



普通高等教育“十三五”规划教材
化学本科专业全程实践教学体系改革实验丛书

丛书总主编 ● 刘 卫

计算机在 化学中的应用

JISUANJI ZAI HUAXUE ZHONG DE YINGYONG

主 编 ● 黄兆龙

副主编 ● 刘 卫 陈雪冰 苟高章



普通高等教育“十三五”规划教材
化学本科专业全程实践教学体系改革实验丛书

计算机在 化学中的应用

主 编 ○ 黄兆龙

副主编 ○ 刘 卫 陈雪冰 苟高章

西南交通大学出版社
· 成 都 ·

图书在版编目 (C I P) 数据

计算机在化学中的应用 / 刘卫总主编; 黄兆龙主编.

—成都: 西南交通大学出版社, 2017.7

(化学本科专业全程实践教学体系改革实验丛书)

普通高等教育“十三五”规划教材

ISBN 978-7-5643-5564-7

I. ①计… II. ①刘… ②黄… III. ①计算机应用—
化学—高等学校—教材 IV. ①O6-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2017) 第 164741 号

普通高等教育“十三五”规划教材

化学本科专业全程实践教学体系改革实验丛书

计算机在化学中的应用

总 主 编 / 刘 卫

主 编 / 黄兆龙

责任编辑 / 牛 君

助理编辑 / 黄冠宇

封面设计 / 何东琳设计工作室

西南交通大学出版社出版发行

(四川省成都市二环路北一段 111 号西南交通大学创新大厦 21 楼 610031)

发行部电话: 028-87600564

网址: <http://www.xnjdcbs.com>

印刷: 成都中铁二局永经堂印务有限责任公司

成品尺寸 185 mm × 260 mm

印张 14 字数 332 千

版次 2017 年 7 月第 1 版 印次 2017 年 7 月第 1 次

书号 ISBN 978-7-5643-5564-7

定价 38.00 元

课件咨询电话: 028-87600533

图书如有印装质量问题 本社负责退换

版权所有 盗版必究 举报电话: 028-87600562

前 言

计算机技术的发展日新月异，它已渗透到生产、科研、生活等领域，在现代化、信息化、自动化的文明社会里，计算机技术已经成为“三化”的技术支撑，不容置疑，整个社会已经离不开计算机科学与技术了。

计算机技术在化学中的应用，从早期的简单数据处理，到理论化学的复杂计算，药物设计，化学作图，化工生产控制系统，几乎无处不在。尤其是互联网的普及，计算机技术被应用到更宽、更广的信息领域，数字化资源的拓展与共享，改变了人们的思维习惯和研究习惯，促进了科学、技术的研究与应用。

本教材结合计算机化学的特点，结合读者已经具备的计算机知识，在大家已有的计算机知识的基础上，介绍一些与计算机关联的化学作图、化学计算、化学资源检索等基础知识和技术；同时，还介绍了计算机应用中一些中级水平的技能技巧，并适当介绍一些化学相关的编程基础，以适应计算机化学应用技术的发展要求，给有意提高计算机化学应用水平的读者提供基础的知识和临摹材料。所以，本书是一本从初级到中级水平过渡的计算机化学教材。

编 者

2016年11月

目 录

1	办公软件在化学中的应用	1
1.1	Microsoft Office 中的通用技术技巧	1
1.2	Microsoft Word 在文档编辑中的应用	8
1.3	Microsoft Excel 在化学化工数据处理中的应用	20
1.4	PowerPoint 在化学教学中的应用	33
1.5	WPS Office 简介	43
2	化学绘图软件	46
2.1	简 介	46
2.2	CS ChemWindow 简介	46
2.3	CS ChemOffice 简介	56
3	Origin 在化学化工中的应用	75
3.1	概 述	75
3.2	Origin 的基本操作	77
3.3	Origin 在化学中的应用实例	95
4	Internet 与网上化学信息检索	126
4.1	化学期刊网上资源	126
4.2	化学数据库资源	137
4.3	专 利	143
4.4	三大检索资源	149
4.5	美国化学文摘	157
4.6	文献检索常见问题	164
5	实验数据的数学处理方法	165
5.1	实验误差的软件计算方法	165

5.2 线性方程组的求解	167
5.3 非线性方程的求解	171
6 VBA 基础知识及其在化学中的应用	186
6.1 VBA 基础知识	186
6.2 Word 文档中插入化学计算面板的方法	195
6.3 Word 文档中化学式的批量转换程序	207
参考文献	218

1 办公软件在化学中的应用

目前,国内最常用的办公软件主要是微软的 Microsoft Office 和中国金山公司的 WPS Office,国内也有一些公司制作了与微软和金山兼容的办公软件,体积更小,功能强大,能够满足中国人办公的一般要求。例如,永中 Office,虽然只有数十兆,但它的功能比较齐全,完全能够满足一般办公要求,硬盘和内存占用小,将 Word、Excel、PPT、PDF 等模块打包在一个软件中,在同一个软件窗口中,可以打开四类文档。

由于化学文档有其专业的特点,编辑排版较为复杂,符号、公式、图标也多于其他学科文档,因此,建议使用微软 Office 来编写化学文档,尤其是微软 Office 中的开发工具,如 VBA,使微软 Office 的应用范围更广,可提升的文档技术水平更高。因此,本章主要介绍微软 Office 的应用技术。

1.1 Microsoft Office 中的通用技术技巧

1.1.1 自定义工具栏

Word 2003 版工具界面以下拉菜单配置为主要特点,而 2007 版及以后的版本,虽然各自的界面相互间也有较大差异,但共同特点是分块的工具图标布局,基本放弃了下拉菜单的设计,将各菜单下的条目内容细化,并将同一栏目下更多的设置展开在工具栏上,将最常用、最基本的设置放在新增的“开始”栏目下,以图标形式表现,大气、美观、内容丰富,使用也更方便。针对 2003 版的工具栏,Word 提供了较大的自定义空间,用户可以根据需要和喜好增减工具栏内容。2007 版以后,自定义工具栏的用户空间很窄,当然,新的布局提供了更多的方便,不作改动也完全能满足一般用户的需要。下面重点介绍 Word 2003 版的工具栏修改方法。

根据化学文档的特点和编辑要求,工具栏最好能提供以下功能的按钮图标(2003 版默认不含)。

- (1) 上下角标:编辑化学式、离子式。
- (2) 段落左对齐:中国大陆文体习惯的排版方式。
- (3) 公式编辑器:化学公式及离子式编辑。
- (4) 表格自动求和:对 Word 表格中的数据进行求和计算。
- (5) 工具计算:在 Word 文档中进行简单的数学计算。
- (6) 页面设置:对打印文档的排版设置。

(7) 横排图文框：插入图文框（文本框可以在绘图工具栏中找到）。

2003 版自定义工具栏的步骤是：

点开顶部菜单中的“工具”，从下拉菜单中点击“自定义”，弹出自定义窗口，再选中间条目“命令”，即呈现如下窗口（图 1-1）

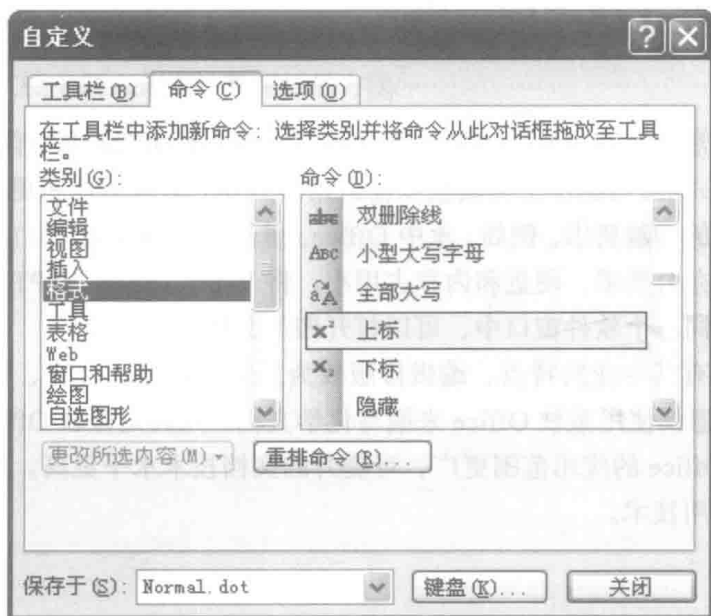


图 1-1 自定义工具栏（添加角标）

点击左边的“格式”，拖动右边右侧的滚动条，找到“上角标”图标 x^2 ，用鼠标左键按住图标拉到工具栏空白或适当的位置松开左键，工具栏就新增了上角标。同理，返回自定义命令窗口，找到下角标图标 x_2 ，拉到工具栏上。

还有几个常用工具图标也建议提到工具栏上，它们是：左对齐 \equiv （编辑）；公式编辑器（插入）；自动求和（表格）；工具计算（工具）；页面设置（文件）；横排图文框（插入）。

如果不喜欢工具栏上默认的某个图标（几乎不用的），可以用鼠标左键按住该图标，拉到自定义窗口中的任何位置，然后松开左键，工具栏上的图标就消失了，需要恢复它时，再从自定义窗口中找到相关类别，从右侧找到该图标，重新拉到工具栏上即可。

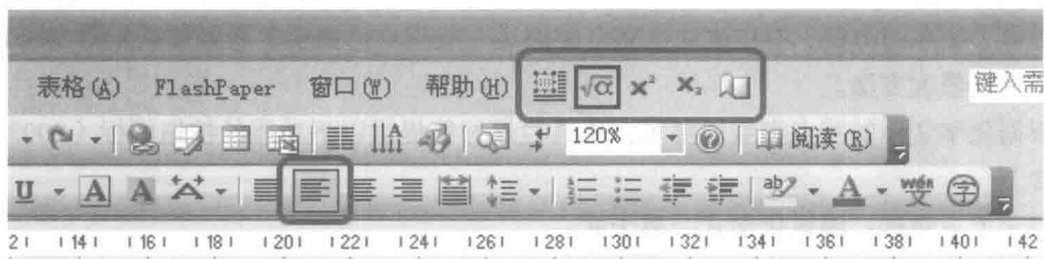


图 1-2 修改后的 word 工具栏

1.1.2 自定义快捷键

Office 中提供了工具栏方便鼠标操作，同时，也提供了很多快捷键，以便让用户手不离

键盘就能进行编辑和排版，履行鼠标的功能。事实上，快捷键不但使手的操作更快捷，在电脑系统的指令传输中，也快于鼠标。大家注意观察：2003版的菜单名称后都有一个括号框住的大写字母，在2007以后的菜单中也会出现类似的表示，它就是快捷键的關鍵字。默认操作是：按下Alt+括号内字母，即可打开下拉菜单，例如，按Alt+F，则可打开“文件”的下拉菜单。通常，下拉菜单首先出现最常用的条目，片刻，便展现菜单的全部条目。下面的快捷键适用于大多数窗口下拉菜单：

Alt+F（文件）；Alt+E（编辑）；Alt+V（视图）；Alt+I（插入）；Alt+T（工具）；Alt+W（窗口）；Alt+H（帮助）。

此外，在Office软件的编辑中，还有一些比较常用的默认快捷键：

Ctrl+S（保存）；Ctrl+A（全选）；Ctrl+C（复制）；Ctrl+V（粘贴）；Ctrl+X（剪切）；Ctrl+Z（撤消键入）；Ctrl+I（斜体，再按则恢复正常）；Ctrl+U（下划线，再按则恢复正常）；Ctrl+B（黑体，再按则正常）；Ctrl+Home 键（全文首）；Ctrl+End（全文尾）；Home（同一行文字的左端）；End（同一行文字的右端）；Ctrl+=（下角标）；Ctrl+Shift+=（上角标）。重复按一次则恢复正常。

上面归纳的快捷键都是微软已经定义的默认快捷键。其实，软件也提供了自定义快捷键的方法，我们可以根据化学文档的编辑需要，定义一些新的快捷键，方便操作，提高编辑排版效率。下面介绍几种自定义的快捷键。

注意，定义快捷键时，需要确认用户指定的快捷键还没有被系统使用，否则，快捷键会出现冲突，使自定义快捷键失效。要检验拟定义的快捷键是否可用（还没有被软件默认占用），可以直接按下将要定义的快捷键，看看文档的编辑窗口有没有变化，如果没有任何变化（无弹窗，无下拉菜单，工具栏按钮无下陷选中情况），表明该快捷键可用，否则，需要另选其他快捷键。一般快捷键可以由两个或三个键构成，例如：我们想定义下标的快捷键为Alt+Z（并不会影响微软默认的Ctrl+=，只是多了一种选择而已），此前，我们应该先同时按下Alt+Z组合键，观察窗口有无变化，结果表明，无变化，这个组合快捷键是可用的，我们便可以定义它们来启动某种操作。一般情况下，Alt+Z、Alt+X、Alt+C、Alt+S、Alt+D等组合键没有被使用，我们可以分别赋予它们一定的操作任务。下面，以定义下标快捷键Alt+Z为例，说明自定义快捷键的操作步骤（见图1-3）：

（1）检查确定要使用的快捷键。一般Office系统中的Alt+Z均未被软件占用，我们指定它为设置下标的快捷键，即按下Alt+Z键后，被选定的字符便立即变为下标，再按一次后，又恢复为正常显示。

（2）点菜单上的“工具/自定义”，弹出自定义窗口。

（3）点窗口底部的“键盘”按钮，弹出“自定义键盘”窗口。

（4）从左边“类别”找到格式，再从右边移动滚动条，找到Subscript，选定它。

（5）用鼠标在右边“请按新快捷键”下的输入框里点一下，使处于输入状态。

（6）按下Alt+Z组合键，则在该输入框中即显示出“Alt+Z”。

（7）按下左下角的“指定”按钮，在左边“当前快捷键”窗口里便新增“Alt+Z”。

（8）关闭两个窗口。

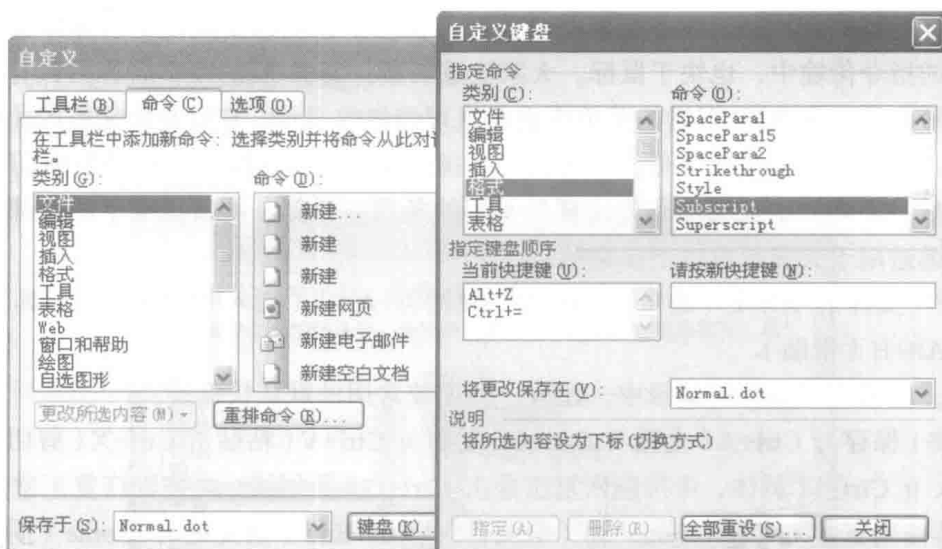


图 1-3 自定义快捷键

如果不删除 $\text{Ctrl}+=$ ，则两个快捷键都能够控制下标的形成与撤消。自定义的 $\text{Alt}+\text{Z}$ 可以通过左手二指操作，比默认快捷键方便。

我们注意到，弹出的自定义键盘窗口中，右边的快捷键名称都是英文，英文名称就是控件的名称，可以从下部的中文“说明”来了解控件的作用和意义。

其他操作的快捷键按上述方法设置即可。需要设置快捷键的命令有：上标、下标、调出公式编辑器和某些宏的启动键（后面会介绍宏知识）。

1.1.3 定义“自动更正”的化学符号

自动更正是 Office 中一个自动修正错误的小工具。尤其是英文单词输入错误时，系统会自动更正为正确的单词。系统中已经含有大量的自动更正项，同时，系统也为用户提供了自定义自动更正项的功能。利用自定义自动更正功能，可以根据化学文档的共性内容和特点，定义一些自动更正项，用它们来完成一些符号或文字替换，加快录入速度，提高正确率。

在 Office 2003、2007、2010 和 2013 中都有“自动更正”的设置，但进入途径不完全相同。下面介绍 Word2003 设置“自动更正”的操作步骤。

1. 自动生成摩尔浓度符号 mol/L

步骤：

- (1) 点菜单“工具/自动更正”选项，弹出自动更正窗口。
- (2) 点开“自动更正”，一切保持默认，左边“替换”填写输入的内容或代号，右边“替换”填写替换后的结果。

更正实例：输入 M^* （输入在左边），自动更正为 mol/L（输入在右边）。

录入一组内容（2 个），按下“添加”，再继续录入下一组内容，再添加。添加完毕，按“确定”退出。

自动更正窗口见下图（图 1-4）：



图 1-4 添加自动更正的对象

2. 自动转换双字母元素符号

在图 1-4 中，替换处输入“AG”，替换为“Ag”，点击添加，然后，依次将 BA-Ba、CA-Ca 等双字母元素符号的替换添加进去。

在输入文档时，遇到双字母元素符号，只要左手按“Shift”，右手按大写字母的元素符号，继续输入内容时，界面就会自动转换为大小写的元素符号。可以省去中英文切换步骤，加快输入速度。

1.1.4 全角与半角的希腊字母

化学文档中使用希腊字母的频率不少，输入希腊字母的途径也较多，可以从各种中文输入法中输入，也可以从右键菜单的“输入符号”调出符号窗体，由希腊语符号输入，还可以从工具栏字体集中找到 symbol 字体输入。它们的差别是：输入法及系统的“输入符号”中的希腊字母是全角符号，而从字库 symbol 里输入的是半角符号。在化学文档中推荐使用半角的希腊字母，显得紧凑、美观。

例如，络合效应系数符号用输入法表示时为 $\alpha_{M(L)}$ ，而用 symbol 字库中的符号表示时为 $\alpha_{M(L)}$ 。

显然，用半角符号更合理，建议使用“字库”中的 symbol 符号集。可以直接获得半角符号，美观又方便，且符合目前的化学论文化学规范性。

1.1.5 快速生成化学式的两种方法

字符查找和替换是 Office 的重要功用之一。常规的查找和替换一般只涉及字符串、短语符号，替换也只是这些内容之间的替换，但事实上，Word 还可以使用格式和控制符替换。利用控制符替换快速完成中文（或代号）转化学式，转公式，转图形的替换。


1. “硫酸”替换为 H_2SO_4


设化学文档中含有大量的“硫酸”字样，要将它们都转换成化学式，可以先输入一个化学式“ H_2SO_4 ”，然后，复制这个化学式。打开替换面板（或按下 $\text{Ctrl}+\text{H}$ ），在弹出的替换窗口中，查找内容栏输入“硫酸”，替换为处输入“^c”，按下“全文替换”，则文档中所有的中文“硫酸”都替换为它的化学式。

同理，可以将各种化合物或离子式名称替换为对应的化学式或离子式，所要做的就是，先编辑一个化学式，复制，在替换窗口中只要修改查找内容即可。


“^c”的意义就是将剪贴板中的内容替换要查找的内容。所以，用这个控制符可以替换为公式、图片、大段文字等。

2. 格式刷复制化学式角标

格式刷图标为，它可以一次或多次复制一种格式，例如，化学式的上标、下标，字体、字号、颜色等格式。

复制下角标的方法：先编辑好一个含下标的化学式，如 H_2S ，选中下角标（不是整个化学式），然后，单击工具栏中的格式刷图标（呈按下状态），将鼠标移到文档中需要变下标的字符处，按左键拖动选中，如选中 CH_4 中的“4”，松开左键，则 CH_4 立即变成 CH_4 。

如果要一次处理很多的下标，则可以将单击格式刷改为双击格式刷，这样，格式刷就可以无限次地使用而不会弹起，直到再单击一次格式刷，让其弹起为止。


必须强调：格式刷只能复制一类完全相同的字符，例如，使用上标格式刷可以刷 Na^+ 中的“+”， Fe^{3+} 中的“3+”，但不能一次完成隔开的同类格式的转换，例如，用下标格式刷来处理 H_3PO_4 式中的“3”和“4”，必须分两次刷，不能一次刷完“ 3PO_4 ”，否则，4 个字符都变下标。另外，取得格式“标准”的复制也只针对一类完全相同的字符，例如，若选定磷酸化学式，点格式刷后，再去刷其他的字符，决不会生成下标，因为它们含两种格式，格式刷无效。

3. 控制符替换

替换面板中有一组特殊控制符，在查找和替换窗口中，点“高级/特殊字符”，即弹出一竖条控制符清单（见图 1-5）。

利用控制符替换可以删除空行，或添加空行。

应用：删除空行

段落标记（ ^p ）就是硬回车的控制符。如果删除段落标记，则该控制符前后的两段文字将合并为一段。如果有两个连续的控制符，则两段文字之间一定有一个空行，如果有多个连续的控制符，则一定含 $n-1$ 个空行。例如下面这段文字共有 5 个空行，可以用控制符的替换方法将全文的所有空行一步删除。

在 Office 中捆绑的“公式编辑器”没有“可逆”符号，
经提供了这些符号。

↵
↵
↵
↵
↵

公式及分子式输入、三线表制作、图表制作与排版、

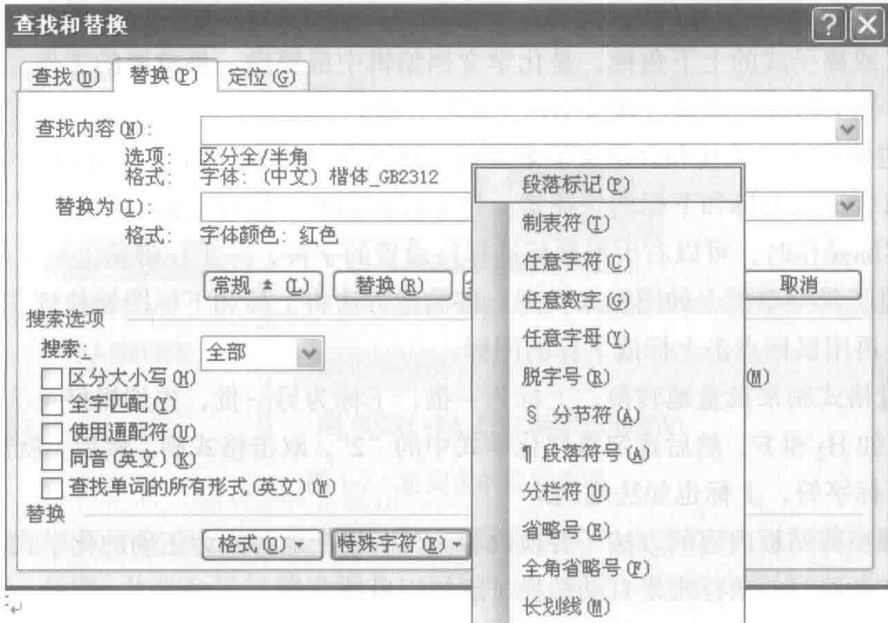


图 1-5 查找特殊字符（用符号表示）

特殊字符可以从菜单里选择，也可以用键盘输入控制符的符号，例如，段落标记的符号为“^p”，注意是半角符号。删除空行的方法是：查找处输入“^p^p”（两个连续的段落符号），替换为输入“^p”。全部替换，因为一次只能删除一个空行，故应该反复按“全部替换”，直到显示替换结果为 0。

窗口输入见图 1-6。

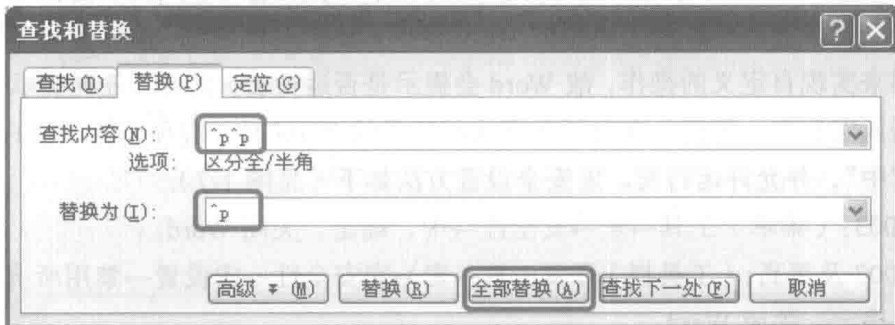


图 1-6 删除空行的替换设置

如果要将所有段落都合并为一段，即删除段落符号，则查找处输入^p，替换处留空，全部替换。如果要在段落与段落之间加一空行，则查找处输入^p，替换处输入^p^p，只能按一次“全部替换”，否则，空行会越来越多。

1.2 Microsoft Word 在文档编辑中的应用

1.2.1 化学式-结构式-反应式编辑

化学式是最基本的化学语言。它主要涉及大量的上角标、下角标和元素符号。

(1) 上下角标。

化学式或离子式的上下角标，是化学文档编辑中最繁琐、最重要的工作。根据前面的技术介绍，上下角标的设置可以采用以下五种方法：

① 通过快捷键（默认和自定义）来实现。建议在 Alt+S、Alt+Z、Alt+C 三个组合键中选择两个组合键为上标和下标的快捷键。按上面介绍的方法将上标宏和下标宏指定给这些组合键。实际操作时，可以右手握鼠标选择待设置的字符，左手在键盘上完成转换。

② 通过工具菜单栏上的图标来实现。按前述方法将上标和下标图标拉到工具栏上，选择字符后，再用鼠标点击上标或下标的图标。

③ 通过格式刷来批量地转换。上标为一批，下标为另一批，先编辑好一个上标和一个下标字符，如 H_2 和 F，然后选定氢气化学式中的“2”，双击格式刷，然后，就反复地“刷”待转换的下标字符，上标也如法炮制。

④ 用替换剪贴板内容的方法（替换内容为^{^c}）逐个地替换为正确的化学式。

⑤ 用作者编写的角标宏来自动转换（宏知识后续介绍）。

(2) 自动完成元素符号大小写的转换。

前已述及。

(3) 化学结构式。

在 Word 中没有专门针对书写化学结构的功能，但可以通过绘图工具来组合成可以输入化学结构的模板，或者利用一些商业化学软件来制作化学结构式。

目前网上可用的化学工具 Word 模板软件有：化学金排、化学画板、超级化学助手，它们运行后可以在 Word 工具栏、菜单里添加各种化学和仪器符号。只要双击模板文件即可打开并生成一个含各类化学符号工具栏的 Word 窗口。由于这些依托 Word 的化学工具几乎都是以宏代码来实现自定义的操作，故 Word 会提示是否运行宏，甚至无任何提示地拒绝运行宏，以防引入宏病毒。所以，在打开含有这些工具的 Word 时，应预先将 Word 的宏安全级别设置成“中”，并允许运行宏。宏安全设置方法如下（见图 1-7）：

Word2003：（菜单）工具→宏→安全性→中，确定。关闭 Word。

Word2007 及更高：（工具栏）开发工具→宏→宏安全性→宏设置→禁用所有宏，并发出通知，点击确定，关闭 Word。

设置完毕，关闭 Word 后，再重新打开 Word 或模板文件。Word2003 会弹出对话框，提问是否启动宏，应选择其中的“启动宏”；Word2007 及更高版本，不弹出对话框，而是在工具栏下部出现橙色的提示条，请按下允许宏运行。便进入熟悉的 Word 界面，但工具栏中会新增几组工具按钮。

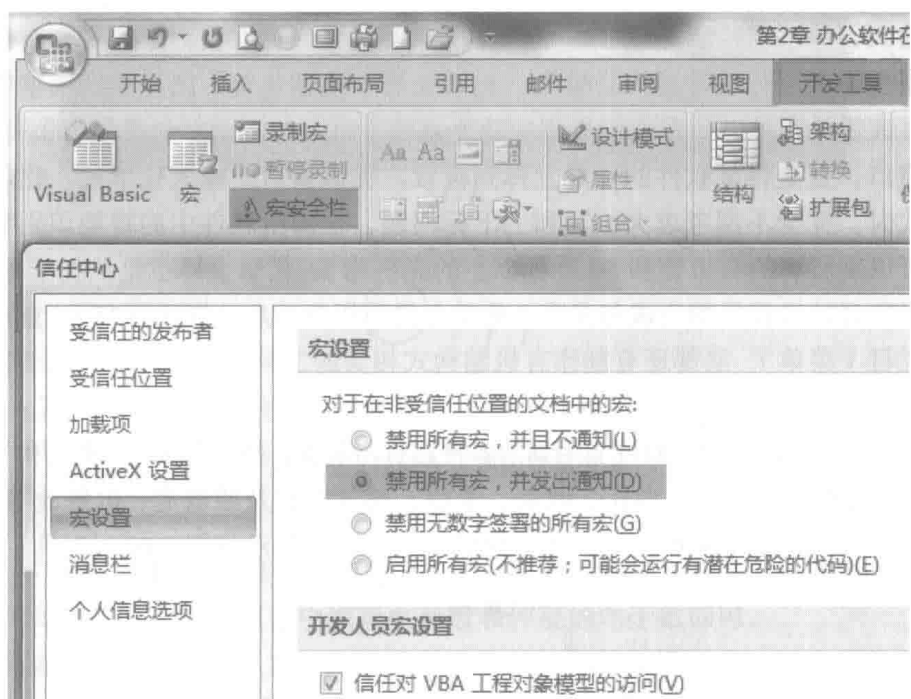


图 1-7 宏安全的设置选项

上述提到的几个化学工具，主要是用于书写化学式和化学方程、绘制化学结构图、仪器装置图等，其中，化学金排的模块较多，功能齐全，颇受中学化学教师的欢迎。嵌入 Word 中的化学金排界面，见图 1-8。

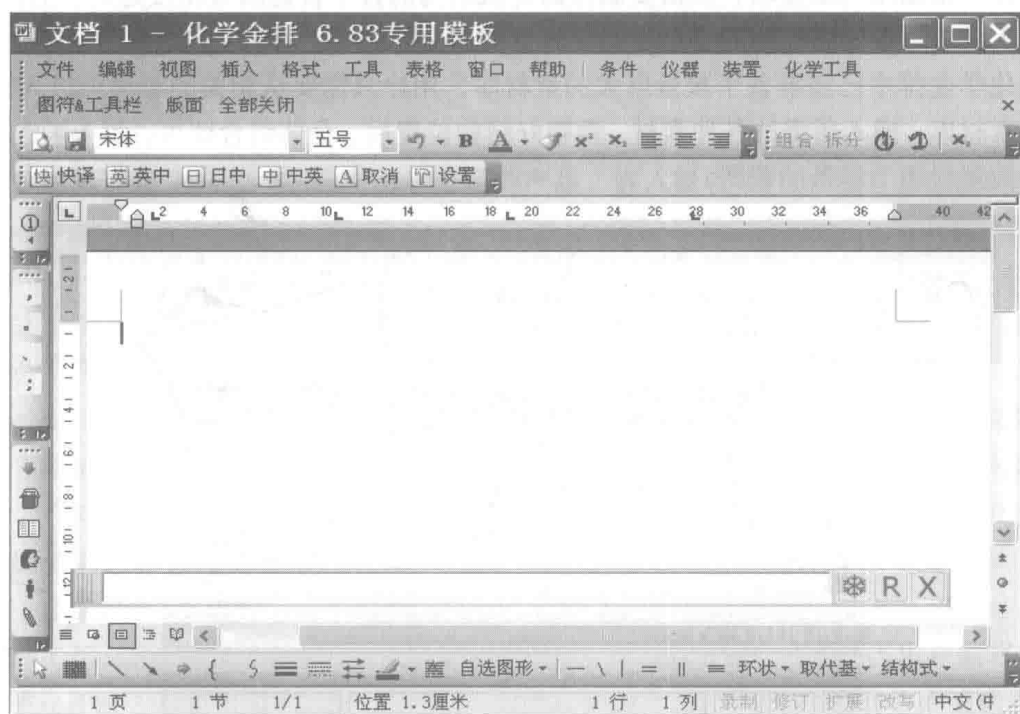
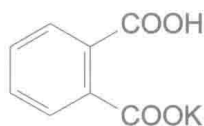


图 1-8 含化学金排控件的 Word 窗口

化学金排软件是中国人编制，开发于 2000 年。利用该软件可以轻松实现化学中常用

的同位素输入、原子结构示意图、电子式、电子转移标注、有机物结构式、有机反应方程式、反应条件输入、化学常用符号输入、化学仪器、化学装置、图片图形调整等许多实用功能，同时该软件还提供一套方便易用的题库系统（以上功能全部免费使用）。独创的化学文章输入窗口，更是将该软件的功能发挥到极致。在该窗口中输入化学式、化学方程式、离子方程式时，完全不用考虑大小写和上下标问题，全部由软件中的智能识别替换系统自动完成（可识别所有的有机物和 80 万种以上的无机物）。化学金排也是依托于 Word 主件，以宏操作来实现特殊符号的生成与录入。化学金排模板启动后，打开的 Word 窗口工具栏新增了四个栏目（菜单），底部还有制作有机结构式相关的工具。几个栏目的内容如下：

- 条件——包括化学反应中可能遇到的绝大多数的反应条件，还可以自定义；
- 仪器——包括中学化学实验可能用到的各种器材与装置，数量达 50 多种，用户随意组装；
- 装置——包括气体制备、净化、收集、干燥、尾气吸收及原电池、电解池等成套装置；
- 化学工具——包括同位素输入、化合价标注及原子结构示意图的输入工具。



例如，制作有机结构图：

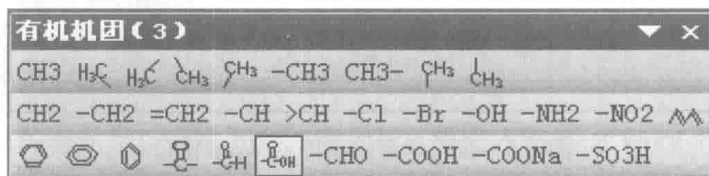
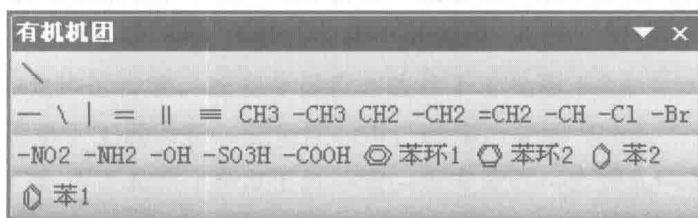
可从图符&工具进入操作面板，步骤为：

- (1) 点“图符&工具栏”菜单中的“有机基团”或“有机基团(3)”菜单项。

前者用于制作较大的有机结构，后者用于制作较小的有机结构，金排窗口便调出相应的工具栏，根据结构图要求，点击要制作的有机结构的各个官能团或相接近的官能团。

- (2) 调整好各个官能团的合适位置，将官能团全部选中，然后组合。

在化学金排中已经准备了数量巨大的素材库，用户只需要从相关的菜单中进入，调出对应的素材库，插入所需的各种素材，调整好结构位置后，全体组合即可。图 1-9 是几个结构相关的素材库工具条的截图。



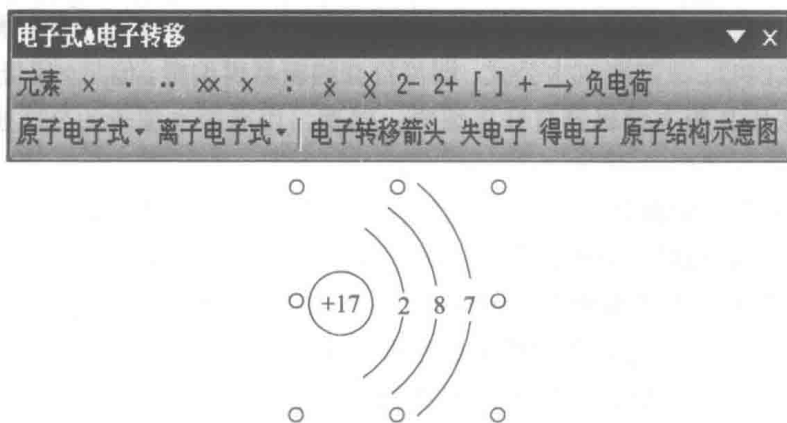


图 1-9 化学金排中的常用工具

制作原子结构示意图：

可以分别调用“图符&工具栏”中的“电子式&电子转移”工具，点其中的“原子结构示意图”，在弹出的原子结构模板中填写电荷数和各层的电子数即可。

“化学金排”的功能比较丰富，能满足中学化学的各种作图要求，对大学化学作图也有帮助。但大学化学和化工中涉及的作图要求远比中学复杂得多，涉及高分子结构式、复杂有机结构式、量子化学、药物设计、波谱等复杂的制图与计算，这时“化学金排”就显得“捉襟见肘”了。必须要使用高级化学软件才能实现。目前，国际上化学相关的专业软件有 ChemOffice、Chemwindows、Guass 计算工具等，这些工具可以完成复杂的化学作图和化学计算，用它们制作好的化学结构图，可以直接复制粘贴到 Word 文档中。关于专业化学软件的介绍见第二章内容。

1.2.2 公式编辑器

公式编辑器是 Design Science Inc 公司的产品，嵌入微软 Office 软件的公式编辑器是 Equation 3.0 版本，在 Office 2003 版本以前的软件中都默认捆绑有这个工具，但 2007 版以后的 Office 中不再含公式编辑器，因为微软已经加入自己的公式编辑器，如果要使用第三方的公式编辑器，需要另外安装，或直接使用免安装的 Equation 3.0 编辑公式，然后，将编辑好的公式再粘贴到 Word 或 PPT 中。

Design Science 公司的公式编辑器功能非常强大，几乎任何数学表达式都可以编写，并方便地自动插入到 Office 文档。化学公式中最常用的数学符号如加减乘除、指数对数、乘方开方、三角函数、矩阵、可逆符号等数学符号都能轻松编写。公式可以无极缩放，不会失真，因为它们都是矢量图。

(1) Equation 3.0 用法

微软 Office2000/2003 版本，在完全安装时，都会自动载入这个工具，当用户编写 Word、PPT 或 Excel 时，点击工具栏上的下拉菜单“插入/对象/对象/新建”，找到公式编辑器 3.0，选择，确定，即可在文档中插入一个公式，并可进行编辑。编辑完毕，点右上角“关闭”，或在编辑器之外点一下，便自动退出编辑，编辑结果便会显示在 Word 中。