

目 录

第一章 chemdraw 基础知识.....	1
1.1、工作环境.....	2
1.1.1 工作环境综述.....	2
1.1.2 图形工具板.....	2
1.2 chemdraw 的基本操作.....	4
1.1.1 chemdraw 文件的建立.....	4
1.1.2 打开 chemdraw 文件.....	4
1.1.3 chemdraw 文件的存储.....	6
1.1.4 关闭 chemdraw 文件.....	7
1.1.5 退出 chemdraw.....	7
第二章 实例指导.....	8
2.1 指导实例 1 反应方程式.....	8
2.1.1 绘制前的操作准备.....	8
2.1.1 绘制实例.....	9
2.2 指导实例 2 绘制中间体结构.....	15
2.3 指导实例 3 复杂环化合物.....	18
2.4 指导实例 4 Fischer 葡萄糖结构图.....	21
2.5 指导实例 5 绘制透视图形.....	23
2.6 指导实例 5 Newman 结构.....	26
练习:	29

第一章 chemdraw 基础知识

计算机作为一种化学学习和研究的工具有着不可替代的作用。它不仅能够帮助我们进行文字及图形处理等文书工作,而且可以在化学学习与研究的各个方面协助我们更快、更好的工作。本章介绍一些常用的能在 PC 机上使用的化学类软件,以期能帮助读者在自己的学习和研究中做出有效、快速的选择。

有关化学结构式编辑的软件市面上非常之多,它们各有所长。既有商品的,亦有对教育界及家用免费的。其功能主要是描绘化合物的结构式、化学反应方程式、化工流程图、简单的实验装置图等化学常用的平面图形的绘制。常见的这类软件有: ChemDraw, ChemWindow, ISIS Draw, ChemSketch 等。前两个为商业软件,有关它们的资料可以查阅各自的网站 <http://www.camsoft.com/> 和 <http://www.sadtlersuite.com/>。后两个对教育界及家用为免费软件,可以在它们各自的网站 <http://www.mdli.com/>和 <http://www.acdlabs.com/>上下载。

ChemDraw 是世界上使用最多的大型软件包 ChemOffice 中的一个组件,其它两个组件为 Chem 3D(分子结构模型)和 ChemFinder(化学数据库信息),其最新版本是 Chem Office 2004(ChemDraw Pro 8.0、Chem3D Ultra8.0、ChemFinder Ultra8.0)。ChemDraw 是国内外最流行、最受欢迎的化学绘图软件,它可以建立和编辑与化学有关的一切图形。例如,建立和编辑各类化学式、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。基于国际互联网技术开发的智能型数据管理系统,包含的多种化学通用数据库共四十多万个化合物的性质、结构、反应式、文献等检索条目的分析和利用,可为化学家的目标化合物设计、反应路线选择和物化性质预测以及文献的调用提供极大的方便。该软件可以运行于 Windows 平台下,使得其资料可方便地共享于各软件之间。除了以上所述的一般功能外,其 ultra 版本还可以预测分子的常见物理化学性质如:熔点、生成热等;对结构按 IUPAC 原则命名;预测质子及碳 13 化学位移移动等。

1.1、工作环境

1.1.1 工作环境综述

类似 Office 的多文档界面，主要包括以下几个部分：

- 1、菜单栏： 含有操作 chemdraw 应用文件和内容的命令设置。
- 2、工具栏： 含有常用命令图标，单击图标时，效果与选择菜单中相应的命令一样。
- 3、编辑区： 供绘制图形结构的工作区。
- 4、滚动栏： 含有滚动框、滚动按钮和滚动条。
- 5、状态栏： 标出当前的工作内容以及鼠标指到某些菜单按钮时的说明

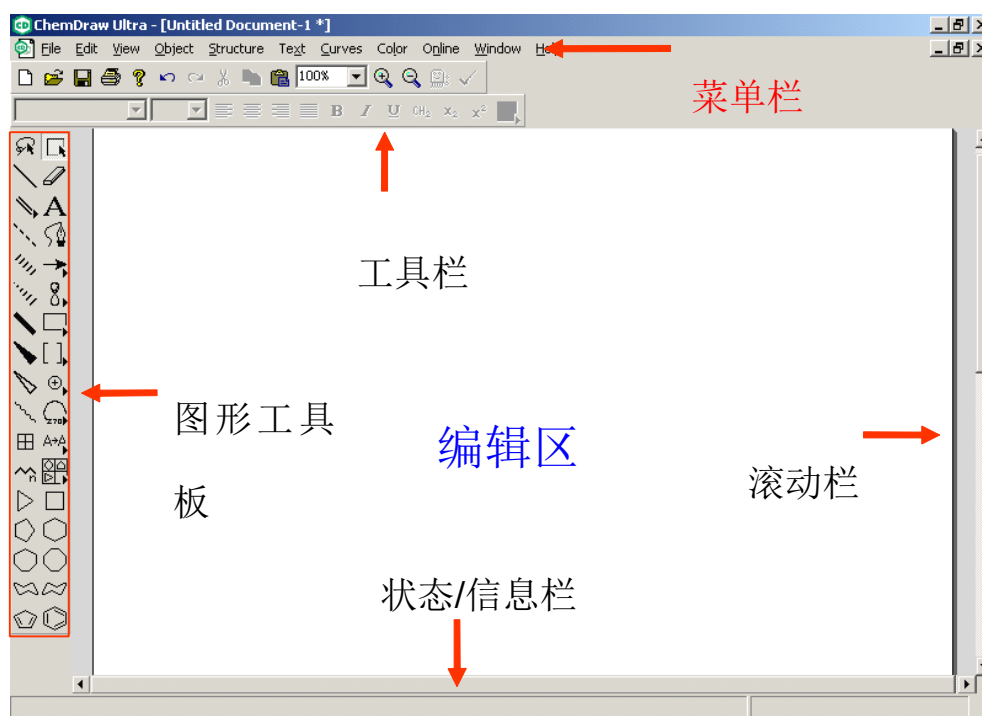


图 1.1 chemdraw 软件的操作界面

1.1.2 图形工具板

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，光标将随之改变成为相应的工具形状。工具板见图 1-2。

选择工具时，一次只能选择一个。

在图标右下角有小黑三角 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，子工具图标将显示出来。

工具板上的工具如下。

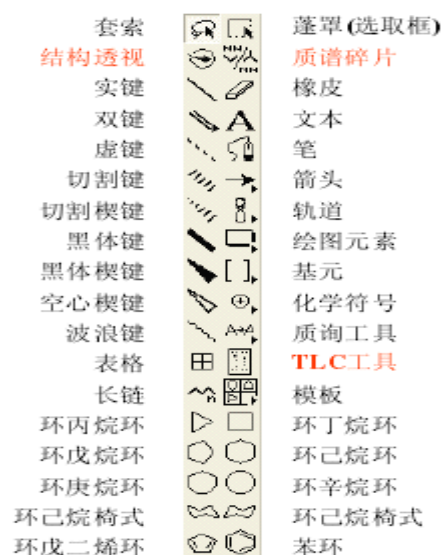


图 1-2 chemdraw 软件的工具图板

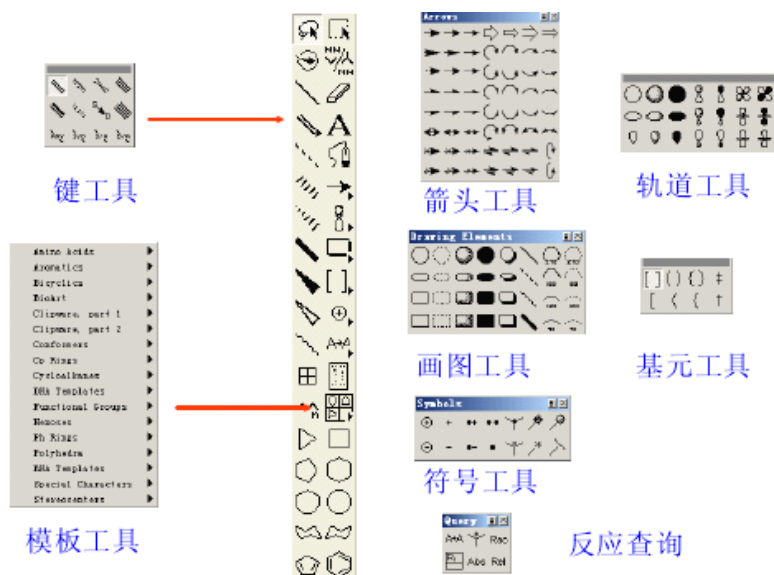


图 1-3 工具栏中的子工具类型

键工具：用于绘制单、双和三键

箭头工具：用于绘制各种箭头。

轨道工具：用于绘制各种轨道。

画图工具：用于绘制常见几何形状。

基元工具：用于绘制化学中常用符号。

符号工具：用于绘制各种重要化学符号。

反应查询：用于建立原子间在不同结构中的联系。

模板工具：用于绘制模板库存的图形和结构。

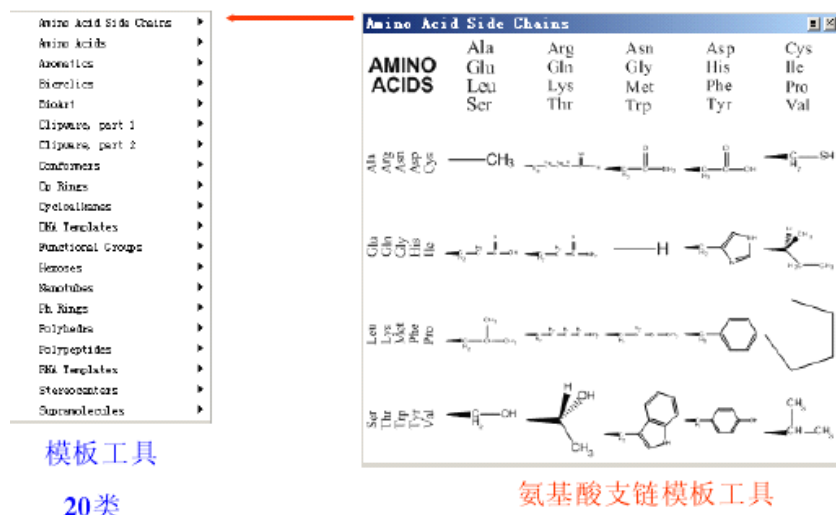


图 1-4 工具栏中的模板工具

1.2 chemdraw 的基本操作

1.1.1 chemdraw 文件的建立

在 file 菜单中选择 NEW 或 open special 即可以建立一个新文件。

1.1.2 打开 chemdraw 文件

1、打开 chendraw 文件：

通过菜单【File>Open】打开相应的 chemdraw 文件。

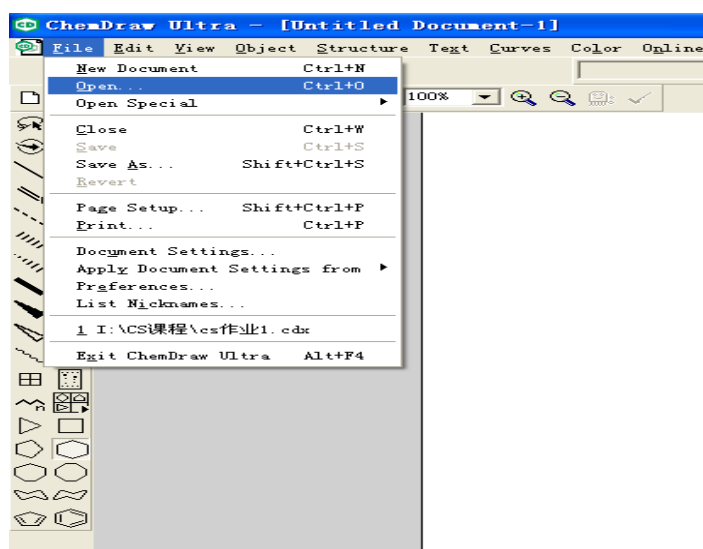


图 1-5 file 文件及下拉菜单

2、打开不同格式的 chemdraw 文件

在 open 对话框下面的下拉菜单中选择需要的文件格式。

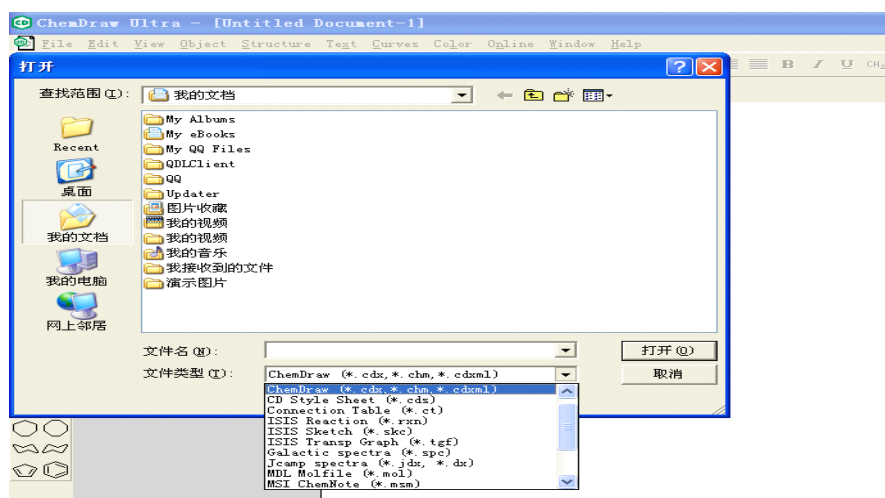


图 1-6 chemdraw 中 open 菜单下的对话框。

3、变换两个打开文件的窗口

每次打开一个文件，就出现一个文件窗口。如果打开多个文件，尽管文件名都列在窗口菜单中，但文件窗口只显示最后打开的文件。把现有文件窗口变换成其他打开文件的窗口（激活其他文件窗口），可按下列方法进行：

- (1) 在窗口菜单中选择要转换的文件。
- (2) 单击所要文件窗口的任何暴露区域。
- (3) 按 ctrl + Tab 键变换两个打开文件的窗口。

1.1.3 chemdraw 文件的存储

1、存储一个文件的方法

(1) 在 File 菜单中选择 save，此时出现一个存储对话框，所用的平台不同，对话框也不同。

- (2) 在【文件名】框中输入要存储文件的名：
- (3) 单击 OK 或 save.

2、以不同的文件名和位置存储文件副本

可以用 **Save As** 命令以不同的文件名、不同的位置或不同的格式存储文件副本。以这种形式存储文件副本，对保持原文件或把原文件的信息输入到其他应用都是很有用的。

- (1) 在 **File** 菜单中选择 **Save As..**
- (2) 在 **save** 对话框中输入新的名或新地址名。
- (3) 单击 **OK** 或 **save**.

1.1.4 关闭 **chemdraw** 文件

结束文件操作、关闭活动文件窗口的方法:

- (1) 在 **File** 菜单中选择 **close**
- (2) 单击 **close** 即可。

在关闭之前，记住储存文件，否则将出现对话框提问操作者。

1.1.5 退出 **chemdraw**

在 **file** 菜单中选择 **Exit chemdraw** ,即可把文件退出。及时关闭结束的文件，可以给正在应用的文件倒出更多的内存空间。在退出结束文件之前，需要先存储已有的文件。

第二章 实例指导

本章提供 5 个典型通俗的指导性实例，设计的目的是使使用者熟悉第一章中的基本术语和基础知识，掌握一些基础的绘图技能，便于在以后的学习中举一反三，运用自如。

2.1 指导实例 1 反应方程式

2.1.1 绘制前的操作准备

在本实例中，将学习如何绘制反应方程式（图 2-1），绘制实例前先进行以下操作：

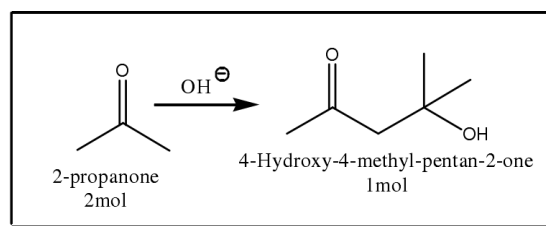


图 2-1 实例指导 1（反应方程）

- (1) 开始启动 chemdraw。
- (2) 从 File 菜单，选择 Save As 命令。
- (3) 在文本对话框的底部输入 tut1.cdx。
- (4) 在指南中存储文件。
- (5) 单击 OK 按钮。
- (6) 打开 Object 菜单，确认在 Fixed lengths 和 Fixed angles 命令的左边有对号，如果没有对号，再选择一遍，如图 2-2。

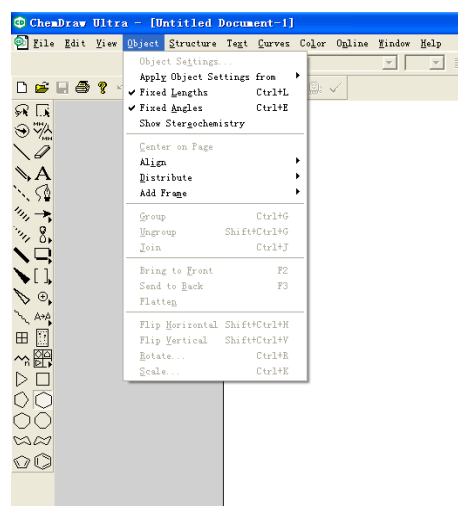


图 2-2 Object 菜单的操作

2.1.1 绘制实例

1、绘制第一个键

(1) 在工具板上选择实键工具，见图 2-3 左。

(2) 把鼠标(当选中单键工具时，鼠标在屏幕上显示为十字形)放在文件窗口的任意合适的位置(定位)，同时单击鼠标，见图 2-3 中。

(3) 向右上角拖动鼠标，见图 2-3 右。

(4) 当放开鼠标时，键与 X 轴成 30 度角，伸展的键长为固定键长。见文件窗口左下角的【信息区域】框。

【注意】当利用键工具绘制化学结构时，总是要建立结构的第一个键，如图 2-3 所示。不能用键工具单击出结构来，如果用环工具，可用单击开始第一个结构。

2、加一个键

(1) 用鼠标指向键右面的原子(放在点位)，见图 2-4 左。

(2) 单击原子加一个键，见图 2-4 右。形成的键与第一个键成 120 度角。



图 2-3 绘制第一个键

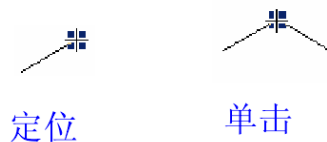


图 2-4 加一个键

3、加第二个键

(1) 用鼠标指向 C2 原子(加键的位置就是 C2)，见图 2-5 左。

(2) 单击原子加一个键，见图 2-5 右。

4、建立一个双键

(1) 用鼠标指向 C2 并按下鼠标，见图 2-6 左。

(2) 选中鼠标沿单键从 C2 移动到 C4，然后放开鼠标，即可建立一个双键，见图 2-6 右。



图 2-5 单击加第二个键



图 2-6 绘制双键

5、在结构上加原子标记

加原子标记的方法很多，将在指导实例中逐步说明。

(1) 用鼠标指向原子，见图 2-7 左。

(2) 双击原子，见图 2-7 中。

(3) 在文本框中输入字母 O，见图 2-7 右。

如果关闭文本框，可单击窗口其他区域或选择其他工具。

6、复制结构

(1) 选择套索图标，最后绘制的结构自动被选中。

(2) 把鼠标放在选择方框中，鼠标变成一只手。

(3) 按下 Ctrl 键，手上出现一个加号，表示选择工具的复制模式，见图 2-8 左。

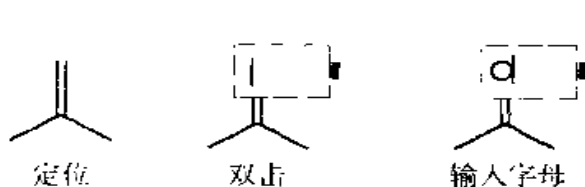


图 2-7 加原子标记

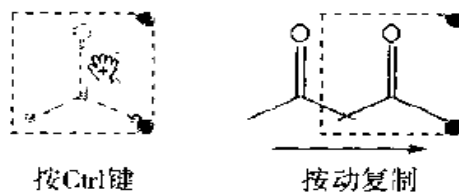


图 2-8 复制结构

(4) 向右按动选择框，当开始移动时，结构的复制图被建立，原结构保持在原位置，见图 2-8 右。

7、修改复制的结构

(1) 在工具板上选择实键工具，见图 2-9 左。

(2) 用鼠标指向原子，见图 2-9 中。

(3) 单击原子加键，见图 2-9 右。

8、加一个以上的键

(1) 用鼠标指向原子，见图 2-10 左。

(2) 单击原子三次，每次间隔停顿一下，见图 2-10 右。

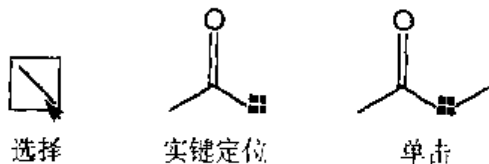


图 2-9 在复制结构上加键



图 2-10 加三个键

【注意】 这里所用的角度是基于 Drawing Setting 对话框中的 Chain Angles Setting 所决定。如果想改变到任意角度，可以由 Shift 再加上按动操作实现。

9、改变某一个键的角度

(1) 按下 Shift 键，指向向下的垂直线，见图 2-11 左。

(2) 按动键到指定的方位，见图 2-11 右。

(3) 放开鼠标和 Shift 键。

10、用快捷键建立原子标记

在键盘上的许多键可以作为设置原子标记的快捷键。

(1) 用鼠标指向原子，见图 2-12 左。

(2) 用键盘输入字母 O，见图 2-12 右。

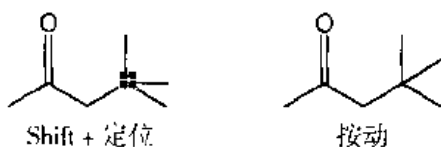


图 2-11 改变键的角度

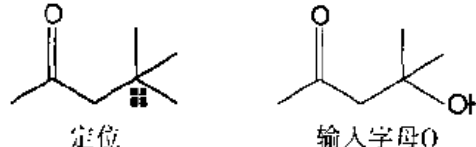


图 2-12 快捷键建立原子标记

11、把两个靠近的结构分开

到目前为止，反应的反应物和产出物的结构已绘制完毕，见图 2-13。

用 check Structure 命令来检查结构图形的正确性的步骤：

选择选择工具，最后绘制的图形自动被选中；如选择不同的结构，双击结构的任意一个键；从 Structure 菜单选择 check Structure 命令，其错误信息将在相应处出现。

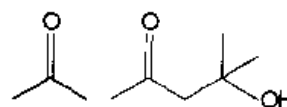


图 2-13 两个结构靠得很近

重复此步骤检查另外的结构。

【注意】如果发现错误，在信息窗口单击 Stop 按钮，此时在结构有问题的部分出现光标。

利用选择工具可以把图 2-13 的两个靠近的结构分开，以便在中间加反应箭头。

- (1) 在工具板上单击【选择】工具，见图 2-14(1)、
- (2) 用套索工具或按下 Ctrl 键选用选择工具，见图 2-14(2)。
- (3) 对角方向拖曳鼠标以完全罩住结构。放开鼠标和快捷键便选中了结构，见图 2-14(4)。
- (4) 移动选择了的结构，以便把两个靠近的结构分开，中间添加反应箭头。
- (5) 选中 Alt 键限制被选结构的移动，见图 2-14(3)。

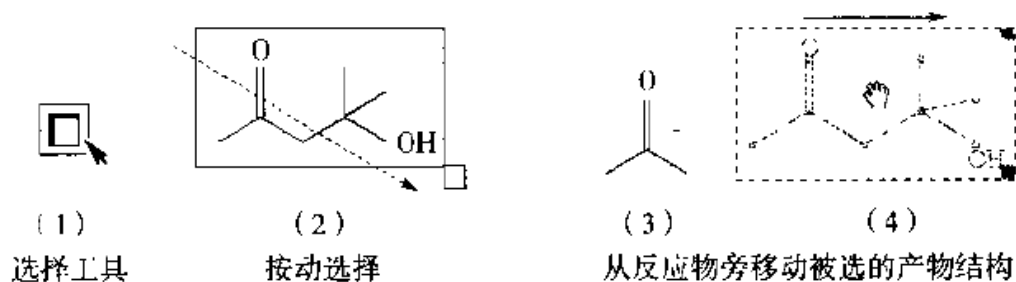


图 2-14 选择结构和移动被选结构

12、在反应式中加箭头

- (1) 选中工具板上的【箭头】工具，此时箭头工具箱显示各种箭头。
 - (2) 用鼠标指向第一列、第三行的正常小【箭头】工具，见图 2-15(2)。一旦选中后，就可以放开鼠标键。
 - (3) 把箭头定位在反应物的末端，并选中鼠标键。
 - (4) 把箭头按动到所需要的长度，见图 2-15(3)
- 绘制后，变换箭头的长度(或与 X 轴成的角度)的方法:选中 Shift 键，并用鼠标指向箭头，此时光标块出现；按箭头直到所要的长度(或角度)。

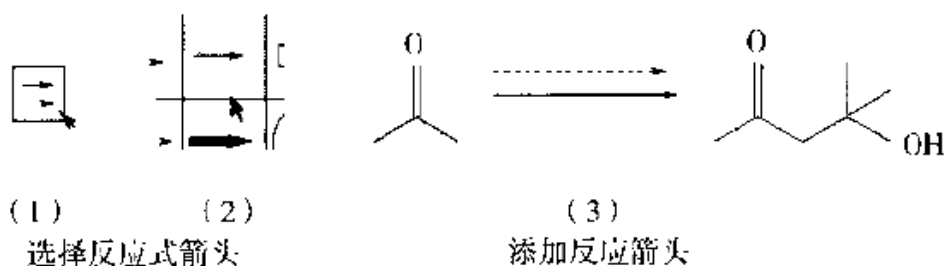


图 2-15 选择反应式箭头和添加反应式箭头

13、用文本添加反应条件

- (1) 在工具板上选择【文本】工具。
- (2) 用鼠标在箭头上定位。
- (3) 单击建立文本输入框，图 2-16 左。
- (4) 输入 OH，图 2-16 右。

【注意】有角标数字的文字说明和线性分子式，可以用 Text 菜单中的 Formula 命令建立。另外，分子式类型的计算信息可由 Analyze Structure 命令获得。

14、添加电荷符号

- (1) 选中工具板上的化学符号工具，此时子工具板显示出来。
- (2) 用鼠标指向子工具板上的负电荷(工具板第二列、第四行)，见图 2-17 左，然后放开鼠标键。
- (3) 把鼠标放在 OH 符号的右面，见图 2-17 中。
- (4) 单击建立负电荷符号，见图 2-17 右。

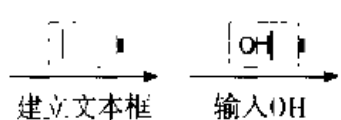


图 2-16 用文本框添加反应条件

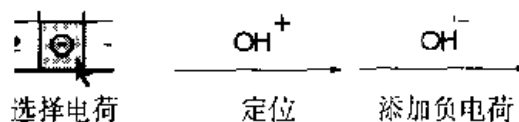


图 2-17 选择和添加电荷符号

15、符号相互集中

- (1) 在工具板上单击选择工具。
- (2) 按下 Shift 键，然后分别单击箭头、OH 和负电荷，见图 2-18。

(3) 用 Object 菜单的 Group 命令把符号相互集中在一起。

16、在结构下建立含有名字、反应物数量及其他信息

(1) 在工具板上选择文本工具。

(2) 在第一个结构下面建立文本框，见图 2-19 左。

(3) 在 Text 菜单中选择 Centered 命令，使文本居中，见图 2-19 中。

(4) 输入 2-propanone，按回车键后，再输入 2 mole，见图 2-19 右。

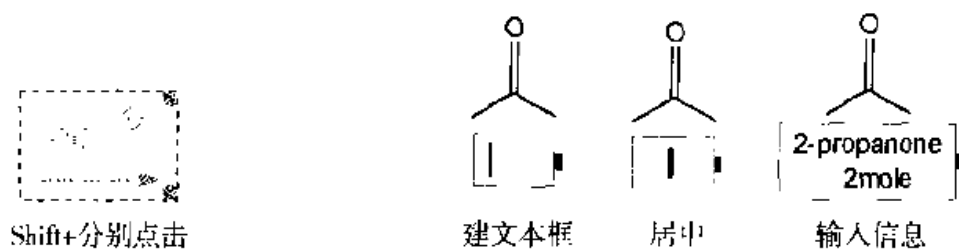


图 2-18 符号相互集中

图 2-19 在结构下建立文本信息

用同样方法，在产物结构下面建立名字、反应物数量。

如果在结构下的文本说明位置不合适，用选择工具和左右箭头键来调整。

17、用方框把反应方程式框起来

(1) 用鼠标按下图形基元工具。

(2) 选择工具箱中的阴影框，见图 2-20 左。

(3) 把鼠标放在左上角，向对角线下方按动阴影框，直到把反应过程式全部罩上，见图 2-20 右。

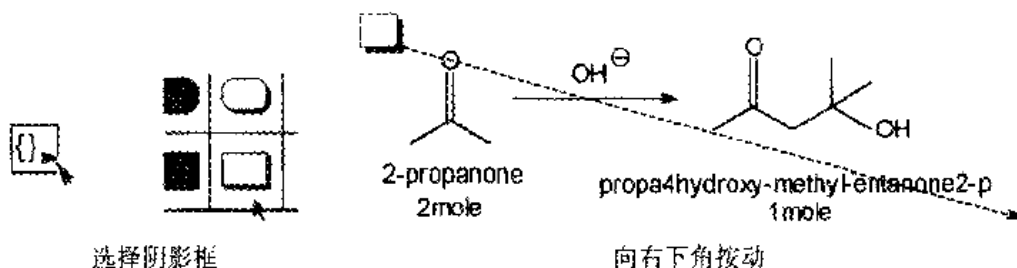


图 2-20 选择阴影框和向右下角按动

18、存储文件

从 File 菜单选择 Save 命令，存储完整的图形(图 2-21)，然后选择 close

命令，关闭操作。至此，全部结束实例指导 1。

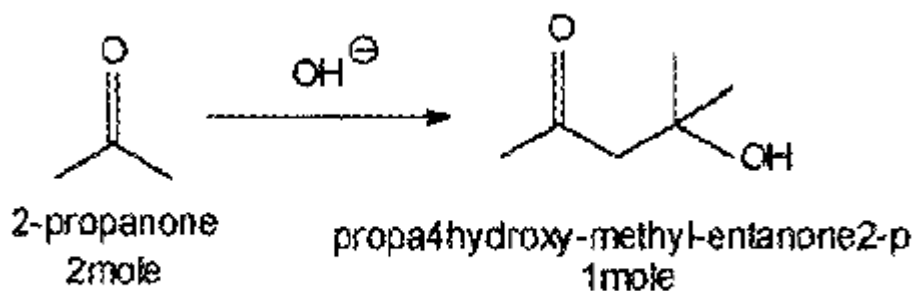


图 2-21 实例指导 1 的完整图形

2.2 指导实例 2 绘制中间体结构

在本实例指导中，将学习如何用笔工具进行在环的中间体结构上加曲线箭的形状定型操作(见图 2-22)。绘制实例之前先进行以下操作：

- (1) 从 File 菜单选择 New document。
- (2) 从 file 菜单选择 Save as，出现存储对话框。
- (3) 在对话框的文件名框中，输入 tul2.cdx。
- (4) 选择存储格式，在其中存储文件。
- (5) 单击 OK 按钮。

以下是实例指导 2 的操作步骤。

1、建立一个环己烷环

- (1) 在工具板上选择环己烷环工具，见图 2-23 左。
- (2) 在文件窗口定位。
- (3) 单击建立一个环，见图 2-23 右。

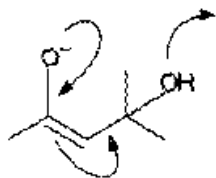


图 2-22 中间体结构上加曲线箭



图 2-23 建立环己烷环

2、去掉环的某一部分键

- (1) 在工具板上选择橡皮工具，见图 2-24 左。
- (2) 在环的顶部定位，出现选择块，见图 2-24 中。
- (3) 单击消除该原子及其两个键，见图 2-24 右。

【注意】也可分别在两个键的中间定位而分别消除。

3、添加一个键

- (1) 在工具板上选择实键工具，见图 2-25 左。
- (2) 在 C2 原子上定位，见图 2-25 中(图中加键位为 C2)。
- (3) 单击加键，见图 2-25 右。

4、添加第二个键

- (1) 在 C4 原子上定位，见图 2-26 左。
- (2) 单击加另外一个键，见图 2-26 右。



图 2-24 去掉环的一部分

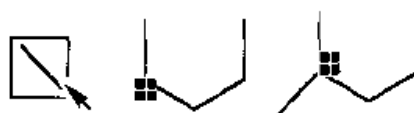


图 2-25 添加一个键

5. 按动添加第三个键

- (1) 继续把鼠标放在 C4 原子上。
- (2) 确定方位(向右上方)按动鼠标即可添加第三个键，见图 2-27 左。



图 2-26 添加第二个键

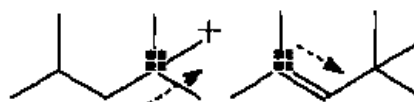


图 2-27 添加第三个键和一个双键

6、添加一个双键

- (1) 在 C2 原子上定位。
- (2) 在键上面从 C2 按动到 C3，即可建立一个双键，见图 2-27 右。

7、变化双键中单键的位置

- (1) 在双键的中心上定位，见图 2-28 左。
- (2) 单击(不要拖)，把在上面的单键变换到下面，见图 2-28 右。

8、添加一个氧负离子

- (1) 在原子上定位。
- (2) 双击原子打开文本框，见图 2-29 左。
- (3) 输入 0，在 Text 菜单的 style 子菜单中选中角标并输入“-”符号，见图 2-29 右。

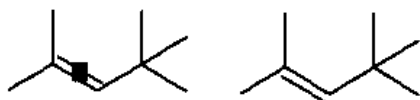


图 2-28 改变双键中单键位置

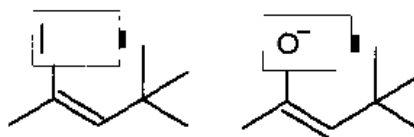


图 2-29 在原子上定位建立标记

9、添加一个 OH 原子标记

- (1) 在最右面原子上定位。
- (2) 双击原子打开文本框，见图 2-30 左。
- (3) 输入 OH，见图 2-30 右。

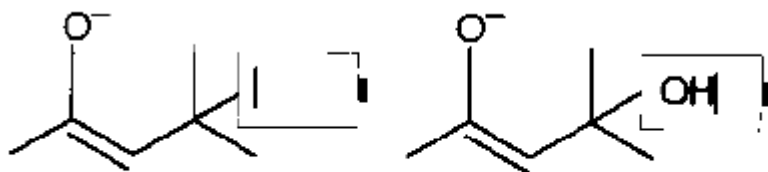


图 2-30 在原子上定位建立 OH 标记

10、建立一条表示电子的倾向曲线箭

以上结构图形结束，下一步需要用箭头来表示电子的倾向正规，因而需要用笔工具来定型箭：

- (1) 在工具板上选择笔工具，见图 2-31 左一。
- (2) 在 Curves 菜单中选择 Arrow at End 命令。
- (3) 在双键附近定位，此点是电子开始指向的起点；
- (4) 向右下拖曳，然后放开鼠标，此时出现笔工具虚线，但在工具板上的箭工具太见图 2-31。
- (5) 把光标定位在箭头停止的位置。
- (6) 单击建立一条曲线箭，见图 2-31 右起第二个。
- (7) 按 Esc 键退出绘制模式，曲箭旁的笔工具虚线消失。

11、对曲线箭的形状进行调整

- (1) 在曲线箭的中心定位(出现选择块), 见图 2-32 左一。
- (2) 单击曲线箭进入编辑状态, 此时出现笔工具虚线, 见图 2-32 左二。
- (3) 用小手形光标选中箭头尖移动, 放开鼠标, 出现另一条笔工具虚线, 见图 2-32 右二。
- (4) 按动两下端虚线柄, 此时曲线箭随移动方向变化, 见图 2-32 右一。
- (5) 当达到理想形状时, 按 Esc 键, 退出绘制模式。

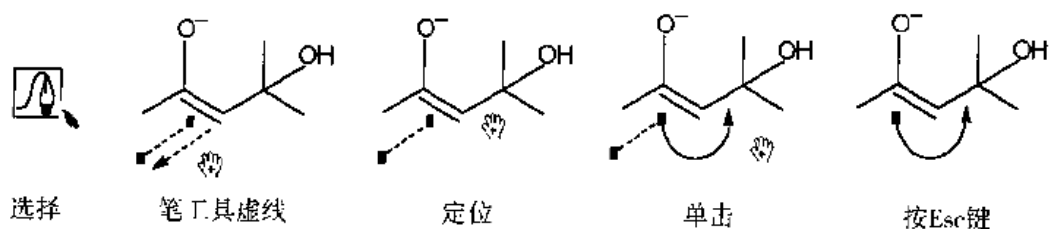


图 2-31 建立一条表示电子的倾向曲线箭



图 2-32 对曲线箭的形状进行调整

用相同的方法在结构上添加其余的两条曲线箭, 并加上电子标记

【注意】可以用 Tools 菜单中的 Magnify 命令放大图形。

12、最后的工作

- (1) 用阴影框框起图形, 见图 2-33a
- (2) 从 File 菜单选择 Save 命令。
- (3) 从 File 菜单选择 Close 命令。

2.3 指导实例 3 复杂环化合物

在本实例指导中, 将学习如何用环工具绘制较复杂的结构(见图 2-34)。绘制实例之前先进行以下操作:

- (1) 从 File 菜单选择 New document。
- (2) 从 file 菜单选择 Save as, 出现存储对话框。

- (3) 在对话框的文件名框中，输入 tul3
- (4) 选择存储格式，在其中存储文件。
- (5) 单击 OK 按钮。

以下是实例指导 3 的操作步骤。

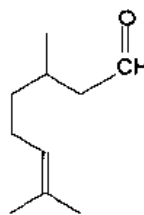


图 2-34 用环工具绘制较复杂的结构

1、在环己烷上添加一个环

- (1) 在工具板上选择环己烷环工具。
- (2) 在环右下键的中心定位，见图 2-35 左
- (3) 单击合并一个环，见图 2-35 右。

2、合并第二个和第三个环

- (1) 在第一个环的左下键的中心定位，此时出现选择块，单击合并第二个环，见图 2-36 中。
- (2) 在第一个环的右上键的中心定位，此时出现选择块，单击合并第三个环，见图 2-36。

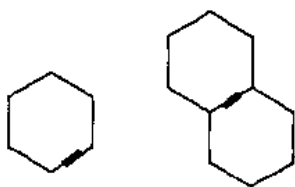


图 2-35 在环己烷环上加第一个环

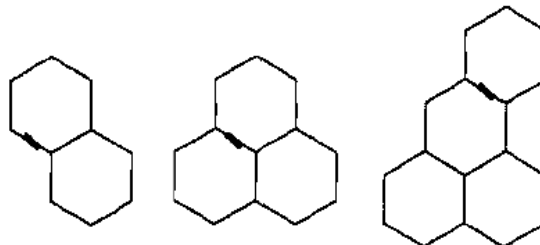


图 2-36 合并第二个和第三个环

3、用橡皮工具去掉结构中的部分键

- (1) 选择【橡皮】工具。
- (2) 选择原子点位定位，此原子点出现光标块，见图 2-37 左二。
- (3) 单击光标块消除该原子及与其相连的三个键，见图 2-37 中。
- (4) 以上述方法继续消除原子和键，结果见图 2-37 右二和图 2-37 右一。

4、在结构上加双键

- (1) 在工具板上选择【实键】工具。

(2) 在图 2-38 左面结构的原子点位处定位。

(3) 向上移动建立双键，见图 2-38 左。

同样，可在右面结构建立第二个双键，见图 2-38 右。

5、加碳原子标记

(1) 在工具板上选择【文本】工具。

(2) 在原子点位定位，见图 2-39 左。

(3) 按快捷键 C，原子标记 C 随着合适数目的氢原子出现，见图 2-39 右。

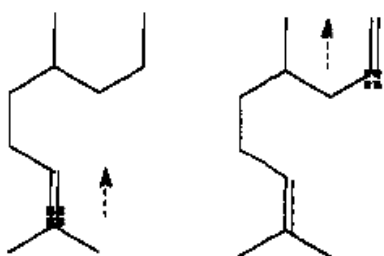


图 2-38 在结构中加双键

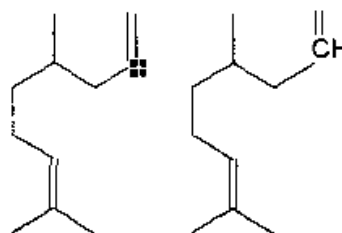


图 2-39 加碳原子标记

6、加氧原子标记

(1) 在原子点位定位，以便加氧原子标记，见图 2-40 左。

(2) 输入 O 键，原子标记氧原子出现，图 2-40 右。

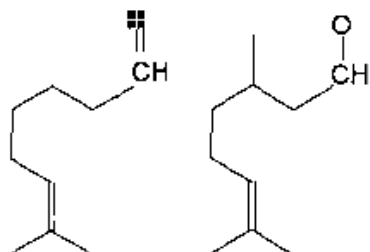


图 2-40 加氧原子标记

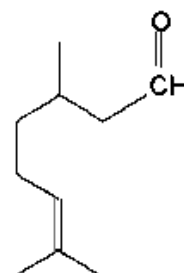


图 2-41 最后完成图

7、最后的工作

(1) 用阴影框框起图形，见图 2-41。

(2) 从 File 菜单选择 Save 命令。

(3) 从 File 菜单选择 close 命令。

2.4 指导实例 4 Fischer 葡萄糖结构图

在本实例指导中,将学习如何用绘制费希尔(Fisher)葡萄糖线性结构图(见图 2-42)。绘制实例之前先进行以下操作:

- (1) 从 File 菜单的 open special 子菜单中选择 ACS-1996.cds。
- (2) 从 file 菜单选择 Save as, 出现存储对话框。
- (3) 在对话框的文件名框中, 输入 tul4.cdx。
- (4) 选择存储格式, 在其中存储文件。
- (5) 单击 OK 按钮。

以下是实例指导 4 的操作步骤。

1、建立一条五连键

- (1) 在工具板上选择【实键】工具, 并在文件窗口定位。
- (2) 在 Tools 菜单中选择 Fixed lengths 命令。
- (3) 垂直向下按动鼠标建立第一个键, 见图 2-43。
- (4) 在第一个键的下端原子点定位。
- (5) 垂直向下按动鼠标建立第二个键。
- (6) 重复 3、4、5 操作三次, 建立一条五连键, 见图 2-43

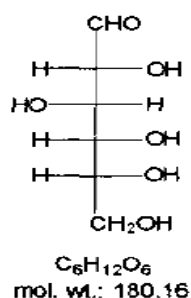


图 2-42 费希尔(Fischer)葡萄糖结构

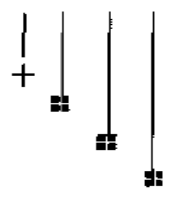


图 2-43 建立五连键

2、建立与五连键垂直的水平键

- (1) 用鼠标在 C2 处定位, 出现正方形选择块。
- (2) 【单击+向右水平按动】建立一个与五连键垂直的水平键, 见图 2-44 左。
- (3) 继续在 C2 处定位, 向左建立一个水平键, 见图 2-44 中。

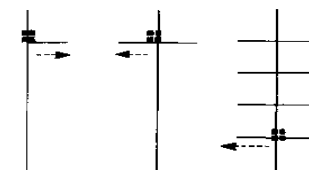


图 2-44 建立与五连键垂直的水平键

(4) 依此类推，在五连键两侧可建立 10 个与其垂直的水平键，见图 2-44 右。

3、在骨架上加标记

(1) 存 C1 处定位，见图 2-45(1)。

(2) 双击 C1 建立文本框，见图 2-45(2)。

(3) 输入 CHO，见图 2-45(5)。

(4) 在框外单击关闭文本框。

(5) 同样，在 C6 处定位，双击 C6 建立文本框，输入 CH₂OH（见图 2-45(6)）。

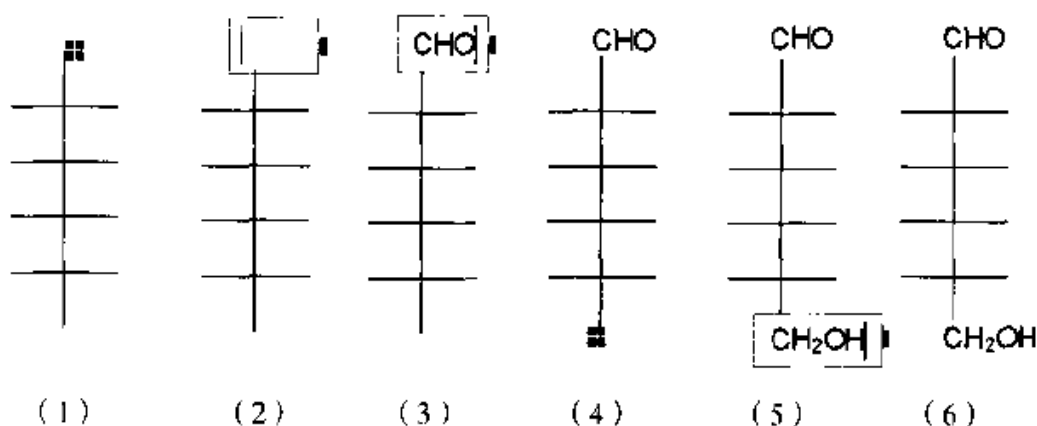


图 2-45 在 C1 和 C6 处加标记

4、加 H 和 OH 标记

(1) 在左水平 C1 键端定位，见图 2-46 左。

(2) 在 C1 处输入 H 原子标记，见图 2-46 中，依次在图中箭头指向的原子点位加 H 原子标记。

(3) 在左水平 C2 键端定位，图 2-46 右，依次在图中箭头指向的原子点位加 OH 标记。

5、检查结构

(1) 在工具板上选择【选择】工具，最后绘制的图形自动被选择。如果结构未被选择，双击结构图形。

(2) 从 Structure 菜单选择 Analyze Structure 命令。如果绘制正确，将出现来自结构的计算信息；如果绘制不正确，将提供问题所在。

(3) 在 Analyze Structure 对话框中，关闭所有的项目，只留下 Formula 和 Molecular Weight 检查框。

(4)把 Formula 和 Molecular Weight 信息拷贝到结构式下。

6、最后的工作

(1) 用阴影框框起图形，见图 2-47。

(2) 从 File 菜单选择 Save 命令。

(3) 从 File 菜单选择 Close 命令。

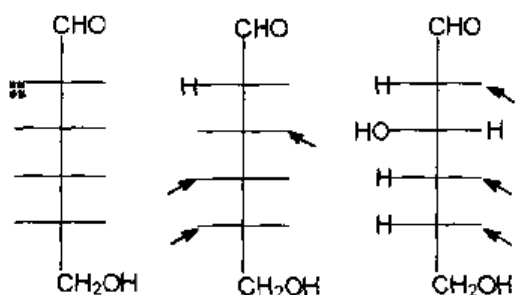


图 2-46 加 H 和 OH 标记

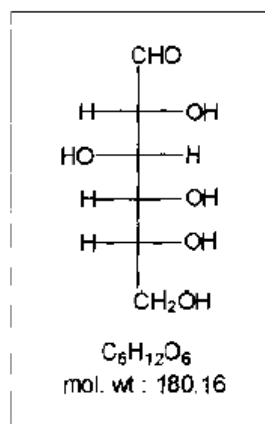


图 2-47 本实例最后完成图

2.5 指导实例 5 绘制透视图形

在本实例指导中，将学习如何用绘制霍沃思（Haworth）D-葡萄糖结构透视图中(见图 2-48)。绘制实例之前先进行以下操作：

- (1) 从 File 菜单选择 New document。
- (2) 从 file 菜单选择 Save as，出现存储对话框。
- (3) 在对话框的文件名框中，输入 tul5.cdx。
- (4) 选择存储格式，在其中存储文件。
- (5) 单击 OK 按钮。

以下是实例指导 5 的操作步骤。

1、建立和定位一个环己烷环

- (1) 在工具板上选择环己烷环工具。
- (2) 在文件窗口单击建立一个环。
- (3) 按 Ctrl+Alt+Tab 键，将自动选择最后绘制的结构图，见图 2-49 左。

(4) 在选择方框的右上角出现弯曲双箭头光标(称旋转柄), 表明选择工具在进行旋转模式的操作, 见图 2-49 中。

(5) 按动旋转柄向右下方旋转 30 度(在 Messages area 中检查), 见图 2-49 右。

(6) 在虚框外单击, 使虚框消失。

【注意】尽管 Fixed Angles 命令是打开的, 但角度是不受限制的。此命令仅仅在建立时起作用。

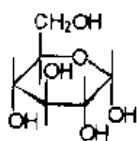


图 2-48 D-葡萄糖结构透视图形



图 2-49 建立和旋转定位环己烷环

2. 定位环上的氧原子

(1) 在环己烷环右上角原子点处定位, 见图 2-50 左。

(2) 按快捷键 O, 见图 2-50 右。

3、添加垂直键

(1) 在氧下面的 C1 定位, 见图 2-51 左。

(2) 向上按动建立一个向上的键, 见图 2-51 左二。

(3) 在 C1 再次定位, 向下按动建立一个向下的键, 见图 2-51 中。

(4) 重复以上操作, 在图 2-51 右二中的箭头处建立上、下垂直键。见图 2-51 右。

【注意】在 C5 处进行 Alt+向下按动操作, 在 C3 键端距 C5 一半处停止。当不用 fixed length 命令而利用快捷键时, 不需要关闭 Fixed Lengths 命令。

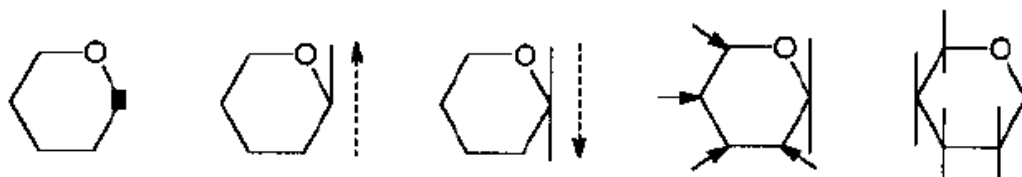


图 2-51 添加垂直键

4、把结构图形转变成沿 Z 轴的透视图

- (1) 在工具板上选择套索工具。
- (2) 在右下角的调整柄处，按 Alt 键，见图 2-52 左。
- (3) 向上按动直到结构垂直缩小 50%，见图 2-52 右。

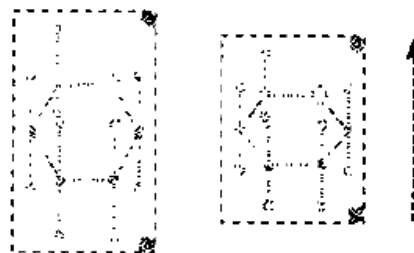


图 2-52 变结构为透视图

5、建立 OH 原子标记

- (1) 选择单键工具，在结构右面向下键端原子处定位，见图 2-53 左一。
- (2) 双击建立原子标记框，图 2-53 左二。
- (3) 输入 OH。
- (4) 在图 2-53 右二箭头处单击，OH 原子标记重复出现，见图 2-53 右一。

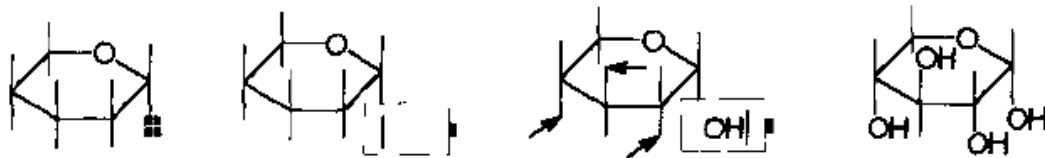


图 2-53 建立 OH 原子标记

6、建立 CH₂OH 标记

- (1) 在 C5 向上键端三击，建立 OH 。
- (2) 按回车键建立原子标记框，见图 2-54 左。
- (3) 在 OH 前输入 CH₂标记，见图 2-54 右。

【注意】回车快捷键所打开的原子标记框只对最后标记的原子起作用，此定义不能改变。

7、变化前面键的形状

- (1) 在工具板上选择黑体键。
- (2) 单击底键的中心，变为黑体键，见图 2-55 左。
- (3) 在工具板上选择黑体楔键，单击下部两侧键的中心，此时两单键变为两黑体楔键，见图 2-55 右。

【注意】如果两楔键的方向是错误的，只要在中心处重新单击即可。

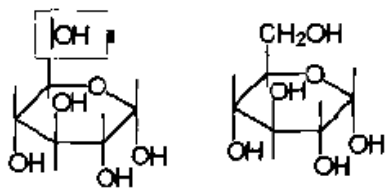


图 2-54 建立 CH₂OH 标记

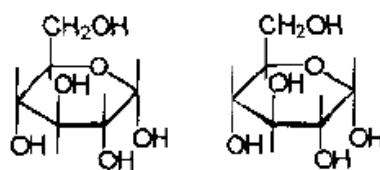


图 2-55 变化前面键的形状

7、最后的工作

- (1) 用阴影框框起图形，见图 2-56。
- (2) 从 File 菜单选择 Save 命令。
- (3) 从 File 菜单选择 Close 命令。

2.6 指导实例 5 Newman 结构

在本实例指导中，将学习如何用绘制纽曼（Newman）结构图（见图 2-57）。

绘制实例之前先进行以下操作：

- (1) 从 File 菜单选择 New。
- (2) 从 file 菜单选择 Save as，出现存储对话框。
- (3) 在对话框的文件名框中，输入 tul6.cdx。
- (4) 选择存储格式，在其中存储文件。
- (5) 单击 OK 按钮。

以下是实例指导 6 的操作步骤。

1、建立一个三键对称结构

- (1) 在工具板上选择实键工具。
- (2) 在文件窗口定位，向下按动建立第一个键。见图 2-58
- (3) 在单键下面的原子点处定位，单击加第二个键。
- (4) 再在相同的原子点定位，单击一次加第三键，此时结构为三键对称结构，见图 2-58 右。

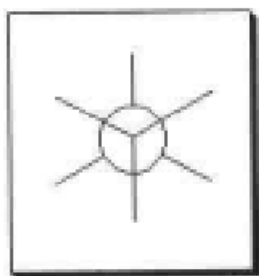


图 2-57 纽曼(Newman)结构



图 2-58 建立三键对称结构

2、复制结构

- (1) 选择套索工具，最后绘制的结构会自动被选择。
- (2) 把光标放在选择框里，按下 Ctrl 键。
- (3) 按下鼠标，如图 2-59 按动处复制结构。

3、加一个键链接两个结构

- (1) 在工具栏选择单键工具。
- (2) 在上面结构中心定位，向下按动 ALT 键，见图 2-60 左。
- (3) 按下鼠标键，按动与另一个结构相连。
- (4) 当另一个结构中心出现光标块时，放开鼠标，见图 2-60 右。

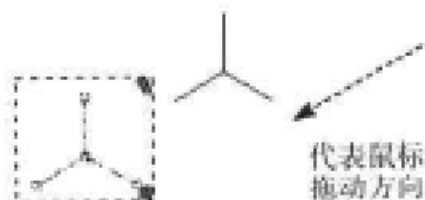


图 2-59 复制三键对称结构

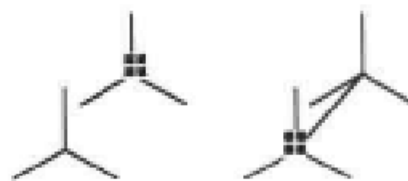


图 2-60 连接两个结构

4、在结构中空轨道。

- (1) 用鼠标单击 Orbital 工具，此时出现子工具板
- (2) 按选中空轨道（第一行、第一列），见图 2-61 左。
- (3) 在下面分结构的中心原子定位，按 Alt 键。
- (4) 按下鼠标，向外按动建立轨道，见图 2-61 右

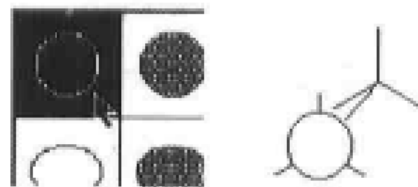


图 2-61 在结构中空轨道

5、旋转上面的分结构

- (1) 选择套索工具，最后绘制的结构会自动被选择。
- (2) 上面分结构旁定位，按下鼠标键，绕着分结构全选三键，见图 2-62 中
- (3) 在右上角处双击旋转柄，Rotation 对话框出现，见图 2-62 中。
- (4) 在文本框中输入 180，然后单击 Rotate，结构旋转到相反的方向。

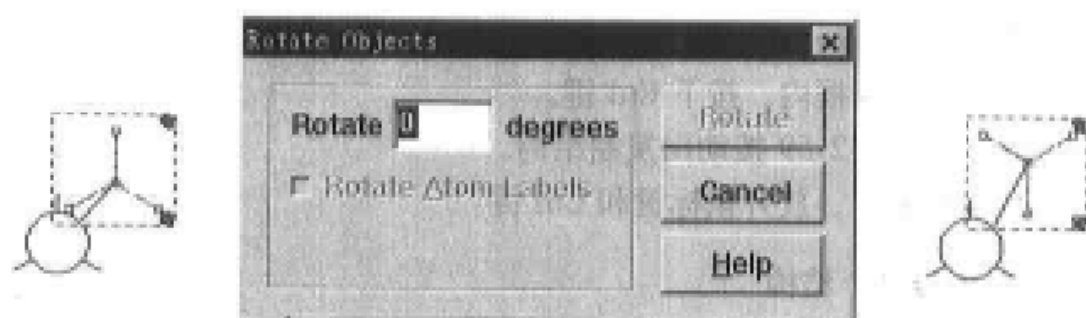


图 2-62 旋转上面分结构

6、变化层次结构

- (1) 从 Object 菜单中选择 Bring to front 命令。
- (2) 把光标放在选择方框中，直到光标变为手光标。
- (3) 沿图 2-63 左图的箭头方向按动鼠标，直到被选择的上面分结构的中心原子定位在轨道中为止，见-63 右。
- (4) 放开鼠标，在选择框外单击消除虚框。此外，便把结构的前面部分定位成纽曼（Newman）结构。

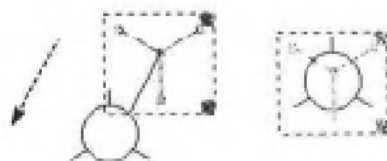


图 2-63 后面结构移到前面

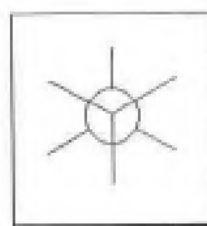


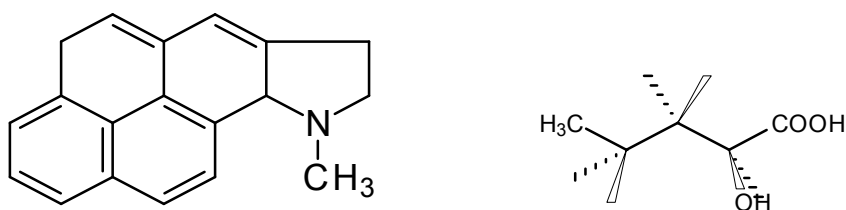
图 2-64 实例指导 6 的完成图

7、最后的工作

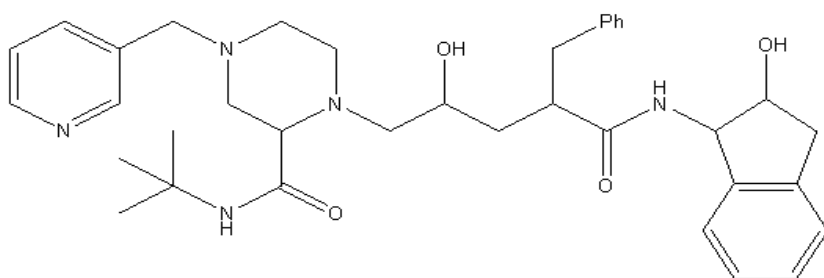
- (1) 用阴影框框起图形，见图 2-64
- (2) 从 File 菜单选择 Save 命令。
- (3) 从 File 菜单选择 Close 命令。

练习：

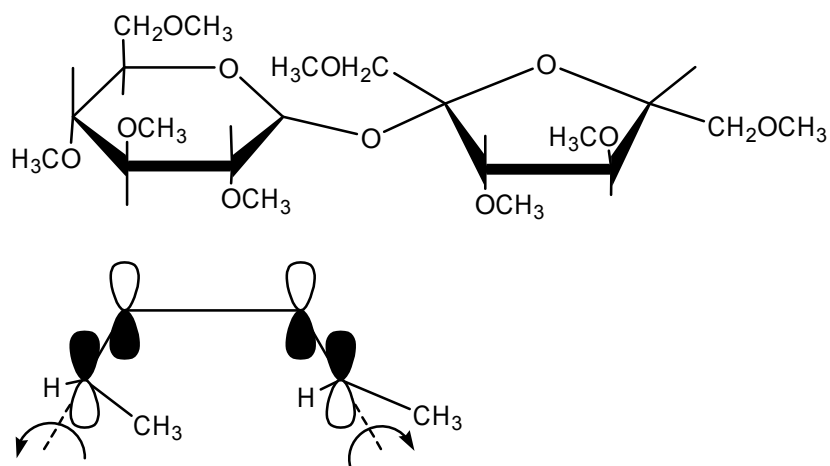
1. 利用 chemoffice2004 画出下面的结构式，写出名称，分子量，熔点，沸点等信息。



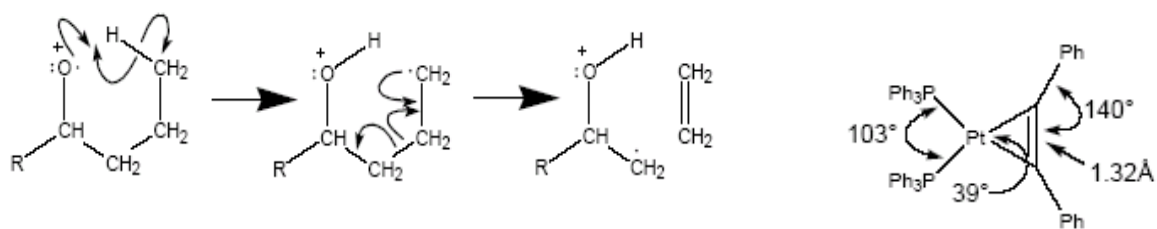
2. 利用 chemoffice2004 画出下面的结构式，写出名称，分子量等信息。



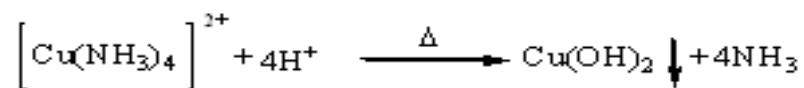
3. 利用 chemoffice2004 画出下面的结构式，写出名称，分子量等信息。



4. 利用箭头和弧线功能画出下列结构式



5、写出下列反应方程式



7、画出一套常压蒸馏装置和一套由滴液漏斗、温度计、冷凝管组成的有机反应装置。

8、画出下列化合物的结构

3-methylbenzoic acid

2-methyl-1,2,3,4-tetrahydrophenanthren-1-ol

7-amino-9-methylbicyclo[3.3.1]nonan-3-ol