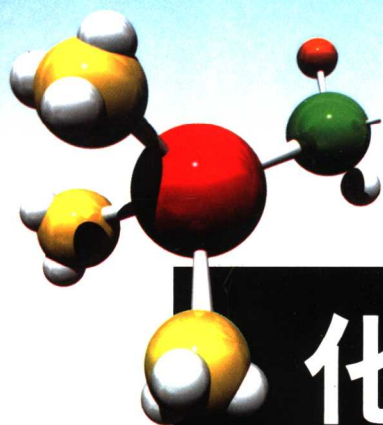




化学化工 常用软件 与应用技术

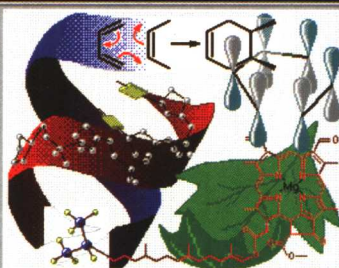
吕维忠 刘 波 韦少慧 编著



Copyright © 1994-1999
Advanced Chemistry
Development Inc.
All Rights Reserved

133 Richmond St. West
Suite 605, Toronto, ON
M5H 2L3 Canada

Toll-Free: (800) 304-3988
Tel: (416) 368-3435
Fax: (416) 368-5596
<http://www.acdlabs.com>



ACD/ChemSketch

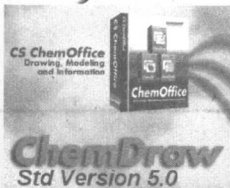
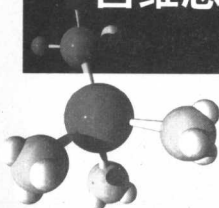


化学工业出版社

“深圳大学教材建设专项基金”资助

化学化工 常用软件 与应用技术

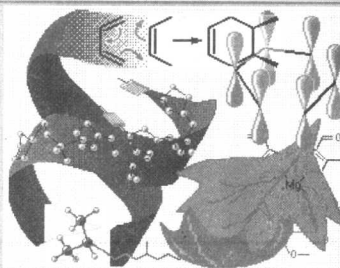
吕维忠 刘波 韦少慧 编著



Copyright © 1994-1999
Advanced Chemistry
Development Inc.
All Rights Reserved

133 Richmond St. West
Suite 605, Toronto, ON
M5H 2L3 Canada

Toll-Free: (800) 304-3988
Tel: (416) 368-3435
Fax: (416) 368-5596
<http://www.acdlabs.com>



ACD/ChemSketch



化学工业出版社

· 北京 ·

图书在版编目(CIP)数据

化学化工常用软件与应用技术/吕维忠,刘波,韦少慧编著.
北京:化学工业出版社,2006.11
ISBN 978-7-5025-9695-8

I. 化… II. ①吕…②刘…③韦… III. ①化学-应用软件
②化学工业-应用软件 IV. ①06-39②TQ-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006)第 136215 号

责任编辑:刘俊之
责任校对:顾淑云

文字编辑:云 雷
装帧设计:韩 飞

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)
印 刷:河南新丰印刷有限公司印刷
装 订:河南新丰印刷有限公司装订
787mm×1092mm 1/16 印张 11¼ 字数 294 千字 2007 年 1 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网址:<http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价:26.00 元

版权所有 违者必究

前言

随着计算机在各行各业的普及和发展,计算机在各行业中的应用也越来越广、越来越深、越来越专业。化学行业也不例外,化学软件发展突飞猛进,已经取得了长足的发展,在化学行业的作用也越来越大,很多以前只能靠手工书写的各类化学分子式、化学结构式、化学反应式现在都能应用各类化学软件输入和输出,不仅美观而且省时省力;以前很多只能用一些挂图以及模型表达的轨道模式图、能级图、三维立体结构图、实验装置图也能利用化学软件非常准确清楚地描绘,而且还可以旋转甚至动画、模拟,这不仅仅丰富了教师的教学手段,也使学生学习更加形象化、趣味化和生动化!

当代计算机硬件迅速扩展,性能迅速提高,为软件的发展提供了广阔空间,同时也对软件的要求越来越高。化学软件最近几年发展迅猛,应用计算机技术能解决的化学问题越来越多,从对物质结构进行剖析和表征,到分子的模拟与设计,这些化学软件已经成为化学工作者日常学习、工作、科研必不可少的工具,化学软件的相关信息也成为需要关注的内容,有必要加以整理;为此,深圳大学应用化学系在2004年开始在全校开出《常用化学软件及其应用》课程,目的就是为了让引导同学们乃至化学工作者关注常用化学软件,提高常用化学软件的认知能力、操作能力、应用水平。我们通过2004级、2005级、2006级三年在深圳大学试用教材的基础上,在听取广大师生意见和建议的基础上,正式编著了本书。

本书主要介绍常用化学软件及其应用技术技巧。本书重点介绍 Origin、ChemWindow、ISIS Draw、ChemDraw 以及 ChemSketch、正交实验助手等常用化学图文处理软件及其应用,着重介绍这些软件的基本功能以及基本使用技巧。这些内容是撰写化学论文或相关学科论文必不可少的计算机应用技术,也是进行计算机功能分子设计、电子结构与性质分析的重要基础。具有内容新颖、学(科)技(术)综合及实用性强等特色。

在本书的编写、试用、成书的过程中,得到许多软件公司(书中所列)的许可和协助,在此不一一列举,我谨代表本书所有编写人员向他们表示真挚的谢意。有些软件公司因为种种原因没有取得联系,书中对软件的表述以及评价如有不妥之处敬请谅解,并欢迎与我们联系以便在本书再版时更加完善。

本书主要由吕维忠负责编著。该书得以完稿,和我们应用化学系师生的辛勤劳动是分不开的,主要编著者还有刘波、韦少慧;另外本科生吕广辉、张济富、陈晓丹也为本书的输入、编排和核定作了大量的工作;华南理工大学化工与能源学院的涂伟萍教授、华南理工大学化学科学学院的钟振声教授、深圳大学的戈早川教授审阅了书稿并提出了不少有建设性的意见,在此一并表示感谢!此外,还要特别感谢深圳大学教务处处长徐晨教授、深圳大学教材中心王家衡副教授。

特别致谢:本书得到“深圳大学教材建设专项基金”资助。

本书适用于大专院校化学系、化工系、材料系、生物系教师,本科生、硕士生、博士生、科研院所的化学相关专业的从业者,工厂企业化学类技术人员以及化学界相关的其他各类人士。可以作为应用化学、精细化工、食品科学与工程、材料科学与工程、生物化学等与化学相关专业的教材使用。

由于时间仓促、作者水平有限,书中错误在所难免,欢迎广大读者批评指正。

吕维忠
2006年9月

目 录

第一章 化学化工常用软件介绍	1
第一节 化学结构式编辑软件	1
第二节 三维结构显示与描绘软件	1
第三节 数据处理软件	2
第四节 文献管理软件	2
第五节 图谱解析软件	2
第六节 计算机辅助化学教学	3
第七节 量子化学计算软件	3
第二章 Origin	5
第一节 Origin 基础知识	6
第二节 简单二维图	8
第三节 数据管理	13
第四节 绘制多层图形	16
第五节 非线性拟合	21
第六节 数据分析	24
第三章 ChemWindow	27
第一节 ChemWindow 软件的特点及功能	27
第二节 ChemWindow 的使用方法和技巧	28
第三节 ChemWindow 的基本应用	28
第四章 ISIS/Draw	37
第一节 下载和安装	37
第二节 启动和设置	37
第三节 基本使用方法及技巧	39
第四节 高级使用	44
第五节 界面介绍	46
第五章 ChemDraw	50
第一节 绪论	50
第二节 实例指导	61
第三节 化学结构的绘制	75
第四节 文本说明和原子标记	84
第五节 绘制轨道和化学符号	93
第六节 绘制箭头、弧及其他图形	97

第七节 选择应用	106
第六章 ChemSketch	116
第一节 引言	116
第二节 ACD/ChemSketch 基础	116
第三节 画简单的结构	122
第四节 画更复杂的结构	128
第五节 超级结构、简化线性分子式和化学反应式	132
第六节 高级画法: 模型	140
第七节 创建动画物体	147
第八节 结构模式中的样式功能(Styles)	158
第七章 正交设计助手	163
参考文献	170
后记	171

第一章 化学化工常用软件介绍

计算机作为一种化学化工学习和研究的工具有着不可替代的作用。它不仅能够帮助我们进行文字及图形处理等文书工作,而且还可以在化学学习与研究的各个方面协助我们更快、更好的工作。本章介绍一些常用的能在 PC 机上使用的化学类软件,以期能帮助读者在自己的学习和研究中做出有效、快速的选择。

第一节 化学结构式编辑软件

有关化学结构式编辑的软件市面上有很多,它们各有所长。既有商品形式的,也有对教育界及家用免费的。其功能主要是描绘化合物的结构式、化学反应方程式、化工流程图、简单的实验装置图等化学里常用的平面图形的绘制。常见的这类软件有 ChemDraw、ChemWindow、ISIS Draw 和 ChemSketch 等。前两个为商业软件,有关它们的资料可以查阅各自的网站 <http://www.camsoft.com> 和 <http://www.sadtlersuite.com>,最新版本分别为 6.0 和 6.5。后两个对教育界及家用为免费软件,可以在它们各自的网站 <http://www.mdli.com> 和 <http://www.acdlabs.com> 上下载,最新版本分别为 2.2 和 4.0。

ChemDraw 是当前最常用的化学结构式编辑软件,除了以上所述的一般功能外,其 ultra 版本还可以预测分子的常见物理化学性质,如熔点、生成热等;对结构按 IUPAC 原则命名;预测质子及碳 13 化学位移等。

ChemWindow 的一个最突出的特点是与光谱的结合,它的 6.5 Spectroscopy 版本包括了一个约五万张 ^{13}C NMR 的数据库(达 250 兆),因而其预测更加精确;除了根据化合物的结构预测 ^{13}C NMR 化学位移外,还能预测红外图谱、质谱等,更可以读入标准格式的 NMR、IR、Raman、UV 及色谱图。

这些程序虽然可以画出非常好的二维化学结构,但除了 ChemSketch 软件外,其他软件要表现出三维的化学结构则十分困难,必须依赖于一些专门的 3D 软件来实现。

第二节 三维结构显示与描绘软件

比较有名的化学三维结构显示与描绘软件有: Chem3D, WebLab Viewer Pro, RasWin, ChemBuilder 3D, ChemSite 等,它们都能够以线图(wire frame),球棍(ball and stick),CPK 及丝带(ribbon)等模式显示化合物的三维结构。其中的 RasWin 和 WebLab Viewer 的 Lite 版只能显示而无法编辑三维分子模型,为免费软件,RasWin 可以在几乎所有的化学软件站点找到,WebLab Viewer 的下载地址为 <http://www.msi.com>。

Chem3D 同 ChemDraw 一样,是 ChemOffice 的组成部分,它能很好地同 ChemDraw 一起协同工作,ChemDraw 上画出的二维结构式可以正确地自动转换为三维结构。它的 ultra 版本还包括了一个很好的半经验量子化学计算程序 MOPAC 97,并能与著名的从头计算程序 Gaussian98 连接,作为它的输入、输出界面。能够以三维的方式显示量子化学计算结果,如

分子轨道、电荷密度分布等。

WebLab Viewer 的 pro 版本表现生物分子和晶体结构的能力比较强。

第三节 数据处理软件

化学中的数据处理多种多样,对不同的数据处理要求宜采用不同的软件完成。通用型的软件如 Origin, SigmaPlot 等可以根据需要对实验数据进行数学处理、统计分析、傅里叶变换、t-试验、线性及非线性拟合;绘制二维及三维图形如:散点图、条形图、折线图、饼图、面积图、曲面图、等高线图等。Origin 的最新版本为 7.0,其演示版可以从 <http://www.originlab.com> 下载, SigmaPlot 的最新版本为 2000,其评估版可以从 <http://www.spss.com> 下载。

核磁数据处理软件有 NUTS、MestRe-C、Gifa 等, NUTS 可以处理一维及二维核磁数据,其功能包括傅里叶变换、相位校正、差谱、模拟谱、匀场练习等几乎所有核磁仪器操作软件的功能,安装程序不大(3M),价格为一千美元,其演示版可以在 <http://www.acornnmr.com> 下载; MestRe-C 为处理一维核磁数据的免费软件,功能完善。其最新版本为 2.3,有兴趣者可以在 <http://qobruue.usc.es/jsgroup/MestRe-C/MestRe-C.html> 处查看有关信息或下载; Gifa 可以处理一至三维核磁数据,为运行在 LINUX 操作系统中 X-Window 上的免费软件,有关信息可查看 <http://www.cbs.univ-montp1.fr/GIFA/>。

色谱及红外、Raman 等实验数据的处理可以使用 GRAMS/32,有关信息可查阅该公司的网页 <http://www.galactic.com>,也可索取免费的 trial CDROM。

第四节 文献管理软件

在收集参考文献过程中,文献管理程序可以帮助你整理、排列所收集的内容;在撰写研究论文的过程中,这类程序允许直接在文字处理过程中插入参考文献,并按要求自动生成规定格式的参考文献列表。这类程序中有代表性的有 EndNote 4、Reference Manager 和 ProCite 等,它们都能对文献进行整理,能在文字处理程序中直接插入参考文献并生成一定杂志规定格式的参考文献列表。所不同的是 EndNote 4 对中文版的文字处理程序(如 Word)的兼容性问题,导致 Word 不能正常启动。其他两个程序则无此类问题。有关程序的演示版或测试版可以在 <http://www.niles.com> (EndNote) 和 <http://www.risinc.com/> (Reference Manager 9.5, ProCite 5.0) 找到。

第五节 图谱解析软件

解析有机化合物的红外、核磁及质谱有时是一件非常困难的工作,特别是复杂化合物的图谱解析更是这样。

核磁图谱的解析可以先利用 ChemNMR, C13 Module for ChemWindow, gNMR 等软件对目标化合物的化学位移进行估算或作出模拟谱,用以协助对该化合物图谱的指认。ChemNMR 为 ChemDraw Ultra 版本的一个插件,可以用来估算大多数有机物的 ^1H 、 ^{13}C 化学位移及用线图表示的相应图谱, C13 Module for ChemWindow 为 ChemWindow 的一个插件,可以用来估算大多数有机物的 ^{13}C 化学位移, gNMR 则可用于估算任何 NMR 活性核的化学位移,并能画出非常逼真的图谱,该软件包所带的几个工具(gSPG, gCVT)也可用来处理一维核磁图谱数据,并能与模拟谱进行比较,有关该程序的信息及演示版可以查阅 <http://www.cherwell.com>, 二维核磁的解析可以使用 Sparky 程序,特别是对复杂 2D NMR 的

解析非常有用。IR Mentor Pro 及 IR SearchMaster 为专门用来辅助红外图谱解析的工具,它们能对给定的红外图谱数据进行自动分析与处理,或对给定的振动谱带给出可能存在的功能团,有关的演示版可以在 <ftp://ftp.softshell.com/pub/> 上下载。MassSpectra Simulator 为质谱模拟程序,其有关信息可以查阅以下网址

<http://members.aol.com/gjlinker>

此外,在 ChemWindow 6.0 Spectroscopy 版本中也有丰富的质谱分析辅助工具。

第六节 计算机辅助化学教学

利用计算机动画、多媒体等功能协助学习一些比较抽象的化学知识是一种非常有用的工具。这类的软件市面上非常多,不胜枚举。这里只介绍两个有关有机合成路线设计和有机化合物命名的工具。CHAOS 程序的出现比较早,是随《Organic Chemistry in Action》一起上市的,这个短小精悍的程序可以使用“逆序法”自动寻找目标物的合成原料,非常好用。

前面已经介绍了 ChemDraw 的 ultra 版本包括了有机物的 IUPAC 命名功能,那是因为其中包括了一个 Beilstein 公司的 AutoNom 2.0 命名软件;实际上,今年该公司推出了 AutoNom 4.0 版,其功能更强大,除了给出 IUPAC 名称外,还给出 CAS 名称,更增加了对立体化学的支持。该软件的演示版可以在 <http://www.beilstein.com> 站点下载。

第七节 量子化学计算软件

量子化学对分子结构与性质的解释与预测是任何其他工具所不能替代的。但对大部分的化学工作者来说,不可能、也没有必要去弄清楚量子化学计算的每一个细节,因为一般关心的只是其结果。与分子结构和性质的计算有关的程序逐渐成为化学研究中一个必不可少的工具。

WinMOPAC 是著名的半经验分子轨道 (AM1, PM3, MINDO, MNDO/3 等) 计算程序 MOPAC 的商业版本,同共享版相比,界面更友好,方法更多。计算出的分子轨道及电荷密度等可以用三维图形表示出来。WinMOPAC 的最新版本是 2000, 有关信息可查阅 <http://www.winmopac.com> 站点。

PC Spartan 为 WaveFunction 公司的产品,分为标准版、Plus 版及 Pro 版,功能依次增加,其计算方法包括: MM2, AM1, AM1 with Solvent, PM3, 从头计算等,也可将分子轨道及电荷密度等用三维图形表示。有关信息请查阅 <http://www.wavefun.com> 站点;此外,该公司还有一个 Titan 程序。

HyperChem 等功能比 PC Spartan 更强,包括常用的几乎所有分子力学及半经验分子轨道方法及多种基集的从头计算等,并能计算振动光谱、电子光谱、分子动态学等,所得结果可以用非常漂亮的三维图形表示出来。其网站为 <http://www.hyper.com>, 可以下载测试版。

Gamess 为一免费的从头计算程序,其速度快,并提供源程序。但其界面为 DOS 界面,必须用手工输入分子结构及计算相关的命令,比较烦琐。有关信息可查阅 <http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html>。

另外,有一个专门为 Gamess 设计的用户界面 Visualize,使得结构与命令的输入更简单,计算的结果可以三维图形方式表现出来。该软件亦为免费程序,可以在 <http://www.compbio.net> 上下载。

Gaussian 在量子化学界非常有名,支持常用半经验方法、从头算法及密度泛函理论,其用户界面不够友好。但可以在 Chem3D 加入 CS Gaussian Client 插件后简化用户的操作。有

关信息可查阅：

<http://www.gaussianinc.com>。

Jaguar 为 Schrodinger 公司给使用工作站（如 SGI, HP, DEC）及 LINUX 操作系统的 PC 所设计的从头计算及密度泛函计算程序，其速度特快，用户界面一般。其站点为 <http://www.schrodinger.com>。

Titan 为设计 PC Spartan 的 WaveFunction 公司与设计 Jaguar 的 Schrodinger 公司合作的结晶，该产品支持半经验方法、从头算法及密度泛函计算，用户界面友好。但功能相对较薄弱。

另外，由原 Oxford Molecular Ltd 开发，现被日本的 Fujitsu 公司收购的 CAChe 程序时专为实验化学家所设计，使用简单的量子化学程序，功能强大。但价格相对较贵。

第二章 Origin

本章结合大量实例,由浅入深、循序渐进地介绍了 Origin 软件的基本功能(函数拟合、数据管理、数据分析、二维和三维绘图、多层绘图等功能)和最新增强功能(文字、图形和分析等功能)。

Origin 是美国 OriginLab 公司(其前身为 Microcal 公司)开发的图形可视化和数据分析软件,是科研人员和工程师常用的高级数据分析和制图工具。自 1991 年问世以来,由于其操作简便、功能开放,很快就成为国际流行的分析软件之一,是公认的快速、灵活、易学的工程制图软件。在国内,其使用范围也越来越广泛,化学类学习及工作者需要处理大量的实验数据、数据制图和数据分析,本章主要是帮助读者快速掌握 Origin 的使用。

当前流行的图形可视化和数据分析软件有 Matlab、Mathematica 和 Maple 等。这些软件功能强大,可满足科技工作中的许多需要,但使用这些软件需要一定的计算机编程知识和矩阵知识,并要熟悉其中大量的函数和命令。而使用 Origin 就像使用 Excel 和 Word 那样简单,只需点击鼠标,选择菜单命令就可以完成大部分工作,获得满意的结果。

像 Excel 和 Word 一样,Origin 是一个多文档界面应用程序。它将所有工作都保存在 Project (*.opj) 文件中。该文件可以包含多个子窗口,如 Worksheet, Graph, Matrix, Excel 等。各子窗口之间是相互关联的,可以实现数据的即时更新。子窗口可以随 Project 文件一起存盘,也可以单独存盘,以便其他程序调用。

Origin 具有两大主要功能:数据制图和数据分析。Origin 数据制图主要是基于模板的,提供了 50 多种 2D 和 3D 图形模板。用户可以使用这些模板制图,也可以根据需要自己设置模板。Origin 数据分析包括排序、计算、统计、平滑、拟合和频谱分析等强大的分析工具。这些工具的使用也只是单击工具条按钮或选择菜单命令。

Origin 是一个复杂的应用软件,其中的各个部分相互交错,有机地结合在一起。本书结合大量的实例,本着由浅入深、由易到难、循序渐进的编排原则,全面地介绍了 Origin 的数据制图和数据分析功能。

第一节介绍了 Origin 的基础知识,包括 Origin 的工作环境,如菜单、子窗口、工具栏和项目管理器等,还包括 Origin 的基本操作,如打开、保存文件或子窗口,重命名子窗口等。这一节的内容比较零散,读者可以先浏览一遍,然后通过后面章节的学习来加深理解各个窗口、不同命令的功能和作用。

第二节介绍了二维绘图功能。主要内容包括把 ASCII 数据导入工作表,进行各种设置,然后根据工作表的数据绘制各种类型的曲线图。

第三节介绍了 Origin 的数据管理功能。主要包括数列变换、排序、选择数据范围绘图、屏蔽数据点和线性拟合等内容。

第四节介绍了 Origin 的绘制多层图功能。图层是 Origin 中的一个重要概念,一个绘图窗口中可以有多个图层,从而可以创建和管理多个曲线或者图形对象。本节的主要内容是介绍 Origin 自带的多层图形的创建与定制的方法。

第五节介绍了 Origin 的函数拟合功能。Origin 提供了 200 多个拟合函数,而且支持用户

定制。本节主要内容包括菜单命令和拟合工具的使用方法，非线性最小平方拟合合法自定义拟合函数。

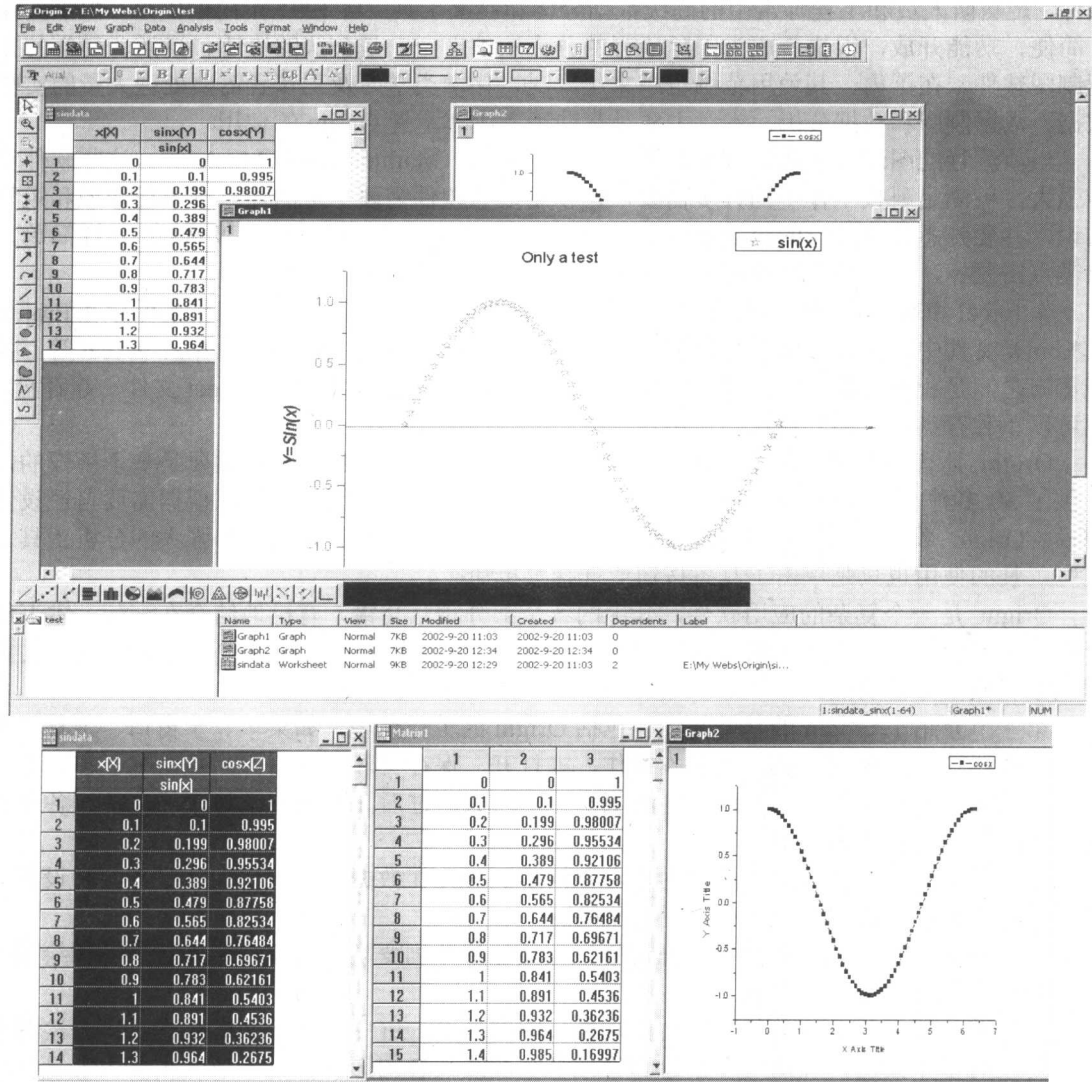
第六节介绍了 Origin 的数据分析功能。包括简单数学运算、统计（如 T-检验、方差分析等）、快速傅里叶变换、平滑和滤波、基线和峰值分析等。

第一节 Origin 基础知识

Origin 是美国 Microcal 公司推出的数据分析和绘图软件，现在的最高版本为 7.5，网址是 <http://www.originlab.com>。

它的特点是：使用简单，采用直观的、图形化的、面向对象的窗口菜单和工具栏操作，全面支持鼠标右键、支持拖拉方式绘图等。

Origin 有两大类功能，即数据分析和绘图。数据分析包括数据的排序、调整、计算、统



工作表

矩阵

绘图

图 2-1 类似 Office 的多文档界面

计、频谱变换、曲线拟合等各种完善的数学分析功能。准备好数据后,在进行数据分析时,只需选择所要分析的数据,然后再选择相应的菜单命令即可。Origin 的绘图是基于模板的,Origin 本身提供了几十种二维和三维绘图模板而且允许用户自己定制模板。绘图时,只要选择所需要的模板就行。用户可以自定义数学函数、图形样式和绘图模板;可以和各种数据库软件、办公软件、图像处理软件等方便的连接;可以用 C 语言或其他高级语言编写数据分析程序,还可以用内置的 Lab Talk 语言编程等。

一、工作环境

1. 工作环境综述

Origin 有类似 Office 的多文档界面(见图 2-1),主要包括以下几个部分。

- ① 菜单栏:窗口的顶部是 Origin 的菜单栏,一般可以实现大部分功能。
- ② 工具栏:在菜单栏下面,一般最常用的功能都可以通过此实现。
- ③ 绘图区:在窗口的中部,所有工作表、绘图子窗口等都在此。
- ④ 项目管理器:在窗口的下部,类似于资源管理器,可以方便切换各个窗口等。
- ⑤ 状态栏:底部,标出当前的工作内容以及鼠标指到某些菜单按钮时的说明。

2. 菜单栏

菜单栏的结构取决于当前的活动窗口。

工作表菜单如图 2-2 所示。

绘图菜单如图 2-3 所示。

矩阵窗口如图 2-4 所示。

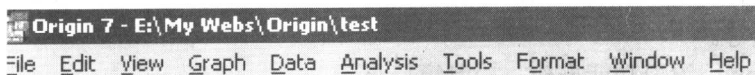


图 2-2 工作表菜单

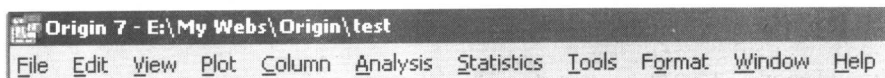


图 2-3 绘图菜单

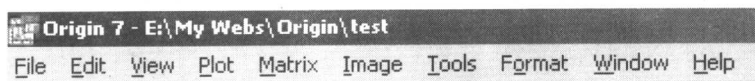


图 2-4 矩阵窗口

菜单简要说明如下。

- (1) File 文件功能操作。打开文件、输入输出数据图形等。
- (2) Edit 编辑功能操作。包括数据和图像的编辑等,比如复制、粘贴、清除等,要特别注意 undo 的功能。
- (3) View 视图功能操作。控制屏幕显示。
- (4) Plot 绘图功能操作。主要提供以下 5 类功能。
 - ① 几种样式的二维绘图功能,包括直线、描点、直线加符号、特殊线/符号、条形图、柱形图、特殊条形图/柱形图和饼图。
 - ② 三维绘图。
 - ③ 气泡/彩色映射图、统计图和图形版面布局。
 - ④ 特种绘图,包括面积图、极坐标图和向量。

⑤ 模板, 把选中的工作表数据导入绘图模板。

(5) Column 列功能操作。比如设置列的属性、增加删除列等。

(6) Graph 图形功能操作。主要功能包括增加误差栏、函数图、缩放坐标轴、交换 X、Y 轴等。

(7) Data 数据功能操作。

(8) Analysis 分析功能操作。

① 对工作表窗口: 提取工作表数据; 行列统计; 排序; 数字信号处理 (快速傅里叶变换 FFT、相关 Correlate、卷积 Convolute、解卷积 Deconvolute); 统计功能 (t-检验)、方差分析 (ANOVA)、多元回归 (Multiple Regression); 非线性曲线拟合等。

② 对绘图窗口: 数学运算; 平滑滤波; 图形变换; FFT; 线性多项式、非线性曲线等各种拟合方法。

(9) Plot3D 三维绘图功能操作。根据矩阵绘制各种三维条状图、表面图、等高线等。

(10) Matrix 矩阵功能操作。对矩阵的操作包括矩阵属性、维数和数值设置, 矩阵转置和取反, 矩阵扩展和收缩, 矩阵平滑和积分等。

(11) Tools 工具功能操作。

① 对工作表窗口: 选项控制; 工作表脚本; 线性、多项式和 S 曲线拟合。

② 对绘图窗口: 选项控制; 层控制; 提取峰值; 基线和平滑; 线性、多项式和 S 曲线拟合。

(12) Format 格式功能操作。

① 对工作表窗口: 菜单格式控制、工作表显示控制, 栅格捕捉、调色板等。

② 对绘图窗口: 菜单格式控制; 图形页面、图层和线条样式控制, 栅格捕捉, 坐标轴样式控制和调色板等。

(13) Window 窗口功能操作, 控制窗口显示。

(14) Help 帮助。

二、基本操作

作图时一般需要一个项目 Project 来完成, 执行 File-》New。

保存项目的缺省后缀为 OPJ。

自动备份功能: Tools-》Option-》Open/Close 选项卡-》“Backup Project Before Saving”。

添加项目: File-》Append。

刷新子窗口: 如果修改了工作表或者绘图子窗口的内容, 一般会自动刷新, 如果没有请选择 Window-》Refresh。

这些基本窗口、菜单以及基本操作都要慢慢熟练, 才能做到运用自如、灵活应用。

第二节 简单二维图

在化学类学习以及科研工作中, 经常会遇见需要绘制简单的二维图, 用简单的二维图来表达某种结果, 试图得到某种规律性的结果, 绘制简单二维图有不少的软件可以达到目的, 而且 Excel、Word 中也有自带的绘制简单二维图的插件; 但是这些软件都没有 Origin 来得那么简单直接, 对二维图编辑修改的便捷也是其他软件无法比拟的。本节主要介绍数据输入、简单二维图的绘制、行 (列) 属性的设置、数据浏览、图形定制 (定制数据曲线、定制坐标轴、添加文本说明、添加日期和时间标记) 等。

一、输入数据

绘制简单二维图，一般来说数据按照 X、Y 坐标存为两列，这些数据既可以从弹出的表格中，按照 X、Y 轴用键盘分别输入，也可以从现成的各类文件中调用。假设从 dat 数据库调入数据，文件为 sindata.dat，格式如下：

```
x sin(x)
0.0 0.000
0.1 0.100
0.2 0.199
0.3 0.296
.....
```

输入数据时请对准 data1 表格，点右键调出如下窗口，然后选择 Import ASCII 找到 sindata.dat 文件，打开即可，如图 2-5 所示。

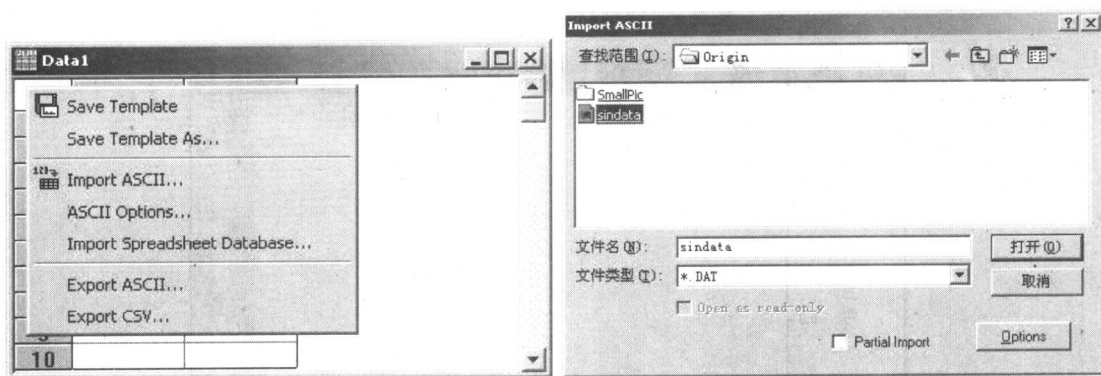


图 2-5 数据的输入对话框

二、绘制简单二维图

输入数据或者调入表格后，按住鼠标左键拖动选定这两列数据，用图 2-6 所示最下面一排按钮就可以绘制简单的图形，按从左到右的顺序，三个按钮做出的效果分别如图 2-6~图 2-8 所示。

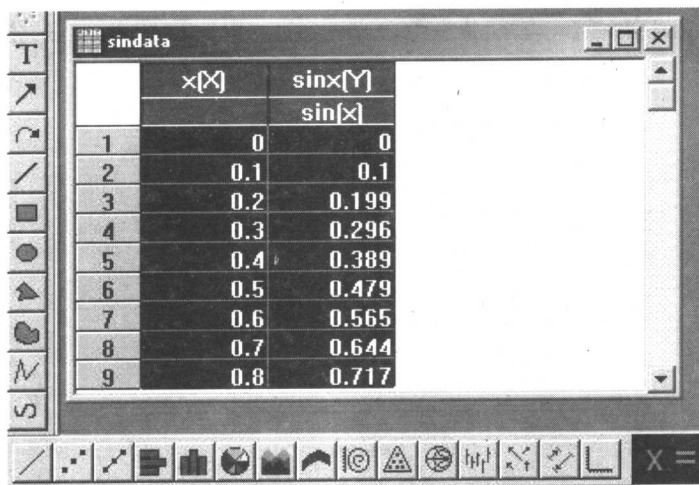


图 2-6 绘制简单二维图形—数据输入

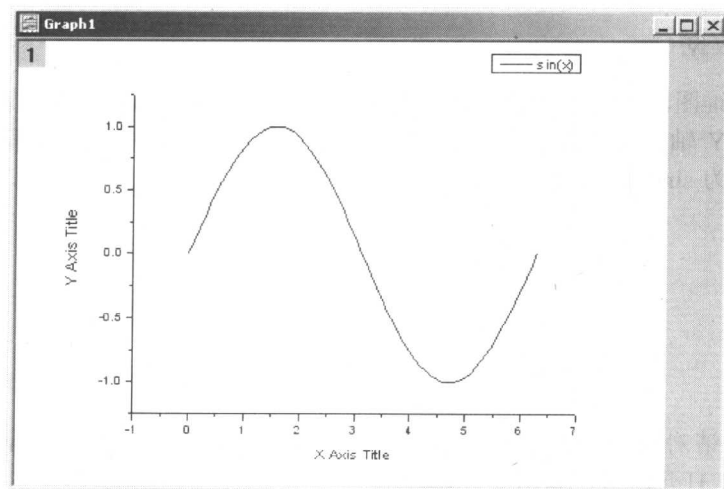


图 2-7 绘制简单二维图形—图形 1

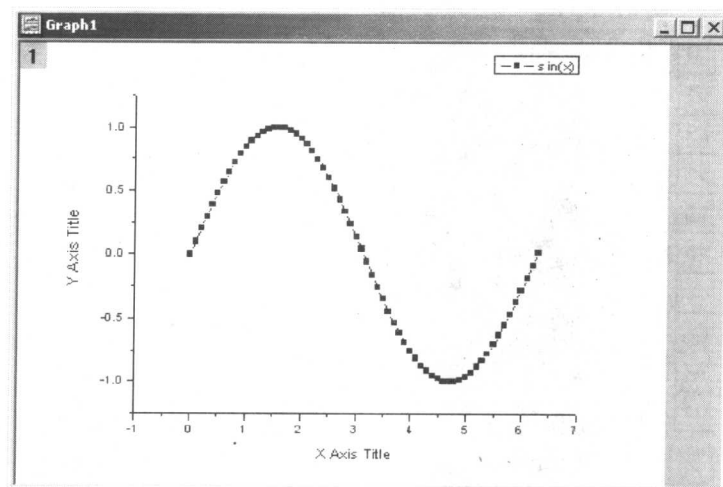
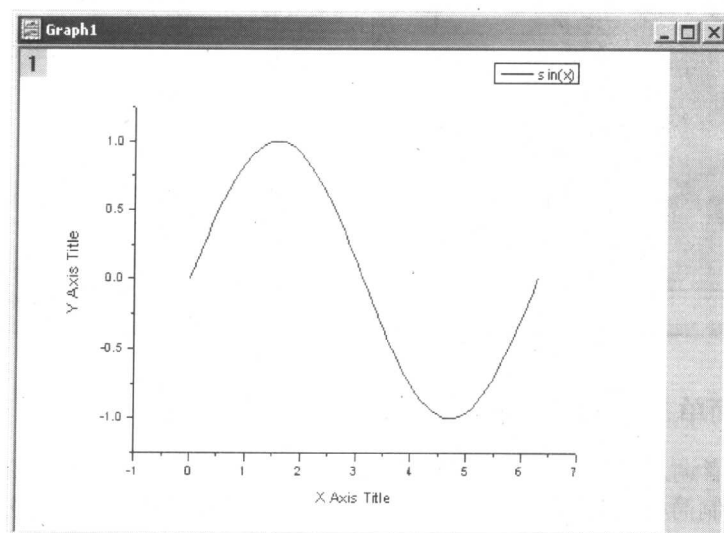


图 2-8 绘制简单二维图形—图形 2

最下面一排图型类别选择按钮有很多种,可以根据自己的专业特点以及需要来选择得到不同类型的简单二维图。

三、设置列属性

绘制简单二维图,很多其他软件也能实现,但是对已做好的简单二维图进行修改,Origin 非常便捷。对列属性的设置,双击 A 列或者点右键选择 Properties,按图 2-9 可以设置一些列的属性。

四、数据浏览

在已经绘制好的简单二维图中,Origin 还有其他软件中没有的数据浏览的功能,能非常便捷、准确地从已经绘制好的简单二维图中找到需要浏览的数据。

① Data Display 动态显示所选数据点或屏幕点的 X、Y 坐标值。

② Data Selector 选择一段数据曲线,作出标志。可以用鼠标,也可以利用 Ctrl, Ctrl+Shift 与左右箭头的组合。

③ Data Reader 读取数据曲线上的选定点的 XY 值。

④ Screen Reader 读取绘图窗口内选定点的 XY 值。

⑤ Enlarger 局部放大曲线。

⑥ Zoom 缩放。

注意利用方向键,以及与 Ctrl 键和 Shift 键的组合。

五、定制图形

Origin 对已经绘制好的简单二维图还可以实现图形的定制,比如,定制数据曲线,用于区别不同的影响因素,直观地反映出影响因素对指标的影响;也可以定制坐标轴,对坐标轴(包括 X 轴和 Y 轴)的起点、跨度、文本说明、坐标示意等都能定制出来;还可以添加文本说明、添加日期和时间标记等。

1. 定制数据曲线

用鼠标双击图线弹出下面窗口,如图 2-10 所示。

2. 定制坐标轴

双击坐标轴,得到图 2-11 所示对话框。

3. 添加文本说明

用左侧按钮 T,如果想移动位置,可以用鼠标拖动。注意利用 Symbol Map 可以方便的添加特殊字符。做法:在文本编辑状态下,点右键,然后选择 Symbol Map。如图 2-12 所示。

4. 添加日期和时间标记

利用 Graph 工具栏上的^④下面的菜单可以作出很多特殊要求的图像,比如两点线段图、三点线段图等,水平(垂直)阶梯图、样条曲线图、垂线图。下面给出一个演示,如图 2-13 所示。

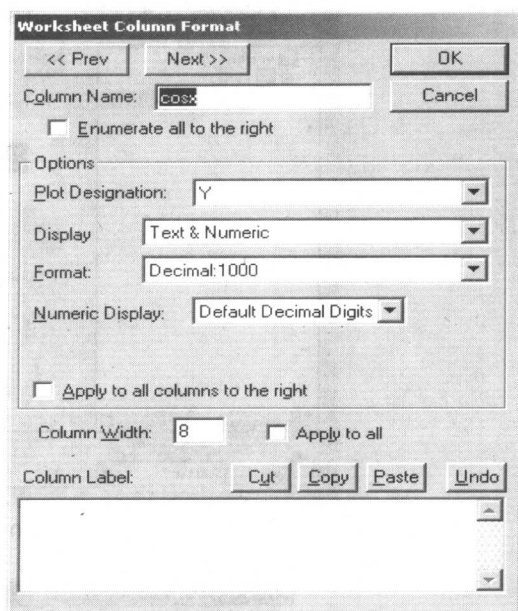


图 2-9 设置列属性