

化学教师的优秀助手——Chemoffice2000

叶 非 张 珉

(东北农业大学基础部 哈尔滨 150030)

摘 要 简要介绍了实用的化学专业绘图软件 Chemoffice2000 的特点与功能, 及笔者在使用过程中的一些经验和技巧。

关键词 化学 软件

A Excellent Assistant of Chemical Teacher——Chemoffice2000

YE Fei, ZHANG Min

(Northeast Agricultural University Harbin 150030)

Abstract The characteristic and function of the chemistry software ——Chemoffice2000 is introduced.

Key words Chemistry, Software

随着现代科学技术的发展, 计算机在工作、生产中的应用愈来愈广泛, 各行各业对软件的要求也不断的增加。对于一个化学工作者来说, 日常工作中的大量的学术论文、科研成果报告中经常需要处理大量的化学结构式和化学反应式, 这就需要一套专业的化学办公软件。CS ChemOffice 2000 是现在最优秀的化学软件, 无疑是解决此问题的有力工具。

CS ChemOffice 2000 是由美国剑桥软件公司开发, 包括极品版、增强版和标准版, 最新的版本为 5.0 版^[1]。CS ChemOffice Pro 5.0 包括三个软件: ChemDraw、Chem3D、ChemFinder。其中 Chemdraw 主要用来绘制有机分子结构式、反应方程式; Chem3D 可以显示有机分子的三维立体图象; ChemFinder 可以建立自己的数据库。这三部分既可以单独使用, 又可以联合起来应用到教学和编辑的工作之中。该软件可以运行于 Microsoft Windows95、98 以及 Windows NT 下, 也可以运行在多种操作系统中。由于 Windows 环境下具有的友好用户界面的切换功能, 使得其资料可更加方便地共享于各软件之间。

1 ChemDraw5.0 的特点与使用技巧

ChemDraw5.0 的程序界面是标准的 Windows 窗口(图 1), 在窗口中点击左键以击活快捷工具。用来画分子图形的各种常用操作均用图标形式显示于左边的工具箱中, 不必记忆任何操作命令, 亦可采用下拉式菜单方式使用。有的工具按钮上有“向右的小三角”图标, 表明有多重选项。如果需要对分子图形进行放大和缩小或者进行任意角度旋转等操作, 可以直接用鼠标选中相应的结构, 就可进行操作。该软件提供了各种类型的化学键、化学分子轨道、电荷、球(椭圆); 并且自带了 12 类几百个模板, 从芳环、多元环、羰基化合物到糖、氨基酸等应有尽有, 使用十分方便; 同时, ChemDraw5.0 还具有了分子结构的扩展, 例如在写分子式时可以用 Me 代替甲基, Ph 代表苯环, 在利用展开分子式功能可以将这些缩写展开。

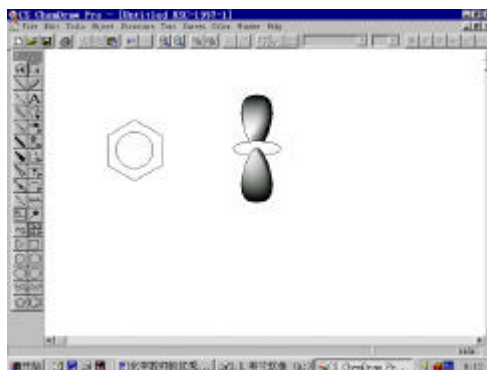


图 1 ChemDraw5.0 的窗口

ChemDraw5.0 的一大特点是具有强大的分子图形编辑功能。对分子图形可以进行组合与分块处理——即可以将许多分块的结构组合成为一个结构来进行处理,或者将一个结构分解成若干个小结构进行处理,这就使得使用者可以根据需要用不同的方式对化学结构进行编辑。ChemDraw5.0 具有对化学分子式的上下标记功能,使得对于图形的各种处理,特别是局部的处理提供了很大的灵活性。ChemDraw5.0 对于整个分子结构的图形不仅可以进行放大、缩小、旋转等操作,而且也能对局部进行精细的微调,并且能结合 Chem3D 对结构进行立体 3D 的旋转,使分子结构呈现出空间的立体形象。此外,该软件还具备了对于所绘制的化学结构进行结构式检查的功能,以确保所绘的结构式的正确性。ChemDraw5.0 中具有丰富的图形屏幕显示,使得可以对图形的不同部分用不同的颜色进行显示。使用 ChemDraw5.0 绘制化学结构式,可以让使用者象小孩子搭积木那样简单和方便。

ChemDraw5.0 绘制的化学结构图形可直接存为 19 种文件格式,例如可以存为 skc、wmf 图形格式,使得所保存的图形可以分别与 ISIS\Draw 及 Word 兼容;例如可以将反应式保存为一系列的 gif 格式,然后利用免费的软件将它转化为 gif 动画的格式,产生动态的反应演示。这一功能对于化学课程的计算机辅助教学无疑是大有裨益的。利用 ChemDraw5.0 在 Word 等系统中插入图形十分方便,只要在 Word 文档中需要的位置上打开“插入”菜单,选择“图象”,通过路径,找到文件名 xxx.wmf 后确定,即在 Word 文档中插入了所编辑的结构式图形。同样可以把它与 Microsoft Office 系统软件中的 PowerPoint 进行共享便可制作出图文并茂的专业幻灯片,取得很好的效果。此外,ChemDraw5.0 可以用 Windows 的复制和剪贴板来进行操作,从而实现了与 Microsoft Word、Excel、Powerpoint 之间的合用,并且可以利用 Windows 自带具有 OLE (对象链接与嵌入)的界面支持,可以确保所绘制的图形在其它文件中自动更新。

2 Chem3D 5.0 的特点与使用技巧

将二维平面的有机分子结构图形转化成三维的空间结构,在分子和原子水平上模拟和分析分子的立体构象是 Chem3D 5.0 的一大特点。ChemDraw5.0 的程序界面是标准的 Windows 窗口,在窗口中点击左键,可以击活快捷工具。在 Chem3D 5.0 中既可以通过复制 ChemDraw5.0 里绘制的结构来完成其空间立体的转换;也可以直接在 Chem3D 5.0 键入分子式。例如:选择“txt”,键入“CH₄”回车,就可以得到甲烷分子的空间立体结构图(图 2)。

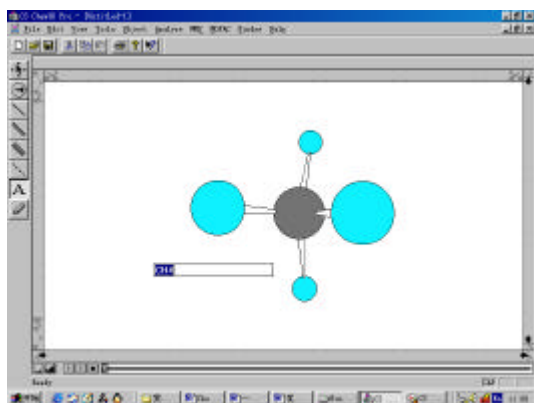


图 2 Chem3D 5.0 中甲烷的立体结构

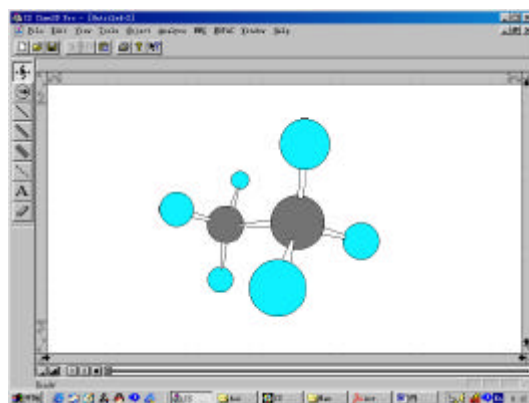


图 3 乙烷分子的交叉式

利用 Chem3D 5.0, 可以演示三维分子结构, 并且可以任意地旋转分子, 从不同的角度去观察分子。同时, Chem3D 5.0 还具有设定立体结构旋转的路径方式, 达到能够反复播放和演示的按指定路径的结构旋转动态图象。例如: 演示烷烃(乙烷)分子围绕 C-C σ 键旋转空间变化构象的动画。打开文件(File), 选择新模板(New Model), 点击文本工具 A, 键入 C₂H₆, 确定后见图 3。单击围绕 C-C 旋转的 σ 键, 打开移动控制(Movie Cotroller)中的记录键(Record button), 选择旋转钮进行旋转, 同时也可以进行空间 360°的旋转。打开播放键(Start button)就可以播放乙烷分子围绕 C-C σ 键旋转的动画图像。如果需要保存, 单击保存键即可。

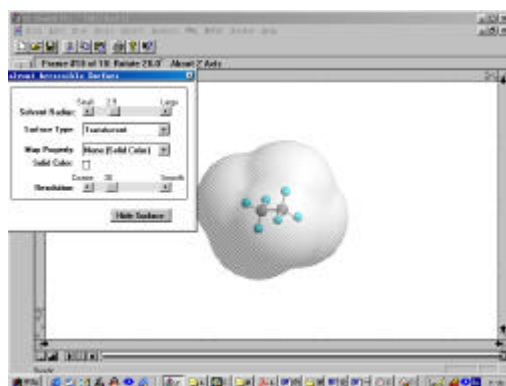


图 4 乙烷的分子表面结构图

用 Chem3D 5.0 三维图形来表征有机分子的结构, 特别有利于学生对分子立体结构产生深刻的印象。例如: 演示乙烷的分子图形状。选择新模板(New Model), 点击文本工具 A, 键入 C₂H₆, 确定。打开 View 菜单, 选择 Molecular surface tapes 中的 Solvent Accessible, 确定分子图形的表现为 translucent, 得到乙烷的分子表面结构图形(图 4)。打开菜单 Analyze, 可以选择该分子结构在空间围绕 x、y、z 轴自动旋转。利用 Chem3D 5.0 的这些功能, 笔者还建立了对映体空间结构、碳正离子空间形象、苯的空间形象、S_N2 反应历程、有机化合物分子的异构体等教学演示文件并应用于教学中, 由于它表现的动画直观性, 对学生的学习可起到事半功倍的作用。

此外, Chem3D 5.0 还提供了一些辅助的计算工具, 例如优化模型、构象搜索、分子动力学和计算分子的单点能量等。利用这些工具可以计算出分子半经验的几何构象和单个点的能量以及相关的性质, 如计算某个分子中单个碳原子的能量、扭矩等。

3 ChemInfo 5.0 的特点与使用技巧

ChemInfo 是基于国际互联网络技术开发的智能型数据管理系统。ChemInfo 5.0 可以建立分子结构的数据库, 将在工作和教学中用到的所有分子结构和文字等说明以及得到的试验数据和分析结果从容的输入进去。利用 ChemInfo 5.0, 笔者建立了烷烃、烯烃、炔烃、卤代烃、醇、酚、醚、醛、酮等重要反应的数据库, 这样, 我们就可以随时在此数据库中查找所需要的资料, 学生也可以利用数据库查找与课程相关的重要有机反应的资料; 同时, 数据库可以根据不同的分类方式(分子式、分子量、结构式、反应式、熔点、沸点等)进行检索。例如, 学生在学习卤代烃的内容时, 可以利用数据库查找出有关卤代烃的分子结构或相关的反应, 配合文字的说明, 就可以主动、有针对性地进行学习。

参考文献

- [1] <http://www.camsoft.com/>