

Applications of Chemical Software

化工软件应用

第八章 化学结构绘制-Chemdraw

万辉
南京工业大学

1

Chemdraw 简介

✓ Chemdraw是一个方便快捷的化学绘图工具，可以迅速画出各种各样的**化学结构及化学反应式**，以及**与化学有关的其它图形表示**。

✓ 具有**多种输入输出功能**，可以直接将所绘制的图片等以常见的格式输出，可由word等文字处理器识别的，便于一般的文档处理。

南京工业大学

第 2 页

2

Chemdraw 简介

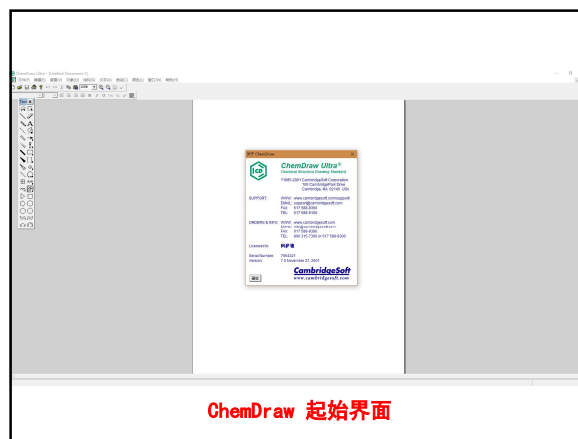
✓ 具有预测¹H NMR和¹³C NMR(核磁共振)谱图的功能，不仅可以生成图谱，还可以直接计算出各个峰的位置和面积(高度)，为化学研究带来了极大的方便。

✓ ChemDraw已经成为化学工作者撰稿和进行学术交流公认的化学结构输入软件。

南京工业大学

第 3 页

3

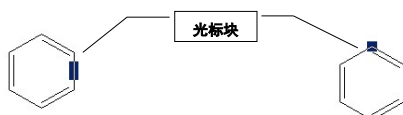


ChemDraw 起始界面

4

一、常用术语

点位：移动鼠标直到鼠标的光标放到所要进行操作的位置，如果选择的位置在图形结构中的键、原子、线等的上面，一般出现黑方块，称之为**光标块**，**选择块**或**操作块**。



南京工业大学

第 5 页

5

一、常用术语

选择：用鼠标的光标选中某种选择，使对象产生光标。选择对象并不意味着动作，只是标记要操作的对象和点位；

单击：快速按下鼠标键(左或右键)，然后快速抬起；

双击：快速操作两次单击；

拖动：由三部分动作组成——按下鼠标左键选择对象，移动鼠标，将被选的对象移动到指定位置后抬起鼠标。

南京工业大学

第 6 页

6

一、常用术语

“键+单击”：按下特殊的键和单击鼠标键同时进行。如，“Shift+单击”意思是按下”Shift”键和单击鼠标键；

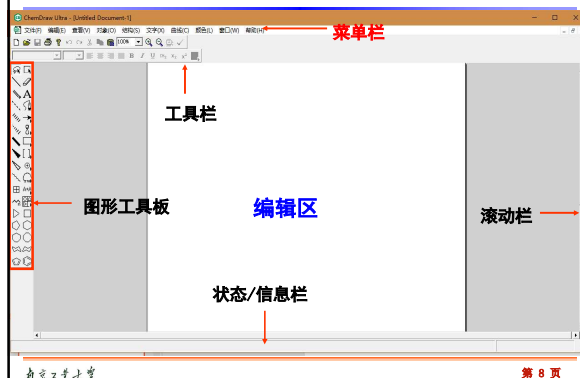
“键+拖动”：按下特殊的键和鼠标键，移动鼠标。如，“Shift+拖动”意思是按下”Shift”键和拖动鼠标光标。

南京工业大学

第 7 页

7

二、软件工具栏简介

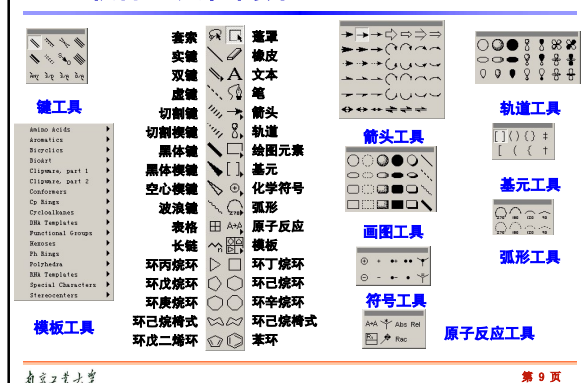


南京工业大学

第 8 页

8

二、软件工具栏简介

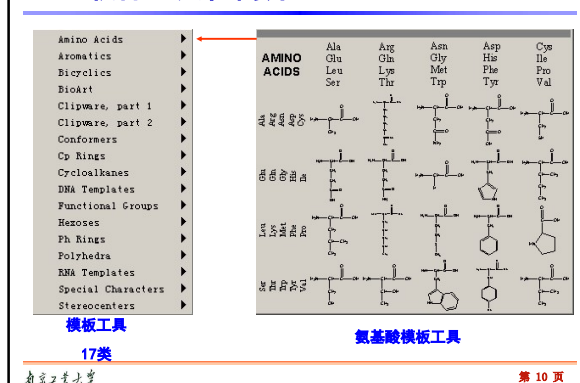


南京工业大学

第 9 页

9

二、软件工具栏简介

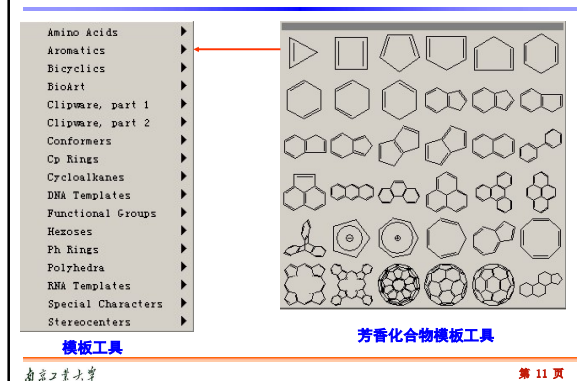


南京工业大学

第 10 页

10

二、软件工具栏简介

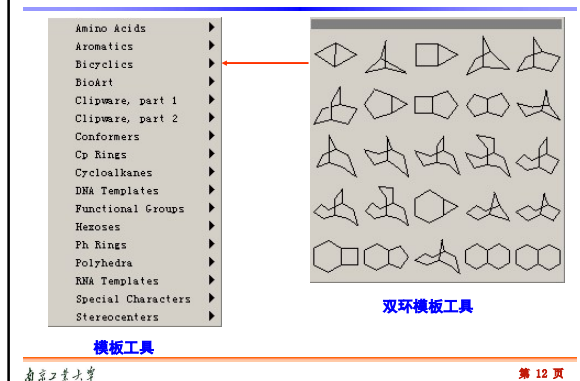


南京工业大学

第 11 页

11

二、软件工具栏简介



南京工业大学

第 12 页

12

二、软件工具栏简介

Amino Acids
Aromatics
Bicyclics
BioArt
Clipware, part 1
Clipware, part 2
Conformers
Cp Rings
Cycloalkanes
DNA Templates
Functional Groups
Hexoses
Ph Rings
Polyhedra
RNA Templates
Special Characters
Stereocenters

生物模板工具

模板工具

南京工业大学 第 13 页

13

二、软件工具栏简介

Amino Acids
Aromatics
Bicyclics
BioArt
Clipware, part 1
Clipware, part 2
Conformers
Cp Rings
Cycloalkanes
DNA Templates
Functional Groups
Hexoses
Ph Rings
Polyhedra
RNA Templates
Special Characters
Stereocenters

玻璃仪器模板工具(I)

模板工具

南京工业大学 第 14 页

14

二、软件工具栏简介

Amino Acids
Aromatics
Bicyclics
BioArt
Clipware, part 1
Clipware, part 2
Conformers
Cp Rings
Cycloalkanes
DNA Templates
Functional Groups
Hexoses
Ph Rings
Polyhedra
RNA Templates
Special Characters
Stereocenters

玻璃仪器模板工具(II)

模板工具

南京工业大学 第 15 页

15

二、软件工具栏简介

Amino Acids
Aromatics
Bicyclics
BioArt
Clipware, part 1
Clipware, part 2
Conformers
Cp Rings
Cycloalkanes
DNA Templates
Functional Groups
Hexoses
Ph Rings
Polyhedra
RNA Templates
Special Characters
Stereocenters

构象异构体模板工具

模板工具

南京工业大学 第 16 页

16

二、软件工具栏简介

Amino Acids
Aromatics
Bicyclics
BioArt
Clipware, part 1
Clipware, part 2
Conformers
Cp Rings
Cycloalkanes
DNA Templates
Functional Groups
Hexoses
Ph Rings
Polyhedra
RNA Templates
Special Characters
Stereocenters

环戊二烯模板工具

模板工具

南京工业大学 第 17 页

17

二、软件工具栏简介

Amino Acids
Aromatics
Bicyclics
BioArt
Clipware, part 1
Clipware, part 2
Conformers
Cp Rings
Cycloalkanes
DNA Templates
Functional Groups
Hexoses
Ph Rings
Polyhedra
RNA Templates
Special Characters
Stereocenters

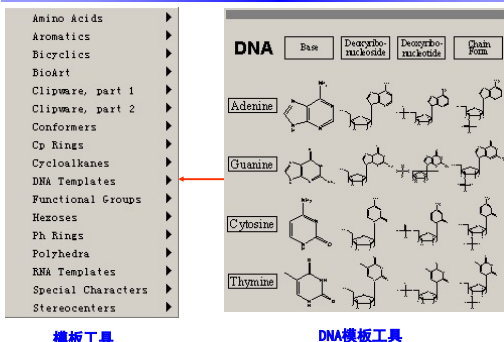
脂环模板工具

模板工具

南京工业大学 第 18 页

18

二、软件工具栏简介

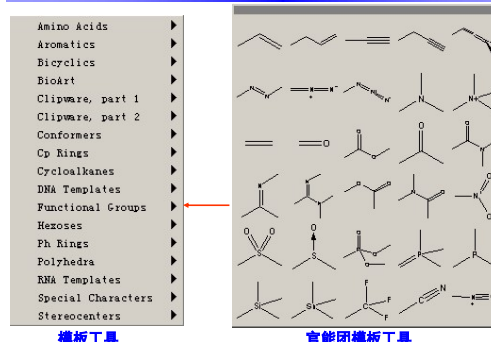


南京工业大学

第 19 页

19

二、软件工具栏简介

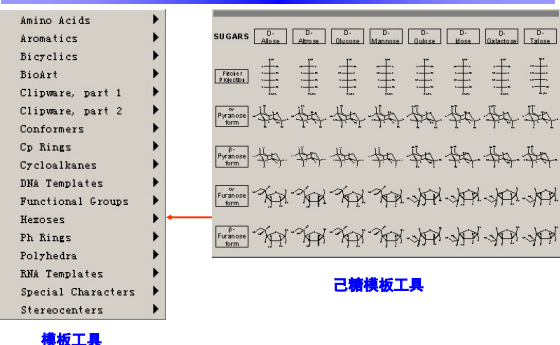


南京工业大学

第 20 页

20

二、软件工具栏简介

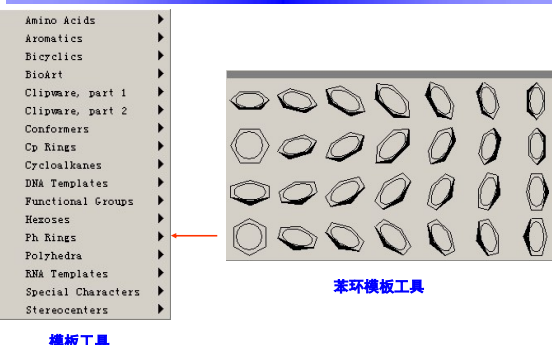


南京工业大学

第 21 页

21

二、软件工具栏简介

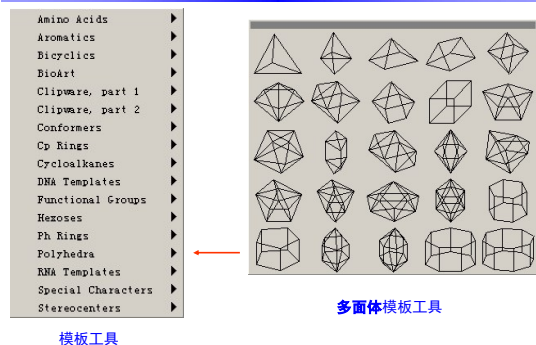


南京工业大学

第 22 页

22

二、软件工具栏简介

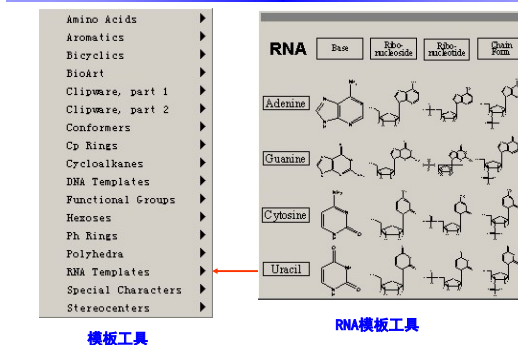


南京工业大学

第 23 页

23

二、软件工具栏简介

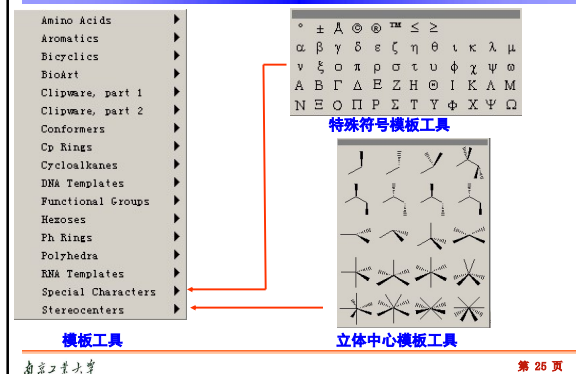


南京工业大学

第 24 页

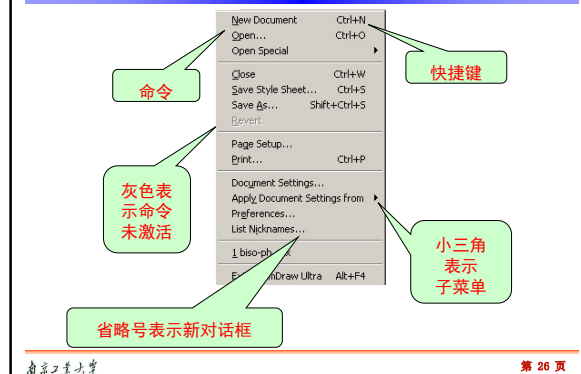
24

二、软件工具栏简介



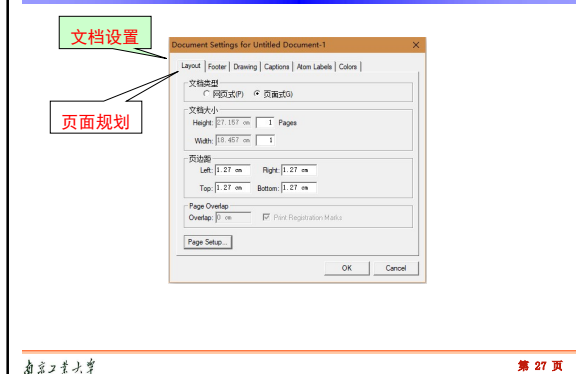
25

二、软件工具栏简介



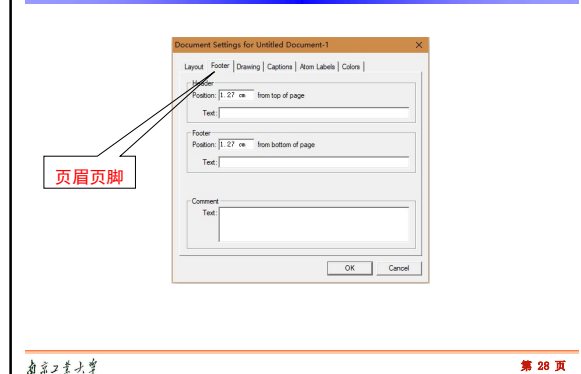
26

二、软件工具栏简介



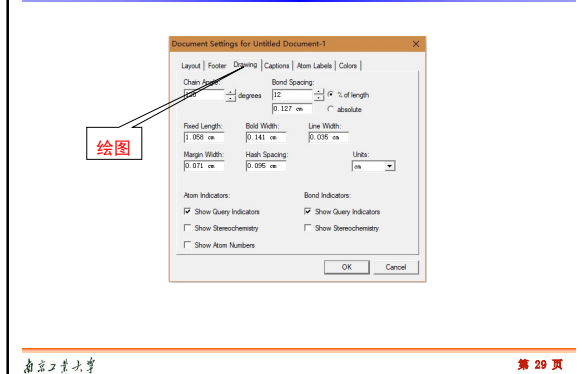
27

二、软件工具栏简介



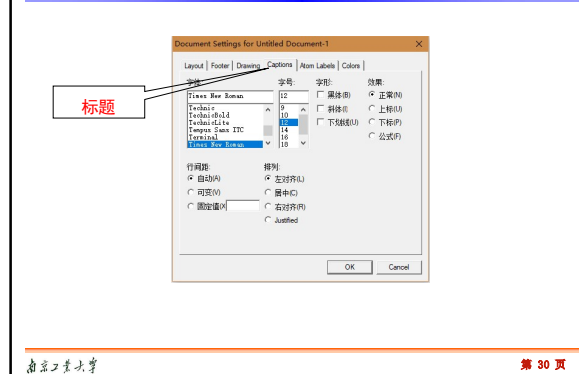
28

二、软件工具栏简介



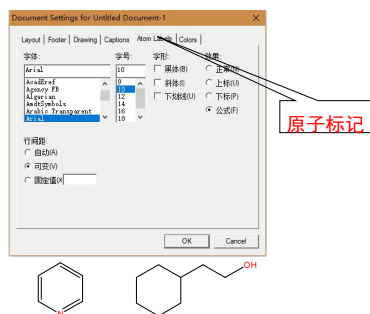
29

二、软件工具栏简介



30

二、软件工具栏简介

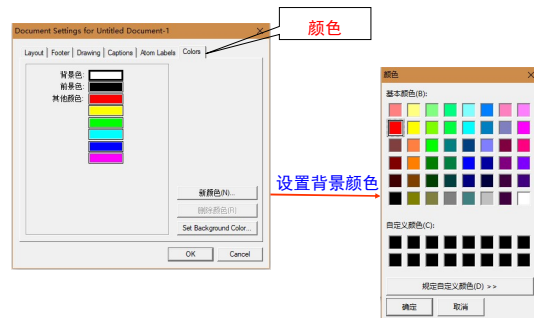


南京工业大学

第 31 页

31

二、软件工具栏简介

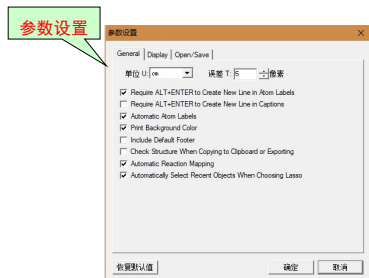


南京工业大学

第 32 页

32

二、软件工具栏简介



南京工业大学

第 33 页

33

二、软件工具栏简介

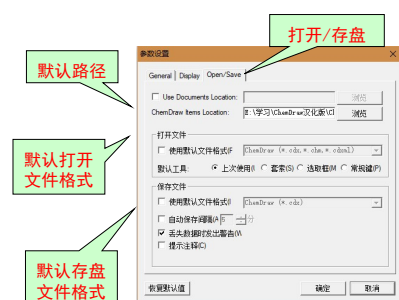


南京工业大学

第 34 页

34

二、软件工具栏简介

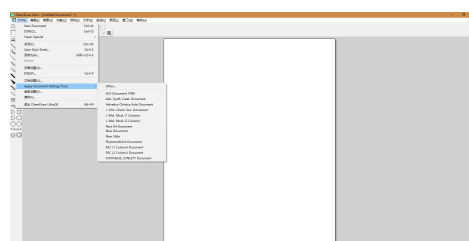


南京工业大学

第 35 页

35

二、软件工具栏简介



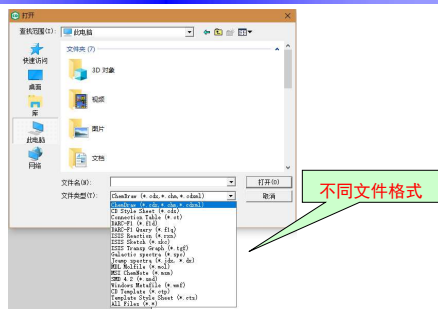
南京工业大学

第 36 页

36

二、软件工具栏简介

打开文件



南京工业大学

第 37 页

37

二、软件工具栏简介

文件格式介绍

1. CD Template(*.ctp, *.ctr)——用于保存模板文档
2. ChemDraw (*.cdx)——ChemDraw原本格式，是一个公共标记的文件格式，易被其它程序建立和解释
3. ChemDraw Steyl Sheet(*.cds)——用于存储文件设置和其它物体
4. Connection Table(*.ct)——一种实例格式，存储关于原子与元素、系列编号、X和Y轴、键序、键类型等的连接和联系的列表。是用于多类应用程序间互换信息的通用格式

南京工业大学

第 38 页

38

二、软件工具栏简介

5. DARC-F1 (*.fld)——Questel DARC系统中存储结构的原本文件格式
6. DARC-F1 Query(*.flq)——Questel DARC系统中存储查询的原本文件格式
7. ISIS Reaction(*.rxn)——MDL开发的格式，用于存储元素反应信息
8. ISIS Sketch(*.skc)——在Windows或Macintosh环境下，存储并传输到另外的ISIS应用程序中

南京工业大学

第 39 页

39

二、软件工具栏简介

9. MDL MolFile (*.mol)——MDL(分子设计有限公司) MolFile文件格式用于其它一些在Windows、Macintosh和Unix环境下的化学数据库和绘画应用软件
10. Galactic Spectra(*.spc)——银河图谱文件格式
11. Jcamp Spectra(*.jdx, *.dx)——图谱文件格式，可读取紫外、质谱、红外、核磁等数据文件
12. MSI ChemNote(*.msm)——一种ASCII文本文件，可以用于像ChemNote一类的应用程序

南京工业大学

第 40 页

40

二、软件工具栏简介

13. SMD 4.2 (*.smd)——ASCII文本文件，一般用于检索化学文摘数据库
14. Windows Metafile(*.wmf)——图片文件格式，可以将ChemDraw图片传输到其它应用程序中，如Word。WMF 文件格式含有ChemDraw的结构信息，可被ChemDraw早期版本编辑

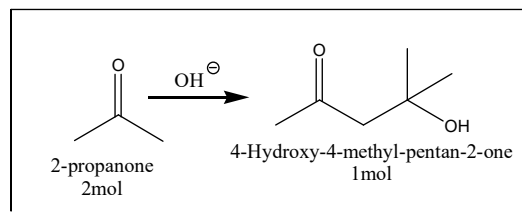
南京工业大学

第 41 页

41

三、画图方法

1、反应方程式



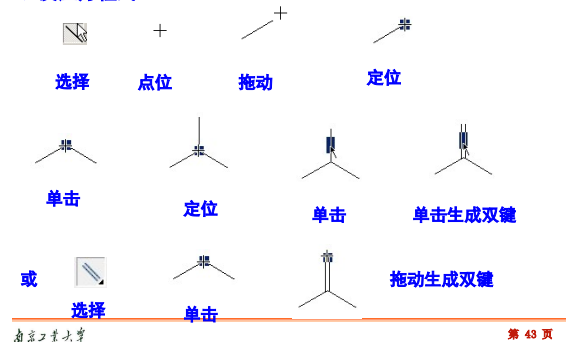
南京工业大学

第 42 页

42

三、画图方法

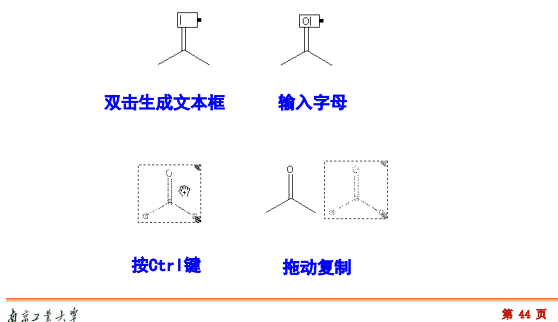
1、反应方程式



43

三、画图方法

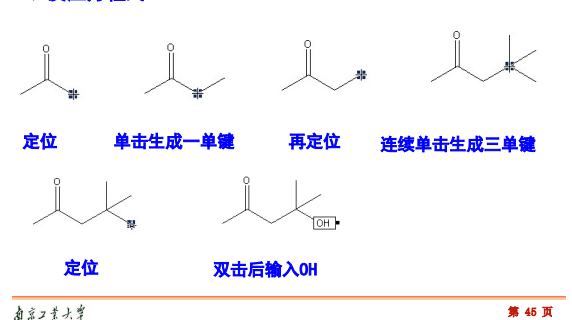
1、反应方程式



44

三、画图方法

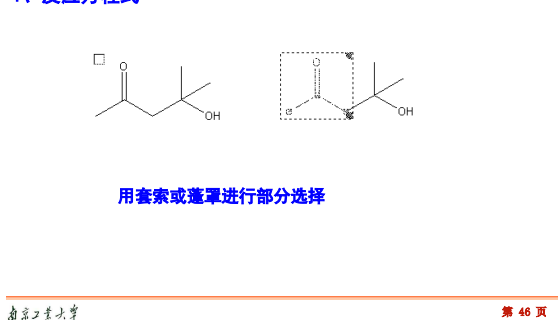
1、反应方程式



45

三、画图方法

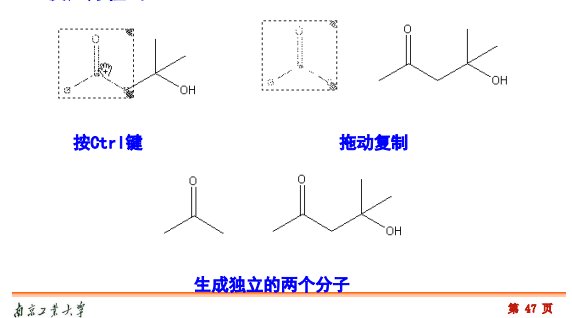
1、反应方程式



46

三、画图方法

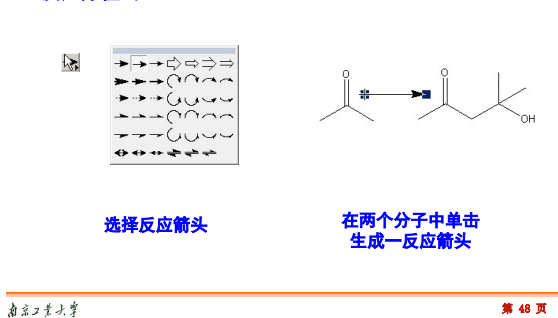
1、反应方程式



47

三、画图方法

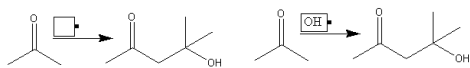
1、反应方程式



48

三、画图方法

1、反应方程式



箭头上方建立文本框

输入反应条件

南京工业大学

第 49 页

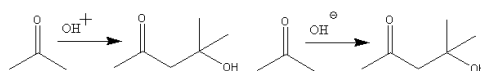
49

三、画图方法

1、反应方程式



选择电荷



定位

添加负电荷

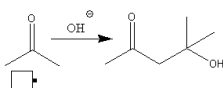
南京工业大学

第 50 页

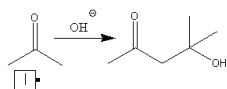
50

三、画图方法

1、反应方程式



分子下方建立文本框



选择居中

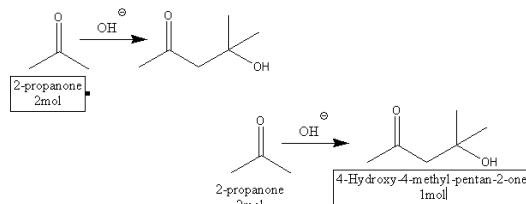
南京工业大学

第 61 页

51

三、画图方法

1、反应方程式



依次输入文本信息

南京工业大学

第 62 页

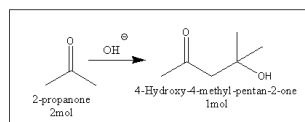
52

三、画图方法

1、反应方程式



选择阴影框



将反应方程式全部罩上

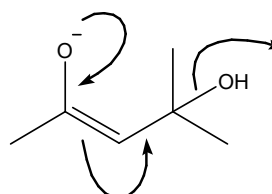
南京工业大学

第 63 页

53

三、画图方法

2、绘制中间体结构



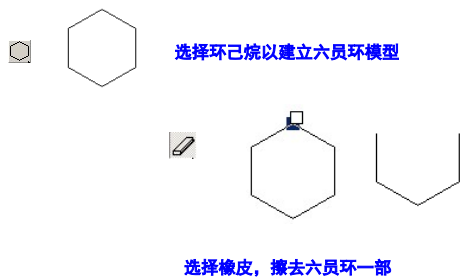
南京工业大学

第 64 页

54

三、画图方法

2、绘制中间体结构



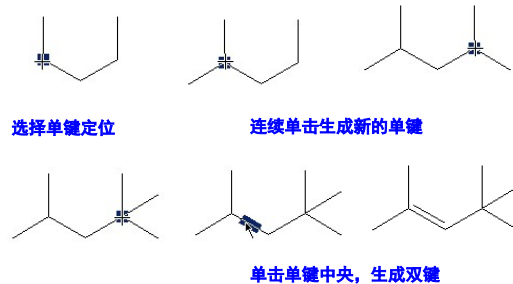
南京工业大学

第 65 页

55

三、画图方法

2、绘制中间体结构



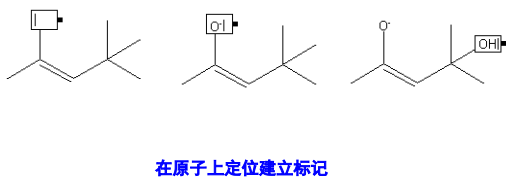
南京工业大学

第 66 页

56

三、画图方法

2、绘制中间体结构



南京工业大学

第 67 页

57

三、画图方法

2、绘制中间体结构



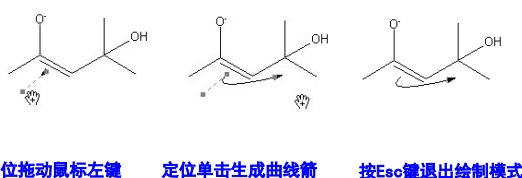
南京工业大学

第 68 页

58

三、画图方法

2、绘制中间体结构



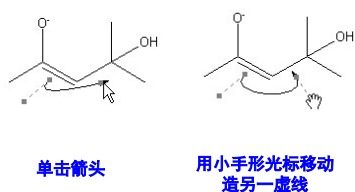
南京工业大学

第 69 页

59

三、画图方法

2、绘制中间体结构



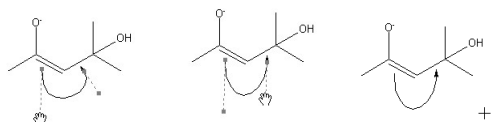
南京工业大学

第 60 页

60

三、画图方法

2、绘制中间体结构



小手形光标
选中虚线柄

拖动改变
虚线箭形状

按Eso键

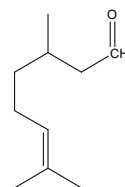
南京工业大学

第 61 页

61

三、画图方法

3、复杂环结构



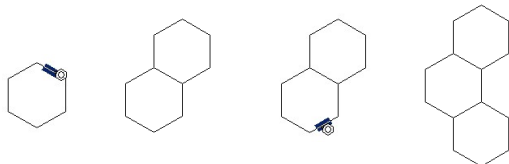
南京工业大学

第 62 页

62

三、画图方法

3、复杂环结构



选择环已烷；
并添加第一个环

添加第二个环

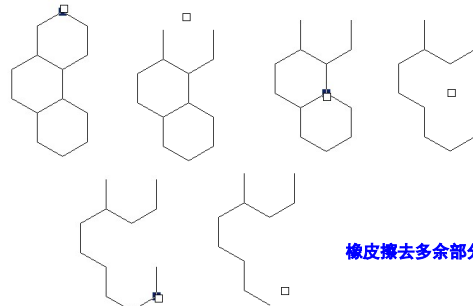
南京工业大学

第 63 页

63

三、画图方法

3、复杂环结构



橡皮擦去多余部分

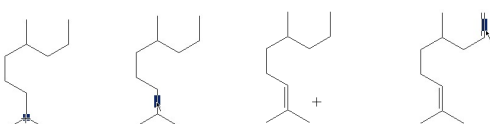
南京工业大学

第 64 页

64

三、画图方法

3、复杂环结构



选择键工具；单击生成新的单双键

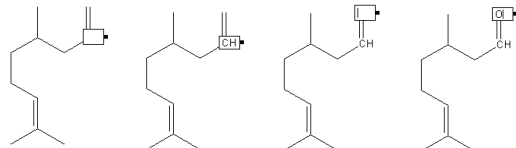
南京工业大学

第 65 页

65

三、画图方法

3、复杂环结构



在原子上定位建立标记

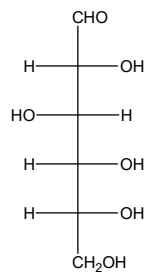
南京工业大学

第 66 页

66

三、画图方法

4、Fischer葡萄糖结构图



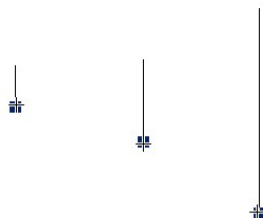
南京工业大学

第 67 页

67

三、画图方法

4、Fischer葡萄糖结构图



选择键工具；连续单击生成五连键

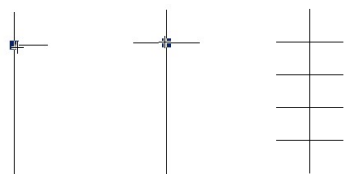
南京工业大学

第 68 页

68

三、画图方法

4、Fischer葡萄糖结构图



建立与五连键垂直的水平键

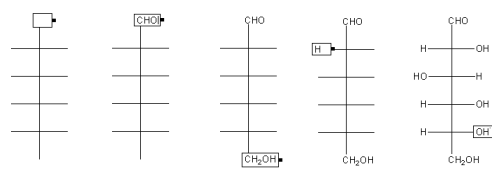
南京工业大学

第 69 页

69

三、画图方法

4、Fischer葡萄糖结构图



在原子上定位建立标记

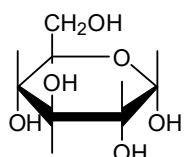
南京工业大学

第 70 页

70

三、画图方法

5、透视图形



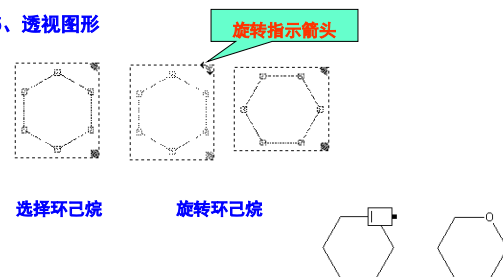
南京工业大学

第 71 页

71

三、画图方法

5、透视图形



在原子上定位建立标记

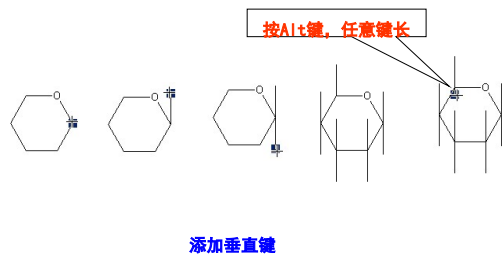
南京工业大学

第 72 页

72

三、画图方法

5、透视图



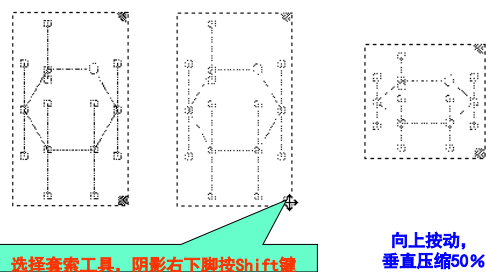
南京工业大学

第 73 页

73

三、画图方法

5、透视图



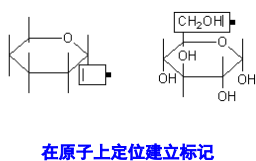
南京工业大学

第 74 页

74

三、画图方法

5、透视图



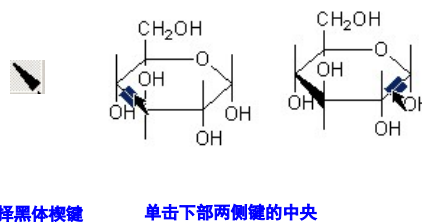
南京工业大学

第 75 页

75

三、画图方法

5、透视图



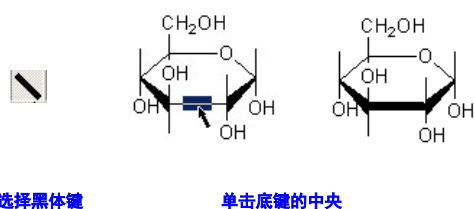
南京工业大学

第 76 页

76

三、画图方法

5、透视图



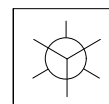
南京工业大学

第 77 页

77

三、画图方法

6、Newman结构



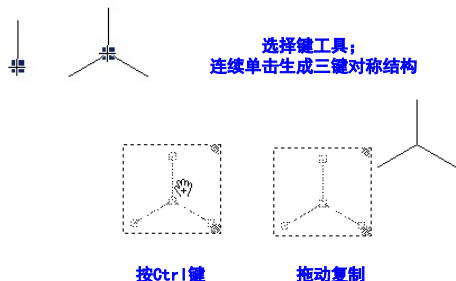
南京工业大学

第 78 页

78

三、画图方法

6、Newman结构



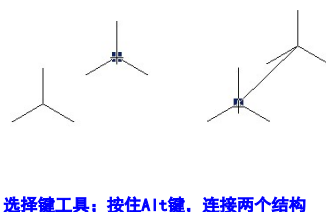
南京工业大学

第 79 页

79

三、画图方法

6、Newman结构



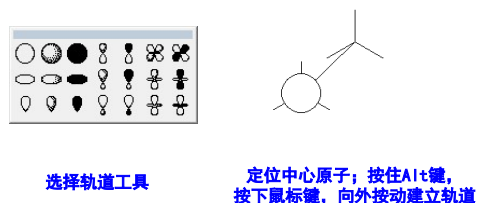
南京工业大学

第 80 页

80

三、画图方法

6、Newman结构



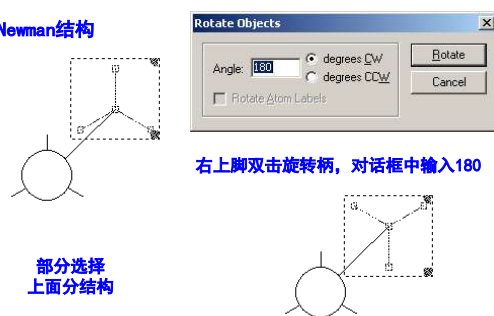
南京工业大学

第 81 页

81

三、画图方法

6、Newman结构



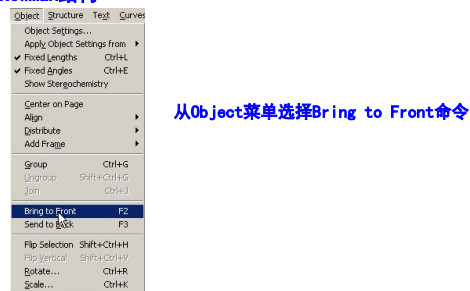
南京工业大学

第 82 页

82

三、画图方法

6、Newman结构



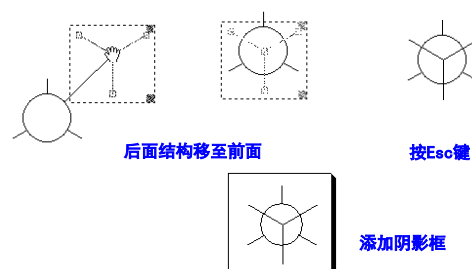
南京工业大学

第 83 页

83

三、画图方法

6、Newman结构



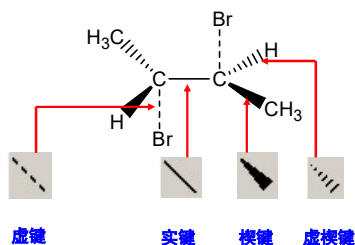
南京工业大学

第 84 页

84

四、化学结构的绘制

1、键工具



南京工业大学

第 85 页

85

四、化学结构的绘制

1、键工具



南京工业大学

第 86 页

86

四、化学结构的绘制

1、键工具



南京工业大学

第 87 页

87

四、化学结构的绘制

2、环工具



南京工业大学

第 88 页

88

四、化学结构的绘制

2、环工具



南京工业大学

第 89 页

89

四、化学结构的绘制

3、无环链工具



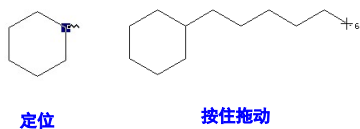
南京工业大学

第 90 页

90

四、化学结构的绘制

3、无环链工具



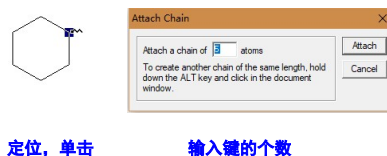
南京工业大学

第 91 页

91

四、化学结构的绘制

3、无环链工具



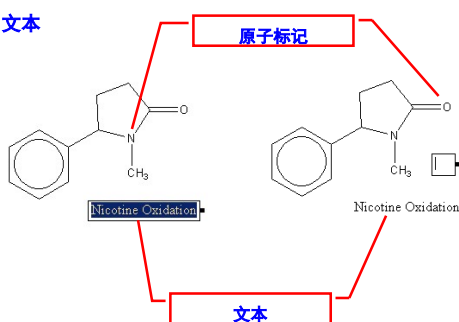
南京工业大学

第 92 页

92

五、文本说明及原子标记

1、文本



南京工业大学

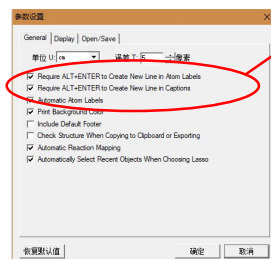
第 93 页

93

五、文本说明及原子标记

1、文本

更改快捷键设置



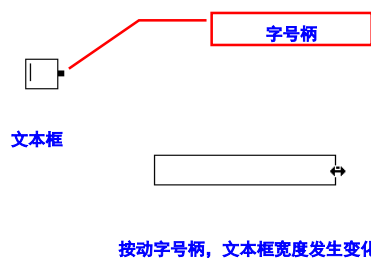
南京工业大学

第 94 页

94

五、文本说明及原子标记

1、文本



南京工业大学

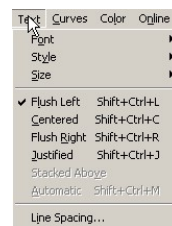
第 95 页

95

五、文本说明及原子标记

1、文本

改变说明文本的字体、字号和字形



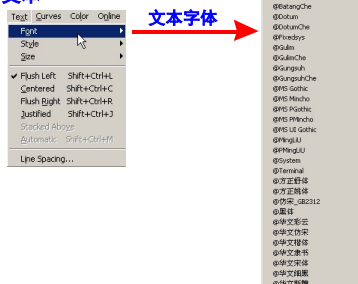
南京工业大学

第 96 页

96

五、文本说明及原子标记

1、文本



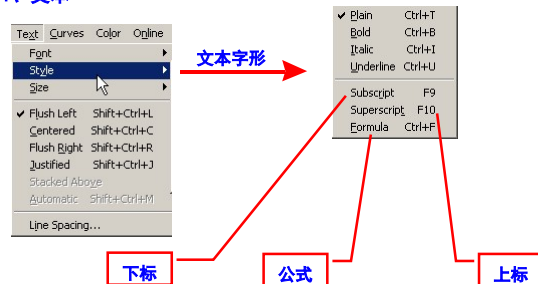
南京工业大学

第 97 页

97

五、文本说明及原子标记

1、文本



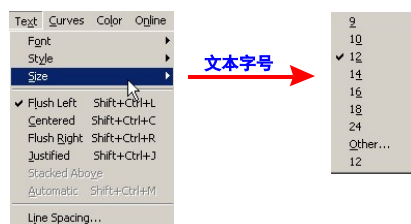
南京工业大学

第 98 页

98

五、文本说明及原子标记

1、文本



南京工业大学

第 99 页

99

五、文本说明及原子标记

1、文本



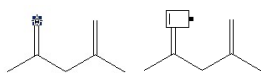
南京工业大学

第 100 页

100

五、文本说明及原子标记

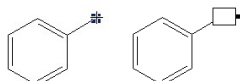
2、原子符号的标记



定位

单击

使用文本工具
建立原子标记框



定位

双击

使用键工具
建立原子标记框

南京工业大学

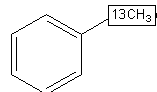
第 101 页

101

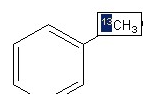
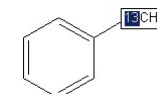
五、文本说明及原子标记

2、原子符号的标记

标记同位素



选择上标



南京工业大学

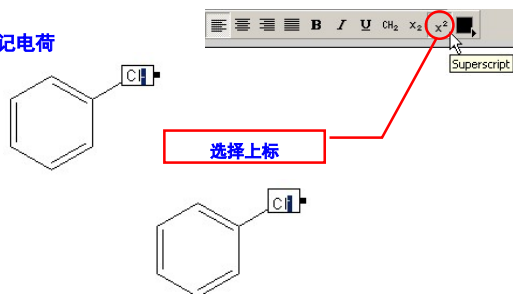
第 102 页

102

五、文本说明及原子标记

2. 原子符号的标记

标记电荷



南京工业大学

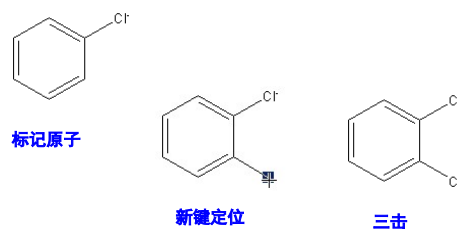
第 103 页

103

五、文本说明及原子标记

2. 原子符号的标记

重复原子标记 (快捷方式)



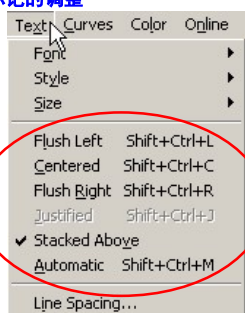
南京工业大学

第 104 页

104

五、文本说明及原子标记

3. 原子标记的调整



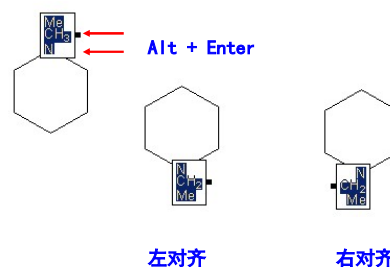
南京工业大学

第 105 页

105

五、文本说明及原子标记

3. 原子标记的调整

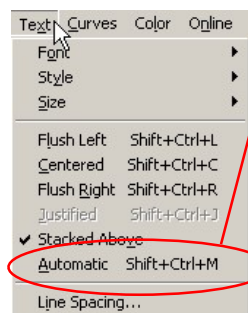


南京工业大学

第 106 页

106

五、文本说明及原子标记

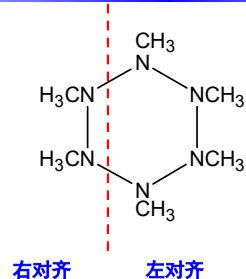


南京工业大学

第 107 页

107

五、文本说明及原子标记



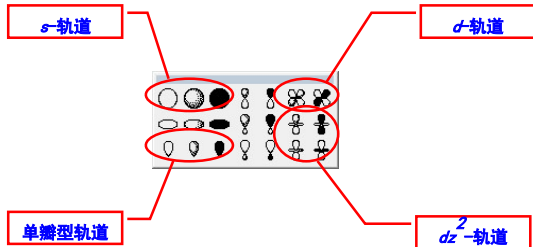
南京工业大学

第 108 页

108

六、轨道工具及化学符号

1. 轨道工具

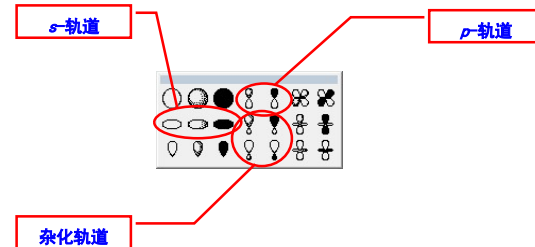


南京工业大学

第 109 页

109

六、轨道工具及化学符号



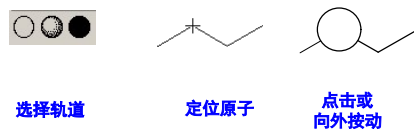
南京工业大学

第 110 页

110

六、轨道工具及化学符号

s-轨道的绘制



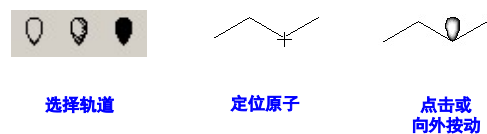
南京工业大学

第 111 页

111

六、轨道工具及化学符号

单瓣型轨道的绘制



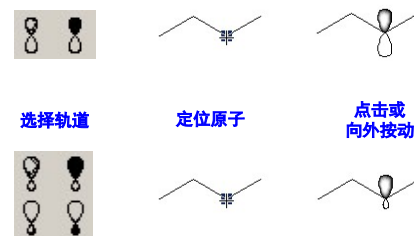
南京工业大学

第 112 页

112

六、轨道工具及化学符号

p-轨道及杂化轨道的绘制



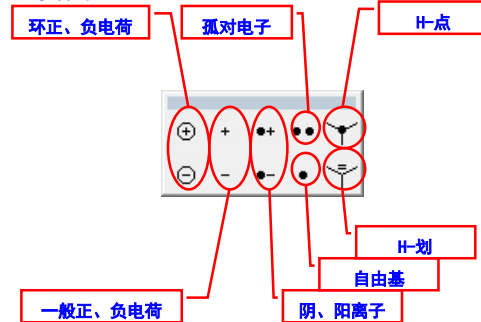
南京工业大学

第 113 页

113

六、轨道工具及化学符号

2. 化学符号



南京工业大学

第 114 页

114

六、轨道工具及化学符号

H-点：表示沿Z轴向平面外伸出的氢

H-划：表示沿Z轴向平面里进入的氢



定位

单击

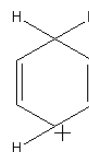
南京工业大学

第 115 页

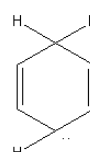
115

六、轨道工具及化学符号

孤对电子



定位



单击

南京工业大学

第 116 页

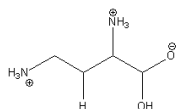
116

六、轨道工具及化学符号

电荷符号



定位



单击

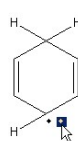
南京工业大学

第 117 页

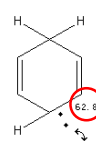
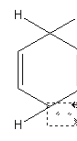
117

六、轨道工具及化学符号

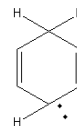
3. 化学符号的旋转



选择



旋转



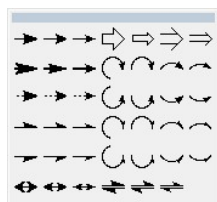
南京工业大学

第 118 页

118

七、箭头，绘图元素及基元

1. 箭头



箭头工具

南京工业大学

第 119 页

119

七、箭头，绘图元素及基元



普通箭头



粗体箭头



虚箭头



上半箭头



下半箭头



双头箭头

南京工业大学

第 120 页

120

七、箭头，绘图元素及基元



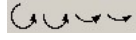
空心箭头



后开口空心箭头



全头曲箭头



半头曲箭头



平衡箭头

南京工业大学

第 121 页

121

七、箭头，绘图元素及基元

箭头的绘制



定位

按动

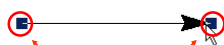
南京工业大学

第 122 页

122

七、箭头，绘图元素及基元

箭头的选择



两个编辑块

南京工业大学

第 123 页

123

七、箭头，绘图元素及基元

箭头的选择



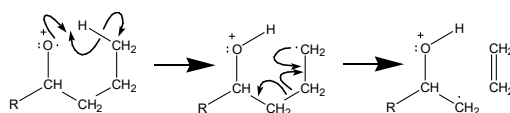
旋转按钮

南京工业大学

第 124 页

124

七、箭头，绘图元素及基元



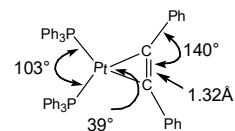
用箭头指示电荷的转移

南京工业大学

第 125 页

125

七、箭头，绘图元素及基元



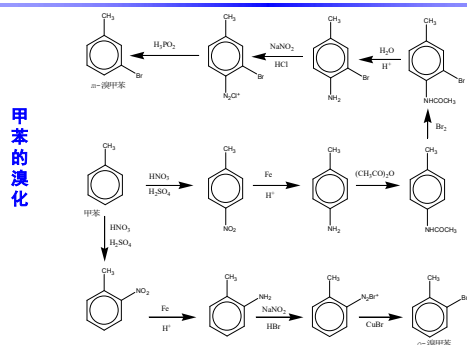
用箭头指示键角及键长

南京工业大学

第 126 页

126

七、箭头，绘图元素及基元



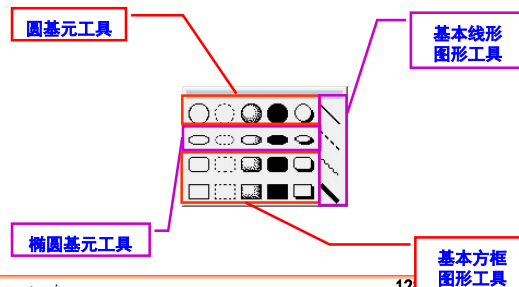
南京工业大学

第 127 页

127

七、箭头，绘图元素及基元

2. 绘图元素及基元

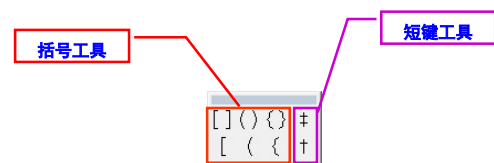


南京工业大学

128

128

七、箭头，绘图元素及基元

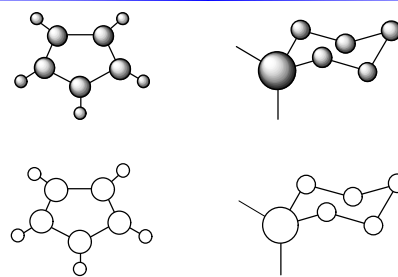


南京工业大学

第 129 页

129

七、箭头，绘图元素及基元



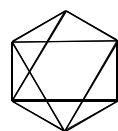
灰圆工具(上)和空心圆工具(下)建立的分子结构

南京工业大学

第 130 页

130

七、箭头，绘图元素及基元



绕工具绘制的
交叉线是相交的



实键工具绘制的
交叉线是不相交的

南京工业大学

第 131 页

131

八、弧形及笔工具

1. 弧形工具



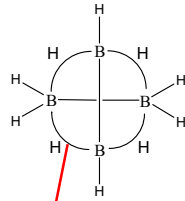
90°、120°、180°、270° 弧

南京工业大学

第 132 页

132

八、弧形及笔工具



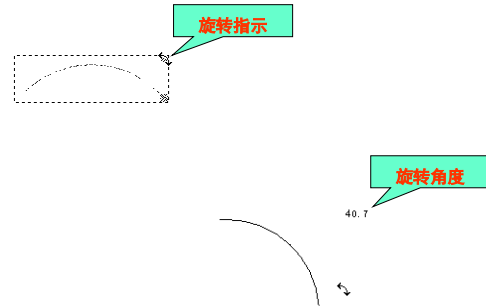
90° 弧

南京工业大学

第 133 页

133

八、弧形及笔工具

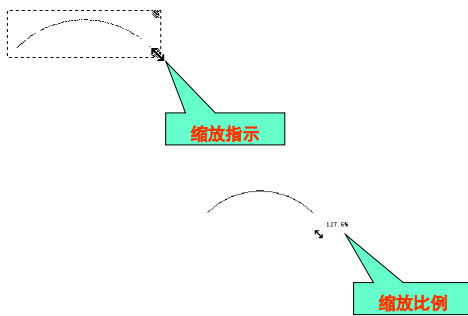


南京工业大学

第 134 页

134

八、弧形及笔工具



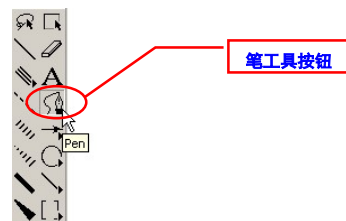
南京工业大学

第 135 页

135

八、弧形及笔工具

2. 笔工具

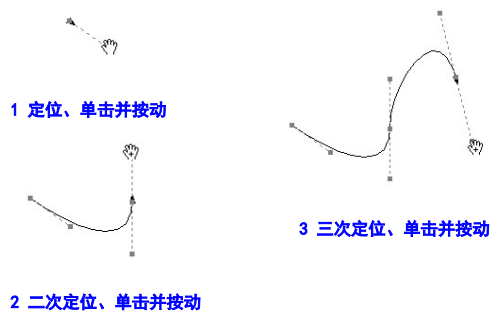


南京工业大学

第 136 页

136

八、弧形及笔工具

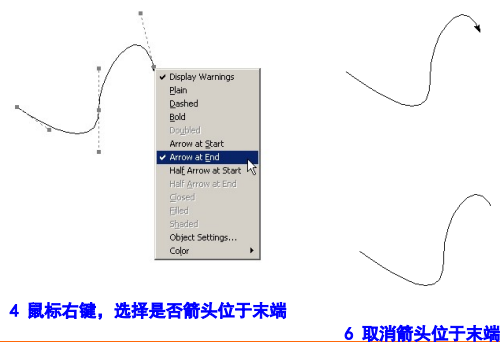


南京工业大学

第 137 页

137

八、弧形及笔工具

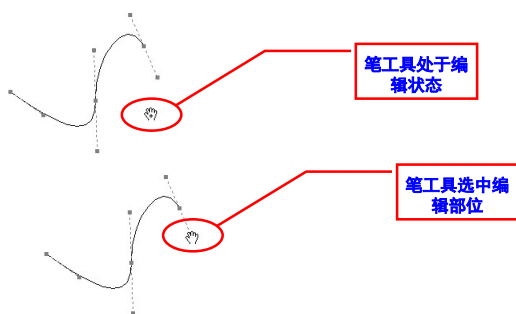


南京工业大学

第 138 页

138

八、弧形及笔工具

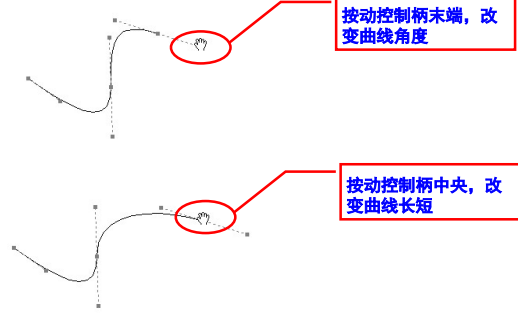


南京工业大学

第 139 页

139

八、弧形及笔工具



南京工业大学

第 140 页

140

八、弧形及笔工具



用笔工具绘制的反应曲线

南京工业大学

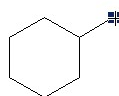
第 141 页

141

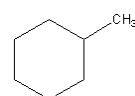
九、使用快捷键标记原子

使用快捷键标记原子

1. 标记最后被绘制的原子(方法1)



绘制键



按快捷键C

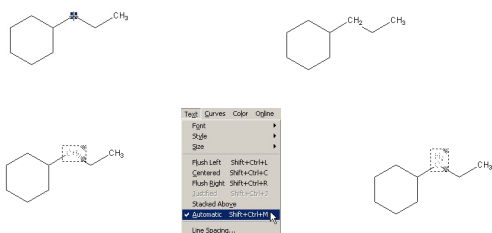
南京工业大学

第 142 页

142

九、使用快捷键标记原子

2. 定位快捷标记原子(方法2)



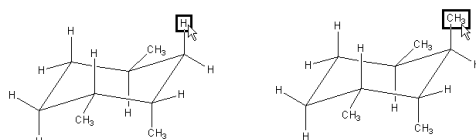
南京工业大学

第 143 页

143

九、使用快捷键标记原子

3. 选择工具快捷变换原子(方法3)



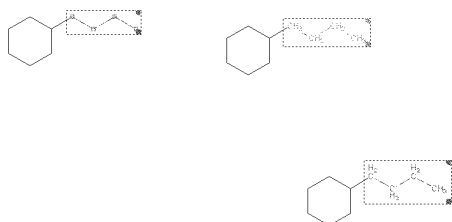
南京工业大学

第 144 页

144

九、使用快捷键标记原子

4. 标记被选结构中的原子(方法4)



南京工業大學

第 145 页

145

九、使用快捷键标记原子

5. 运用默认快捷键(方法5)

- 1) **Enter 键**: 打开原子标记文本框
- 2) **Space 键**: 删除原子标记
- 3) **/ 键**: 当指向定位原子时, 显示原子属性对话框
- 4) **= 键**: 显示列举俗名对话框
- 5) **. 键**: 增加一个连接点

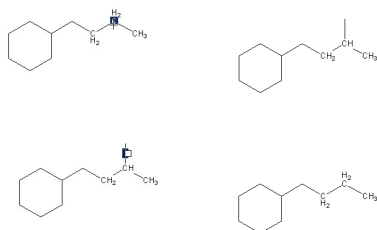
南京工业大学

第 146 页

146

九、使用快捷键标记原子

6. 快捷键效果(方法6)



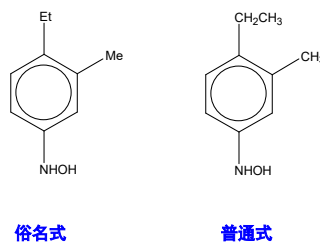
南京工業大學

第 147 页

147

十、俗名的使用

俗名的使用

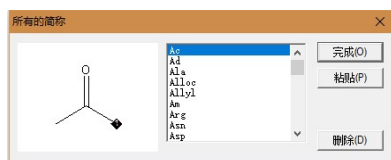


南京工業大學

第 148 页

148

十、俗名的使用



俗名列表对话框

南京工业大学

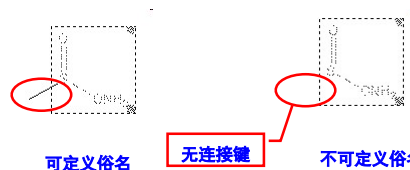
第 149 页

149

十、俗名的使用

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，而其余的键没被选择，用于表示官能团的连接键；



南京工業大學

第 150 页

150

十、俗名的使用

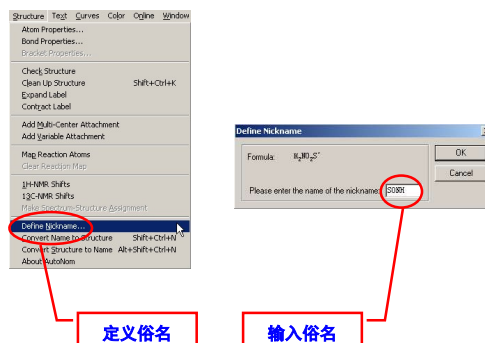
- 3) 从Structure菜单中, 选择Define Nickname, 出现Define Nickname对话框;
- 4) 给俗名输入一个简短的名称;
- 5) 单击OK按钮, 俗名被定义, 即可用此俗名标记原子。

南京工业大学

第 161 页

151

十、俗名的使用



南京工业大学

第 162 页

152

十、俗名的使用

注意

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

南京工业大学

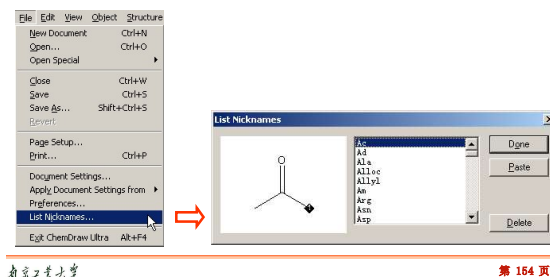
第 163 页

153

十、俗名的使用

查看俗名

- 1) 从File菜单中, 选择List Nicknames, 出现俗名列表对话框;



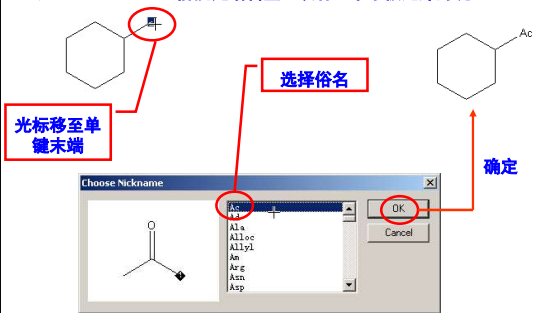
南京工业大学

第 164 页

154

十、俗名的使用

- 2) 使用快捷键 =。前提是编辑区必须有一个未被选择的键。



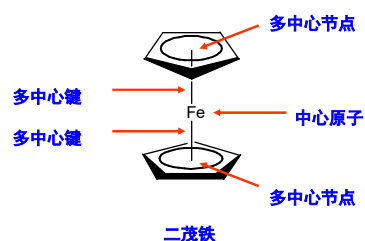
南京工业大学

第 165 页

155

十一、多中心结构

多中心结构



南京工业大学

第 166 页

156

十一、多中心结构



南京工业大学

第 157 页

157

十一、多中心结构

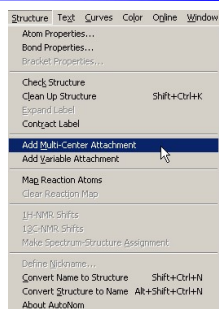


南京工业大学

第 158 页

158

十一、多中心结构



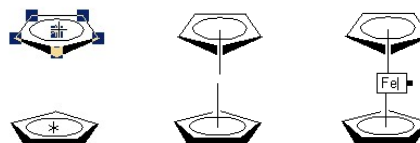
分别添加多中心节点

南京工业大学

第 159 页

159

十一、多中心结构



选择实键工具，在上下两个中心节点画出上下两根单键

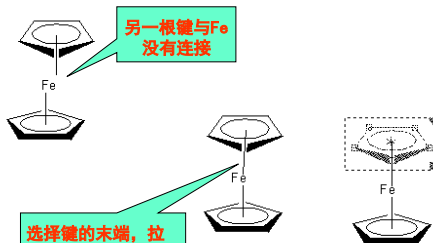
在其中一根单键上标记Fe

南京工业大学

第 160 页

160

十一、多中心结构



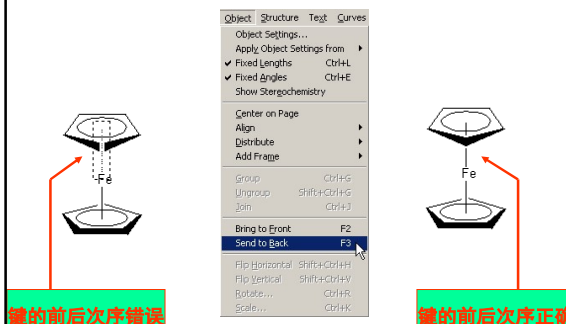
调整对齐

南京工业大学

第 161 页

161

十一、多中心结构



键的前后次序错误

键的前后次序正确

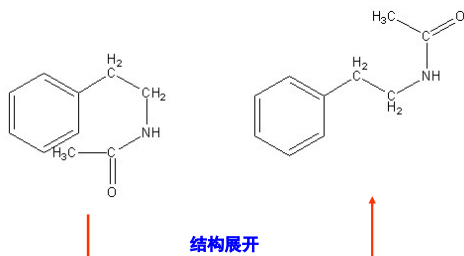
南京工业大学

第 162 页

162

十二、结构展开与调整

结构展开与调整

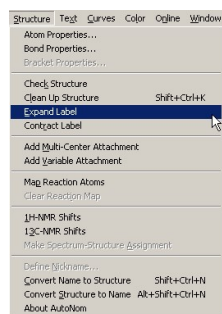


南京工业大学

第 163 页

163

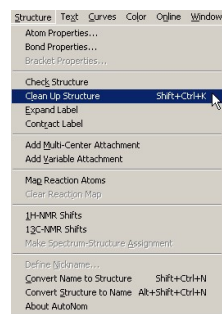
十二、结构展开与调整



展开标记

南京工业大学

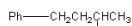
164



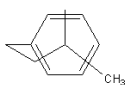
结构调整

第 164 页

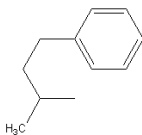
十二、结构展开与调整



结构的符号形式



结构展开



结构调整

南京工业大学

第 165 页

165

十二、结构展开与调整



结构调整

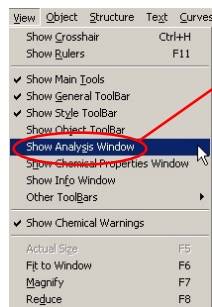
南京工业大学

第 166 页

166

十三、检查化学结构信息

检查化学结构信息



结构分析

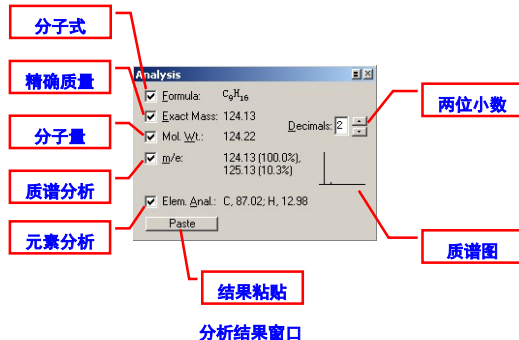


南京工业大学

第 167 页

167

十三、检查化学结构信息



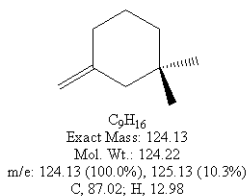
分析结果窗口

南京工业大学

第 168 页

168

十三、检查化学结构信息



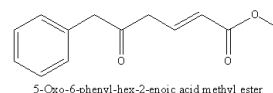
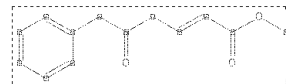
结果粘贴

南京工业大学

第 169 页

169

十三、检查化学结构信息



化合物命名

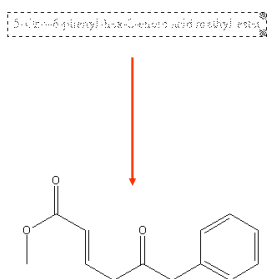
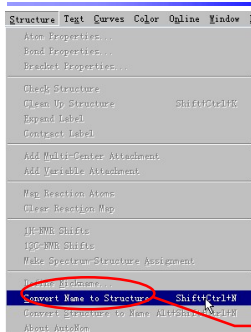
将结构转化成名称

南京工业大学

第 170 页

170

十三、检查化学结构信息



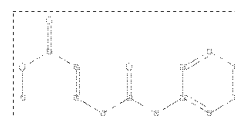
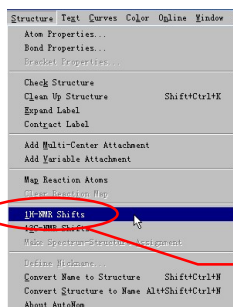
将名称转化成结构

南京工业大学

第 171 页

171

十三、检查化学结构信息



1H-NMR 预测

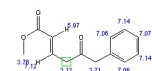
南京工业大学

第 172 页

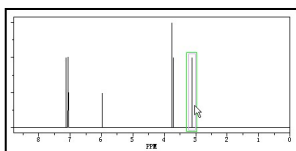
172

十三、检查化学结构信息

ChemNMR H-1 Estimation



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



1H-NMR 预测结果

南京工业大学

第 173 页

173

十三、检查化学结构信息

Protocol of the H-1 NMR Prediction:

Node	Shift	Base + Inc.	Comment (ppm rel. to TMS)
CH2	3.12	1.37 0.63	methylene 1 alpha -C=C
CH2	3.71	1.12 1.37	1 alpha -C(=O)-C methylene
CH	7.06	1.22 1.12	1 alpha -1-C=C-C-C-C-C*1 1 alpha -C(=O)-C
CH	7.14	7.26 -0.20	1-benzene 1-C
CH	7.07	7.26 -0.12	1-benzene 1-C
CH	7.14	-0.19 7.26	1-benzene 1-C
CH	7.06	7.26 -0.12	1-benzene 1-C
CH3	3.76	-0.20 0.66	1-C methyl
H	5.97	2.90 5.25	1 alpha -OC(=O)-C=C 1-ethylene
H	7.12	0.80 -0.08	1-C(=O)-O-R gem 1-C(=O)-O-R cis
		5.25 1.18 0.69	1-ethylene 1-C(=O)-O-R cis 1-C(=O)-O-R gem

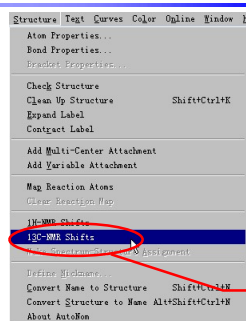
预测结果

南京工业大学

第 174 页

174

十三、检查化学结构信息



13
CNMR预测

13
CNMR位移

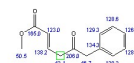
南京工业大学

第 175 页

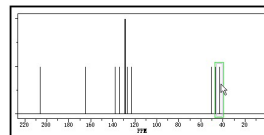
175

十三、检查化学结构信息

ChemNMR C-13 Estimation



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



13
CNMR预测结果

南京工业大学

第 176 页

176

十三、检查化学结构信息

Protocol of the C-13 NMR Prediction:

Mode	Shifts	Base + Inc.	Comment (ppm rel. to TMS)
C	165.0	166.0 4.0	1-carbonyl 1 -C=O-C
CH	123.0	-5.0 123.3 7.1	1 -C from O-carbonyl 1-ethylene 1 -C(=O)OC
CH	138.2	-7.4 123.3 5.5	1 -C 1-ethylene 1 -C(=O)OC
CH2	49.1	9.4 -2.3 19.5 29.3 -2.6 -2.8 2.0	1 -C aliphatic 1 alpha -C=C 1 alpha -C(=O)-C 1 gamma -1-C=C*+C*+C*+1 1 gamma -C(=O)-O gamma corrections
C	206.0	193.0 13.0	1-carbonyl 2 -C
CH2	46.7	-2.3 24.3 29.3 -2.1 -2.5	aliphatic 1 alpha -1-C=C*+C*+C*+1 1 alpha -C(=O)-C 1 gamma -C=C aromatic corrections
C	124.3	128.5	1-benzene

部分预测结果

南京工业大学

第 177 页

177