第一章 计算机在化学分子绘图中的应用

1.1 简介

Microsoft Office Word 是一款非常强大的图文编辑软件,但没有提供绘制化学分子结构式的工具。现在微机上经常使用的绘制 2D 分子结构的软件为 ChemWindow、CS ChemDraw、ISIS Draw 和 ChemSketch 等;绘制 3D 分子结构的软件有 CS Chem3D、HyperChem、WebLab ViewerPro、ArgusLab 和 RasMol 等。2D 分子结构绘图软件的使用方法是基本相似的,我们将选用 ChemWindow 6.0 为例介绍这类软件的基本用法。

ChemWindow(www.chemwindow.com)常见的有 3.0、5.0、6.0 三个版本,3.0 版用于 Windows 3.0,其他两个版本均可以在 Windows 2000/Windows XP 下运行,6.0 版的安装文件约为 15MB。 安装时要求 Windows 已安装打印机驱动程序(只安装驱动程序即可,不必非得有打印机),安装步骤与一般 Windows 程序类似,安装后即可运行。程序打开后,窗口界面与一般 Windows XP 的软件相似,依次包括菜单栏、工具栏和文档区(图 1.1)。工具栏提供了许多常用的化学分子 及化学键,使用时单击一下工具栏中所需的工具,移动鼠标到编辑区后,指针变为 "+",在 合适位置单击,则分子结构式就会出现,使用非常方便。ChemWindow 6.0 还支持 Windows 剪贴板,所有结构式可以方便地以对象形式剪贴到 Word 文档中,而当要进行修改时,只需在 Word 文档中双击结构式,即可打开 ChemWindow 进行修改。下面就从工具栏开始按功能分类 介绍 ChemWindow 6.0 软件的使用方法和技巧。



图 1.1 ChemWindow 6.0 界面

1.2 工具栏

ChemWindow 6.0 更改了工具栏的形式,使其与 Windows 的风格统一,同时提供了更多的工具按钮以及增加了工具栏选择的自由度。View 菜单中可以设置显示哪些工具栏,用户可以根据自己的需要显示或掩藏工具栏。单击带有右红三角的工具按钮,可以打开选择工具栏,选择某工具后则显示该工具的按钮(题:按钮不变,从这里可以选定模板)。

在工作区右击,可以直接打开工具栏,如图 1.2 所示。



图 1.2 工具栏

(1)常用工具栏 (Standard Tools):提供了选择、套索、化学标记、键、环、模板以及可选择工具按钮。

(2) 自定义工具栏 (Custom Palette): 提供可选择工具按钮。

(3) 命令工具栏 (Commands): 提供保存、打印、编辑及一些图形关系操作按钮。

🚰 🖶 🗢 🗠 🖄 🏙 🔠 🖉 🖉 🖽 😤 🖽 🍣 🞞 🥞 📜 💡

(4) 键工具栏 (Bond Tools): 提供化学键按钮。

1 1 2 1 4 4 5 1 1 1 1 1 11 11

(5)图形工具栏 (Graphic Tools):提供文字、表格、箭头和自由绘图工具等按钮。

Τ▦◻◻◻੦∧∧⊘◙▯▯◖ぃ狗隊

(6) 轨道工具栏 (Orbital Tools): 提供各种轨道图形按钮。

0 0 0 0 0 8 8 9 9 8 8 8 8 8

(7) 其他工具栏 (Other Tools): 提供板擦、环、长链等工具按钮。

(8)反应工具栏 (Reaction Tools):提供反应箭头工具按钮。

→ --+ ++ |= |-+ |= |+

(9) 符号工具栏 (Symbol Tools):提供电荷、自由基和其他符号标记按钮。

★ ⊕ ⊖ + − ± . + + 123 ab ∝β 123 ab ∝β

(10) 模板工具栏 (Templete Tools): 提供一些模板按钮。

(11)格式工具条 (Style Bar):提供分子结构样式、字体、字号、颜色以及其他格式按钮。

Reports - Times New Roma - 12 - Black - B I U X2 x2 04 = = =

(12)图形格式工具条 (Graphics Style Bar):提供图形样式按钮。

White Fill for Sha 🕶 📕 Black Line for St 👻 1.0 point 👻 📈

(13) 缩放工具条 (Zoom Bar): 提供缩放工具按钮。

100 % 💽 🔍 🔍 🔍 🖸 🖸

1.3 化学键的绘制

(1) 单键 (/// / / / / /)。

1) 共同性质。

① 单击新产生的键将出现在比较合适的方向,单独的键将出现在水平方向。

Click

② 采用拉伸的方式产生键,同时按住 Shift 键则产生任意长的键,按住 Ctrl 键则可至任 意方向,在初始点结束则取消。

③ 键端可以用周期表或用键盘快捷输入,一些键盘快捷键为: b=Br, c=C, f=F, h=H, l=Cl, n=N, o=O, p=P, s=S; 空格=不标记的 C; 其他快捷键请参考 Help 文件。基团上的氢数自动给出,多次按键则给出不同氢原子数的集团。如按 n 则依次给出 NH2、N、NH。另外也可自己设置快捷键(Other:Edit Hot Keys)。

④ 单击键的中央可以在各种键型之间互换。

- click

2) 特殊性质。

① 使用 / 按钮, 在键中央单击可依次产生双、三、单键。

② 按住 Alt 键单击 / 按钮则产生短线双键。

4 计算机在化学化工及生物工程中的应用



 使用 按钮,单击键中央转换为短双键;单击短双键可以改变短键的位置;将光标移 到键中央按住鼠标左键左右拖动可改变双键的宽度,上下拖动可以改变短键的长短。



② 使用 按钮,按住鼠标左键拖动可以产生长链多键,右方数字代表键的个数,松开鼠标则确定。同时按住 Shift 键为任意键长;按住 Ctrl 键为任意方向;按住 Alt 键为不饱和双键长链。



③ 其他双键和多重键,使用方法与短双键使用相同。

1.4 与画环有关的工具

(1) 饱和环。

① 只绘制一个环时:单击鼠标左键,水平方向上产生一个环;按住鼠标拖动可翻转至所 需方向,松开鼠标即可得到所要方向的环。按住 Shift 键为不同键长;按住 Alt 键为不饱和环。

② 与其他原子相连:单击某原子,将原子与新绘制的环以单键连接;按住某原子拖动, 至所需方向,松开鼠标得到与原子直接连接的环;单击欲连接的键中央,则粘贴产生稠环。



(2) 不饱和环。

不饱和环与饱和环有相同操作,不同处为:使用^④按钮,在环中心单击可以加共轭环, 拖动环可以改变环大小。



(3) 其他环。

⑦ 分类提供一些环状分子: Aromatics、Bicyclics、Conformers、Cycloalkanes、Polyhedra 和 Templetes,分别如下方几个图片所示。



1.5 与画箭头有关的工具

与画箭头有关的工具包括→→↔→→→⊂┍/∩/℃©。

(1)反应式箭头 (→→↔→→→(→)→)。

① 单击产生水平箭头。

② 拖动鼠标,可以产生各方向的箭头;如拖动回原点,可改变箭头类型。

③ (双线箭头)按住箭头中央黑块拖动,可改变箭头宽度。

④ 单击箭头中央,可以改变箭头种类,如下图所示的同型不同方向等。

$$\Rightarrow$$

⑤ 按住 Shift 键,拖动鼠标可以改变箭头长度。

⑥ 使用□按钮拖动鼠标可产生 90°箭头,单击端点可改变箭头类型,拖动端点可改变两端的长度和方向,按住 Shift 键拖动箭头的各端点可改变箭头形状,其操作与弯箭头类似。

(2) 机理及电子转移箭头 ()^)。

① 通过拖动鼠标画出弯箭头。

6 计算机在化学化工及生物工程中的应用

② 拖动鼠标时回原点再拉出可以使弯箭头翻转。

③ 刚绘制的弯箭头有两个方框,可以通过调整方框的位置改变曲线的形状,也可以拖动 箭头的首尾改变箭头的形状。

④ 单击箭头两端可以改变箭头的类型。

(5) 按住 Shift 键,在箭头上的箭头点和 2 个箭头的侧翼点拖动鼠标可改变箭头的形状。



⑥ 欲改变箭头,单击箭头可以激活。



化学符号标记和文字说明 1.6

(1) 化学符号标记按钮 (二)。

① 单击要加化学符号的位置,产生插入符,输入原子或基团的名称即可。



② 以取代基形式插入(按住 Shift 键可以改变键长)。

- ③ 直接在空位输入分子式,如H₂SO₄。
- ④ 编辑已标记的内容: 选中 本按钮后, 单击欲编辑的位置即可编辑。



(2) 文字说明按钮 Caption (工)。

可以在图形中加文字说明,可以使用各种字体(包括中文),也可以使用 Windows 支持的 所有符号。该说明文字可以是普通文本、粗体或斜体,也可以使用 Formular 格式,字体和样 式等可以在菜单上选择。编辑方式与 Word 相似。注意不可用 Caption 方式加化学标记,该工

具所写的文本无法与化学键相连。

1.7 编辑工具

编辑工具包括对象选择工具》、套索工具》与板擦》,主要用于对象的编辑。

(1) 对象选择工具 ♪。

单击某结构的一点,或单击某对象,或者采用拖动鼠标的方式将矩形内的所有对象选择。 选中的对象边缘有 8 个黑点。如欲选择多个对象可以按住 Shift 键后选择或用鼠标拖出的方框 来包含对象。



此工具与菜单命令合用,可以改变对象大小,移动、旋转、复制、删除、改变对象等。 ① 移动:可用鼠标拖动到任意位置或使用键盘上的光标移动键逐点移动。移动过程中如 果按住 Ctrl 键则可以复制。



② 改变对象大小和旋转:鼠标选中边上的把手(handle)后可以水平或垂直放大或缩小 对象;选择角上的把手可以对整个对象放大或缩小;如在选择角上把手时按住 Shift 键则可水 平、垂直方向拉伸;如果选择边上把手时按 Shift 键则产生旋转标志,可以旋转所选对象;进 行以上操作时如按住 Ctrl 键则复制对象。



(2) 套索工具 ?.

使用套索可以复制、删除或移动一个结构的一部分;可以用来移动原子标记而不移动键; 可以改变键的前后位置;可以在套索选择的位置加标记。

① 选择:可以用单击方式选择一个原子,或用拖动的方式选择多个原子;按住 Shift 键 可以进行多次选择。



② 移动一个或多个原子:使用套索选择一个或多个原子;用鼠标拖动到目标位置(使用 键盘方向键可以逐点移动)。



③ 不移动对应的键而移动基团的标记:按住 Alt 键,用套索拖动标记至目标位置(使用 键盘方向键可以逐点移动)。



④ 移动键的前后位置:用套索选择某键,在 Arrange 菜单中选择 Bring to Front/Send to Back 命令可以改变交迭键的前后位置。

⑤ 复制套索所选内容:用套索选定部分结构后,按 Ctrl 键拖动,可复制选定部分。



⑥ 删除套索所选内容:用套索选定部分结构后,按 Backspace、Delete 键或选择 Edit 菜 单中的 Clear 命令可清除选定部分。



⑦ 标记原子:用套索选择后,选择周期表或使用快捷方式标记原子。用空格键去除不想标记的原子。



⑧ 旋转结构中的一部分:选择旋转点,单击旋转工具 3 或选择 Arrange 菜单中的 Free Rotate 命令,可用拖动的方式旋转结构中的一部分。

第一章 计算机在化学分子绘图中的应用



⑨ 其他功能: 套索选择后,可以使用编辑及改变模式命令。

⑩ 选择工具 b 也可以进行套索操作,其方法是在使用时按 Alt 键。

(3) 板擦 2。

使用板擦可以删除某个原子、化学标记、键以及图形对象等。

1.8 画框及括号工具

(1) 画框工具 (リロロロ)。

① 选定框的类型,用鼠标拖出框,松开鼠标即可。如在起始点松开鼠标,则不画框,按 住 Shift 键则画方框。



② 改变框大小和位置:使用选择工具 ⋈ 放大或缩小。

③ 拖动框的左上角,可以改变框线的角的弧度;拖动其右下角,可以改变框线的阴影 大小。



(2) 画括号工具(<u>口,0(()</u>)。

① 拖动鼠标产生双括号,对于 L 按钮,可在四角填写相应的上下标内容。



② 拖动括号下角可以改变双括号形状。

③ 使用选择工具 , 可以改变双括号的大小和位置。

④ 单括号:用鼠标拖动可改变角度;拖动单括号的中心,则改变形状。

1.9 原子标记符号

原子标记符号包含★ ⊕ ⊖ + - ± : ・ = - + 123 ab «# 123 ab »

选择符号后,在某原子上单击则产生相应的符号,符号与该原子相关联;拖动符号绕该 原子旋转,可以决定符号位置;按 Shift 键可改变符号与原子间距离;任意点单击产生单独的 符号对象;符号可使用套索或板擦删除。

▷≉→▷⊕

1.10 轨道符号

在起始点拖动, 画出轨道符号; 按 Shift 键可改变大小; 按 Ctrl 键改变方向; 使用 Arrange 中的前后变换命令可改变对象间的前后位置。

1.11 组合工具

组合工具包含 哈哈哈哈 小 号 际 留。

(1)水平翻转(▲)和垂直翻转(≤):选择对象,单击"水平翻转"按钮,可使被选择对象水平方向翻转;选择对象,单击"垂直翻转"按钮,可使被选择对象垂直方向翻转。



(2)自由旋转(¹):与 Arrange 菜单中 Free Rotate 功能相同;使用选择工具选择对象, 单击"自由旋转"按钮,击中对象把手拖动鼠标,可以自由旋转到指定角度,旋转中角度显示 在旁边。按住 Ctrl 键则复制出旋转后的对象。



(3)组(题))和取消组(题):将多个对象组合为一个组,也可以将多个组组合为一个 组。与 Arrange 菜单中的 Group 命令相同。例如,将一个反应式中的反应物和产物组合为一个 组,这样在某些操作时整个反应式可以同时进行,避免出现遗漏现象。



(4)连接(圖):将两个相叠或近似相叠的结构直接连接形成一个结构,同 Arrange 菜 单中的 Join 命令。注意其与组的区别。

(5) 对象排列(上): 将选择的对象按水平/垂直方式排列,与 Arrange 菜单中的 Align Object 命令相同。选择此命令后,出现对话框,水平方向有四个选项:不变、左边、中心和右边;垂直方向也是四个选项:不变、顶部、中心、底部。选择后选择 OK 进行排列。此命令 有时会使选择对象重叠。

(6)移到前面(5)/后面(5):将选择对象放至图形的前面/后面对象的堆积。 ChemWindow 将图形对象像牌一样堆积,一般的结构为透明的,所以堆积结构的次序是没有 关系的;一些工具可以产生不透明图形(如轨道等),这时前后顺序必须正确。另外, ChemWindow 在处理相互交叠的键时,自动将后面的键断开而产生立体感,使用上两个命令 也可以改变键之间的前后顺序。



1.12 其他工具

(1) 表格工具 : 可拖动制表,因可在 Word 中使用更好的制表,一般不提倡使用。

(2) Newman 投影式 . 可绘制 Newman 投影式,选中后在文档区拖动,选定前面三个 原子的位置,松开鼠标,可得到 Newman 投影式。



(3)标注工具《:单击标注工具》,可打开相应的标注工具栏,可对选定的原子进行标注。

前5个标注工具按钮为文本框样式,中间5个为连线样式,后4个为标注原子的样式。

(4)质谱碎片工具**逊**:拖动穿过分子,可将分子沿线分作两部分(自由基),分别给出 分子量和分子式。

(5)质谱标记工具 引: 在相应键上单击可将断开后两部分的分子量和分子式标出。



1.13 附加库的使用

ChemWindow 6.0 提供了四个附加的图形结构库,使用这些附加库,可以非常方便地绘制 化工设备示意图、玻璃仪器装置图和已知化学物质结构式(图 1.3)。附加库的默认位置为: C:\Program files\Bio-Rad Laboratories\ChemWin\Libraries\,包括:

- (1) CESymbol: 提供化工符号;
- (2) LabGlass: 提供化学实验室的玻璃仪器等的图形;
- (3) OtherLib 和 StrucLib: 提供化学物质的结构式。



图 1.3 附加库的使用

先打开库文件,选择所需图形或结构,也可通过查询命令在库中寻找,然后通过剪贴板 复制到用户的 ChemWindow 文档中。对于玻璃仪器,其标准口可以自动连接。

1.14 菜单命令

对常用的菜单命令不再解释,这里仅对一些需要说明的菜单命令进行说明。

(1) File 菜单: 文件管理、打印等。默认保存为扩展名为".cwg"的文件,可用 Save As 命令将文挡存为 Standard Chemistry Format (.SCF)、MDL MolFile(.MOL)、ChemDraw(.CHM) 等其他格式。可用 Page Setup 命令更改纸张大小,以扩大文档大小。

(2) Edit 菜单:包括 Undo(撤销)、Redo(重复)、Copy(拷贝)、Paste(粘贴)、Select All(全选)等命令,与其他的 Windows 应用程序相近。Join(连接)已在前面工具按钮中说明。如打开的是库文件,可以使用 Find in Library 命令在库中查找结构或仪器。Override Style 命令可改变当前样式默认的参数值如键长度、宽度、字体和字号等(注:不要随意改变)。样式可在 Style 工具条中改变。

(3) View 菜单:决定显示哪些工具栏,是否显示标尺和状态栏等。

(4)Arrange 菜单:包括前后位置设置(Bring to Front、Send to Back)、组(Group、Ungroup),
旋转(Rotate、Free Rotate)、放大缩小(Scale)、翻转(Flip Horizontal、Flip Vertical)和对象
排列(Space Objects、Align Objects)等命令。

① Rotate (^R): 将选择的对象旋转指定角度,使用该命令时,产生一对话框,输入欲旋转的角度并单击 OK 确认即可。其旋转方向为逆时针方向,如欲顺时针旋转,角度值可以输入负数。

② Scale (^S):比例缩放所选择对象的大小。所有在 ChemWindow 中的对象均可以用两种方法缩放,其一为使用鼠标,选择对象,将鼠标选中对象的把手远离或朝向对象拖动至目标大小(拖动时显示缩放的比例);其二是使用键盘,选择对象后用 Arrange 菜单中的 Scale 命令,在对话框中输入百分比确认即可。

③ Size: 设置对象大小及位置。

④ Space Objects: 等距排列对象; 对象间的距离用点数表示。选择多个对象, 使用 Arrange 菜单中 Space Objects 命令, 出现对话框, 选择对象间隔的点数和排列方式, 确认即可。

⑤ Align Objects: 将选择的对象排成一行或列。

(5) Analytical 菜单:

① Calculate Mass: 计算所选择结构的分子量。选择一个结构或一个结构的一部分,选择 Calculate Mass 命令,可计算出分子量、分子式和组成百分比,按 Paste 按钮可将选中的项粘贴 到 ChemWindow 的文档中。

② Formular Calculator: 计算分子量及不同摩尔数的分子质量。

③ Periodic Table:显示周期表。选择原子,其信息显示在中间窗口上,按 Edit 按钮可显示各个同位素参数并可进行编辑。周期表也可用于标记原子,用套索选择某结构中的一个或多个原子,从周期表中单击要选择的原子,该原子就被加到结构上,相应的氢原子个数也被加上。

(6) Other 菜单:

① Check Chemistry:检查结构是否正确。在 Other 菜单中选择 Check Syntax 命令,将检查文档中所有结构是否正确,如发现错误,其光标将移到错误位置;检查窗口的上部将提供错误的信息;改变错误后, Ignore 按钮将变为 Continue,单击继续检查。

Continue Ignore All Learn Exit The valence is not correct.

② Make Stick Structure: 将简写结构变为结构图。

③ Make Labeled Structure:将结构图改为简写形式。



④ Edit User's Chemistry: 用户可根据自己需要加入基团或分子的简写,在计算分子量等操作中程序可以辨认。

⑤ Edit Hot Keys: 用户可自己增加基团的热键,如默认中 4=Ph,在刚加上一单或双键时, 按热键程序可自动加入相应基团。

⑥ Symapps: 对选择的分子直接打开 Symapps 程序显示三维结构。

(7) Windows 和 Help 菜单: 与一般程序相同。

1.15 三维绘图程序 SymApps 6.0

使用该程序可以将 ChemWindow 6.0 中的分子结构显示为三维图形 (图 1.4),可以计算给

14 计算机在化学化工及生物工程中的应用

出键长、键角、点群等信息,可制作分子三维旋转动画,也可以将图形拷贝至 Word 文档。下面简单介绍其一些主要功能。



图 1.4 三维绘图程序 SymApps 6.0 界面

(1)分子的输入:可以从 ChemWindow 直接将分子拷贝至剪贴板,在 SymApps 执行粘贴命令;或选择分子,在 ChemWindow 的 Other 菜单中执行 SymApps 命令;也可以在 SymApps 程序中运行"打开"命令,打开各种类型的文件。一般对包含有原子坐标的分子结构文件,打开后即可显示其三维结构。对由 2D 结构产生的 3D 结构,需运行 Compute 3D Structure 命令¹¹,以使分子 3D 结构更为合理化(注:一定程度上)。

(2) 3D 工具栏:为使显示更合理,SymApps 程序提供了 3D 工具栏,可方便地将分子进行旋转、平移、放大(图 1.5)或缩小。其方法是将鼠标在相应工具栏内拖动。



图 1.5 3D 工具栏

(3)原子坐标以及分子结构参数:用回回回回四个工具按钮依次显示各原子的 XYZ 坐标、分子中各键键长、键角和二面角,如图 1.6 所示。选择原子或其他各项会在 3D 图中明显标出。



图 1.6 原子参数界面

(4) 点群的判断:按回按钮可计算分子所属点群,计算后可按CnSnji⊙按钮显示对称元素的位置。如下图为苯分子的对称元素位置。按回按钮可计算点群特征标表,如C2的特征标表, 如图 1.7 所示。



图 1.7 C2特征标表



图 1.8 分子 3D 图形的 4 种类型

对 Frame,可选择 适应 按钮确定是否显示原子标记、H 原子、键和坐标轴。 (6)光源位置等设置:通过依次的"单色"、"点光源"、"带阴影"、"光源位置"、"透视 图"按钮 意见,可使 3D 结构显示为各种光源条件下的效果。

例如,绘制防治非典的药物——利巴韦林(ribavirin)的三维结构式如图 1.9 所示。



图 1.9 利巴韦林的三维结构图

1.16 输出

ChemWindow 图形以*.cwg 文件格式存盘,一般软件不能直接调用。若要把绘制成的图形 应用于其他软件,需要对图形文件的格式进行转换。

方法一: 另存为(Save as)。

ChemWindow 能输出的文件格式为*.CHM、*.MOL、*.SCF,为实现数据共享提供了一种间接方法。

方法二: 插入 ChemWindow Document 对象, 如图 1.10 所示。



图 1.10 "插入对象"对话框

方法三:复制与粘贴(Copy and Paste)。

把绘制成的图形应用于 Word 中的方法是:选取绘制成的图形,选择 Edit 菜单中的 Copy 命令,再切换至 Word 文档中,将光标移到文本中需嵌入图形的位置,在 Word 的"编辑"菜单中选择"粘贴"命令。

先将 ChemWindow 图形复制粘贴到画笔(Paintbrush)中,然后将其转换成 BMP 或 JPG 文件,也可被大多数软件调用,但此方法得到的图形在放大或缩小时会变形。

另外,在Word的"编辑"菜单中选择"选择性粘贴"命令,也可以得到图片。

上机作业

NaOH HCl NaCl Ca(HCO3)2 CH3COOH CH3COOCOCH3

第一章 计算机在化学分子绘图中的应用 17



