

化学化工常用软件实例教程

彭智 陈悦 编



化学工业出版社
化学与应用化学出版中心

· 北 京 ·

图书在版编目(CIP)数据

化学化工常用软件实例教程 / 彭智, 陈悦编. —北京:
化学工业出版社, 2006.1
ISBN 7-5025-7827-7

. 化... . 彭... 陈... . 化学-应用软件-教材
化学工业-应用软件-教材 . 06-39 TQ-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2005) 第 126820 号

化学化工常用软件实例教程

彭智 陈悦 编

责任编辑: 成荣霞 梁虹

责任校对: 凌亚男

封面设计: 潘峰

*

化学工业出版社 出版发行
化学与应用化学出版中心

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

购书咨询: (010) 64982530

(010) 64918013

购书传真: (010) 64982630

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销

北京市彩桥印刷有限责任公司印刷

三河市海波装订厂装订

开本 787mm × 1092mm 1/16 印张 16 字数 351 千字

2006 年 1 月第 1 版 2006 年 1 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-7827-7

定 价: 28.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

目 录

绪论	1
第 1 章 Word 软件应用进阶	4
1.1 Word 编辑排版中常见问题	4
1.1.1 显示/隐藏编辑标志	4
1.1.2 空格与居中	4
1.1.3 空行与分页	6
1.1.4 表格内容的对齐	7
1.1.5 上标字符和下标字符	8
1.1.6 特殊符号	8
1.1.7 项目符号和编号	9
1.1.8 Word 常用快捷键	11
1.1.9 文字排版练习	11
1.2 插入图片	12
1.2.1 插入剪贴画	12
1.2.2 图片属性	13
1.2.3 插入图片来自文件	15
1.3 公式编辑器	15
1.3.1 安装公式编辑器	15
1.3.2 启动和退出公式编辑器	17
1.3.3 在工具栏上增加公式编辑器按钮	17
1.3.4 公式模板简介	18
1.3.5 字符样式和空格	19
1.3.6 自造符号	19
1.3.7 公式编辑器常用快捷键	20
1.3.8 公式编辑练习	21
1.4 Word 中的样式	22
1.4.1 什么是样式	22
1.4.2 写作常用的几种样式	23
1.4.3 设置正文缩进样式	23
1.4.4 设置标题样式	28

1.4.5	其他样式	29
1.4.6	样式快捷键	30
1.5	使用宏	30
1.5.1	录制宏	30
1.5.2	编辑宏	32
1.5.3	设置快捷键	34
1.6	模板	35
1.6.1	保存模板	35
1.6.2	模板的存放地点	36
1.6.3	使用模板	36
1.7	小结	37
第2章	PPT 演示文稿制作	38
2.1	基本操作	38
2.1.1	基本概念	38
2.1.2	制作第一张幻灯片	38
2.1.3	添加新幻灯片	39
2.1.4	添加图片	40
2.1.5	添加表格	42
2.1.6	添加视频、音频	43
2.1.7	应用设计模板	44
2.1.8	设置动画效果	45
2.1.9	更换幻灯片版式	46
2.1.10	添加、删除占位符	47
2.1.11	制作幻灯片的注意事项	47
2.2	常用技巧	48
2.2.1	菜单	49
2.2.2	带颜色的公式	50
2.2.3	图片的巧妙切换	51
2.2.4	制作布朗运动动画	53
2.3	音频视频功能	54
2.3.1	录音功能	55
2.3.2	插入视频	56
2.3.3	控件的应用	58
2.4	幻灯片发布	60
2.4.1	直接复制演示文件	60
2.4.2	“打包”发布	60
2.4.3	发布调用外部程序的幻灯片	61

2.5 小结	62
第3章 化学办公软件 ChemOffice	63
3.1 初识 ChemDraw	63
3.1.1 主界面	63
3.1.2 模板	64
3.2 ChemDraw 绘图实例	67
3.2.1 绘制阿司匹林结构式	68
3.2.2 图形存盘	70
3.2.3 图形的旋转与缩放	70
3.2.4 检查结构错误和整理结构式	71
3.2.5 实例练习	71
3.2.6 根据化合物名称得到结构式	72
3.2.7 根据结构得出化合物命名	73
3.2.8 预测核磁共振化学位移	73
3.2.9 分析结构估计性质	75
3.2.10 元素周期表	75
3.2.11 绘制化学反应式	76
3.2.12 符号、字体和颜色	77
3.2.13 快捷菜单和快捷键	78
3.2.14 绘制实验装置	79
3.3 Chem3D 绘图实例	80
3.3.1 Chem3D 简介	80
3.3.2 建立 3D 模型	81
3.3.3 ChemDraw 结构式与 3D 模型间的转换	86
3.3.4 整理结构与简单优化	87
3.3.5 显示 3D 模型信息	87
3.3.6 改变元素序号与替换元素	89
3.3.7 原子和分子的大小	90
3.3.8 计算内旋转势能	93
3.3.9 Huckel 分子轨道	95
3.3.10 MOPAC 量子力学计算	96
3.4 ChemFinder	98
3.4.1 ChemFinder 简介	98
3.4.2 根据结构式检索	98
3.4.3 根据分子式检索	100
3.4.4 根据化学名称检索	101
3.4.5 根据相对分子质量检索	102

3.4.6	使用化学反应数据库	103
3.4.7	查找免费网络资源	105
3.5	小结	109
第 4 章	数据处理软件 Origin	110
4.1	Origin 7.0 界面	110
4.1.1	主界面	110
4.1.2	菜单栏	111
4.1.3	工具栏	116
4.2	Worksheet 窗口	118
4.2.1	自键盘输入数据	119
4.2.2	自文件导入数据	119
4.2.3	列操作	120
4.2.4	数值计算	121
4.2.5	数据统计与筛选	123
4.3	Origin 绘图	126
4.3.1	绘制最简单的 X-Y 图形	127
4.3.2	定制图形	127
4.3.3	定制坐标轴	130
4.3.4	添加文本、箭头等注释	134
4.3.5	读取图中数据	135
4.3.6	数据屏蔽和移除	135
4.3.7	保存项目文件和模板	136
4.3.8	使用模板绘图	136
4.4	2D 绘图实例	137
4.4.1	绘制红外光谱图	137
4.4.2	多条曲线叠加对比图	141
4.4.3	绘制 X 射线衍射图	146
4.4.4	线性回归	148
4.4.5	多项式回归	153
4.4.6	非线性回归	154
4.4.7	扣除基线	157
4.4.8	数值积分	159
4.4.9	拾取峰值	161
4.4.10	分峰	162
4.4.11	双坐标图	165
4.4.12	多层图	169
4.4.13	数据平滑与滤波	174

4.5	3D 绘图实例	179
4.5.1	工作表转换为矩阵	179
4.5.2	三维表面图	180
4.5.3	图层属性设置	181
4.5.4	其他 3D 图形	182
4.6	小结	183
第 5 章	绘制示意图软件 Visio	184
5.1	Visio 功能简介	184
5.2	初识 Visio	185
5.2.1	主界面	185
5.2.2	菜单栏	187
5.2.3	工具栏	187
5.2.4	形状、模具与模板	188
5.3	基本文件与页面操作	189
5.3.1	文件操作	189
5.3.2	设置页面	190
5.3.3	标尺与网格	192
5.3.4	背景页	193
5.4	基本图形操作	193
5.4.1	基本图形	194
5.4.2	图形的各种手柄	194
5.4.3	绘制图形	195
5.4.4	复制形状	196
5.4.5	删除形状	196
5.4.6	查找形状	196
5.4.7	移动图形	196
5.4.8	调整形状的大小	197
5.4.9	连接形状	197
5.4.10	堆叠形状	198
5.4.11	对齐形状	198
5.4.12	形状组合	199
5.4.13	形状的联合	199
5.4.14	形状的拆分	200
5.4.15	形状的相交操作	200
5.4.16	形状的剪除	200
5.4.17	形状旋转与翻转	201
5.4.18	形状格式化	202

5.5 基本文字操作	203
5.5.1 向形状添加文本	204
5.5.2 添加独立文本	204
5.5.3 设置文本格式	204
5.5.4 改变文字方向	205
5.5.5 特殊符号	205
5.6 将图形添加到 Word 文档	205
5.6.1 将 Visio 图形添加到 Word 文档	206
5.6.2 在 Word 文档中修改 Visio 图表	206
5.7 Visio 绘图实例	206
5.7.1 组织结构图	206
5.7.2 程序流程图	211
5.7.3 工艺流程示意图	216
5.7.4 化工厂平面图	228
5.7.5 办公室平面布置图	233
5.7.6 网络结构图	237
5.7.7 制作网页	242
5.8 小结	244

绪 论

我国有大量的化学、化工工作者，他们的研究工作都需要使用电脑来处理相关数据。我国每年还有大量相关领域研究生毕业，毕业生人人都要撰写毕业论文，其中涉及许多与化学化工相关的数据处理内容，如化学分子式、反应式处理；各种曲线绘制与数据处理，如二维、三维数据图、数据平滑、滤波、数据微分、积分，线性回归，非线性拟合等；各种仪器分析数据处理，如红外光谱、紫外-可见光谱、X 射线衍射、核磁共振等。另外还可能要绘制各种示意图、原理图、工艺流程图等。这些与化学化工相关的数据、公式、图、表等信息不妨通称为化学化工数据。

从前处理化学化工数据主要靠编程实现，这需要使用者拥有较高编程水平。然而，编程并非多数人的强项，因此用编程方法处理化学化工数据难以普及，于是就出现了各式各样的化学工具软件。然而这些工具软件的用法多散见于书刊，且简介性的内容较多，迄今尚没有将这些软件有机地组合在一本书中并紧密结合化学、化工数据处理的实例教程。

本书选用最新的化学、化工数据处理软件为平台进行讲解，包括数据处理软件 Origin，化学办公软件 ChemOffice 以及示意图绘制软件 Visio。所选的实例都是与化学、化工数据处理密切相关的。读者只要按照实例一步一步做，就能快速掌握常见的化学、化工数据处理方法。考虑到各种数据处理结果最终要形成文本输出或做成幻灯片展示，本书还专门讲了 Word 高级应用以及 Powerpoint 应用技巧方面的内容。

学习本书之前，最好具备以下软、硬件条件。

(1) 硬件要求和操作系统

本书所用软件对机器的性能要求不高，奔腾 以上、拥有 128MB 内存和 20G 硬盘的电脑都能胜任。现在的电脑性能远超最低要求。

写作本书所用操作系统为 Windows 2000 Pro。安装 Windows 2000 Pro 之后，应首先安装 SP4 (Service Pack 4)。办公软件为 Office 2000，并安装必要的防毒软件。

(2) 升级 Windows 和 Office

只有安全稳固的操作系统才能为我们提供可靠的工作平台，不至于因为系统问题而操作不出来或频频死机。如果你用宽带或 ADSL 上网，那么请升级你的 Windows 和 Office。如果你用“小猫”上网，请跳过这部分，因为升级文件实在太多也太大了。

SP4 很容易找到光盘版，如果在线升级到 SP4 则需要更长时间。

Windows 的【开始】菜单的最上端有个【Windows Update】选项，单击之即可链接



微软网站。IE 浏览器的【工具】菜单中也有一个【Windows Update】项，也能达到异曲同工的目的。【Windows Update】首页如图 1 所示。



图 1 升级 Windows

单击【查看以寻找更新】超链接，Windows 会花几分钟或更长时间来检查系统更新状态。检查完毕后出现如图 2 所示的窗口。

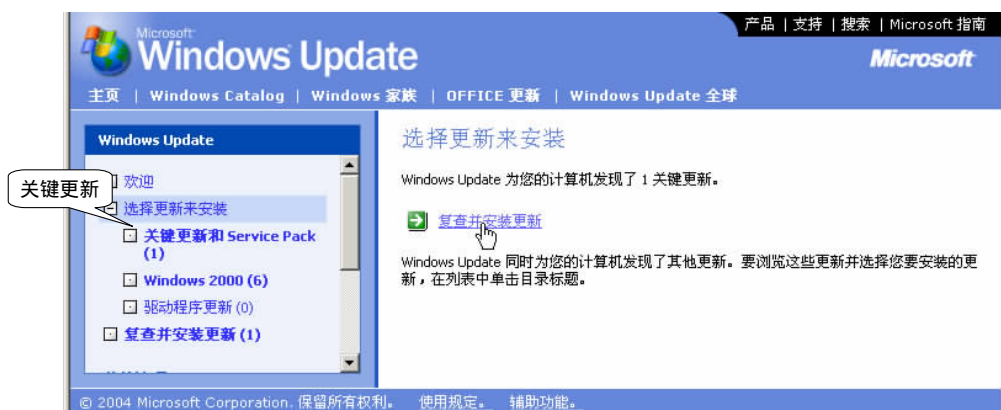


图 2 复查并安装更新

Windows 更新有 3 个方面：

- 【关键更新和 Service Pack】：这是必须进行的更新，必须一直更新到其后面的数字为“0”。即使安装了 SP4，Windows 2000 Pro 也有超过 20 项的关键更新，并且有些更新项目必须单独进行，也就是说一次只能更新一个项目。完成全部关键更新需要下载几十 MB 的文件，并反复重新启动几次机器。
- 【Windows 2000】：这个更新项目是可选的，通常不必更新这里面的项目。
- 【驱动程序更新】：通常也不必更新这里的项目。

单击【复查并安装更新】超链接，将所有关键更新安装到计算机上。

升级 Office 可以到微软网站 <http://www.microsoft.com/> 按提示进行，这里不再赘述。



书中涉及的其他软件的版本会在相关内容中提及。

(3) 安装必要的化学、化工软件

学习本书需要安装 Origin 7.0 , ChemOffice 2004 和 Visio 2003 等软件。用户可以在网上找到这些软件的试用版。也可以使用其他版本的软件进行学习,但是软件界面可能有所差异,也不能保证在操作步骤上完全兼容,读者应该灵活掌握。

第 1 章 Word 软件应用进阶

微软的办公软件 Office 包括 Word、Excel、PowerPoint、Access、Frontpage 等部分，其中 Word 是最为常用的，我们编辑文稿通常会和它打交道。由于 Word 界面直观，即使没有专门学习过的人也能无师自通，也能用 Word 编辑排版文件。但在实际的教学过程中我们发现，甚至不少学过 Office 套件的人也不能高效地使用 Word，编辑命令不清楚，排版不规范，不懂高级的编排操作技巧，这样不仅浪费时间，还会影响正式文稿的效果，特别是在编排规模较大的文稿时问题尤其突出。

本章首先讲解 Word 编辑排版中常见的问题，之后讲解在 Word 中插入图形的相关操作。撰写科学论文或毕业论文时，公式编辑器是少不了要用到的，这部分内容会重点讲解。如果你要形成鸿篇巨制，比方写一本书或完成一篇几十甚至上百页的毕业论文，不妨花点时间仔细研读一下本章后面讲的样式、宏、模板和快捷键。弄懂这些内容不仅会给你带来很高的排版效率（排版格式越复杂效率就越高），还能带给你相当专业的输出效果。“磨刀不误砍柴功”，这句俗话放在这里说是再合适不过的了。

1.1 Word 编辑排版中常见问题

在 Word 中要达到某种排版效果，可以采用多种方法。一些方法很笨拙，但不幸的是有不少人还在采用这类笨方法解决问题。其实规范方法学起来也很容易，效率也更高，形成的文本效果也更好、更显专业风采。

1.1.1 显示/隐藏编辑标志

编辑符号是不会打印出来的，因此 Word 在默认情况下也不会显示这些符号，如空格、键、分页标志等。然而在编辑大文本时可能需要将这些编辑标志显示出来，帮助我们了解文本及段落的编辑情况，了解到底是什么符号在起作用。

使用“显示/隐藏编辑标志”按钮的方法很简单，将 Word 工具栏上的  按钮按下就显示编辑标志，弹起就隐藏编辑标志。在显示编辑标志的状态下，英文空格显示为浅灰色的小圆点，汉字空格显示为浅灰色的方框，键显示为浅灰色的小箭头等，分页符等编辑符号也会显示出来。

1.1.2 空格与居中

多数文章的标题是要居中放置的，因此有不少人连续输入若干空格将标题推到文本中部，然后左瞄右瞄，增加几个空格或删除几个空格，惟恐标题不在页面的中间。这种



居中方法实在太低效了,也对不准确。其实 Word 在工具栏上有个居中按钮  (见图 1-1),将光标停留在要居中的行上,单击  按钮即可完成居中操作。



图 1-1 格式工具栏

默认的段落对齐状态是两端对齐,用户往往是在默认对齐方式下输入文字,然后再使用  按钮居中,需要注意的是首行有没有设置缩进。首行缩进显示在水平标尺上。水平标尺如图 1-2 所示。

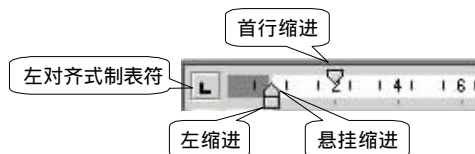


图 1-2 水平标尺

若带有首行缩进,单击  按钮居中后应将首行缩进滑块拖至标尺的零点,否则该行不会真正居中,会偏离 1/2 的首行缩进距离。标尺上的滑块或按钮简介如下:

(1) 首行缩进:中文行文的习惯是首行空出两个字。首行缩进滑块就是用来完成这项任务的。

(2) 悬挂缩进:有时除了首行需要缩进之外,后续行也需要缩进,这就是所谓的悬挂缩进。排版时用到悬挂缩进的情况比较少。

(3) 左缩进:缩进整段内容,包括首行缩进和后续行。

(4) 左对齐式制表符:  是默认制表符,文中有若干行需要对齐时,可用这个制表符间隔并对齐,单击这个制表符按钮,可顺序切换到如下各种制表符:

- 居中式制表符 .
- 右对齐式制表符 .
- 竖线对齐式制表符 .
- 首行缩进 .
- 悬挂缩进 .
- 小数点对齐式制表符 :有时我们需要将带有小数点的项目在小数点处对齐(表格中使用较多),可选中各项目,按 **Tab** 键将它们对齐。如

3.1

31.41

314.159



1.1.3 空行与分页

有不少人在使用 Word 时采用空行控制段落间距，或用空行将部分内容推到下一页来强制分页。这样做在调整段落间距时不易达到精确的控制效果，用做分页时又很容易受到版面内容变化的影响，如增加或减少了一行，会导致整个版面重新调整。其实 Word 提供了更为方便和正规的做法。

(1) 控制段前/段后间距

将光标置于要调整的段落上。

执行【格式】/【段落】菜单命令，或单击鼠标右键，在弹出的快捷菜单中选择【段落】菜单项，弹出【段落】属性窗口，如图 1-3 所示。

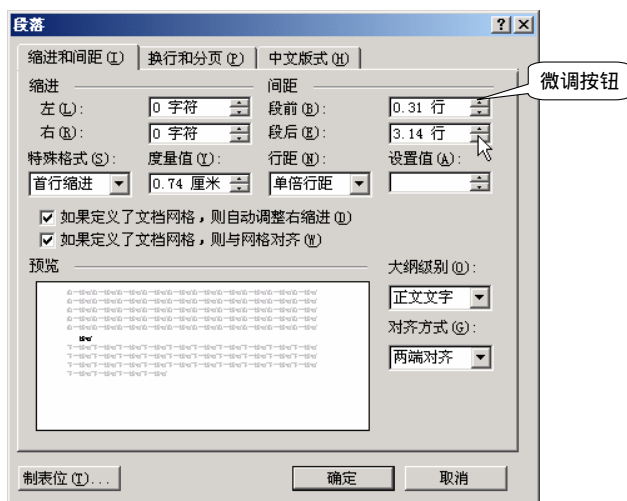


图 1-3 【段落】属性窗口

单击【缩进和间距】选项卡（这是默认的、首先出现的选项卡）。

在【间距】的【段前】、【段后】输入框中输入打算控制的段前、段后间距数值。

这里可以直接输入小数精确控制段落间距。若用微调按钮调整间距，则每次调整会以 0.5 行为倍数增减。使用过 Word 早期版本的人可能习惯使用磅值来调整段间距，这里也可以直接输入磅值，比如“20 磅”。

单击 **确定** 按钮，退出段落属性设置对话框。

(2) 插入分页符号

将光标置于要分页的段落的段首。

执行【插入】/【分隔符】菜单命令，弹出【分隔符】对话框，如图 1-4 所示。

对话框里包括【分隔符类型】和【分页符类型】两大类，共 7 个单选项。最常用的【分页符】为默认设置。

单击 **确定** 按钮，插入分页符。

用分页符强制分页不会受版面调整的干扰，有助于我们高效地完成复杂文稿。

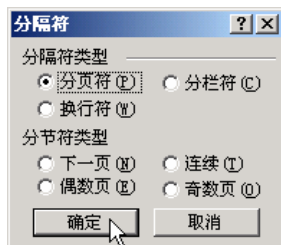


图 1-4 【分隔符】对话框

1.1.4 表格内容的对齐

填写表格后,通常需要将某些项目对齐。居中和左对齐这两种编辑方式使用比较多。然而有时表格单元具有不同的高度,使用  按钮会使表中文字贴着单元格上缘对齐,效果很不好看。实际上表格有专用的对齐方式。

对齐表格内容的具体操作方法如下:

选中表格。

单击右键,弹出快捷菜单,单击【单元格对齐方式】菜单项,弹出 9 个对齐按钮,如图 1-5 所示。

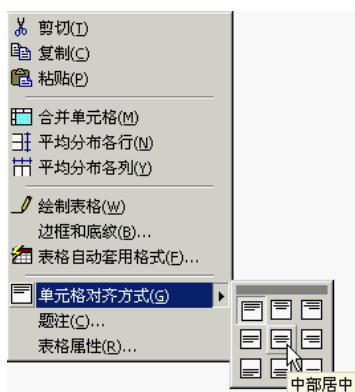


图 1-5 单元格对齐方式菜单项

单击  (中部居中) 按钮,将单元格内容对齐。最终效果如表 1-1 所示。

表 1-1 对齐单元格实例——聚合物复合体系的分类

复合体系	分散相尺度			
	>1000nm (>1μm)	100~1000nm (0.1~1μm)	1~100nm (0.001~0.1μm)	0.5~10nm
聚合物/低分子物		低分子作增溶剂	低分子流变改性剂	外部热塑性聚合物
聚合物/聚合物	宏观相分离型聚合物掺混物	微观相分离型聚合物合金	分子复合物, 完全相容型聚合物合金	
聚合物/填充物	聚合物/填充物复合体系	聚合物/填充物复合体系	聚合物/超细粒子填充复合体系	聚合物纳米复合体系



1.1.5 上标字符和下标字符

科学工作者的文稿中常会出现上标、下标字符。然而 Word 默认的工具栏中却没有这两个按钮。每次使用时都得执行【格式】/【字体】命令，选中【字体】选项卡中【效果】项中的上标或下标复选框才能变成上、下标字符，非常麻烦。

我们可以将上标按钮和下标按钮添加到工具栏上，这样使用起来就方便多了。添加上标、下标按钮的具体操作方法如下：

执行【工具】/【自定义】菜单命令，弹出【自定义】对话框。

单击【命令】选项卡。

单击【类别】中的【格式】选项。

下拉右侧【命令】框中的滚动条，找到【上标】项，如图 1-6 所示。

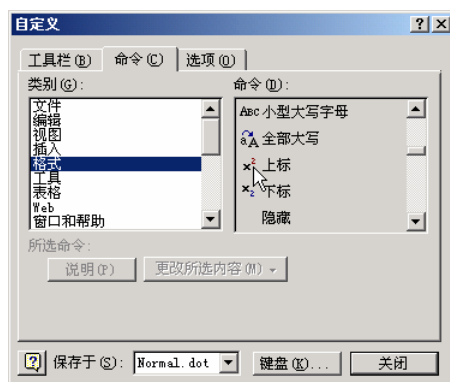


图 1-6 添加上标、下标按钮

拖动上标按钮 x^2 到 Word 工具栏上，释放鼠标按钮。

同样将下标按钮 x_2 也拖到工具栏上。

单击 **关闭** 按钮关闭【自定义】对话框。

需要使用上标、下标字符时，可单击相应按钮，然后键入字符；或选中打算变成上标、下标的文字，单击相应按钮，即可完成变换。

工具栏上有了按钮，输入上标、下标就方便多了。但更高效的办法是记住快捷键，这样可以不必在键盘和鼠标间不断切换了。

- 上标：Ctrl + Shift + = （再按一次文字恢复正常）。
- 下标：Ctrl + _ （再按一次文字恢复正常）。

1.1.6 特殊符号

科学工作者难免要和许多符号打交道。Word 提供了大量符号供我们选择，我们可以通过执行【插入】/【符号】命令插入选中的符号，也可以按照上面所讲的添加上标、下标按钮那样，将插入符号按钮 Ω 添加到工具栏上。插入符号按钮 Ω 在【自定义】/【命令】/【类别】/【插入】命令中，具体操作这里就不详述了。