

动态三维真彩色晶体结构绘画系统的设计

宓锦校 赵景泰 毛少瑜 黄种乐 黄雅熙

(厦门大学化学化工学院 厦门 361005)

梁军 沈今川

(中国地质大学测试中心 武汉 430074)

摘要: 将计算机三维动画技术引入晶体结构研究, 用 C 语言设计制作出用于绘制动态三维真彩色晶体结构图的大型计算机绘图软件包——晶体结构三维实体造型系统软件包 3DSLOTS, 利用晶格常数、空间群、原子坐标和原子半径等参数在计算机模拟的三维空间内制作出晶体结构的动画影像, 引入三维晶体结构动画概念, 使晶体结构的绘图技术从静态图向动态图发展。

关键词: 晶体结构动画; 三维实体造型; 程序设计

中图法分类号: O 76

文献标识码: A

文章编号: 1001-4160 (2000) 04-367-370

Program Package for Three Dimensional Crystal Structure Animation

MI Jin-xiao ZHAO Jing-tai MAO Shao-yu HUANG Zhong-le HUANG Ya-xi

(Institute of Chemistry and Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005)

LIANG Jun SHEN Jin-chuan

(Test Center, China University of Geosciences, Wuhan 430074)

Abstract: The computer technique of three dimensional animation was first introduced into graphics of crystal structures. A program package 3DSLOTS has been designed for building three dimensional model of crystal structures. It generates ball-and-stick or polyhedral diagrams, and can plot atoms as spheres in true color. Polyhedra can be of any complexity besides triangle, tetrahedra and octahedra. The files exported by 3DSLOTS can be imported to 3D Studio of Autodesk. Fifty animations of crystal structures such as Diamond, Graphite, Fluorite, Sphalerite, Niccolite, Chalcopyrite, Rutile, Spinel, Corundum, Albite etc, have been plotted and published in disk of CD-R.

Key words: crystal structure animation, three dimensional model design, computer program design

晶体结构的描述和表达是晶体化学研究的重要环节, 绘制三维晶体结构图是晶体结构表达的重要手段之一。人们为了探索和认识晶体结构的特性, 常将晶体结构制作成木质模型, “八五”期间, 晶体结构模型制作技术被列为国家自然科学基金攻关项目, 由此可见晶体结构的表达在晶体结构研究中的重要地位。由于晶体结构表述的是内部原子在三维空间中的分布规律, 显得比较抽象, 将原子坐标等参数绘制成直观的晶体结构图, 将有助于认识和探索结构的规律性。本文主要介绍晶体结构三维实体造型系统软件包的设计开发, 将计算机三维动画技术引入晶体结构研究, 设计制作晶体结构动画, 使晶体结构的绘图技术从静态平面图向三维立体动态图方向发展。

1 晶体结构绘图软件的研究现状

目前, 专门用于绘制晶体结构图的绘图软件多达几十种, 在国际互联网国际晶体学会网址(<http://www.icrystal.org>)

收稿日期: 1999-12-22, 收修改稿日期: 2000-02-24

基金资助: 山东大学晶体材料国家重点实验室开放基金和国氏博士后基金资助

作者简介: 宓锦校, 男, 1964 年出生, 籍贯: 浙江, 博士, 副教授, 1995 年获中国地质大学矿物及晶体化学专业理学博士学位, 1997 年武汉工业大学材料科学与工程博士后出站

www. ICh. AC. UK) 上可以查到大部分有关晶体结构测定和绘图及其相关软件 (如教学软件、晶胞转换软件等) 的网址和内容简介。较有影响的绘图软件包有 ATOMS、MOLDRAW、ORTEP、PLUTO、SCHAKAL 等^[1-4]。ATOMS、PLUTO 等软件包大多为商业软件, 如 ATOMS V4.1 (For WINDOWS) 的售价为 395 美元, 而 ORTEP 绘图软件包则是免费共享软件。

在计算机绘图软件包出现之前, 晶体结构图只能依靠手工绘制, 绘制一幅复杂的三维晶体结构图有的需要数天甚至更多的时间, 一般只能绘制沿晶轴等特殊方向的结构图。随着计算机技术的发展, 计算机绘图技术被引入晶体结构研究, 但早期的计算机绘图软件包主要侧重晶体结构本身的设计, 如计算等效点系坐标、键长、键角和配位多面体等, 程序功能比较简单, 晶体结构图缺乏立体效果。随着计算机运行速度的不断提高, 使晶体结构图直接在计算机荧光屏上进行旋转成为可能, 代表性软件包有 ATOMS 等。从 90 年代初开始, 在晶体结构绘图中, 开始注重感观效果的设计, 引入真彩色和光照模型等技术, 出现具有光照效果的晶体结构图, 这样就提高了晶体结构图的立体感。但凭借目前已有软件绘制的结构图与电影、动画、实物照相等相比, 其立体效果仍有很大的差距, 如何提高其结构图的立体效果是晶体结构绘图软件设计的首要目标。

2 晶体结构三维实体造型系统的设计

众所周知, 不管是图形、还是照片; 不管表达的是二维平面的、还是三维立体的, 只要凭借荧光屏显示 (如计算机显示的图形) 或在纸上表达 (如图纸、黑白、彩色照片等), 它们都在二维 ‘载体’ 上, 也就是说实际上它们都是二维的, 三维立体绘图实际上就是三维图形在二维平面上的表述过程。三维图形是通过物体表面的颜色 (RGB) 和明暗色调 (HLS) 来表现景物的几何形状、空间位置和表面材料, 从而增强立体感。设计真彩色三维晶体结构绘图软件包的核心问题是解决物体的造型及其表面颜色。传统的晶体结构绘图系统, 用一条普通的直线来代表两个原子间的成键, 本文采用圆柱来表示原子之间的成键, 以便提高图形质量和立体感, 其造型过程如下: (1) 选定成键原子对象, 从键盘读入原子类型。(2) 确定原子成键范围, 从键盘输入最大配位键长, 计算出成键原子 (如 Si (x_1, y_1, z_1), O (x_2, y_2, z_2))。(3) 事先计算好一个平行 C 轴的圆柱, 使其圆柱半径为 1。(4) 连接成键原子, 计算其空间取向, 圆柱通过一系列矩阵的旋转平移变换, 最终使圆柱的两端连接成键原子 (参见表 1)。(5) 从键盘输入半径 R, 将圆柱的半径放大或缩小 R 倍。这样就完成了一对原子间的成键的造型过程。

表 1 原子间成键造型的矩阵变换

Table 1 Translation matrix for plotting bonds

Ta	Rx	Ry
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -x_1 & -y_1 & -z_1 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c/v & b/v & 0 \\ 0 & -b/v & c/v & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} v & 0 & a & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -a & 0 & v & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
Rz	Ry ⁻¹	Rx ⁻¹
$\begin{pmatrix} \cos & \sin & 0 & 0 \\ -\sin & \cos & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} v & 0 & -a & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ a & 0 & v & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c/v & -b/v & 0 \\ 0 & b/v & c/v & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

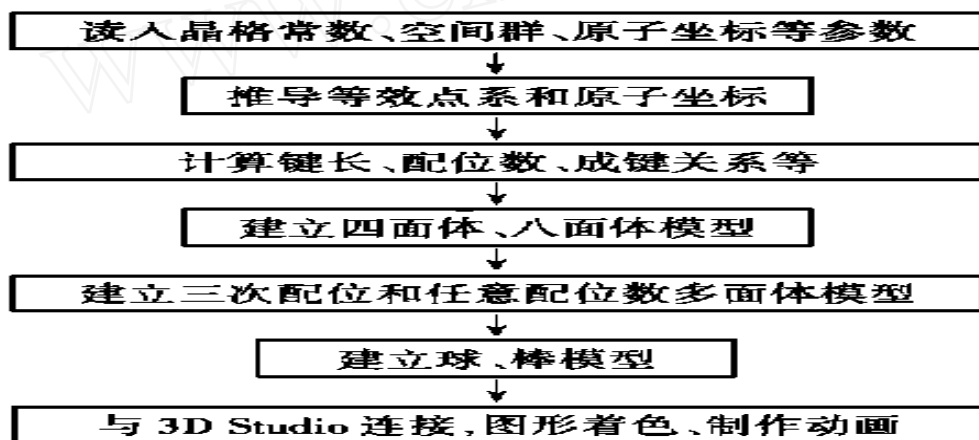
Idea model of column translated by matrix as followed: $[x, y, z, 1] = [x, y, z, 1] \cdot Ta \cdot Rx \cdot Ry \cdot Rz \cdot Ry^{-1} \cdot Rx^{-1}$, will link the atoms as Si (x_1, y_1, z_1) and O (x_2, y_2, z_2) and be the bond of them. The symbols mean as listed: $d^2 = (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2$, $a = (x_2 - x_1)/d$, $b = (y_2 - y_1)/d$, $c = (z_2 - z_1)/d$, $v^2 = b^2 + c^2$, $\cos = c/v$, $\sin = b/v$, angle of rotation.

传统的晶体结构绘图程序用简单的一个圆圈来表示一个原子, 为了增加立体感, 本绘图系统采用圆球来表示。每个圆球的表面用 130 个顶点和 256 个小面来模拟, 这样大大地增强了圆球的立体感。为了获得更高质量的图形, 本系统还可用 242 顶点、480 个小面或 482 个顶点、960 个小面、甚至更多的顶点和面来

模拟球面。不过，这样同时也增加了计算工作量和存储空间。先计算好一个坐标原点的圆球，使其圆球半径为 1，要绘制某一原子时，先从键盘读入原子坐标和原子半径，然后进行平移操作，再将原子半径扩大或缩小 R 倍。传统的晶体结构绘图程序一般只能绘制四面体和八面体这两种配位多面体，本系统增加了 3 次配位和高次配位的多面体的绘图功能。绘制高次配位多面体的设计过程如下：

(1) 从键盘读入中心原子类型和配位键长；
 (2) 计算配位数和配位原子；
 (3) 任意选定两个配位原子，再筛选第三个配位原子，使其它所有配位原子都位于这 3 个配位原子所构成的空间三点一面的一侧，这就完成了配位多面体其中一个面的造型过程；

(4) 重复 (3) 确定其它所有的面。物体造型过程比较复杂，具体内容在此不再作详细介绍，作者已将其编制成 C 语言程序，可在 586 以上的微机上运行，使用方法简单，只要从键盘输入晶体结构三维实体造型系统的程序名 3DSPLOTS (3 Dimensional crystal Structure PLOting System) 便可。采用交互式提示，回答 “Yes” 或 “No”，便可完成全过程。其设计框图如下：



3 真彩色三维晶体结构动画的特点

所谓三维动画是指在计算机模拟的三维空间内制作三维模型，指定它们的动作，最后生成彩色动画影像。晶体结构动画是指在计算机模拟的三维空间内制作晶体结构的动画影像。用上述晶体结构三维实体造型系统 (3DSPLOTS) 结合 3D Studio 技术^[5]，作者设计制作了包括金刚石型、石墨型、萤石型、NaCl 型、CsCl 型、闪锌矿型、纤锌矿型、红砷镍矿型、黄铜矿型、钙钛矿型、赤铜矿型、金红石型、锐钛矿型、尖晶石型、刚玉型、石英型、钇铝榴石型、磷灰石型、 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ 型、 ZrO_2 型、铈酸锂型、烧绿石型、钨青铜型、钠长石型及硬石膏型等 50 种典型晶体结构的真彩色三维动画。采用不同颜色、大小的圆球来表示不同类型的原子 (或离子)，不同色彩及粗细的圆柱表示不同原子之间的成键关系，不同的四面体、八面体及任意配位数的配位多面体表面赋予不同的颜色和材质，使其所表达的晶体结构图形色彩更鲜明、立体感更强。晶体结构动画区别于一般真彩色结构图，在于它是动态的、能进行 360° 动态旋转，其特点是直观。观察晶体结构动画犹如观看电影或动画片，使稍具晶体化学知识就能看懂较复杂的晶体结构图，有利于晶体化学知识的普及和推广，对从事晶体结构研究的科技工作者来说，它还能用于观察原子间、不同配位多面体之间的配位关系。由于真彩色结构图需占用较大空间，目前作者设计的每一个晶体结构动画由 90 帧画面组成，平均占用硬盘空间 8~10MB，已设计的 50 个晶体结构动画有 400MB，并配有文字说明、辅助数据库和中文普通话配音。限于篇幅，不在此作详细介绍，晶体结构动画已制作成计算机光盘，中英文双语版 (电子版) 最近已由武汉工业大学出版社出版^[6]。

晶体结构三维实体造型系统 (3DSPLOTS) 绘图软件包及其绘制的晶体结构图具有如下特点：(1) 具有色彩逼真，颜色丰富，可达 24 位以上真彩色；(2) 立体感强。用圆球来代表原子，每个圆球的表面有 200 多个小面模拟而成，而每一小面上每一点的颜色和亮度都各不相同，这样通过颜色和光亮度等差别来

表示物体空间的不同位置,提高立体感,使圆球表面可产生‘鼓’起来的视觉效果;(3)能进行动画显示,可用原子在空间作柔性振动来动态表示实际原子热运动;(4)任意方向连续旋转,绘制任意取向的结构图;(5)光照显示和阴影显示;(6)可用于绘制宏观晶体形貌图和单个大阳离子配位多面体图(多面体形式或球棒形式);(7)能画球、棒、多面体(碳酸根三角形、硅氧四面体、铝氧八面体)、任意配位多面体;还可将其画成透明物体,如将硅氧四面体画成透明四面体,其中心 Si 原子画成实心的小球;(8)任意空间 2 个原子连键,键的粗细和配位原子的大小可任意设置;(9)能画平视图、透视图;(10)多面体和球表面可以赋予不同的颜色(COLOR)、材质(MATERIAL),如用日常生活中铁的材质(颜色、光泽等)来表示内部原子微观世界的铁原子;(11)其输出图形可转换成窗口程序下运行的 Animator、画笔、Picture Publisher、Photostyler、photoshop、CorelDraw 等通用绘图软件的通用格式,可进行各种后续处理,如添加图名、图例、化学分子式等;(12)亦可用于有机分子的结构绘图。

目前,晶体结构研究已不再局限于常温结构的研究,高温和超低温下结构的研究也在不断深入,作者正在设计制作能反映不同温度下晶体结构演化及动态显示相变规律的晶体结构动画。

本课题得到山东大学晶体所王继扬教授的帮助,在此表示感谢!

参 考 文 献

- 1 Ugliengo P, Viterbo D, Chiari G. MOLDRAW - Molecular Graphics on a Personal Computer, Z. Krist. 1993, 207: 9 - 23
- 2 Burnett M N, Johnson C K. ORTEP : Oak Ridge Thermal Ellipsoid Plot Program for Crystal Structure Illustrations, Oak Ridge National Laboratory Report ORNL-6895, 1996
- 3 Sam Motherwell. Pluto: crystal packing energies in the cambridge structural database. Acta Cryst (Suppl), 1997, A52: C558
- 4 Keller E. Some computer drawings of molecular and solid-state structures. J Appl Crystallogr, 1989, 22:19
- 5 王琦,熊可宜. 3DS Studio 3.0—4.0 三维动画全面速成. 北京:学苑出版社,1996
- 6 宓锦校,吴伯麟,袁润章. 无机材料晶体结构. 武汉:武汉大学出版社,1999.
MI Jin xiao, WU Bo lin, YUAN Ren zhang, et al. The crystal structures of inorganic materials (CD-R), Wuhan: Wuhan University of Technology Press, 1999 (in Sino-English)

(上接第 366 页)

参 考 文 献

- 1 Chen Chuanzhang, Hou Zongyi, Li Mingzhong. The Theory and Application of Linear Integral Equations. Shanghai: Shanghai Science and Technique Press, 1987
- 2 Chihongnov A N, Arsenin V Y. Solutions of Ill-posed Problems. Translated by Wang Bingchen. Geology Press, 1979
- 3 Chu B. Laser Light Scattering. New York: Academic Press, 1991
- 4 Obenchain R L. Classical F-Tests and confidence regions for ridge regression. Technometrics, 1977, 19:429 - 439
- 5 Provencher S W. Inverse problems in polymer characterization; direct analysis of polydispersity with photon correlation spectroscopy. Makromol Chemistry, 1979, 180:201 - 209
- 6 Provencher S W. A constrained regularization method for inverting data represented by linear algebraic integral equations. Computer Physics Communications, 1982, 27:213 - 227
- 7 Provencher S W. CONTIN: A general purpose constrained regularization program for inverting noisy linear algebraic and integral equations. Computer Physics Communications, 1982, 27:229 - 242
- 8 Wu Chi, Gao Jun. Modern laser light scattering a powerful tool for the study of macromolecules and colloids. New developments in polymer research abroad, Eds. Wu Tianbai and Hu Hanjie. Chemistry Industry Press, 1997:100 - 119
- 9 Zhou Zukang. Dynamic light scattering. Huaxue Tongbao (Chemistry), 1986, (10):34 - 39