene-carboxylic acid methyl ester



将名称转化成结构

第六部分 高级绘制技巧

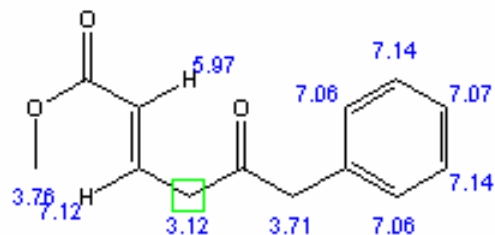


^1H NMR位移

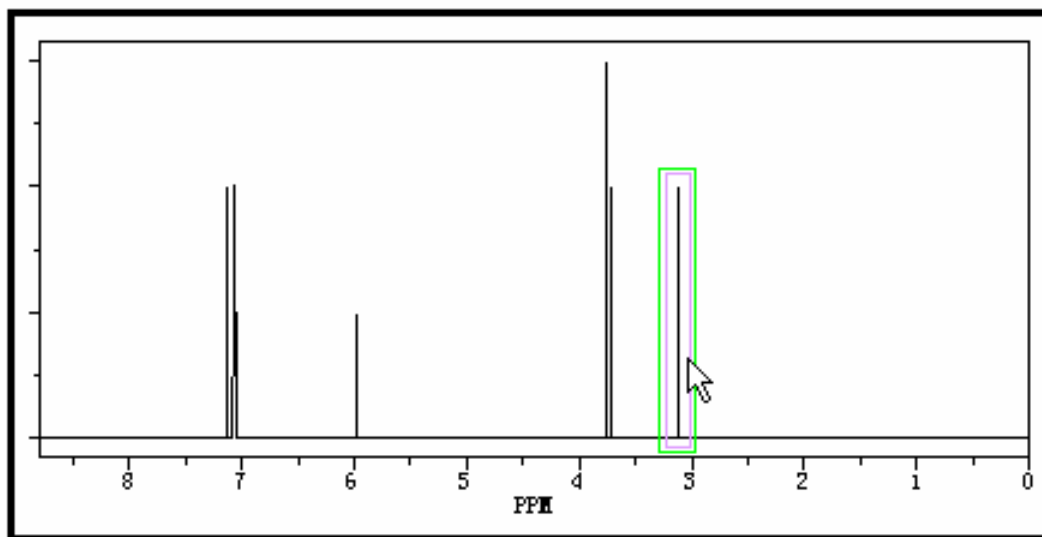
^1H NMR预测

第六部分 高级绘制技巧

ChemNMR H-1 Estimation



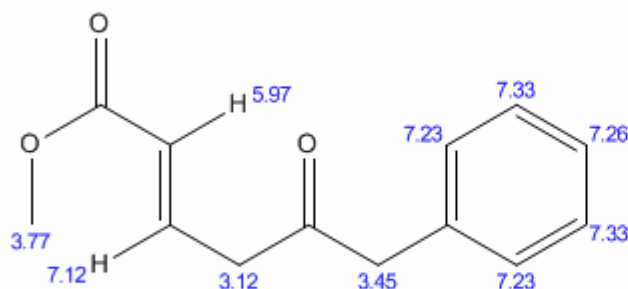
Estimation Quality: blue = good, magenta = medium, red = rough



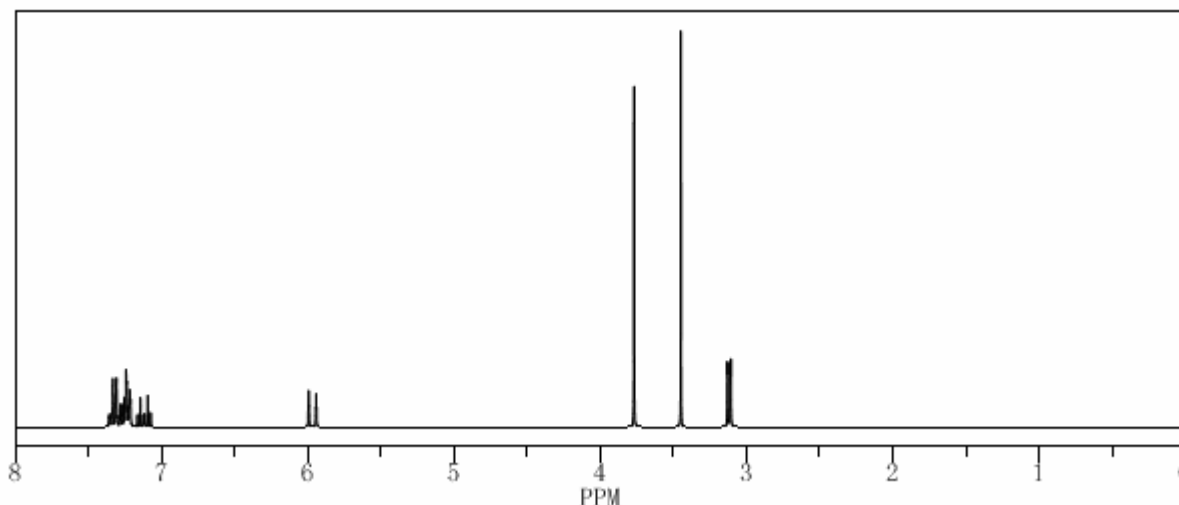
^1H NMR预测结果

第六部分 高级绘制技巧

ChemNMR ^1H Estimation



Estimation quality is indicated by color: good, medium, rough



^1H NMR预测结果(ChemDraw8.0及以上版本)

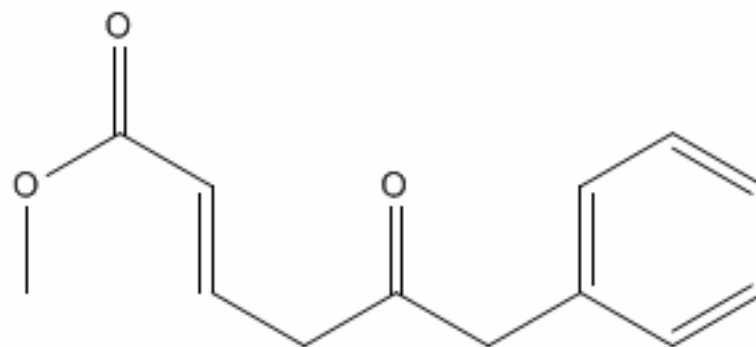
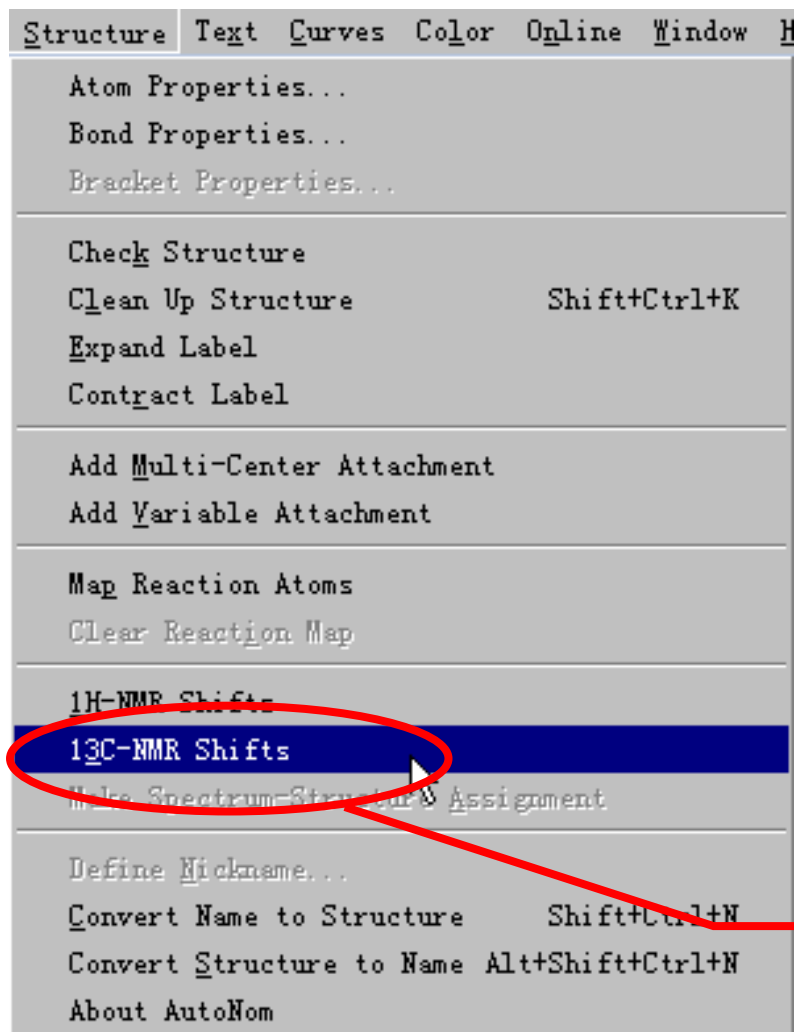
第六部分 高级绘制技巧

Protocol of the H-1 NMR Prediction:

Node	Shift	Base + Inc.	Comment (ppm rel. to TMS)
CH2	3.12	1.37	methylene
		0.63	1 alpha -C=C
		1.12	1 alpha -C(=O)-C
CH2	3.71	1.37	methylene
		1.22	1 alpha -1:C*C*C*C*C*C*1
		1.12	1 alpha -C(=O)-C
CH	7.06	7.26	1-benzene
		-0.20	1 -C
CH	7.14	7.26	1-benzene
		-0.12	1 -C
CH	7.07	7.26	1-benzene
		-0.19	1 -C
CH	7.14	7.26	1-benzene
		-0.12	1 -C
CH	7.06	7.26	1-benzene
		-0.20	1 -C
CH3	3.76	0.86	methyl
		2.90	1 alpha -OC(=O)-C=C
H	5.97	5.25	1-ethylene
		0.80	1 -C(=O)O-R gem
		-0.08	1 -CC=O cis
H	7.12	5.25	1-ethylene
		1.18	1 -C(=O)O-R cis
		0.69	1 -CC=O gem

预测结果

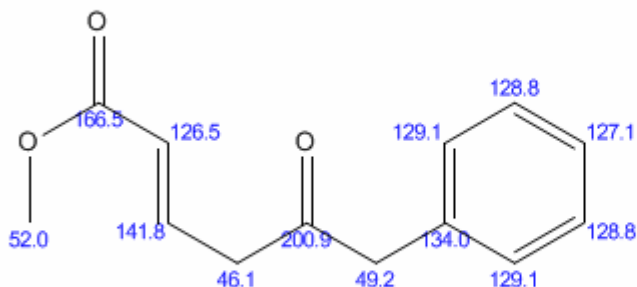
第六部分 高级绘制技巧



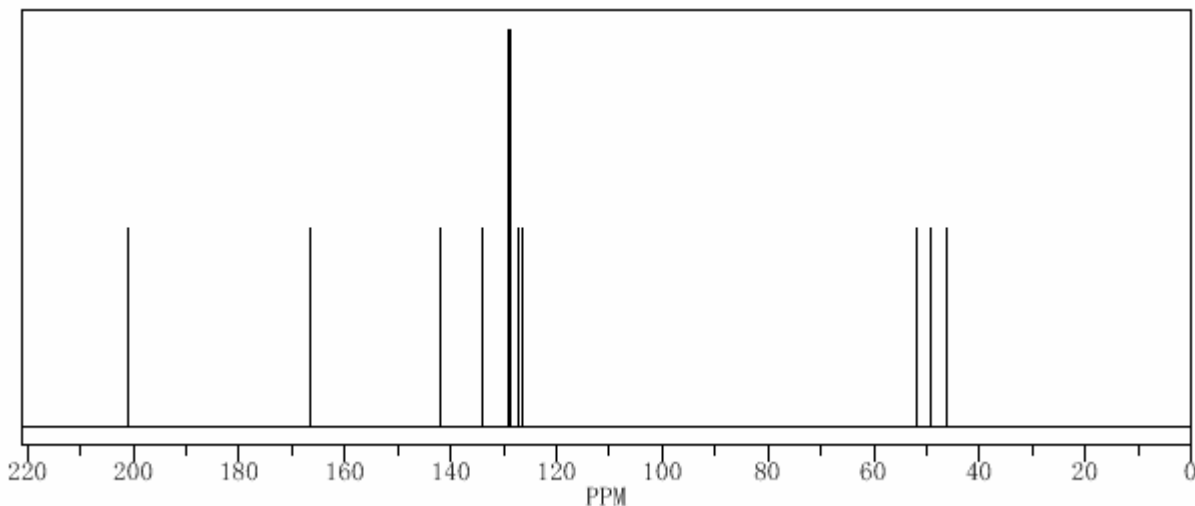
^{13}C NMR位移

^{13}C NMR预测

第六部分 高级绘制技巧

ChemNMR ¹³C Estimation

Estimation quality is indicated by color: good, medium, rough



¹³CNMR预测结果

第六部分 高级绘制技巧

Protocol of the C-13 NMR Prediction:

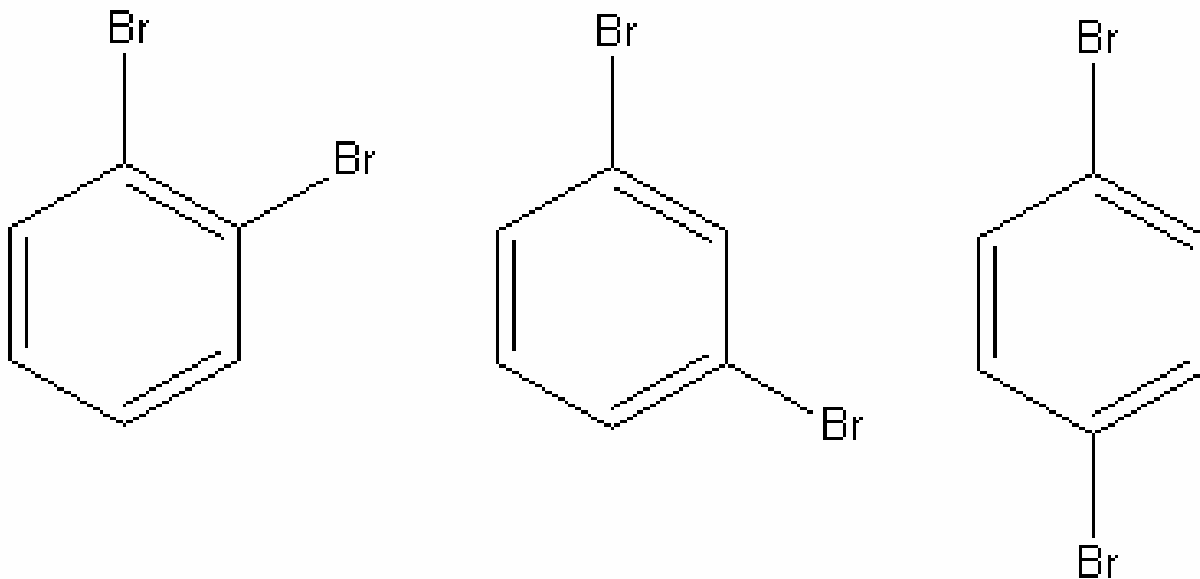
Node	Shift	Base + Inc.	Comment (ppm rel. to TMS)
C	165.0	166.0	1-carboxyl
		4.0	1 -C=C-C
		-5.0	1 -C from O-carboxyl
CH	123.0	123.3	1-ethylene
		7.1	1 -C(=O)OC
		-7.4	1 -C
CH	136.2	123.3	1-ethylene
		5.5	1 -C(=O)OC
		9.4	1 -C
CH2	43.1	-2.3	aliphatic
		19.5	1 alpha -C=C
		29.3	1 alpha -C(=O)-C
		-2.6	1 gamma -1: C*C*C*C*C*C*1
		-2.8	1 gamma -C(=O)-O
		2.0	gamma corrections
C	206.0	193.0	1-carbonyl
		13.0	2 -C
CH2	46.7	-2.3	aliphatic
		24.3	1 alpha -1: C*C*C*C*C*C*1
		29.3	1 alpha -C(=O)-C
		-2.1	1 gamma -C=C
		-2.5	steric corrections
C	134.3	128.5	1-benzene

部分预测结果

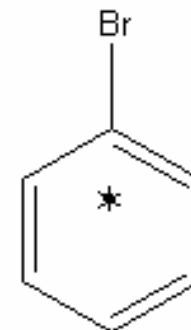
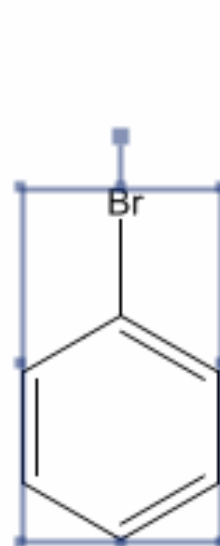
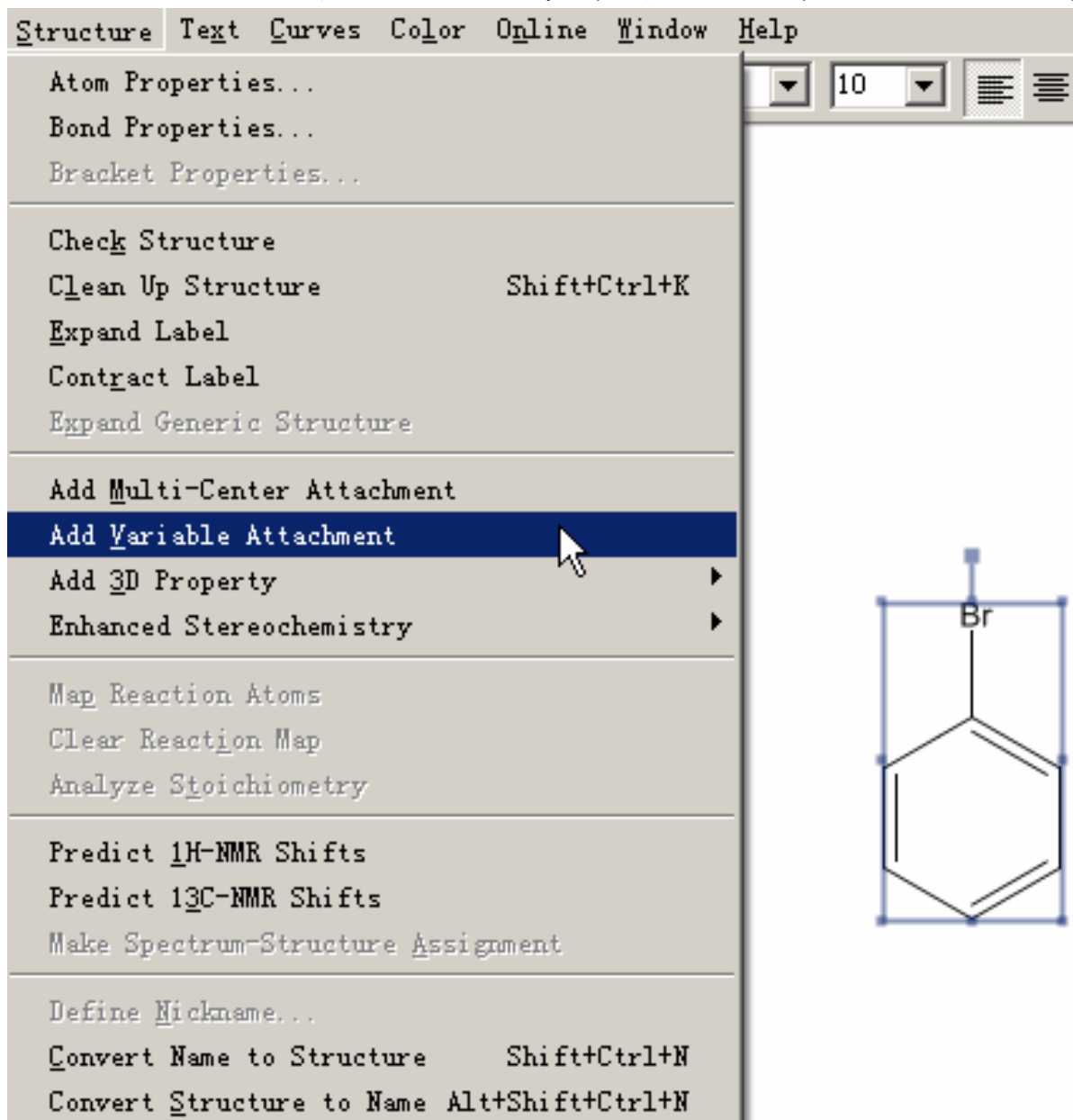
第六部分 高级绘制技巧

6.5 不定结构连接

不定结构：化学组成相同而结构不同的异构体

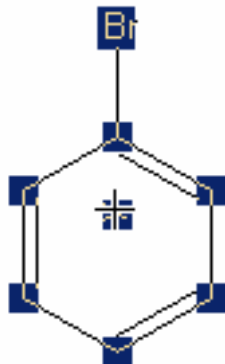
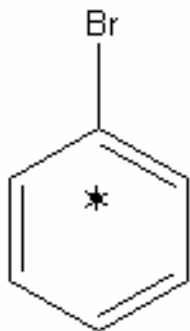


第六部分 高级绘制技巧

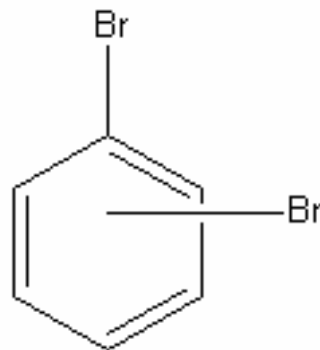


不定连接点

第六部分 高级绘制技巧



定位



Alt + 按动