第一图书网, tushu007.com

<<ChemOffice 2008实用教程>>

图书基本信息

书名：<<ChemOffice 2008实用教程>>

13位ISBN编号：9787122064097

10位ISBN编号：7122064093

出版时间：2009-9

出版时间：化学工业出版社

作者：曾炜，孙延辉，李红霞　编著

页数：285

字数：462000

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：http://www.tushu007.com

前言

在信息技术日益发展的今天，化学化工软件已成为相关专业工作者日常工作中不可或缺的基本工具。
它不仅可以解决化学计算中的复杂问题，而且可以利用虚拟的程序模拟化学世界的微观结构，并可以将微观结构的光谱形态等形象直观地展示出来，因此熟悉常用化学化工软件并掌握其使用方法便成为相关专业工作者必备的技能之一。

ChemOffice Ultra是美国剑桥软件公司研究和开发的一款化学专业应用软件，是目前世界上最优秀的桌面化学软件之一。
它集强大的应用功能于一身，提供了优秀的化学辅助系统，可使化学工作者的日常工作更加便捷。
经过多年的发展，ChemOffice系列软件已经成为国内、外化学化工领域的常用软件。
迄今为止，该软件已经发布了11个版本，目前最新版本为CambridgeSoft ChemOffice Ultra 2008（简称ChemOffice 2008）。

ChemOffice 2008主要包括ChemDraw（化学结构绘图）、Chem3D（分子模拟分析绘图）和ChemFinder（化学信息搜寻整合系统）模块，此外还加入了E-Notebook、BioAssay Pro、量化软件MOPAC、Gaussian和GAMESS的界面，ChemSAR、Server Excel、ClogP、BioViz、CombiChem/Excel等一系列完整的软件。

在ChemOffice 2008套件中，ChemDraw模块是世界上最受欢迎的化学结构绘图软件之一，是绘制化学结构最快速、最精确的工具，是各期刊杂志指定的化学结构绘图格式软件；Chem3D模块是提供工作站级的3D分子轮廓图及分子轨道的特性分析，并能和数种量子化学软件结合在一起的软件；ChemFinder模块是进行化学信息搜寻整合系统的软件，它既可以建立、储存及搜索化学数据库，也可以与ChemDraw、Chem3D联合使用，还可以使用现成的化学数据库。

目前，ChemOffice在国内的应用主要集中于ChemDraw、Chem3D及ChemFinder模块，本书即由此入手，分3部分对ChemOffice进行介绍。
其中，第1～4章主要介绍ChemDraw基础知识、如何绘制化学结构式、反应式、反应流程图等多个方面的内容，以及如何采用ChemDraw对化学结构式进行相关的物理、化学性质方面的表征等；第5～8章主要介绍Chem3D基础知识、如何绘制化学结构式的立体结构形式，以及用MOPAC、Gaussian或GAMESS运行半经验计算以及预测分子轨道的形状等；第9章主要介绍如何利用ChemFinder查询现有的化学信息、建立本地化学查询数据库等多方面的应用。

本书实例丰富，图文并茂，使软件的使用方法更为直观易懂，方便用户学习。
本书可作为化学化工专业人员学习ChemOffice 2008的入门与提高的书籍，也可作为大专院校应用化学、材料学、生物医药等专业教师及学生、科研部门的化学工作者、各单位化学技术人员及化学界的其他相关人士学习ChemOffice 2008的教材或教学参考书。

内容概要

本书主要介绍利用ChemOffice 2008进行化学结构绘图、分子模拟以及化学信息搜寻整合等方面的内容。
其中，详细介绍了绘制化学结构式、反应式、反应流程图，绘制化学结构式的3D图形，进行半经验计算以及预测分子轨道的形状、查询现有的化学信息、建立本地化学查询数据库等多方面的内容。
各部分内容的介绍既有软件的应用与操作方法和技巧，又融入了ChemOffice基础知识和要点，还通过大量实例具体说明操作与绘图过程，语言通俗易懂、实例丰富、图文并茂，方便用户学习。
　本书可作为化学化工专业人员学习ChemOffice 2008入门与提高的书籍，也可作为大专院校应用化学、材料学、生物医药等专业教师及学生、科研部门的化学工作者、各单位化学技术人员及化学界其他相关人士学习ChemOffice 2008的教材或教学参考书。

书籍目录

第1章 ChemOffice基础知识 1.1 什么是ChemOffice 1.2 发展历史 1.3 应用领域 1.4 组件 1.4.1 ChemDraw 1.4.2 Chem3D 1.4.3 ChemFinder 1.5 新增功能 1.6 如何获得帮助 1.7 安装与启动 1.7.1 系统配置要求 1.7.2 系统的安装、启动与退出 1.8 其他化学绘图软件 第2章 ChemDraw操作基础 2.1 ChemDraw的工作环境 2.1.1 工作界面 2.1.2 标题栏 2.1.3 菜单栏 2.1.4 工具栏 2.1.5 图形工具箱 2.1.6 编辑/绘图区 2.2 文件基本操作 2.3 绘图操作基础 2.3.1 图形基本操作 2.3.2 “ Undo ”和“ Redo ”命令 2.3.3 插入对象 2.4 自定义ChemDraw的工作界面 2.4.1 页面参数的设置 2.4.2 文档的设置 2.4.3 工具条的显示与隐藏 第3章 利用ChemDraw绘制图形 3.1 绘图工具 3.1.1 键工具简介 3.1.2 绘图工具的使用 3.1.3 绘图实例 3.2 文本的操作 3.2.1 文本的输入 3.2.2 文本的编辑 3.2.3 原子标记 3.3 绘制箭头、弧及其他图形 3.4 绘制结构式 3.4.1 绘制普通化学结构式 3.4.2 绘制反应中间体 3.4.3 绘制复杂环结构 3.4.4 绘制Fischer投影式 3.4.5 绘制透视图 3.4.6 绘制Newman投影式 3.4.7 绘制立体化学结构式 3.5 绘制反应式 3.5.1 绘制反应方程式 3.5.2 绘制反应历程 3.6 轨道和化学符号 3.6.1 轨道工具简介 3.6.2 轨道工具绘图实例 3.6.3 化学符号工具简介 3.7 绘制生物分子 3.7.1 生物分子模板工具简介 3.7.2 绘制DNA/RNA分子图像 3.7.3 绘制β-麦芽糖酶（β-Maltose）结构 3.7.4 绘制DNA双螺旋结构 3.8 绘制简单的反应设备 3.9 绘制TLC图形 3.10 化学查询工具 3.10.1 化学查询工具简介 3.10.2 化学查询工具的使用 3.11 高级绘图技巧 3.11.1 结构展开与调整 3.11.2 名称与结构之间的转化 3.11.3 俗名的使用 3.11.4 多中心结构与多连接标记 3.11.5 图形颜色调整 3.11.6 获取结构式的3D图形 3.12 综合实例 3.12.1 苯亲电取代反应进程－位能变化曲线图的绘制 3.12.2 立体化学反应历程的绘制 第4章 ChemDraw的扩展功能 第5章 Chem3D操作基础 第6章 Chem3D模型的建立及操作 第7章 化学计算 第8章 Chem3D综合实例 第9章 ChemFinder操作基础

章节摘录

第1章 ChemOffice基础知识　1.1　什么是ChemOff i ce　美国剑桥公司的ChemOffice软件是一款优秀的化学软件，它集强大的应用功能于一身，目前正被无数科学工作者使用。
ChemOffice软件是针对专业化学绘图所设计，可以绘制各式各样的化学键、环、轨道等，并可以与软件中的数据库链接；对于不明的结构组织，可以通过输入适当的搜寻条件，查出可用的结构式；可以将化合物名称直接转为结构图，省去绘图的繁琐；也可以对已知结构的化合物命名，给出正确的化合物名称。
ChemOffice完整的应用系统涉及各个研发领域，从合成路线、化合物库设计、药物合成、细胞试验到结果和报告分析。
另外，也可以利用此软件所提供的样板功能，大幅缩短制作文件所需花费的时间。
ChemOffice作为一款优秀的化学软件，将使化学研究人员的研究工作达到一个新的高度。
1.2　发展历史　从1985年美国剑桥公司发布第一个ChemDraw 1.0以来，该公司几乎每年都会推出包括Windows和Macintosh的新版本。
但是除ChenDraw外，ChemOffice的其他组件只适合在Windows操作平台下使用。
Macintosh用户可以购买ChemDraw软件，其中包含最新、最有特点的ChemDraw版本。
从l994年开始，ChemOffice的功能更加完善，所包含的组件基本涵盖了桌面化学软件的各个方面，如图1—1所示。
迄今为止，ChemOffice已经发布了11个版本。
目前，ChemOffice的最新版本为ChemOffice 2008，主要包括ChemDraw（化学结构绘图）、Chem3D（分子模型及仿真）和ChemFinder（化学信息搜寻整合系统）。
此外还加入了E-Notebook、BioAssay Pro、量化软件MOPAC、Gaussian和GAMESS的界面、ChemSAR、Server Excel、CLogP、CombiChem/Excel等。
ChemOffice Pr0还包含了全套ChemInf0数据库，包括ChemACX、ChemACX—SC、Merck索引和ChemMSDX等一系列完整的软件。

编辑推荐

优秀的软件：集成分子结构绘制、计算、预测及数据库的建立、检索等功能　全面的讲解：涵盖三个主要功能模块，图文并茂地介绍软件的使用方法　丰富的内容：凝聚作者多年的学习心得、使用经验及技巧　轻松的学习：内容编排由浅及深，易学易用　《ChemOffice 2008实用教程：化学结构绘图、分子模拟、数据整合》主要内容　ChemOffice基础知识 软件功能及其安装、启动方法　ChemDraw操作基础 Chem Draw的工作界面、文件及绘图的基本操作　利用ChemDraw绘制图形 利用键工具及各模板工具绘制结构式、反应式等　ChemDraw的扩展功能 预测分子的物理化学性质、IR光谱、NMR谱图及进行结构式与名称间的转换等　Chem3D操作基础 Chem3D的工作环境、文件和图形的基本操作　Chem3D模型的建立及操作 绘制分子的3D模型，实现2D模型与3D模型之间的转换　化学计算 利用MOPAC、Gat．Jssiafl、GAMESS等运行半经验计算以及预测分子轨道的形状等　Chem3D综合实例 通过三个实例介绍利用Chem3D预测IR光谱、NMR谱图及过渡态能量的计算方法　ChemFinder操作基础 检索现有的化学信息、建立个性化的化学检索数据库等

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:http://www.tushu007.com