

# 化学结构绘制软件

李 军

(中国科学院青海盐湖研究所西安二部, 陕西 西安 710043)

**摘要:** 简要介绍国际广泛使用的计算机化学结构绘制软件, 并提供各软件的网址。

**关键词:** 化学结构; 软件

**中图分类号:** TP311

**文献标识码:** E

**文章编号:** 1008-858X(2001) 02-0071-02

随着计算机的广泛运用及计算机功能增强, 用计算机绘制分子的化学结构已经成为现实。当今世界上有多种化学结构绘制软件, 其中一些是免费使用, 这些软件给化学家们提供了便利的工具, 可以直观地展示分子的结构。在提交论文发表时, 很多刊物都明确要求提供计算机绘制的分子结构图。

化学结构绘制软件不仅是化学家们进行科学研究的辅助工具, 同时也成为学生在学习过程中的工具, 国外的一些教科书包括了这样的软件, 它们可以提高学习兴趣, 增强对分子结构的直观形象了解。

本文简要介绍国际广泛使用的计算机化学结构绘制软件, 并提供各软件的网址, 感兴趣的读者可以直接到那些网址下载免费或演示版的软件。

## 1 ChemDraw

Chemdraw 是世界上使用最多的大型软件包 ChemOffice 中的一个组件, 其它两个组件包括 Chem<sup>3</sup>D(分子模型与分析) 和 ChemFinder(化学信息和结构检索)。这三个组件可以分别购买或者购买集成的软件包。剑桥软件提供了三种版本的 ChemDraw, 分别是 Ultro 5.0、Pro 5.0 和 Stand 5.0, 分别满足不同的需要。在其最高级版本 Ultro 5.0 版本中集成了 Beilstein 的结构, 即命名插件, AutoNom 2.1 除此之外, 其它插件包括给出有机化合物的<sup>13</sup>C 和<sup>1</sup>H NMR 光谱等。Pro 5.0 则是最广泛使

用的一个版本, 它提供了从直接的桌面出版到网络发布的多种格式输出。

## 2 ChemSketch

ChemSketch 是加拿大的软件公司 Advanced Chemical Development (ACD, [www.acdlabs.com](http://www.acdlabs.com)) 免费产品。其最新的版本是 4.0, 可从该公司的网站免费下载或购买 CD-Rom。在初次下载时需要提供电子邮件地址和下载口令。为使用户尽快掌握该软件, 用户可同时下载 PDF 格式的用户手册。

如果是仅仅绘制化学结构而不需要光谱信息和计算, 那么 ChemSketch 是一个不错的选择, 事实上, 在很多大学里该软件与多种化学教科书捆绑。

## 3 ChemWindow

ChemWindow 出自 Bio - Rad ([www.Bio-Rad.com](http://www.Bio-Rad.com)) 实验室, 该公司提供了两种版本, 需要光谱数据 Chemwindow Spectroscopy 6.5 和不需要光谱数据 ChemWindow 6 供用户选择。最新的 6.0 版提供了用于立体化学的 Newman 投影和 Angled 反应工具, 可以帮助绘制反应路径和绘制三维结构的多种工具; 而且支持 ChemDraw 的早期版本和 MDL 的 MOL 格式文件。在其 Sadtler Suite 软件包

收稿日期: 2000-09-04

作者简介: 李军(1965-), 男, 研究员。

(C)1994-2022 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. <http://www.cnki.net>

中, Bio-Rad 集成 40 年的光谱数据库的经验, 集化学结构绘制、光谱数据展示、解析预测等诸多功能, 因此, ChemWindow 在光谱学家中有很高的使用率。

#### 4 Chem<sup>4</sup>-D Draw

Chem<sup>4</sup>-D Draw 是 Chem Innovation 软件公司的产品( [www.cheminnovation.com](http://www.cheminnovation.com) )。该公司成立于 1995 年, 最新版是 5.0。除了化学结构的绘制功能, 该软件集成了 NamExpert 和 Nomenclator。前者可根据 IUPAC 命名自动产生化学结构, 后者可自动给出分子结构的 IUPAC 命名。此外还提供交互三维结构旋转, 支持 MDL 的 MOL 格式以及 Nomenclator 和 NamExpert, 可作为剑桥软件 ChemDraw 的插件。

表 1 化学结构绘制软件

Table 1 Chemical structure drawing software

| Software             | Version | PC or Mac | Free or Commercial | Description                                                                                                   | URL                                                                |
|----------------------|---------|-----------|--------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------|
| ChemDraw             | 5.0     | both      | Commercial         | Ultra <sup>5.0</sup><br>Pro <sup>5.0</sup><br>Stand <sup>5.0</sup><br>Part of<br>ChemOffice<br>suite<br>32bit | <a href="http://www.camsoft.com">www.camsoft.com</a>               |
| ChemSketch           | 4.0     | PC        | Free               | 16bit                                                                                                         | <a href="http://www.acdlabs.com">www.acdlabs.com</a>               |
| ChemWindow           | 6.0     | PC        | Commercial         | 32bit<br>ChemWindow<br>Spectroscopy<br>6.5<br>ChemWindow<br>6                                                 | <a href="http://www.bio-rad.com">www.bio-rad.com</a>               |
| Chem <sup>4</sup> -D | 5.0     | PC        | Commercial         | 32bit<br>Pro <sup>5.0</sup><br>Stand <sup>5.0</sup>                                                           | <a href="http://www.cheminnovation.com">www.cheminnovation.com</a> |
| ISIS/Draw            | 2.2.1   | both      | Free               | 32bit                                                                                                         | <a href="http://www.mdli.com">www.mdli.com</a>                     |

## Chemical Structure Drawing Software

LI Jun

( Qinghai Institute of Salt Lakes, Chinese Academy of Sciences, Xi'an Branch, Xian 710043, China)

**Abstract:** This article gives a brief introduction of software widely used across the world for chemical structure design and drawing, and the webaddress is provided.

**Key words:** Chemical structure; Software

#### 5 ISIS/Draw

ISIS/Draw 是作为 ISIS ( Integrated Scientific Information System) 构架 MDL 信息体系的免费软件提供给科研所或个人使用的。用户可以到该公司网站下载, 此外用户还可下载较早的用于 Window 3.1 和 PowerMac 版本的软件。

综上所述, 以上五种化学结构绘制软件提供了从免费的单独使用的软件到集成的软件包多种选择。它们的一些特点列在表 1 中, 供读者参考。这些软件均支持 OLE(PC), 可将绘制的化学结构作为对象插入诸如 Microsoft Word、Wordperfect 等字处理软件或幻灯制作软件中。