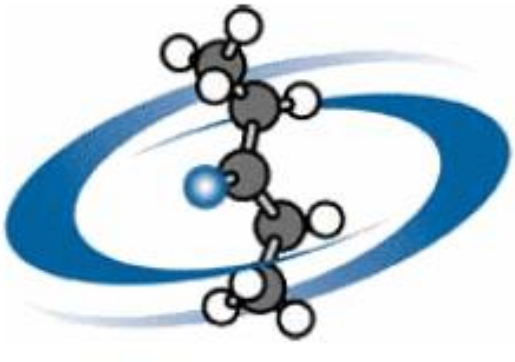


ACD/ChemSketch

Version 12.0 for Microsoft Windows

中文使用指南

化学结构式和图形图像的绘制

高级化学发展有限公司（ACD/Labs）

版权©1997-2010 本书版权归高级化学发展有限公司（ACD/Labs）公司所有。

ACD/Labs 是高级化学发展有限公司商标。

Microsoft 和 Windows 是微软公司在美国（或其他国家）的注册商标。©2010

IBM（International Business Machines）是国际商用机器公司的注册商标。©1994，2010

Adobe，Acrobat，PDF（Portable Document Formats）及关联数据结构等都是 Adobe 系统组合公司在美国（或其他国家）的注册商标。©2010

Camtasia 是 TechSmith 公司的注册商标，Camtasia Studio 是 TeachSmith 公司的商标。© 1999–2010

本指南中提到的其他商标均属于其拥有者。且所有的商标均是被许可的。

本说明书中内容可能不在任何通告下进行改变，公司对以下情况不承担责任，包括但不限于商业或任何其他特殊用途。公司对使用该说明书而直接、间接、专门、附带的和因此而引起的任何错误不承担责任。

目　录

1.引　言 8

1.1　免费版 8
1.2　关于本指南 8
1.2.1　高级理解 9
1.3　鼠标惯用法 10
1.4　更多信息 10
1.4.1　如何联络我们 11
1.4.2　在线升级 11

2.　ACD/ChemSketch 基础 13

2.1　目标： 13
2.2　启动 ACD/ChemSketch 13
2.3　设定可兼容的文件类型 13
2.3.1　改变可兼容的文件类型 14
2.4　改变默认路径 15
2.5　安装插件 16
2.6　退出 ChemSketch 17

3.　绘制简单结构 18

3.1　目标 18
3.2　画原子、化学键和标签 18
3.2.1　使用常用画图工具 18
3.2.2　双键和三键 19
3.2.3　撤销命令 20
3.2.4　个别原子的删除 20
3.2.5　聚合物 20
3.2.6　非原子 21
3.2.7　改变原子 21
3.2.8　使用连续画图工具 23
3.2.9　使用鼠标拖拽绘图 23
3.2.10　优化结构 24
3.2.11　编辑原子标签 24
3.2.12　使用画链工具 25
3.3　清除屏幕 26
3.4　使用 ACD/Dictionary 27
3.5　翻转结构 28
3.6　输出 30
3.6.1　保存 ChemSketch(.sk2)文件 30
3.6.2　保存结构为 MDL Molfile 格式 30
3.6.3　打印 31
3.6.4　在文件中插入结构式 32

4.　绘制更复杂结构 33

4.1 目标.....33
4.2 使用基团表.....33
4.3 使用环节构.....34
4.4 删除原子和基团.....35
4.4.1 同时删除多个原子.....36
4.5 替换原子和基团.....37
4.6 设置双键和三键.....37
4.7 标定电荷和定义阳离子与阴离子.....38
4.8 标记键.....40
4.8.1 原子团标记键.....41
4.9 使用立体键.....42
4.10 绘制配位键.....44
4.11 离域电荷及曲线.....47
4.12 更多键类型.....49
4.13 改变原子属性.....52
5. 超级结构、简化线性分子式和化学反应式.....55
5.1 目标.....55
5.2 2D－优化.....55
5.2.1 创建环烷烃结构.....55
5.2.2 画环形的缩氨酸.....56
5.3 简化线性分子式(SMILES Notations).....58
5.3.1 创建简化线性分子式.....58
5.3.2 从简化线性分子式创建结构式.....59
5.4 IUPAC 国际化学标识分子式.....60
5.4.1 生成国际化工标识分子式.....60
5.4.2 从国际化学标识分子式生成结构.....62
5.5 3D－优化.....62
5.5.1 创建双[2，2，2]环己烷结构.....63
5.5.2 创建三蝶烯结构.....64
5.5.3 创建立方烷结构.....66
5.5.4 创建 C_{20} 球碳分子.....67
5.6 绘制、标记和映射化学反应.....70
5.6.1 绘制化学反应.....70
5.6.2 标记化学反应.....71
5.6.3 映射化学反应.....72
5.6.4 计算化学反应数据——仅限商业版！.....74
6. 高级绘制：模型.....76
6.1 目标.....76
6.2 概述.....76
6.3 原子团表.....77
6.3.1 创建荧光胺结构.....77
6.4 快速模型工具.....79
6.4.1 创建环状体聚物结构.....79

6.5 模型窗口 80
6.5.1 创建 DNA 分子片断 *81*
6.5.1.1 绘制去氧核糖-5-磷酸盐链的图象 81
6.5.1.2 添加碱基 82
6.6 绘制复杂的生物化学结构 83
6.6.1 创建β -麦芽糖酶结构 *83*
6.7 定义用户模型 86
6.7.1 模型窗口组织者 *86*
*6.7.2 *.cfg 模板文件* *87*

7. 计算宏观性质 89

7.1 概述 89
7.2 计算宏观性质 89
7.2.1 菜单命令 *89*
7.2.2 状态栏自动显示 *90*
7.3 计算单一同位素质量 91

8. 特殊功能键 93

8.1 目标 93
8.2 同分异构体 93
8.2.1 举例 *95*
8.2.2 化学文献中的错误 *95*
8.3 字典 97
8.4 ACD/免费名称附件 97
8.4.1 ACD/免费名称的局限 *99*

9. 结构搜索－－仅限商业版！ 100

9.1 目标 100
9.2 搜索结构 100
9.2.1 通过哪些文件搜索 *100*
9.2.2 鉴于搜索结果 *103*

10. 创建绘画对象 105

10.1 目标 105
10.2 绘制反应能量图 105
10.2.1 画一条曲线 *105*
10.2.2 修改曲线 *107*
10.2.3 绘制 X、Y 轴 *108*
10.3 绘制各种不同轨道 109
10.3.1 绘制 p 轨道 *109*
10.3.2 绘制 d 轨道 *110*
10.3.3 绘制 pi 轨道 *112*
10.4 绘制真空蒸馏装置 113
10.4.1 在图形上加注释 *115*
10.4.1.1 文字注释 115

10.4.1.2 插入注释框 117
10.4.1.3 修改注释框的形状 117
10.4.1.4 将元素编组/拆开 118
10.5 绘制一个双链 DNA 螺旋结构 118
10.6 绘制脂肪和胶体 123
10.6.1 绘制脂肪 *123*
10.7 创建表格 125
10.7.1 绘制表格内容 *126*
10.7.2 插入表格 *127*
10.7.3 置入数据 *127*
10.7.4 修改表格内容 *129*
10.7.5 编辑表格外观 *131*
11. 管理文件 133
11.1 插入页眉和页脚 133
11.2 转换成 PDF——仅限商业版！ 134
11.3 创建海报 135
12. 结构模式中的样式 137
12.1 目标 137
12.2 改变结构样式 137
12.2.1 应用期刊样式 *138*
12.2.2 准备发表 *139*
12.3 创建用户样式 140
12.3.1 用户定义样式：糖 *140*
12.3.2 用户定义样式：磷酸盐 *141*
12.3.3 用户定义样式：碱 *142*
12.3.4 用户定义样式：强调 *142*
12.4 应用现有样式 144
12.5 设定默认样式 145
13. 画图模式中的样式 146
13.1 目标 146
13.2 改变对象样式 146
13.3 保存样式 147
13.4 应用现有样式 147
13.5 设置默认样式 148
13.6 管理样式 149
14. 创建汇报模型 150
14.1 目标 150
14.2 关于汇报模型 151
14.3 输入汇报模型 151
14.4 插入模型对象 151
14.5 设定显示参数 154

14.6 编排模型对象 160
14.7 保存和应用汇报模型 160

1. 引　言

感谢您购买 ACD/ChemSketch。我们一直致力于开发最简单易用、最强大有效的程序来用于化学结构、反应、示意图形的绘制以及化学相关的报告和演讲材料的设计。

1.1 免费版

从1999年4月开始，高级化学发展公司(ACD/Labs)在网站中提供免费的ChemSketch。

http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/

重要启事:ACD/ChemSketch 的免费软件应该单独安装,也可以与其他目前可用的 ACD/Labs 免费软件安装在同一个文件夹中, 但不能包含任何商业版的 ACD/Labs 软件(既非免费软件)。

所有关于免费软件的限制和常见问题(FAQs)同样可以在我们的网站上找到:
http://www.acdlabs.com/resources/ilab/faq.php

注意: 尽管我们不对 ACD/ChemSketch 免费版的用户提供技术支持,我们鼓励用户将您的问题和要求发放到新闻组(Newsgroup)的网页上,具体网址将在下面的章节中提到。

1.2 关于本指南

阅读完本指南您能够获得帮助您开始使用ACD/ChemSketch的工具，同时本指南也用于在线使用和“硬拷贝”版的打印和使用。

本指南中使用的是较小屏幕的显示。

本指南中的色彩和其他窗口元素的性质取决于默认的窗口显示性质。

本用户指南以电子形式提供，可使用通常使用的Microsoft Word阅读。如果您找不到您需要的目录标题，请使用搜索功能查找相关的字、词语。

1.2.1 高级理解

本指南是ACD/Labs软件的技术支持文章的一部分。要循序渐进的学习ACD/Labs的产品，我们推荐您按以下步骤完成技术文章的学习（相关的文章都在ACD/Labs文章的文件夹中，\\DOCS）：

1.参考手册(CHEMSK_R.PDF)

2. ACD/Dictionary 用户指南 (DICT.PDF)和ACD/3D Viewer 3D阅读器 (3D.PDF)

此外，如果能够对ACD/Labs的如下产品进行了解那是明智的（相关的文章都在ACD/Labs文章的文件夹中，\\DOCS）：

1. ACD/I-Lab (ILAB.PDF) —允许您得到基于互联网的对化工数据库和性质预测程序的立即通入的服务(可从http://www.acdlabs.com 免费下载) 。

2. ACD/ChemBasic (CHEMBAS.PDF)—使用户能定制ACD/Labs的特殊编程语言软件(可从http://www.acdlabs.com免费下载) 。

3. ACD/Name to Structure (NAMESTR.PDF) —几乎能够为所

有化学名称生成一个分子结构。ACD/Name to Structure 根据 IUPAC 建议的关于有机，生物化学，和无机的命名原则可以给出相应化学有机物和天然产品衍生物 IUPAC 名称的结构式。

1.3 鼠标惯用法

在您使用本软件的过程中您可能会执行的个别动作，我们用如下的专业术语来描述。

- 指向(Point to)：移动鼠标到一个物体。
- 点击或点击左键(click)：移动鼠标到一个物体，并按下鼠标左键。
- 点击右键(right-click)：移动鼠标到一个物体，并按下鼠标右键。
- 双击(double-click)：移动鼠标到一个物体，并迅速按下左键两次。
- 拖动(drag)：当你移动鼠标时，按下鼠标左键并移动。
- 选择（select)：通过点击或拖拽来突出或激活某个界面元素。

1.4 更多信息

要想了解更新的产品和服务，请访问我公司网站：

http://www.acdlabs.com

我们网站正以每天数以万计的“点击”的速率被访问.原因是:我们提供了很多有用的产品和信息。从2006年夏天，我们提供免费的 ChemSketch 12.0，免费的ISIS 3D 附件，免费的CHEMDRAW扩展，和经济的“互动性界面实验室”讨论组，您可以不用购买软件就可使用 Java Applets 运行测试计算。还可下载许多以Lotus公司CAM形式的

影像资料，这些资料显示各种软件包的操作。

我们正不断更新关于我们网站的信息。网站将向你显示在哪一个科学会议方面你能访问ACD/Labs销售产品。通过我们的网页，您还能浏览常见问题页面或者在我们的新闻组访问“Chat”的连接。

如果您想随时了解ACD/Labs公司化学软件的最新进展，请给我们网站中的广播站发邮件：

http://www.acdlabs.com/feedback/mailing.html

1.4.1 如何联络我们

可通过访问网站、电话、传真和邮件与我们联系，但最常用的方法是电子邮件。关于价格、销售、供货、和一般问题，请发邮件：

info@acdlabs.com

技术和科学问题，请发邮件：

support@acdlabs.com

与我们联系时，请告诉我们软件拥有者的名字，版本号，产品证书号(这些信息可在**帮助/关于**文件中找到)。如果可能，请告诉我们供应商的名字。

1.4.2 在线升级

所有ACD/Labs计算机软件都可以在网上进行升级. 您需要准备好您的产品登记号，并且用您安装了ACD/Labs 软件的计算机进行升级。通常升级只是很小的改进，比如：将实际版本从12.00升至

12.01. 详情请参阅您的产品说明文件中的在线升级\\DOCS\UP_CLNT.PDF。或与我们的技术支持部联系。

2. ACD/ChemSketch基础

2.1 目标:

本章讲解如下内容:

- 如何启动**ACD/ChemSketch**
- 如何设定和改变文件可兼容的文件类型(**File Assosciation**)
- 如何设定默认文件路径
- 如何退出**ACD/ChemSketch**

2.2 启动ACD/ChemSketch

安装完毕后，按以下步骤操作可启动程序。

1. 打开**Windows**。

2. 双击图标，启动;

或任务栏中，由开始菜单单击图标;

或在**ACD/Labs**栏目中双击**CHEM.exe**程序文件;

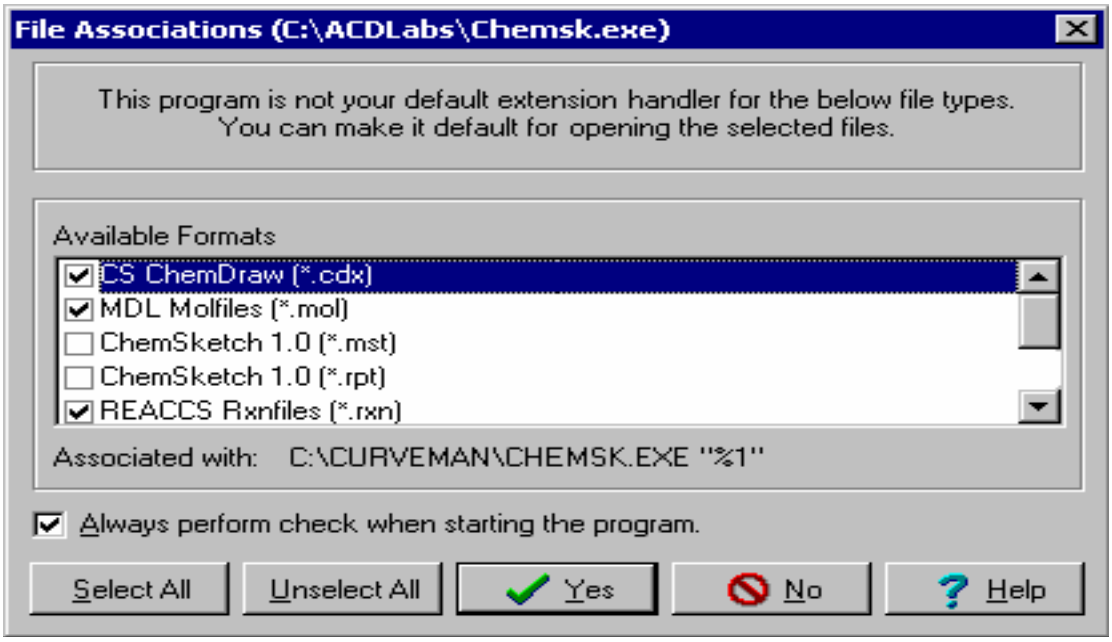
或从正在运行的其他ACD/Labs程序中的**ACD/Labs** 目录中选择**ChemSketch**。

3. 如果是免费版本，您将看到15秒**ACD/Labs**产品滚动图象，请等待并点击取消键(**Cancel**)。

2.3 设定可兼容的文件类型

1. 在您第一次使用此软件时，设定可兼容的文件类型(**File**

Associations)对话框将出现.



2. 这些可兼容的形式包括**CS ChemDraw(*.CHM), REACCS Rxnfiles (*.RXN), ISIS/Sketch (*.SKC)**，可能还有其他格式的文件，这些文件都可以在**ChemSketch** 中打开. 具体做法是在您想要添加的选项前的方框内点上对号，然后点击**YES**键即可。

3. 如果您不知道或者不确切地知道 **ChemSketch**将打开的文件的扩展名，不要选任何选项，然后点击**NO**键。

4. 然后今日诀窍(**Tip of the Day**)窗口将跳出，您可以在阅读结束后关闭。

2.3.1 改变可兼容的文件类型

在您没有选择可兼容文件类型以前, ChemSketch将自动使用默认的文件类型,您可以随时改变默认文件类型，只要在文件 (File)菜单下选择相关ACD产品命令(**File Associations**)即可。

重要启事：如果在 Window NT 的系统中您没有被授权改变可兼容文

件的同时选择 File Associations 的命令，会出现警告信息，请联系您的系统管理员解决问题。

如果您已经选择了所有的可兼容文件类型，一条信息会提示您已经选择了所有的文件类型-“all supported file types are already associated with the current application，您可以通过Windows Explorer选择选项：

1. 打开 Windows Explorer，选择您想选的选项:
2. 按住 Shift键，在要打开的文件上右击鼠标,在菜单中选择 Open With.
3. 选择您要打开的文件相对应的文件类型，然后选择 Always use this program(只要在前面的方框内打对号即可)。
4. 点击 OK,然后关闭 Windows Explorer.

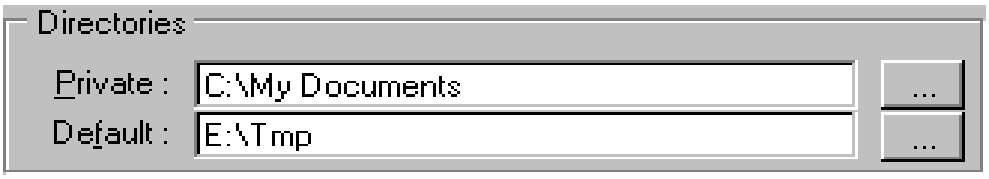
2.4 改变默认路径

如果您使用的是单一用户(可以单独使用的版本)，默认路径可能是没有任何问题的.

如果您使用的是网络版本，我们建议您改变您的默认路径,将您的文件保存在您自己的硬盘,而不是网络服务器。当做好了单机路径后，再在每一个单机上进行以下操作:

1. 打开 **ChemSketch** 的窗口后，从**Option**s 菜单中选择 **Preferences** 命令键。

2. 点击 **General**，然后在默认栏内键入每次您要输入，打开，保存和输出文件的路径。



注意: 在 **Private** 栏内，您可以设定记录每次**ChemSketch**操作的设置。

3. 点击 **OK**。

2.5 安装附件

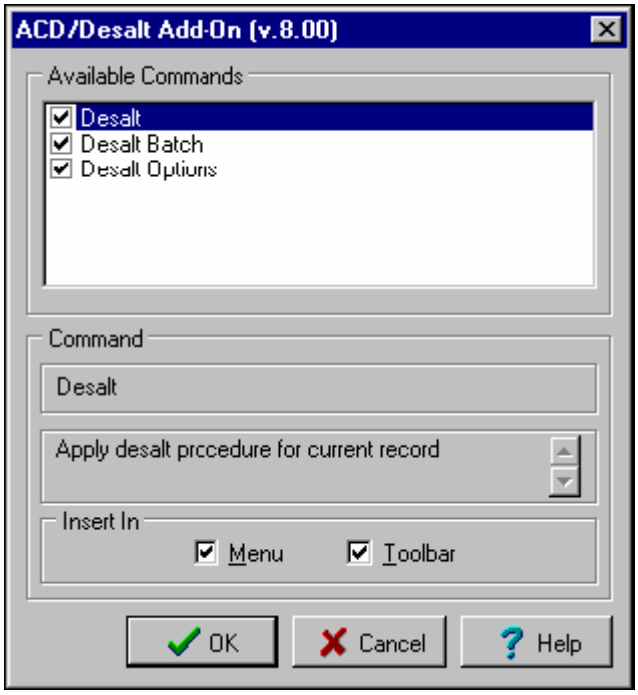
从8.00的版本开始就可以安装附件了—编写的用于扩展主要应用的一些程序（有**.ADDON**的扩展名）。每个附件都包含了用于当前记录或整个数据库的一整套命令。当附件被安装，它的命令可能被安置或在工具栏作为按钮或在主菜单作为添加子菜单的命令，或二者都有。

请按以下步骤安装附件：

1. 从选择菜单，选择附件组织者（**Add-on Organizer**）。

2. 点击添加，在出现的打开对话框中，找到**.ADDON**文件。点击打开将其添加至目录中。

3. 用户化一些添加选项，在目录选择它点击编辑:



4. 在可用的命令框中,从**ChemSketch**界面选择命令是容易实现的。在插入区域, 选择添加命令应该增加的地方: 作为命令对菜单并且/或者作为按钮对一般工具栏（若通过附件自动执行）。点击**OK**。

5. 点击**OK**在附件组织者对话框和核实是否菜单或按钮增加到界面。

2.6 退出ChemSketch

您能从以下方式中选择任意一种来退出程序：

- 在屏幕右上脚点击 ⊠。
- 在 **ACD/Labs** 菜单中选择 **Close All**，这将退出所有 **ACD/Labs**软件。
- 从**File** 菜单中选择 **Exit** ，这将只退出现有的软件。

在退出之前, 计算机将提示您存盘。

3. 绘制简单结构

3.1 目标

本章介绍绘制结构的一些基本知识，这些功能只在结构模式适用。您将掌握以下的功能:

- 画原子，化学键(单键，双键，三键，共价键，等等)，和标签。
- 翻转分子结构式。
- 选择，旋转和扩大与缩小结构图。
- 将结构式输出至文件夹，文件及打印机。
- 清理屏幕。

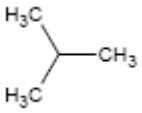
3.2 画原子、化学键和标签

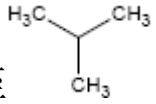
ChemSketch 的基本功能是画化学键和原子，您必须在结构模式进行以下操作: 

3.2.1 使用常用画图工具

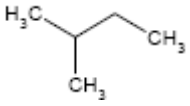
当程序开始时，常用画图工具是默认的。在这种模式下，您可以很容易地画直链和分支结构，并用元素周期表中的原子取代所画的原子。

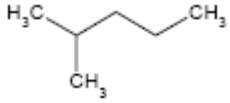
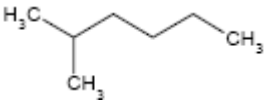
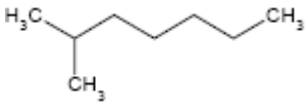
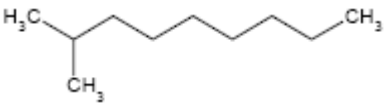
5. 在画图模式(**Draw Mode**)下,从原子工具条选择碳原子。
6. 单击空白处，画出CH_4。

7. 单击CH_4以增加一个CH_3基团，并以标准键长连接。再双击同一个碳原子，画出  。

8. 单击**Set Bond Vertically** ，将从上一步得到的结构旋转至  。

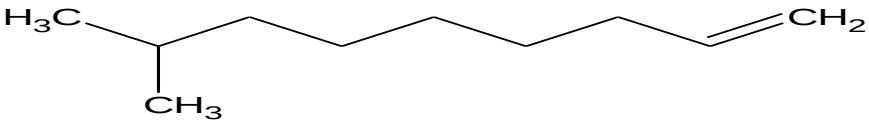
9. 单击结构工具栏中常用画图工具。

10. 单击最右边的碳原子，画出  。

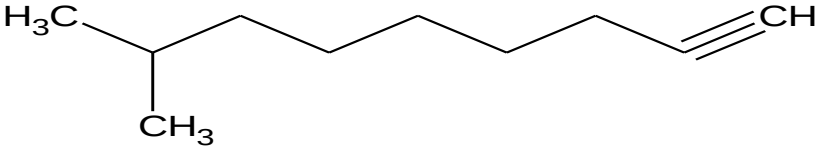
11. 重复以上步骤，画出一些结构  ， ， ， 。

3.2.2 双键和三键

1.在3.2.1节的第7步所画的结构式中的最后一个单键上再次单击获得双键:



2. 再次在双键上单击获得三键:



3. 再次在三键上点击将重新得到单键.

3.2.3 个别原子的删除

如果您加了过多的原子，可以逐一去除原子：

1. 点击**Delete** 键.
2. 在以上的分子结构上进行逐一去除原子的练习.

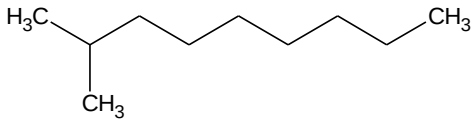
3.2.4 撤销命令

另外一个重要的功能是如何恢复以前的界面设置：

1. 单击 **Undo**键。这会将 **ChemSketch** 的界面恢复到以前的设置.

注意： 点击 Undo 键将会击活重做(Redo)键。

2. 多次单击恢复 **Undo**键，直到将其恢复至以下结构：

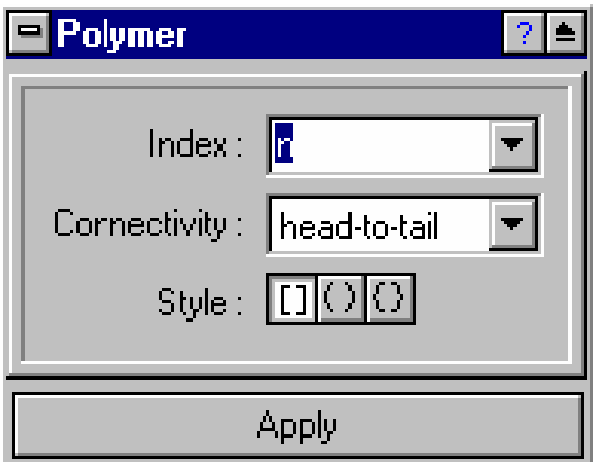


注意： Undo 键可以连续点击 50 次.当您画比较复杂的结构或者物体时，我们建议您养成及时保存文件的习惯。

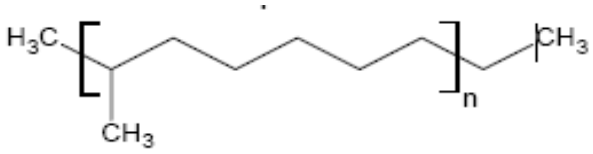
3.2.5 聚合物

ChemSketch提供了聚合物结构的绘制功能：

1. 在结构工具栏上点击**Polymers** 键，出现聚合物面板后就可以进行如下设置的更改了：



2. 通过点击或拖拽来选定产生聚合物的区域。当区域被选择，聚合物出现在工作区:



3. 再次点击**Polymers**  键就可以离开聚合物绘制模式。

3.2.6 非原子

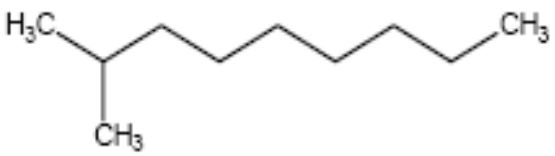
按照以下步骤来创建无终止的聚合物和弯键：

1. 在原子工具栏，点击**Pseudo Atom**  键。
2. 点击结构的结束原子用空的原子替换他们。那么就可以得到一个无终止的聚合物了。

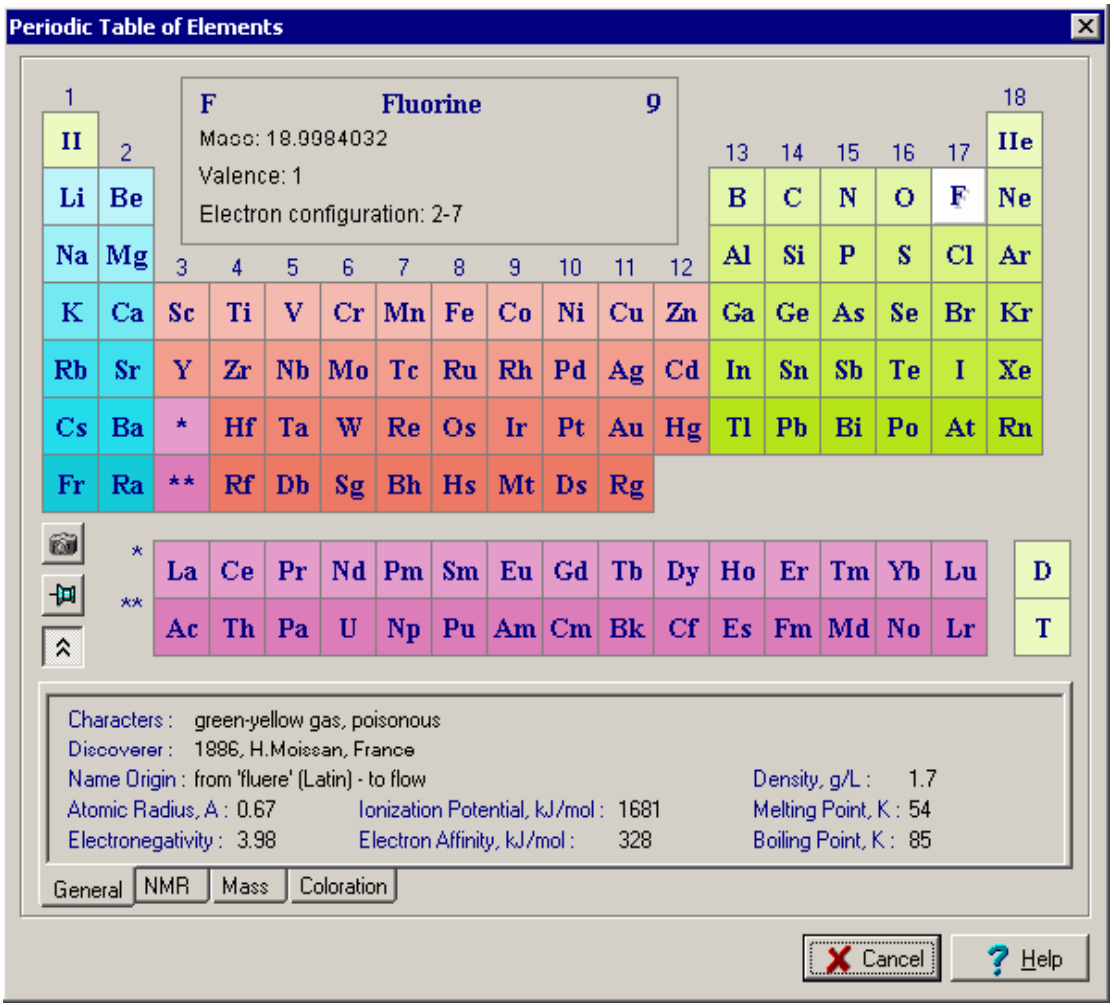
3.2.7 改变原子

按以下方式用一个原子工具栏中没有的元素替换当前元素：

1. 点击撤销键  直至回到下面的结构或者画出它：

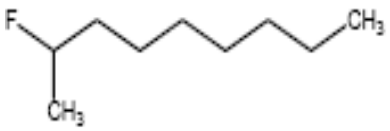


2. 单击原子工具条下的元素周期表(**Periodic Table**)键 , 打开元素周期表(**Periodic Table of Elements**)：



3. 单击元素周期表中的氟(**Fluorine**)键 F，注意现在氟(**Fluorine**)键出现在原子工具条中。

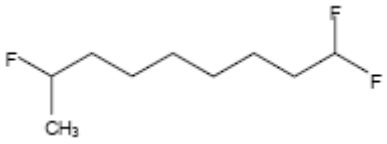
4. 单击最左边的碳(**Carbon**)，用氟原子替代碳原子：



注意：当您选择了元素周期表中的某个元素时，相应的元素键将自动加到原子工具条中。去除工具条中的原子键可以通过双击任何一个原子键或者双击原子工具条，然后选择 YES。但是后者将删除默认原子以外的所有原子键。

3.2.8 使用连续画图工具

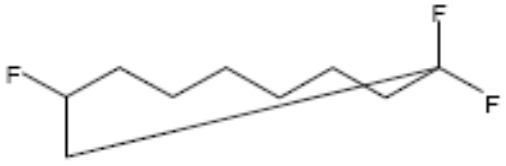
当连续画图工具(**Draw continuous Tool**) 被激活后，只有在原子工具条中被选定的原子才能用于画化学键。点击工具条中的原子键，可使其成为被选中的原子。这种连续画图工具模式在由一个选定原子“衍生”多个相同原子时，非常方便。

1. 在结构工具栏中，点击连续画图键。或者单击鼠标右键，选择画图模式。
2. 在原子工具栏(**Atoms**)中选择原子。
3. 点击最右边的碳原子，双击以“衍生”出F原子。在同一碳原子上双击，以“衍生”第二个F原子。

3.2.9 使用鼠标拖拽绘图

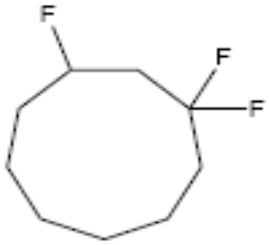
在正常画图(**Draw Normal**)和连续画图(**Draw Continuous**)两种模式下，您可以从一个原子拖动鼠标到另一个原子，画出单键。如果您从一个空白处开始(或结束)拖动，将在开始处(或结束处)生成一个新的原子。在下面结构中，点击一端的碳原子，拖动鼠标到另一端的碳原子。

当正常画图(**Draw Normal**)和连续画图(**Draw Continuous**)被激活后，指向到终端碳的当中一个和扯拽到其它终端碳画以下结构：



3.2.10 优化结构

点击结构工具栏中“清洁”  命令，将使结构中所有的键长与角度平均化，得到如下结构：



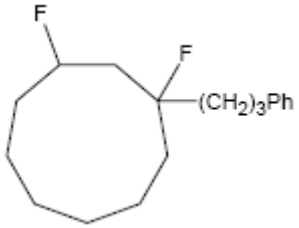
Clean命令不仅使键长和角度平均化，令结构看上去更好看，更使该结构符合于化学意义。例如循环结构，它将SP2轨道上的碳原子的键按120度分布，将SP轨道上的碳原子的键按180度分布。当画平面和立体异构体时，**Clean**命令保持以上特性将键长和角度平均化。

3.2.11 编辑原子标签

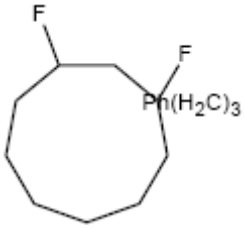
编辑原子标签工具允许您用简短的缩写代替最终端的原子。

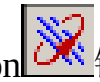
1. 在原子工具栏中，点击原子标签工具 键，然后将鼠标移动到结构中最右端的F原子上。

2. 在打开的编辑标签(**Edit Label**)对话框中，键入$(CH_2)_3PH$，再点击插入键(**Insert**)，画出如下结构。



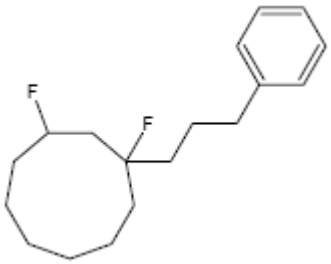
3. 选择改变位置(**Change Position**) ，然后点击原子标签，调换Ph和(CH_2)的位置得到以下结构：



提示：如果在选中 Change Position键后，按住 Shift，同时点击结构中的原子标签将达到与 3.同样的效果。

4. 利用已激活的编辑原子标签工具(**Edit Atom Label**)，点击已得到的缩写，将编辑标签对话框再次打开，点击“展开”(**Expand**)

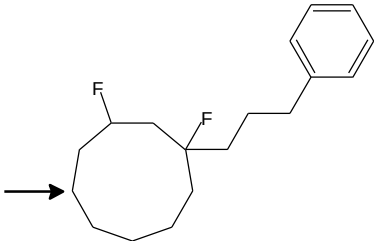
键，得到如下结构：



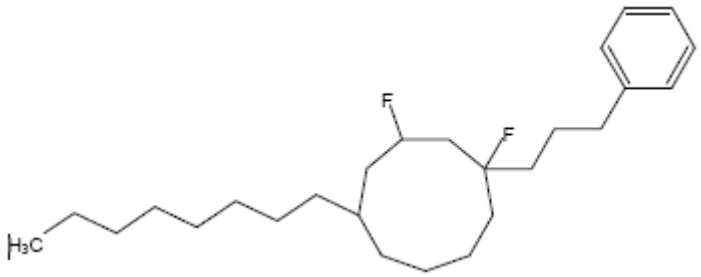
3.2.12 使用画链工具

使用画链工具，通过点击和拖动鼠标，您可以很容易地画出长、短键。

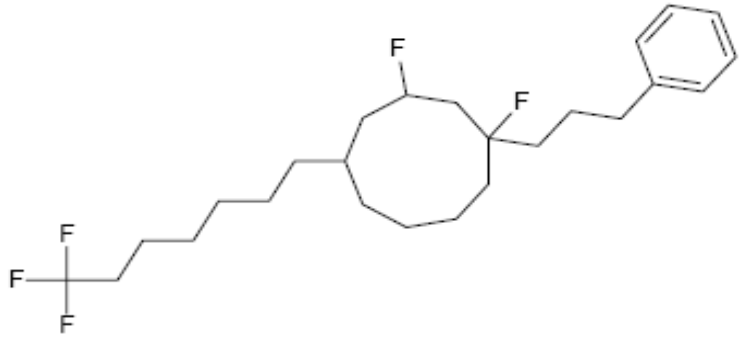
1. 点击结构工具栏中画链工具键，将鼠标移动到键头所指的原子上。



2. 按下鼠标键，向左拖动。当鼠标离开结构时，自动生成碳链。注意鼠标箭头旁的碳原子数(C#)随着碳原子的增减而变化：



3. 激活画链工具(**Draw Chains**)，在原子工具栏中选择F原子，点击最左边的碳原子，衍生出F原子。点击结构工具栏中清洁工具键，得到如下结构：



3.3 清除屏幕

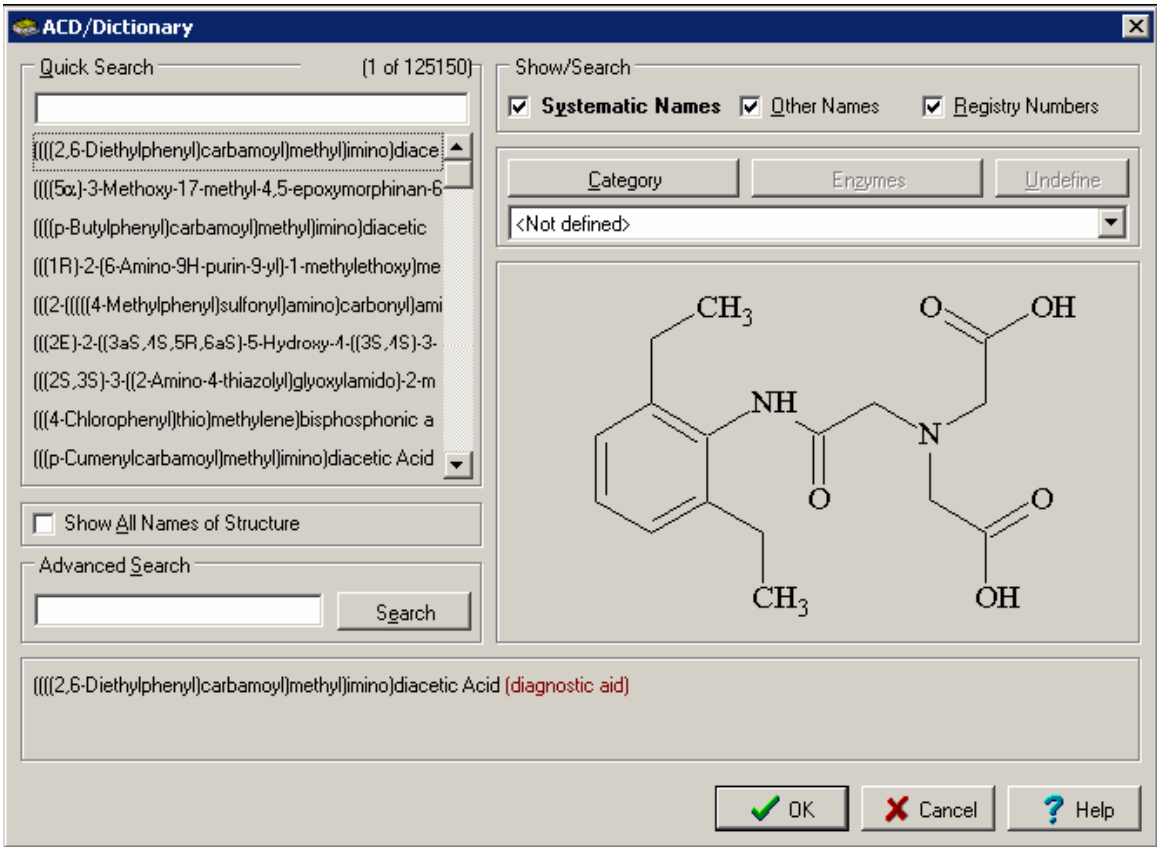
如果您需要清除屏幕，您可以选择以下的一种方式：

- 从文件（**File**）菜单，选择新建（**New**）。这将打开一个新的空白文件。
- 在左上方选择创建新页按钮(**New Page**)，创建新的一页。
- 在编辑菜单中选择“全选”按钮(**Select All**)，再选择“删除”命令(**Delete**)。
- 在工具栏中(**General toolbar**)点击删除(**Delete**)按钮，点击空白处，再点击结构的任意部分，将其全部删除。

3.4 使用ACD/字典

我们允许您从普通药品名字中查找分子结构，但这个模块是只可利用的在 **ACD/ChemSketch** 的商业版本。如果您使用免费软件版本 **ACD/Dictionary** 是不可用的，请跳过这个部分。

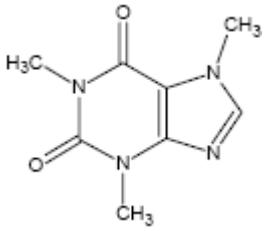
1. 在参考工具栏点击**ACD/Dictionary** 按钮（**ACD/Dictionary**）来显示 **ACD/Dictionary**:



2. 在对话框的标题栏上单击鼠标右键来显示快捷菜单，确信没有选中复制带有命名的结构（**Copy Structure with Name**）。
3. 在快速查找箱，输入咖啡因。当您键入名单即显示对应的名称。当必需的名称在表单中可见的时候，点击它来选择。对应的结构就会被显示在右边的预览区域。

4. 将被选择的化合物置入工作区，点击 OK 即可。

5. 结构阴影附有指针，指向空白区域并点击即可插入结构：

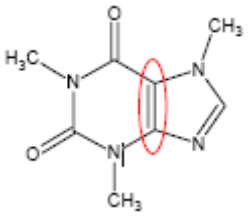


注意：更多细节在 ACD/Dictionary 选项中，参见 ACD/Dictionary User's Gudie 位于 ACD/Labs 文献文件夹(\\DOCS\DICT.PDF) 。

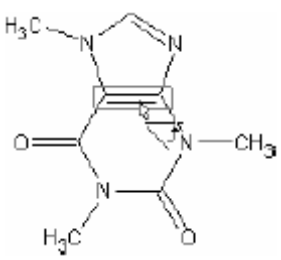
3.5 翻转结构

您可以在结构工具栏中通过点击一个键来实现整个结构的旋转和翻转。

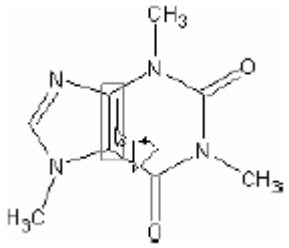
1. 我们拿前面一节字典中的或手工绘制的咖啡因为例，将下图中红线标记的双键进行翻转。



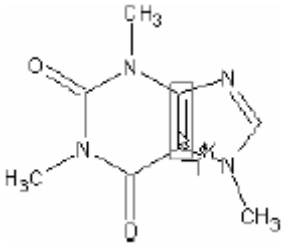
2. 点击设置水平键（**Set Bond Horizontally**）然后再点击目标键使其处于水平，结构其它部分将相应转动。用该工具反复点击此键可使结构绕键不断翻转。



3. 点击设置垂直键（**Set Bond Vertically**）然后点击目标键使其处于垂直，其它部分将相应翻转。



4. 点击翻转键（**Flip on Bond**）然后点击目标键，结构将会绕着被点击的键转动。



5. 首先选中整个分子（或基团），点击上下翻转（**Flip Top to Bottom**）按钮，则选中的结构或基团（若无选中项，则所有已绘结构）将从上部旋转至下部。

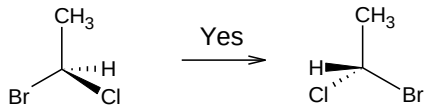
6. 点击左右翻转(**Flip Left to Right**)使被选结构或基团（若无选中项，则所有已绘结构）将从右方旋转至左方。

注意：应用翻转工具可能改变立体结构。可以从选项（Options）菜单中选择参数（Preferences）,然后切换至结构（Structure）标签来进行控制。保持立体构型（Keep Stereo Configuration on）选区将控制程序是否对分子的真实 3D 排列进行记忆：

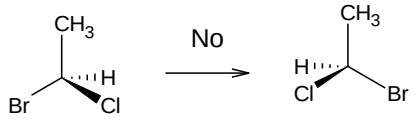


它可以保持真正的 3D 结构的分子结构. 我们建议选择 Flips, 这样一

来尽管位置改变了，分子结构将和翻转以前的一样.



否则,分子将变成原来分子的对应异构体:



3.6 输出

输出的方式有存盘，打印或者插入其他文件中，如：**MS Word, Excel** 等. 您还可以试试 I-Lab 服务。(参见 **ACD/I-Lab User's Guide** 位于 **ACD/Labs** 文献文件夹, **\\DOCS\ILAB.PDF**)

3.6.1 保存ChemSketch(.sk2)文件

将我们在前一节中所画的结构式存为 **ACD/Labs** 格式,[1] 文件名为 **example1.sk2**。

1. 从 File 菜单选择 **Save**。
2. 在对话框中输入文件名和路径，然后点击 **OK**。

3.6.2 保存结构为 MDL Molfile 格式

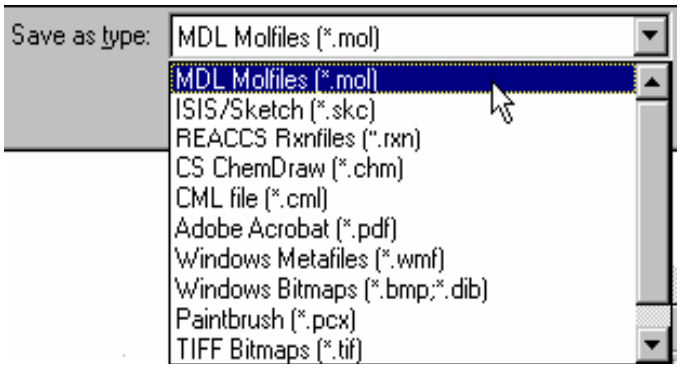
一种比较标准的文件格式是由 MDL 公司开发的 **MDL molfile** 格式。注意：只有结构式可以存盘，图象和文字不能以这种格式存盘。

1. 选择您要存盘的结构式。

---

[1] **SK2** 格式的细节请参阅 **http://www.acdlabs.com/products/draw_nom/draw/chemsketch/**

2. 从文件夹(**File**)菜单选择输出(**Export**)命令，在对话框下部的文件类型选择栏中选择 **MDL Molfiles:**

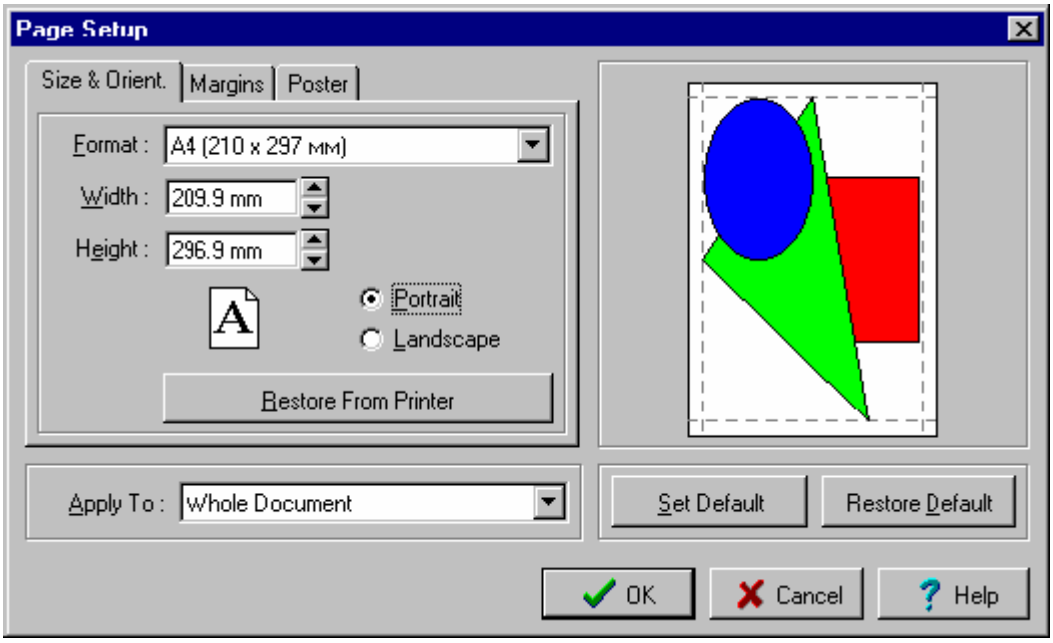


3. 输入文件名和路径，点击 **OK**。

3.6.3 打印

其它方式保存您的工作将打印报告。在开始的打印之前，核实页面设置。

1. 若您想设置海报选项，从文件菜单，选择页面设置显示您能指定纸张大小，取向等（更多有关海报制作的细节可在 11.3 获得）。



2. 点击 OK 保存。

3. 点击全页(Full Page)键进行预览。

4. 进行适当的调整。

5. 从文件夹(File)菜单选择打印(Print) 或者点击。点击 OK 开始打印。

3.6.4 在文件中插入结构式

有时侯您需要将结构式插入其他类型的文件中。例如: Word document, Excel spreadsheet 等。

1. 选择所需的结构式。

2. 若想从图画板拷贝结构式, 单击拷贝键。

或者

从编辑(**Edit**)菜单键选择拷贝 **Copy** 命令。

或者

在键盘上按 CTRL+C 键。

3. 然后在您选定的文件中, 点击粘贴(Paste)键。

> **重要说明:** 当把结构式粘贴至其他文件时, 如: Microsoft Excel, 结构式可能会变成数字或者图形(MDL molfile 格式), 为了得到结构式, 可以点击特殊粘贴(Paste Special), 在粘贴选择（paste options)中, 选择 ACD ChemSketch 2.0 Object 或者 Picture 键, 前者将结构式作为 OLE 物体插入, 因此您可以将插入的结构式通过 ChemSketch 进行修改。

4. 绘制更复杂结构

4.1 目标

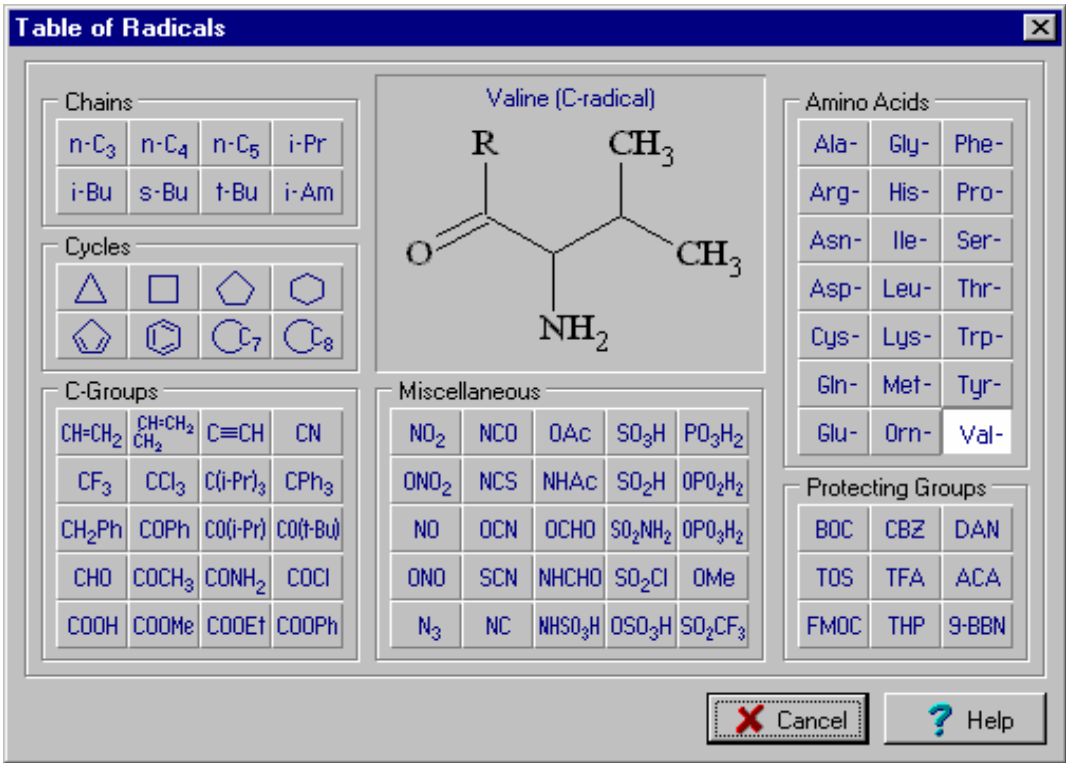
在这一章中,主要讲解以下内容：

- 如何用化学基团表画化学基团;
- 如何迅速地画环结构;
- 如何删除和替换原子;
- 如何画双键和三键;
- 如何画原子的电荷,阳离子和阴离子;
- 如何改变不同原子的性能。

4.2 使用基团表

化学基团表(Table of Radicals)中包括预先画好的氨基酸及其保护基的结构，还有核甘酸及其他常用结构。

1. 在常用工具栏(General toolbar)点击保存文件(Save File)，然后点击新页面（New Page）在同一文件中开始新的绘图。
2. 在参考工具栏(References Toolbar)中点击基团表(Table of Radicals)，显示如下基团：



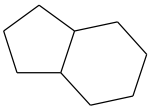
3. 在表中点击环己烷键(Cyclohexane) 。环己烷键被选定，同时选定屏幕右边的参考工具栏(References toolbar)。

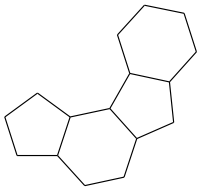
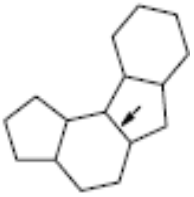
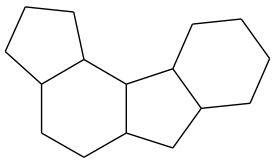
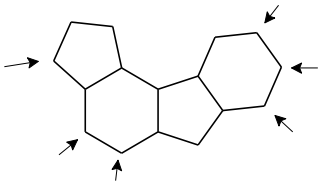
4. 对环戊烷键和羟基重复以上步骤。

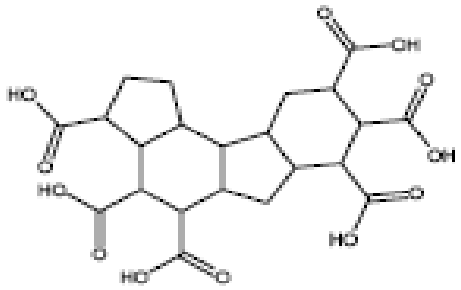
注意：当基团表中新的化学基团被选中后，在参考工具栏中将自动添加该键。可通过双击该键或在参考工具栏再选择 YES，删除该键。

4.3 使用环节构

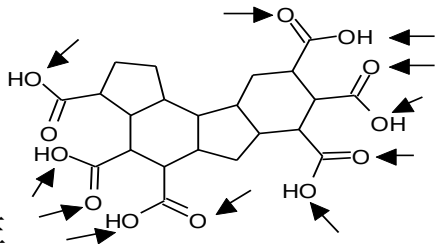
1. 在右边参考工具栏中选择环戊烷键（Cyclopentane），或者从化学基团表中选择。
2. 在工作区点击创建新的五元环。
3. 在同一工具栏中，选择环己烷离子，将鼠标移动到环

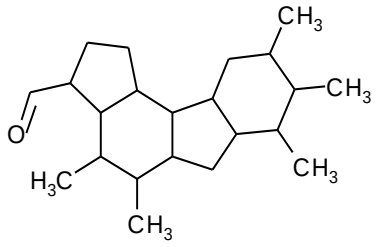
戊烷键，再点击创建如下结构。

4. 重复以上步骤，创建如下结构：
5. 点击垂直键(Set Bond Vertically)，再点击箭头所指的键，使结构围绕该键旋转：
6. 在基团表中点击 COOH 按钮。
7. 点击箭头所指的原子，以衍生出羧基：



4.4 删除原子和基团

我们将在结构删除箭头所指的原子

使其成为如下结构  。

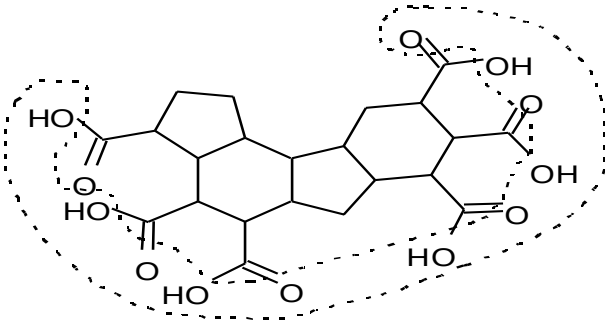
您可以这样作：依次删除每个原子，或一次自动删除所有原子。

4.4.1 同时删除多个原子

在这个部分，您将学会怎样立即删除所有必需的结构元素：

1. 点击结构工具栏中套索开关键(Lasso on/off) ，以激活套索选择模式。注意此时选择/移动工具 (Select/Move)也被激活。

2. 用套索线围住所有要删除的原子。



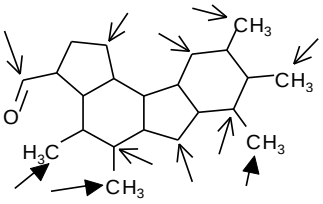
3. 点击工具栏中的删除(Delete)键。点击任意一个被选定的原子，将它们全部删除。

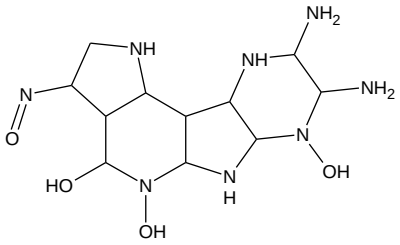
   或者

   在键盘上按Delete删除。

注意：您可以通过套索(Lasso selector) 和矩形套索(Rectangle selector) 选定原子、键和图象。不选择图象时，点击任意空白即可。

4.5 替换原子

替换箭头所指的原子，使结构成为：

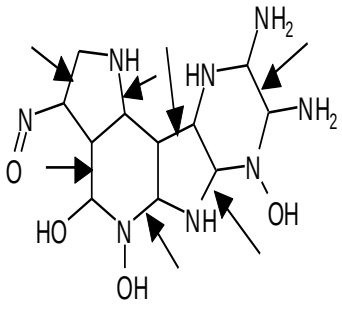


1. 点击原子工具栏(Atoms toolbar)中氮原子键 N，再点击所有细箭头指定的碳原子。
2. 点击原子工具栏中氧原子键 O，再点击三个粗箭头指定的碳原子。

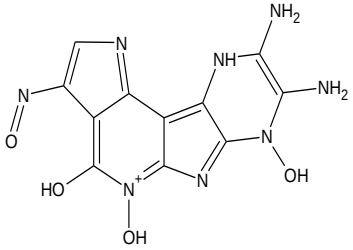
注意：在连续画图模式下，您不能替换原子(见 3.2.8 章)

4.6 设置双键和三键

1. 在（DrawNormal），（Draw Continuous）或（Draw Chains）任一处于激活状态下时，点击箭头所指的键

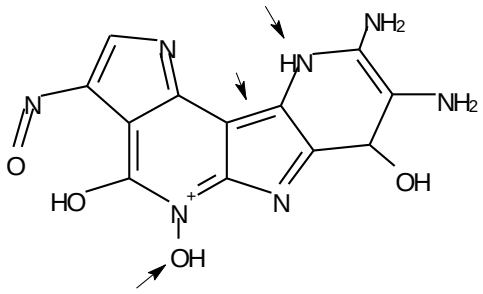


使其变成双键：



2. 使用改变双键(Change Double Bond)或氢原子位置(Hydrogen Position)键，可以使结构更精细。选定这个键，并点击箭头所在的氢原子和双键。注意：氢原子围绕氮原子和氧原子移动，

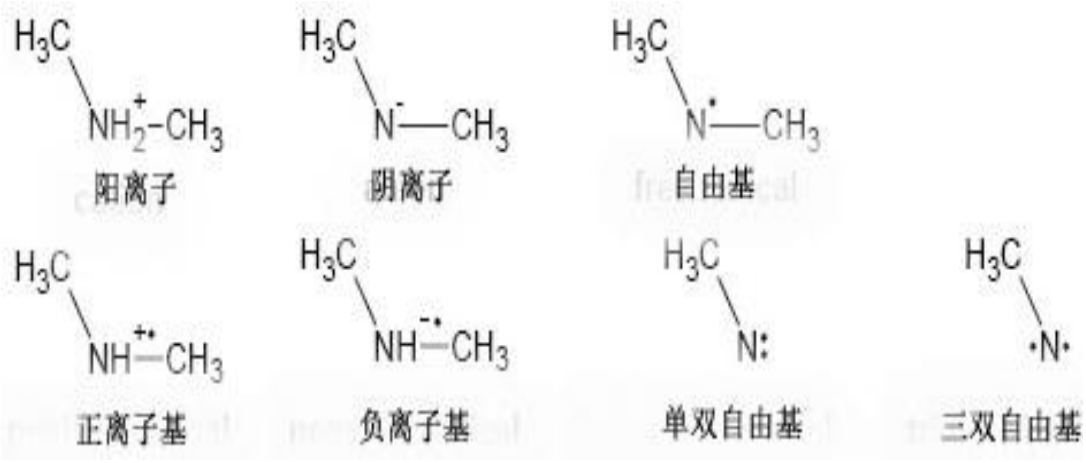
双键围绕单键移动。



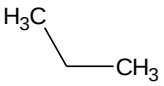
3. 在常用工具栏，点击保存文件，然后点击新建页面。

4.7 标定电荷和定义阳离子与阴离子

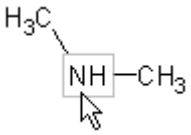
本章将画下列结构:



1. 在原子工具栏中选择碳原子 键**Carbon** C，并且保证通用画图工具处于激活状态（ **Draw Normal** ），画出如下结构:



2. 选择氮键（ **Nitrogen** N ），并且点击中间的碳键，用氮替换碳:



3. 点击原子工具栏中的**Increment (+) Charge** 键 的右下角的三角形扩展得到以下各项:

 Increment (+) Charge 正电荷

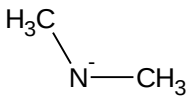
 Decrement (-) Charge负电荷

 Radical自由基;

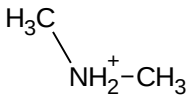
 Positive Radical Ion正离子基;

 Negative Radical Ion负离子基.

4. 点击负电荷**Decrement (-) Charge** 键，然后点击NH，得到一个阴离子：

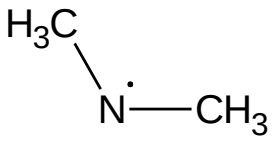


5. 右击鼠标得到正电荷键 **Increment (+) Chargel**（或者选择），双击将得到阳离子：

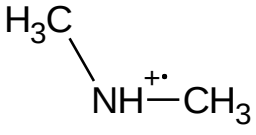


注意：当阳离子或者阴离子加到非金属结构中时,氢原子将根据化学键的需要自动加上或者删除。

6. 选择自由基键 **Radical** ，点击NH_2 得到自由基：

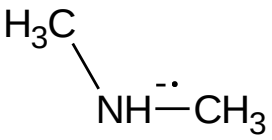


7. 在空白处右击鼠标得到正离子基或者选择相应的键，点击氮原子，得到如下结构：



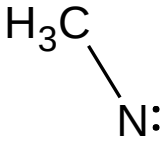
8. 右击鼠标得到负离子基或者选择相应的键，点击氮原子，得到

如下结构：

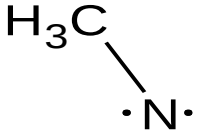


9. 选择删除键 **Delete** ，点击右侧的CH_3 将其删除。

10. 多次点击将得到**singlet biradical** ，点击N得到以下结构：



11. 继续在自由基状态下点击N，将得到以下结构：

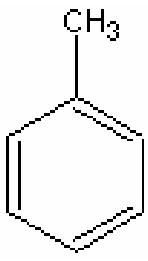


12. 在常用工具栏，点击保存文件，然后点击新建页面。

4.8 标记键

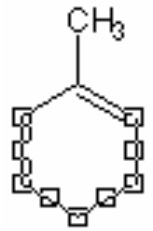
使用键标记工具，用附加点来指示结构。

1. 在原子基团表中，点击苯，然后在工作区的空白处单击。
2. 在原子工具栏中，点击碳原子，这时我们可以注意到常用绘图工具被自动激活了。
3. 点击苯顶端的原子来添加一个甲基：

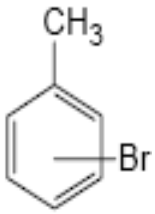


4. 在原子工具栏点击溴原子

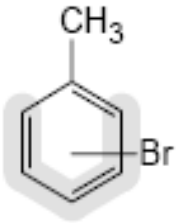
5. 使用选择/移动工具或旋转/调整工具选定结构下部的五个原子：



6. 在结构工具栏上，点击键标记或阴影键标记工具。被选中的原子就被出现的键标记连接起来了：



或



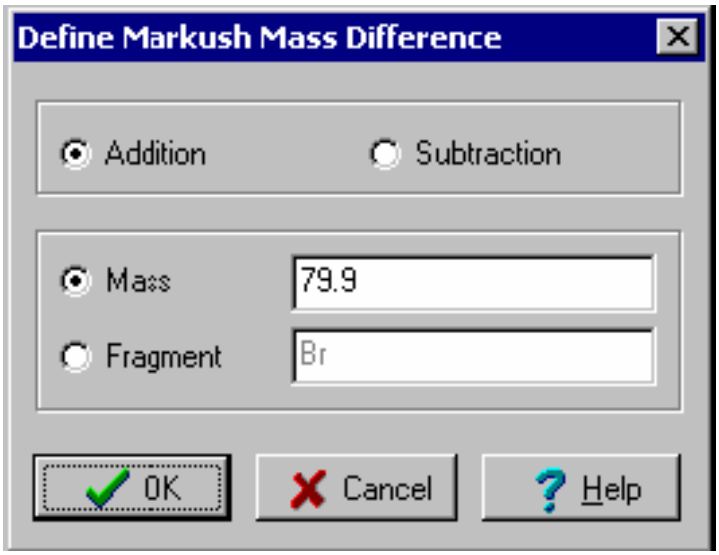
在结构上，溴可以连接在甲苯下部五个碳原子中的任何一个，ACD/ChemSketch 让你借由可变附着点的加良把这个现象变的更加明显。

4.8.1 原子团标记键

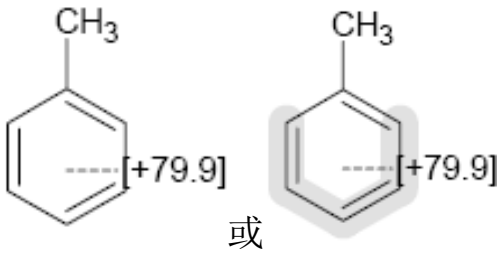
从 9.0 的版本开始，您就可以通过附加模块和公式来绘制结构以替代额外的或是无关的结构的原子团本身。这种特殊类型的结构标记对化学结构的变化或是质谱的变形的指示是很有用的。

1. 应用该选型，同上述方式绘制甲苯然后选择结构中五个较低的原子。
2. 在结构工具栏中，点击增减原子团标记键的按钮：即或。
3. 在出现的定义标记质量差的对话框中，选择 Addition 和 Mass

选项，然后在对应的框中输入 79.9：



4. 点击 OK。您可以看到如下结构之一：



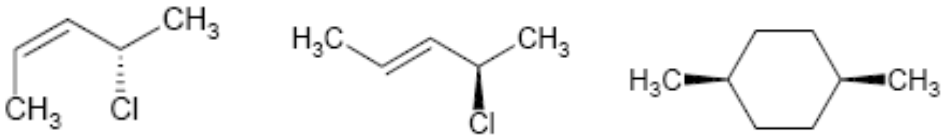
或

5. 在常用工具栏，点击保存文件，然后点击新建页面。

4.9 使用立体键

ACD/ChemSketch 让你为手性和非手性中心产生立体的描述符并为一个双键结构。

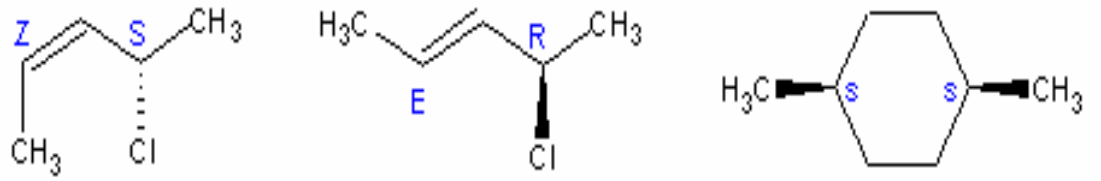
1. 使用上述工具绘制下面一系列结构：



提示：要绘制立体键，请在结构工具栏中点击 Up Stereo Bonds或者 Down Stereo Bonds。然后在化学结构中点击目标键就可将其

转换成立体键了，或者从原子拖拽到一个空白区，或者简单的点击一个已有原子（如果原子工具栏中被激活的原子和已有原子是同一原子的话）。您可以根据您的需要多次点击键来改变立体键的方向。

2. 选中全部结构。
3. 在工具（Tools）菜单中，指向生成（Generate）然后点击立体描述符（Stereo Descriptors）（在结构模式和绘图模式下您均可以进行该操作）。立体描述符就会在结构中相应的手性中心和双键上显示了：



4. 下面是可用的描述符：

- **S** 和 **R** 描述一个手性中心的构型
- **E** 和 **Z** 描述一个双键的构型
- 小写 **r** 和 **s** 描述的是非手性中心

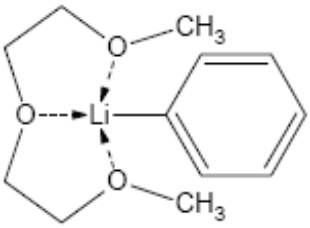
5. 从选项菜单选择参数设置来改变描述符的颜色。
6. 在出现的参数设置对话框中转换到结构（Structure）标签，然后在自动/手动编号调色板中选择适当的颜色。当您再次使用立体描述符的时候，定义的颜色将会被运用。

注意：如果工作区没有结构被选中，当前页的所有包含手性中心或双键的结构将会自动生成可能的 Z/E 或 R/S 异性立体描述符。

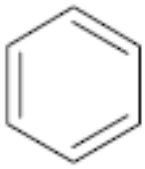
7. 在常用工具栏，点击保存文件，然后点击新建页面。

4.10 绘制配位键

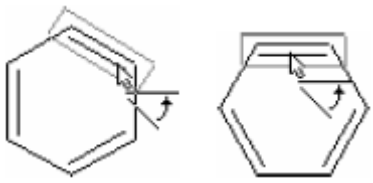
绘制配位键的方法有多种。ACD/ChemSketch 将让您学会四种类型的绘制方法。我们一起来绘制如下结构：



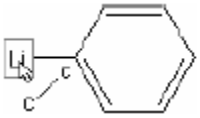
1. 使用原子基团表或者参考工具栏上的按钮，将苯环粘贴到工作区：



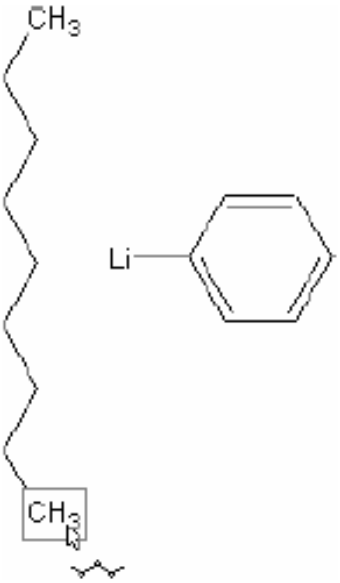
2. 在结构工具栏点击设置水平键然后点击下图中的键来转动苯环：



3. 激活正常绘图工具，在元素周期表中点击锂然后点击 OK。指向苯环最左边的原子组并拖拽出锂：

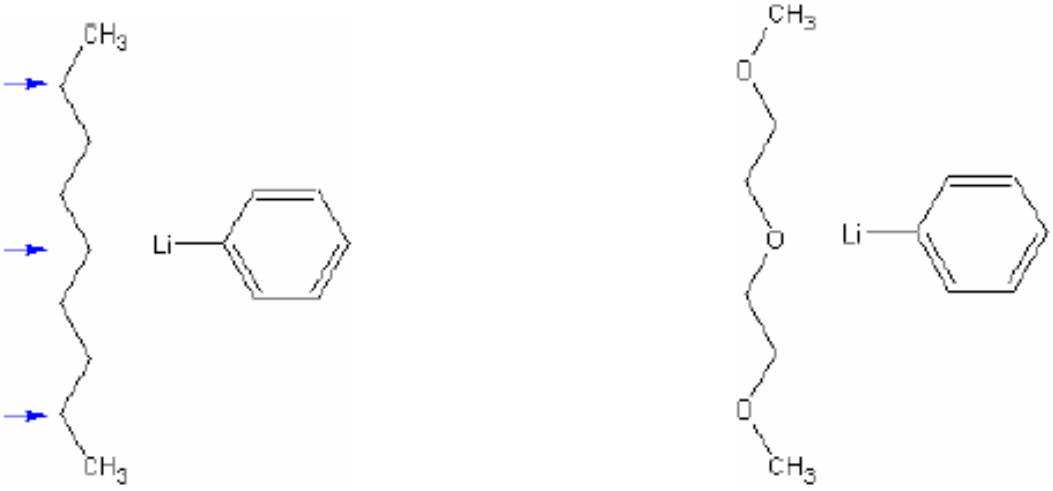


4. 点击原子工具栏中的碳原子然后点击画链工具。拖拽到一空白区域那么就得到一个包含 9 元素的链了。拖拽时，将链移动到结构的左边，不要碰到结构：



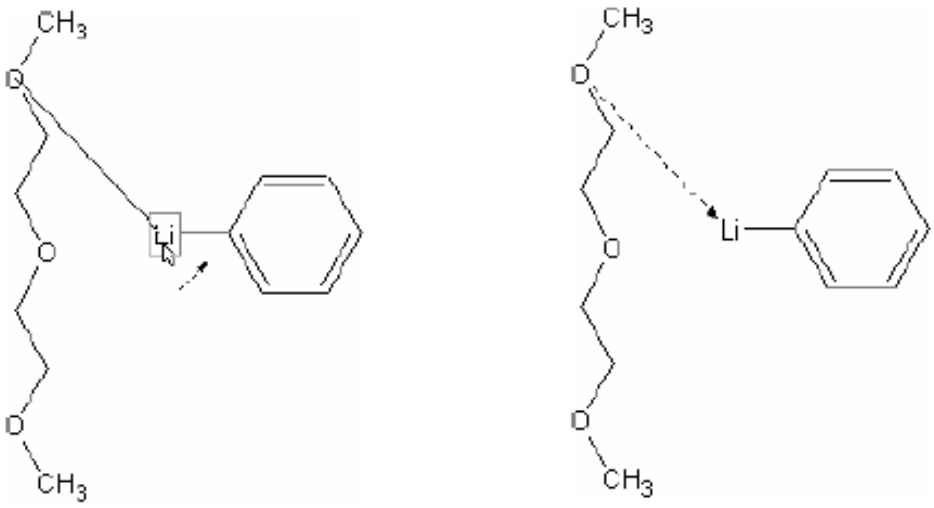
注意：如果在 Preferences 对话框中（常用标签），Informative Cursor 选项被选中，在您绘制链的时候您将会在旁边看到元素的个数。

5. 在工作区弹右键转换到正常绘图工具并在原子工具栏选取氧 O。点击按钮并在下图箭头标记的地方替换为氧原子。



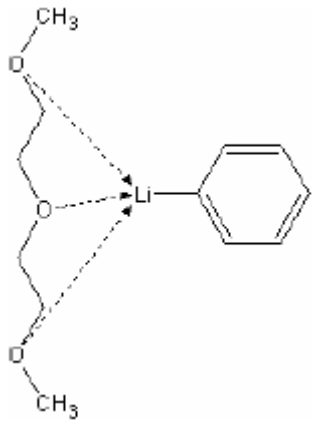
6. 在结构工具栏，点击配位键按钮上的白色三角然后选择虚线箭头按钮。

7. 从一个氧原子拖拽到锂原子来用配位键连接它们。当您松开鼠标，配位键就出现了：

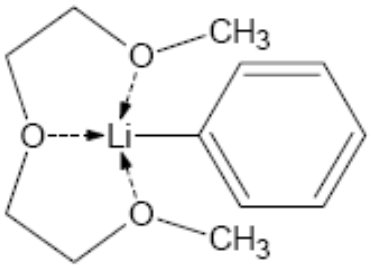


注意：如果键箭头被错误定向，指向键就会被高亮提示，点击后来改变定向。

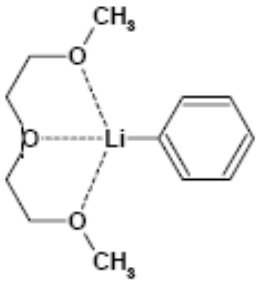
8. 用同样的方式，从氧元子拖拽到锂原子来绘制其他的配位键：

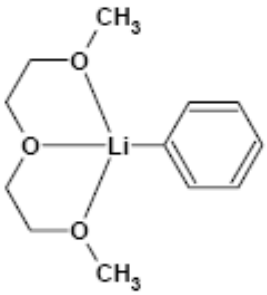


9. 点击优化结构来标准化所有键长和键角：



您可以通过以下结构来练习配位键的绘制：



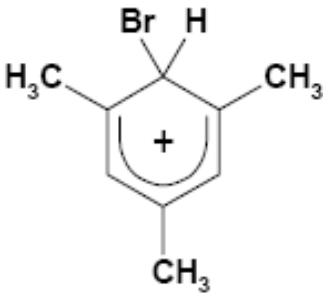


注意：尽管看起来和普通键一样，配位键并不影响原子的化合价及电荷。所有类型均按同一方式编码，所有以上三种绘制描述的是同一结构。

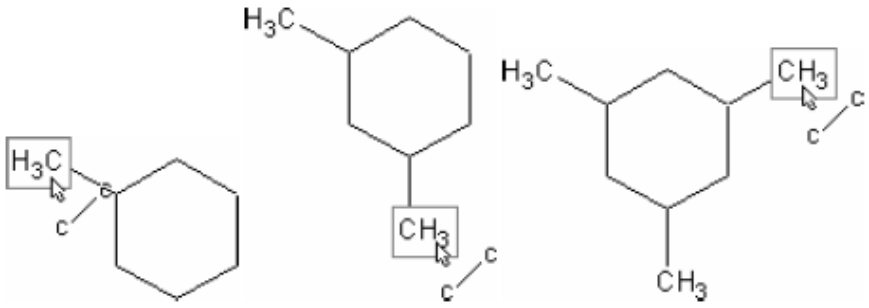
10. 在常用工具栏，点击保存文件，然后点击新建页面。

4.11 离域电荷及曲线

离域键和离域电荷可用来绘制反应中间产物，离域电荷和有多中心配位键的有机金属结构。我们将通过下面的结构的绘制来练习该类型键的使用：

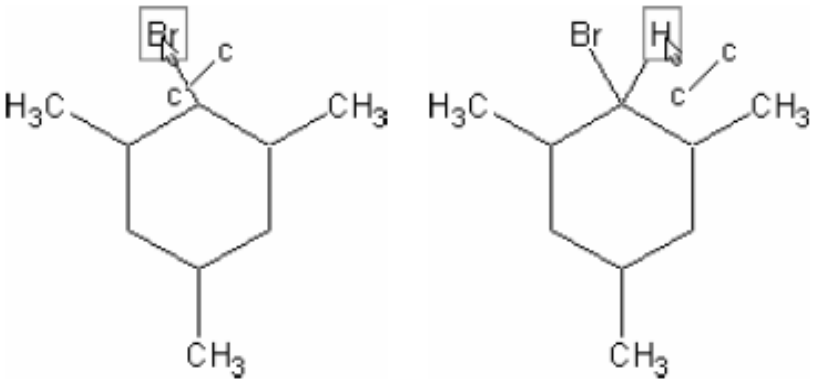


1. 在参考工具栏或原子基团表中，选择环己烷并粘贴到工作区中。
2. 在原子工具栏中，点击碳原子。通过从环上原子的拖拽，导出多个甲基：

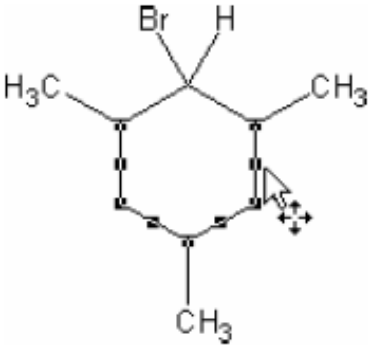


3. 如果原子工具栏中没有溴原子，从元素周期表中找到并选取，若可用——直接点击。点击环上部的原子导出一个新的键。

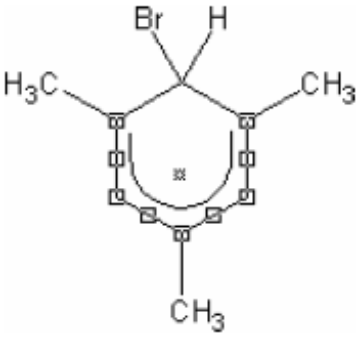
4. 点击氢并从同一原子拖拽导出另一个键：



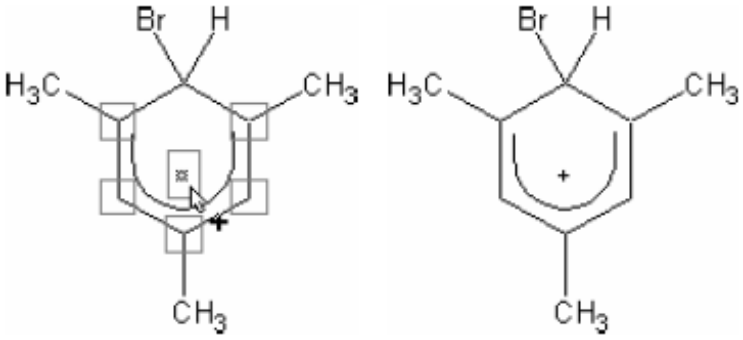
5. 激活选择/移动工具。按下 SHIFT 键并逐个点击下图所示的键：



6. 在结构工具栏，点击实心离域键（Solid Delocalization Bond）将其应用到所选键上：



7. 在原子工具栏上点击正（＋）电荷，指向离域键的中心在出现的高亮区点击就可以将其变为正电荷：



注意：如果您想要让加号变得更现眼，您可以通过 4.13 中的改变属性来改变它的大小。

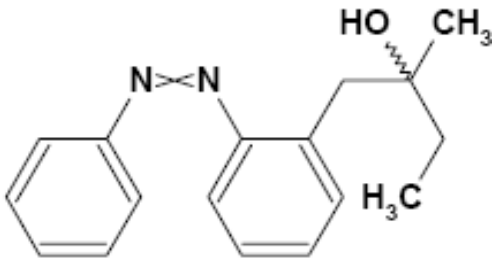
现在，您可以通过如下结构的绘制来进行练习：



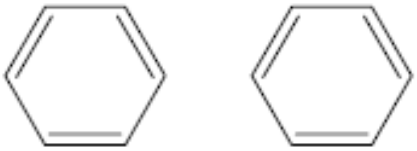
8. 在常用工具栏，点击保存文件，然后点击新建页面。

4.12 更多键类型

在这一节中，我们将学习绘制包含能够指示不明双键结构和手性中心结构的不明确的单双立体键的结构：

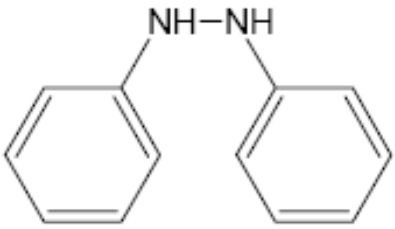


1. 从参考工具栏或者是原子基团表中使用苯环来插入图示两个结构：

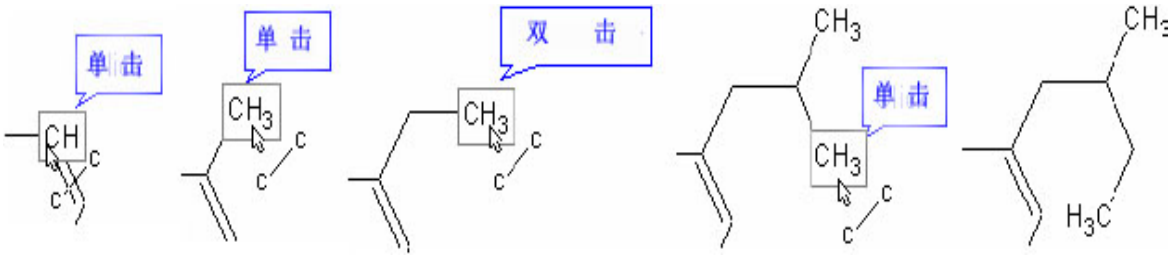


提示：在结构工具栏中点击设置水平键来旋转插入的模板。

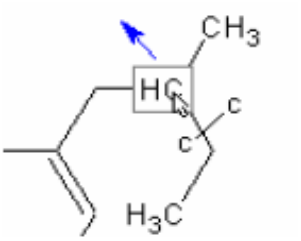
2. 在原子工具栏，点击氮原子并按下图所示通过鼠标的拖拽和释放来连接两个环：

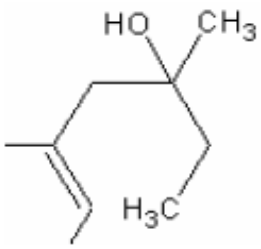


3. 在原子工具栏中点击碳原子并通过如下的方式来点击原子以增加一个基团：

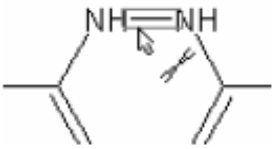


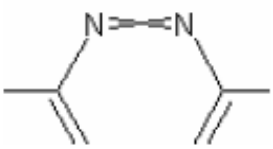
4. 在原子工具栏，点击氧原子并在标记出的原子上向左上方拖拽出一个基团：



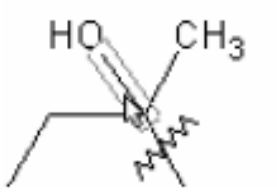


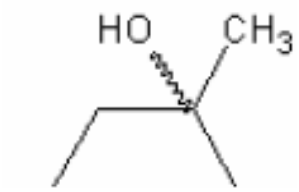
5. 在结构工具栏上点击 Undefined Stereo Bond 上的白色三角按钮来显示更多键类型。点击 Undefined Double Stereo Bond 来选择它。点击所示键用其他类型来取代：



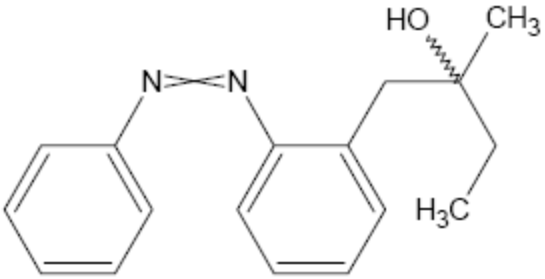


6. 从结构工具栏中的同一按钮中选择 Undefined Stereo Bond 并点击所示结构用以替换：



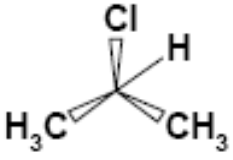


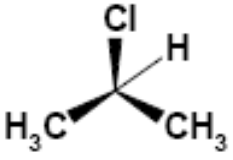
于是，将会显示出如下的结构：



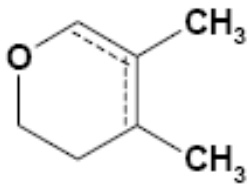
您可以通过尝试以下结构来练习其他类型键的绘制：

- 空心楔形有时候用于描述空间原子的排布。等同于相对普遍的向上的立体键：

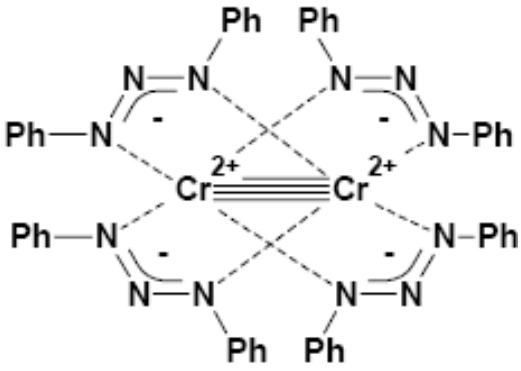




- 离域键或半序键可用于描述双键、异构体或芳香结构的离域：



- 四联键用于描述一些有机金属联合体的结构：

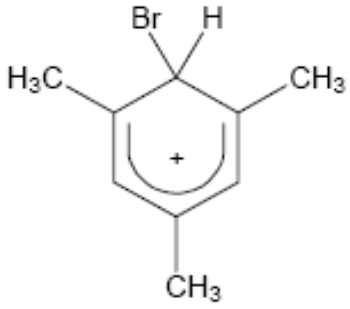


7. 在常用工具栏，点击保存文件，然后点击新建页面。

4.13 改变原子属性

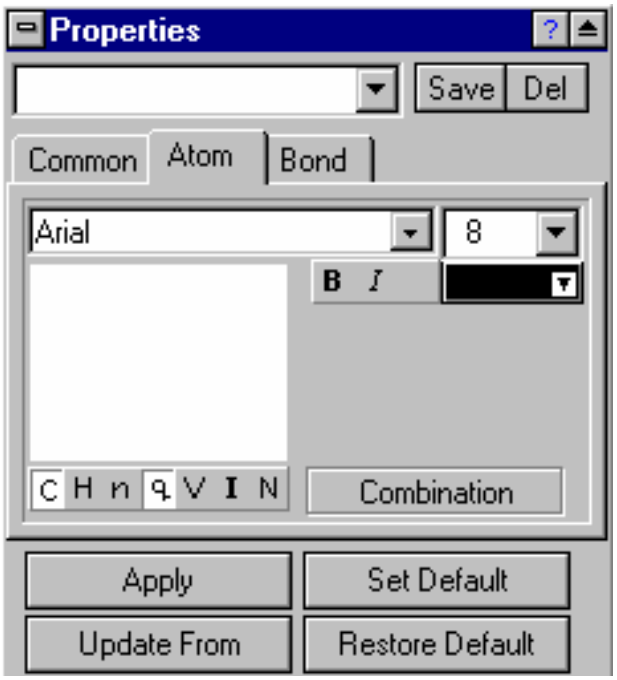
如果您想显示 ACD/ChemSketch 中绘制的结构的化合价或者是某个原子的同位素的质量——甚至是改变原子的字体或大小——那么您就要用到属性面板了。

您可以使用在 4.11 中绘制的结构。下面我们一起来改变加号的大小并将可见元素符号加粗：

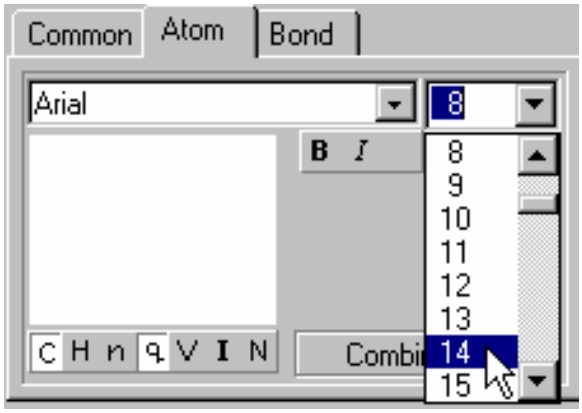


1. 在结构工具栏，点击选择/移动

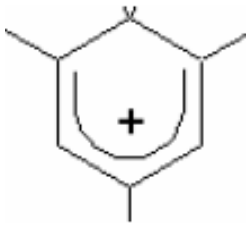
2. 指向加号然后双击。这将调出属性面板。转到原子标签：



3. 如您所见，在预览区下方的按钮让您可以改变元素符号和电荷 C H n q V I N。字体大小，选择 14 号：



4. 点击应用键(Apply)来显示选择部分的效果：



5. 选择结构的其他部分或整个结构然后双击，从属性面板中尝试修改其他不同属性。

6. 在常用工具栏，点击保存文件，然后点击新建页面。

5. 超级结构、简化线性分子式和化学反应式

5.1 目标

本章讲解如何画更为复杂的结构,主要讲解的两个内容是:二维(2D)优化和三维(3D)优化。对于初学者,请务必在读完前面章节以后再阅读本章。具体内容如下:

- 如何利用 2D 优化和清理(Clean) 工具功能画环烷烃和氨基酸;
- 如何将化学结构式转化成简化线性分子式(SMILES),如何做相反的转化;
- 如何用 3D Optimization 优化工具画[2,2,2]环已烷, 三蝶烯(triptycene),立方烷(cubane)和 C_{20} 球碳结构(dodecahedrane)的 3D 优化结构;
- 如何画化学反应式。
- 使用反映计算器——*仅限商业版!*

5.2 2D—优化

清理功能(Clean) 可以理解为 2D 的优化。例如：可以重新画和调整大小，以使所有键长和键角符合标准。使用该功能，您可以很容易地画出完美的结构。下面给出一些实例：

5.2.1 创建环烷烃结构

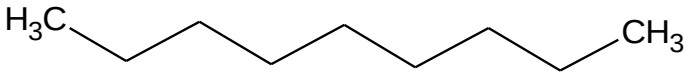
该部分可由公司网站电影区（MOVES）中下载，文件名为：

cycloalk.exe

使用该技术，可以很快画出完美的环烷烃结构，下面是如何画环壬烷：



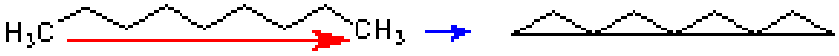
1. 在原子工具栏（结构模式），点击碳原子。
2. 在结构工具栏，选择画链工具(Draw chains)，并在工作区画出9个碳的链。注意游标显示着链中原子数。



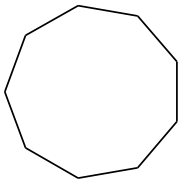
3. 在结构工具栏，点击上下翻转按钮结构就被颠倒了：



4. 点击鼠标右键，选择通用画图工具(Draw Normal)，由一个原子拉到另一个原子，以建立连接的键。



5. 点击清理结构键(Clean Structure)得到如下结构：



➢ 练习用以上方法画10个碳和8个碳的环。

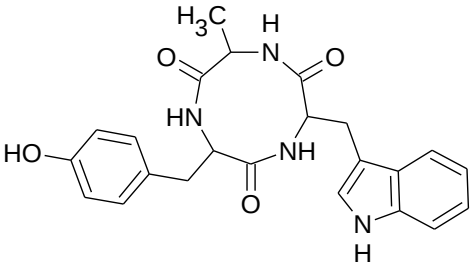
6. 在常用工具栏，点击保存文件，然后点击新建页面。

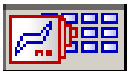
5.2.2 画环形的缩氨酸

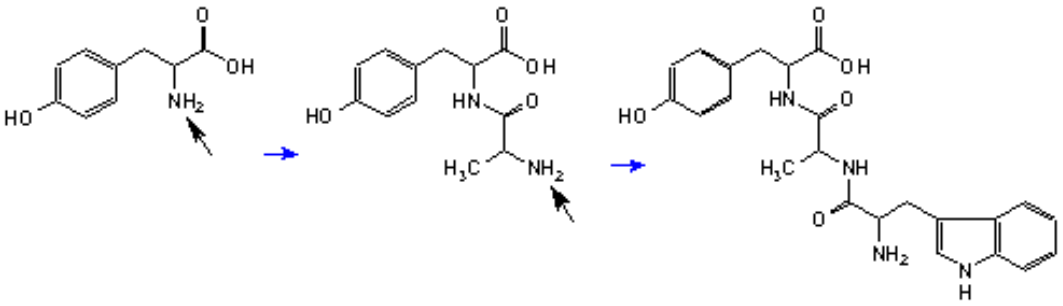
这部分可由我公司网站中下载或在电影区(Movies)中找到，文

件名为：pept.exe。

让我们画一个如下结构，我们会再次发现结构清理键十分有效。

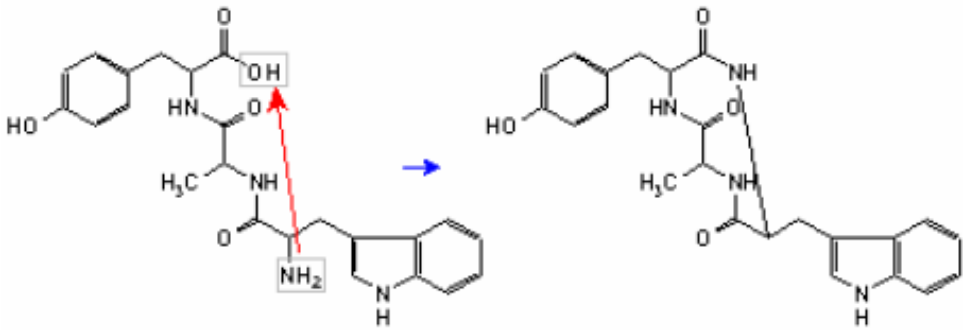


1. 确保您在结构模式下进行操作。
2. 在模板窗口切换到氨基酸的标签下，可以从打开模板窗口按钮中找到模板窗口。
3. 从氨基酸系列中选择酪氨酸在空白区点击导入结构。
4. 从原子基团表中选择 Alanine 丙氨酸和 Tryptophan 色氨酸，点击指定的原子，连接上相应的官能团。

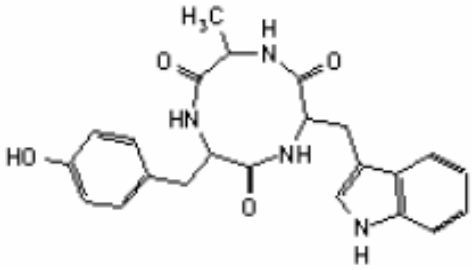


提示：在固定基团到工作区前，可以按 TAB 键将结构翻转。

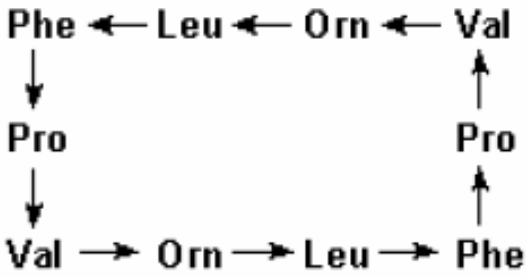
5. 点击右键快速切换到选择/移动工具然后如下图将氨基拖拽到羟基上：



6. 点击优化结构（Clean Structure）将得到如下结构：



练习画如下缩氨酸：



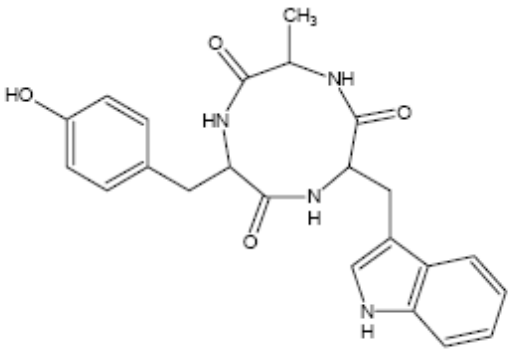
5.3 简化线性分子式(SMILES Notations)

ACD/ChemSketch 可以将简化线性分子式(SMILES,全称 Simplified Molecular Input Line Entry Specification) 转化为分子结构式,反之易然。

5.3.1 创建简化线性分子式

现在我们仍以环形氨基酸为例（5.2.2）,讲解如何创建简化线性分子式。

1. 在工具（Tools）菜单，指向生成（Generate）然后选择 SMILES Notation 命令。创建的简化线性分子式出现在结构式的下面：



Oc1ccc(cc1)CC2NC(=O)C(C)NC(=O)C(NC2=O)C\C4=C\Nc3ccccc34

2. 您可以按 CTRL+C 将其复制到 Windows 的剪贴板，通过菜单命令或 CTRL+V 粘贴到其他外部文件中。

注意：如果有多个结构式,您不必分别选择每一个结构式,再转换成 SMILE Notation,只要不选择任何结构式,点击 SMILES 后,所有的结构的 SMILE Notation 将在一行显示,中间有一点隔开。

5.3.2 从简化线性分子式创建结构式

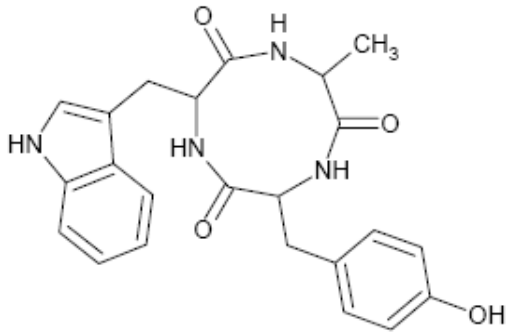
现在我们将进行相反的过程,将简化线性分子式(SMILES Notations)转化成结构式。

1. 选择由前一节得到的线性分子式：

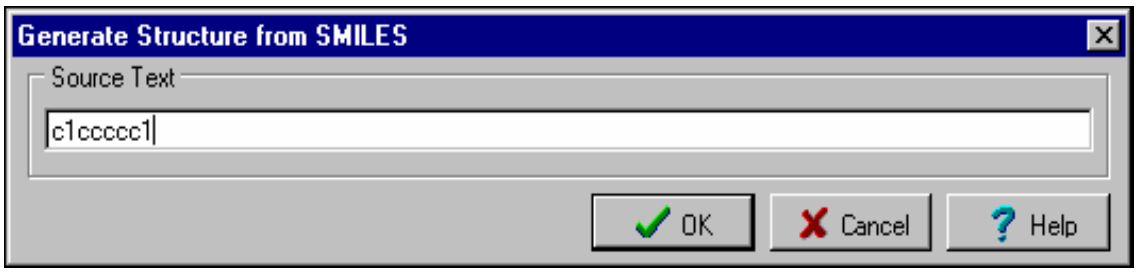
C4(=O)C(Cc1ccc(cc1)O)NC(=O)C(NC(=O)C(Cc2cnc3c2cccc3)N4)C

2. 从工具菜单栏 (Tools) 选择 Generate Structure from SMILES 命令,结构式将出现。这个结构式与前面得到的相同。

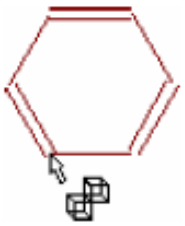
Oc1ccc(cc1)CC2NC(=O)C(C)NC(=O)C(NC2=O)C\C4=C\Nc3ccccc34



3. 若您确实没有将线性分子插入到工作区或者分子没有被选中，选择 Structure from SMILES 命令，在出现的对话框中您可以手动输入线性分子：



4. 点击 OK。生成的结构以阴影的形式附着在鼠标下：



5. 点击工作区置入结构。

6. 在常用工具栏，点击保存文件，然后点击新建页面。

5.4 IUPAC国际化学标识分子式

ACD/ChemSketch 可将 IUPAC 国际化学标识分子式（IUPAC International Chemical Identifier） 转换成结构，反之亦可。

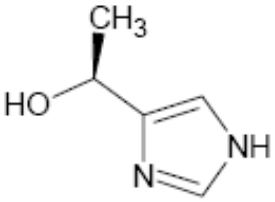
InChI 程序于 2000－2004 年间在 IUPAC 项目下开发的。该技术由美国 NIST（National Institute of Standards and Technology）首先实现。更多关于 InChI 的信息可在 IUPAC 的网站上获得：

www.iupac.org/inchi

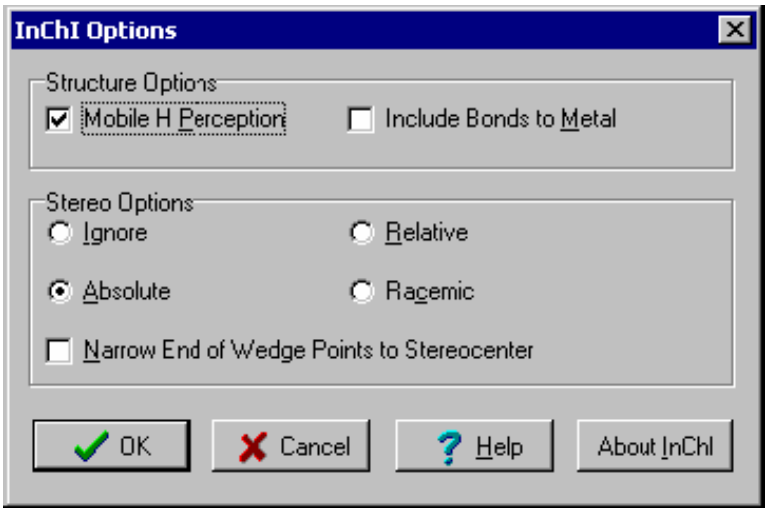
5.4.1 生成国际化工标识分子式

现在，我们将把(1S)-1-(1H-咪唑-4-基)乙醇。

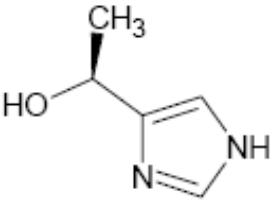
1. 用已学的知识绘制如下结构：



2. 在工具菜单，指向生成，然后选择 InChI 选项。在出现的对话框中，如图设置选项然后点击 OK：



3. 在工具菜单中，指向生成，然后选择 InChI for Structure.生成的分子将出现在结构的下方：



InChI=1/C5H8N2O/c1-4(8)5-2-6-3-7-5/h2-4,8H,1H3,(H,6,7)/t4-/m0/s1

注意：您可以按 CTRL+C 将其复制到 Windows 的剪贴板，通过菜单命令或 CTRL+V 粘贴到其他外部文件中。

4. 用不同的选项来重复 InChI 分子的生成；在 InChI Options 对话框中清除 Mobile H Perception 选项并选择 Stereo Options 下面的 Ignore.将会显示如下的 InChI 分子：

InChI=1/C5H8N2O/c1-4(8)5-2-6-3-7-5/h2-4,8H,1H3,(H,6,7)/f/h6H

5.4.2 从国际化学标识分子式生成结构

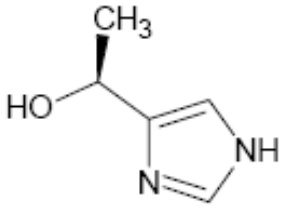
现在我们尝试将任务倒置——从 InChI 分子来引导生成结构。我们直接引用上一节生成的分子来生成结构。

1. 首先选择上一节创建的文本串分子：

InChI=1/C5H8N2O/c1-4(8)5-2-6-3-7-5/h2-4,8H,1H3,(H,6,7)/f/h6H

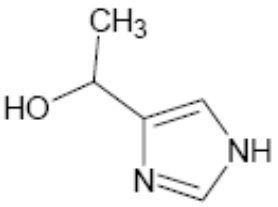
2. 在工具菜单栏中指向生成，然后选择 Structure from InChI.结构将会在文本串分子下生成。如你所见，生成的分子和上一节中的 InChI 结构是一样的：

InChI=1/C5H8N2O/c1-4(8)5-2-6-3-7-5/h2-4,8H,1H3,(H,6,7)/t4-/m0/s1



3. 现在选择第二个 InChI 分子然后再次选择 Structure from InChI 命令。您可以了解到立体异构并没有被映射：

InChI=1/C5H8N2O/c1-4(8)5-2-6-3-7-5/h2-4,8H,1H3,(H,6,7)/f/h6H



5.5 3D－优化

本章讲述如何创建一个含有非标准角度和键长的结构。画这样的结构是很难的。3D 优化和 3D 旋转使您可以很容易完成这些任务。

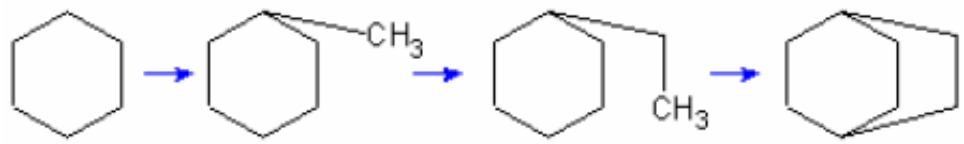
这些功能使在 ACD/ChemSketch 中创建复杂结构变得很容易。

5.5.1 创建双[2，2，2]环己烷结构

本节基于我们官方网站的影片或\\MOVIEDS 文件夹下文件：bicyc.exe。



1. 从选项菜单，选择参数设置，然后在出现的对话框中切换到结构标签。
2. 在 3D 优化区，清除 Add Hydrogens 前面的复选框然后点击 OK。
3. 在参考工具栏或原子基团表中选择环己烷点击工作区置入环己烷环。
4. 点击正常绘图并按照下面的图案使用拖拽绘制出烃桥：



5. 点击 3D 优化即获得所绘结构的 3D 样式。

注意：如果工作区中有多个结构，先利用选择工具选取将进行 3D 优化的结构(您可以利用选择/移动、选择/移动/调整、3D 旋转工具(Select/Move, Select/Move/Re-size, 3D Rotation) 。

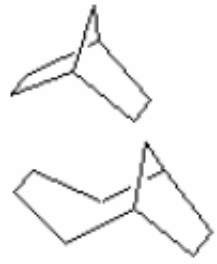
6. 如果选项菜单下参数对话框中结构标签下的转换到 3D 旋转结构的复选框被选中，在您 3D 优化后将自动转换到 3D 旋转模式。如果没有选中，点击 3D 旋转。然后指向结构的任一原子或键拖拽到工作区上使其旋转到如下结构：



注意：从 **Options** 菜单，选择 **Preferences,**再单击对话窗口的 **Structure** 键，您可以选择背景键断开或者连接,如果在 **Bonds Intersections** 中的 **Enable** 被选中，则背景键断开,否则,背景键连接。

您可以改变交叉键的位置,具体做法是利用 **Tools** 菜单键下的 **Bring Bond to Front**(CTRL+F) 和 **Send Bond to Back** (CTRL+K). 您也可以通过激活 **Change Position**  键后,单击即将改变位置的化学键,同时按住 SHIFT 键将后面的键移到前面来。

用以上技术尝试绘制如下结构：



Bicyclo[2.2.1]heptane

Bicyclo[4.2.1]nonane

7. 在常用工具栏点击保存再点击新页面。

5.5.2 创建三蝶烯结构

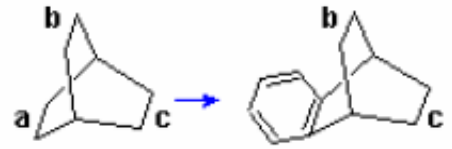
本节基于我们官方网站的影片或\\MOVIEDS 文件夹下文件：triptyc.exe.



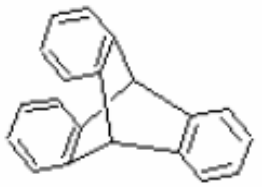
确定您在结构模式下进行以下操作。

1. 使用上节的技巧画出双[2，2，2]环己烷结构，或者使用模型窗口中相应的模型或者在上面的模板中选择双环

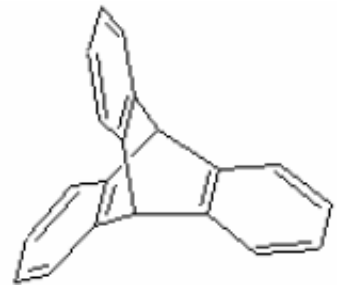
中的合适结构。点击粘贴到工作区。
2. 从参考工具栏或原子基团表中选择苯环。
3. 指向 a 键进行点击以将苯环连接该键：



4. 在 b 和 c 键上重复 2-3 的步骤将获得如下结构：



5. 如果工作区的结构不止一个，使用选择工具中的任意一个来选中您要进行 3D 优化的结构。
6. 点击 3D 优化将得到所绘结构的 3D 样式：



7. 如果转换到 3D 旋转模式的复选框被选中（结构标签下），3D 优化后程序将自动转换到 3D 旋转模式，如果没有选中，点击 3D 旋转。指向结构中的任一原子或键拖拽到工作区即可。
8. 从工具菜单栏，选择 Show Aromaticity 来显示芳香环：



9. 在常用工具栏点击保存再点击新页面。

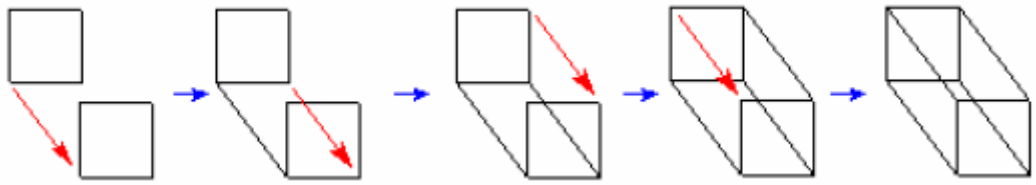
5.5.3 创建立方烷结构

本节基于我们官方网站的影片或\\MOVIEDS 文件夹下文件：Pr_cub.exe.



确保您在结构模式下进行以下操作。

1. 由基团表中选择环丁烷，在工作区点击两次，生成上下两个正方形。
2. 选择正常画图模式，通过从一个原子到另一个原子拖动鼠标，连接环丁烷分子的角：



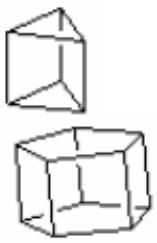
3. 点击 3D 优化键，得到所要的 3D 模型。
4. 选择 3D 旋转(3D Rotation)键。
5. 将鼠标放置在任意原子或键上，在工作区拖动鼠标旋转结构，直到它成为您需要的结构。



注意：从 **Options** 菜单，选择 **Preferences,**再单击对话窗口的 **Structure** 键，您可以选择交叉键中的后面的键断开或者连接,如果在 **Bonds Intersections** 中的 **Enable** 被选中，则后面的键断开,否则,后面的键连接。

您可以改变交叉键的位置,具体做法是利用 **Tools** 菜单键下的 **Bring Bond to Front**(CTRL+F) 和 **Send Bond to Back** (CTRL+K). 您也可以通过激活 **Change Position** 键后,单击即将改变位置的化学键,同时按住 SHIFT 键将后面的键移到前面来。

- 利用以上技术，试着画出以下结构：



Prismane

Hexacyclo[4.2.0.$0^{2,5}$.$0^{3,9}$.$0^{4,8}$.$0^{7,10}$]decane

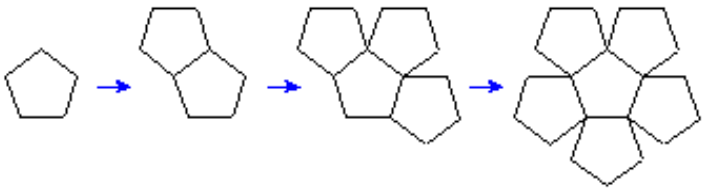
6. 在常用工具栏点击保存再点击新页面。

5.5.4 创建C_{20}球碳分子

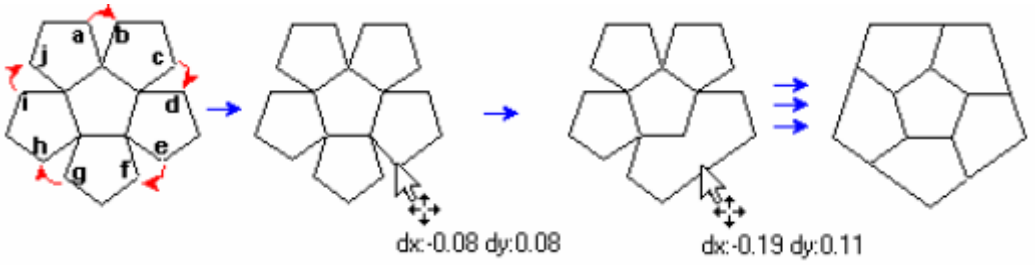
本节基于我们官方网站的影片或\\MOVIEDS 文件夹下文件：fuller.exe.

确保您在结构模式下进行以下操作。

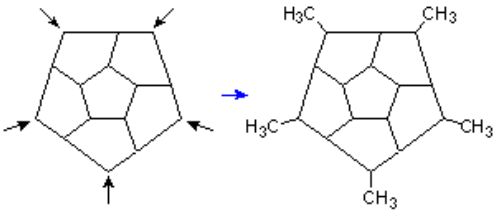
1. 在原子团表中选择环戊烷，在工作区点击，放置该结构。
2. 在环的每个边点击，形成另外五个环：



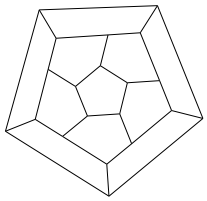
3. 点击鼠标右键，选择选择/移动工具。
4. 通过拖动鼠标将原子 **a,c,e,g,i** 移动到原子 **b,d,f,h,j** 形成如下结构。



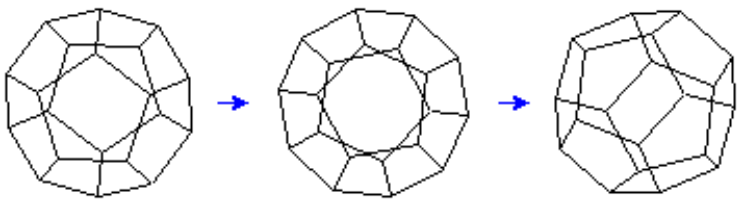
5. 在左边原子工具栏中选取碳原子，点击箭头所指的点：



6. 通过拖动鼠标用单键连接甲烷基团，得到下面的结构：



7. 点击 3D 优化键（3D Optimization)，得到所要求的 3D 模型。
8. 选定 3D 旋转工具(3D Rotation) ，将鼠标放置在任意原子或键上，在工作区拖动鼠标旋转结构，直到它成为您所期望的结构。

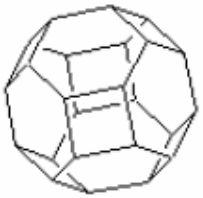


注意：从 **Options** 菜单，选择 **Preferences,**再单击对话窗口的

Structure 键，您可以选择交叉键中的后面的键断开或者连接,如果在 **Bonds Intersections** 中的 **Enable** 被选中，则后面的键断开,否则,后面的键连接。

您可以改变交叉键的位置,具体做法是利用 **Tools** 菜单键下的 **Bring Bond to Front**(CTRL+F) 和 **Send Bond to Back** (CTRL+K). 您也可以通过激活 **Change Position**  键后,单击即将改变位置的化学键,同时按住 SHIFT 键将后面的键移到前面来。

使用以上技巧尝试绘制以下结构：

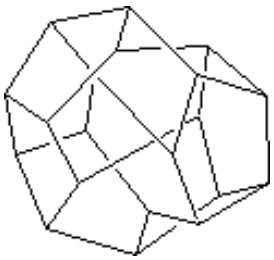


[4,6]Fullerene-C_{24}



[5,6]Fullerene-C_{24}

提示： 如果优化后的结构是如下结构,而不是十二面体结构(fullerene),



那么说明优化过程的结果是一个不寻常的值.这种情况下。您可以点击重做 **(Undo)**键，回到优化以前的结构，然后点击清洁键 **(Clean Structure),**或者点击 选择/移动键（**Select/Move**）,移动一些原子,重新进行优化。

9. 在常用工具栏点击保存再点击新页面。

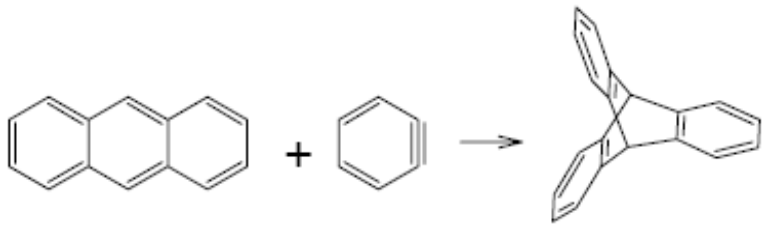
5.6 绘制、标记和映射化学反应

本节将说明如何绘制化学反应和复杂化学图案的手动或自动绘制。

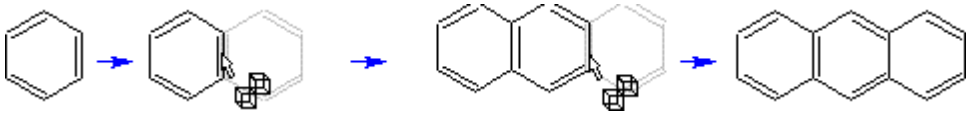
5.6.1 绘制化学反应

本节基于我们官方网站的影片或\\MOVIEDS 文件夹下文件：reaction.exe.

本节我们来绘制如下反映图形：

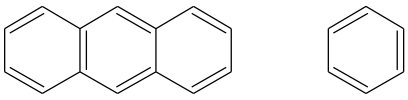


1. 从原子团表中**Table of Radicals** 选择苯环 **Benzene**。
2. 按键盘上的 TAB 键,将悬在光标上的苯环翻转,然后在空白区点击,得到苯环,然后在苯环上的相应的位置点击,得到以下结构：

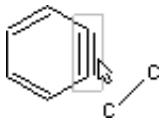


注意：:当将几个结构画在一起时，可以将光标直接点在即将连接的键上。

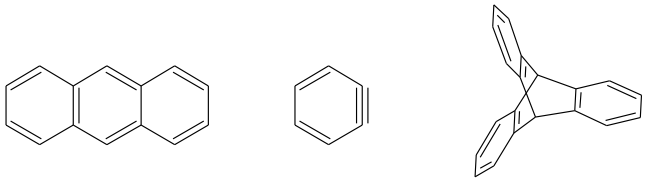
3. 按住 键盘上的 TAB 键,将悬在光标上的苯环阴影翻转,然后点击空白处,右击鼠标,悬在鼠标上的阴影将消失：



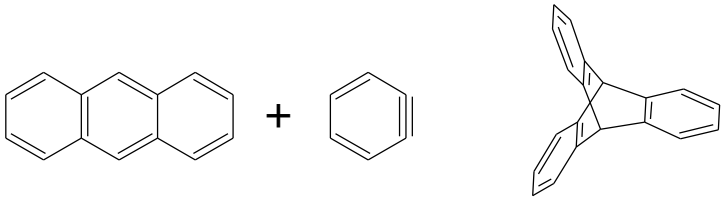
4. 点击常规画图工具(**Draw Normal**),然后在一个独立的苯环的双键上点击,得到三键：



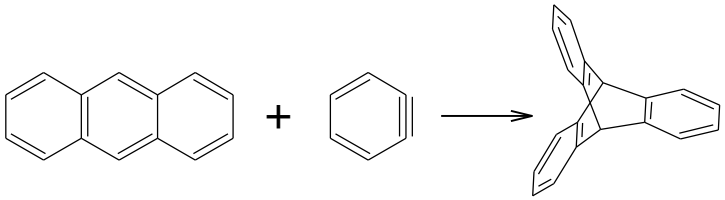
5. 按照 Section 6.4.2 节中所讲的画出三将军结构如下：



6. 从结构工具栏中,选择 **Reaction Plus** 键，在以下两个结构之间点击,得到加号：



7. 点击反应箭头键(**Reaction Arrow)** ，在反应物和生成物之间点击并拖动鼠标,得到箭头：



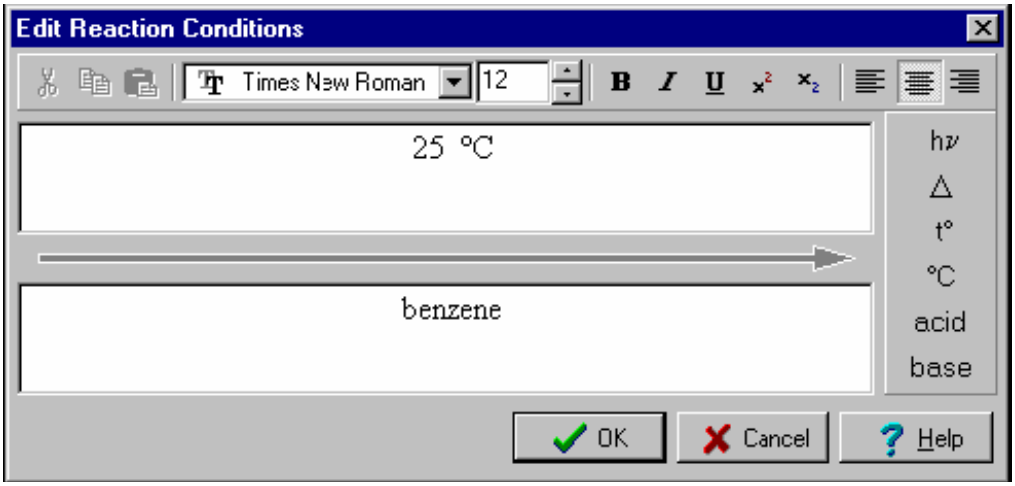
注意： 点击 **Reaction Arrow** 键右下脚的三角,可以得到一系列的不同形状的箭头。一些箭头被视为图形模式的物体,所以不能正确地输出至其他文件。

8. 如果要移动加号或者箭头,可以点击选择/移动键 **Select/Move** 工具，然后将光标指在要移动的物体上,拖动鼠标。

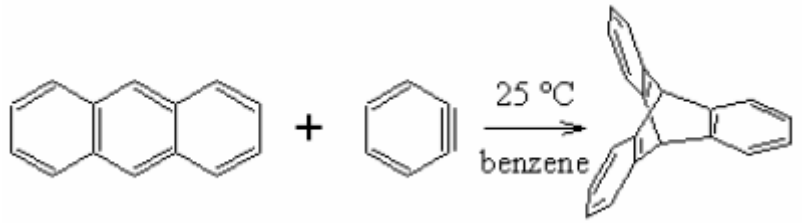
5.6.2 标记化学反应

本节我们学习如何在化学反应图形中添加实验条件：

1. 在结构工具栏，点击反应箭头标签。
2. 点击反应箭头调出编辑反应条件对话框。
3. 在编辑反应条件对话框的上部方格中输入 25 然后在对话框的右边点击℃。
4. 在下面的方格中输入 benzene 苯。



5. 点击 OK 关闭对话框。现在反应如下：



5.6.3 映射化学反应

此工具能够映射已有手工或自动绘制的反应。选择不同的颜色来区分自动生成和手动插入。

1. 从选项菜单选择参数调出参数设置对话框。
2. 转到反应 Reaction 标签，将手绘色 Manual Mapping Color 选为红色：



3. 转换到结构 Structure 标签，将自动/手动编号色 Auto/Manual Numbering Color 设置为蓝色：



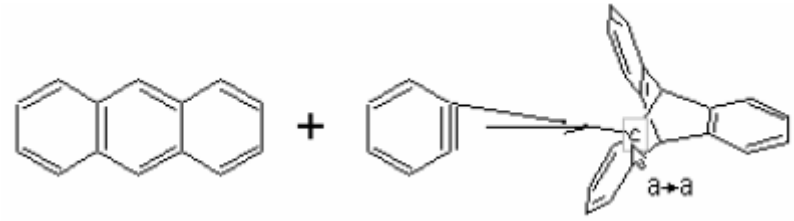
4. 点击 OK，现在我们可以照样子开始绘制了。

5. 在结构工具栏，点击 Atom-Atom Map 来显示映射工具面板并选择映射方式：



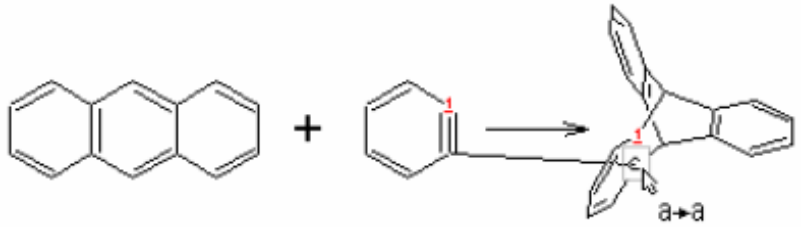
注意：注意到手动映射模式已被自动打开（相应的按钮被激活）。

6. 指向反应物的原子拖拽到生成物上的相应原子。



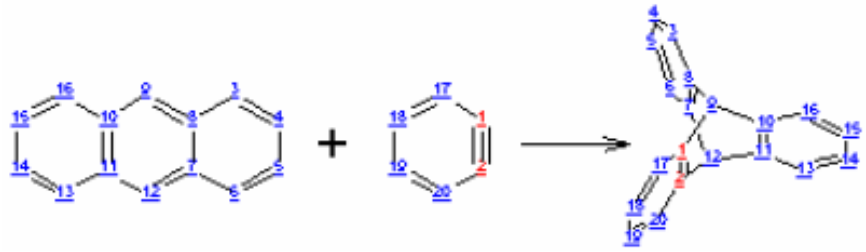
当您松开鼠标，**1** 在反应图中手动映射的原子上出现了。

7. 指向下以原子再次拖拽到产物中相应原子：



当您松开鼠标，**2** 出现在临近的反应物原子及对应的生成物原子上。

8. 现在，在自动映射面板，点击自动映射。所有其它原子都被自动赋值了。

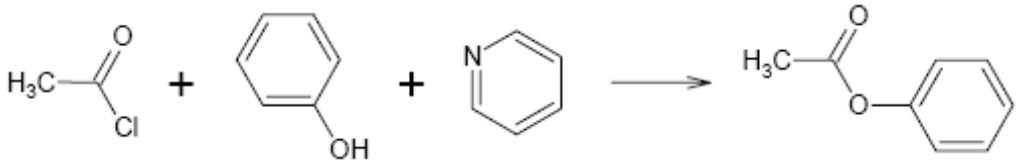


注意：被映射的原子仅在映射工具面板被调出的时候可见。

9. 在常用工具栏点击保存再点击新页面。

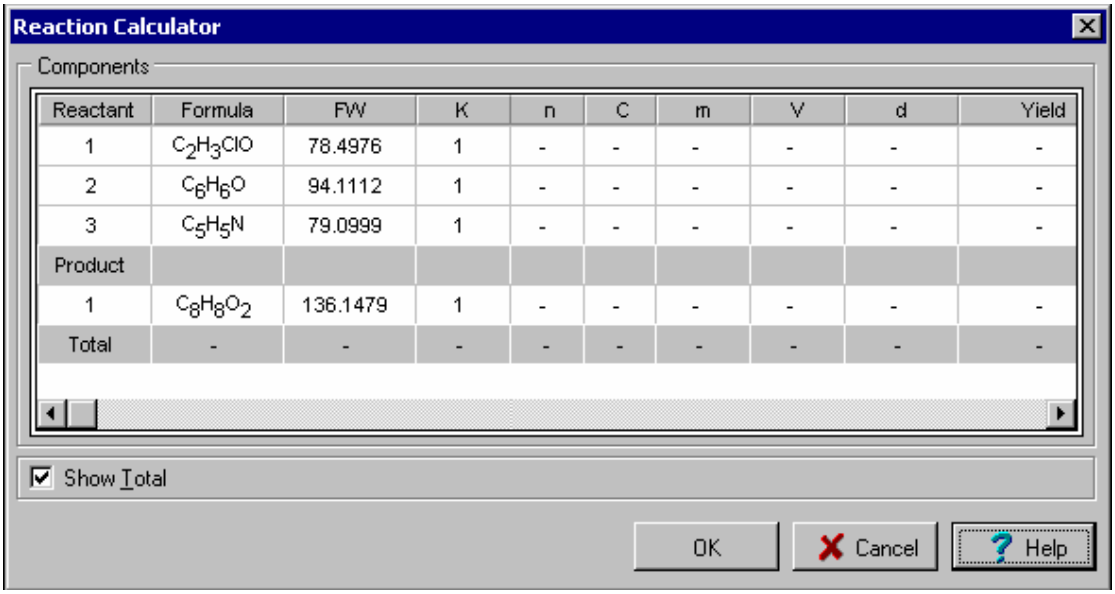
5.6.4 计算化学反应数据——仅限商业版！

1. 根据所学知识（参见 5.6.1）绘制如下反应：



Reactant	Formula	FW	K	n	C	m	V	d	Yield
1	C_2H_3ClO	78.4976	1	1.1 mol	-	86.3 g	78.5 mL	1.1 g/mL	-
2	C_6H_6O	94.1112	1	-	-	-	-	-	-
3	C_5H_5N	79.0999	1	-	-	-	-	-	-
Product									
1	$C_8H_8O_2$	136.1479	1	-	-	-	-	-	-

2. 在结构工具栏中点击反应计算器，然后点击反应箭头。反应计算器的对话框将出现：



3. 在乙酰氯对应行双击物质的量单元格（n）将其选中。
4. 输入 0.11mol，然后回车。
5. 要计算体积，您需先输入化合物的密度。双击相应密度单元格（d），输入 11g/ml。回车以后计算的体积在体积单元格（V）中出现。
6. 类似的，在下面成分表格中填入相应的值：苯酚——0.1mol（n），嘧啶——0.11mol（n）0.983g/ml(d)。所有其它数据将被自动计算出。
7. 双击相应产物质量单元格（m）并输入 12.9g。
8. 按下回车键。产量（Yield）将会被计算出来：

React...	Formula	FW	K	n	C	m	V	d	Yield
1	C_2H_3ClO	78.4976	1	0.11 mol	-	8.63 g	7.85 mL	1.1 g/mL	-
2	C_6H_6O	94.1112	1	0.1 mol	-	9.41 g	-	-	Based on
3	C_5H_5N	79.0999	1	0.11 mol	-	8.7 g	8.85 mL	0.983 g/m	-
Product									
1	$C_8H_8O_2$	136.1479	1	0.0947 mol	-	12.9 g	-	-	94.7 %
Total	-	-	-	0.32 mol	-	26.7 g	16.7 mL	-	-

9. 点击 Ok 关闭反应计算器对话框，然后将填写了的成分表格粘贴到 ChemSketch 页面。

6. 高级绘制：模型

6.1 目标

本章讲解如何利用模型进行画图。主要内容如下:

- 模型功能如何能帮助您画图;
- 如何利用 **Instant Template** 功能画含有多个相同功能团的结构;
- 化学基团表(Table of Radicals)的更多用途;
- 如何利用模型画 DNA 分子和复杂的生物分子;
- 如何自创模型。

6.2 概述

ACD/ChemSketch 包括 3 种结构模型来源：

- 化学基团表(Table of Radicals) 
- 模型窗口(Template Window) 
- 插入模型工具(Instant Template tool) 

当您指定化学基团表中的任意模型的连接点后，模型窗口和插入模型工具允许您通过点击而指定连接的原子或键。无论模型来自何处，连接的原理是一样的。将模型连接到结构上有以下几种方法：

- 通过连接结构与模型的键： 将鼠标的指针指向特定的化学键，使结构的化学键和模型在光标上的影子结合，再点击鼠标。
- 通过模型接近结构：将光标指向结构中相应的原子，产生连接键

后，点击鼠标。

- 通过模型和结构之间的螺旋线连接：将鼠标指向要连接的原子，按下 SHIFT 键，点击鼠标。

注意：可以通过点击 TAB 键使悬在光标上的模型影子翻转。

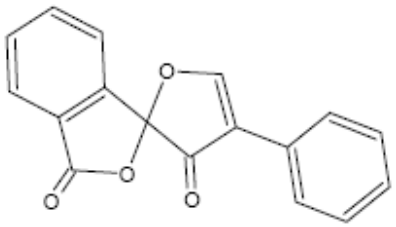
6.3 原子团表

原子基团表是用以绘制化学结构的一系列化学原子团。在一些例子中，它们的名称和所写将帮助您快速的利用简洁的方式查找化学原子基团的。

6.3.1 创建荧光胺结构

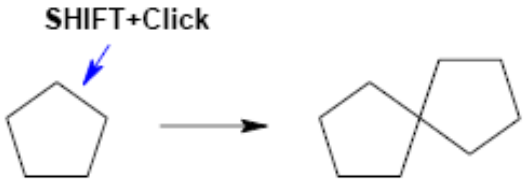
该部分可由公司网站电影区（MOVES）中下载，文件名为：fluor.exe.

我们将利用从原子基团表中的模板来绘制如下结构

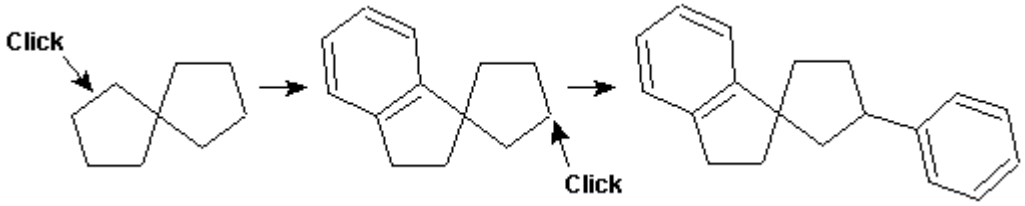


确保您在结构模式下进行以下操作。

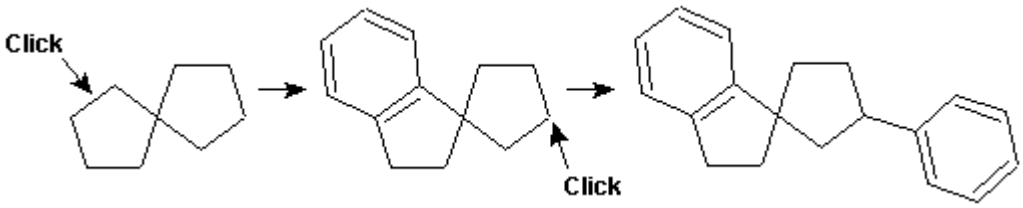
1. 在常用工具栏上点击新页面来打开一个空白页面。
2. 从参考工具栏或原子基团表中选择环戊烷。
3. 点击 ChemSketch 的工作区将环粘贴进来。
4. 按下 SHIFT 键，点击指定的原子，以螺旋方式连接第二个环戊烷：



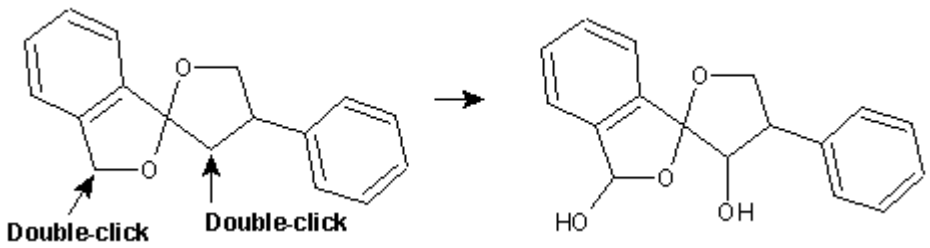
5. 由化学基团表中选择苯(Benzene) ，首先点击指定的键连接苯环，再点击指定的原子，连接苯环：



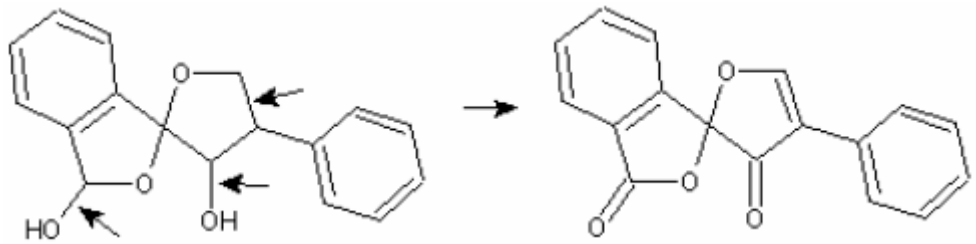
6. 在左侧原子工具表中选定氧键(注意：此时通用画图工具自动激活)，点击指定的原子，用氧取代：



7. 点击鼠标右键，选择连续画图工具，双击指定的原子，连接 OH 集团：



8. 点击指定的单键，使之变为双键：



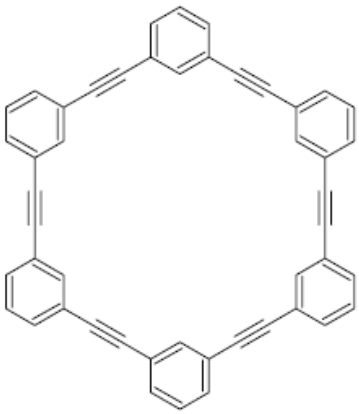
9. 在常用工具栏，点击保存文件，然后点击新建页面。

6.4 快速模型工具

在 ACD/ChemSketch 中一个有用的工具就是快速模型工具，它可以帮助您节省时间，更快地画出图象。您可以认为它是“粘贴“命令。

6.4.1 创建环状体聚物结构

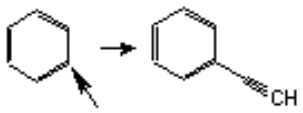
该部分可由公司网站电影区（MOVES）中下载，文件名为：fluor.exe.



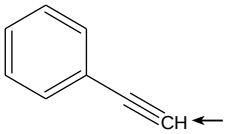
确保您在结构模式下进行以下操作。

1. 从化学基团表中选择苯环，在工作区的上中部点击鼠标，放置苯结构。

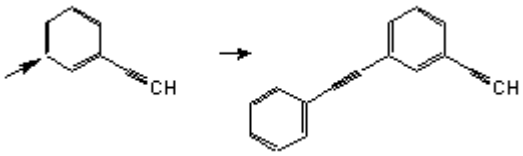
2. 从化学基团表中选择乙炔(Ethynyl) ，点击箭头所指的原子，将其连接在苯环上：



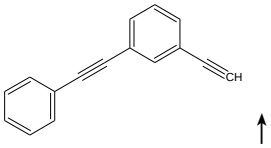
3. 选择快速模型工具，点击箭头所指原子，创建一个快速模型：



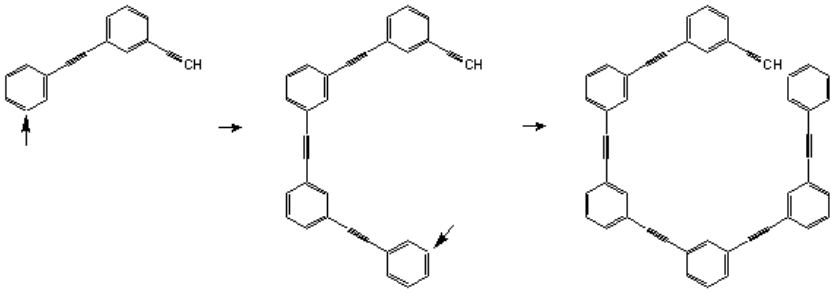
4. 点击箭头所指原子，接上模型：



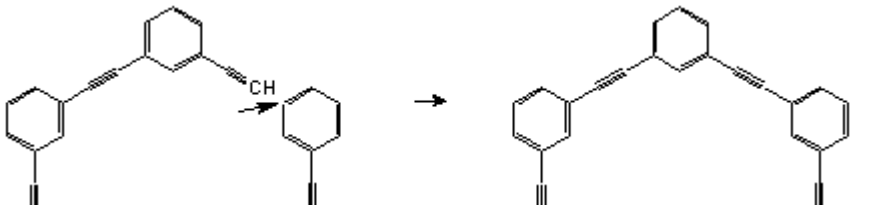
5. 再次选择快速模型工具，将整个图象创建成模型：



6. 像图示的那样，点击指定原子，连接成如图所示的模型。完成后，点击鼠标右键将模型影子隐藏：



7. 选择通用画图工具，点击指定的原子，完成环：



8. 在常用工具栏，点击保存文件，然后点击新建页面。

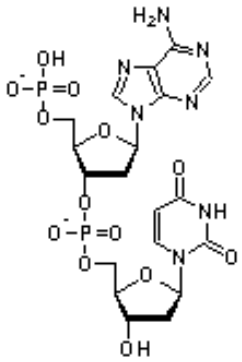
6.5 模型窗口

模板窗口是 ChemSketch 三大模板中最经典的因为它可以让您对以后要拷贝的结构或图形进行组织和存储。

👍👍该部分可由公司网站电影区（MOVES）中下载，文件名为：templ_st.exe.

6.5.1 创建DNA分子片断

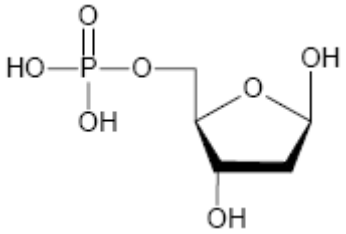
👍👍该部分可由公司网站电影区（MOVES）中下载，文件名为：dna_st.exe.



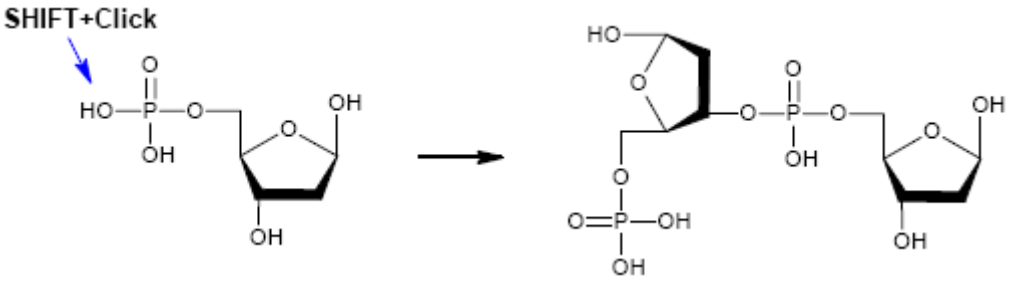
6.5.1.1 绘制去氧核糖-5-磷酸盐链的图象

1. 打开模型窗口，由DNA/RNA 表

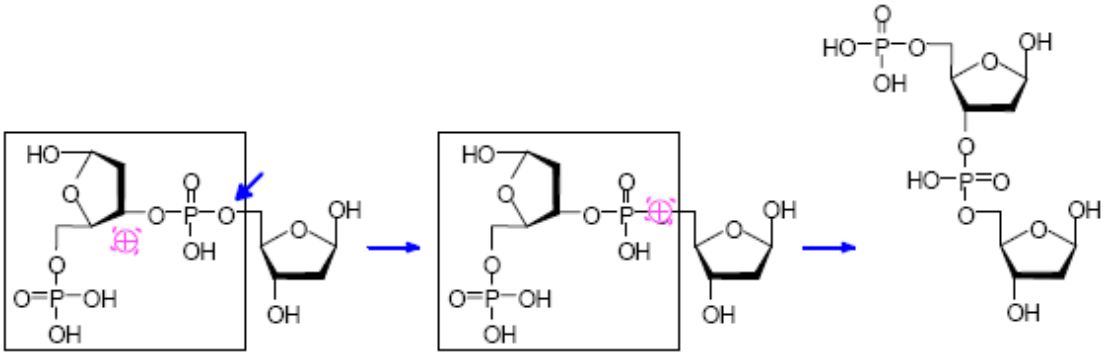
中通过点击原子选择2-去氧核糖-5-磷酸盐((2-Deoxyriboso-5-phosphate)链状结构)：



2. 点击工作区得到选定的模型。
3. 按下SHIFT键，移动鼠标到指定原子，点击以连接下一个去氧核糖-5-磷酸盐图象：

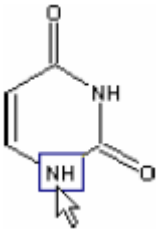


4. 选定选择/旋转/调整大小工具(Select/Rotate/Re-size) 。
5. 通过拖动矩形选择框选定结构中指定部分，将动作中心拖到指定的氧原子上。按下SHIFT键，拖动结构中选定部分顺时针旋转90度：

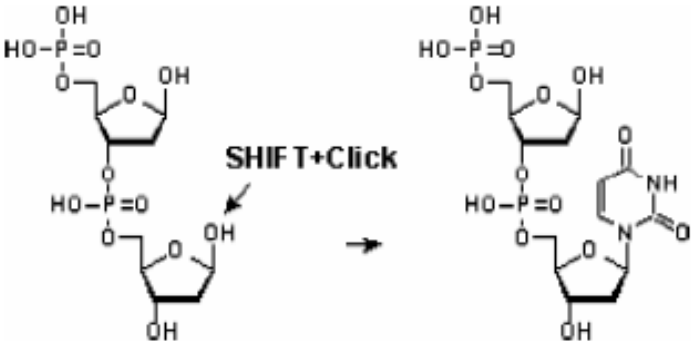


6.5.1.2 添加碱基

1. 打开模型窗口，由DNA/RNA模型表中选择您需要的碱基：

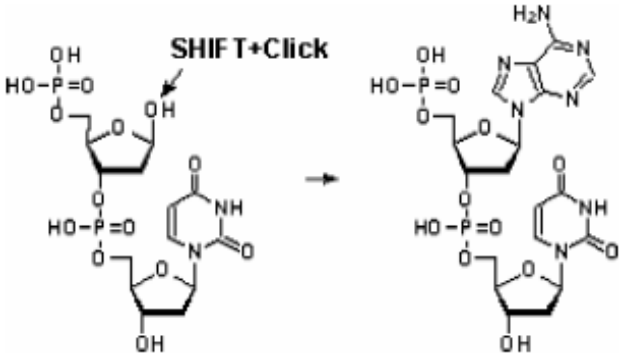


2. 将鼠标移动到指定的原子上，按下SHIFT键，点击鼠标：



提示：可以点击TAB键将悬在游标上的模型影子翻转。

3. 重复步骤1和2给其他核甘酸添加碱基：



试着画出您的任意长度的DNA或RNA图象。

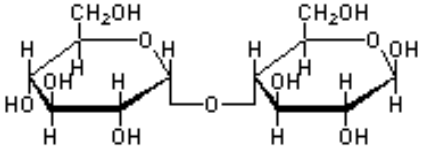
4. 在常用工具栏点击保存文件，然后点击关闭文件。

6.6 绘制复杂的生物化学结构

这里利用 ChemSketch 的不同工具，画复杂的生物化学结构。

6.6.1 创建β -麦芽糖酶结构

该部分可由公司网站电影区（MOVES）中下载，文件名为：maltose.exe.

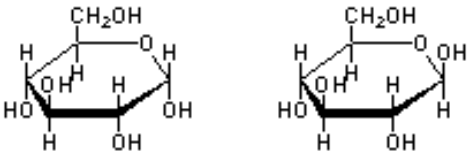


1. 点击打开模型窗口。选择 Sugars:alpha-D-Pyr

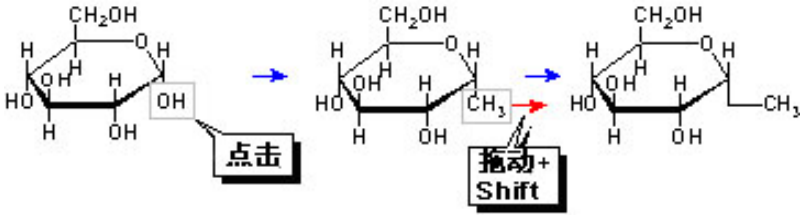
Sugars: alfa-D-Pyr 表，确认您看到的是霍夫曼规则

1(4) Haworth Formulae 页，如果不是，点击右边箭头，直到找到为止。

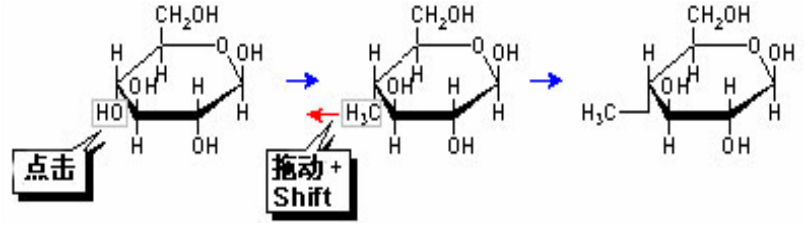
2. 点击 α-D-Glucopyranose 糖，在工作区点击得到结构。
3. 重复 1-2 步骤，选择 D-糖表(beta-D-pyranose) Sugars: beta-D-Pyr，选择 β-D-Glucopyranose..
4. 在 ChemSketch 窗口中，点击将其放置在第一个结构的右边：



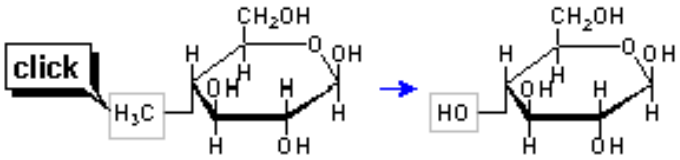
5. 选择 ChemSketch 碳原子键 C，在 α-D-Glucopyranose 中点击指定的原子，用 CH_3 集团取代它，按下 SHIFT 键，将 CH_3 集团拖动到右边，以形成 90 度键：



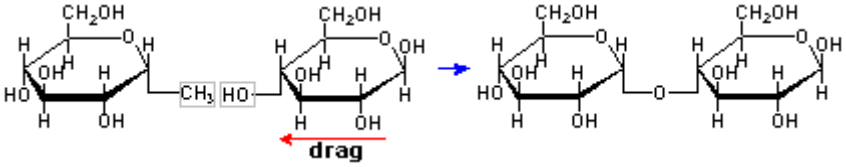
6. 对 β-d-glucopyranose 结构重复步骤 5，得到如下结构：



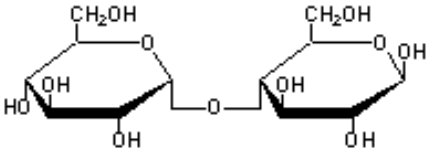
7. 选择 O 原子 O，点击 β-D-Glucopyranose 结构中如下所示的原子（Click 箭头所指的 CH_3),用 OH 替换 CH_3：



8. 选定选择/移动(Select/Move) 键，点击工作区附近，选定结构。将鼠标放在结构的任意原子或键上，向左拖动直到 OH 和 CH_3 集团连接成键：



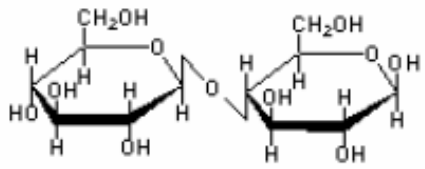
9. 通过选择工具菜单中的去氢原子功能(Remove Hydrogens)，将选定结构中的氢原子隐藏起来：



注意：尽管与中心氧原子连接的碳原子被隐藏起来，但它是存在的。如果在您的任务中，它的化学意义很重要，您可以将这些原子去掉. 激活选择/移动工具（Select/Move)，双击需要隐藏的原子。当选项菜单出现后，选择原子标签，选择元素符号键(Atom Symbol) ，右下拉菜单中选择 Empty 

，点击应用(Apply)。同样的，您还可以使用 Pseudo Atom 工具来实现。

- 使用以上技巧绘制如下结构：



β-Cellobiose

10. 在常用工具栏点击保存，然后点击新页面。

6.7 定义用户模型

将一个文件指定为模型是很容易的。我们经常在网站提供可下载的模型。这是一个模板交流页面，如果有您觉得有对 ACD/ChemSketch 有用的结构或图形您可以考虑将其共享。

要将一个 ChemSketch 文件保存为模型文件，我们推荐您将其保存在模型文件夹中。按如下操作即可：

1. 将您的当前文件保存为SK2形式，或在ChemSketch中打开SK2文件。如：C:\EXAMPLES\ACD\MALTOSE.SK2.
2. 由模型菜单中选择保存用户模型命令。
3. 在保存用户模型对话框中键入您模型的名字，如“ALKALOIDS”，并注意文件保存的路径，再点击OK。

注意：您可以为您的文件键入任意名字(例如：对于 b_d_fur.sk2 文件，Sugare:beta-D-Furanose 这样的名字可能更好一些。)

一旦您的文件被保存为用户模型，它的名字被自动加到模型管理器中和模型窗口的模型清单中。

注意：您可以从任何文件创建模型文件，即使它是关闭的也可以。打开模型管理器对话框(模型菜单中)，点击新创建（New）键，找到您需要的文件，为其指定名字即可。

4. 关闭打开的文件。

6.7.1 模型窗口组织者

模型窗口组织者(**Template Window Organizer)** 对于管理模型文

件是极为方便的,无论是那些含有软件包的文件,还是客户自定义文件,都很方便。将您的 ChemSketch 文件存为模型只需要几分钟的时间.

模型与普通的*.SK2 文件的区别是:模型文件在模型窗口组织者中(Template Window Organizer)被存为模型,它有以下的优点:

- 您的分散在各处的 *.sk2 文件将存在一个地方,既: Template Window Organizer.
- 模型名可以是一个比文件名更具体的名字,所以比普通文件名更能反应文件内容,使用户更容易迅速找到文件。
- 您可以通过在模型窗口阅览文件内容而迅速找到文件。
- 您可以在文件名单中点击打开文件(**Open Document)**命令将文件打开。
- 模型窗口最多可以存储 15 个模型文件。

您可以利用用户模型完成以下任务:

⇒修改模型：从 **Template Organizer** 选择 Template List,然后选择所需的文件模型,点击打开文件(**Open Document)**键**,** 修改文件,然后重新保存文件模型。

⇒您无需打开整个文件而将文件模型中的任何一部分拷贝,只要在模型名单(Template List) 找到您需要的文件模型,点击,然后在工作区点击得到文件或者图形。

6.7.2 *.cfg模板文件

在 ACD/ChemSketch 中管理模板的关键是 TEMPLATE.CFG 文件。该文件使 ACD/ChemSketch 能够完全识别.SK2 是优于用户文件

的模板文件。它可使用任何文字编辑器来阅读，尽管您可能不需进行该操作。模板窗口通过 TEMPLATE.CFG 文件来来识别作为模板显示的文件。如果某.SK2 文件没有在模板窗口中显示，则当您把.SK2 文件作为正常的 ACD/ChemSketch 文件打开点击保存以后它将被添加到 TEMPLATE.CFG 文件。

如果 TEMPLATE.CFG 文件被移动或丢失，模板窗口将无法显示任何模板。如果 TEMPLATE.CFG 文件被找到（通过 Windows 资源管理器或系统的“查找文件”）可将其保存在默认目录或用户目录中。如果找不到，您可以通过重新安装 ACD/ChemSketch 或按上面的方法逐个添加来重新获取。

7. 计算宏观性质

7.1 概述

除了绘图功能，ACD/ChemSketch 能够为您的结构提供许多性质的预算。

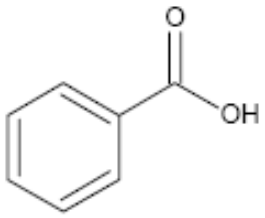
本章将介绍计算这些性质的简单方法。

7.2 计算宏观性质

7.2.1 菜单命令

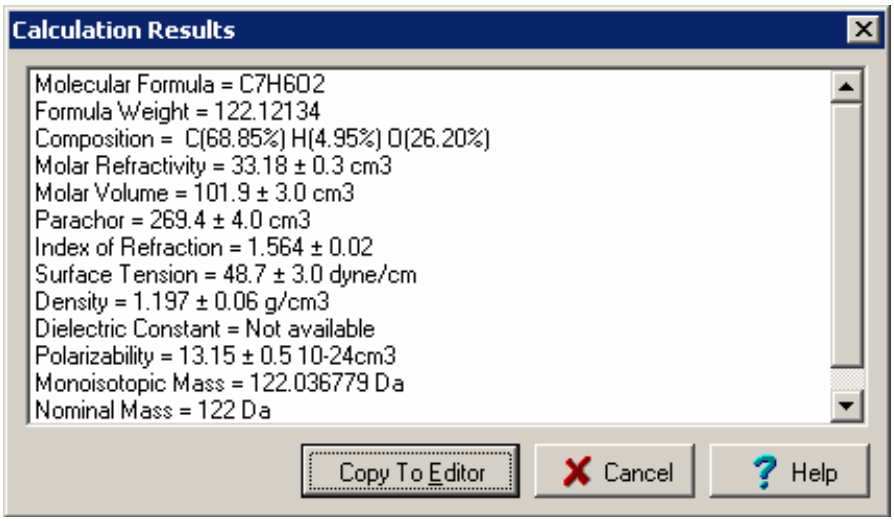
按照以下步骤计算所有可用分子性质:

1. 在结构模式下，画出一个结构，例如苯甲酸：



2. 从工具(Tools)菜单中选择计算(Calculate)，再选择所有性质(**All Properties)** 或者某一个性质,对其性质进行计算。

3. 选定以后，计算的性质将显示在计算结果对话框中 (Calculation Result) ：



4. 通过点击”复制到编辑器”键(Copy to Editor)，可以将文本内容粘贴到工作区。你可以转换到画图模式下进行必要的文本编辑。

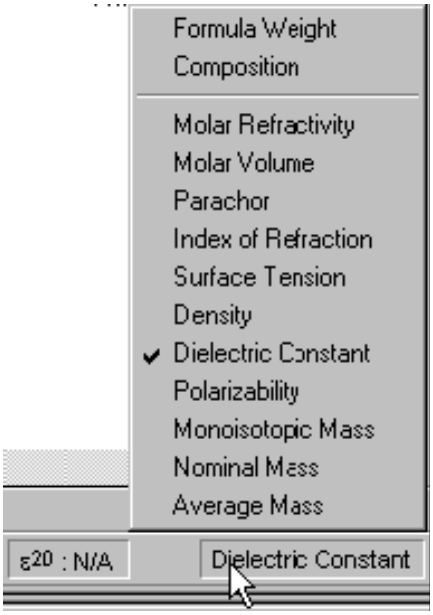
注意：在工具菜单指向计算，然后选选择计算性质来定义需要计算的一系列性质。在出现的对话框中，标记性质后点击OK。如果您现在选择选择性质仅会计算被选中的性质。

5. 切换回结构模式然后保存文件为CALC_PROP.SK2.

7.2.2 状态栏自动显示

也可以直接在工作区的状态栏中观察宏观性质。如果没有结构被选中，所有显示的结构的性质将被计算；如果没有任何结构，状态栏的该区域将不可以。

只有点击最右边的状态对话框，并选择相应的性质即可。

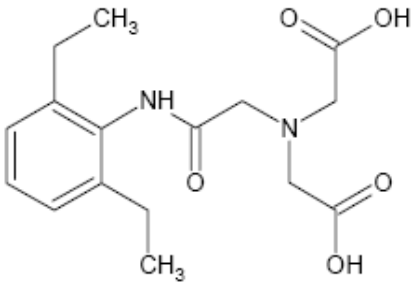


默认值是分子量。图中显示的是介电常数。

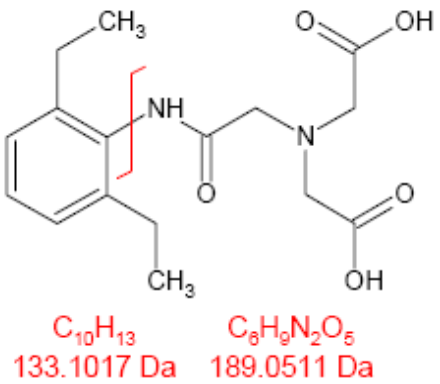
7.3 计算单一同位素质量

本节我们将为一个结构片断计算单一同位素质量：

1. 在常用工具栏，点击新页面打开一个新的空白页。
2. 绘制如下一个结构：



3. 选择并切断一个（非环的）键。
4. 从工具菜单选择 MassSpec Scissors 或者在结构工具栏点击相应按钮切开的两个片断的单一同位素质量在其下方出现在工作区：



注意：你可以在画图模式下改变分割线的样式：选择线后双击，在对象面板改变样式即可。

您还可以通过计算宏观性质选项（参见 7.2）来显示质量。

8. 特殊功能键

8.1 目标

ACD/ChemSketch 是多功能输入和编辑分子结构的有效工具。因此,几个其他 ACD/Labs 模块作为单独的键出现在 ChemSketch 的界面中。本章叙述 ChemSketch 界面中三个特殊的附加模型。ACD/Tautomers(同分异构体)和 ACD/Name 在 ACD/ChemSketch 的商业版和免费版中均有，ACD/(字典)仅在商业版中提供。

8.2 同分异构体

有些化合物在溶液中有两种或者更多的结构形式,这些结构形式在平衡时相互转换。大大多数情况下,同分异构体是由电子转移产生的。ACD/同分异构体软件能产生所画有机结构的最可能的同分异构体。这个功能可以通过点击工具菜单**(Tools)** 查找同分异构体命令**(Check Tautomeric Form)**或者点击键获得。

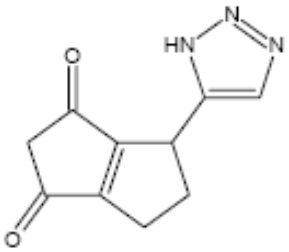
对于含有两个或者多个双键或者三键与氧,氮,硫或者其他元素原子相共厄或者相连接的有机分子结构,可能会有其它的同分异构体,但是您要很仔细地考虑它们的可能性。ACD/同分异构体功能所提供的同分异构体是数学计算的结果,可能并不是最正确的结构形式。您可以参考其他信息后作出决定。

ACD/同分异构体不能对以下结构进行同分异构体预测:

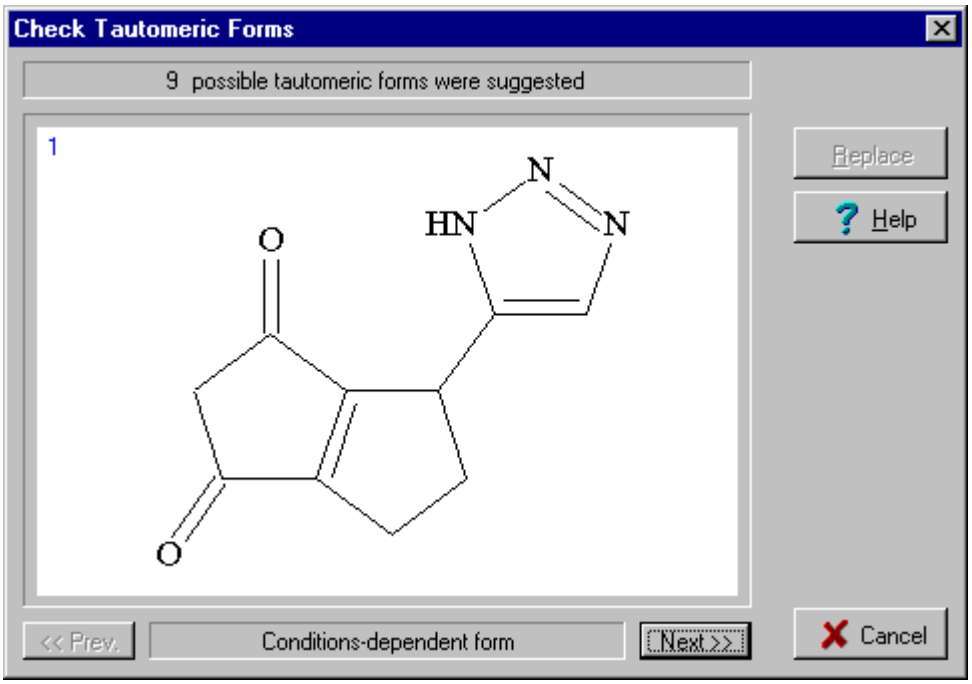
- 含有金属原子的结构；
- 含有带电荷原子的结构,(除与 N (+)(IV)和 O(-)相连的非离子衍生物；
- 在非典型键中含有除碳以外的其他元素；
- 含有配位键的结构；
- 含有超过 255 个原子的结构。

请看下面的例子:

1. 用以上讲的方法画以下结构：



2. 选择结构 (用选择/移动 **Select/Move** 工具键), 点击查看同分异构体(**Check Tautomeric Forms**)键,得到如下对话框：

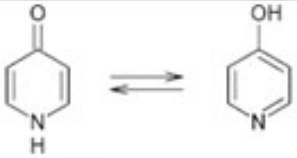
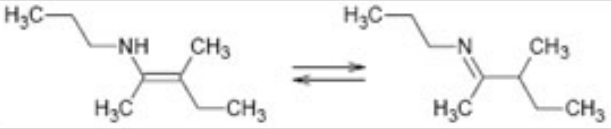


3. 点击Next >>或者 << Prev键,.查看所有的同分异构体。

4. 点击替换(**Replace**)键,用对话框中的结构替换原有的结构。

8.2.1 举例

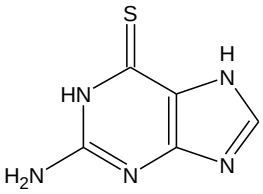
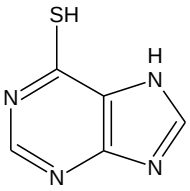
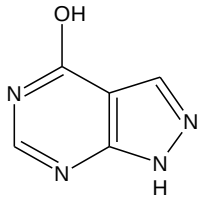
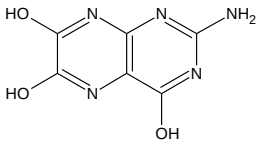
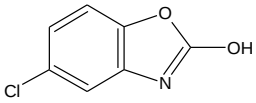
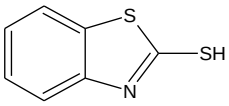
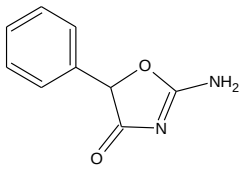
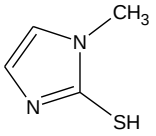
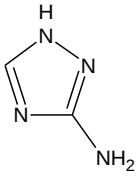
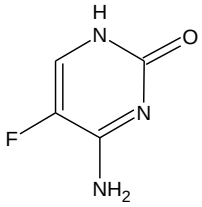
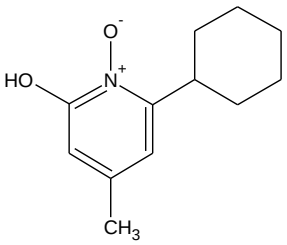
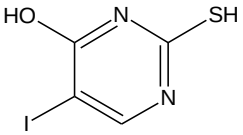
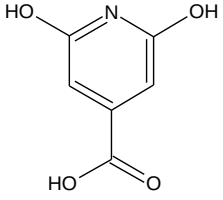
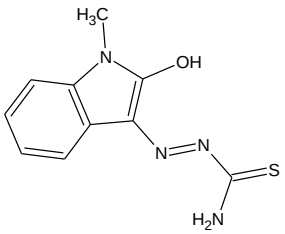
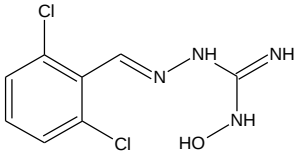
以下是一些您可用上述 Check Tautomeric Forms 进行实验的“经典”样式。

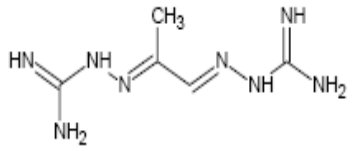
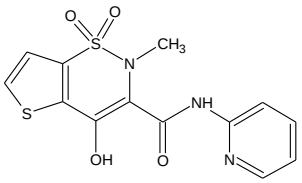
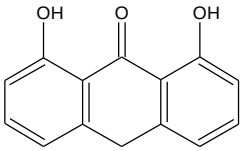
同分异构	示例
酮类 烯醇 同分异构体	
苯酚 酮类 同分异构体	
杂环同分异构体	
硝基 酸类 同分异构体	
亚硝基 肟 同分异构体	
亚胺 烯胺 同分异构体	

8.2.2 化学文献中的错误

人们经常忽视的一个问题是在化学文献中的化学结构和它们的同分异构体是错误的。

以下所有的结构式都是从文献中选取的。许多结构式是错误的或者没有清楚地指出同分异构体。 ACD/同分异构体软件可以帮助您获得正确的同分异构形式。

文献中的错误结构		
		
硫鸟嘌呤(抗肿瘤的药) 4 种可能的结构形式	6-巯(基)嘌呤 (.抗肿瘤的药) 5 种可能的结构形式	别嘌呤醇 (痛风药) 5 种可能的结构形式
		
[医]白带 3 种可能的结构形式	Chlorzoxazone (skeletal muscle relaxant) 2 种可能的结构形式	2-Mercaptobenzothiazole 2 种可能的结构形式
		
Pemoline (CNS 兴奋剂) 2 种可能的结构形式	甲巯基咪唑(抗甲状腺药) 2 种可能的结构形式	氨基三唑(杀草强,一种除草剂) 3 种可能的结构形式
		
Flucytosine (抗真菌的) 2 种可能的结构形式	Ciclopirox (.抗真菌的) 2 种可能的结构形式	Iodothiouracil (甲状腺抑制剂) 2 种可能的结构形式
		
柠檬酸 2 种可能的结构形式	甲吲噻腙(抗滤过性病原体的) 2 种可能的结构形式	Guanoxabenz (.抗高血压的(药物)) 3 种可能的结构形式

		
丙脒腙 (抗肿瘤药) 10 种以上可能结构形式	Tenoxicam (抗链球菌的, 止痛药) 4 种可能的结构形式	地蒽酚 (antipsoriatic) 2 种可能的结构形式

8.3 字典

ACD/字典是由 ACD/ChemSketch 所有商业复件提供的一个附加模板。它广泛用于通过通用名称来查找化学品。

ACD/字典根据化学名称来查找它们的结构。它包含了 125000 个系统和非系统命名的名称及其相应的分子结构。该字典可以通过名称的一部分或全称来进行查找。

有关 ACD/字典的详情，请参见 ACD/Labs 文件夹下的 ACD/字典用户指南：\\DOCS\DICT.PDF.

注意：如果您购买了 ACD/ChemSketch 但是在 ChemSketch 的结构模式下没有看到字典按钮，请确认您在安装时是否正确输入了两个注册码——ACD/ChemSketch(Main)和 ACD/Dictionary(Add-in)。

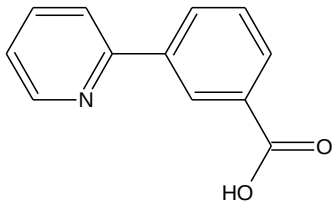
8.4 ACD/免费名称附件

现在您可以在 ChemSketch 界面中通过点击下面的键进入化学名称附件，在常用工具栏上的功能键。

这个功能很容易使用：画出需要命名的化学结构式,点击命名键,化学名称将以文本形式插入屏幕上的工作区。

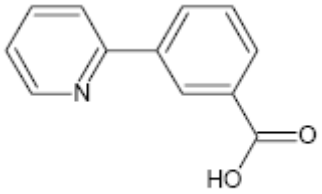
让我们尝试着命名以下结构：

1. 使用 ChemSketch,工具，画出以下结构：



2. 如果工作区有多个结构,选定需要命名的结构即可。

3. 点击从结构获得名称(**Generate Name from Structure)**键,或者从工具菜单**(Tools),**选择从结构获得名称**(Generate Name from Structure),** 化学名称将出现在结构式的下面：



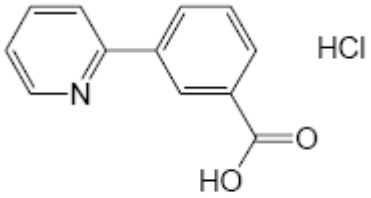
3-(2-pyridinyl)benzoic acid

注意：在 ACD/Name 或任一个 ACD/Labs 数据库程序中的命名参数选项，将影响在 ACD/ChemSketch 中生成的命名结果。

4. 将名称向下拉一些。

5. 选择氯元素键，在结构附近点击一次,得到盐酸结构 HCl。

6. 选择以上所画的两个结构,再次点击从名称获得结构**(Generate Name from Structure)** 键,这一次两个结构式的名称将放置在方框内：



3-(2-pyridinyl)benzoic acid hydrochloride

8.4.1 ACD/免费名称的局限

ACD/免费化学名称附件有以下的局限性:

- 要进行命名的结构式不能超过 50 个原子(包括氢原子在内)
- 普通化学键中只能包括 H,C,N,P,O,S,F,Cl,Br,I,Li,Na,K 元素
- 化学结构不能超过三个周期
- 免费版不允许人为地改变命名的优先性,它用与之相对应的 IUPAC 名称。

注意: 商业版的 ACD/化学名称软件没有这些局限性,详情请参阅:

http://www.acdlabs.com/products/name_lab/iupac/.

9. 结构搜索－－仅限商业版！

9.1 目标

本章我们将学习从 ACD/ChemSketch 环境进行结构查找的一些基础技巧。

本章您将学习到：

- 在您计算机的文件中进行结构搜索；
- 根据您的需要修改搜索选项设置；
- 对通过搜索的文件设置标记；
- 查看搜索结果。

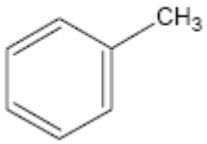
9.2 搜索结构

ACD/Searching for Structure 模块让您对多种文件在不打开它们的情况下就可以对其中的结构进行搜索。当结构被找到，即可置入 ChemSketch 的窗口或其他应用程序。

9.2.1 通过哪些文件搜索

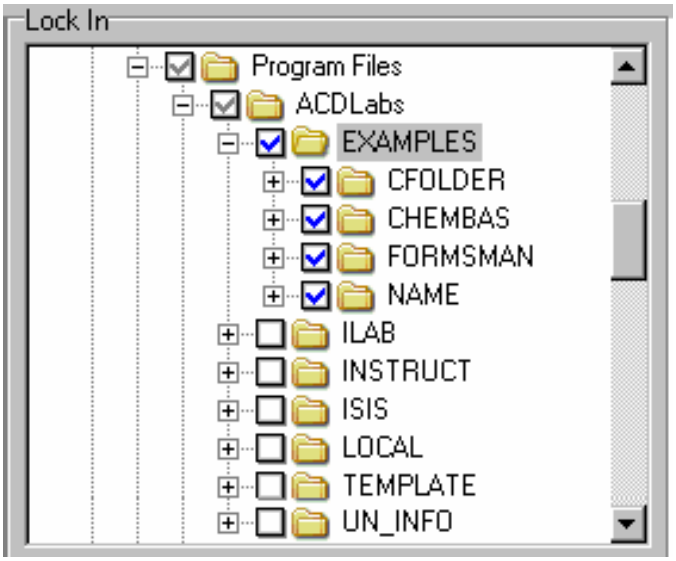
结构搜索工具让您能够通过当前可用格式进行结构的详细搜索。

1. 在常用工具栏，点击新页面切换到新页面。
2. 绘制甲苯或从 ACD/字典中找到它：

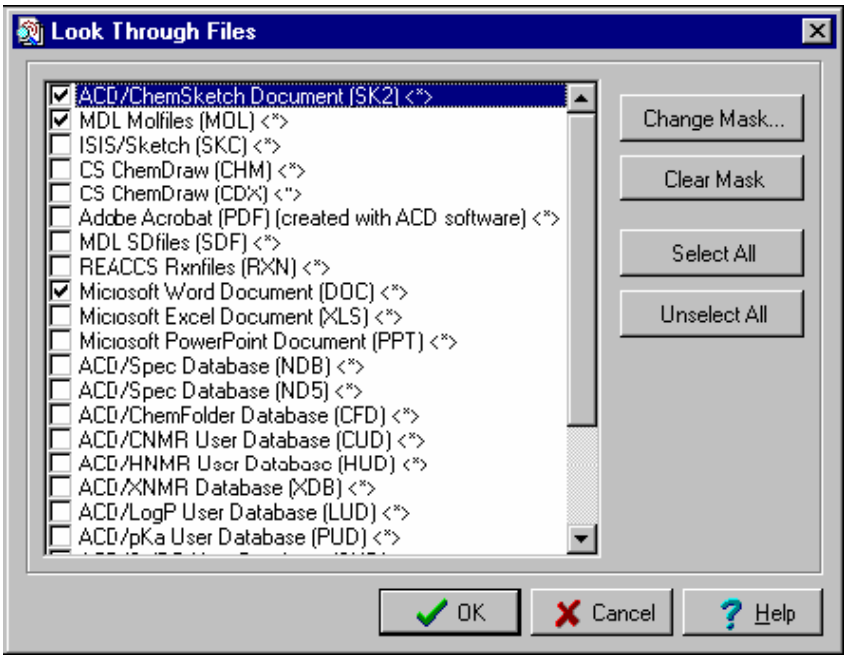


3. 在常用工具栏，点击搜索结构。包含所绘结构的搜索样式框的结构搜索对话框出现了。

4. 在 Look In 框中，选择要搜索的文件夹和（或）文件。例如我们找到 ACD/Labs 示例文件夹并选中所有子文件夹：



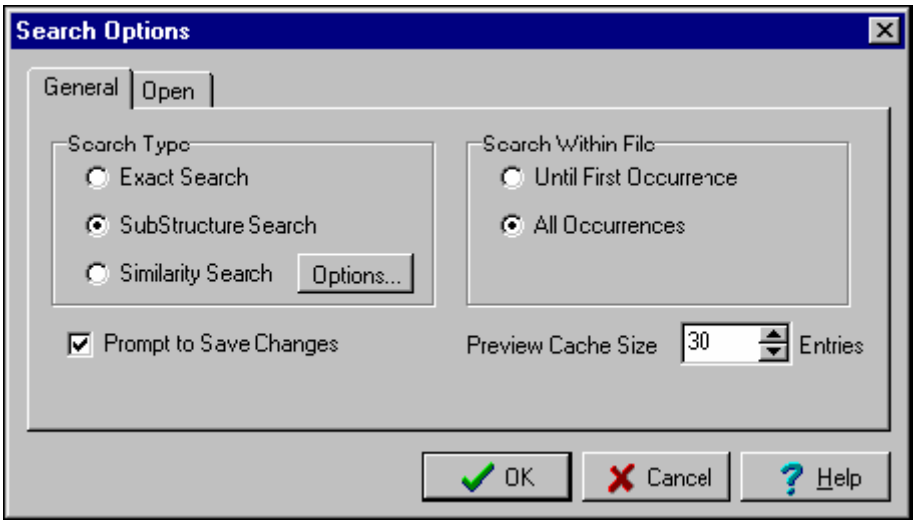
5. 点击 Look In 下面的浏览来设定所要搜索的文件格式。浏览文件（Look Through Files）对话框出现。选择 ChemSketch 文件，MDL Molfiles 和微软 Word 文件的复选框，清除其他所有复选框。



提示：您可以通过标记选中的文件格式来缩小搜索范围。选中格式点击改变标记然后在出现的对话框中输入标记。

6. 点击 OK 应用改变。

7. 在 Search for Structure 对话框中，点击选项来用户化搜索选项。



8. 在常用标签中，设置搜索类型到子结构搜索 Substructure Search 并在 Search Within File 框中选择 All Occurrences。

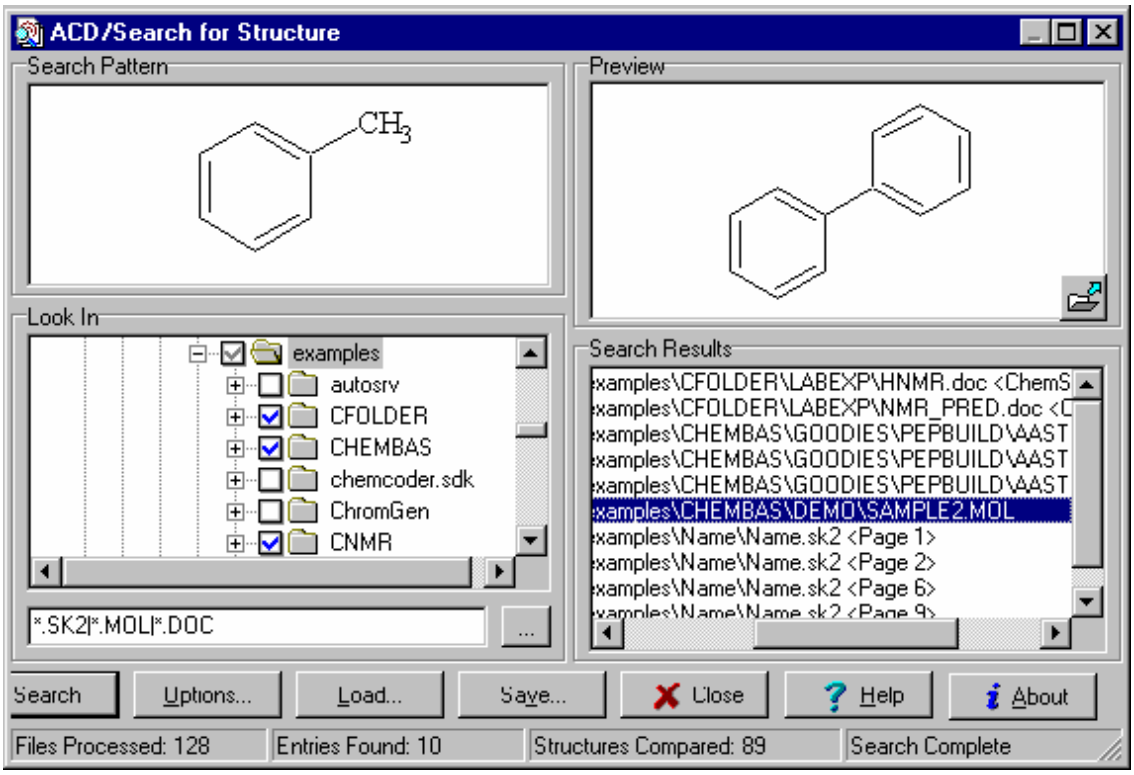
9. 转到打开标签，根据需要打开的文件来定义应用程序。

10. 点击 OK。

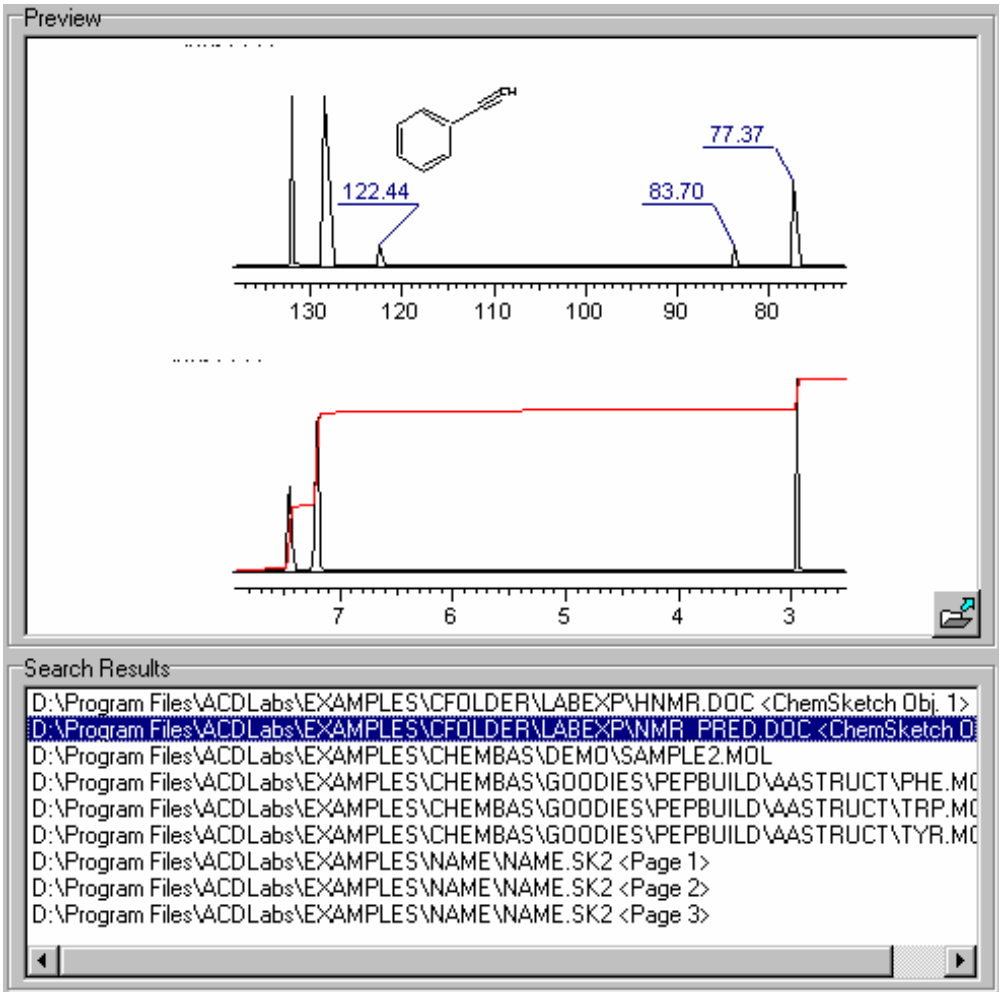
9.2.2 鉴于搜索结果

现在我们开始搜索需要的结构：

1. 点击搜索（Search）来开始搜索。当查寻进行，询问结构被发现的文件被显示在查寻结果区域。
2. 根据您的疑问来观察结构，点击找到的文件列表。结构将出现在预览区。



3. 如果在搜索结果中有个 MS Word 文件（.DOC），在列表中对其点击将会显示出包含所询结构的对象目标。例如：



4. 在预览区点击 Open 来打开找到的结构或目标对象。
5. 保存查询结构和文件夹设置为.SSF 文件，点击 OK。

注意：如果某个被找到的文件在 ChemSketch 中打开，一个完全对应于搜索结果列表的中的该文件路径名称的页面将被创建。因此，您每次点击 Open 或者双击搜索结构列表中的同一文件，一个新的页面将在 ChemSketch 中被打开。

10. 创建绘画对象

10.1 目标

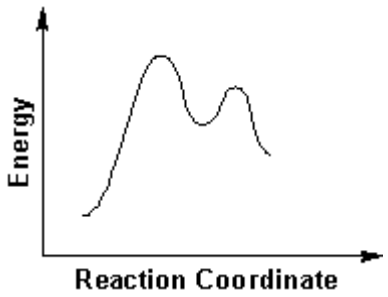
本章讲解如何创建动画物体,所以,现在请转换到画图模式。本章讲解的主要内容如下：

- 画化学反映能量图；
- 画各种类型的轨道；
- 画真空蒸馏装置；
- 画双链 DNA 螺旋结构；
- 画脂肪和胶体；
- 创建多页海报。

您还将在本章学习如何将文件以 PDF 格式输出——*仅限商业版！*

10.2 绘制反应能量图

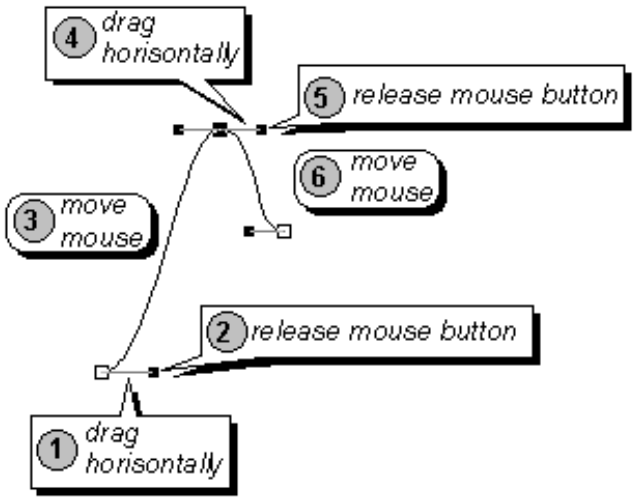
👍👍该部分可由公司网站电影区（MOVES）中下载，文件名为：diagram.exe.



10.2.1 画一条曲线

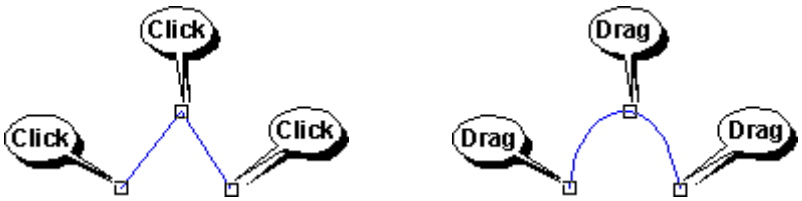
这节介绍怎样绘制一条曲线：

1. 转换到绘图模式下在常用工具栏点击 Draw
2. 从文件菜单，选择新建开始一个新文件。
3. 在绘图工具栏，点击多线工具Polyline 。
4. 从曲线起点向右画出控制线。
5. 释放鼠标。
6. 向上移动鼠标画出曲线的第一部分。
7. 向右水平延长控制线。通过改变控制线的长度您可以改变曲线的形状。
8. 释放鼠标。
9. 向下移动鼠标画出下一部分。



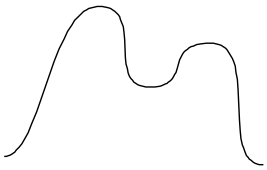
10. 重复以上步骤画出下面两部分。
11. 点击鼠标右键结束画曲线。

提示: 当应用多线工具键时(polyline tool), 请记住:点击将产生一个点或者一个尖锐角度,但是拖动鼠标将产生曲线：



10.2.2 修改曲线

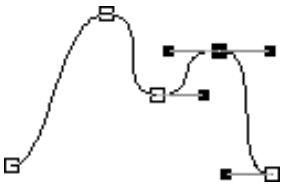
当您第一次使用多线工具画曲线的时候,可能曲线的形状不令人满意,例如,可能第一次的曲线是如下形状：



1. 选定选择/移动键(**Select/Move)**  ,然后点击要修改的曲线。
2. 点击节点编辑（**Edit Nodes**） 键,将显示所有曲线上所有能够被修改的点：



3. 点击第三个点,您会看到那个点显示被选中,并且显示相应的控制线。



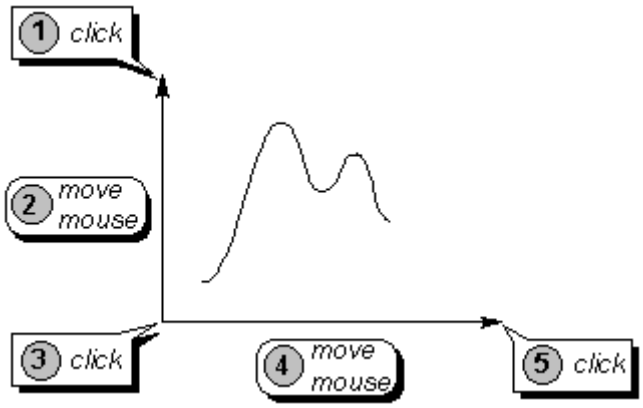
4. 移动控制线,选择并修改曲线上其他的点,直到曲线形状令人满意为止。

提示： 应用 **Edit Node**时，您可以应用工具键修改图形。例如：您可以选择几个不同的点,然后在工具栏点击相应的键重新安排曲线上的点。

10.2.3 绘制X、Y轴

完成一个反应图标，坐标轴是必要的。确定多线工具 **Polyline** 被激活 。

1. 在常用工具栏点击新页面。
2. 从工具菜单选择箭头样式面板。从箭头样式(**Arrow Type**)的下拉菜单中选择双向箭头。
3. 从选项菜单，选择 Snap on Grid 和/或 Show Grid 来简化您的绘制。
4. 点击 Y 轴的终点。
5. 竖直向下移动鼠标,画出 Y 轴。
6. 点击得到坐标原点。
7. 水平向右拖动鼠标得到 X 轴。
8. 在 X 轴终点点击鼠标。



9. 右击鼠标完成整个画 X 和 Y 轴工作。
10. 利用 **Text** 和 旋转 **90°** (**Rotate 90°**) 工具键添加标题。

这是一个挑战.利用 **Text** 键写出字来。例如,选定用 **text** 键写出的字,字号 **36,**颜色:黄色,现在可以用多线工具键 **(Polyline)**在黄色字上写出相同的字。 **(**注意:用多线工具键写出字后,可以用节点编

辑键Edit Nodes 进行修改)。

Chemistry

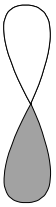
11.在常用工具栏点击新页面。

10.3 绘制各种不同轨道

该部分可由公司网站电影区（MOVES）中下载，文件名为：orbital.exe.

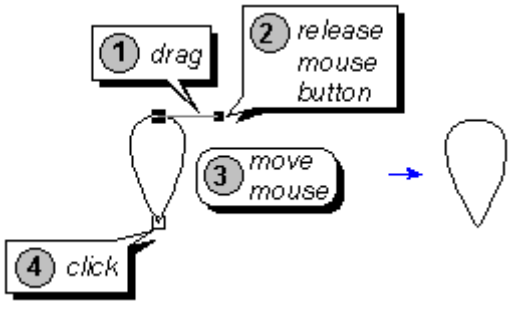
10.3.1 绘制p轨道

我们将绘制如下轨道：



确保您在绘图模式下，并在绘图工具栏点击多边形。

1. 由起点向右移动水平鼠标，以画出轨道的控制线。
2. 释放鼠标。
3. 向下移动鼠标，画出轨道的主体。
4. 点击得到轨道。



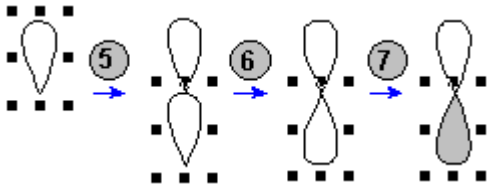
注意：若曲线形状您不满意，可以使用节点编辑工具进行编辑。

5. 点击鼠标右键两次，结束画轨道。切换到选择/移动/调整大小(Select/Move/Re-size)工具。将光标放在选定的轨道上，按下 CTRL 键，向下拖动鼠标复制轨道的下半部分。

6. 选择上下翻转(Flip Top to Bottom)键，将复制的轨道翻转,然后移动轨道将两个轨道如下图所示安放在一起。

提示：要将格部分规则的排列，确保选项菜单中的 Snap on Grid 没有被选中。

7. 选定轨道的下半部分,在调色盘中点击灰色键，然后在轨道下半部分点击鼠标左键将轨道颜色改变。

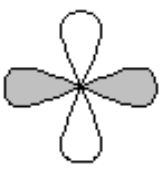


提示：选定轨道，选择水平中心按钮(Center Horizontally)，可快速确定轨道的中心。

8. 选定轨道的两个部分，点击群按钮(Group)，将两个轨道变成一个整体,您就可以像处理一个轨道一样处理它们，如使用选择/移动/选择工具(Select/Move/Rotate)进行选择。

10.3.2 绘制d轨道

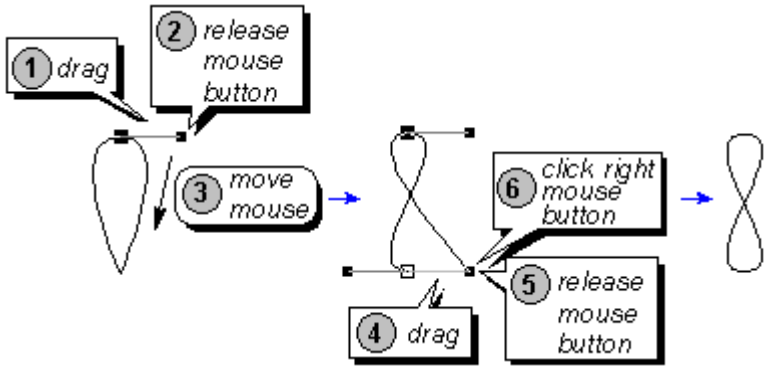
这一节我们将绘制如下轨道：



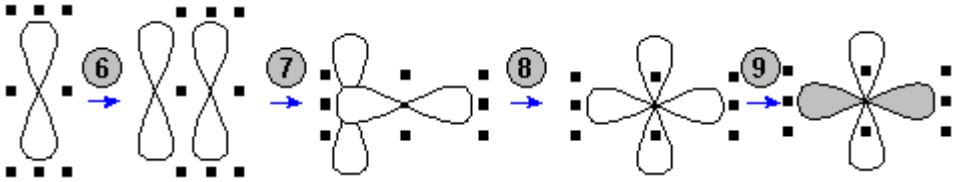
在绘图模式下选择多变形工具(Polygon) 。

提示：在绘制前，从选项菜单选择网格捕捉 Snap on Grid 来命令帮助您快速绘制对称的轨道。

1. 由起点水平向右画出轨道的控制线。
2. 释放鼠标。
3. 向下移动鼠标画出轨道。
4. 向右水平移动画出控制线。请注意，为了使轨道的两部分完全相同，您必须使控制线长度相同。
5. 释放鼠标。
6. 单击鼠标右键完成轨道的绘制，并转换到选择/移动/调整工具。



7. 选定轨道，按下 CTRL 键对轨道进行复制。
8. 选择旋转 90 度按钮(Rotate 90) ，将复制的轨道进行旋转。
9. 拖动复制的轨道。
10. 当复制的轨道被选中后，在调色板(Color Palette)中选择灰色按钮(gray)，点击鼠标左键将轨道颜色改变。



提示：选定轨道，选择水平中心按钮(Center Horizontally) ，可快速确定轨道的中心。

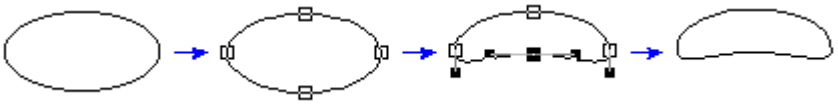
11.如果您选定轨道的两个部分，点击群按钮(Group) ，可以将以上所有轨道变成一个物体,您就可以像处理一个轨道一样处理它们，如使用选择/移动/旋转工具(Select/move/Rotate) 进行选择。

10.3.3 绘制pi轨道

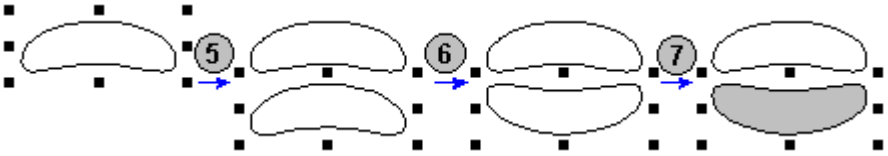
下面我们绘制如下轨道：



1. 选择椭圆工具(Ellipse) 在工作区划出一个椭圆。
2. 由对象菜单(Objects)中选择转换为多线命令(Convert to Polyline)。
3. 选择编辑点工具(Edit Nodes) 。
4. 将最低点向上拖。



5. 点击鼠标右健选定选择/移动/调整(Select/Move/Re-size) 工具。 点击图形的外形选中它，按下 CTRL 健将其复制。
6. 选择上下翻转键(Flip Top to Bottom) 将下面的图形翻转。
7. 在调色板(Color Palette)中选择灰色按钮(Gray)，点击鼠标左键将轨道颜色改变。

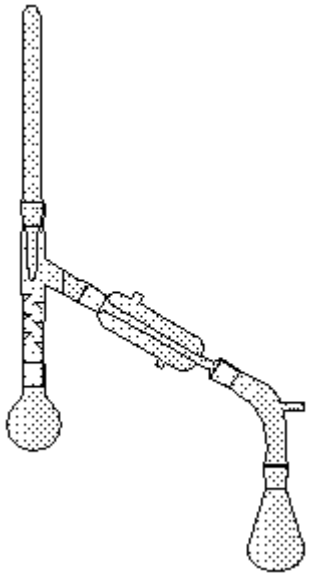


提示：点击水平中心按钮(Center Horizontally) ,可快速确定轨道的中心。

8. 如果您选定轨道的两个部分，点击群按钮(Group) ，所有以上轨道将成为一个物体,您就可以像处理一个轨道一样处理它们。
9. 在常用工具栏点击新页面。

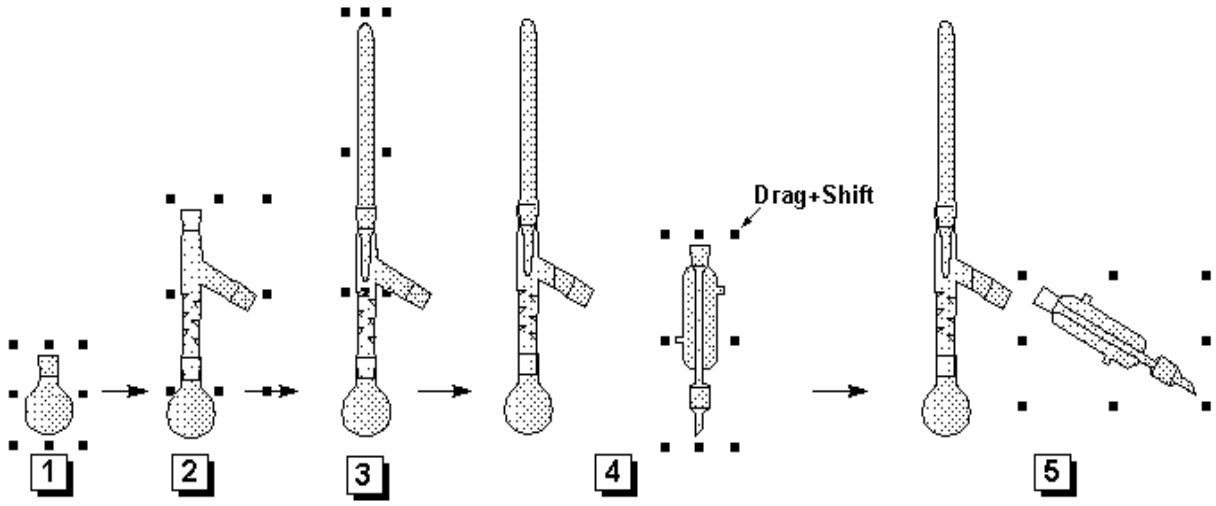
10.4 绘制真空蒸馏装置

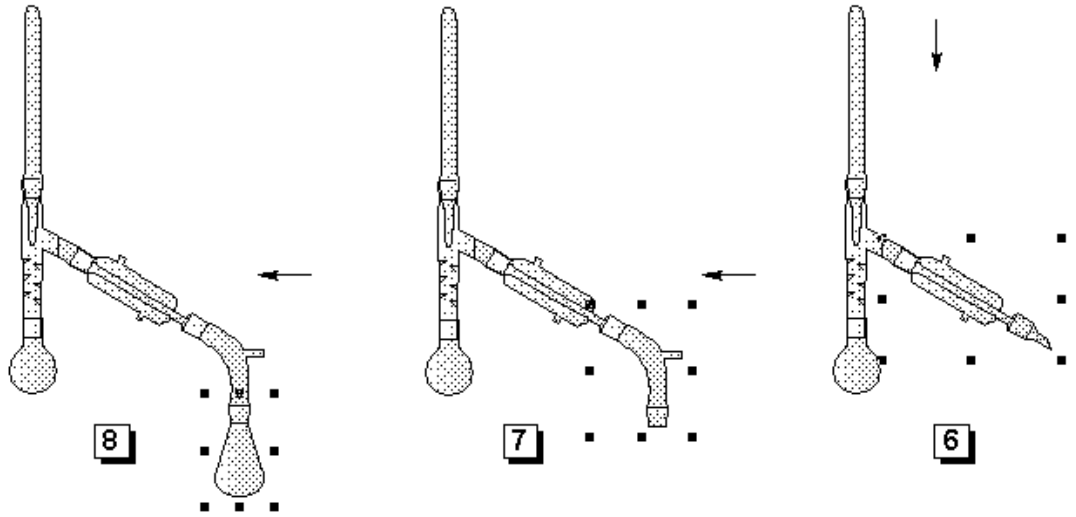
该部分可由公司网站电影区（MOVES）中下载，文件名为：apparat.exe.



1. 选定画图模式并将比例调整为50%，然后点击新页面来打开一个空白页面。
2. 由模型窗口中的模型列表中选定实验室用品(Lab Kit)。
3. 通过点击选定圆底烧瓶(round-bottom flask)，再通过点击工作区得到圆底烧瓶。点击鼠标右健将悬在游标上的模型阴影隐藏。

4. 打开模型窗口，选定带连接器的格氏蒸馏管(Vigreux distillation column with connection adapter)，将其连接到烧瓶。点击鼠标右健将模型阴影隐藏。
5. 由模型窗口中选定温度计(thermometer)，如图连接。点击鼠标右键，将模型阴影隐藏。
6. 在模型窗口中选定冷凝管(distillation column)，再通过点击工作区得到冷凝管。点击鼠标右健将悬在游标上的模型阴影隐藏。选定选择/移动/调整大小工具 (Select/Move/Re-size)。
7. 点击在蒸馏瓶柱周围的黑色正方形,快速转换为选择/移动/旋转工具 (Select/Move/Rotate)。拖动任意一个蒸馏瓶把守,将选定的物体顺时针旋转73度,游标将显示旋转的角度(在优化菜单(Options menu)中的参数对话框(Preferences dialog box)中选择**General** 选项,在**General**选项下选择Informative Cursor)。
8. 移动柱使其接近装置。
9. 由模型窗口中选择真空接液器(adapter)并连接到装置。
10. 连接接收瓶(receiving flask)结束工作。

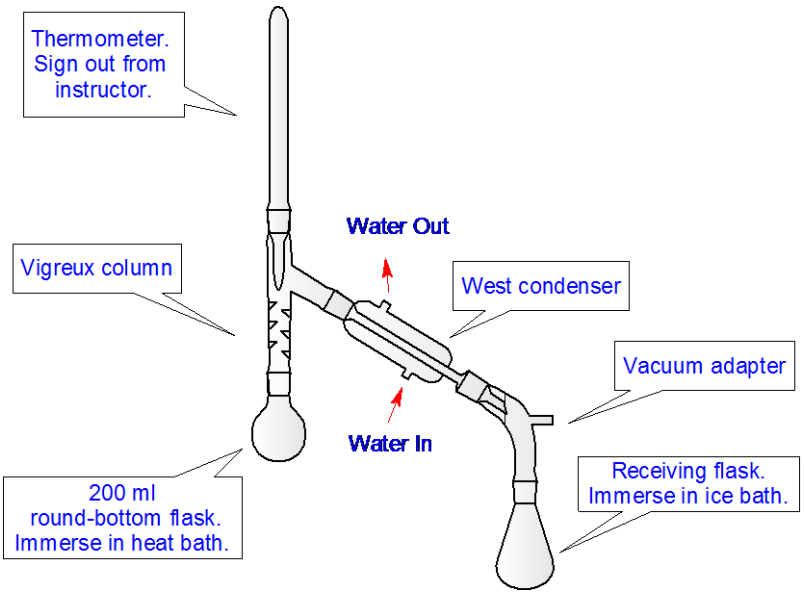




10. 4. 1 在图形上加注释

ACD/ChemSketch 使您能够画出优美的图形.最近我们将此软件升级,现在模型窗口中包括烧瓶,电加热器等等.您可以画出整个实验的过程。

有些时候,我们需要加上注释。本节讲解如何在图形上加注释：

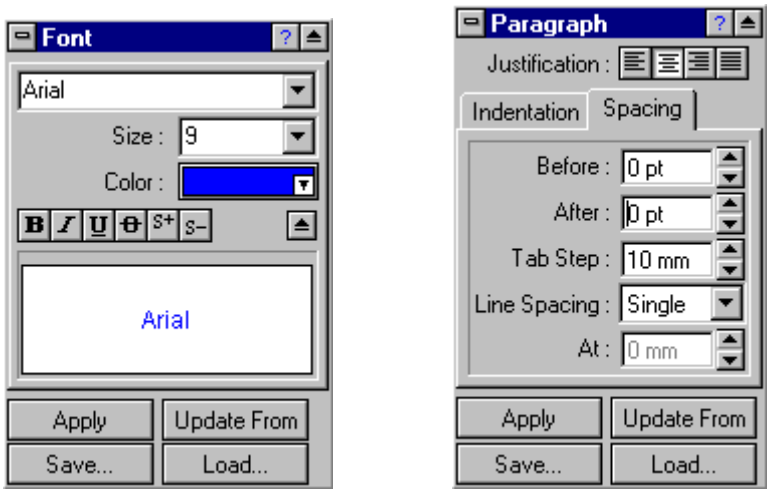


10.4.1.1 文字注释

从本章您将了解到如何为真空蒸馏装置添加注释框：

1. 从工具菜单(**Tools**)选择设定字体(**Font Panel**)和设定段落

(Paragraph Panel),在打开的窗口中设定字体和段落：



2. 选择文字工具键**(Text)** ,并在温度计的左边点击,然后在出现的文字方框中打出 *Thermometer. Sign out from instructor*。如果要将文字框变小,拖动右边的边线：

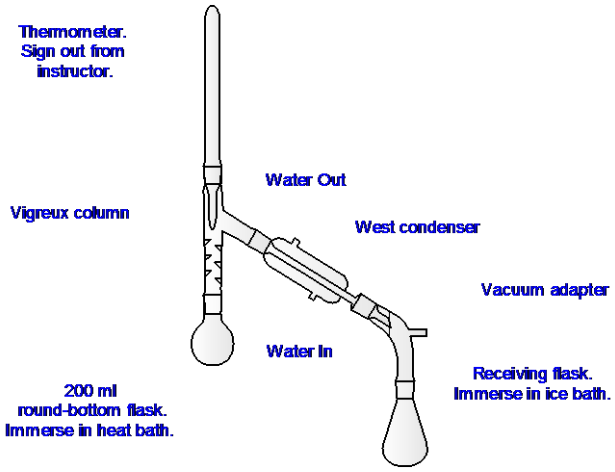


3. 点击文字框以外的区域,完成文字输入。

注意： 如果您在还没有完成文字输入的时候点击了文字框的外面,选择编辑文字**(Edit Text)** 键,选定的文字将被重新放置进文字框中,如果文字还没有被选定,只要在选定编辑文字键后,点击文字即可。

4. 重复以上第 2 和第 3 步骤,完成其他的注释。

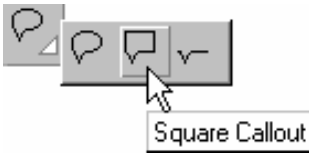
5. 如果有必要,您可以将注释重新在图形周围进行排列。



10.4.1.2 插入注释框

现在我们将插入注释框。

1. 在画图工具栏中点击 **Callout**  键的右下脚的小三角形,得到更多的注释框的形状,选择您需要的注释框。



2. 注释框总是在物体周围并且箭头指向物体,当文字框位置适合时,点击得到注释框:



3. 用相同的方法得到其他的注释框。在工作区点击右键即可离开注释模式。

10.4.1.3 修改注释框的形状

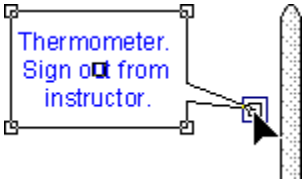
现在我们将修改注释框的形状让其指针对准我们想要的目标。

1. 在注释框上点击得到注释框上的点,选择编辑节点(**Edit Nodes**) 

键：



2. 拖动注释框最低处的点将注释框箭头指向合适的物体。



提示：拖动注释框四角上的点,改变注释框的大小。

3. 重复第 2 步骤,对其它注释框进行修改。

4. 修改了所有的注释框后,在工作区右击鼠标,结束修改注释框。

5. 用 **Draw Arrow**键,将箭头加在水入口和出口处。

6. 同时选择两个箭头,双击鼠标,得到 Objects Panel 窗口,选择红色,点击应用（**Apply**）。

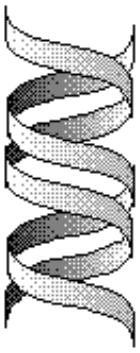
10.4.1.4 将元素编组/拆开

要将图片作为一个整体来处理，按住 CTRL+A 的同时选取所有组成部分然后点击编辑工具栏上的编组键。编组(Group) 功能键是将多个物体通过编组键,使其在移动或改变大小的时候成为一个物体。如果要将物体拆为不同的物体,选择整个物体,重新点击 Group 键。

10.5 绘制一个双链DNA螺旋结构

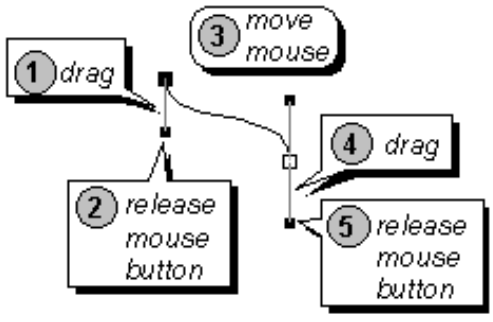
该部分可由公司网站电影区（MOVES）中下载，文件名为：

dna_ch. exe.



确保您已选定画图模式。

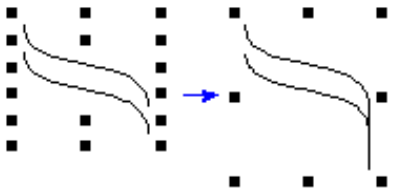
1. 在常用工具栏点击新页面。
2. 在绘图工具栏，选定多线工具(Polyline) 。
3. 由曲线起点向下垂直移动画出控制线。
4. 释放鼠标。
5. 向右移动鼠标画出曲线。
6. 垂直向下移动画出控制线，通过调整控制线的长度，可以修改曲线的形状。
7. 释放鼠标并双击鼠标右健结束工作，选定选择/移动调整大小工具(Select/Move/re-size)。



8. 将鼠标放在选定的曲线上，同时按下 CTRL 和 SHIFT 键向下拉(拖动鼠标时，按下 CTRL 键可以留下一个复件，而按下 SHIFT 键，

可以使对象水平或垂直移动)。

9. 通过点击曲线周围选择矩形或分别点击两条曲线选定两条曲线，再选择 Object 菜单下的连接线(Connect lines)将曲线的右端连接。

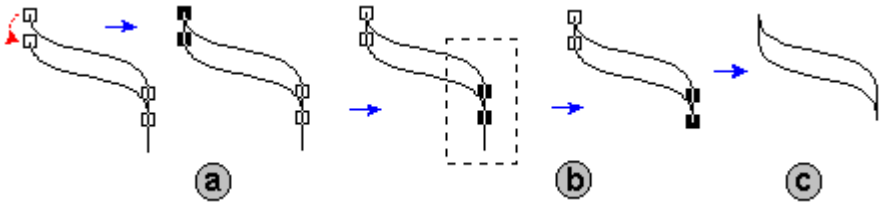


10. 由编辑工具栏(Edit toolbar) 中选择编辑交点(Edit Nodes)工具，再进行如下操作：

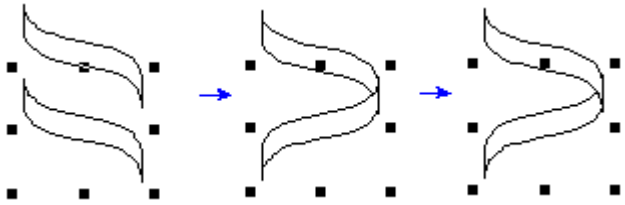
a) 点击端点连接键(Connect Vertices) ，连接线段的两端。

b) 通过拖动右边两点的矩形选定右边两点，再点击转换成线段(Convert to line)键。

c)点击鼠标右键转换为选择/移动/调整大小  (Select/Move/re-size)工具。

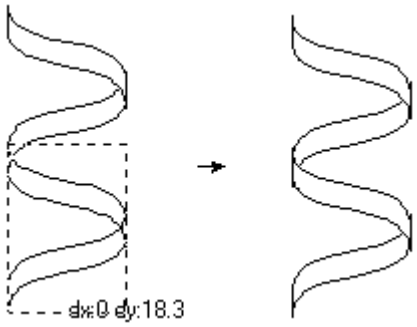


11. 如第二步一样，按下 CTRL 和 SHIFT 键通过拖动得到图形的复制件。点击左右翻转键(Flip Left to Right) ，将其翻转，点击转换到背面键(Send to Back) ，将图形旋转到背面。

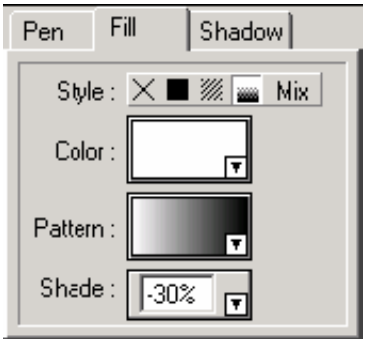


提示：通过移动图形来调整它们的位置需要花费一定的时间。为了使它们整齐，您可以对图形使用垂直中心对齐(Center Horizontally) 工具。

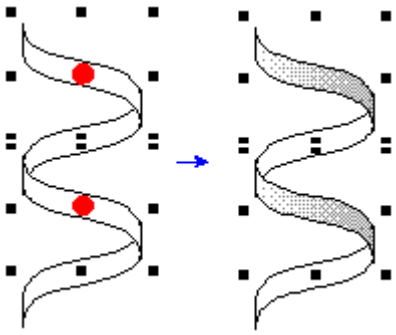
12. 通过拖动选择或按下 SHIFT 键点击选定两个图形，使用以前的步骤调整位置。



13. 按下 SHIFT 键，通过点击选择图形，双击其任何部分，打开对象(Objects)选项，在 FILL 键中选择如下设定：

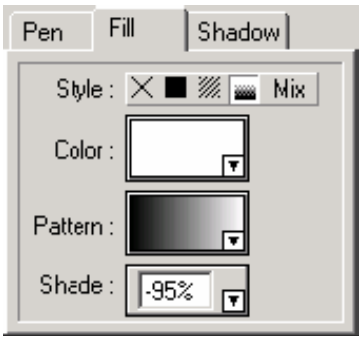


然后点击应用(Apply)：

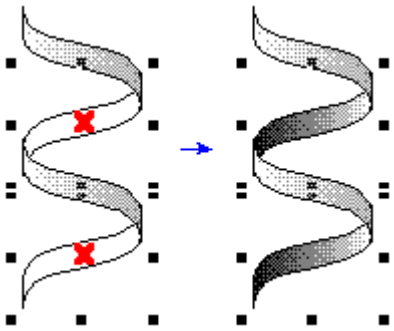


14. 选择其他两个图形(它们用十字标记)，在对象面板中选定如下设

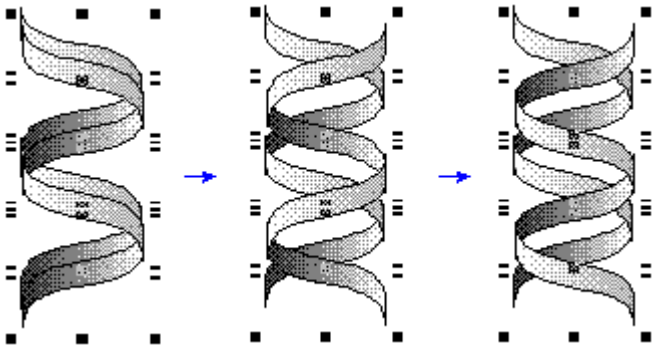
置：



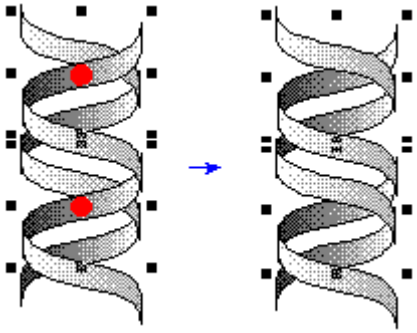
再点击应用(Apply)，得到如下图案：



15. 选定全部图形，按下 CTRL 键通过拖动对其进行复制。点击向右翻转(Flip Left to Right) 和上下翻转按钮(Flip Top to Bottom) 。



16. 按下 SHIFT 键，通过点击选择图形，点击发送到背景键(Send to Back) 。



17. 选择所有部分并将它们编组。

10.6 绘制脂肪和胶体

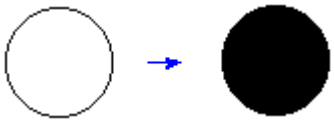
👍👍该部分可由公司网站电影区（MOVES）中下载，文件名为：lipid.exe.

10.6.1 绘制脂肪

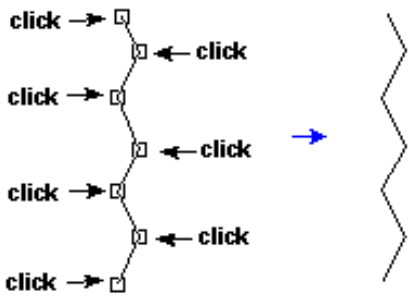


确保您已选定画图模式。.

1. 选定椭圆工具(Ellipse) ，按下 SHIFT 键在工作区画出圆。
2. 点击在状态线中的颜色选项中的黑色，将圆涂色。



3. 选定多线工具(Polyline) ，分别在工作区中的圆附近点击鼠标画出碳链，点击鼠标右键结束。



提示：为了简化工作，您可以选择栅格捕捉(Snap on Grid)或显示格栅命令(Show Grid)。

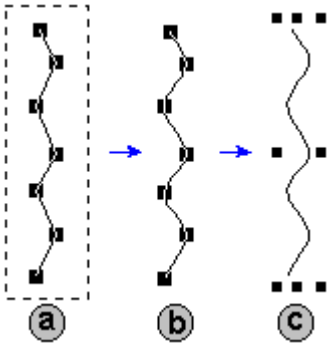
4. 选定 Edit Nodes 键 并按以下方法来平滑 Z 字线：

a)通过选择矩形选定所有的点，注意选定的点变为黑色。

b)点击转换成曲线键(Convert to Curve)，再点击平滑

键(Smooth)。

c)点击鼠标右键转换到选择/移动/调整/大小(Select/Move/Re-size)工具。



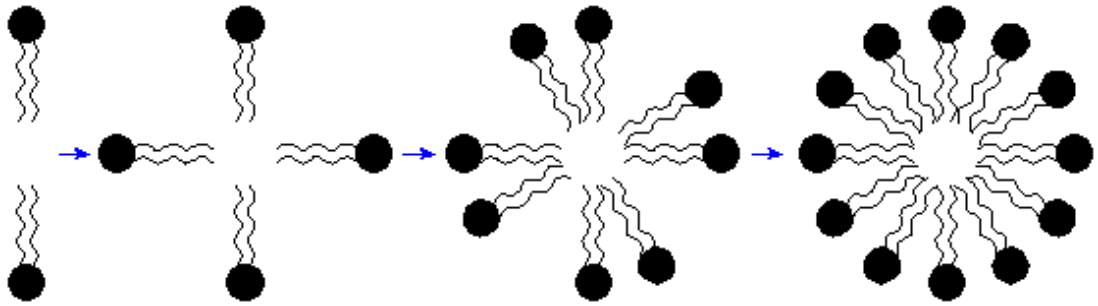
5. 按下 CTRL 键，将鼠标放在曲线上，对曲线进行复制。

6. 拖动曲线如图所置。



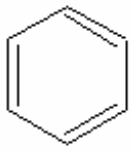
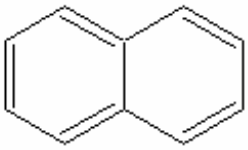
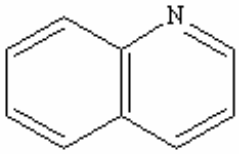
提示：如果您利用群按钮(Group) 将所有的元素选定，您可以将它们象一个对象一样处理，如使用选择/移动/旋转(Select/Move/Rotate) 工具使其旋转。

使用复制命令(CTRL+拖动)，群组 (Group)、旋转 90 度 (Rotate 90)，选择/移动/旋转 (Select/Move/Rotate)等命令，包括合并(aligning)和翻转工具(flipping)，画出如下的图形：



10.7 创建表格

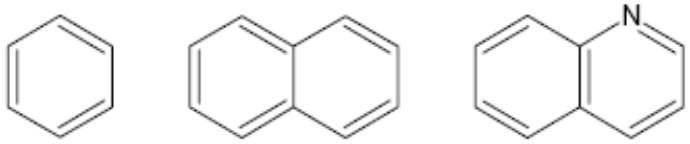
从 7.0 版本开始，ACD/ChemSketch 提供绘制和管理表格的加强工具。本节您将学习到如何插入表格，添加表格数据以及编辑表格。我们将绘制下面的表格来做示例：

Structure	Name	Properties
	Benzene	Composition = C(92.26%) H(7.74%) Density = 0.873 ± 0.06 g/cm^3
	Naphthalene	Composition = C(93.71%) H(6.29%) Density = 1.037 ± 0.06 g/cm^3
	Quinoline	Composition = C(83.69%) H(5.46%) N(10.84%) Density = 1.106 ± 0.06 g/cm^3

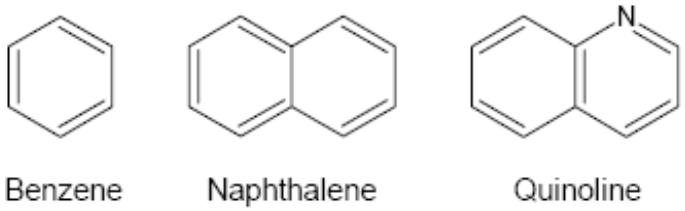
10.7.1 绘制表格内容

首先我们为表格绘制内容：

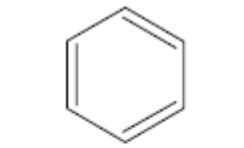
1. 转换到结构模式。
2. 使用前面章节中学习到的技巧包括字典查找结构，绘制出苯，萘以及喹啉的结构：



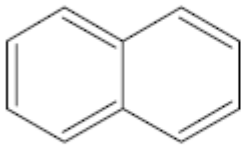
3. 转换到绘图模式，使用艺术字工具为每个结构插入名称：



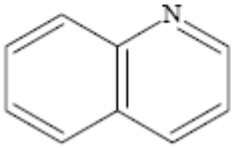
4. 现在计算它们的部分或所有性质（更多有关性质的计算参见第 6 章）。如果需要，移动结构和文字以得到更美观的效果。您可能就得到了类似下面的东西：



Benzene　　Composition = C(92.26%) H(7.74%)
Density = 0.873 ± 0.06 g/cm^3



Naphthalene　　Composition = C(93.71%) H(6.29%)
Density = 1.037 ± 0.06 g/cm^3



Quinoline　　Composition = C(83.69%) H(5.46%) N(10.84%)
Density = 1.106 ± 0.06 g/cm^3

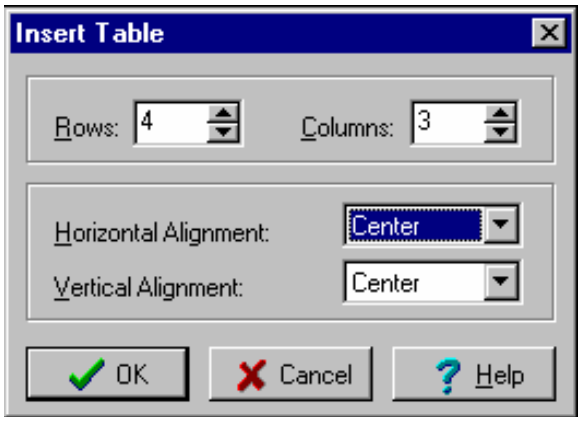
5. 关闭文字工具。点击空白区输入“Structure”。然后点击文本框外部。类似的，输入“Name”和“Properties”。这些就是后面的表头了：

Structure　　Name　　Properties

10.7.2 插入表格

现在，我们就可以为表格内容制作边框了：

1. 在左边工具栏上点击表格然后在空白工作区拖拽出您所需要表格的大致大小。插入表格的对话框出现了。设置行列为 4 和 3：

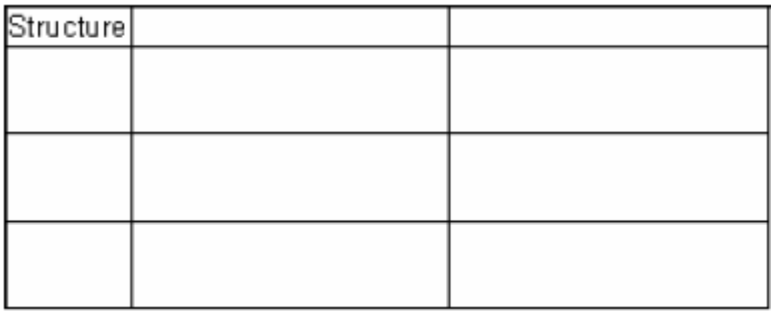


2. 点击 OK。空表格就被置入了，右击鼠标离开表格绘制模式。

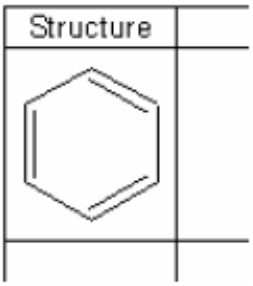
10.7.3 置入数据

表格绘制好以后，我们就可以用先前修正好的数据进行填写了：

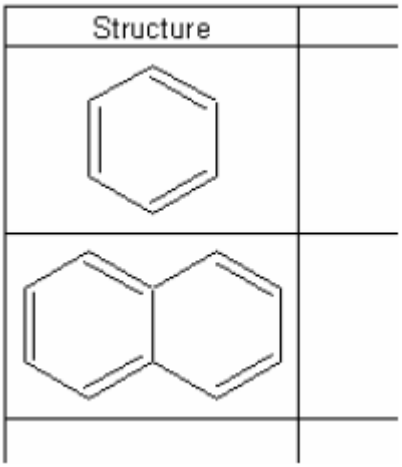
1. 在选择/移动/调整工具被激活的前提下，将“Structure”拖拽到表格上部最左边的单元格中。当您松开鼠标文本就会自动置入单元格且单元格会根据文本大小自动调整（这是一种添加方式）：



2. 再将苯环拖动到结构表头的正下方。注意到单元格的尺寸相应的改变了：

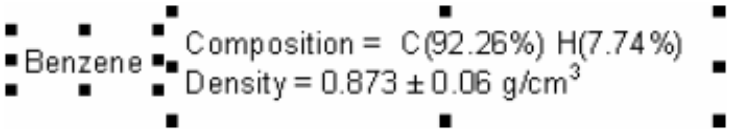


3. 下面介绍另一种填充方法。点击萘将其选中，按下 SHIFT 键并点击苯环下的空白单元格将两个目标选中。再编辑工具栏，点击编组，将会根据结构的大小将其自动置入单元格中：

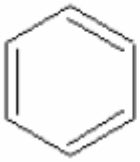


4. 您也可以一次添加多个对象。点击苯的文本，然后按住 SHIFT 键

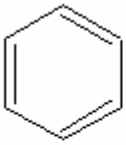
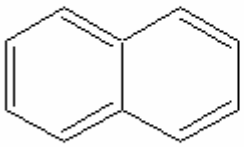
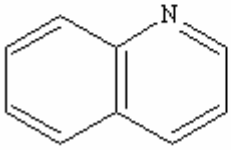
点击苯的相关性质将二者选中。



5. 将它们拖动到苯环结构右边的两个单元格之间然后松开鼠标。这两个对象就被置入了两个独立的单元格中：

Structure		
	Benzene	Composition = C(92.26%) H(7.74%) Density = 0.873 ± 0.06 g/cm^3

6. 将其它对象用拖动或成组选择的方式添加到表格中。您会获得象下面这样的表格：

Structure	Name	Properties
	Benzene	Composition = C(92.26%) H(7.74%) Density = 0.873 ± 0.06 g/cm^3
	Naphthalene	Composition = C(93.71%) H(6.29%) Density = 1.037 ± 0.06 g/cm^3
	Quinoline	Composition = C(83.69%) H(5.46%) N(10.84%) Density = 1.106 ± 0.06 g/cm^3

提示：如果文字或任意对象不能完全可见，可以放大表格（表格周围的虚线）。选中表格变角的双向箭头 ，通过拖动调整大小。

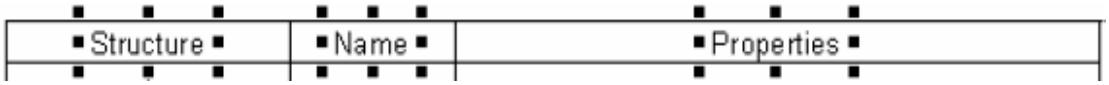
10.7.4 修改表格内容

现在我们对表格内容的格式进行修改。

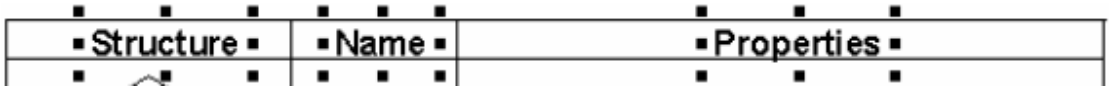
1. 在选择/移动/调整工具被激活的时候用鼠标拖拽过上部的一行将它们选中：



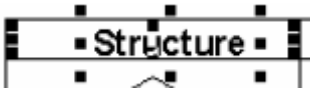
2. 在编辑工具栏点击编组将其释放。这将使各个单元格及其内容独立化。您现在可以看到只有文本部分被选中：



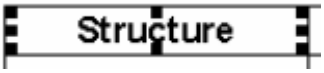
3. 双击任意文字部分将调出对象面板。在字体标签下，选择黑体复选框，设置大小为 12，然后应用。



4. 关闭对象面板。
5. 点击空白区的任意处来离开选区。
6. 要将文本重新置入表格，如：选择“Structure”文本后按住 SHIFT 键然后选择要置入的单元格：



7. 点击编组键。单元格和文本又重新组合了：

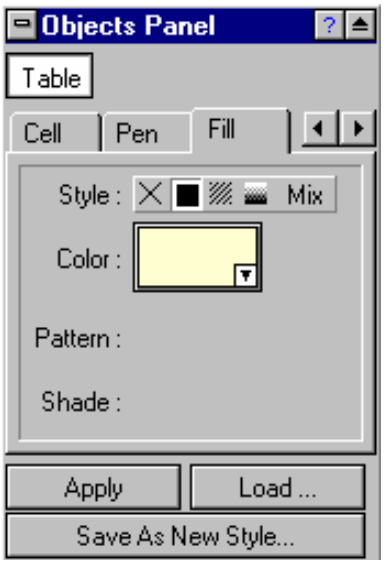


8. 重新组合的另一方法是小幅度拖拽文本让其处于单元格中的某个部分，松开鼠标，文本将自动于单元格组合在一起。要判定文本于相应单元格是否组合，指向对象，若选择框架环绕整个单元格而不仅仅是对象，那么该对象已被置入单元格。使用以上任一方法将其他表头置入单元格。

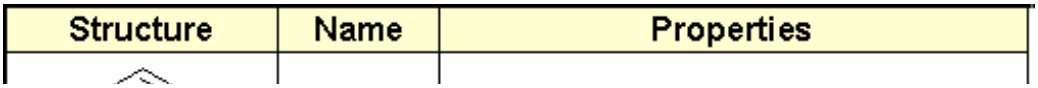
10.7.5 编辑表格外观

最后，我们对表格外观进行修改：

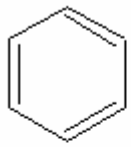
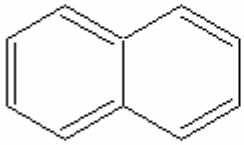
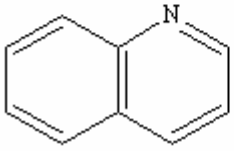
1. 在选择/移动/调整工具被选中时拖拽过上部的行将其选中。
2. 双击选区激活对象面板。若填充标签不可见，点击向右的箭头使其显示。示例：将颜色设为乳黄色：



3. 点击应用：选中的单元格均被填充成乳黄色：



4. 关闭对象面板。
5. 选中整个表格然后双击调出对象面板（注意，在填充标签下，颜色设置为混合）。转到钢笔标签然后将颜色设为深红。点击应用：

Structure	Name	Properties
	Benzene	Composition = C(92.26%) H(7.74%) Density = 0.873 ± 0.06 g/cm^3
	Naphthalene	Composition = C(93.71%) H(6.29%) Density = 1.037 ± 0.06 g/cm^3
	Quinoline	Composition = C(83.69%) H(5.46%) N(10.84%) Density = 1.106 ± 0.06 g/cm^3

6. 关闭对象面板后保存文件。

11. 管理文件

如果您完成上面章节中材料，您应该有一些附有各种图形的页面。在这一章，我们将练习一些涉及全部文件的处理。

- 这一章您将学习到：
- 插入页眉和页脚；
- 将文件转换为 PDF 格式——*仅限商业版！*
- 创建海报。

下面几节不属于一些特例，而且可适用于您的任一 ACD/ChemSketch 文件。

11.1 插入页眉和页脚

从 8.0 的版本开始，您就可以为您文件中的所有页面来添加页眉和页脚。您只要对一个页面插入文本和图片那么其他页面会拥有同样的样式了。

1. 在页面菜单中，指向页眉和页脚，然后选择编辑。调出相应工具栏



而且在页面的前面出现了文本编辑框。

2. 例如，在某页的页眉输入“ACD/ChemSketch”。
3. 在页眉页脚工具栏上点击移至下一文本，又一个文本框出现

在页眉的中间。输入“Author”。

4. 现在点击工具栏上的插入自动图文集

再选择 Author。您的注册名将被自动插入。

5. 再次点击移至下一文本页眉的右边再次出现一文本框。点击插入自动图文

然后选择 Page X of Y，相应的自动文本被插入。若您想添加更多数据到页脚，点击移至下一文本。

注意：您页可以在页眉页脚中插入任意想要显示的图片。在页眉页脚编辑模式下，使用 ChemSketch 工具在需要的位置绘制或插入图片。当您离开当前模式，相应图片在页眉页脚中均可显示了。

6. 当所需数据被插入后，通过关闭工具栏离开页眉页脚编辑模式。点击关闭。

7. 在页面间切换来察看插入的页眉。

11.2 转换成PDF——仅限商业版！

ACD/ChemSketch 现在包含一个将 ChemSketch 文件（.SK2）转换为 Adobe PDF 格式的工具。当您按前面章节绘制好一些图形对象以后您就可以尝试将您的文档转换为 Adobe PDF 格式了。注意该功能仅在 ACD/ChemSketch 的商业版中才可用。

注意：要从 ACD/ChemSketch 转换成 PDF，您不必在您的电脑上安装 Adobe Acrobat 或是 Acrobat Reader 但要查看 PDF 文档就需要其一了。您可以在 ACD/Labs 的安装目录中找到免费版的 Adobe Acrobat Reader。

1. 将要转换成 PDF 文件的对象或结构按您想要的方式排版好。

提示：您可以点击 Full Page来查看整个页面。

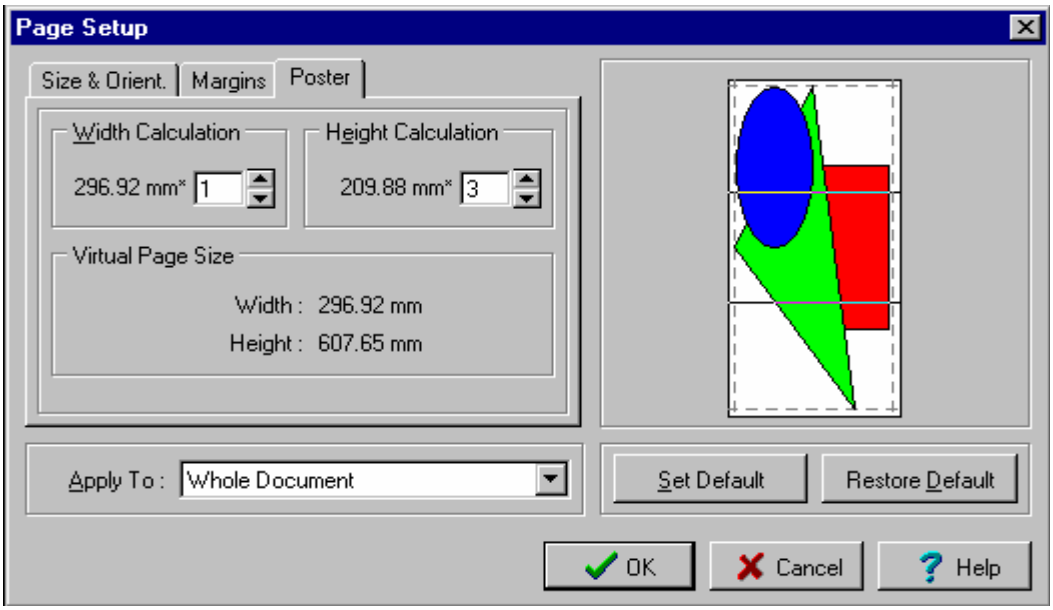
2. 点击输出到 PDF。程序将对 PDF 文件的路径和名称给您提示。
3. 键入名称，例如：Chapter10.pdf，然后点击 OK。
4. 当转换完成后，您可以通过 Adobe Acrobat 阅读器来查看新生成的文件的结果。

注意：一些经 OLE 服务插入的对象（从编辑菜单选择插入对象）可能不会转换到 PDF。鉴此，将有一消息框对您进行提示。

11.3 创建海报

该部分可由公司网站电影区（MOVES）中下载，文件名为：poster.exe.

1. 从文件菜单，选择页面设置。
2. 在版式（Size & Orient）标签下设置页面格式并选择前景选项。
3. 在出现的对话框中选择海报键(Poster tab)，点击旋转按钮(spin)，设定您的海报中标准页数，请注意您可以看到软件会在虚拟页中自动计算海报的尺寸：



4. 在点开页边键(Margins)中设定页的边距。点击 OK。
5. 在结构和画图模式中，画出您的海报画。在显示整体效果时,选择全页显示(Full Page) 。

注意：您可以在编辑菜单中使用粘贴(Paste)和特殊粘贴工具(Paste Special)插入其他窗口中创建的文件(如：文本，图片等)。您也可以使用 OLE 对这些对象进行编辑。

6. 如果您想看到您的海报画在打印时如何被分成独立的页，从选项（Options）菜单中选择参数设置框中的 General 标签下的 Borders 选中 Printable Area 复选框。
7. 由文件菜单(File)中选择打印设置(Printer setup)。
8. 在选择打印机(Select Printer)对话框中,选择安装(Set Up) 键,在字体(Font) 中选择打印真实动画设计(Print TrueType as Graphics), 然后点击 OK.。
9. 从文件菜单(File)中选择打印命令(Print) ，或在总工具表(General toolbar)中点击打印键，打印出海报。

12. 结构模式中的样式

12.1 目标

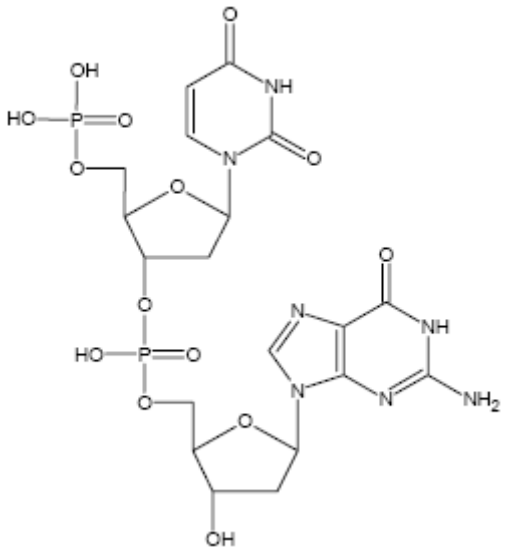
如果您经常用一系列独特的属性来显示您的结构，比如字号，字体，化学键的粗细等等。您可以将保存这些设置作为一个整体样式进行保存。若您想对您处理的分子用同一方式显示出来这是特别有用的。

这一章我们将学习到：

- 改变化学结构的样式；
- 保存样式；
- 应用现有的样式；
- 设置默认样式。

12.2 改变结构样式

样式(style)是决定化学结构式的外观的多种因素的组合(原子和化学键,画笔,箭头,字号,文字的段落等),这些都可以被命名并保存。

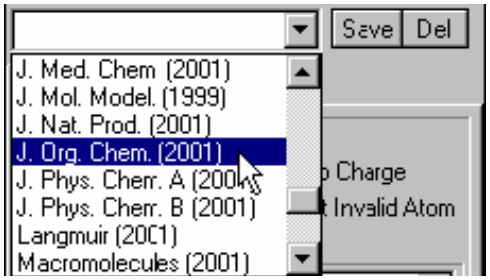


提示: 可借用模型窗口（DNA/RNA Kit）来画右侧结构。选择 2-deoxyriboso-5-phosphate，Uracil, guanine.当将两个结构片段连接起来时,使用 SHIFT 并点击连接点。关于如何使用模型窗口,请参阅 6.5。

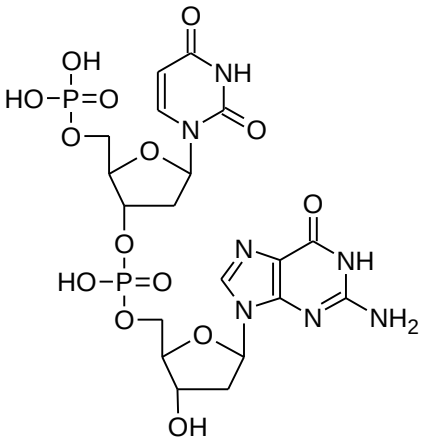
12.2.1 应用期刊样式

假设您有一篇文章要寄给有机化学杂志(*Journal of Organic Chemistry)*,您要在文章中画出分子结构。

1. 用选择/移动**(Select/Move)**键选定结构式。
2. 将光标放在由 **Select/Move** 产生的小方框上,小方框将变成黑方框。双击鼠标,得到性质对话框**(Properties)** 。
3. 在样式框中选择 **J.Org Chem(2002)**:



4. 点击应用**(Apply)**键**,** 您将看到结构式将变成杂志样式。点击分子旁边以将其释放，您可以更清楚的观察:



5. 从文件夹(File)菜单,选择保存为(Save As),并将此结构式命名为 DNAFRAG2.SK2。

6. 重新选择整个分子,从 **Style** 菜单,选择性质**(Properties)**对话窗,再选择正常**(Normal)** 。

7. 点击 **Apply** 键,分子式变成与以前相同。

12.2.2 准备发表

如果您想要发表文章,需要做更多的工作.所以,ACD 公司为您准备了链接,您可以得到 80 多篇杂志上的文章概要。

1. 例如,从 **Help** 菜单,选择 **Instructions for Authors**。

2. 从表中找到 **Journal of Organic Chemistry**。

3. 点击 Adobe PDF 链接,显示相应的文件。

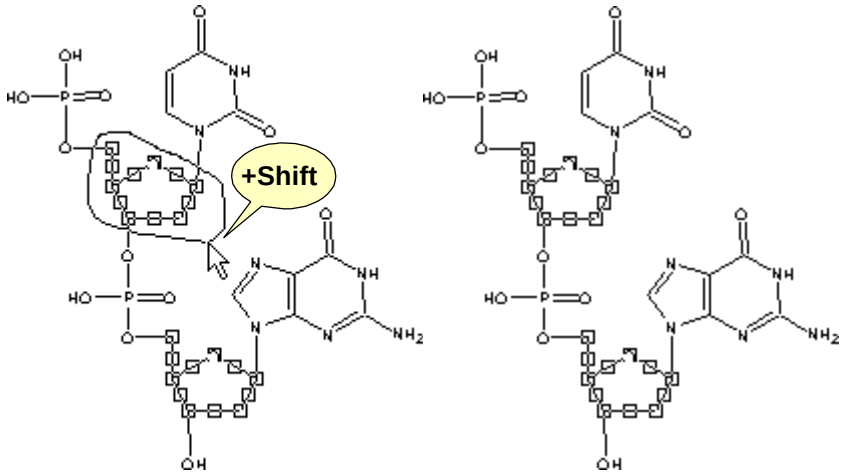
4. 用 **Contents** 键回到其他杂志文章总表中,您可以阅览其他杂志文章概要。

注意： 有些文章没有明确的化学结构式的说明,所以结构性质(Structure Properties)对话框中没有列出这些杂志。

12.3 创建用户样式

如果您要将结构式中不同的功能团,如:糖,磷盐,DNA 中的氨基酸等等用不同的颜色表示,可以按照以下步骤进行：

1. 打开 DNAFRAG.SK2 文件 (或者重新画 6.5.1 中的 DNA 片段),并转换成结构模式。
2. 转换到 **Lasso On**  ,选择 **Select/Move** 键。
3. 拖动鼠标将糖(sugar)功能团选定，(当选择另外一个功能团时,按住 SHIFT 键)：

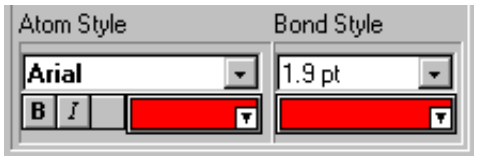


4. 将光标放在任何选定的功能团的任何一部分,使得选定的方形变成黑色,双击得到性质对话框.

12.3.1 用户定义样式：糖

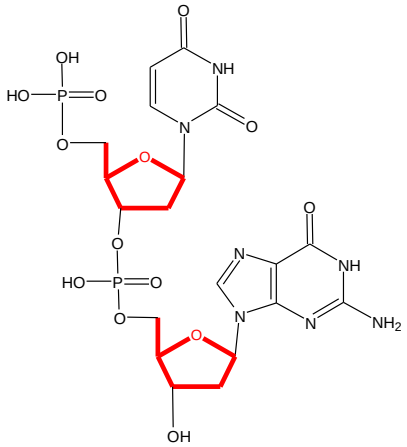
现在我们为糖的结构定义我们的样式：

1. 在原子样式(**Atom Style)**和化学键样式**(Bond Style)**中,点击颜色区域,将功能团设定为另外一种颜色,如,红色,将化学键宽度设为 1.9 pt .



注意：大多数可选尺寸都与 **Options** 下的 **Preferences** 中的相应参数相对应,如果没有您需要的尺寸,您可以从键盘敲入。

2. 点击应用键(**Apply)**. 被选的功能团将变成红色：



3. 在性质对话框(**Properties)**中的样式表的空白处输入,点击 **Save** 将以上样式设置保存,文件名为 *Sugar*。



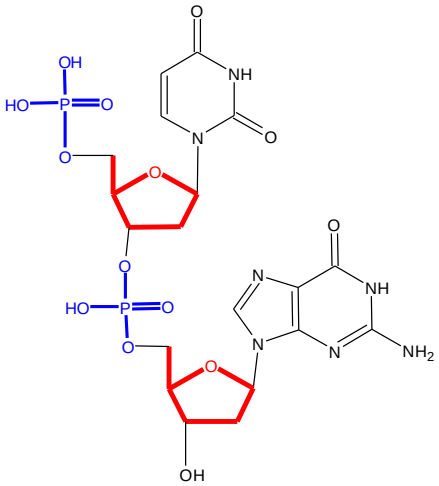
4. 然后将有一个窗口跳出,问您是否确信要保存这个样式设置。点击 Yes。

12.3.2 用户定义样式：磷酸盐

这一节我们对磷酸盐定义我们自己的样式：

1. 用相同的方法,选定分子中的磷盐部分,从性质对话框中将键宽加宽,并将原子和化学键选定为蓝色。

2. 将这个样式保存为**(Save)** *Phosphate* ,点击应用键(**Apply)**：

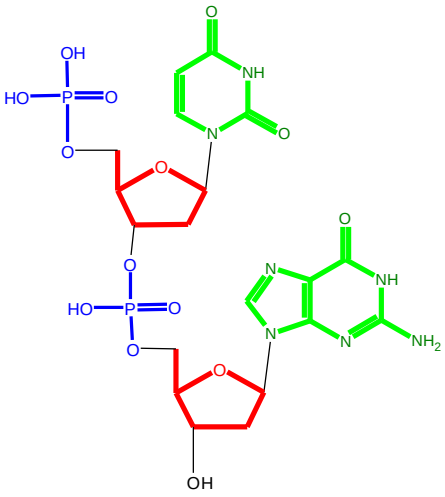


12.3.3 用户定义样式：碱

我们同样可以为碱来定义样式：

1. 用同样的方法,将碱部分的原子颜色设定为深绿色,将化学键颜色设为霓虹绿。

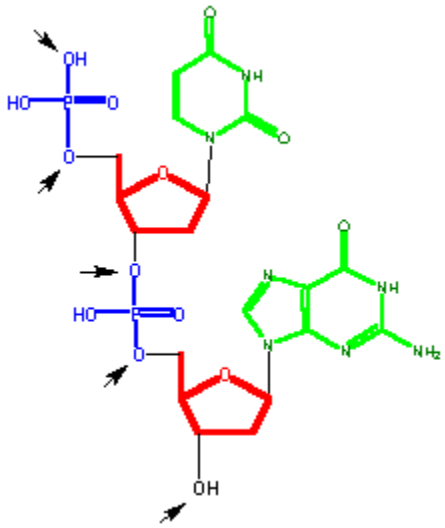
2. 将这个样式保存为**(Save)** *Base*,然后点击应用键**(Apply)**：



12.3.4 用户定义样式：强调

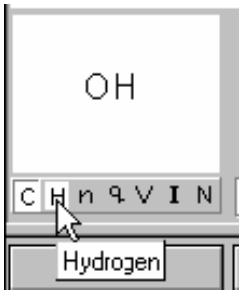
如果您需要在做报告时强调某些原子,如:氧原子,您可以用第四个用户定义样式：强调。

1. 按住 SHIFT 并点击箭头所示的氧原子将其选定：



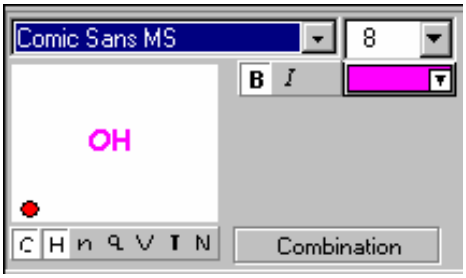
2. 双击任何一个选定的氧原子,得到性质对话框(**Properties**),选择原子键(**Atom)** 。

3. 为了改变氧原子和氢原子的颜色和大小,按住 SHIFT ,点击空白处下面的 C 和 H：



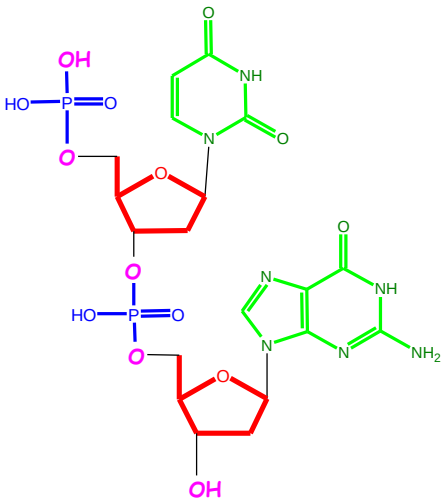
注意：您也可以改变其他的特性,只要点击相应的键就可以了。

4. 将以下的设置改变颜色,原子大小和其他性质。



注意：您可以用同样的方法改变化学键的特性。

5. 点击应用键(**Apply)**得到如下结构：



6. 保存强调样式。

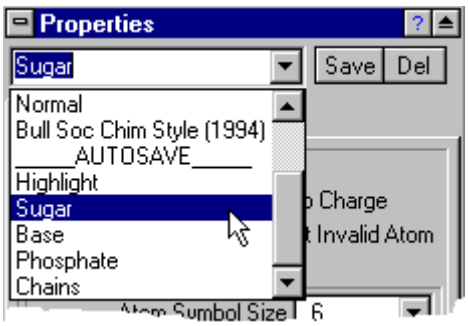
12.4 应用现有样式

打开刚刚保存的样式 *dnafrag2.sk2*。

2. 用 **Lasso** 键选定在 12.3 中的五环糖结构。

3. 双击糖结构中的任何部分或者从工具菜单(**Tools**)中选择结构性质命令(**Structure Properties)** 。

4. 在出现的性质框中(**Properties**), 从样式(styles)的下拉菜单中选择糖(*Sugar*) 。



5. 点击应用键(**Apply)**。选定的样式将应用于下面选定的结构。

6. 选择磷盐功能团从样式表中选择磷盐(*Phosphate),*点击应用键(**Apply)** 。

7. 类似地,在 DNA 片段中选择两个碱结构,点击应用键(**Apply)** 。

提示：用户定义样式保存在您的单机硬盘的 Windows 或者 WinNT 的目录中, 文件夹名为 USERSTL.SK。.如果您的同事或者朋友想与民分享这些用户定义样式,他们可以将一份拷贝保存在他们的单机上。

12.5 设定默认样式

在性质栏(Properties) 中的样式表中选择需要的样式。

或者：

点击设定默认设置(**Set Default),**那么在上一步中选择的样式将成为默认设置。

注意：如果您要将某种样式设为默认设置,您不必保存样式,您可以设定所需的性质,然后直接点击设定默认(**Set Default**)。

13. 画图模式中的样式

13.1 目标

在画图模式中,样式包括多项的组合：铅笔(pen), 箭头(arrow), 字体(font) 和段落(paragraph).您可以设置不同的文字样式,物体样式,箭头样式和线样式。

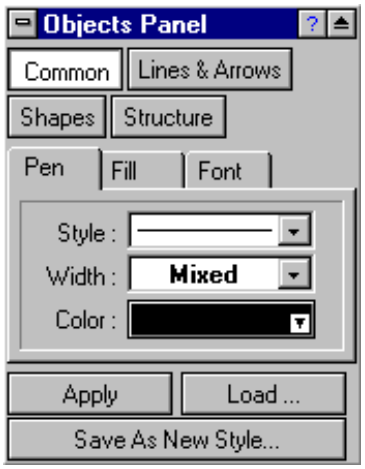
本章将主要讲解如下内容：

- 改变一个物体的样式；
- 保存样式；
- 设置默认样式。

13.2 改变对象样式

第10章中, 在讲解如何画DNA链和轨道时,我们对改变物体的样式做了简单的介绍。本节讲解的是一般方法。

1. 转换到绘图模式下。
2. 选定要做修改的对象。
3. 双击选定的物体,得到 **Objects** panel(物体窗口)。不同对象的对象面板具有不同的标签(形状,线性物体,箭头,文字,谱图,表格或者结构)：



4. 当所有选项都重新选定后,点击应用键(**Apply**) 。

注意：从普通设置(**Common**)改变的设置适用于所有的物体。例如,将铅笔(pen)颜色设为红色,那么它将影响形状,线和结构.如果是在形状(**Shapes)**下改变的设置,它将只影响形状。

13.3 保存样式

您创建的样式可以被保存：

1. 点击 **Objects** 对话框中的保存新样式(**Save As new Style)** 。
2. 在出现的保存用户样式对话框中(**Save User Style),**选择需要的项目.例如, 如果您要创建一个文字样式,选择字体**(Font Style)**和段落**(Paragraph Style)** 。
3. 输入样式的名称,点击 **OK**。 这样,这个样式将被保存到样式表中,以后可以应用。

13.4 应用现有样式

您可以对任意对象应用保存的模板（安装的和用户定义的皆可）。

1. 选择要做改变的物体。

2. 在选定的物体上双击得到 **Objects** 对话框。

3. 点击 **Load,**从样式表中选择所需的样式。样式属性将被载入面板中。

4. 点击应用 **Apply**。

13.5 设置默认样式

从工具菜单(**Tools**)使用命令可以将选项默认样式属性可置入特殊样式面板：

- 铅笔样式(Pen Style Panel)
- 填充样式(Fill Style Panel)
- 箭头样式(Arrow Style Panel)
- 字体(Font Panel)
- 段落(Paragraph Panel)
- 表格（Table Panel）

在以上各项中设定的设置直接变成默认设置。

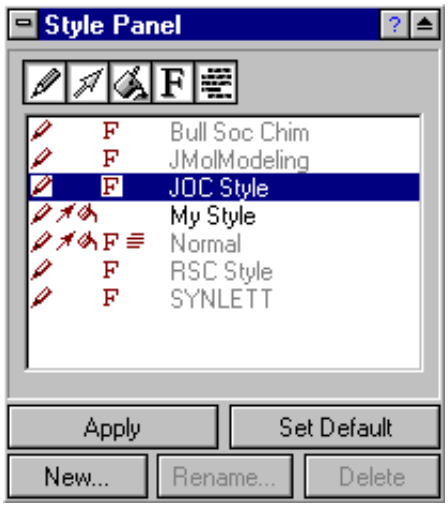
选择任何一个现有的样式设置,点击 **Load** 键, 这个设置将应用于所有的样式选项中,并自动变成默认设置。

您也可以将已经画好的物体的样式直接设定为默认。 点击 **Update From** 键,然后点击物体,这个物体的所有样式将装载到样式板中,并自动设置为默认设置。

注意：如果您要改变某一个物体的样式,但并不想改变默认设置,使用 **Objects** 面板(详情请参阅 13.2 节)。

13.6 管理样式

从工具菜单(**Tools**)中选择样式组织板(**Style Organizer Panel**),然后就可以进行样式的管理了(保存,应用,重新命名,清除或者设置默认样式等):



在该面板上，您可以进行以下操作：

目的	操作步骤
查看含有某一种样式项目(铅笔，箭头，填充，字体，段落)。	点击样式板顶部相应的键。
查看样式的所有选项。	点击样式板上部的所有选项键,选定所有项目：
在选定的物体上应用样式.	选定所需的样式,点击应用键(**Apply**)。
设样式为默认样式。	选定所需的样式,点击设置默认键(**Set Default**)。
在现有的默认设置的基础上,创建一个新的样式	点击新建（**New**）键。
重新命名样式	在表中选定您要改变名称的样式,点击 **Rename** 键,注意:灰色的样式名为随机样式,不能改变名称。
清除样式	选定相应的样式,点击清除(**Delete**)键，注意：灰色的样式名为随机样式,不能清除。

14. 创建汇报模型

14.1 目标

ACD/报告模型是被用在它的基础上产生一个模型而且产生标准报告而非为每项报告重复一样的编辑程序的一个特别的工具。目前，您可以在 ChemSketch 中来实现。ACD/ChemSketch 让您能够创建含有由 ACD/SpecManager 组建支持的 1D，2DNMR，MASS，UV-IR，CURVE 和 CHROM 数据的报告模型。以后，我们将扩大允许创建基于模板的报告程序的名单。使用报告模板工具将帮您轻松适合共同标准。

使用 ACD/报告模型，您能够安排多个在一页或几页中属于一个或多个光谱/曲线/色谱的 ACD/SpecManager 对象（譬如表格，图标，参数，结构以及其他）。

如果您没有上面提到的任一模块请您跳过这一章。

这一章您将学习到：

- 进入报告模型模式；
- 衡量要插入表格中的信息，决定该包含的对象；
- 在模型中插入对象；
- 给每个对象标记性质；
- 将对象进行合理排布直到满意，
- 将模型作为一独立文件保存。

14.2 关于汇报模型

各块报告模板包括所谓的模板对象，或对象，每个被分配到某一 SpecManager 项目(光谱，表格，化学结构...) 或其它项目(文本标签) 并且有调控这些项目显示的某些性质。很大程度上，这些性质被关联以 SpecManager 性质相对应的模块。如果模板对象有不同的标识号或标识部分，他们涉及到不同的 SpecManager 文件。如果没有标识部分被分配，模型中的所有对象都涉及到同一 SpecManager3 文件。

当做一个位图插入你的公司图形进入以型型为基础的报告是可能的(该如何插入一个位图，见报告模型帮助的对应主题)。

而且，当基于模型的报告准备好后，您可以使用通过双击调出的标准 ChemSketch 对象面板轻易的插入适当的修改。

报告模型可以通过绘制工具栏（绘图模式）上的报告模型键来访问。

14.3 输入汇报模型

您可以通过许多 ACD/Labs 应用程序的模型来创建报告。

1. 转换到绘图模式下。
2. 点击工具栏最左边的报告模型。注意信息光标出现了。

那里有大量关于如何插入报告模型的大量信息。让我们通过一个示例来了解报告模型。

14.4 插入模型对象

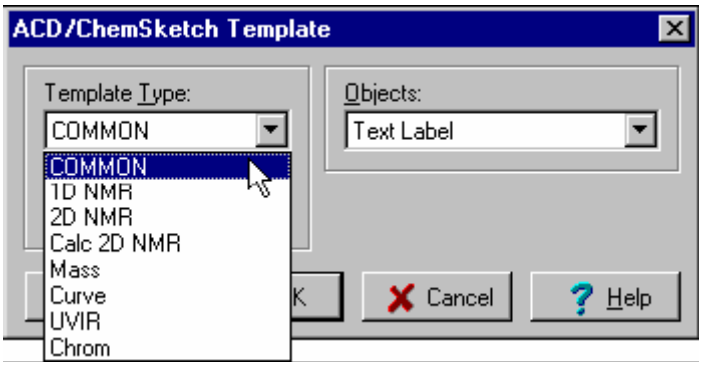
1. 当报告模板被打开时，鼠标指向工作区的左上角通过拖拽来定义

第一个模型对象的尺寸。



注意：不用为模型窗口的尺寸而担心，因为您可以稍后对其进行修改。

2. 当您释放鼠标后，ACD/ChemSketch 模型窗口出现了。模板类型列表包含了所有您计算机上安装了的 SpecManager 模块，COMMON 类型（默认选择的）。根据选择的模型类型的不同，对象列表有所不同。



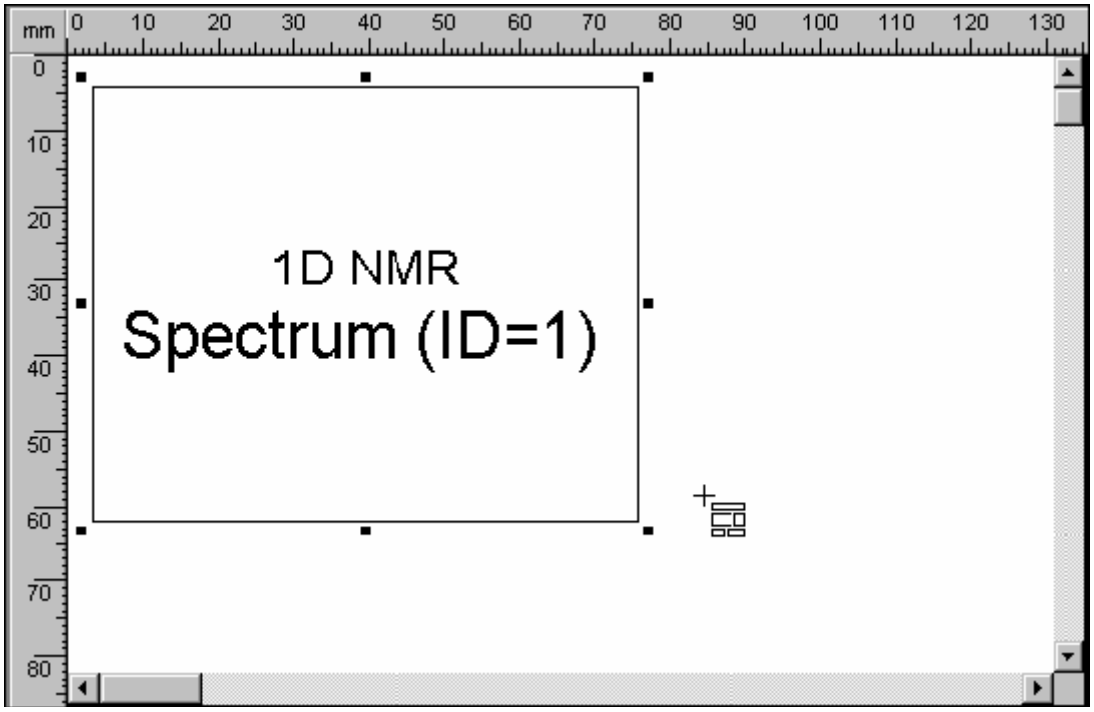
注意：当您在类型列表中选择不同的模型，ChemSketch 工作区中的提示将会相应的改变以提示您将要创建的模型。

3. 现在，我们为 1DNMR 和 2DNMR 模块来创建模型。当然，若您没有 SpecManager 的这些模块，可选择其他模型类型来替代。在模型类型的列表中，选择 1DNMR，然后在对象列表点击光谱。注意工作区中的对象相应的改变了。在标识框中，输入或选择“1”来提交对象至同一标识的光谱文件。

注意：关于如何为 SpecManager 文件指派标识，参见相应的报告模型帮助主题：如何基于报告创建模型。报告模型帮助是 ChemSketch 帮

助和 SpecManager 帮助的一部分。

4. 在 ACD/ChemSketch 模型对话框中，点击 OK。对话框被关闭但报告模型模式仍处于激活状态。

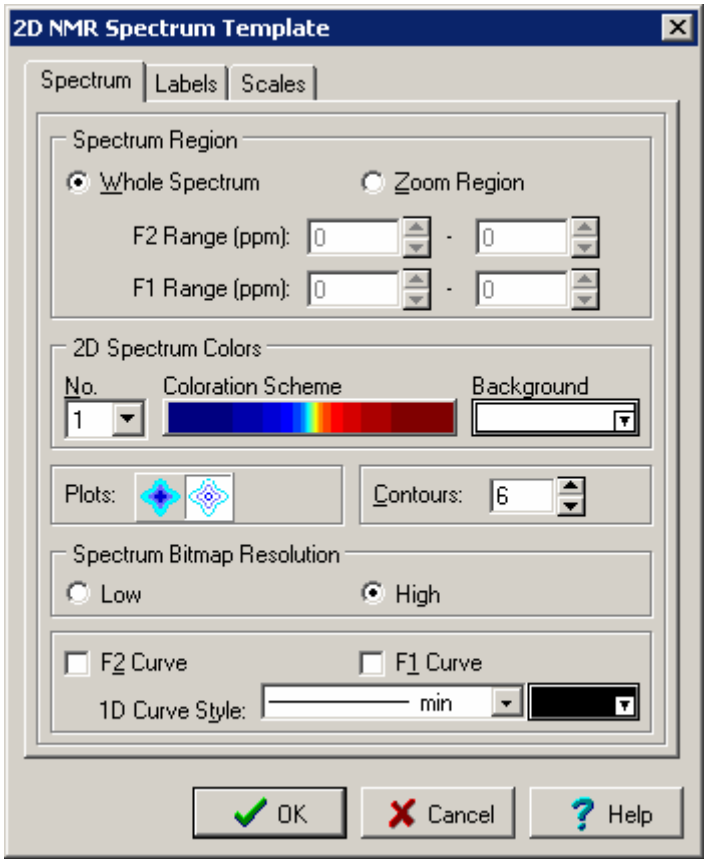


5. 在工作区向第一个对象的右边拖拽出近似相同尺寸的第二个模型对象。ChemSketch 模型对话框再次立即出现。
6. 在模型类型列表中，点击 2DNMR 然后在对象列表中选择光谱。从而，我们为 2DNMR 光谱分配了一个区域。由于该光谱可能在其他光谱文件中，我们需对其指派一个标识。在标识框中输入或选择“2”。

注意：若您已有一个 SpecManager 模块，一个模块的相关类型，因此可两次插入同一类型的光谱/色谱/曲线，但是要对它们指定不同的标识。当根据此模型的报告被创建，您将可以插入同一类型的两个不同光谱。

14.5 设定显示参数

1. 点击设置Settings...为 2DNMR 光谱设定光谱显示模式。

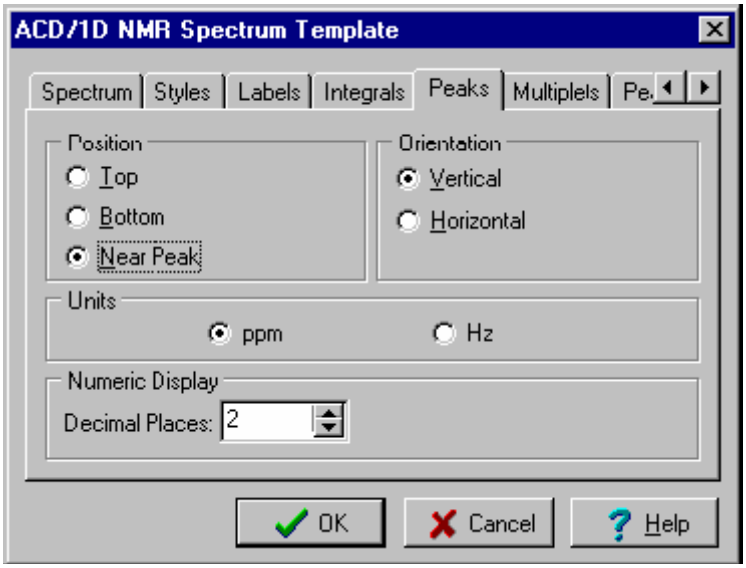


注意：每次您在 ChemSketch 模板对话框中点击设置Settings...，将出现一对应于当前模型对象的对话框。各个模板对象有包括对应的对话框的固有选项设置。如果您为一个另外模块打开光谱模型对话框，它自然地将看起来不同。然而，这些对话框在对应的组件中包含与参数设置对话框相同的选项。得到关于选项的更多信息，点击帮助。

2. 现在，我们对多数模块的共同显示参数进行设置。在光谱区区域中，点击整个光谱。 这种情况下，整个的光谱将会被插入依照这一个模型被做的报告中。

注意：若您选择光谱区，仅有一缩放区被插入。

3. 转换到 Labels 和 Scales 标签下，若有需要，改变这些组件的设置。
4. 点击 OK 应用设置。
5. 在 ACD/ChemSketch 模型对话框下，点击 OK。对话框消失但报告模型模式仍为开启状态。而且第二个模板对象（2DNMR 光谱（ID＝2））仍被选中（周围有黑色节点）。
6. 双击第一个插入的模型对象将其激活显示出 ACD/ChemSketch 模型对话框。确保对象清单中，光谱选项被选中然后点击设置 Settings... 为 1DNMR 光谱定制参数选项。1DNMR 光谱模型对话框出现了。
7. 点击峰 Peaks 标签：

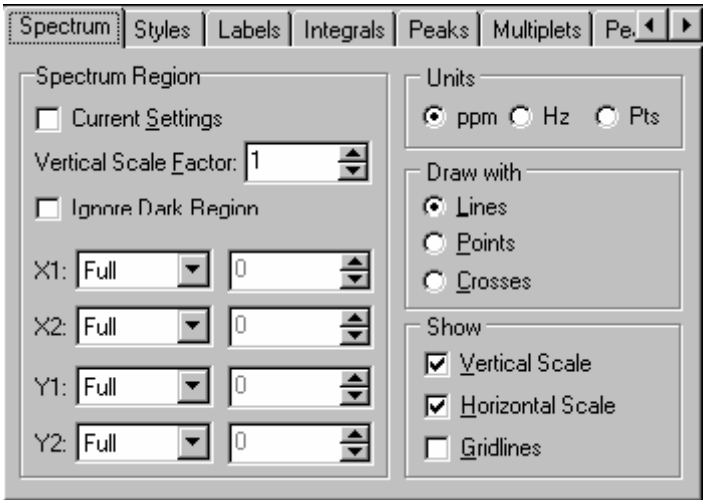


8. 指定峰标签的显示：在 Position 区域，点击 NearPeak，在 Orientation 区域中，点击垂直的。在 Numeric Display 区域，输入或选择“2”—— 在这种情况下，二个小数位将被显示在峰标签上。

重要：若在光谱中没有峰被选中来插入到将来的基于模型的报告，它们在光谱中将事不可见的。在其他选项中同样如此（积分，多重谱线，

曲线…）。

9. 点击光谱（Spectrum）标签。在光谱区域中，设置 X1，X2，Y1 和 Y2 选项至 Full，然后在显示区域，选择 Vertical Scale 和 Horizontal Scale 复选框。

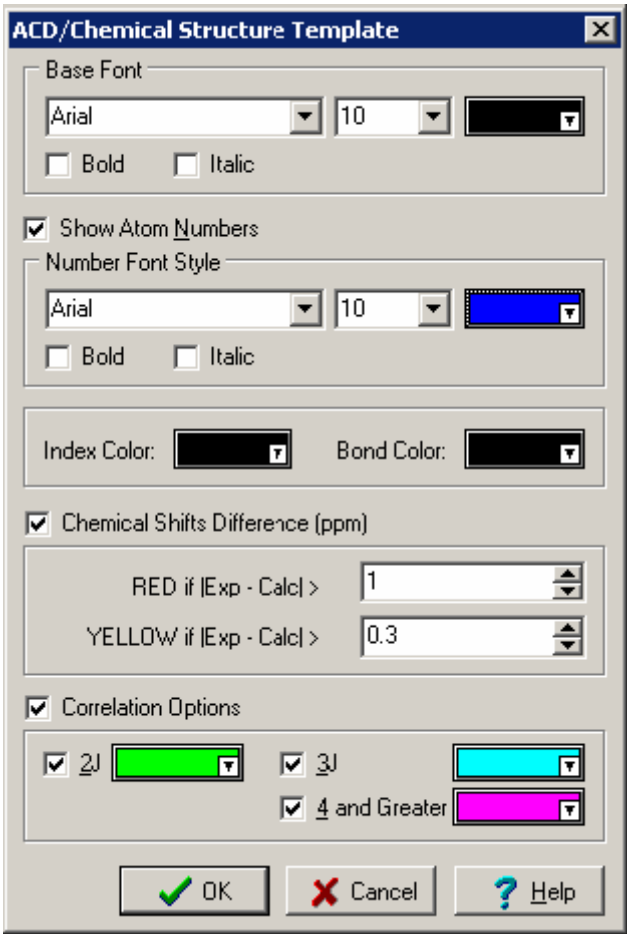


注意：尽管如此，当设置显示参数时，您不查看任何直接结果，这些设置将被程序保存并置入相应的模型对象中。

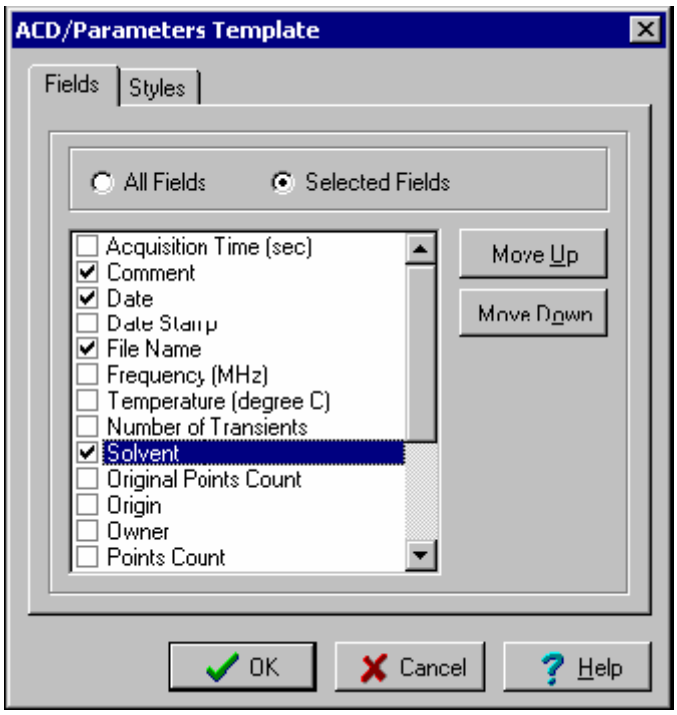
10. 浏览您的相关模块对话框中的标签找到其他可用选项。获得更多细节，请点击帮助（Help）。若有需要，设置其他选项点击 OK 进行应用。

11. 在 ACD/ChemSketch 模型对话框中点击 OK 将其关闭。

12. 为 1DNMR 模型类型选择报告模型工具，插入标识为 1（ID＝1）（参见 14.4 中的介绍以获得帮助）。在 ACD/ChemSketch 模型对话框中，点击设定来定义 Settings... 结构显示：

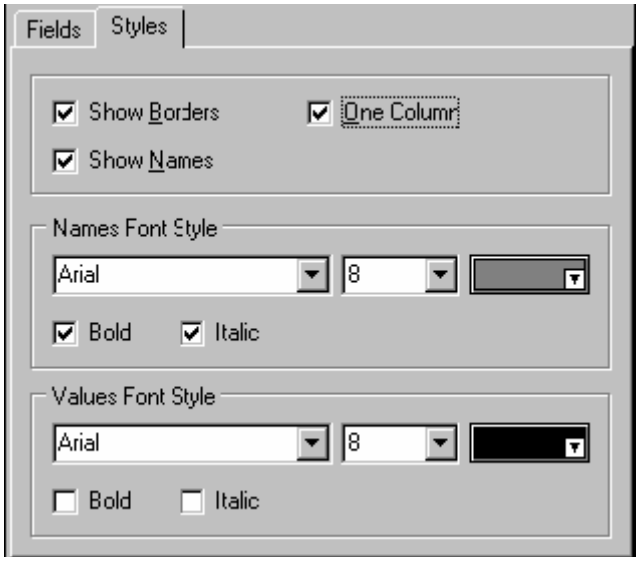


13. 在 Base Font 区域，为绘制的结构设置字体，字号及颜色参数。点击化学键颜色框来显示调色板，然后选择键的颜色。选择指示原子个数复选框，然后在数字字体下为原子数设置适合的字体。点击 OK 将两个对话框都关闭。
14. 现在，再插入一个 1DNMR 类型的对象——标识为 1 的光谱参量。点击设定 Settings... 来定制报告中光谱参量的显示。
15. 参量模型对话框中的 Fields 标签让您选择您想要再依照一个模型而做的报告中出现的那些光谱参数而且再选择参数的显示次序中调节。在对话框的顶端选择 Select Fields 选项然后清除除注释，日期，文件名及解决方法以外所有复选框。其余仍被选中的选项将被插入报告中。



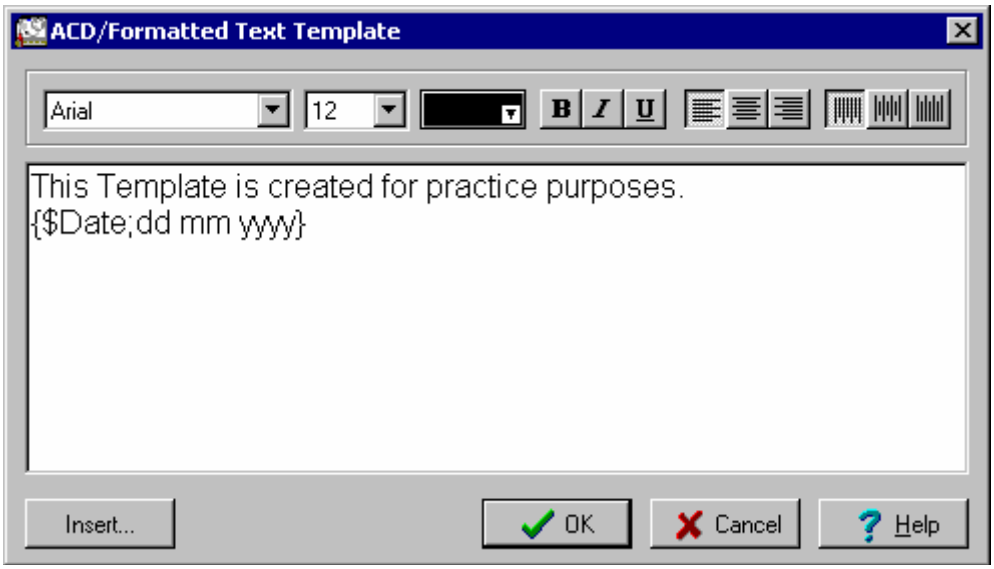
注意：您可以使用向上 Move Up 和向下 Move Down 按钮来重新安排该区域的顺序。

16. 点击类型（Styles）标签。选择指示边界（Show Borders）复选框来指示每个名称-值对（Name-Values pair）之间的边界，否则仅会显示值（Values）。选择 One Coluimn 复选框来显示一纵队的参数：一个名称-值对下面接一个名称-值对：



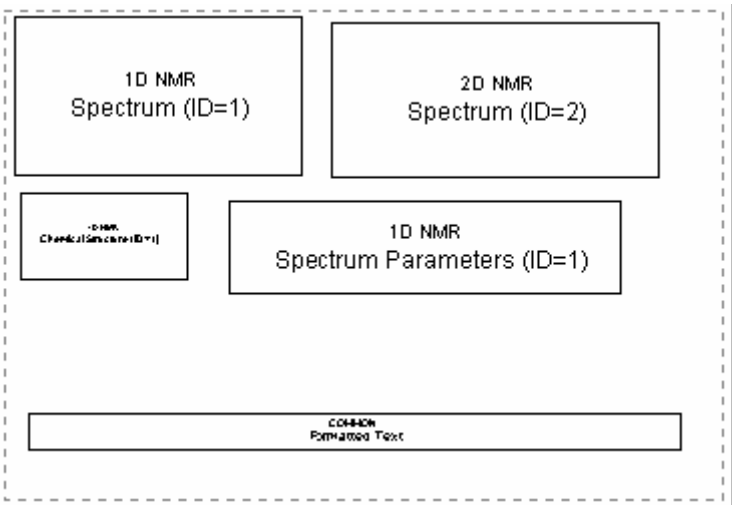
17. 在两个对话框中点击 OK。

18. 现在我们来添加署名。打开报告模型工具使用 14.4 节中的说明，沿着模型的底部边缘插入一个长而窄的方框。在出现的 ACD/ChemSketch 模型对话框中，选择模板类型列表中的 COMMON，再在对象列表中点击格式化文本。点击设置 Settings... 。
19. 格式化文本模型对话框出现。使用该对话框，您可以添加任意文本信息到模型中，添加的文本将会出现在根据该模型做成的任何报告中。您要根据这一模型创建并键入一些能够表明该系列报告特色的文字，比如：“This Template is created for practice purposes”，然后点击插入 Insert... 按钮，它将为您自动插入日期，时间，页码或任何用户定义标记。在 Select Field 对话框中，在名称列表中选择日期，然后点击 OK。设置字体和对齐参数。



注意：对齐按钮在被格式的文本模型对话框的最上方的右手边，用以调整文本的水平对齐  （在左边的边界上方，在边界之间,分别在右边的边界上方）和垂直对齐  （超过顶部边界，在边界之间,在底部的边界上方）。这里的边界是指模型对象的边界。

选择，在您的 ChemSketch 的工作区中应该有类似如下的东西了：



14.6 编排模型对象

所有的模型对象被插入之后，再按所需尺寸将它们进行合理编排到完全合适。

1. 转换到选择/移动/调整工具。
2. 选择您要移动的对象。
3. 指向模型对象中即会出现移动指示器。现在您可以通过拖动鼠标将该对象重新安置。
4. 指向任意节点相应的调整指示器就会出现。您可以通过拖动鼠标来调整该对象的尺寸了。
5. 按以上方法，根据您的需要对模型中的其他对象进行调整和编排。

14.7 保存和应用汇报模型

一旦一个模型做好了，您就需要将其保存为一个*.SK2 文件，否则，您以后将无法使用它。

1. 从文件菜单中选择另存为调出文件另存为的对话框，然后为文件

选择目录和名称。

2. 转换到处理器窗口。
3. 打开您要保存报告的文件夹，然后在编辑菜单中指向创建报告，选择依据模型；从编辑菜单指向将报告输出为 PDF（*仅限商业版!*），并选择依据模型；或从文件菜单，指向打印报告，然后选择依据模型或点击相应的按钮。
4. 在选择汇报模型对话框中，选择您保存的模型的目录和名称。
5. 当报告被创建后，将会自动切换到 ChemSketch 窗口。若有需要，可以通过双击对象打开对象面板对报告进行编辑。

关于创建以模型为基础的报告的进一步细节，请参见 SpecManager 的对应组件上的用户指南或浏览相应的 SpecManager 帮助主题。

提示：若您想在保存模型前试验模型，看看 ChemSketch 标题栏发现 ChemSketch 给当前模型的名称。