

高等学校教材

计算机在材料和 化学中的应用



张发爱 赵 斌 编著



化学工业出版社

高等学校教材

计算机在材料和 化学中的应用

张发爱 赵 斌 编著



化学工业出版社

·北京·

本书是为材料和化学类专业学生进行初步科学研究、了解计算机在该领域中的应用而编写的。本书共分为 6 章, 分别介绍了计算机在材料科学中的应用、化学中常见的计算机软件和资源、化学制图软件及分子式结构绘图 ChemWindow 软件、科学绘图和数据分析 Origin 软件、分子模拟软件 MP 以及文献管理软件 EndNote X2 的安装、使用方法和应用技巧等内容。所选软件均为最新的版本, 采用图文并茂的方式进行分层次介绍, 对于初学的读者非常实用, 可按照书中的实例进行操作, 同时在部分章节中增加了练习, 以使读者通过这些练习尽快掌握软件的应用技能。

本书适用于材料、化学类专业的高校师生及相关领域的科技工作者参考, 也适用于环境、能源等与化学分子式结构绘图、数据分析处理以及撰写科技论文的相关人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

计算机在材料和化学中的应用 / 张发爱, 赵斌编著. —北京: 化学工业出版社, 2012.6

ISBN 978-7-122-13991-7

高等学校教材

I. 计… II. ①张… ②赵… III. 计算机应用-材料科学 IV. TB3-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2012) 第 068675 号

责任编辑: 杨 菁

文字编辑: 李 玥

责任校对: 周梦华

装帧设计: 张 辉

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 装: 大厂聚鑫印刷有限责任公司

787mm×1092mm 1/16 印张 11½ 字数 284 千字 2012 年 7 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

计算机在各行各业中已经得到了广泛的应用，化学和材料行业也不例外。在人们从事的日常教学和科研工作中，经常会遇到将化学结构式、分子式、化学反应式、实验仪器装置图等加到文档中的问题，也有将实验数据归纳后如何用图形直观明了地表示出来的问题，在撰写论文时如何将大量的参考文献进行管理、引用以及按照一定的格式排版的问题。这些问题已经由一些专门的化学计算机软件来解决。一些常见的办公应用软件如 Word、Excel 尽管也有一些化学绘图、数据处理和图形表达功能，但是这些软件仅能绘制一些简单的图形，难以满足化学工作者日常工作的需要。近年来计算机专家和化学工作者合作开发了专门的化学分子式结构绘制、工程图和实验装置图绘制软件 ChemWindow、实验数据处理和图形表达软件 Origin 以及文献管理软件 EndNote 等，但是这些软件都是国外公司用英文编写，国内汉化版或者中文使用指南等书籍较少，难以使这些优秀的软件发挥较大的作用，而本书则侧重于对这几种软件进行介绍，以填补这些软件在国内使用中的空白。

本书主要介绍化学分子式结构绘图软件 ChemWindow、数据处理软件 Origin、分子模拟软件 MP 以及文献管理软件 EndNote X2 的安装、使用方法和应用技巧，全书共分为 6 章：第 1 章主要介绍计算机在材料科学，特别是高分子材料科学中的应用；第 2 章主要介绍了化学中常见的计算机软件和资源，包括分子结构、数据处理、文献管理、图谱解析、计算机辅助教学、量子化学计算等使用的软件以及它们的网站；第 3 章介绍了常见的化学制图软件，重点介绍了 ChemWindow 的功能、特点、安装、使用方法、应用示例，并列出了练习题；第 4 章主要介绍 Origin7.5 的用法，包括软件安装、工作环境、简单二维图形绘制、数据管理、多层图形绘制、非线性拟合以及数据的输入和输出，也列出了部分练习题；第 5 章介绍了分子模拟的基本知识以及分子模拟的软件，重点介绍了分子模拟软件 MP（分子的性质）的特点、使用方法以及应用实例；第 6 章主要介绍了文献管理软件 EndNote X2 的特点、使用方法，包括文献数据库的建立、管理以及在写作时的应用。

本书主要为材料和化学类专业学生学习《计算机在材料和化学中的应用》课程编写，其他专业学生也可参考。

本书第 1、2、3、5、6 章由张发爱编写，第 4 章由赵斌编写。由于编写时间紧迫，加之作者水平有限，难免出现疏漏，希望读者批评指正。

编 者
2012 年 2 月

目 录

第 1 章 计算机系统及其在材料科学中的应用 1	
1.1 计算机信息系统..... 1	
1.2 计算机辅助系统..... 1	
1.2.1 计算机辅助设计..... 1	
1.2.2 计算机辅助制造..... 2	
1.2.3 计算机辅助工艺规划..... 2	
1.3 计算机控制系统..... 2	
1.4 计算机仿真(模拟)技术..... 3	
1.4.1 计算机模拟技术的优势..... 3	
1.4.2 材料模拟方法与模拟层次..... 4	
1.4.3 材料研究的主要模拟技术..... 4	
1.4.4 计算机模拟在材料科学中的应用..... 5	
1.4.5 计算机模拟在材料科学中的应用..... 7	
1.5 计算机数据和图像处理技术..... 8	
1.6 计算机模拟的步骤..... 8	
1.7 结束语..... 9	
参考文献..... 9	
第 2 章 化学中的常用计算机软件与资源 10	
2.1 化学结构式..... 10	
2.2 三维结构..... 10	
2.3 数据处理..... 11	
2.4 文献管理..... 13	
2.5 图谱解析..... 13	
2.6 计算机辅助教学..... 13	
2.7 量子化学计算..... 14	
参考文献..... 15	
第 3 章 化学制图软件及化学之窗 ChemWindow 16	
3.1 常见的化学制图软件..... 16	
3.1.1 ChemSketch..... 16	
3.1.2 ISIS/Draw..... 17	
3.1.3 Chemistry 4D Draw..... 17	
3.1.4 GlassyChemistry..... 17	
3.1.5 ChemOffice 2010..... 18	
3.1.6 ChemDraw..... 18	
3.1.7 ChemWindow..... 18	
3.2 ChemWindow 6.0 的主要功能和特点..... 19	
3.3 ChemWindow 的安装..... 20	
3.4 ChemWindow 的使用方法..... 21	
3.4.1 ChemWindow 6.0 的程序界面..... 21	
3.4.2 画图 and 编辑基础..... 26	
3.4.3 结构编辑命令..... 31	
3.4.4 画图样式..... 35	
3.4.5 化学命令和工具..... 37	
3.4.6 标题和类型样式..... 41	
3.4.7 制作和使用模板..... 42	
3.4.8 图库..... 42	
3.4.9 文件与 OLE 2.0 的兼容性..... 45	
3.4.10 注解工具..... 47	
3.4.11 创建图表..... 48	
3.4.12 分子量工具..... 49	
3.5 ChemWindow 应用示例..... 50	
3.5.1 绘制分子结构..... 50	
3.5.2 绘制化学反应式..... 51	
3.5.3 绘制电子转移箭头符号..... 52	
3.5.4 绘制图形和文字混合图..... 52	
3.6 使用 Chem3D 绘制三维结构图..... 52	
3.6.1 Chem3D 简介..... 53	
3.6.2 建立 Chem3D 模型..... 54	
3.6.3 整理结构与简单优化..... 58	
3.6.4 显示 3D 模型信息..... 59	
3.6.5 改变元素序号与替换元素..... 61	
3.7 ChemWindow 练习..... 61	
参考文献..... 67	
第 4 章 科学绘图及数据分析软件 Origin 68	
4.1 Origin 基础知识..... 68	
4.1.1 工作环境综述..... 69	
4.1.2 菜单栏..... 70	
4.1.3 工具栏..... 75	
4.2 工作表的使用及数据分析..... 78	

4.2.1 输入、编辑和保存工作表	78	5.3.3 按钮窗口	116
4.2.2 调整工作表的基本操作	80	5.3.4 菜单窗口	116
4.2.3 数据分析	81	5.4 文件与分子结构	119
4.3 数据绘图	81	5.4.1 存取分子结构文件	119
4.3.1 简单二维图形绘制	81	5.4.2 结构显示功能	119
4.3.2 选择数据范围作图	83	5.4.3 构造一个分子	120
4.3.3 屏蔽曲线中的数据点	83	5.4.4 构造一个多分子体系	122
4.3.4 定制图形	84	5.4.5 删除部分分子片段	122
4.3.5 绘制多层图形	86	5.5 分子模拟应用实验	122
4.4 曲线拟合	89	5.5.1 用“分子的性质”软件构建全同立 构聚丙烯分子、聚乙烯分子并计算 它们末端的直线距离	122
4.4.1 使用菜单命令拟合	89	5.5.2 用“分子的性质”软件计算聚丙烯 酸甲酯的构象能量	123
4.4.2 使用拟合工具拟合	90	参考文献	125
4.4.3 非线性最小二乘拟合	91	第6章 文献管理软件 EndNote X2	126
4.5 Origin 的应用	93	6.1 概述	126
4.5.1 数据的算术运算	93	6.1.1 文献管理软件	126
4.5.2 插值	94	6.1.2 EndNote 软件的特点	126
4.5.3 微分	95	6.1.3 EndNote 软件的基本功能	126
4.5.4 积分	96	6.1.4 EndNote 软件中用到的几个术语	127
4.5.5 基线工具	97	6.1.5 EndNote X2 软件的新功能	127
4.5.6 绘制红外光谱图	98	6.1.6 EndNote X2 软件的安装和 运行环境	128
4.5.7 多条曲线叠加对比图	101	6.2 数据库的建立	130
4.5.8 双坐标图	104	6.2.1 EndNote 程序主界面	130
4.6 Origin 练习	106	6.2.2 手动输入记录建立数据库	132
参考文献	107	6.2.3 利用在线文献搜索方法建立 数据库	132
第5章 分子模拟软件	108	6.2.4 利用数据库网站建立数据库	134
5.1 概述	108	6.3 数据库的管理	145
5.1.1 分子模拟	108	6.3.1 程序界面	145
5.1.2 分子模拟方法	108	6.3.2 程序菜单	145
5.1.3 计算机实验	108	6.4 数据库的应用	164
5.1.4 分子模拟的发展	109	6.4.1 Word 中的应用	164
5.2 常见的分子模拟软件	109	6.4.2 利用数据库来撰写论文	167
5.2.1 Alchemy 2000	109	6.4.3 修改输出样式	169
5.2.2 MolSuite 2000	110	6.4.4 利用论文模板撰写论文	175
5.2.3 ChemSite	111	6.4.5 EndNote 统计分析功能	176
5.2.4 ChemSite Pro	112	6.4.6 笔记的管理	177
5.2.5 Molecular Modeling Pro	112	参考文献	177
5.2.6 Chem3D Ultra	113		
5.2.7 Molecular Properties	114		
5.3 MP 软件的功能	114		
5.3.1 主窗口	115		
5.3.2 图形窗口	115		

第1章 计算机系统及其在材料科学中的应用

现代高新技术的发展，对材料的性能要求越来越高，由此对材料科学本身也提出了更高的要求。随着对材料微观结构与宏观性能关系了解的日益深入，人们将可以从理论上预言具有特定结构与功能的材料体系，设计出符合要求的新型材料，并通过先进工艺和技术制造出来。新材料的发展显然离不开近年来备受青睐的计算机技术的作用，在新材料的合成、加工以及获取更多的信息方面，都与计算机技术的发展紧密相连，计算机技术已应用于材料科学与工程各个方面。在计算机技术迅速发展的今天，计算机模拟已经成为解决材料科学中实际问题的重要组成部分。

1.1 计算机信息系统

一个计算机信息系统通常由包括硬件、操作系统、网络系统在内的支持环境和以数据库管理为核心的数据库系统以及建立在其上的各种应用软件等几部分组成。而用户则通过专门的人机交互界面进行数据查询、修改等操作并实现统计分析、规划、决策等功能。目前计算机信息系统正向着系统集成化、结构分布化、信息多元化、功能智能化的方向发展。在材料科学领域中，尤以功能智能化为发展目标，如专家系统。目前的专家系统基本上以事务性操作为主，具有一定的决策功能，但还限于局部应用，如石刻文物防侵蚀复合材料专家系统、复合材料专家系统、各种数据库等。未来的信息或专家系统应具有知识获取、知识管理以及推理等功能，可以提供诸如提示、报警、自动记录和统计、专人或专题情报服务、预测和规划、决策和咨询等服务。

材料数据的特点是数据量庞大，世界上已有工程材料数十万种，各种化合物达几百万种，材料的成分结构、性能及使用等构成了庞大的信息体系，由此材料数据库应运而生。

计算机材料数据库具有存储信息量大、存取速度快、查询方便、使用灵活、应用广泛等优点。目前已有的材料数据库包括：合金相图数据库、陶瓷相图数据库、材料腐蚀数据库、材料摩擦磨损数据库等，还包括材料力学性能数据库、金属弹性性能数据中心和金属扩散数据中心等数十种各类数据库。网络技术的发展使得材料数据库进一步走向现代化，在材料研究、理化测试、产品设计和决策咨询中得到广泛应用。

1.2 计算机辅助系统

计算机辅助系统在材料科学中的应用主要体现在以下几个方面。

1.2.1 计算机辅助设计

目前各种合成及加工设备均采用计算机辅助设计（CAD），尤其是在高分子材料加工中的模具加工方面，计算机辅助设计已得到广泛应用，专门用于设计注塑产品的模具设计软件已得到厂家应用。该技术结合了高分子材料的物理特性、材料特性等，采用特征化、参数化

技术,通过热力、静力、动力分析优化设计模型,是目前计算机辅助设计在分子科学领域中应用取得最成功的一个方面。

材料设计是指通过理论与计算预报新材料的组分、结构与性能,或者通过理论与设计来“订做”具有特定性能的新材料,按生产要求设计最佳的制备和加工方法。材料设计按照设计对象和所涉及的空间尺寸可分为电子层次、原子/分子层次的微观结构设计和显微结构层次材料的结构设计。

材料设计主要是利用人工智能、模式识别、计算机模拟、知识库和数据库等技术,使人们能将物理、化学理论和大批杂乱的实验资料沟通起来,用归纳和演绎相结合的方式对新材料的研制做出决策,为材料设计的实施提供行之有效的技术和方法。

1.2.2 计算机辅助制造

计算机辅助制造是指在机械制造业中,利用电子计算机通过各种数值控制机床和设备,自动完成离散产品的加工、装配、检测和包装等制造过程,简称CAM。CAM的核心是计算数值控制(简称数控)。除CAM的狭义定义外,国际计算机辅助制造组织关于计算机辅助制造有一个广义的定义:“通过直接的或间接的计算机与企业的物质资源或人力资源的连接界面,把计算机技术有效地应用于企业的管理、控制和加工操作。”按照这一定义,计算机辅助制造包括企业生产信息管理、计算机辅助设计和计算机辅助生产、制造三部分。计算机辅助生产、制造又包括连续生产过程控制和离散零件自动制造两种计算机控制方式。这种广义的计算机辅助制造系统又称为整体制造系统。采用计算机辅助制造零件、部件,可改善对产品设计和品种多变的适应能力,提高加工速度和生产自动化水平,缩短加工准备时间,降低生产成本,提高产品质量和批量生产的劳动生产率。

数控已广泛应用于飞机、汽车、机械制造业、家用电器和电子产品制造业中各种设备的控制,如注塑机、挤出机、压延机及各种连续合成装置。

1.2.3 计算机辅助工艺规划

工艺规划是从原材料到产品之间加工顺序和所需条件的规划,这项工作需由生产经验丰富的工程师进行复杂的规划。计算机辅助工艺规划(CAPP)也是运用人机交互、计算机图形学、工程数据库以及专家系统等计算机科学来实现的。高分子材料的合成及加工今后也可能采用这种方法,如通过气体辅助注塑成型实验与仿真研究,借助计算机辅助工程分析技术所提供的信息,优化模型设计,确定最佳的工艺参数配置,减少试模和修模次数。CAPP的作用不仅在于节省了人工传递信息和数据,更有利于产品生产的整体考虑。设计工程师从公共数据库中,可以获得并考察所设计产品的加工信息,制造工程师可以从中清楚地知道产品的设计需求。全面考虑这些信息,可以使产品的生产获得更大的效益。

1.3 计算机控制系统

计算机控制系统是通过不断采集被控对象的各种状态信息,由计算机按照被控对象的模型和一定的控制策略实时地计算和处理后,作为控制信息去推动执行结构,被控对象自动地、准确地按照预定的规律运行,以减少人力,提高生产质量。目前计算机控制系统在大宗高分子材料合成装置中已被采用,如聚乙烯、聚丙烯、聚苯乙烯的合成。

使用计算机作为控制工具,控制系统及控制在广度和深度上都在不断发展。在广度

上,向着大系统或系统工程方向发展。从单一过程、单一对象的局部控制到对整个工厂等复杂对象进行控制;在深度方面则向着智能化发展,引进自适应、模糊决策、神经网络等各种控制方法,并根据感知的信息进行推理分析、直观判断,自行学习解决问题,获得更高层次的控制效果。

材料加工是指制造材料的各种手段以及处理过程,如铸造、锻造、焊接、压力加工、机加工、热处理及粉末冶金等。所有这些均可利用计算机对其过程进行自动控制,比如目前应用较为广泛的连铸、连轧、多种化学热处理计算机控制,全自动焊机、热处理炉、粉末氢气烧结炉、数控机床等。它们共同的特点是:准确度高;可避免人为因素造成的误差或损失;可改善工人的工作条件和劳动强度;可节省人力物力资源以提高效率。材料加工技术的发展主要体现在控制技术的飞速发展,微型计算机和可编程控制器(PLC)在材料加工过程中的应用正体现了这种发展和趋势。

生产过程自动控制是生产过程现代化的标志之一。在材料加工控制领域,运用较多的是微型计算机和可编程控制器。计算机在材料加工中的应用包括以下几个方面:物化性能测试数据的自动收集和处理、加工过程的自动控制、计算机辅助设计和制造、计算机辅助研究、材料加工过程的全面质量管理等。

用计算机可以对材料加工工艺过程进行优化控制。例如在计算机对工艺过程的数学模型进行模拟的基础上,可以用计算机对渗碳渗氮全过程进行控制。在材料的制备中,可以对过程进行精确地控制,例如材料表面处理(热处理)中的炉温控制等。计算机技术和微电子技术、自动控制技术相结合,使工艺设备、检测手段的准确性和精确度等大大提高。控制技术也由最初的简单顺序控制发展到数学模型在线控制和统计过程控制,由分散的个别控制发展到计算机综合管理与控制,控制水平提高,可靠性得到充分保证。

1.4 计算机仿真(模拟)技术

计算机仿真技术是在建立模型(数学模型、过程模型等)的基础上,对所模拟的客观或理论系统进行定量研究、实验和分析,以便为系统的实际操作提供充分的理论和实验依据。这里的“系统”是广义的,它包括工程系统(如电气系统等),也包括非工程系统(如生态系统等)。计算机仿真既不是实验方法也不是理论方法,而是在实验的基础上,通过基本原理构筑起一套模型与算法,从而计算合理的分子结构与分子行为。

1.4.1 计算机模拟技术的优势

采用各种新颖算法的模拟技术,并结合运算功能强大的计算机,人们能够做到前所未有的细致和精确程度对物质内部状况进行研究。这导致计算机模拟在材料科学中的应用越来越广泛,并由此产生了一门新的材料研究分支——计算材料科学(Computational Materials Science)。采用模拟技术进行材料研究的优势在于它不但能够模拟各类实验过程,了解材料的内部微观性质及其宏观力学行为,并且在没有实际制备出这些新材料前就能预测它们的性能,为设计出优异性能的新型结构材料提供强有力的理论指导。材料科学研究中的模拟“实验”比实物实验更高效、经济、灵活,并且在实验很困难或不能进行的场合仍可进行模拟“实验”,特别是在对微观状态与过程的了解方面,模拟“实验”更有其独特性甚至有不可替代的作用。

1.4.2 材料模拟方法与模拟层次

材料研究可针对三类不同的尺度范围：① 原子结构层次，主要是凝聚态物理学家和量子化学家处理这一微观尺度范围；② 介观层次，即介于原子和宏观之间的中间尺度，在这一尺度范围主要是材料学家、冶金学家、陶瓷学家处理；③ 宏观尺寸，此时大块材料的性能被用做制造过程，机械工程师、制造工程师等分别在这一尺度范围进行处理。既然材料性质的研究是在不同尺度层次上进行的，那么，计算机模拟也可根据模拟对象的尺度范围而划分为若干层次，如表 1.1 所示。

表 1.1 计算机的模拟层次、空间尺度及模拟对象

模拟层次	空间尺度	模拟对象
电子层次	0.1~1nm	电子结构
原子分子层次	1~10nm	结构、力学性能、热力学和动力学性能
微观层次	约 1 μ m	晶粒生长、烧结、位错网、粗化和织构
宏观层次	>1 μ m	铸造、焊接、锻造和化学气相沉积

在研究微观尺度下的材料性能时，统计力学仍是十分有用的原子级模拟方法。这种经典方法最明显的成功是对相变的理解。例如，固体的结晶有序，合金的成分有序或铁磁体的磁化。这种模拟属于所谓的“物质的平衡态”，也就是物质从头至尾已弛豫至与环境达到热平衡和化学平衡。但是，实际许多工艺上情况是远离平衡的，例如，在铸造、焊接、拉丝和施压等情况下，平衡统计力学是不合适的。最近 10 年期间，非平衡过程的理论和这些过程的数学建模技术已经取得很大进步。随着巨型计算机的出现，用于规则的结晶固体的模拟计算，已经达到了定量预测的能力。最新的进展表明，有可能以相似的精度描述诸如缺陷附近的晶体形变、表面和晶粒边界的非规则图像。这些新方法甚至有可能用以研究物质的亚稳态或严重无序状态。

1.4.3 材料研究的主要模拟技术

1.4.3.1 第一原理模拟技术

材料的电子结构及相关物性与宏观性能密切相关。因此，研究材料的电子结构及相关物性，对从微观角度了解材料宏观形变与断裂力学行为的本质机制具有重要价值，也能为探索改善材料力学性能的可能途径提供指导。基于量子力学第一原理的局部密度函数（LDF）理论上的各种算法已能够计算材料的电子结构及一些基本物理性能，包括晶界—非晶—自由表面与断纹面—杂质—缺陷等各类原子组态的电子结构、相结构稳定性、点和切变面缺陷能量、理想解能量、原子键强及热力学函数等，这使得在实验和理论之间的比较不再局限于依靠经验或半经验参量势函数的计算模式。

1.4.3.2 原子模拟技术

按照获得原子位形或微观状态的方法，对于完整和非完整晶体的结构、动力学和热力学性质，有几种可行的模拟方法，如分子动力学方法（MD）、蒙特卡罗方法（MC）、最小能量法（EM）等。分子动力学的目标是研究体系中与时间和温度有关的性质而不只是静力学模拟中研究的构型方面。分子动力学方法是求解运动方程（如牛顿方程、哈密顿方程或拉格朗日方程），通过分析系统中各粒子的受力情况，用经典或量子的方法求解系统中各粒子在某时刻的位置和速度，来确定粒子的运动状态。蒙特卡罗方法是根据待求问题的变化规律，人为地构造出一个合适的概率模型，依照该模型进行大量的统计实验，使它的某些统计参量正好

是待求问题的解。最小能量法是利用计算机计算晶体的能量,通过调整原子的位置、调整原子间的化学键长和键角得到最可能的结构,使其系统能量下降,达到最小,所计算的能量值与实验结果相比较,可达到相当精确的程度。

1.4.3.3 连续介质模型的模拟方法

为处理宏观问题,常用的方法主要包括传统的有限差分法、有限元法、边界元法等。例如,对材料研究中的传热温度场、传质扩散等问题都可借助这些方法进行求解。此外,对于某些连续的材料微观物理演变过程,也可以在对空间和时间的离散化处理的基础上,采用一定的算法对其进行数据模拟,如对材料的显微组织转变过程、晶粒或第二相粒子长大过程等现象的数值模拟。

1.4.3.4 综合化模拟方法

综合模拟技术是近年来兴起并蓬勃发展的一类新技术。综合化的含义主要体现在研究方法和研究对象的空间尺度两个方面,前者除发展全新技术外,还包括将原有的基于交互作用势函数的原子模拟技术、从第一原理出发的各种计算技术、连续介质模型、离散化数值计算这几类技术相结合的模拟技术;后者或是直接研究介于原子尺度和宏观尺度之间中间尺度(1~100 μm)的材料结构与性能,或是将不同尺度的材料行为联系起来作为统一体加以研究,特别是如何将不同层次的研究联系起来,已成为材料模拟领域最富挑战性的重点课题。

1.4.3.5 人工智能模拟技术

在材料研究和应用的不少领域中,很大程度上还依靠经验解决问题,或者某些问题即使存在理论上的算法解,但由于解法过于复杂,使它们难以应用到实际中。针对上述现象,属于人工智能范围的各种计算机模拟技术为解决这些涉及材料研究与应用中特有的问题提供了有效工具,包括聚类模拟识别技术、专家系统、人工神经网络技术等,它们已经逐渐被应用于材料的组织成分设计、材料制备和加工过程的控制、材料物理与力学性能的预测等各个方面。

1.4.3.6 优化设计技术

这种设计的基本原理是:从已有的大量数据、经验事实出发,利用现有的各种不同结构层次的数学模型,如合金的成分、组织、结构与性能关系的数学模型及相关数据理论,如固体与分子经验电子理论、量子理论等,通过计算机对比、推理思维来完成优选新合金、新材料的设计过程。优化设计实质上就是数学上的最优化问题,任何一个需要优化设计的实际材料问题都可以用最优化技术来解决。

1.4.4 计算机模拟在材料科学中的应用

计算机仿真的用途十分广泛,它可应用于系统生命周期的三个阶段,即系统论证分析、系统开发建立和系统运行维护。在系统论证分析阶段,计算机仿真论证新系统建立的可能性及必要性,分析原有系统存在的问题及改进途径,减少盲目性和风险。在系统开发建立阶段,计算机仿真可用于实验新建立的系统(或子系统)的动态性能,提高工程质量。在系统运行维护阶段,计算机仿真可用于对系统运行进行指导(如调度),训练系统的操作人员,提高系统的运行质量。

1.4.4.1 新材料的设计合成

材料设计是指通过理论与计算,预报新材料的组分、结构与性能,或者通过理论与设计来“订做”具有特定性能的新材料,按生产要求设计最佳的制备和加工方法。材料设计主要是利用人工智能、模式识别、计算机模拟、知识库和数据库等技术,使人们能将物理、化学

理论和大批杂乱的实验资料沟通起来,用归纳和演绎相结合的方式对新材料的研制做出决策,为材料设计的实施提供行之有效的技术和方法。

无论是对现有材料的合成与制备过程的改进,还是对新材料合成与制备的研究,仍然在很大程度上需要参照现有同类材料的合成与制备经验。这就使得各类材料的数据库,特别是各种材料的化学和物理化学性质的数据库显得非常重要。例如,一种新陶瓷材料的合成,一种新型晶体材料的生长,如果能得到有关相图方面的信息,就可以大大减少工作中的盲目性,减少工作量。这时,计算机及其相关技术就成为必不可少的工具,依据材料科学的知识系统,将大量丰富的实验与模拟计算资料存储起来以形成综合数据库。目前,各国的材料研究机构已经建立了许多不同类型的数据库,如合金系相图、晶体结构参数和物理性质、相和组织的力学性能图等。

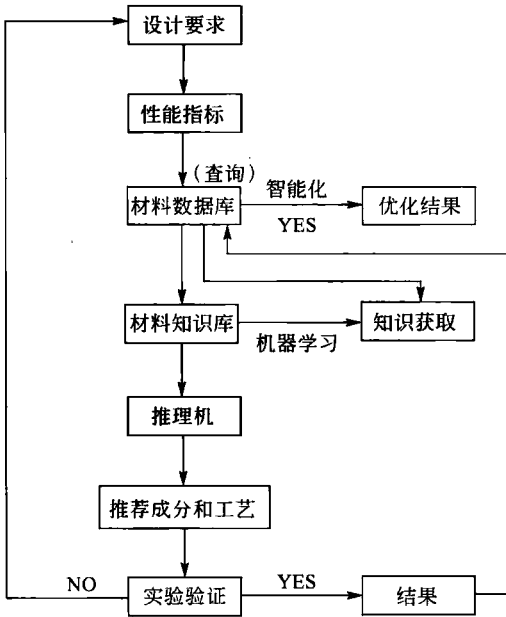


图 1.1 材料设计专家系统流程

材料设计是研究材料的合成和制备问题的最终目标之一。许多化学家、物理学家和材料学家在这一方向上不懈地努力着。他们将材料方面的大量数据和经验积累起来,在数据库的基础上形成了大大小小的专家系统,一些工作已经取得了很好的结果。

如图 1.1 所示的是一个计算机辅助 Bi-YIG 磁光薄膜材料设计的专家系统,在这个系统中两个最重要的部分就是材料数据库和材料知识库。材料数据库中存储的是具体有关材料的数据值,它只能进行查询而不能推理;材料知识库中存储的是规则,当从数据库中查询不到相应的性能值时,知识库却能通过推理机构以一定的可信度给出性能的估算值,从而实现性能预测功能。同时,也可用知识库进行组分和工艺设计,在整个知识库中采用了近年来在国际上兴起的数据库知识发现技术 KDD。材料设计的专家系统是今后发展的重要方向之一。

要方向之一。

1.4.4.2 材料的组成和结构分析

现今材料的组成和结构表征研究主要采用各种大型分析设备进行,例如扫描电镜 (SEM)、透射电镜 (TEM)、分析电镜 (AEM)、扫描探针显微镜 (SPM) 等;各种谱仪如可见光谱、红外光谱、拉曼光谱、原子吸收光谱、等离子体发射光谱、荧光光谱等;各种衍射仪如 X 射线衍射、电子衍射、中子衍射等。这些大型分析设备几乎无一例外地是在计算机的控制之下完成分析工作的。这些分析设备提供不同的分析模拟软件以及相应的数据库,而且这些分析模拟软件的功能非常强大,大大减轻了数据处理的工作量,可以给出能够直接用于发表的各种图表。

1.4.4.3 材料的性能测试和分析

材料性能的测定大多使用专门的测试设备和仪表。有时为了测定某些较为特殊的性能,也常用一些通用的测试设备和仪表组成比较复杂的测试系统。在组建的测试系统中,如果使用计算机来控制整个系统,使其协调运行,进行数据采集和数据处理,通常都能使整个系统

的功能得到飞跃性的增强。计算机化的材料性能测试系统 (CAT 系统) 是提高材料研究水平的重要手段。由于计算机灵活的编程方式, 强大的数据处理能力和很高的运算速度, 使得 CAT 系统可以实现手动方式不能完成的许多测试工作, 提高了材料实验研究的水平和测试的精度。在材料性能分析方面, 计算机的应用也非常广泛。例如, 对纳米非均匀体系中的内应力场及其对相变的影响以及多晶系统中的晶粒压电共振等许多问题进行计算和模拟。这些计算和模拟为深刻地认识材料的物理性质, 为建立相应的物理模型提供了有力的论据。

1.4.4.4 材料加工的自动控制

对材料进行加工是工业上制造和处理材料的重要手段。材料加工主要包括铸造、锻造、压力加工、热处理及粉末冶金等。所有这些均可利用计算机对其进行自动控制。材料加工的基本原理是: 根据材料加工的尺寸或性能要求向计算机输入相关数据, 将得到的信息经过 A/D 转换成数字信号输入计算机, 计算机经过自己的程序处理, 最后将处理的数字信号经 D/A 转换器变成模拟信息, 进而将模拟信息传输到相应的执行设备以达到自动控制效果。

1.4.4.5 相图计算及其软件

相图是描述相平衡系统的重要几何图形, 通过相图可以获得某些热力学资料; 反之, 由热力学数据建立一定的模型也可计算和绘制相图。用计算机来计算和绘制相图有了广泛的应用。当今最具代表性的材料集成热化学数据库和相图计算软件是瑞典皇家工学院开发的 Thermo-Calc 系统 (包括物质和溶液数据库、热力学计算系统、热力学评估系统) 和加拿大蒙特利尔工业大学开发的 FACT 系统 (包括物质和溶液两个数据库及一套热力学和相图等的优化计算软件)。这些软件的共同特点是集成了具有自洽性的热化学数据库和先进的计算软件, 可用于各种类型的二元、三元和多元相图的平衡计算。

1.4.5 计算机模拟在高分子材料科学中的应用

计算机模拟覆盖了高分子物理、高分子化学、高分子材料加工与高分子材料的分子设计等领域。目前国内外许多专家都在开拓该领域的研究。

计算机仿真最早开展研究是在高分子材料物理性能的估算方面, 目前仍是国内外研究的热点, 从基本分子结构形态模拟估算到高分子材料各种物理性能的估算, 几乎涉及高分子物理的各个方面。

在高分子结构方面, 用计算机模拟网状聚合物中链的取向, 模拟支链聚合物分子量分布和支化度, 采用动力学理论模拟网状聚合物的形成。在高分子电性能方面, 模拟偶极转化极性聚合物的介电松弛, 模拟稳定聚合物铁磁体液晶态的光电响应, 固体聚合物电解质的离子传导。在高分子力学性能方面, 模拟聚合物液晶的结构和机械性能关系。利用随机抽样 (或称统计法) 的 Monte Carlo 模拟技术, 在研究聚合物的热力学性质、相分离动力学、链动力学、链的构象和构型性质以及聚合物共混物的相形态学等方面有大量成果。

聚合反应是非常复杂的, 由于影响因素较多, 很多反应难以对其反应机理和动力学行为进行精确的建模和仿真。在聚合过程中, 寻找能反映聚合体系的化学和物理本质, 准确描述反应动力学行为的模型是亟待解决的问题。许多学者提出了各种模型, 例如:

(1) 从苯乙烯自由基聚合反应和机理出发, 在工厂生产模拟实验数据的基础上, 建立苯乙烯本体聚合反应动力学模型。针对不同待定参数的识别问题, 采用相应优化方法, 给出用于估计待定参数初始值范围的经验公式, 有效地解决苯乙烯聚合反应的动力学方程参数初始值难以确定的问题。

(2) 模拟二氧化碳环氧丙烷共聚过程。

(3) 能用于模拟多种单体的乳液聚合过程的数学模型。

(4) 以一个工业化聚酯生产过程为例, 以反应度法和生成函数为工具, 建立描述此类缩聚反应过程的反应动力学及其分子分布的数学模型。

1.5 计算机数据和图像处理技术

材料科学研究在实验中可以获得大量的实验数据, 这些处理数据往往比较复杂, 涉及的数据精度要求较高, 仅凭人工计算处理难以达到精度要求, 即使能达到, 也要花费相当多的精力和时间, 且出错的概率很大。借助计算机的存储设备, 可以大量保存数据, 并对这些数据进行处理(计算、绘图、拟合分析)和快速查询等。

材料的性能与其凝聚态结构有密不可分的关系, 其研究的手段之一就是光学显微镜和电子显微镜技术, 这些技术以二维图像方式表述材料的凝聚态结构。利用计算机的图像处理和析功能就可以研究材料的结构, 从图像中获取有用的结构信息, 如晶体的大小、分布、聚集方式等, 并将这些信息和材料性能建立相应的联系, 用来指导结构的研究。

目前, 可用于数据管理、计算、绘图、解析和拟合分析的软件很多, 有些功能强大, 有些则相对简单、专业化。一个比较著名的软件是 Microcal Software 的 Origin 软件(参见第 4 章), 可以对科学数据进行一般的处理与绘图, 对实验数据进行常规处理和一般的统计分析, 用数据作图, 用多种函数拟合曲线等。

计算机图像分析系统正逐渐成为辅助研究材料结构与性能之间定量关系的一种重要手段。图像处理主要是用常规软件(Photoshop 等)进行材料的图像分析与处理, 例如, 材料凝聚态结构单元的测量, 利用图像色调整的方法进行图像的二值化, 包括目标粒子的分离、背景的去除等。典型的应用如计算机图像分析系统在金属材料研究中的应用, 包括晶粒度测量、夹杂物的评级、相分析(包括测含量及形状因子)以及显微硬度、孔洞率、球化率、圆度和涂层厚度的测定。

计算机在材料检测中的应用目前主要集中于材料的成分、组织结构与物相、物理性能的检测, 以及机械零部件的无损检测等方面。其基本方法是借助于某种探测器, 将各探测到的信号转化为数字信号传输到计算机里, 然后通过程序员编制的相关程序对这些数字信号判断、处理后得到相应结果。例如, 能谱分析仪、X 射线仪、超声波无损检测仪、万能材料实验机等计算机处理系统等就是这方面应用的成功事例。

1.6 计算机模拟的步骤

计算机模拟的基本步骤是: ① 首先建立系统的数学模型, 并将它转变为能在计算机上运行的仿真模型; ② 根据研究目的, 设计在计算机上对模型进行实验的框架; ③ 在计算机上运行模型以得到模型的行为特性; ④ 对行为特性进行分析, 若有必要, 需改进模型或实验框架, 重复上述步骤。

根据系统数学模型描述特点的不同, 计算机仿真一般分为连续系统仿真与离散条件系统仿真两大类。二者的主要区别是连续系统的数学模型一般可用方程来加以形式化描述, 而离散条件系统则难以用方程加以形式化描述, 往往要以一组逻辑条件及实体流程图来加以

描述。

1.7 结束语

计算机作为一种现代工具，在当今世界的各个领域日益发挥着巨大的作用，它已渗透到各门学科领域以及日常生活中，成为现代化的标志。计算机应用技术从最初的数值计算开始已逐渐渗透到材料研究领域的各个方面。计算机应用系统也由最初的单机系统向集成化、网络化、智能化方向发展，并可处理各种形式的信息。计算机应用系统也由最原始的手工编程发展到运用软件工程的原理以及诸如层次、结构和面向对象的多种开发方法。由于更多地依赖专用的软件开发工具和环境以及在操作系统和应用软件之间出现了越来越多的中间软件，为应用软件的开发提供了方便的平台和接口，从而使计算机应用的开发人员趋于非计算机专业化，也使计算机技术广泛应用于材料科学。

参考文献

- [1] 李旭祥. 计算机技术在高聚物研究中的应用. 石化技术与应用, 2000, 18 (3): 125-128.
- [2] 黄万. 计算机在材料科学中的应用. 包钢科技, 2005, 31 (增刊): 6-8.
- [3] 陈文革, 魏劲松, 谷臣清. 计算机在材料科学中的应用. 材料导报, 2000, 1 (2): 20-21.
- [4] 高英俊, 刘慧, 钟夏平. 计算机模拟技术在材料科学中的应用. 广西大学学报: 自然科学版, 2001, 26 (4): 291-294.

第 2 章 化学中的常用计算机软件与资源

计算机作为一种化学学习和研究的工具有着不可替代的作用。它不仅能够帮助人们进行文字及图形处理等文书工作，而且可以在化学学习与研究的各个方面协助人们更快、更好地工作。本章介绍一些常用的能在 PC 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。

2.1 化学结构式

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常用的平面图形的绘制。常见的这类软件有：ChemDraw、ChemWindow、ISIS Draw、ChemSketch 等。ChemDraw 和 ChemWindow 为商业软件，有关它们的资料可以查阅各自的网站 <http://www.camssoft.com/software> (现为 PerkinElmer 公司所有) 和 <http://www.bio-rad.com>，最新版本分别为 12.0 和 6.5。ISIS Draw 和 ChemSketch 对教育界及家用为免费软件，可以在它们各自的网站 <http://accelrys.com/products/informatics/cheminformatics/draw/> 和 <http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/> 上下载，最新版本分别为 2.4 和 4.0。

ChemDraw 为当前最常用的结构式编辑软件，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 ^{13}C 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 5 万张 ^{13}C NMR 的数据库 (达 250MB)，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、拉曼 (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 外，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。

2.2 三维结构

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 及带状 (Ribbon) 等模式显示化合物的三维结构，如图 2.1 所示。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，作为免费软件，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.chem.ac.ru/Chemistry/Soft/WEBLAB.en.html>。

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。

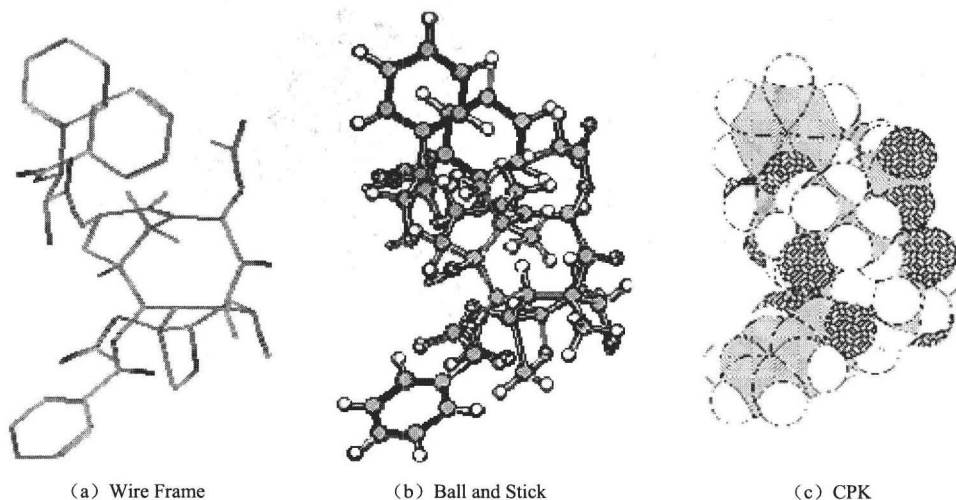


图 2.1 各种三维结构模型

WebLab Viewer 的 Pro 版本表现生物分子和晶体结构的能力比较强，如图 2.2 所示。

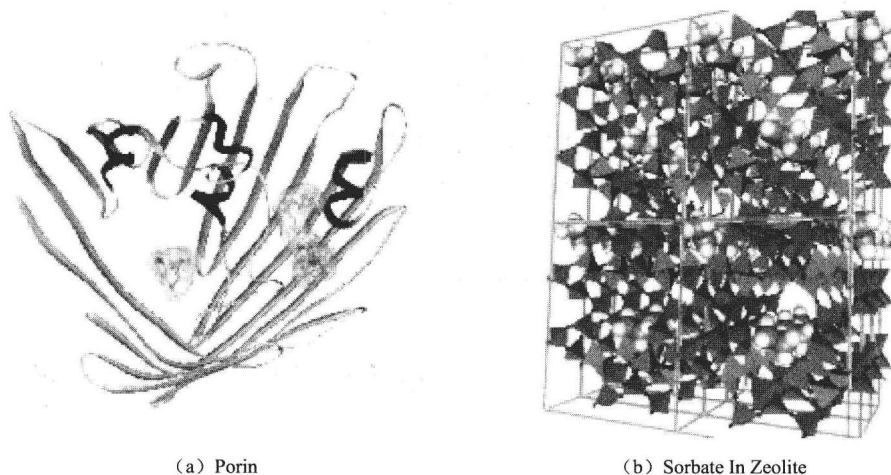


图 2.2 WebLab Viewer 的 Pro 版表现的生物分子和晶体结构

2.3 数据处理

化学中的数据处理多种多样，对不同的数据处理要求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 8.6，其演示版可以从 <http://www.originlab.com/>