

三维电脑动画在结构化学中的应用

林银钟 黄仲彪 陈鸿博 魏光 廖代伟

(厦门大学化学系, 厦门大学固体表面物理化学国家重点实验室, 厦门大学物理化学研究所, 厦门 361005)

摘要: 介绍了采用 3D MAX 三维动画构造典型分子、晶体的结构模型, 并且通过动画演示, 生动、形象、直观地表达其结构的方法。

关键词: 动画制作技术; 分子、晶体结构; 三维空间

中图法分类号: O 642.4

文献标识码: A

文章编号: 1001-4160 (2001) 02-187-189

Application of 3D-MAX in Structural Chemistry

LIN Yin-zhong HUANG Zhong-biao CHEN Hong-bo WEI Guang LAO Dai-wei

(Department of Chemistry, State Key Laboratory of Physical Chemistry on Solid Surfaces,
Institute of Physical Chemistry, Xiamen University, Xiamen 361005)

Abstract: The structural modes of molecules and crystals were constructed using 3D-MAX program. The structures can be lively exhibited.

Key words: 3D-MAX, molecule, crystal structure

1 引言

结构化学是大学化学本科教育的一门基础课程。其主要内容是研究原子、分子、晶体等物质微观结构和性能之间关系的科学, 结构化学内容抽象, 数字推理及公式较多, 这就要求学生应具有较强的空间想象能力和抽象思维能力。而分子、晶体结构是结构化学教学中的重点和难点。其内容抽象, 讲授时描述也较困难。在传统的教学方法中, 虽借助于一些球棍实体模型教具帮助学生理解, 但一则模型有限, 二则分子结构的对称元素也难以表示, 三则模型虽反映静态三维晶体的立体构型, 而对不等径球密堆积的实质未能体现。所以学生理解起来感到困难, 教学效果不太理想。可喜的是, 现在随着计算机和多媒体技术的发展^[1,2], 模拟微观粒子动态变化三维演示的计算机动画模型的实现成为可能, 计算机动画技术提供了一种新型教学辅助手段, 它能帮助学生理解复杂的化学概念, 帮助学生解决可视化、理解和记忆动态化学过程中所遇到的困难。我们利用动画模拟, 构造了分子、晶体结构计算机模型, 该动画即能将画面按一定的顺序快速、连续地在计算机的荧屏上面演播出来, 展示运动的变化过程, 能够在原子和分子水平上生动形象地演出。从而帮助学生对物质微观结构上理论概念有更好的理解。

2 制作多媒体课件的工具

2.1 硬件要求

多媒体电脑的基本配置是: Pentium 586MMX、64MB 内存、2M 显示、2G 硬盘、16 位声卡、音箱和 32 速光驱并带有一个内置式光盘刻录机。

2.2 软件要求

3DS MAX 系列是 Autodesk 公司的一个王牌产品, 其强大的三维的动画设计功能和出色的按钮化命令面板界面, 无不显现出该软件的独具匠心和深厚功力, 理所当然地成为三维动画设计领域首屈一指的顶尖级

收稿日期: 2000-11-19; 修改稿日期: 2001-01-08

作者简介: 林银钟

别软件^[3]。

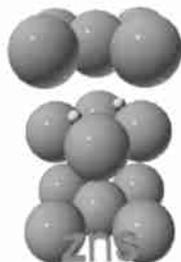
3 三维动画设计

三维动画设计过程按照顺序一般分为 5 个部分：实物造型、材质编辑、运动控制、渲染着色和合成系列。在计算机三维动画中，首先创造动画角色和景物的三维数据，生成实物造型，再给造型体赋予材质和贴图，并通过插值计算使角色在三维空间运动起来。然后在场景中设计灯光、镜头、并渲染氛围，并引入摄影机镜头，最后通过会成序列生成一个完整的动画。

3.1 造型体的制造

化学分子、晶体结构模型的主要工作集中在各原子（离子）连接位置的参数上，运用化学、数学等知识确定各原子（离子）的连接参数。

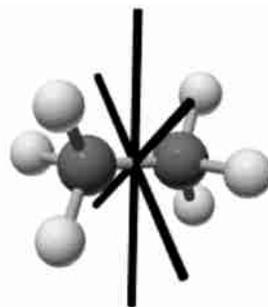
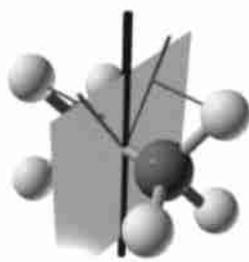
对立方 ZnS 晶体而言，首先我们先确定锌、硫等各原子的位置，然后打开 3DS MAX，在命令面板中选择 Create（创建）命令面板，点击 Gomtry（主体造型）命令面板，命令面板里显示的是创建三维造型物体的命令按钮。选取 Geosphere（地球），在视图区的 Perspective 中创建一个圆球，然后点击命令面板中的 Modify（修改），打开 Parameters 左边的“+”号，在弹出参数设置对话框中修改球的半径、颜色、命名等。然后选取工具栏上的 Select and move 按钮，选取视图中的球体，按住鼠标左键，同时按住 Shift 键，同时拖动鼠标，这时会弹出 Close selection 的对话框，里面分别有 Copy（复制）、Instance（实体）、Reference（参考）三种类型可供选择。这里我们选择 Instance，分别克隆出所需的原子个数，然后根据已计算好的原子坐标，分别改变各原子的相对位置，结果就构成了硫化锌晶体的模型。具体如右图所示：



对分子结构而言，考虑到分子点群的对称元素较多，存在着对称元素的组合，每一类分子点群有它自己的对称元素，通过这些对称元素的存在与否的递进演绎决定了分子点群的递进演绎。每个分子点群计算机模型是由几个连续的计算机动画组成，一般是 3 个到 6 个动画。概括地说，第一个动画是演示分子的立体结构，可代替那些实物模型教具；第二个动画是构建分子所属点群每一类的对称元素，并对分子进行该类的对称操作，看其最后是否完全复原；第三个动画是构建分子所属点群其他类的对称元素，同样对分子进行该类的对称操作，确认其最后是否完全复原；依次类推……，当然其中包括由独立元素的组合导出其他的对称元素；最后是演示已描绘了所有对称元素的分子点群模型。

对于分子点群的高次旋转轴 C_n 和垂直于 C_n 的 C_2 轴而言，我们对实例分子进行其基本旋转操作，通过对一个分子衍生出一个旋转分子最后又与原来分子重合复原来实现；而垂直于 C_n 的 C_2 轴是一个比较特殊的对称元素，作为分子点群的判别过程中的一个要点，它的隐蔽性较强，在许多分子中要找到出它有一定的困难，我们是通过分子对应部分的坐标关系变换来构建的。

对于分子点群的高次旋转轴 C_n 和垂直于 C_n 的 C_2 轴而言，我们对实例分子进行其基本旋转操作，通过对一个分子衍生出一个旋转分子最后又与原来分子重合复原来实现；而垂直于 C_n 的 C_2 轴是一个比较特殊的对称元素，作为分子点群的判别过程中的一个要点，它的隐蔽性较强，在许多分子中要找到出它有一定的困难，我们是通过分子对应部分的坐标关系变换来构建的。



以部分交叉分子 C_2H_6 所属 D_3 点群为例，该模型的 3 根 C_2 轴是在 2 个 C 原子连线的中垂面上。在该 C_2 轴构建的计算机动画模拟中，我们先构建出该中垂面，然后对应的 2 个 H 原子投影到该面生成 2 个垂足

(垂足点闪烁), 这两点与两个 C 原子的中心垂足点生成两条投影线, 再在这两条投影线的角平分线上生长出一条 C_2 轴, 其他的两根 C_2 轴是由该 C_2 轴围绕 C_3 主轴旋转应运而生的。具体如下图所示:

3.2 材质设计

造型体创建后, 仅仅有复杂的外形是远远不够的。实际上, 在动画制作中, 还必须对造型体的渲染, 诸如包括赋予材质和灯光、摄影、雾化等方面。

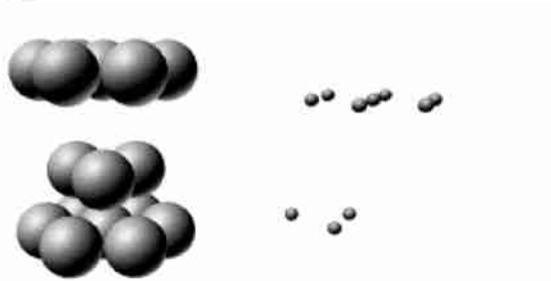
为了给造型体以更为真实的仿真感, 必须运用 3DS MAX 中的材质编辑器来对造型体进行深入的加工, 当一组定义的参数, 如颜色 (Color)、光亮程度 (Shininess)、自发光度 (Self-illumination)、不透明度 (Opacity) 等等, 被赋予造型体后, 造型体在实体着色模色下将体现出特有的质地、色彩、反光度、透明度等等。

具体的处理可以将现有的材质赋予造型体, 生成理想的材质和贴图, 同时也可以设计新的材质以供使用。

3.3 动画的制作

对动画的控制和修改是一件十分麻烦的事情, 它涉及到运动的方向、路径、速度、加速度, 磨擦, 关键帧的设置等等。

完成材质的设计之后, 就要创作动画效果。在此 3DS MAX 中, 几乎任何的造型都可以制作成动画, 只要打开 Animate 动画记录钮, 拨动时间滑动到新的关键帧, 改变一些设置, 这些立刻就会记录成动画。正如上图所表明那样, 我们选择了自上而下的锌原子绕位于 ZnS 晶体的 Z 轴旋转, 然后切入其相应的位置, 将此动作记录成动画, 其结果相当于学生从宏观的角度理解微观的结构特点。



4 结论

通过计算机动画模型的制作、应用, 我们深切地体会到该动画模型是课堂教学一种十分有效的辅助教学手段。以前, 在实体模型教具面前, 学生只能直观地认识分子的微观结构, 而如今, 除了看到实物模型的效果外, 分子点群的计算机动画模拟还能够形象生动地构建演示分子的对称元素和它的复合操作以及模拟对称元素间的组合关系; 形象生动代替枯燥无味, 以动代静, 具体的代替抽象的, 学生变客体为主体, 远近结合的教学代替近程教学。总之, 它无疑对引发学习兴趣和启发学生的理性思维, 都会起到良好的作用, 有利于学生的高素质培养, 也有利于推动教学方式方法的改变, 变传统为新颖, 为 21 世纪高科技时代的新型教育形式探索发展的前景。

参 考 文 献

- 1 蔡文生, 邵学广, 张懋森, 等. 化学通报, 1996, (12):27
- 2 杨武, 韩逢庆, 李红梅, 等. 计算机系统应用, 1999, (6):23
- 3 王琦. 三维动画制作大全. 北京: 北京希望电脑公司, 1998