



高等学校“十三五”实验实训规划教材

GAODENG XUOXIAO “13·5” SHIYAN SHIXUN GUIHUA JIAOCAI

# 计算机在材料中的应用 实验指导

主编 白凌云 李文魁 向军淮



冶金工业出版社  
[www.cnmip.com.cn](http://www.cnmip.com.cn)



高等学校“十三五”实验实训规划教材

本书获得江西科技师范大学教材出版基金资助

# 计算机在材料中的应用 实验指导

主编 白凌云 李文魁 向军淮

北 京

冶 金 工 业 出 版 社

2016

## 内 容 简 介

本书共 18 个实验, 主要介绍了 Origin、Jade、Chemdraw、NoteFirst 以及 Nano Measurer 等软件, 涵盖了 XRD 数据结果的物相分析、试样的粒度分析、晶粒相关参数计算、数据作图、分子结构绘制、反应方程式书写、装置图绘制、分子结构仿真、图片颗粒尺寸测量、文献查阅与管理及论文书写等内容。

本书为材料专业本科生和研究生的教学用书, 也可作为材料专业科研人员及相关学者应用计算机解决专业问题的参考书。

### 图书在版编目(CIP)数据

计算机在材料中的应用实验指导/白凌云, 李文魁, 向军准  
主编. —北京: 冶金工业出版社, 2016. 5  
高等学校“十三五”实验实训规划教材  
ISBN 978-7-5024-7222-1

I. ①计… II. ①白… ②李… ③向… III. ①计算机应用  
—材料科学—科学实验—高等学校—教材 IV. ①TB3-33

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 087270 号

出 版 人 谭学余

地 址 北京市东城区嵩祝院北巷 39 号 邮编 100009 电话 (010)64027926

网 址 www.cnmp.com.cn 电子信箱 yjcbbs@cnmp.com.cn

责任编辑 俞跃春 贾怡雯 美术编辑 吕欣童 版式设计 葛新霞

责任校对 禹 蕊 责任印制 李玉山

ISBN 978-7-5024-7222-1

冶金工业出版社出版发行; 各地新华书店经销; 三河市双峰印刷装订有限公司印刷

2016 年 5 月第 1 版; 2016 年 5 月第 1 次印刷

169mm × 239mm; 9.25 印张; 179 千字; 136 页

25.00 元

冶金工业出版社 投稿电话 (010)64027932 投稿信箱 tougao@cnmp.com.cn

冶金工业出版社营销中心 电话 (010)64044283 传真 (010)64027893

冶金书店 地址 北京市东四西大街 46 号(100010) 电话 (010)65289081(兼传真)

冶金工业出版社天猫旗舰店 yjgycbs.tmall.com

(本书如有印装质量问题, 本社营销中心负责退换)

# 前 言

随着材料科学与计算机技术的不断发展,研究人员对于材料的研究及分析手段越来越多样化,数据的采集、处理和分析过程往往需要计算机辅助进行,相应地对学生掌握多种计算机软件的能力都提出了一定要求,材料研究相关的分析和计算,成为每一个材料类专业的学生都要掌握的一项实用专业技能,“计算机在材料中的应用”相关课程也由此而生。

但在实际教学过程中,大量的软件在课程中只需要进行浅显的介绍和基本应用训练,学生入门后可以结合自身学习、研究及工作需要,进行深入的自学。所以“计算机在材料中的应用”课程缺乏一本合适的教材,目前市面上的教材通常理论性较强,内容较为繁杂,实际操作性差,而且知识点对于普通本科生偏难,令学生望而生畏,丧失学习兴趣。本书结合目前各高校材料类本科教学中常用的计算机软件,对其基础操作进行介绍,并结合实际的数据分析实例,锻炼学生的操作能力。

本书针对最基本的实用技能和常见问题进行讲解,对于提高材料类专业学生的实际动手能力具有较强的指导作用。同时,本书的数据、操作练习、参考答案、软件操作视频、拓展内容等资源,均可在课程的网站中下载,作为教材的有益补充。

本书在编写的过程中参考和采纳了江西科技师范大学材料专业学生近年来在实验课程中提出的建议和意见,还参考了大量的文献资料,如中南大学的黄继武老师撰写的《MDI Jade 使用手册》等。同时,编者也查看并参考了很多网络信息,如小木虫、丁香园等,在此一并表示感谢,但因无法知道确切的作者,如有问题,请联系编者,以便进行更正和修改。

本书由白凌云、李文魁、向军淮担任主编，参加编写的有江龙发、王军、杨千兰、张洪华、陈智琴、张淑芳。

本书配套的操作视频读者可从冶金工业出版社官网 (<http://www.cnmp.com.cn>) 教学服务栏目中下载。

由于编者水平所限，书中不妥之处，敬请广大读者批评指正。

编 者

2015年12月28日

# 目 录

实验1 Origin 软件操作（一）——数据操作、图表处理	1
1.1 实验目的及要求	1
1.2 软件操作过程	1
1.2.1 数据排序	1
1.2.2 变换数列	4
1.2.3 选择数据范围作图	10
实验2 Origin 软件操作（二）——多层图形绘制、曲线编辑	14
2.1 实验目的和要求	14
2.2 软件操作	14
2.2.1 绘制多层图形	14
2.2.2 曲线水平和垂直移动	18
2.2.3 曲线平滑	20
2.2.4 图形窗口上数据和坐标的读取	22
2.2.5 绘制曲线，生成数据	22
实验3 Origin 软件操作（三）——绘制三维图形	25
3.1 实验目的和要求	25
3.2 软件操作	25
3.2.1 工作表转为矩阵	25
3.2.2 创建三维表面图和等高线图	27
3.2.3 练习	28
实验4 Origin 软件操作（四）——曲线中文字及特殊符号标注	32
4.1 实验目的和要求	32
4.2 软件操作	32
4.2.1 数据点修正	32
4.2.2 特殊符号标注	32

<b>实验 5 Jade 6.0 的安装 (32 位)</b> .....	37
5.1 实验目的 .....	37
5.2 操作 .....	37
5.2.1 安装 .....	37
5.2.2 建立 PDF2 的索引数据库 .....	37
<b>实验 6 Jade 6.0 的安装 (64 位)</b> .....	45
6.1 实验目的 .....	45
6.2 实验操作 .....	45
6.2.1 安装 .ocx 控件 .....	45
6.2.2 64 位系统下 Jade 6.5 无法导入 PDF 卡片的处理 .....	49
<b>实验 7 Jade 6.0 软件操作 (一) —— 界面功能及数据的导入出图</b> .....	50
7.1 实验目的和要求 .....	50
7.2 软件操作 .....	50
7.2.1 软件界面功能说明 .....	50
7.2.2 数据导入 .....	53
7.2.3 文件的读入方式 .....	55
<b>实验 8 Jade 6.0 软件操作 (二) —— 物相检索和动态仿真</b> .....	61
8.1 原理介绍 .....	61
8.2 实验目的和要求 .....	61
8.3 软件操作 .....	61
8.3.1 大海捞针型检索 .....	61
8.3.2 限定条件检索 .....	66
8.3.3 物质结构的动态仿真结果查看 .....	68
<b>实验 9 Jade 6.0 软件操作 (三) —— 报告与设置</b> .....	72
9.1 实验目的和要求 .....	72
9.2 软件操作 .....	72
9.2.1 计算峰面积 .....	72
9.2.2 属性设置 .....	73
9.2.3 寻峰 .....	74

<b>实验 10 Jade 6.0 软件操作 (四) ——XRD 结合 SEM/EDS 进行物相分析</b> .....	79
10.1 实验目的与要求 .....	79
10.2 软件操作 .....	79
10.2.1 Jade 导入数据并进行峰归属分析 .....	79
10.2.2 SEM/EDS 结果分析 .....	81
10.2.3 XRD 结果分析 .....	81
<b>实验 11 Jade 6.0 软件操作 (五) ——计算材料相关参数</b> .....	84
11.1 实验目的与要求 .....	84
11.2 软件操作 .....	84
11.2.1 结晶度的计算 .....	84
11.2.2 晶粒尺寸、微观应变查看 .....	87
11.2.3 点阵常数 .....	87
<b>实验 12 ChemDraw 软件操作 (一) ——基础知识</b> .....	90
12.1 实验原理及目的 .....	90
12.2 软件操作 .....	90
12.2.1 工作环境 .....	90
12.2.2 图形工具板 .....	90
12.2.3 文件格式 .....	96
<b>实验 13 ChemDraw 软件操作 (二) ——绘制化学键、曲线、分子式及装置图</b> .....	97
13.1 实验目的和要求 .....	97
13.2 软件操作 .....	97
13.2.1 化学键的书写 .....	97
13.2.2 分子式的书写 .....	98
13.2.3 曲线的绘制 .....	99
13.2.4 化学装置图的绘制 .....	102
<b>实验 14 ChemDraw 软件操作 (三) ——图形的旋转缩放与化学信息查询</b> .....	104
14.1 实验目的及要求 .....	104
14.2 软件操作 .....	104



14.2.1 图形的旋转、缩放 .....	104
14.2.2 化学信息查询 .....	106
<b>实验 15 NoteFirst 软件操作 (一) ——简介 .....</b>	<b>111</b>
15.1 实验目的及要求 .....	111
15.2 软件操作 .....	112
<b>实验 16 NoteFirst 软件操作 (二) ——安装、注册和软件界面功能介绍 .....</b>	<b>114</b>
16.1 实验目的及要求 .....	114
16.2 软件操作 .....	114
16.2.1 软件安装 .....	114
16.2.2 文献订阅 .....	116
16.2.3 知识卡片 .....	121
16.2.4 团队协作 .....	122
<b>实验 17 NoteFirst 软件操作 (三) ——文献 (题录) 管理与写作 .....</b>	<b>123</b>
17.1 实验目的及要求 .....	123
17.2 软件操作 .....	123
17.2.1 题录分类 .....	123
17.2.2 题录显示列表 .....	124
17.2.3 文献检索 .....	124
17.2.4 文献的排序 .....	124
17.2.5 文献的价值等级 .....	124
17.2.6 文献的移动 .....	125
17.2.7 下载全文 .....	125
17.2.8 题录更新 .....	127
17.2.9 参考文献自动生成 .....	127
17.2.10 引文编辑和删除 .....	129
17.2.11 引文格式化 .....	130
<b>实验 18 Nano Measurer 软件操作 .....</b>	<b>131</b>
18.1 实验目的及要求 .....	131
18.2 软件操作 .....	131
18.2.1 软件的安装 .....	131
18.2.2 图片的导入 .....	131

# 实验1 Origin 软件操作 (一)

## ——数据操作、图表处理

Origin 是美国 Microcal 公司出的数据分析和绘图软件,其主要特点为使用简单,采用直观的、图形化的、面向对象的窗口菜单和工具栏操作,支持鼠标右键、支持拖拽方式绘图等。

数据分析包括数据的排序、调整、计算、统计、频谱变换、曲线拟合等多种完善的数学分析功能。Origin 的绘图则是基于模板的,操作简单,软件本身提供几十种二维和三维绘图模板,同时用户可以自己定制模板。

材料类学生在学习和科研中可能遇到的数据分析、作图等,主要为对试样制备过程、检测结果的数据进行分析、作图,因此在本软件的学习过程中,将对以上各项功能进行重点讲解。

### 1.1 实验目的及要求

通过该实验,学生能够对 Origin 软件有一个整体的认识,对其功能、操作界面等具有整体的把握和了解,掌握常用功能键的意思和作用。

本实验主要介绍数据的导入、排序、数列变换、规范化数据图处理以及选择区域作图等基本操作,这些是该软件的一些基本操作,也是最简单、最实用的操作,要求学生能够熟练掌握,为接下来的深入学习打下基础。

### 1.2 软件操作过程

#### 1.2.1 数据排序

Origin 可以做到单列、多列甚至整个工作表数据排序,命令为“sort …”。

(1) 导入数据: File→Open→选择数据。如图 1-1、图 1-2 所示。

(2) 选中一列,选择 Worksheet 菜单: Worksheet→Sort Columns→Ascending (升序排列) /Descending (降序排列)。如图 1-3 所示。

(3) 完成一列的排序,如图 1-4 所示。

(4) 同样操作,练习降序排列。

(5) 更为复杂的是整个工作表排序,选定整个工作表的方法是鼠标移到工作表左上角的空白方格的右下角,变为斜向下的箭头时单击,再按需求排序。如图 1-5、图 1-6 所示。

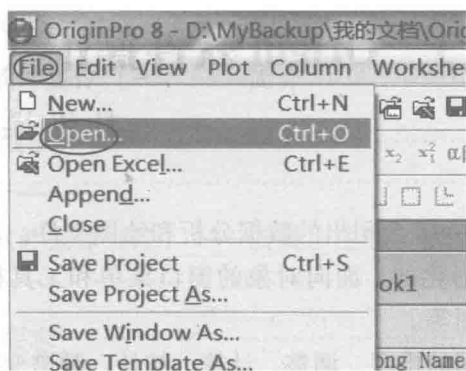


图 1-1 打开数据功能键

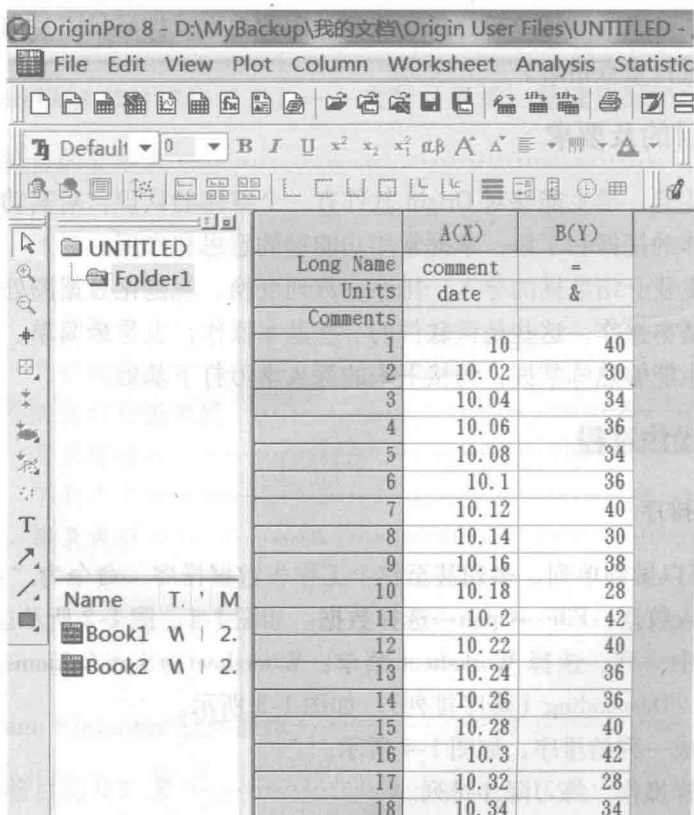


图 1-2 数据界面

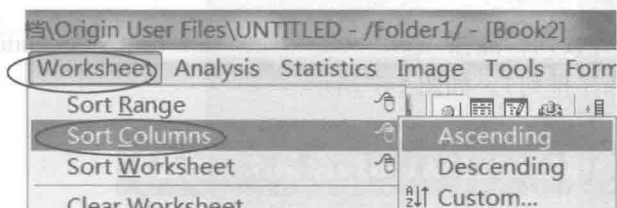


图 1-3 排序功能键

10
10.02
10.04
10.06
10.08
10.1
10.12
10.14
10.16
10.18
10.2
10.22
10.24
10.26

图 1-4 选中数列

Origin User Files\UNTITLED - /Folder1/ - [Book2]  
Worksheet Analysis Statistics Image Tools Form  
Sort Range  
Sort Columns  
Sort Worksheet  
Clear Worksheet

Ascending  
Descending  
Custom...

	A(X)	B(Y)
Long Name	comment	=
Units	date	&
Comments		
1	10	190
2	10.02	182
3	10.04	178
4	10.06	174

图 1-5 选中整个工作表

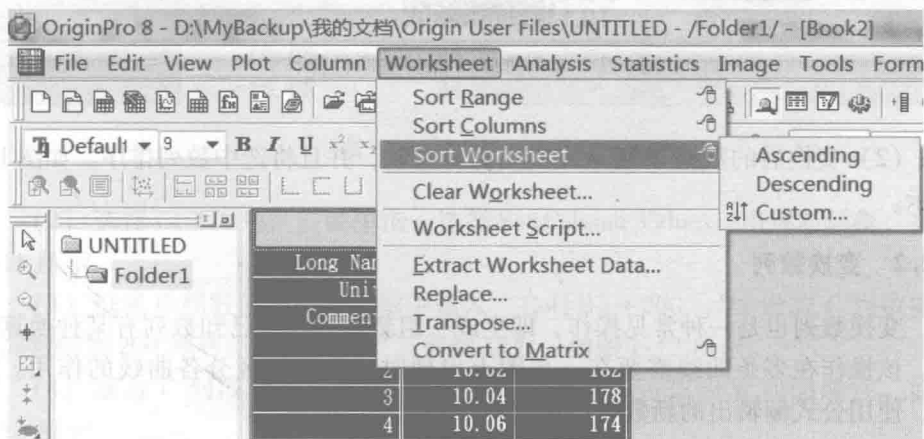


图 1-6 工作表排序功能键

注意：通常我们处理的为两组相关联数据，而整个工作表排序会打乱这种关联性，因此，在实际关联数据处理中不需要进行排序，否则会导致无效作图或分析，如 XRD、TG/DSC 数据作图、分析等。

若要对某一列排序，并且保证整个数据列表的数据关联性，可以进行如下操作：

(1) 选中一列需要排序的数列，点击 Worksheet→Sort Worksheet→Ascending (升序排列) /Descending (降序排列)。如图 1-7 所示。

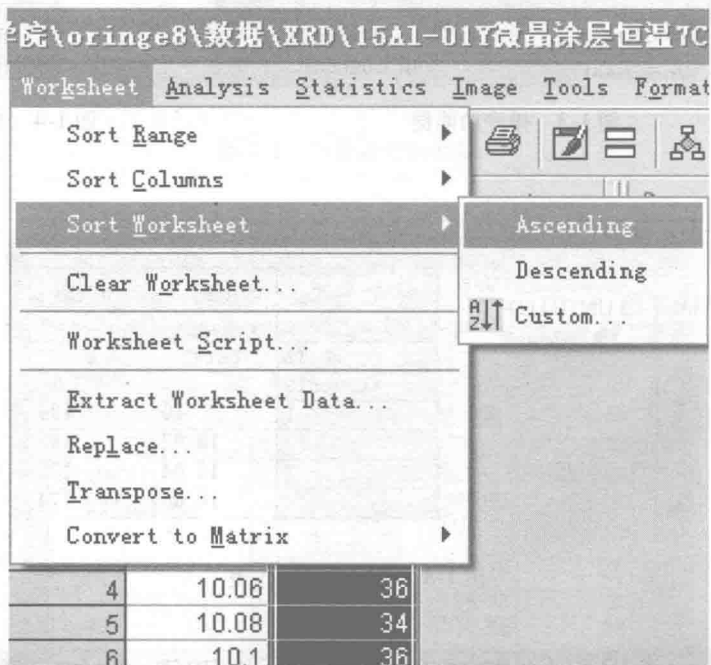


图 1-7 单列排序（保持关联性操作）

(2) 变换后的数据 X 与 Y 之间仍保持关联，并且将选中数列排序。如图 1-8 所示。

### 1.2.2 变换数列

变换数列也是一种常见操作，即生成一组新数列，与已知数列有某种换算关系。该操作在多条曲线需要在一张图上出现时，会起到区分各曲线的作用。同时，使用公式编辑出的新数据，会得到需要的新的曲线。

(1) 导入数据，然后点击 Add New Columns，加入新列。如图 1-9、图 1-10 所示。

	A(X)	B(Y)
Long Name	comment	=
Units	date	&
Comments		
1	48.98	6
2	50.76	8
3	53.52	8
4	59.38	8
5	54.7	8
6	75.6	8
7	71.68	8
8	53.92	10

图 1-8 单列排序后结果

	A(X)	B(Y)
Long Name	comment	=
Units	date	&
Comments		
1	10	40
2	10.02	30
3	10.04	34
4	10.06	36
5	10.08	34

图 1-9 加入新列功能键

(2) 选择 C(Y) 列，右键单击，选择 Set Column Values，出现对话框，如图 1-11 所示。

(3) 设置 C 列数值：例如方框中输入“Col(B) + 200”，即设置 C 列数据为 B 列数值加 200 得到，点击“OK”，得到 C 列，如图 1-12 所示。

(4) 双击 C 列或者点右键选择 Properties，这里可以设置列的属性。如图 1-13 所示。

(5) 鼠标左键拖动选择三列，作图。如图 1-14、图 1-15 所示。

	A(X)	B(Y)	C(Y)
Long Name	comment	=	
Units	date	&	
Comments			
1	10	40	
2	10.02	30	
3	10.04	34	
4	10.06	36	
5	10.08	34	
6	10.1	36	

图 1-10 加入新列效果

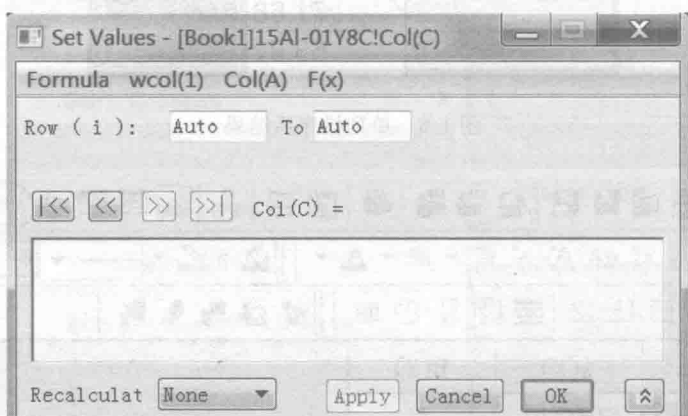


图 1-11 设置数列值

	A(X)	B(Y)	C(Y)
Long Name	comment	=	
Units	date	&	
Comments			
1	10	40	240
2	10.02	30	230
3	10.04	34	234
4	10.06	36	236
5	10.08	34	234
6	10.1	36	236
7	10.12	40	240
8	10.14	30	230

图 1-12 新数列数据生成



图 1-13 数列属性设置

	A(X)	B(Y)	C(Y)
Long Name	comment	=	
Units	date	&	
Comments			
1	10	50	250
2	10.02	58	258
3	10.04	54	254
4	10.06	52	252
5	10.08	56	256
6	10.1	62	262
7	10.12	54	254
8	10.14	46	246
9	10.16	60	260
10	10.18	48	248
11	10.2	52	252
12	10.22	52	252
13	10.24	58	258
14	10.26	52	252
15	10.28	54	254
16	10.3	54	254
17	10.32	46	246
18	10.34	64	264
19	10.36	52	252
20	10.38	60	260
21	10.4	56	256
22	10.42	54	254
23	10.44	56	256
24	10.46	56	256
25	10.48	56	256
26	10.5	60	260

图 1-14 选中作图所需数据



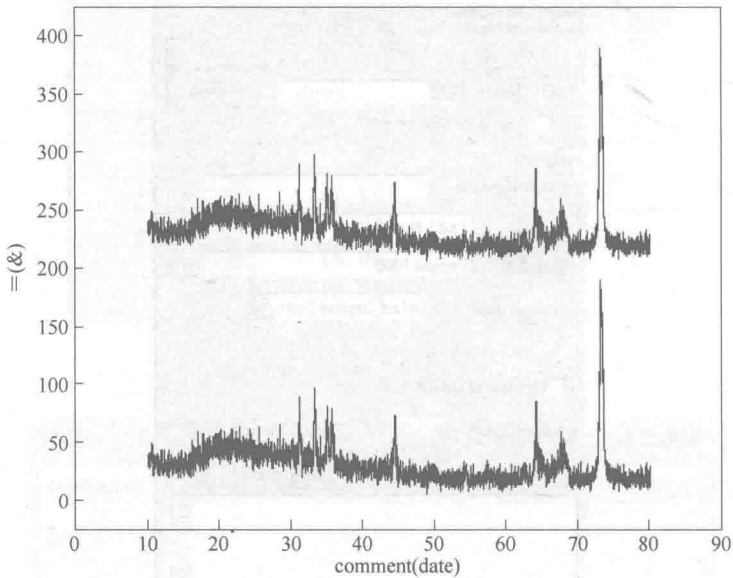


图 1-15 数据作图结果

(6) 图片规范处理。这一操作在今后的科研创新、毕业论文撰写等工作中是特别重要的，一张图片做得是否规范，是否漂亮，懂得以下的操作是至关重要的。

1) 双击图片边缘，出现如图 1-16 所示对话框。

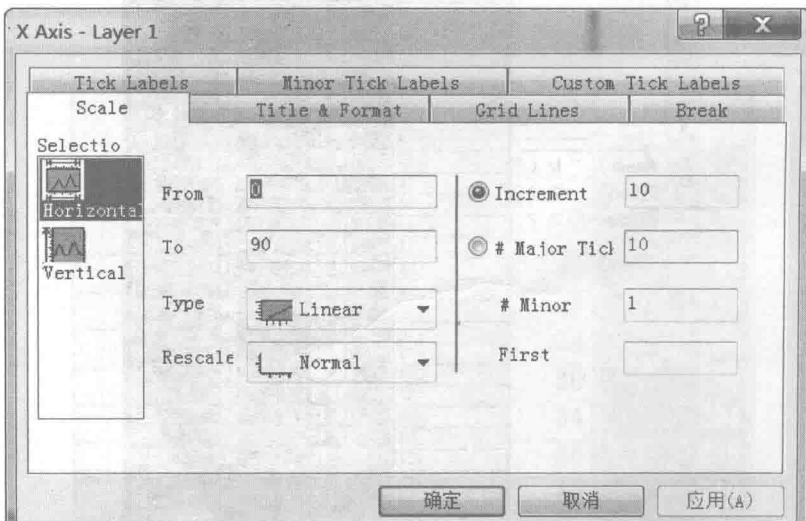


图 1-16 设置水平刻度

Scale 为数据范围，选择恰当的数据范围作图，对于举例的 XRD 数据，通常