“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材

★ 全国优秀畅销书（科技类）
★ 中国石油和化学工业优秀图书奖
★ 中国石油和化学工业优秀出版物奖（教材奖）一等奖

化学化工信息及网络资源的检索与利用

第4版

王荣民　主编

化学工业出版社

www.cip.com.cn
读科技图书　上化工社网

Information Retrieval and Utilization in Chemistry and Related Fields

化学化工信息及网络资源的检索与利用

第4版

ISBN 978-7-122-27500-4

销售分类建议：化工/化工信息

定价：35.00元

“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材

★ 全国优秀畅销书（科技类）
★ 中国石油和化学工业优秀图书奖
★ 中国石油和化学工业优秀出版物奖（教材奖）一等奖

化学化工信息及网络资源的检索与利用

Information Retrieval and Utilization in Chemistry and Related Fields

第4版

王荣民　主编

化学工业出版社

·北京·

《化学化工信息及网络资源的检索与利用（第4版）》的编著是基于作者在研究工作中化学化工信息检索与利用的经历，以及为本科生、研究生讲授“化学化工信息检索”课程的经验，在前一版基础上修订而成，旨在为读者检索和利用化学化工传统文献资源和网络信息提供一种方便快捷的途径；提供可供普通上网用户免费检索的大量网络资源和网站导航。

本书内容构架是从文献查阅逐步深入到化学化工信息检索：首先，在详细介绍科技图书、期刊论文、专利等重要的三类传统化学化工文献源，以及美国《化学文摘》为代表的检索工具基础上，逐步深入介绍基于Internet的化学化工资源、生物医药资源；其次，总结了重要网络数据库的使用、化学化工信息检索与利用的策略与技巧；再次，介绍了学术论文撰写与投稿、化学化工软件与在线课堂；最后，提供了便于实践的综合练习题、特别实用的附录等。此外，本书多处介绍了如何巧妙地利用免费网站下载专业知识与文献。为了便于查阅，在有关章节中提供了大量相关网络资源的地址，以便读者通过网络迅速获得化学化工信息。

本书可作为高等院校化学化工及相关专业本科生、研究生教材，也可供化学化工科技工作者及化学化工爱好者参阅。同时，本书对从事材料、环境、生物、医药等与化学相关领域研究的科技工作者也很有帮助。

图书在版编目（CIP）数据

化学化工信息及网络资源的检索与利用/王荣民主编. —4版. —北京：化学工业出版社，2016.8
“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材
ISBN 978-7-122-27500-4

Ⅰ.①化… Ⅱ.①王… Ⅲ.①化学-互联网络-情报检索-高等学校-教材②化学工业-互联网络-情报检索-高等学校-教材 Ⅳ.①G354.4

中国版本图书馆CIP数据核字（2016）第148083号

责任编辑：窦 臻　　文字编辑：李 玥
责任校对：吴 静　　装帧设计：史利平

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　　刷：北京永鑫印刷有限责任公司
装　　订：三河市宇新装订厂
787mm×1092mm 1/16 印张16½ 字数420千字 2016年10月北京第4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：35.00元

版权所有 违者必究

第 4 版　编写人员名单

主　　编　王荣民
编写成员　王荣民　宋鹏飞　杨志旺　杨彩霞　杜正银
何玉凤　王坤杰　吴翠娇　姚小强

第 3 版　编写人员名单

主　　编　王荣民　杜正银
编写成员　王荣民　杜正银　宋鹏飞　何玉凤
孙丽萍　高　非　杨玉英

第 2 版　编写人员名单

主　　编　王荣民
编写成员　王荣民　何玉凤　冯　华　孙丽萍　吴翠娇　宋鹏飞

第 1 版　编写人员名单

主　　编　王荣民
副 主 编　何玉凤　徐　敏　王君玲
编写成员　王荣民　何玉凤　徐　敏　王君玲　陈汝芬
周建峰　刘　蒲　冯　华　王云普

第 4 版 前 言

《化学化工信息及网络资源的检索与利用》自出版以来，受到了读者的青睐，第 1～3 版分别获得了全国优秀畅销书（科技类）奖、中国石油和化学工业优秀出版物奖等奖项；同时第 3 版入选“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材。

新型网络技术正在迅猛发展，Internet 资源已经渗透到与化学化工相关的各个领域，“互联网＋”正在改变我们的学习、教学、科研及生活方式。这促使我们在第 3 版的基础上，提出打造经典教材的目标，大幅调整框架与内容，从而更加贴近学生、贴近网络资源的实际情况，并引领发展趋势。

第 4 版继续保持本书原宗旨：兼顾传统化学化工资源和 Internet 网络资源，着重培养三种能力——信息获取能力、化学化工信息处理能力及论文写作能力。与前三版相比，第 4 版有如下特点：

（1）将传统的化学文献与现代网络资源的内涵进行融合，打造化学化工信息检索新体系。

（2）调整章节布局，从图书、论文、专利逐步展开，实现了从传统资源向网络资源检索的逐步过渡，有利于教学。

（3）从学生角度出发，安排章节内容，引入现代大学生喜闻乐见的形式。

（4）每章前加入“导引”与“关键词”。

（5）突出免费资源，加强“化工信息”。

（6）注意章节之间内容的互动。

参加第 4 版编写的人员中，王荣民教授修订第 1、第 10 章及编写了第 9 章部分内容，并负责全书的策划和审定，宋鹏飞副教授修订第 4、第 6 章及编写了第 9 章部分内容，杨志旺副教授修订第 5、第 7 章内容，杨彩霞副教授修订第 3、第 11 章内容，杜正银教授修订第 2 章内容，王坤杰副教授修订第 12 章内容，吴翠娇教授修订第 8 章内容，何玉凤教授参与了全书的审核与校对，姚小强副教授参与了第 10 章的修订。另外，王彦斌教授、白林教授、王世亮教授、李健副教授、何晓燕副教授、谢艳副教授、曹成副教授、孙看军副教授、王庆涛博士及冯瑞丽老师提出了宝贵的意见，在此一并致谢。

由于本书篇幅所限，与本书相关的拓展内容将陆续上传到相关网站，请关注编者正在建设的精品课程“化学信息检索”网站（http://hxxxjs.jpkc.nwnu.edu.cn）与化学工业出版社教学资源网（http://www.cipedu.com.cn）。任课教师也可通过 E-mail（wangrm@nwnu.edu.cn）索取课件。

当然，由于当前 Internet 还在迅猛发展，有些网站地址也在发生变化，敬请读者注意。书中难免有疏漏之处，恳请读者见谅。

王荣民

2016 年 7 月

第 1 版前言

当今时代是一个信息时代，信息对于经济和社会的发展、科技文化的进步都起着重要的作用。谁掌握了最新信息，谁就掌握了主动性。

随着科学技术突飞猛进的发展，新的科技文献迅速增加。化学因与其他众多学科交叉，而成为中心学科，化学文献数量在 20 世纪后半叶得到迅猛增加，如：美国化学文摘（CA）当前每卷收录文摘已达到 37 万多条。要从如此巨大的化学化工信息源中获取所需信息，必须借助适当的工具才有可能实现。

计算机的普及，特别是自 20 世纪 90 年代以来，Internet 在我国的迅猛发展，使化学信息的查阅日趋方便、快捷。以往的化学文献教材已难以满足广大化学工作者对信息查阅的要求。但是，Internet 所提供的信息主要集中在近十余年，因此，它并不能完全取代传统的检索手段。为此，编者在多年科研中查阅化学信息和讲授《化学文献》课的基础上，编撰了本书。

本书既兼顾传统化学文献知识和 Internet 网络资源，又有助于加强三种能力——查阅文献能力、化学信息处理能力、论文写作能力的训练与提高。主要特色如下：

（1）介绍各类网络化学信息资源的检索途径与方法。其中网络资源绝大多数是免费资源，特别适合于普通上网用户。

（2）详细介绍美国“化学文摘”收录的主要内容与使用方法（包括“化学文摘”80 类分类的英、汉对照简介），使初学者能够较快入门。

（3）提供了各类化学化工大型工具书及新书简介。介绍专利知识及免费专利文献查阅方法。

（4）介绍了化学论文撰写的要求与方法，并配有实例供参考。

（5）提供化学软件的免费下载地址、完全版购买途径，介绍了使用方法，使读者可以自己绘制一些分子结构图和进行数据处理。

（6）在各章节中提供了大量相关网络资源地址，以便读者迅速通过网络获得化学化工信息。将一些专业术语以中英文对照的形式给出，为查阅英文资源提供便利条件。

全书共分 10 章，其中，何玉凤编写了第 2、第 7、第 9 章及第 4、第 5 章部分内容，徐敏编写了第 8 章，王君玲编写了第 4、第 6 章部分内容，陈汝芬编写了第 10 章，周建峰编写了第 6 章部分内容，刘蒲编写了第 3 章部分内容，冯华编写了第 3、第 5 章部分内容。何玉凤、徐敏、王君玲、王云普参与了本书的审定。王荣民编写了第 1 章并负责全书内容的策划与审定。

由于当前 Internet 处于迅速发展和不断完善的时期，个别网站也在发生变化，因此本书中所介绍的有些网址可能会发生变动，读者如果发现网站无法登录，可以通过大型搜索引擎（如“Google”、“百度”等）键入网站名称，查询新的网址，敬请读者注意。另外，书中不免有疏漏之处，恳请读者见谅。

编　者

2003 年 1 月

第 2 版 前 言

在《化学化工信息及网络资源的检索与利用》出版至今的几年时间里，互联网在我国迅速普及，网络资源极大丰富，几乎渗透到科学技术的方方面面。在化学化工的各个领域中，网络资源除了能够部分替代传统文献资源外，还出现了基于网络的许多新功能。目前，化学科技工作者不但可以通过网络获取文献资源，而且可以检索网络数据库、下载化学课件，也可以进行网络投稿与审稿、查询和订购试剂及仪器等。鉴于此，我们编写了《化学化工信息及网络资源的检索与利用》第 2 版。

本书自出版后，受到了广大读者的普遍欢迎与好评，多次重印，被中国书刊发行业协会评为“2003 年度全国优秀畅销书（科技类）”并荣获第八届中国石油和化学工业优秀图书奖。第 2 版保持了第 1 版原有宗旨：兼顾传统化学文献知识和 Internet 网络资源，又有助于提高三种能力，即查阅文献能力、化学信息处理能力、论文写作能力。在编写中，力求突出以下主要特色：

（1）介绍了各类网络化学化工信息资源的检索途径与方法。其中网络资源绝大多数是免费资源，特别适合于普通上网用户。

（2）在各部分增加了一些专业网站的使用方法，介绍如何巧妙地利用免费网站查阅专业知识，如在第 3 章增加了“如何使用试剂仪器网站查询参数”。

（3）提供了在化学化工信息检索时必要的术语和工具，使本书可作为手册使用，如将一些专业术语以中英文对照的形式给出，为查阅英文资源提供便利，使初学者能够较快入门；提供了国际、国内核心刊物中英文名称和网址，以及各类化学化工大型工具书简介；介绍了专利基本知识及专利文献术语；介绍了化学论文撰写的要求与方法以及网络投稿等知识，并配有实例供参考。

（4）介绍了生物医学信息，为跨学科查阅文献的读者提供便捷途径。

（5）提供了化学软件的免费下载地址、完全版购买途径，并介绍了它们的使用方法，使初学者可以自己绘制分子结构图和进行数据处理。

（6）在各章节中提供了大量相关网络资源地址，以便读者迅速通过网络获得化学化工信息。

为方便教学，本书配有内容丰富的电子课件，使用本教材的学校可以与化学工业出版社联系（cipedu@163.com），免费索取。

本书的编写分工为：何玉凤教授编写了第 2 章、第 7 章、第 9 章及第 4 章、第 5 章部分内容，孙丽萍博士编写了第 3 章、第 4 章、第 6 章部分内容，宋鹏飞博士编写了第 5 章、第 6 章部分内容，吴翠娇博士编写了第 8 章内容，冯华编写了第 3 章、第 10 章部分内容。王荣民编写了第 1 章并负责全书内容的策划与审定。另外，王彦斌教授、白林教授、蔡邦宏副教授、杨宝芸博士提出了宝贵意见，李岩、毛娟娟、贾如琰、李芳蓉、唐丽华、赵明、郝二霞、王燕、张慧芳等同学参与了网址的校对。

由于当前 Internet 还处于完善时期，有些网站地址也在发生变化，敬请读者注意。限于编者水平，书中不免有疏漏之处，恳请读者见谅。

编者

2007 年 1 月

第 3 版 前 言

《化学化工信息及网络资源的检索与利用》自出版以来因其详尽的内容、宽广的读者群而受到了读者的肯定，第 1、2 版分别获得了中国石油和化学工业优秀科技图书奖与优秀教材奖，以及中国书刊发行业协会评选的“2003 年度全国优秀畅销书（科技类）”。另外，自第 2 版出版至今的几年时间里，Internet 资源几乎渗透到与化学化工相关的各个领域，与此同时，网络资源的检索工具的多元化、网络数据库的增容与扩充、原有资源网络地址的变动等使得化学化工网络资源有了大幅度更新和完善。

同时，我们在教学实践过程中发现第 2 版有些章节的内容还可以调整和优化，有些内容需要增删。同时，我们也征求了本教材的部分高校主讲教师、使用本教材的部分本科生和研究生的意见和建议，在广泛吸纳各方意见后，编写了《化学化工信息及网络资源的检索与利用》第 3 版。

第 3 版保持本书原有宗旨，即兼顾传统化学化工资源和 Internet 网络资源，着重培养三种能力——信息获取能力、化学化工信息处理能力及论文写作能力。考虑到现今化学化工信息检索对传统资源的依赖性降低和信息资源的网络化程度增强，第 3 版内容做了如下调整：把工具书与网上图书信息、期刊检索与全文下载、专利信息检索与专利申请和美国《化学文摘》4 章内容提前至第 3～6 章，将 Internet 化学化工资源放在第 7 章；新增加化学化工信息检索与利用的策略与技巧作为第 11 章；各章后增加练习题与实践练习题。在第 1 章中增加了化学化工信息的阅读与管理；把 SCI、EI 放到第 2 章的检索工具中介绍；第 3 章增加了免费电子图书检索与下载网址；第 4 章增加 SCIE 收录化学化工期刊分区情况介绍；第 6 章增加利用 SciFinder 平台检索 CA 数据库的内容；第 7 章增加电子会议、网络讨论班等新内容。另外，对所有网址重新进行了仔细核对。

与前两版相比，第 3 版有如下特点：①章节内容布局更合理，实现了从传统资源向网络资源检索的逐步过渡，有利于教学；②增加了化学化工信息的阅读与管理、检索策略与技巧等内容，方便读者快速检索信息、高效利用信息；③每章后增加练习题与实践练习题，有助于读者通过实践消化本章内容，熟悉检索途径与方法；④更新了相关资源和网址，进一步优化、补充了大量新的网络资源与相应网址；⑤增加了检索技巧的介绍。

由于本书篇幅所限，而当前 Internet 还处于不断发展之中，编者正在建设“化学信息检索”精品课程网站（http://hxxxjs.jpkc.nwnu.edu.cn），为读者提供“知识拓展内容”、“重要资源链接”等内容，为任课教师提供“多媒体课件”、“练习与实践题”、“历年试题”、“电子教案”、“教学进度”等信息。相关内容也可参阅化学工业出版社教学资源网（http://www.cipedu.com.cn）。

参加第 3 版编写的人员中，王荣民教授编写了第 11 章，杜正银副教授编写审核了第 2、第 3、第 4、第 7 章，何玉凤教授编写了第 5、第 9 章，宋鹏飞副教授编写了第 1、第 6、第 10 章，孙丽萍教授编写了第 8 章。全书由王荣民和杜正银负责统稿和审定。

在本书编写过程中，高非博士、杨玉英博士参与了部分章节内容的审核，研究生李晓晓、张玲、孙文静、刘世磊、朱永峰、张雯雯、张源民、赵婷婷、李琛、李春花、刘发锐、纪小青、毛旭东、郭娜、何文娟、王燕等同学参与了网址和文字的校对。另外，白林教授、王彦斌教授、冯辉霞教授、王世亮教授、魏东斌研究员、金星龙副教授、程学礼副教授提出了宝贵意见，在此一并致谢。

书中不免有疏漏之处，恳请读者见谅。

王荣民　杜正银

2012 年 5 月

目　录

第1章　从文献查阅到信息检索 …… 1

1.1　信息 …… 1
1.1.1　信息概念 …… 1
1.1.2　知识、情报和文献 …… 2
1.1.3　信息用途与信息检索 …… 2
1.2　化学化工信息 …… 3
1.2.1　科技文献发展历史 …… 3
1.2.2　化学化工文献与信息 …… 3
1.2.3　化学信息学简介 …… 3
1.2.4　当代化学化工信息的特点 …… 4
1.2.5　Internet 与化学化工信息 …… 5
1.2.6　化学化工信息的分类 …… 5
1.3　化学化工信息的检索与利用 …… 7
1.3.1　信息检索的目的和意义 …… 7
1.3.2　信息检索的概念与类型 …… 7
1.3.3　文献检索的基本原理 …… 8
1.3.4　化学化工信息的检索途径 …… 8
1.3.5　化学化工信息检索方法 …… 10
1.3.6　化学化工信息检索步骤 …… 10
1.3.7　原始文献的搜集与信息内容的记录整理 …… 11
1.3.8　文献的鉴别与筛选 …… 11
1.4　查阅化学化工信息注意事项 …… 11
1.4.1　记录要完整 …… 11
1.4.2　充分利用现有条件 …… 12
1.4.3　交叉补充 …… 12
1.4.4　原文转换 …… 12
1.5　化学化工信息源的管理方法与阅读策略 …… 12
1.5.1　印刷版文献管理 …… 13
1.5.2　电子信息与文件的管理 …… 13
1.5.3　化学化工信息阅读策略 …… 13
1.6　互联网的有效利用 …… 13
1.6.1　免费邮箱申请及其功能 …… 13
1.6.2　基于 Internet 的个人空间 …… 13
1.6.3　基于 Internet 快速获得更新信息 …… 14
练习题 …… 14
实践练习题 …… 14

第2章　科技图书资源检索与利用 …… 16

2.1　科技图书概述 …… 16
2.1.1　图书分类法与图书索引 …… 16
2.1.2　科技图书主要类型 …… 17
2.2　如何阅读与利用科技图书 …… 18
2.2.1　如何利用教科书 …… 18
2.2.2　如何利用科技著作 …… 18
2.2.3　如何利用参考工具书 …… 19
2.2.4　获取最新研究成果与理化参数的其他途径 …… 19
2.3　获取图书资源的途径 …… 20
2.3.1　通过图书馆借阅图书 …… 20
2.3.2　通过书店或出版社购买图书 …… 20
2.3.3　在线图书平台的利用 …… 20
2.4　传统图书馆及数字化平台 …… 21
2.4.1　国内著名图书馆及网络平台 …… 21
2.4.2　国外知名网上图书馆 …… 22
2.4.3　中国国家图书馆检索实例 …… 23
2.5　超星发现的图书检索与全文浏览 …… 25
2.6　国际知名在线图书手册 …… 26
2.6.1　免费的 NIST 化学网络手册 …… 26
2.6.2　Reaxys 数据库 …… 27
2.6.3　Organic Syntheses 网络版 …… 27
2.6.4　网络版 CRC Handbook of Chemistry and Physics …… 28
2.7　出版社与网上书店 …… 28
2.7.1　出版社 …… 28
2.7.2　网上书店 …… 28
2.8　化学化工类工具书简介 …… 29

2.8.1 化学类工具书 …… 29
2.8.2 化工类工具书 …… 31
2.8.3 化学化工相关工具书 …… 33
2.9 免费图书的检索与全文下载 …… 34
2.9.1 免费下载国外电子版图书的网站 …… 34
2.9.2 免费下载国内电子版图书的网站 …… 35
2.9.3 免费网络百科全书和手册 …… 35
练习题 …… 36
实践练习题 …… 36

第3章 期刊论文检索与全文下载 …… 37

3.1 科技期刊的类型 …… 37
3.1.1 传统印刷型科技期刊的主要种类 …… 38
3.1.2 电子期刊与网络电子期刊 …… 38
3.1.3 高水平期刊的评判与高质量论文的筛选 …… 39
3.2 科技期刊论文所承载的信息 …… 39
3.2.1 研究论文的阅读与利用 …… 39
3.2.2 综述性论文的阅读与利用 …… 41
3.3 期刊论文的检索与获取方法 …… 43
3.3.1 通过传统的检索工具检索期刊论文 …… 43
3.3.2 通过网络图书馆检索和下载期刊论文 …… 43
3.3.3 通过期刊出版机构的网站检索与下载 …… 43
3.3.4 通过期刊论文数据库网站检索与下载 …… 44
3.3.5 《全国报刊索引》及其使用方法 … 44
3.4 中国知网——中文期刊论文全文下载途径 …… 45
3.4.1 通过中国知网免费检索摘要 …… 46
3.4.2 通过中国学术期刊网络出版总库下载全文 …… 46
3.5 检索国际核心期刊论文的工具——Web of Knowledge …… 47
3.6 国内国际重要化学化工期刊 …… 47
3.6.1 国内核心期刊认定 …… 48
3.6.2 国内重要的化学化工类期刊 …… 48
3.6.3 国际核心期刊与 SCI 期刊分区 …… 49
3.6.4 SCI 收录的化学化工类中国期刊 … 50
3.6.5 SCI 收录的化学化工类国外期刊 … 51
3.6.6 免费检索 SCI 期刊及其影响因子途径 …… 53
3.7 免费检索期刊论文与获取全文的途径 …… 53
3.7.1 利用本单位图书馆订购的资源 …… 53
3.7.2 利用本校图书馆的文献传递服务 …… 53
3.7.3 利用开放电子期刊资源与免费期刊论文搜索工具 …… 54
3.7.4 利用中科院国家数字图书馆全文传递服务系统 …… 55
3.7.5 利用部门或地方政府的公共服务平台 …… 55
3.7.6 利用专业论坛的求助功能 …… 56
3.7.7 向作者索取全文 …… 56
练习题 …… 56
实践练习题 …… 56

第4章 专利知识与专利信息检索 …… 57

4.1 知识产权与专利制度 …… 58
4.1.1 知识产权 …… 58
4.1.2 专利与专利权 …… 58
4.1.3 专利制度是科技进步的推进器 …… 59
4.2 专利信息相关知识 …… 60
4.2.1 专利技术与专利文献 …… 60
4.2.2 专利组织机构 …… 61
4.2.3 专利信息概念及相关网站 …… 62
4.3 专利申请相关知识 …… 62
4.3.1 中国专利申请条件 …… 62
4.3.2 中国专利类型及其特点 …… 63
4.3.3 中国专利申请程序 …… 63
4.3.4 如何撰写专利申请书 …… 63
4.3.5 不给予专利的情况 …… 64
4.3.6 申请外国专利 …… 64
4.4 专利信息检索途径与方法 …… 64

4.4.1 专利文献检索途径 …… 64
4.4.2 专利文献检索方法 …… 64
4.4.3 中国专利信息检索 …… 65
4.4.4 美国专利信息检索 …… 67
4.4.5 欧洲专利信息检索 …… 71
4.4.6 日本专利信息检索 …… 72
4.4.7 世界范围的专利信息检索 …… 73
4.5 《世界专利索引》简介 …… 73
4.5.1 印刷版德温特专利体系 …… 73
4.5.2 网络版德温特专利体系 …… 74
4.6 专利信息检索技巧 …… 74
4.6.1 专利文献检索方式的选择 …… 74
4.6.2 专利信息检索操作 …… 74
4.6.3 快速获取专利文献——专利下载软件及网站的使用 …… 75
4.6.4 专利文献打包下载软件 Drugfuture 简介 …… 75
4.6.5 检索非英语国家专利——翻译网站的利用 …… 75
4.7 专利信息利用及注意事项 …… 76
4.7.1 专利信息利用 …… 76
4.7.2 专利利用要注意的问题 …… 77
练习题 …… 77
实践练习题 …… 77

第5章 传统化学化工文献与检索工具 …… 78

5.1 印刷版 10 类文献源及其作用 …… 78
5.2 科技图书、期刊与专利文献 …… 79
5.2.1 科技图书 …… 79
5.2.2 科技期刊论文 …… 79
5.2.3 专利文献 …… 79
5.3 学位论文 …… 79
5.3.1 学位论文的特点与用途 …… 80
5.3.2 国内外学位论文检索系统 …… 80
5.3.3 ProQuest 博士论文全文数据库 …… 80
5.4 会议资料 …… 81
5.4.1 会议论文的特点与用途 …… 81
5.4.2 会议文献的检索与原文索取 …… 82
5.4.3 巧用 Internet 获得会议原始文献、了解学科前沿 …… 82
5.5 科技报告 …… 83
5.5.1 科技报告的有限使用性 …… 83
5.5.2 科技报告的主要类型 …… 84
5.5.3 可免费浏览的国家科技报告服务系统 …… 84
5.5.4 科技报告的检索工具与免费下载网站 …… 85
5.5.5 科技报告的原文索取 …… 86
5.6 标准文献 …… 86
5.6.1 国际标准组织及相关网站 …… 87
5.6.2 国内技术标准 …… 87
5.6.3 标准文献检索与免费下载 …… 88
5.7 技术档案 …… 89
5.8 政府出版物 …… 89
5.8.1 政府出版物及法律法规 …… 89
5.8.2 通过政府网站免费获取政策法规 …… 89
5.8.3 大数据时代政府网站的有效利用 …… 90
5.9 产品资料 …… 90
5.9.1 产品样本和说明书 …… 90
5.9.2 通过生产、经销商网站免费检索产品资料 …… 90
5.10 传统化学化工文献检索工具 …… 91
5.10.1 手工检索工具 …… 91
5.10.2 国内化学化工相关文摘简介 …… 93
5.10.3 国外重要文摘及其网络版 …… 93
5.10.4 美国《科学引文索引》简介 …… 94
5.10.5 美国《工程索引》简介 …… 95
5.10.6 美国《会议录引文索引——自然科学版》简介 …… 96
5.10.7 美国《科学评论索引》简介 …… 96
5.11 检索工具的发展趋势 …… 97
练习题 …… 97
实践练习题 …… 98

第6章 美国《化学文摘》 …… 99

6.1 CA——打开世界化学文献的钥匙 …… 99
6.1.1 发展历史、卷期沿革 …… 99
6.1.2 特点 …… 100

6.1.3 CA——具有参考工具书性质的检索工具 …… 100
6.2 《化学文摘》的分类 …… 101
6.2.1 Biochemistry Sections（生物化学部分） …… 101
6.2.2 Organic Chemistry Sections（有机化学部分） …… 101
6.2.3 Macromolecular Chemistry Sections（高分子化学部分） …… 101
6.2.4 Applied Chemistry and Chemical Engineering Sections（应化与化工部分） …… 102
6.2.5 Physical, Inorganic and Analytical Chemistry Sections（物化、无机及分析化学部分） …… 102
6.3 《化学文摘》著录格式 …… 102
6.3.1 期刊论文 …… 102
6.3.2 会议录和汇编 …… 103
6.3.3 技术报告 …… 103
6.3.4 学位论文 …… 104
6.3.5 新书及视听资料 …… 104
6.3.6 电子预印版 …… 104
6.3.7 专利文献 …… 104
6.3.8 交叉参考 …… 105
6.4 《化学文摘》索引及其使用 …… 105
6.4.1 关键词索引 …… 105
6.4.2 作者索引 …… 106
6.4.3 主题索引 …… 109
6.4.4 普通主题索引 …… 109
6.4.5 化学物质索引 …… 110
6.4.6 分子式索引 …… 110
6.4.7 专利索引 …… 112
6.4.8 环系索引 …… 112
6.4.9 登记号索引 …… 112
6.4.10 化学文摘社来源索引 …… 113
6.4.11 索引指南 …… 113
6.5 CA 检索途径及实例 …… 113
6.5.1 CA 检索途径 …… 113
6.5.2 检索实例——甲醇氧化制甲醛 … 113
6.5.3 以“关键词索引”入手查阅期文摘 …… 114
6.5.4 分子式途径检索卷索引 …… 115
6.6 网络 CA 检索 …… 115
6.6.1 化学文摘社主页直接检索 …… 115
6.6.2 《化学文摘》光盘检索 …… 115
6.6.3 CA 网络数据库 SciFinder Scholar …… 116
6.6.4 SciFinder Scholar 客户端检索 …… 116
6.6.5 SciFinder Scholar Web 版检索 … 116
练习题 …… 121
实践练习题 …… 121

第7章 Internet 化学化工资源 …… 123

7.1 Internet 化学化工信息类型 …… 123
7.2 Internet 化学化工信息查找方法 …… 124
7.2.1 在相关门户网站中进行分类逐级查询 …… 124
7.2.2 通过综合网站或搜索引擎查找 … 124
7.2.3 通过网站站内搜索/查询功能进行搜索 …… 126
7.2.4 利用网络实名、浏览器搜索项直接查找 …… 126
7.2.5 通过化学化工专业搜索引擎查找 …… 126
7.3 化学化工专业网站与数据库 …… 126
7.3.1 国内重要网站与搜索引擎 …… 126
7.3.2 国外重要网站与搜索引擎 …… 128
7.3.3 Internet 化学化工专业数据库 …… 128
7.3.4 有机化学与药物合成相关网站 … 130
7.3.5 无机、分析、物化及结构表征技术相关网站 …… 131
7.3.6 高分子与材料学科相关网站 …… 132
7.3.7 与化学相关的学科网站 …… 132
7.4 国内外重要网站 …… 133
7.4.1 政府、科研、教育机构 …… 133
7.4.2 学会与专业科研院所 …… 134
7.4.3 科普、教育信息网站 …… 136
7.4.4 会议论坛、博客及新闻等信息 … 137
7.4.5 招聘与求职信息 …… 138
7.5 通过试剂仪器网站获得信息 …… 138
7.5.1 国内试剂仪器厂商 …… 138
7.5.2 国际知名试剂仪器公司 …… 139

7.5.3 综合经销商 …… 140
7.6 免费资源的利用 …… 140
7.6.1 重要的免费数据库与网站 …… 140
7.6.2 如何使用试剂仪器网站查询化合物参数 …… 142
练习题 …… 144
实践练习题 …… 144

第8章 Internet生物医药信息资源 …… 145

8.1 生物医学及药物网络信息 …… 145
8.1.1 生物医学范畴与网站类型 …… 145
8.1.2 生物医学网站与数据库 …… 146
8.1.3 临床医学网站与数据库 …… 148
8.1.4 药学网站与数据库 …… 149
8.1.5 化学品安全与毒性相关网站 …… 150
8.1.6 生物、医学、药学相关教学网站 …… 150
8.2 免费生物医药类网站与数据库 …… 150
8.2.1 免费搜索引擎 …… 150
8.2.2 免费生物医学全文的获取 …… 151
8.3 PubMed检索方法与实例 …… 152
8.3.1 PubMed简单检索 …… 152
8.3.2 PubMed高级检索 …… 153
8.4 PubChem检索方法与实例 …… 154
8.4.1 PubChem简介 …… 154
8.4.2 PubChem检索实例 …… 155
8.5 蛋白质数据银行检索方法 …… 156
8.5.1 蛋白质数据银行简介 …… 156
8.5.2 蛋白质数据银行检索实例 …… 157
8.6 Internet生物医学期刊 …… 158
8.6.1 出版社与图书馆 …… 158
8.6.2 与生物医药相关的著名期刊 …… 158
练习题 …… 159
实践练习题 …… 160

第9章 重要网络数据库与在线检索工具 …… 161

9.1 检索工具与网络数据库 …… 161
9.1.1 从检索工具到搜索引擎 …… 161
9.1.2 数据库及其在线检索 …… 162
9.1.3 重要的化学化工网络数据库与在线检索工具 …… 162
9.2 综合搜索引擎的使用 …… 164
9.2.1 搜索引擎主要功能的利用 …… 164
9.2.2 中英文关键词的筛选与优化 …… 165
9.2.3 搜索语法与技巧 …… 165
9.3 化学化工专业检索工具 …… 165
9.3.1 CA——网络数据库 …… 165
9.3.2 PubMed——生物医学相关免费检索工具 …… 165
9.3.3 PubChem——生物医学相关免费检索工具 …… 165
9.4 综合数据库及使用方法 …… 166
9.4.1 ISI数据库——Web of Science … 166
9.4.2 EI数据库 …… 167
9.4.3 中国知网数据库 …… 168
9.4.4 万方数据库 …… 170
9.4.5 维普网络数据库 …… 170
9.5 重要专业数据库及使用方法 …… 170
9.5.1 ScienceDirect数据库 …… 170
9.5.2 ACS数据库——高水平论文数据库 …… 173
9.5.3 RSC数据库 …… 175
9.5.4 Wiley Online Library …… 175
9.5.5 SpringerLink期刊全文数据库 …… 175
9.6 特色网络数据库与在线检索工具 …… 176
9.6.1 NIST化学手册 …… 176
9.6.2 Reaxys数据库 …… 176
9.6.3 溶剂数据库 …… 176
9.7 网络数据库与在线检索工具使用策略 …… 176
9.7.1 网络数据库及在线检索工具选择 …… 177
9.7.2 检索方法选择 …… 177
9.7.3 检索结果处理与利用 …… 177
练习题 …… 178
实践练习题 …… 178

第10章 化学化工信息检索与利用——策略与技巧 …… 179

10.1 化学化工信息检索与收集策略 …… 179
10.1.1 根据目标确定检索策略与途径 …… 180
10.1.2 通过专业数据库检索与收集化学化工信息 …… 181
10.1.3 充分利用图书馆的免费资源 …… 182
10.1.4 免费检索信息的途径 …… 182
10.2 文献整理与文件夹管理 …… 183
10.2.1 文件的分类与文件夹的命名 …… 183
10.2.2 文件的分类技巧 …… 184
10.2.3 利用软件管理文件 …… 184
10.2.4 所获信息的鉴别与筛选 …… 184
10.3 化学化工信息的利用——文献的阅读 …… 185
10.3.1 不同类型文献的利用 …… 185
10.3.2 阅读综述 …… 185
10.3.3 广泛浏览与专业精读 …… 185
10.3.4 善于总结 …… 186
10.3.5 巧妙利用 Internet 查生词 …… 186
10.4 研究生如何读文献 …… 187
10.4.1 研究课题确定前后检索与阅读文献 …… 187
10.4.2 带着问题阅读文献 …… 187
10.4.3 用批判的目光阅读文献 …… 189
10.4.4 如何阅读不熟悉领域的文献 …… 189
10.4.5 文献追踪的重要性 …… 190
10.4.6 阅读文献的方式与经验 …… 190
10.5 论文写作——基于文献的创新 …… 190
10.5.1 学会从文献中提炼精华 …… 191
10.5.2 研究论文写作的题材 …… 191
10.6 化学化工信息的检索与利用实例 …… 191
10.6.1 传统、应用性课题——洗涤剂 …… 192
10.6.2 化学前沿领域研究课题——智能高分子 …… 192
10.6.3 检索实例——纳米二氧化钛 …… 194
练习题 …… 194
实践练习题 …… 195

第11章 学术论文撰写与在线投稿 …… 196

11.1 学术论文主要类型 …… 196
11.2 检索信息的再利用——撰写学术论文 …… 197
11.3 学术论文的结构及撰写要求 … 197
11.3.1 论文标题 …… 198
11.3.2 作者署名 …… 198
11.3.3 作者单位与个人信息 …… 198
11.3.4 摘要及图文摘要 …… 198
11.3.5 关键词 …… 199
11.3.6 英文标题、作者、单位、摘要、关键词 …… 199
11.3.7 分类号 …… 200
11.3.8 前言 …… 200
11.3.9 正文部分 …… 200
11.3.10 结论 …… 202
11.3.11 致谢 …… 202
11.3.12 参考文献 …… 202
11.3.13 附录 …… 203
11.4 科技论文撰写知识网站 …… 203
11.5 科学研究论文简介 …… 203
11.5.1 科研论文类型 …… 204
11.5.2 综述论文 …… 204
11.5.3 实验与理论研究论文 …… 204
11.6 教学研究论文简介 …… 204
11.6.1 教学研究论文类型 …… 204
11.6.2 教学技术研究论文 …… 205
11.6.3 知识介绍论文 …… 206
11.7 学位论文与毕业设计说明书 … 207
11.7.1 学位论文基本内容和撰写要求 …… 208
11.7.2 毕业设计说明书 …… 208
11.8 论文投稿 …… 209

11.8.1 纸质版论文投稿与校对符号 …… 209
11.8.2 国内刊物在线投稿 …… 211
11.8.3 国外刊物在线投稿 …… 211
练习题 …… 212
实践练习题 …… 212

第12章 化学化工软件与在线课堂 …… 213

12.1 软件的过去与将来 …… 213
12.2 化学化工软件类型与用途 …… 214
12.2.1 化学结构绘制软件 …… 214
12.2.2 数据处理软件 …… 215
12.2.3 图谱解析软件 …… 215
12.2.4 文献管理软件 …… 215
12.2.5 化学实验软件 …… 216
12.2.6 化学计算软件 …… 216
12.2.7 化学工程软件 …… 217
12.2.8 生命化学软件 …… 218
12.3 化学化工软件下载途径 …… 219
12.3.1 综合网站 …… 219
12.3.2 软件厂商网站 …… 219
12.3.3 专业网站 …… 219
12.4 ChemOffice及其使用方法 …… 220
12.4.1 ChemOffice在线工具 …… 221
12.4.2 立体化学反应历程的绘制 …… 222
12.4.3 ChemOffice预测红外光谱 …… 224
12.5 三维制作软件3DS Max及其使用实例 …… 225
12.5.1 3DS Max简介 …… 225
12.5.2 3DS Max使用实例 …… 225
12.6 文献管理软件EndNote及其使用 …… 227
12.6.1 EndNote的主要功能 …… 228
12.6.2 EndNote的文献导入的几种方式 …… 228
12.6.3 EndNote的文献编排 …… 230
12.7 在线教学软件与在线课堂 …… 230
12.7.1 在线化学软件简介 …… 230
12.7.2 在线课堂 …… 230
12.7.3 NB化学虚拟实验室 …… 231
练习题 …… 232
实践练习题 …… 232

综合练习题 …… 233

综合实践练习题 …… 234

附录 …… 236

附录1 希腊字母 …… 236
附录2 罗马数字表 …… 236
附录3 国际单位制中米制采用的字首 …… 236
附录4 化学名称常用数字字首 …… 237
附录5 系统命名中常见基团的词头、词尾名称对照表 …… 237
附录6 CA常用字符 …… 238

参考文献 …… 249

编者简介 …… 250

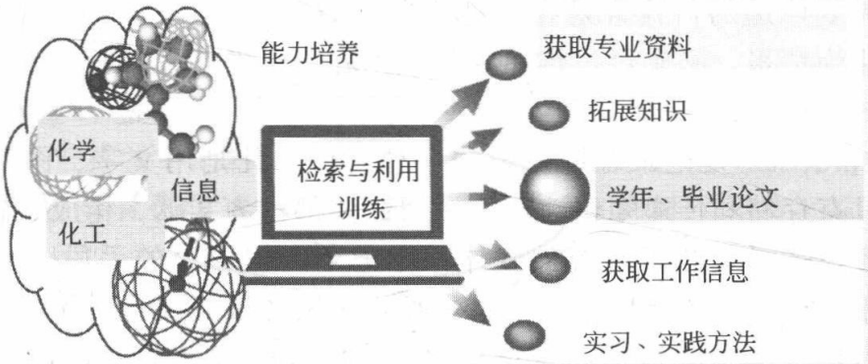
第 1 章　从文献查阅到信息检索

导　语

在当今飞速发展的信息时代，掌握了最新信息就掌握了主动权。通过本章的学习，可以让我们：①了解从化学化工“文献”到“信息”的发展历史；②认识化学信息类型与载体；③培养信息检索的意识。

关键词

化学化工；文献；信息；文献查阅；信息检索。



1.1　信　　息

我们常说的“站在巨人的肩膀上”，实际上是指“以前人积累的知识为基础”。而对前人知识的获取方法，已经从口耳相传、文献查阅与阅读，走向信息的检索与利用。计算机网络的高速发展，为普通科技工作者乃至高校的学生获取信息提供了捷径。

信息（Information）、材料（Material）和能源（Energy）被称为当代文明三大支柱。因此，新材料、信息技术和生物技术成为新技术革命的重要标志。信息对于经济和社会的发展、科技文化的进步都起着非常重要的作用，信息已经成为推动世界经济高速发展的新的源动力，信息无处不在，广泛渗透到各个领域，联系着世间万物，信息是继物资、能源之后的“第三级资源”。

在当今飞速发展的信息时代，谁掌握了最新信息，谁就掌握了主动权！

1.1.1　信息概念

信息是客观事物状态和运动特征的一种普遍形式，客观世界中大量地存在、产生和传递着以这些方式表示出来的各种各样的信息。信息是物质、能量及其属性的标识，是事物现象及其属性标识的集合，反映了物质的存在，不同的物质各自发出不同的信息。

从字面意思理解，信即“信号”，息即“消息”，通过信号带来消息就是“信息”。无形

的信息是以物质介质（如文字、声波、电磁波等）为载体。根据发生源的不同，信息可分为自然信息、生物信息、机器信息和人类信息四大类。“化学化工信息”则属于“人类信息”的范畴。

信息与人类智能活动有关的知识、技术、科学、文化、社会等密切联系在一起，是人们进行一切社会活动时必然伴随的活动。信息由意义和符号组成，一般以声音、语言、文字、图像、动画、气味等方式表示实际内容，通常有数据、文本、声音、图像四种形态。

信息具有差异和传递两个要素。没有差异不是信息，如两端加相同电压的导线没有电流通过，即不产生信息；同样，即使有差异但不经过传递，也不形成信息。

1.1.2 知识、情报和文献

知识（Knowledge）是通过信息传递，并对信息进行加工、重新组合的系统化信息。知识来源于信息，知识是信息的一部分，是人类在社会实践中积累起来的经验，是对客观世界物质形态和运动规律的概括与总结。人们在社会实践中不断接受客观事物发出的信号，经过人脑的思维加工，逐步认识客观事物的本质，这是一个由表及里、由浅入深、由感性到理性的认识过程。

情报（Information，Intelligence）指情况报道，情报的含义即被传递的知识，它是针对特定对象的需要传递的，并且是在生产实践和科学研究中起继承、借鉴或参考作用的知识。知识要转化为情报，必须经过传递并为使用者所接受、发挥其使用价值。情报具有知识性、传递性和效用性。

文献（Document）是记录有用知识的一种载体。凡是用文字、图形、符号、音频、视频记录下来，具有存储和传递知识功能的一切载体都称为文献。构成文献的三大要素：①被记录的知识内容；②承载知识内容的载体；③记录知识内容的手段。文献是情报的一种载体，不仅是情报传递的主要物质形式，也是吸收利用情报的主要手段。

西方学者习惯于把文献情报与自然信息（Information）等同，而把有关国家安全之类的情报中心叫作 Intelligence（常指智力、聪明）。中文“情报”一词则把文献信息与有关敌情的信息混淆，尽管同时存在着现成的“谍报”一词。

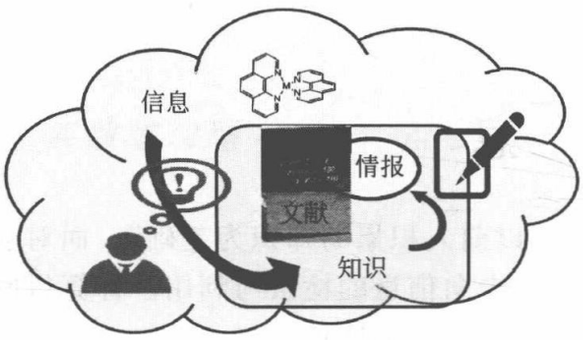


图 1-1 信息、知识、情报和文献之间的关系

信息、知识、情报和文献之间的关系可用图 1-1表示。物质的运动产生信息，各类信息经过人们系统化加工处理，转变成知识；有用知识的记录载体是文献，知识经加工处理，转化为情报。情报用于社会实践，用于解决实践中所存在的问题，创造物质、精神财富，即情报转化为生产力，产生新的信息，形成一个循环的转化过程。

基于文献载体的信息包含知识，知识包含情报。它们不仅是包含关系，而且可以互相转化。

近十年来，随着信息技术的飞速发展，电子、网络出版物大量涌现，使文献、情报、信息这三者趋向统一，逐渐淡化了三者在概念上的差别，尤其在国际交往中情报与信息是同一概念。因此，在国内科技界已用“信息”一词替代“情报”“文献”。

1.1.3 信息用途与信息检索

信息需要传播，人类从广泛传播的信息中获取知识，从而指导社会实践，促进人类进步。信息存储与检索（Information Storage and Retrieval）是信息传播的必备条件。

信息存储与检索是指信息按一定的方式组织起来，并根据信息用户需要找出有用信息的过程和技术，简称为信息检索（Information Retrieval）。信息存储主要包括对信息在选择的基础上进行信息特征描述、加工并使其有序化。检索是指借助一定的设备和工具，采用一系列方法和策略查找出所需要的信息。存储是检索的基础，检索是存储的目的。

从前，从纸质载体（文献）中通过手工或机械方法检索信息，我们称之为文献查阅。

如今，不但可以用手工、机械方法查阅文献，还可以通过计算机（联机、光盘和网络）检索信息，极大地满足了人类对信息利用的需要。

1.2　化学化工信息

1.2.1　科技文献发展历史

信息的传递主要靠口授、传抄或通信联系来进行。17 世纪末科学协会相继成立，为了促进会员之间的学术交流、推广新的发明创造，开始创办科技期刊，1665 年创刊的 Philosophical Transaction of the Royal Society（英国皇家学会哲学汇刊）是世界上最早出版的科技期刊。1778 年出版了第一种化学期刊 Crell's Chemisches Journal。17 世纪后半期和 18 世纪各资本主义国家相继成立了专利局，审理创造发明，于是出现了专利文献。

自 1960 年以来，科学技术高速发展，科技文献急剧增加。其中，化学文献是科技文献的重要组成部分，其数量的递增速度在各门学科中始终占据着领先的地位。

化学（Chemistry）常称为中心科学（The Central Science），因为它有连接基础科学和应用科学的作用，深刻影响着化学工程、生命科学、医学、材料、环境、航空航天等诸多学科。

1.2.2　化学化工文献与信息

化学化工信息内容十分广泛，狭义的化学化工信息指化学化工文献。

化学化工文献是人们从事与化学有关的生产、科学实验及社会实践的记录，它汇集着科技工作者的劳动结晶，积累着大量有价值的事实、数据、理论、定义、方法、科学构思和假设，记载着成功的经验和失败的教训。

化学化工信息不但包括传统化学化工文献所承载的信息，还包括基于网络的与化学化工相关的大量信息，如商务信息、远程教学、远程会议、博客（微博）、论坛，以及个人主页（包括 QQ、微信等）信息。

1.2.3　化学信息学简介

化学信息学（Cheminformatics）是为解决化学领域中大量数据处理和信息提取任务而结合其他相关学科所形成的一门新学科，也是目前正在发展的学科。它是在化学计量学（Chemometrics）和计算化学（Computational Chemistry）的基础上演化和发展起来的，吸收与融合了许多学科的精华。

迄今为止，化学信息学还没有统一的被广泛接受的定义与内涵。伴随着药物的发现和制造技术的发展而产生的化学信息学最早的定义：综合信息资源，将数据（Data）转化为信息（Information），将信息转化为知识（Knowledge），并将它用于特定药物先导化合物的辨识和优化领域的一门学科。

目前，化学信息学研究工作主要包括如下内容：①化合物登记（Compound Registration）；②构效关系的研究工具和技术；③虚拟数据库组装技术（Virtual Database Assembly）；④数据库挖掘技术（Database Mining）；⑤统计方法和技术；⑥大型数据的可视化表达。

广义的化学信息学还应该包括以下内容：①化学、化工文献学；②化学知识体系的计算

机表示、计算机推演；③化学图形学；④化学信息的解析与处理；⑤化学教育与教学的现代技术与远程信息资源。

要注意："化学信息"与"化学信息学"概念侧重点不同；化学信息应该包含与化学、化工相关的文献、信息。本书使用"化学化工信息"这一术语，目的是突出化学信息中的化工部分。

1.2.4 当代化学化工信息的特点

科技文献是全人类认识自然、改造自然、利用自然的知识结晶，科技工作者不仅可以汲取蕴藏于其中极其丰富的营养，而且可以促进思维活动的积极开展。为了有效地利用化学化工文献信息，我们应该了解当代化学化工文献的一些特点。

（1）数量庞大且增长迅速　自20世纪60年代以来，全世界出现了"知识爆炸"和"文献激增"的情况，各国的科技出版物在种类、数量、出版速度、出版形式等各方面都以飞跃的速度向前推进。尖端科学的文献增加速度更快。图1-2为美国《化学文摘》（CA）100年来收录文摘数量的数据。近十年来，网络技术的发展，促进了化学化工信息的高速增长，目前，CA收录超过8500万有机无机物质、6500万以上生物序列、4亿条以上实验和预测数据，以及超过6500万商业信息。

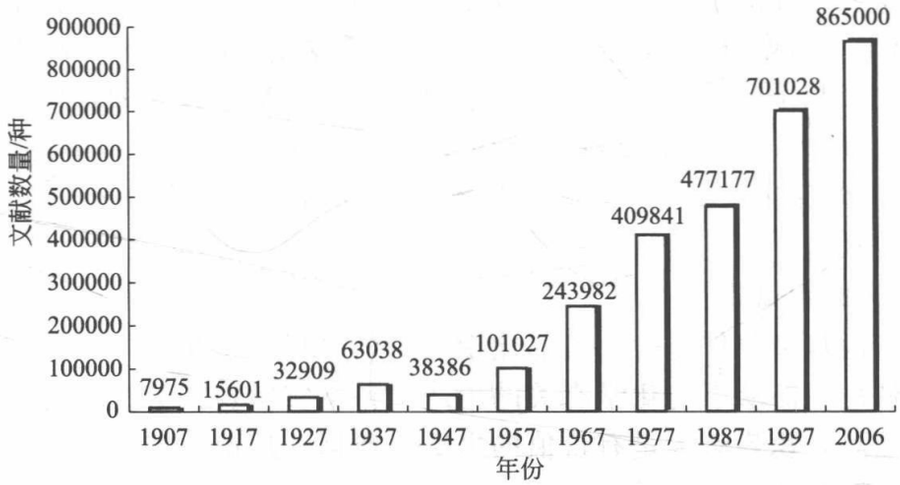


图1-2　美国《化学文摘》1907～2006年各年收录文摘数量

（每篇文摘对应一篇原始文献）

（2）种类繁多　传统科技文献按内容分为图书、期刊论文、专利、学位论文、会议文献、科技报告、技术标准、技术档案、政府出版物、产品样本和说明书等10大类，基于网络的科技信息内容大幅度增加。按载体，除了传统的印刷品以外，还有直感资料（录音带、录像带、缩微出版品、磁带、科技电影、幻灯片、唱片等）。基于Internet的网络文献信息发展异常迅速，已经超过印刷品文献信息。

（3）语种扩大，译文增多　随着科学技术交流程度的不断加深，世界各国的科学技术得到普遍发展，科技文献的语种在扩大。为了克服语言障碍，便于科技文献的利用，世界各国进行了大量的翻译工作，全世界翻译书的种数占图书出版种数的10%以上。大量的著作还拥有不同的译本；同一件专利在不同国家（不同语言）申请专利，这为掌握专利技术提供了便利条件。

（4）内容重复交叉、分布分散　从成果公开的形式看，一件成果可以用专利形式公开，可以在科技会议上宣读，也会以论文、专著的形式发表。这些内容会重复交叉，因此，读者可根据需要，查阅相应的文献。从科学研究领域看，学科界限不断被打破，化学作为中心科学，正在与其他学科相互渗透。因此，研究领域一方面不断深化，另一方面，课题涉及面越

来越广，从而对文献要求的类型与数量日益广泛。

（5）内容的新陈代谢、自然淘汰速度快　现代科学技术的发展日新月异，大量丰富的文献给社会带来了巨大的效益，同是也给人们利用文献带来了较多的困难。一个明显的问题就是知识老化速度加快，文献时效缩短，新陈代谢频繁，随着时间的推移，旧的技术与材料被新的所代替，不成熟的理论逐渐成熟。这种情况在科技文献的新旧更替、自然淘汰中更加明显，其中技术标准最为典型。

知识老化速度加快，文献使用寿命缩短，反映了科学技术发展迅速，说明人们利用文献的迫切性和重要性。同时，文献数量庞大、增长迅速、种类繁多、代谢周期短、文种繁多、分布分散、形式多样，使得人们难以迅速、准确、全面地收集到所需的文献，这就要求我们熟练掌握查阅利用文献的方法，准确掌握最新文献。

1.2.5　Internet 与化学化工信息

Internet 正以当初人们始料不及的惊人速度发展，今天的 Internet 已经改变了人们的思想观念和生产生活方式，推动了各行各业的发展，并且成为知识经济时代的重要标志之一。当然，Internet 也极大地影响着化学化工信息的检索与交流，主要体现出如下特点：

（1）化学化工信息来源丰富、内容多样　Internet 是开放的信息传播平台，任何机构与个人都可以将自己拥有的且愿意让他人共享的信息上网公开。在这个庞大的信息供应源中，不但有化学化工文献的基本来源（如：公共图书馆、媒体、高校、科研机构、商业公司），还有基于网络的电子图书馆、网上书店、专利服务、化学相关试剂与用品厂商，大幅度提高了信息源。

Internet 是一个集声音、图像、文字、照片、图形、动画、电影、音乐为一体的包罗万象的综合性信息系统。因此，Internet 上化学化工文献信息内容也呈现明显的多样性，包括电子版文献、电子版图书、视频资料、实物图像等。

另外，Internet 提供讨论、交流的渠道，也可以向网上发布信息，在网络上找到提供各种信息的人或一些专题讨论小组，通过交流、咨询获得相关化学化工文献信息。当前，在线数据库文献检索、在线交流、远程学习和远程计算都已经成为现实。

（2）化学化工信息检索方便快捷　与手工进行文献查阅相比，通过计算机、网络技术检索化学化工信息，甚至通过网购试剂仪器，极大地减少了文献查阅时间与科学研究的成本。

但需要注意的是：网络化学资源发展并不完善，有些信息资源费用较高。因此，不能忽视传统的化学信息资源与检索方法。

（3）为欠发达地区化学工作者提供机遇　欠发达地区的化学工作者，在网络时代，检索化学信息的时间与代价大幅度降低。

1.2.6　化学化工信息的分类

（1）按加工层次分类　根据加工层次，已经公开的文献分为一次、二次、三次文献，未公开的是零次文献（表 1-1）。一般说来，一次文献发表在前，二次文献发表在后。但由于文献越来越多，近来有些出版物首先以文摘形式予以报道，或者只刊登文摘，不刊登全文。

对于文献检索来说，查找一次文献是主要目的。二次文献是检索一次文献的手段和工具。三次文献可以让我们对某个课题有一个广泛的、综合的了解。

（2）按出版形式分类　传统文献按出版形式分类，分为 10 种（见表 1-2），基本上包括了主要的文献类型，是人们获得科技情报的主要来源。随着计算机、网络技术的普及，出现了新的一类以网络为基础的信息源，即数据库（Database）：除包括上述十大情报源以外，还有化学物质的结构、图谱、性质等信息。

表 1-1 化学化工信息按加工层次分类

加工层次	内容特征	出版形式
零次文献	形成一次文献之前的文献，大部分是保密级	原始实验数据、手稿等
一次文献	即原始文献，以作者本人的研究成果为依据写作的，未经情报加工的论文、专利或报告。是文献的主体，是最基本的情报源，是文献检索最终查找的对象	期刊与论文会议、专利、学位论文、科技报告等，以及网络版原始信息
二次文献	即检索工具，是指将分散而无组织的原始资料（一次文献）经过加工整理，介绍文献特征、摘要，成为系统文献，以便读者查找与利用的一次文献	书目、索引、文摘等检索工具； 网络搜索引擎
三次文献	是指通过二次文献，选用一次文献内容编写出来的成果。一般附有大量参考文献，是查找一次文献的途径	综述论文、科技专著、数据手册、百科全书等印刷或电子版文献

表 1-2 化学化工信息按出版形式分类

分类	内 容 特 征
科技图书（Books）	是对已发表的科研成果、生产技术或经验，或者某一知识领域系统地论述或概括
期刊（Periodicals）	也称为杂志（Journal 或 Magazine），一般是指具有固定题名、定期或不定期出版的连续出版物
专利文献（Patents）	主要指专利说明书，它是专利申请人向政府递送的说明新发明创造的书面文件
学位论文	是指作者为取得专业资格的学位而撰写的介绍自己研究结果的文献。学位论文在美国称为“Dissertation”，在英国称为“Thesis”
科技报告（Reports）	是关于某项研究成果的正式报告，或者是对研究过程中每个阶段进展情况的实际记录
会议论文集（Conference Proceedings）	也称会议资料，有学术会议的报告、记录、论文集及其他文献
标准文献（Standards）	指技术标准、技术规范和技术法规等
技术档案（Technical Archives）	指具体工程建设及科学技术部门在技术活动中形成的技术文件、图纸、图片、原始技术记录等资料
政府出版物（Government Publications）	是各国政府部门及其所属的专门机构发表、出版的文件
产品资料（Product Information）	通常指产品说明书，是对定型产品的构造原理、规格、性能用途、使用方法和操作规程等所作的具体说明

各种类型的文献各有特点，各有所用。例如：了解学科领域的背景资料，宜利用图书资料作为入门指导。进行科学研究主要利用期刊杂志，探讨最新的研究领域，则多半参考科技报告。掌握科技动态，主要利用会议资料。开展技术革新，新产品试制，往往参考专利文献。研究生做论文可以参考国内外高等院校有关的学位论文。定型产品的设计和检验，侧重于技术标准。购买仪器设备，需要参考产品样本目录。

（3）按载体分类　随着电子技术的发展，出版物的形式已经“走出铅与火，走进光与电”，更多的采用声像型和数字存储型。化学化工信息按载体分类见表 1-3。其中，网络信息信息量大，周期短，而且节省纸张和投递费用。为了减轻对地球有限资源的损耗，全世界正在倡导无纸化办公，因此，许多传统载体有被网络信息替代的趋势。

此外，化学化工信息按流通范围可分为公开发行、内部发行和秘密。

（4）数字资源类型　数字资料收藏的级别有如下几类。

① 链接级　通过 Internet 网站的链接，不受控制地获取和保存。如学科导航，免费网络信息。

表 1-3　化学化工信息按载体分类

载体分类	内容特征
印刷型	包括铅印、油印、胶印等，有书本式、卡片式
缩微型	主要包括缩微胶卷等高倍率的复制文献
声像型	主要包括唱片、录音带、录像带、电影片、幻灯片、多媒体光盘等
机读型	采用数字光盘的存储方式，如 CD、DVD、U 盘
网络信息	储存在计算机服务器，可通过网络检索

② 服务器或镜像级　利用其他站点服务器上的资源，或将主站点的资料拷贝到本馆或某地服务器上，向读者提供服务。如：本单位购买了使用权的网站信息（如 Elsevier），在本单位可以免费使用。

③ 永久保存级　具有保存价值的资料存储在本图书馆硬盘或高等存储装置上，可以作教参。

(5) 基于多学科交叉的学科分类　化学化工信息，不但包括化学（无机、分析、有机、高分子、物理化学）学科与化工（化学工程、化学工艺、应用化学）学科信息，而且还包括其他学科的信息。这是因为化学作为中心科学（The central science），与其他学科密切联系与交叉，并诞生了诸多前沿（或边缘）学科，如：与生物医学交叉的生物化学、医药化学、分子生物学、化学生物学、分子遗传学和免疫化学；与物理、材料、能源、环境、地球交叉的材料化学、能源化学、环境化学、绿色化学、化学纳米工程学、地球化学等。因此，在美国《化学文摘》中，将化学化工信息划分为 80 类。

1.3　化学化工信息的检索与利用

1.3.1　信息检索的目的和意义

近、现代科学史的大量事实证明，没有科学上的继承和借鉴，就没有提高；没有科学上的交流和综合，就没有发展。科学上的继承和借鉴、交流和综合，在当代的物质条件下，主要是通过文献检索来实现的。从许多实践经验看，科学研究中出现的各种问题，包括基础研究、应用开发研究，几乎有 95%～99%需要而且可以通过科技文献检索获得启发、帮助和解决。而完全靠自己的创造性劳动来解决的问题仅占 1%～5%。

对于科技工作者而言，信息检索的重要意义在于：①通过自主学习，拓宽知识面，更新知识结构。②通过查阅文献进行调查研究，激发创新灵感，开启创新研究之路。③通过吸取前人成功与失败的经验，减少重复劳动，减少科研投入；节省时间，加快科研步伐。

对于即将加入科学研究、工程技术或教育行列的大学生来说，通过“信息检索与利用”课程的训练与实践，不但能够找到“文献宝库的钥匙”，而且有利于培养他们的科学素养与能力，如图 1-3 所示。

数十年前，化学工作者用于文献检索的时间比例为 15%～61%。随着计算机和网络的发展，用 Internet 检索可以节省大量的时间，检索的范围和检索的成功率大大提高。

总之，通过本书（课程）训练，培训个人的信息分析、归纳、综合能力。这种能力，不仅仅在课程学习、知识拓展、科学研究、学位论文、发表论文中十分重要，而且它有助于个人一生中各种能力的培养与提高。

1.3.2　信息检索的概念与类型

信息检索（Information Retrieval）是指将信息（文献）按一定的方式组织、存储起来，

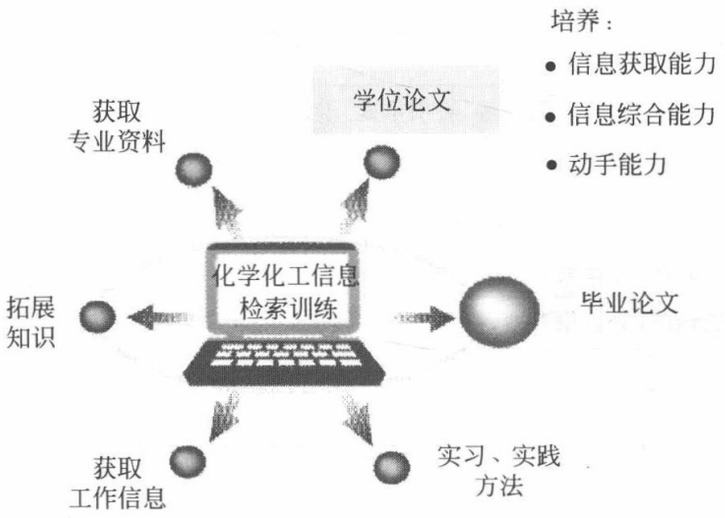


图 1-3 信息检索与利用实践与训练的作用

并针对用户的需要查找出所需信息的过程。因此从广义上讲，信息检索包含了信息的存储和检索两个密不可分的部分。而我们通常所讲的信息检索，是指狭义概念的信息检索，即从检索工具和检索系统中查找出所需信息的过程。

信息检索根据其检索对象的不同，可分为文献检索、数据检索、事实检索。其中，文献检索是三者中最基本、最主要的方式。一般来说，文献检索是信息检索的基本检索，它要比数据检索和事实检索困难，主要通过检索工具达到检索目的；数据检索和事实检索是信息检索的派生检索，主要通过工具书来达到检索目的。

在实际工作中，往往把“信息检索”与“文献检索”混同使用，这主要是针对不同侧面而言。当强调检索的目的时，我们说“信息检索”，即通过各种检索系统查找出所需的信息；当强调检索的手段时，我们说“文献检索”，即从文献型检索系统中查找出所需的文献型信息。信息检索包含了文献检索，文献检索是信息检索中最重要的类型。

1.3.3 文献检索的基本原理

文献检索的基本原理就是利用检索标识与文献的存储标识相比，如果能够取得一致，就叫“匹配”，就可得到“命中文献”。图 1-4 提示了文献检索、检索工具及文献检索系统的一般构成和系统原理。

1.3.4 化学化工信息的检索途径

化学化工信息的检索途径有多种分类方法（表 1-4）。

（1）按检索设备分类 可分为手工检索、缩微文献检索、计算机检索。目前，计算机（网络）检索是化学化工信息检索的最主要方式。

（2）按文献外表特征分类 主要有文献名称、作者姓名、文献序号三种，该途径在网络信息查阅中十分便捷。其中，作者姓名途径可以从作者目录（或作者索引）查寻。作者途径的特点是：专业科技人员一般是各有所专的，尤其是在某些专业领域里的知名学者或专家，他们的文章一般都代表一定的水平和动向，通过作者线索，可以连续地发现和掌握他们研究的情况。在同一作者姓名下，集中内容相近或内容间有逻辑关系的文献，可以查寻某作者最新的论著。一定程度上，可以引导查到同类或相关的文献。其缺点是作者姓名受到所在国别、使用文种、风俗习惯等方面的差异而变化多样，如姓有单姓、复姓、婚姻改姓、父母姓连写等；名有单名、多名、教名、父名等；有的姓在前，有的名在前；还有用不同文字书写的姓名要有“转译”的问题（如英、俄对译，日语罗马字母化等）。

许多文献有固定注册的编号（即唯一的身份证编号），如：期刊论文有 DOI 号（数字对

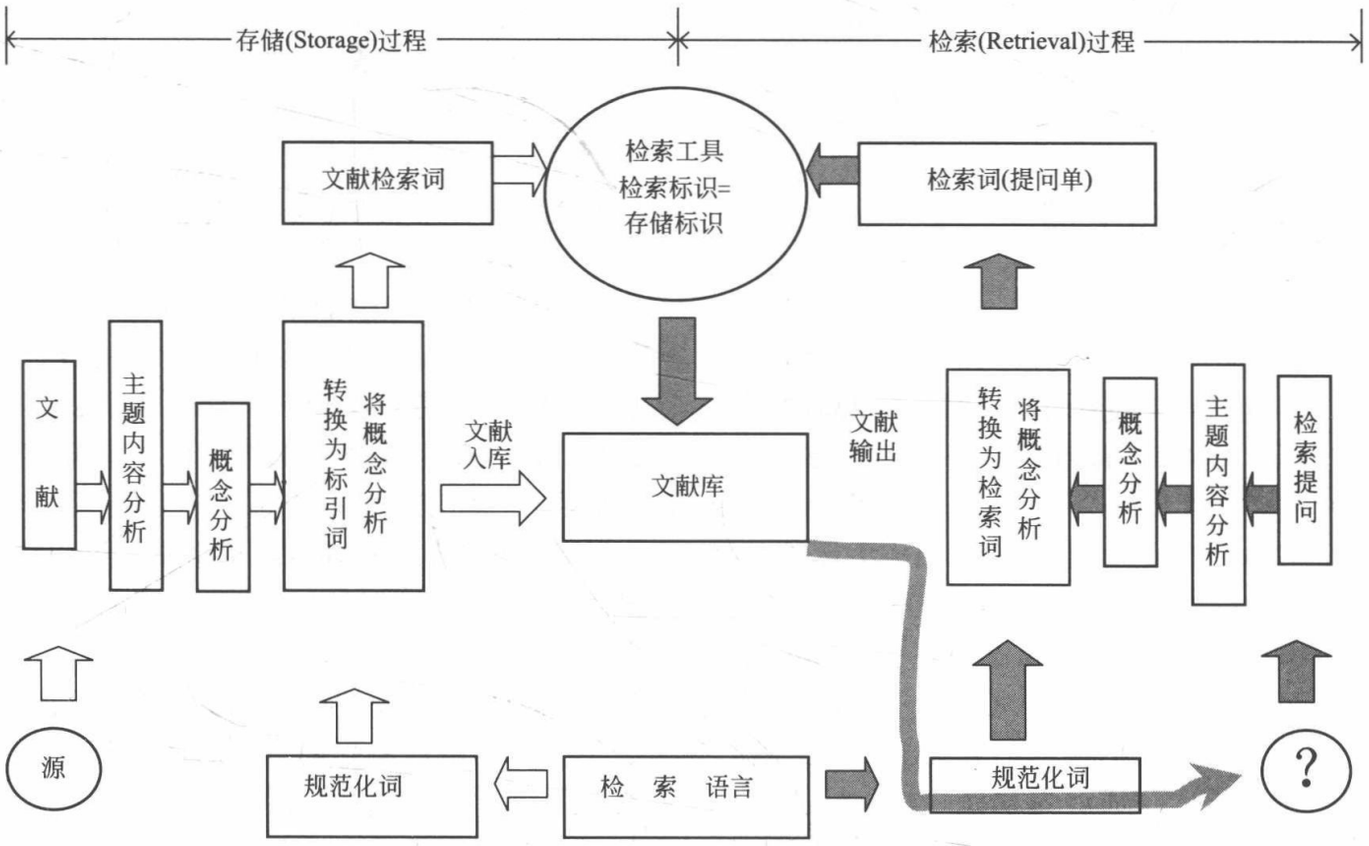


图 1-4　文献检索系统模型图

象标识 Digital Object Identifier)，专利说明书有专利号，技术标准有标准号，科技报告有报告号，文献收藏单位有馆藏号、索取号、排架号等。如果已知某一篇文献的这种编号，可以快速得到原始文献。当然，须先借助其他途径了解有关号码。

表 1-4　化学化工信息的检索途径

检索途径	主要检索类型	检索特点
检索设备	手工检索	即传统的利用卡片式或书本式的目录、文摘等检索工具检索情报
	缩微文献检索	即把缩微胶卷或缩微平片作为情报存储的载体，使用相应的光学阅读装置或电子技术设备进行检索
	计算机检索	是将存储有数据库信息的磁盘(或光盘、软盘)，通过检索软件系统进行检索。主要指以个人计算机为终端的网络检索
外表特征	文献名称	从书名、刊名、篇名等文献名称入手可以查到具体文献
	作者姓名	可以从作者目录(或作者索引)查寻
	文献序号	从文献有固定注册的编号检索
内容特征	分类途径	目前一般采用图书分类法
	主题、关键词	是指表示文献内容主题旨意的、经过规范化的名词或词组
	分子式	按化合物分子式排列方式查阅。是化学特有的检索方式

(3) 图书分类法　是按照一定的观点和法则，以科学分类为基础运用概念划分的方法，将知识分门别类划分列表。每一大类又按一定标准分为若干类，每一类又划分为若干小类，子目、细目等，逐级以扇面式展开，构成一个许多概念项目在上下、左右、前后之间有一定逻辑联系的类属体系，用以组织文献检索系统。能把同一学科的文献信息集中在一起检索出来，缺点是边缘学科、前沿学科在分类时往往难以处理，查找不便。

1.3.5 化学化工信息检索方法

常见的查阅方法主要有直检法、引文法、工具法、循环法（表 1-5）。其中，在没有成套检索工具或检索工具很不齐全的条件下，可用引文法（图 1-5）查得一批有关文献。其缺点是：原文引用的参考文献是很有限的，不可能列出全部有用文献，而且有的文献参考价值不大。

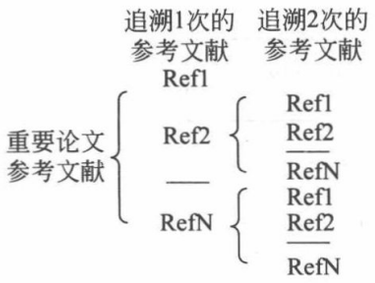


图 1-5 引文法追溯查找文献示意图

工具法又称常用法，是查找文献的主要方法。

（1）顺查法 优点：检出率较高，漏检较少。缺点：检索费时费力，尤其检索年代较长的课题，工作量很大；早期的许多文献早已过期，除了极少数经典著作或论文至今还在被引用外，绝大多数文献已被后来的研究成果所取代。

（2）倒查法 优点：可以节省大量的查找时间。由于近期文献在论述现代科学技术成就的同时，一般都要利用、论述和概述早期的有关文献，从而可以了解该课题的早期研究情况。因此，检索文献只要能从这些文献中基本掌握所需情报，适可而止。缺点：检索比较费时费力。

（3）抽查法 优点：能很快了解该学科的发展情况。缺点：可能漏掉重要线索和有用文献。

循环法是先用检索工具查出一批文献，然后利用这些文献内所附的参考引用文献追溯查找，扩大线索。或者先掌握一篇文献的参考引用文献线索，从中发现这些文献所具备的检索途径，如作者、序号、分类、主题等，然后利用相应的检索工具扩大线索，获取文献。

各种检索方法各有优缺点，采用什么检索方法，要看检索条件和要求而定。检索的基本要求是："广、快、精、准"。但是，由于各种课题的检索目的不同，要求也不完全相同。例如：若收集课题的系统性文献，可以采用顺查法，用检索工具进行检索。如果是要解决某一课题有关的关键性技术问题，要求既快又准地提供关键性情报，解决急需，时间又比较紧迫，这种情况下，宜用倒查法，迅速查得最新技术文献。

表 1-5 化学化工信息的常见检索方法

检索方法		检索特点
直检法		即直接检索法，是从浏览查阅原始文献中直接获取所需文献的方法
引文法（追溯法）		利用文献末尾所附的"参考文献"进行追溯查找
工具法	顺查法	从课题研究的起始年代开始，由远而近，逐年查找，一直查到最近期为止
	倒查法	从最近起，由近而远，逐年推早查找
	抽查法	针对本学科发展特点，可以抓着该学科文献发表的核心刊物和发展的重要年代，抽出一段时间（几年或几十年），再进行逐年检索
循环法		又称分段法或交替法，是以上几种方法相互交替的使用过程

1.3.6 化学化工信息检索步骤

对于科技工作者，当研究课题确定后，课题信息检索过程主要包括如下几个重要步骤：分析研究课题；选择检索系统，确定检索标识；确定检索途径和检索方法；查找文献线索；查找和获取原始文献；阅读原始文献，根据获得的知识，调整检索途径与检索方法，精确查找文献，总结方法，设计研究方案。

作为一名大学生，建议采用如下步骤检索信息：

（1）首先根据自己的兴趣或教师的安排，确定专题领域。然后分析研究课题，要注意以下问题：认识专题领域的实用性或前沿性；掌握相关专业知识；明确检索范围及要求。

（2）选择检索系统，尝试不同的检索工具或检索系统，如：利用图书馆（资料室或书

店）或网络；选择图书、期刊论文或专利等。

（3）选择有效的检索系统，确定检索途径和检索方法。

（4）查找文献线索，找到标题、摘要、信息源等信息。

（5）查找和获取原始文献（如图书、论文、专利、网页等）。

（6）阅读原始文献，根据获得的知识，调整拟综述的专题范围，调整检索方法，精确获得文献，阅读文献、整理总结专题内容，撰写综述（或设计研究方案）。

1.3.7　原始文献的搜集与信息内容的记录整理

（1）获取原始文献的主要方法　各类文献的产生和流通渠道不同，搜集方法也就不同，概括起来有选购、索取与交流、现场搜集、委托搜集、复制与拷贝、网络订购六种。其中，复制方式主要有静电复制、缩微复制及照相复制等。拷贝是指电子版的复制，有时也指从本单位数据库的下载。网络订购指一些国内没有的文献资料，可以通过国际联机检索终端向国外联机中心购原文复制件或订购复制缩微件。

对于普通用户来说，获取原始文献的主要方法是网络免费下载、图书馆复制、网络求助（或购买）3 种方法。

（2）免费获取原始文献的方法　目前，基于各国的政策，专利文献可以免费获得，从专利网站直接下载。而图书、期刊等大部分原始文献是收费的。如果所在学校或单位已经订购了相应的数据库，可以直接下载。

对于无授权的文献，有以下几种途径可以免费获得：①通过 E-mail 向作者索取；②通过网站互助；③通过免费网站。具体方法将在第 10 章总结。

（3）信息内容的记录整理　搜集来的文献资料，来源不一，类型各异，内容十分分散，欲以利用还需进一步有效地积累，将其转换成便于存储与利用的记录形式。文献资料的记录形式，按其内容加工层次划分有索引式、摘录式、提要式、心得式和全录式。按其所使用的记录载体划分有复印式、笔记式、卡片式、活页式、剪报式，它们具有方便、迅速、规范的特点。电子版的化学化工信息，阅读后要学会使用电子版的记录本。

1.3.8　文献的鉴别与筛选

在利用所获的文献之前，需要对其进行鉴别与筛选，主要是分析判断文献的可靠性、先进性和适用性。具体方法见第 10 章（10.2 节）。筛选则是在鉴别的基础上，对文献资料及其情报内容进行取舍，将陈旧的、重复的、无关的资料与部分内容剔除出去，保留或提炼出有价值的文献和知识内容。

1.4　查阅化学化工信息注意事项

1.4.1　记录要完整

查阅文献必须做好记录。可使用笔记本、卡片或活页本。每次记录时，注明查获文献的各项内容和外表特征，如作者姓名、期刊名称、卷、期、页次、年份、文摘的杂志卷号、页码（或文摘号）、题目名称、内容摘要等。记录在卡片上较好，可以事后编排分类，成为“专题性”的积累，为需要时查找创造条件。

（1）印刷版文献记录格式　**作者姓名（通信地址）、题目、期刊名称、年份、卷（期）、起-止页码（文摘的杂志卷号、页码或文摘号），以及内容摘要。**

【例 1-1】　尤长城，张雯，刘育（南开大学化学系），“超分子体系中的分子识别研究”，化学学报，2000，58（3），253-257（《全国报刊索引》自然科学技术版：010101290）。

【例 1-2】　Charlwood，Joanne；Birreil，Helen；Gribble，Andy；Burdes，Vincent；

Toison, David; Camilleri, Patrick (New Frontiers Science Park, SmithKline Beecham Pharmaceuticals, Hariow Essex, UK CM19 5AW). "A Probe for the Versatile Analysis and Characterization of N-Linked Oligosaccharides." Anal. Chem. 2000, 72 (7), 1453-1461 (CA: 133: 308569h).

(2) 网络化学信息记录格式 **作者,"标题",网站名称(或出版者),出版或更新日期[阅读或下载时间],网址。**

需要注意的是:在检索过程中会发现,上述参数中部分内容在所浏览的网页中也可能无法看到,这时只需记录能看到的内容即可。

【例 1-3】 方晓玲,"缓释、控释药用高分子材料的研究和应用",纤维素醚 [2007.09.27], http://hopetop66.hz2.2d.net.cn/bbs/thread-5-1-1.html。

其他种类的化学信息记录方式参见第 11 章内容。

1.4.2 充分利用现有条件

尽量利用各种有利条件,从最简单途径着手检索。如已知化合物分子式,即可以从分子式索引着手。已知专利号,就从专利号索引着手。已知某个作者,可先用作者索引。具体项目,针对性的问题,可从主题索引、关键词索引去查。广泛性、系统性的问题,可从分类体系中查。了解最新的文献动向,可从近期文摘刊物的分类目次中选择适用的范畴,进行一般性的浏览,加深印象。

根据检索条件确定检索方法。没有检索工具时,采用追溯法较实际。虽然它效率不高,费时费力,但也比逐本、逐期、逐年翻查原始文献要快得多。但是在有成套检索工具可供利用的情况下,采用工具法为佳。它的检出率和检准率都比追溯法高,是最常用的检索方法。

1.4.3 交叉补充

除了利用检索工具开展检索过程之外,还要利用各种现期刊物补充查找。因为检索工具报道的"时差"因素,有些最新文献线索可能尚未编入检索工具之中。另外,检索工具收录的文献也有一定的限制,尤其是一些不公开发表的文献。这些文献在某个图书情报部门的馆藏目录中可能有,需补充查一下。如果有条件,最好能利用几种文摘交叉进行检索,这样能起到文献线索的核对作用。尽管会出现重复现象,但一定会得到不少补充,降低漏检。

1.4.4 原文转换

在获得文献线索以后,要设法去寻找原文。若原文一时难以找到,可以考虑从文献的交叉重复发表的范围中查找另一种类型的文献来代替。如:某国某号专利没有原件,可查别国的相同专利;某份科技报告查不到时,可再到政府出版物中去寻找;某次会议文献一时找不到,可到学术性期刊、学会刊物、学报中去找;某种文字的文献看不懂时,可查其译文资料。如果实在找不到原件者,可用它的文摘来代替(最好是较详细的报道性文摘,常用美国《化学文摘》)。

1.5 化学化工信息源的管理方法与阅读策略

搜集与积累的文献资料,经过鉴别与筛选后,还需进一步加工整理,使之系统化与条理化,便于检索使用,这就是文献信息管理。文献信息管理很重要,有利于文献信息的有效利用,特别是在当今电子资源丰富的情况下,更加凸显其重要性。

文献信息的管理可分为外部整理与内容整理两个阶段,外部整理通常指文献资料的记录、分类与建档;内容整理多指文献资料的情报研究。

1.5.1　印刷版文献管理

过去，使用纸质的印刷版文献。作为用户，文献管理需要按照研究内容的不同，进行分类、标记和装订。分类的标准是利于自己查阅和使用；标记是为了显现文献的主要信息内容，特别是自己感兴趣的部分，从而在以后查阅使用时方便快捷；装订有利于印刷版文献的保护与再利用。

1.5.2　电子信息与文件的管理

目前，随时能获得大量电子文献，因此，电子文献管理问题就成为能否真正高效地使用已获得文献的关键。工欲善其事，必先利其器，因而总结适合本人进行专业文献管理的方法或工具也就成为一个现代科技工作者应该具备的技能。对电子文献进行管理较为常见方法包括两种：①利用操作系统的资源管理器并结合 Word 或 Excel 表格的传统文献管理方法；②利用专业的文献管理软件。具体方法参加第 11 章。

1.5.3　化学化工信息阅读策略

通过检索工具检索、下载信息后，关键在于文献利用，主要是文献的阅读与理解。化学化工文献信息阅读基本策略如下：

① 期刊论文阅读内容主要包括背景和研究意义、方法、结论。

② 文献阅读一般要经过粗读、通读、精读三个阶段，这三个阶段取决于读者的需要。粗读是对文献的简单了解；如果文献对自己很有意义，那就应该通读全文了；当然，精读自己最感兴趣的文献部分也是特别重要的。

③ 文献阅读过程中要有记录，记录有利于文献的理解和使用；阅读记录要有重点。

有关化学化工信息的管理与阅读策略与技巧将在第 10 章中详细介绍。

1.6　互联网的有效利用

Internet 上的信息资源非常丰富，信息服务的种类或功能也是多种多样。可以分为两大类，即信息下载（download：浏览、检索）与信息上传（upload：交流、共享、储存）。

近年来，无线网络正在普及，互联网的终端从计算机向智能手机发展。因此，我们不但要学会使用计算机网络，也必须学会使用手机网络。

对普通用户来说，既可以通过网络检索与获取信息，也可以传递、保存、共享信息。这里简单介绍可用于保存与传递信息的载体功能。

1.6.1　免费邮箱申请及其功能

电子邮件（E-mail）是在 Internet 上传递的信件，又叫电子信箱。电子邮件地址格式为：用户名@域名，例如：zhangsanzglz@163.com。

随着 Internet 的迅速发展，绝大多数计算机都与 Internet 网相连。另外，利用磁盘传输数据时，具有容量小、容易丢失的缺点。目前，在许多大型网站，如网易（www.163.com）、Hotmail、Gmail 等都可以免费申请和使用电子邮箱（E-mail），当然，容量从 100M 到 5G 不等。上述电子邮箱可用于储存、传递信息。

E-mail 的首要功能是传输数据，还可以存储数据。由于大型网站的安全设置较高，所以，通过 E-mail 传输数据要比直接拷贝数据安全，可降低计算机病毒传播的概率。

1.6.2　基于 Internet 的个人空间

国内目前流行的微博与 QQ 日志、国际上流行的 FaceBook 与博客的形式相似。

Blog（博客）是 WebLog（Web＋Log）的简称，是以网络作为载体，简易迅速便捷地

发布自己的心得，及时有效轻松地与他人进行交流，再集丰富多彩的个性化展示于一体的综合性平台。博客是近年来发展起来的新型平台，之后又发展出“微博”。微博是继 E-mail、BBS、IM 之后出现的第四种全新的网络交流方式。微博绝不仅仅是一种单向的发布系统，它有着极其出色的交流功能。你在微博上发布的言论，会得到持相同观点者的支持，也有可能得到持相反观点者的反驳，这些支持或者反驳的言论，会使得你在思维上有更好的提升。

微信（WeChat）是 2011 年腾讯公司推出的一个为智能终端提供即时通讯服务的免费应用程序，可快速发送免费语音短信、视频、图片和文字，可将内容分享给好友。它是亚洲地区最大用户群体的移动即时通信软件。

可以预测：微博、微信也是发表个人成果的重要平台，因此也是化学信息相关的重要检索源。

1.6.3 基于 Internet 快速获得更新信息

在网络时代，我们没有时间和条件，像以前一样去逐一浏览现刊，如何快速获得最新成果信息呢？

RSS 在线阅读器解决了这个问题，我们可以通过图书馆已购买的数据库资源，用 RSS（Really Simple Syndication，即简易信息聚合、聚合内容）订阅最新学术文献资源。RSS 会根据您的订阅情况实时更新最新的文献信息，浏览前沿文献的过程中，遇到比较感兴趣的文章，可以再回头去找全文。

总之，互联网正在改变着我们的生活、学习方式，大家已经适应网络购物，在线课堂也在迅速发展。无线网（WiFi）的普及将加速“互联网＋”时代的发展。

练 习 题

1. 什么是信息？信息有哪两个要素？
2. 说明信息、知识、文献与情报之间的关系。
3. 什么是化学信息学？它主要包括哪些内容？
4. 传统化学化工文献按出版形式有几种类型？各自有何特征？
5. 化学化工文献按加工层次有哪些分类？按载体有哪些分类？
6. 分析说明当代化学化工文献信息的特点？
7. 简述化学化工信息检索的方法。
8. 简述进行化学化工信息检索的主要步骤。
9. 进行化学化工信息检索应注意什么事项？
10. 文献的著录格式主要包括哪些方面？请举例说明。
11. 分析化学化工信息检索在日常学习中的重要作用。

实践练习题

1. 调查本单位（学校、院或系）图书馆（资料室）中收藏有哪些类型的化学化工文献，

了解借阅手续。

2. 了解本单位图书馆（资料室）有哪些可用的网络资源。

3. 注册一个免费的个人电子邮箱（要求名称便于记忆），并练习通过附件传递电子文件。练习使用网盘储存电子文档。

4. 建立用于信息交流的 QQ 群，练习上传共享文件。

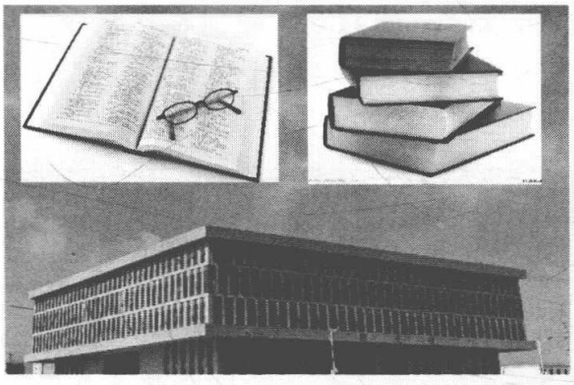
第 2 章　科技图书资源检索与利用

导　语

从教科书、科技著作、工具书等科技图书中，我们可以分别获得基础知识、研究前沿及理化参数。通过本地图书馆，可以借阅科技图书；通过网上图书馆与书店，可以检索、复制或购买所需图书；通过在线图书手册，可以免费获得基础知识、实验方法与理化参数。

关键词

图书；学术专著；工具书；在线图书手册。



图书是一类重要的科技文献。科技图书是对已发表的科技成果、生产技术知识和经验的概括论述，是经过总结和重新组织的三次文献。正式出版的图书均有 ISBN 号（国际标准图书编号：International Standard Book Number）。

从时间上看，科技图书的内容所报道的知识比其他类型的科技文献要晚，通常不反映最新的科技情报。但是，图书中所提供的资料相对更系统、更全面，通常都是经过著者对原始材料的选择、核对、鉴别和融会贯通后写成的，因而它是一种较成熟的科技资料。

欲了解和系统地掌握一门学科、一个专业、一种方法及各种数据，往往都利用图书获得。这比从分散的期刊中获得知识要方便得多。

2.1　科技图书概述

2.1.1　图书分类法与图书索引

一个开架阅览的图书馆，通常是以分类法组织其图书的。我国图书馆，大多使用中国图书馆图书分类法（中图法）对图书进行分类。中国科学院及其下属单位的图书馆基本上使用中国科学院图书分类法（科图法）。另外国际上还有美国国会图书馆分类法、杜威分类法和

国际十进分类法等。表 2-1 介绍了化学相关学科在中图法和科图法中的对应类号。

表 2-1　化学相关学科常用图书分类号

学科、专业	中图法	科图法	学科、专业	中图法	科图法
自然科学总论	N	50	药物化学	R914	63.32
环境科学	X	50.59	农业化学	S13	65.24
化学	O6	54	林业化学	S713	68.22
天体化学	P148	55.38	化学工业	TQ	81
地学	P3	56	食品工业	TS2	83
药物学	R9	63.3			

印刷版文献中，索引包括索引词、说明（或注释语）、出处 3 项内容。索引的作用相当于图书的目录，可以根据目录中的页码快速找到所需内容。其主要功能是为人们准确、迅速地获得文献资料提供线索性指引。常见的索引主要有报刊论文资料索引、文集篇目索引、关键词索引、专名索引、主题索引等。

计算机与网络技术使索引（Index）革命性地变为搜索引擎（Search Engine）。

2.1.2　科技图书主要类型

科技图书的范围较广，有多种分类方式，按其内容的系统性与完善性，主要分为教科书、科技著作、参考工具书三大类。

（1）教科书　教科书是一门课程的核心教学材料。广义上讲，凡是增进人们的知识和技能、影响人们的思想活动都属于教育。按照教学大纲的要求编写的教学用书又称课本、教材。

教科书一般是对某学科现有知识和成果进行综合归纳和系统阐述，较少做新的探索和提出一家之言，并应具有全面、系统、准确的特征。其主要作用是：学生在学校获得系统知识、进行学习的主要材料，它可以帮助学生掌握教师讲授的内容；同时，也便于学生预习、复习和做作业。

（2）科技著作　科技著作是指科学技术学术著作，是对科学技术领域内某个学科、专业（或专题）的文献总结。学术著作是指论述某个学科、专业和专题的著作。学术著作主要有学术专著、基础理论著作、应用技术著作、译著、论文集、科普读物等几类。

学术专著指作者在某一学科领域内从事多年系统深入的研究，撰写的在理论上有重要意义或实验上有重大发现的学术著作。基础理论著作指作者在某一学科领域基础理论方面从事多年深入探索研究，借鉴国内外已有资料和前人成果，经过分析论证，撰写的具有独到见解或新颖体系，对科学发展或培养科技人才有重要作用的系统性理论著作。应用技术著作指作者把已有科学理论应用于生产实践的先进技术和经验，撰写的给社会带来较大经济效益的著作［参见科技部《国家科学技术学术著作出版基金资助项目申请指南（2008 年度）》，网页：http://www.most.gov.cn/tztg/200802/P020080203609287503427.doc］。

（3）参考工具书　参考工具书（Reference Book）是指广泛收集某一领域（或某一方面）的知识材料，以特定形式组织编排，并提供一定检索方法，以便读者查找该领域（或方面）基本知识或解决疑难问题的图书。参考工具书属于三次文献，是数据（或事实）检索工具。

参考工具书包括百科全书、字典、辞典、手册、年鉴、数据集、图谱集等。

工具书是用特定的编制方法，将大量分散在原始文献中的知识、理论、数据和图表等，

用简明扼要的形式，全面、系统地组织起来，供人们迅速查检资料和解决疑难问题的图书。工具书是人们为达到某种研究目的、解决问题和查找特定资料而使用的工具，工具书的编写目的在于查阅资料，其本身不是阅读和研究的对象。另有一些书籍，既可供人们通读以获得信息，又汇集了各种准确的资料，而且索引完备，如资料汇编、学术论文集等，也可作为工具书来使用，这些书籍有时被称为“边缘工具书”。

在科研、教学和生产过程中，人们通过查阅工具书可获取工作中需要的公式、数据、图表、分析方法、合成方法和各种生产工艺过程等资料。如果科技人员承接一个新的课题，接触到的是陌生的领域，那么必须首先了解有关专题的专门名词、术语、基本原理、方法和技术等基础知识，才能阅读原始文献，掌握该课题及领域的发展概况，进而开展课题研究工作。因此，了解、掌握并熟练地使用工具书，对科学研究人员具有十分重要的意义。

工具书的分类：按内容可分为综合性和专科性两大类。按功用可分为字典与词典、百科全书、年鉴、手册、书目、名录、指南、表谱、地图集、传记辞典、地理辞典。

工具书正文一般按照字序、分类、时间地点三种排列形式编排，还提供索引（Index）、参照（See also）系统，也会根据新成果出补编或新版。

鉴于图书不像期刊那样稳定地出版，要了解化学类的图书只能不断跟踪新图书的出版，同时还要掌握一些典型的多卷书和丛书。一些重要的科技图书出版社在出版化学类图书方面已有悠久历史。它们出版的图书是各国图书馆收藏购买的主要来源。通常有下列值得注意的出版社：化学工业出版社、科学出版社、高等教育出版社、Elsevier、Pergamon、John Wiley、American Chemical Society（ACS）、Academic Press、Taylor & Francis、Springer Verlag、Chemical Rubber Co.（CRC）、Noyes Data Corporation、Derwent 等。有些出版社的出版物有一定特色，如 ACS 出版社的图书反映了当今化学领域的发展动向，特别是 ACS Symposium 系列。Elsevier 是规模很大的出版社，它的 Comprehensive 系列工具书是高价出版物，非常有用。CRC 有两个系列，一个是手册系列，另一个是 Critical Reviews 系列。Noyes Data Corporation 则从专利文献的述评方面出版专著，如 Chemical Technology Review 系列丛书。

2.2 如何阅读与利用科技图书

科研人员正确有效地使用教科书、科技著作与工具书，能使科学研究工作事半功倍。这里，从科技工作者新手（研究生、本科生）角度，介绍如何利用科技图书。

2.2.1 如何利用教科书

教科书具有全面、系统、准确的特征。从教科书中，我们可以获得相关学科基础而系统的知识，这是开展科学研究的基石。在不同级别的教科书中，大学教科书内容较为专深，有较高的学术参考价值。

【例 2-1】 针对导电高分子材料这一研究前沿课题，需要从《高分子化学》、《普通物理》、《导电高分子材料》等教材中获得相关基础或系统知识。

需要指出的是：①根据研究课题的需要，可选择性阅读相关教科书的部分章节，而无需阅读全书。②教科书一般是对某学科现有知识和成果进行综合归纳和系统阐述，较少做新的探索。因此，要获得前沿知识，需要阅读科技著作、综述论文或研究论文。

2.2.2 如何利用科技著作

科技著作是指科学技术学术著作，包括科技专著、译著、科普读物等。科技专著指国内外科学专家所撰写的学术著作，是对科技成果进行理论分析和实践的总结。从内容来说，专

著是对某一知识领域所做的探索，是新的学术研究成果。它属于一（学）派一家之言，并以本专业的研究人员及专家学者为主要阅读对象。

【例 2-2】 离子液体是指熔点在 100℃下的由有机阳离子和有机（或无机）阴离子构成的离子型化合物，它是一类重要的绿色溶剂。如果拟开展离子液体方面的研究工作，可以查阅近年来出版的有关专著，如《离子液体——从理论基础到研究进展》（张星辰等编著，化学工业出版社，2009 年）、《离子液体与绿色化学》（张锁江等编著，科学出版社，2009 年）及《离子液体——性质、制备与应用》（邓友全编著，中国石化出版社，2006 年）等。

需要指出的是：科技著作涵盖的知识面较窄，但更精深，对开展研究前了解该领域的专门知识很有帮助。

2.2.3　如何利用参考工具书

查阅化学化工类工具书通常可以获得化合物的理化参数、反应类型、反应条件、产物构造、生物生理毒性、环境影响等内容。如：手册是一类实用性很强的参考工具书，有数据手册、图表手册、条目型手册与总结型手册四大类，汇集了某一范围的基本知识和数据。

【例 2-3】 如果要合成一种已知有机（或无机）化合物时，我们可以查找相关的合成手册，查阅到最简捷的合成路线、反应条件、纯化方法，从而迅速合成所需的化合物。也可通过理化参数（或光谱图）类手册，检索该化合物的熔点、沸点、折射率，检验其纯度，以及对照红外光谱、紫外光谱、核磁共振谱图等数据。

熟练地使用参考工具书，必须做到两个方面。首先要熟悉工具书，既要熟悉著名的综合性工具书，又要熟悉本专业常用的工具书，特别要熟悉那些权威性工具书，它们取材系统完整，数据精确可靠，内容不断更新。只有熟悉了工具书，才能根据不同问题，选择使用合适的工具书。其次要掌握各种工具书的编排方式和使用方法。确定正确的检索途径，达到迅速查检的目的。

化学化工类参考工具书品种繁多，并且不断有新的工具书出版，由于文献越来越多，为方便化学工作者了解某一专业领域的进展，由权威学者主编的大全类工具书不断涌现，它们收录的文献齐全、水平高、篇幅大，价格也高。因此，不断跟踪工具书的出版对于全面了解化学文献是非常重要的。

2.2.4　获取最新研究成果与理化参数的其他途径

综上所述，通过教科书可以获得相关学科的基础知识，通过科技著作可以获得某领域的专门知识，通过工具书可以获得化合物参数、反应数据等。然而，上述图书中并不包含最新的研究进展。那么，如何获得最新的研究成果呢？大家首先会想到上网查阅，但是，目前网络内容虽然很多，但质量差别很大，存在一定量的错误信息。因此，这里介绍两类重要的方法。

（1）检索工具（美国《化学文摘》）与工具书　美国《化学文摘》（CA）（参见第 6 章）作为一个综合性文摘检索工具，收录了大部分新书条目，包括工具书。因此，我们认为在化学文献检索中，利用 CA 也可达到利用一些工具书获取各种数据的目的，尤其能获得尚未收录到参考工具书中的理化参数、制备方法等最新研究成果。但不能就此认为 CA 可以取代一切工具书，不能期望只需 CA 就可以解决文献检索的所有问题，主要有以下原因：①在工具书中查常见化合物最省力，可以直接得到数据，而用 CA 有时要查几十年时间跨度的文献，并逐一阅读文摘，再找出原始文献并从中取得需要的数据。②工具书中提供的数据可靠性好。查到后可以直接参考、引用或以此作实验参考。用 CA 可能会查出一批文献，还得花时间查对比较，进行鉴别，从中找出最可靠的数据。③工具书的编者本身是有一些经验的研究

人员，他们在研究工作中清楚地体会到查文献过程中有哪些不便之处，哪些是当时突出的共同感兴趣的数据，研究人员希望从哪一角度来查阅当时被普遍关注的文献，因此，好的工具书更符合工作人员的需要。④也有一些工具书的数据直接从实验室获得，还没有见诸于原始文献。许多原始文献只是报道了测定的某些数据，或列举部分数据，文献中并未给出完整数据，如谱图、X 射线晶体结构数据等，而有些工具书收集的数据完整性较好。

因此，在化学文献检索过程中应该有机地把 CA 和各种检索工具结合起来使用。特别是取得特定数据，应该首先查阅工具书。例如：要得知一个特定化合物的制备、熔点、沸点、毒性、折射率等，应首先参考工具书。在研究工作中应该分层次地使用工具书，每个实验室应该有 1～2 本最常用的手册，随时备查，当这些手册满足不了需求时，再到图书馆查大套工具书，实在找不到合适的工具书时，再查 CA 乃至使用联机检索等得到原始文献。

(2) 在线电子手册　在线查阅的各种电子手册很多，有的可以查阅化合物的理化参数，有的可以查阅化合物的波谱数据，有的可以查阅化学反应的数据，有的可以检索最新文献，它们在化学化工研究工作中非常有帮助。

【例 2-4】 化学品电子手册 V3.0 是一个综合性的化学品电子手册。它收集了包括化学矿物、金属和非金属、无机化学品、有机化学品、基本有机原料、化肥、农药、树脂、塑料、化学纤维、胶黏剂、医药、染料、涂料、颜料、助剂、燃料、感光材料、炸药、纸、油脂、表面活性剂、皮革、香料等常用化学品的中文名称、英文名称、分子式或结构式、物理性质、用途和制备方法等。该软件采用全模糊检索技术，检索简便。

【例 2-5】 物竞化学品数据库（www.basechem.org）是由上海物竞化工科技有限公司开发并维护的综合性公共化学品数据平台。目前，该数据库已收录基础化学品 5 万多种，标准品及标准物质 2000 多种。

2.3　获取图书资源的途径

对于普通的科技工作者或学生来说，图书是获得基础科技知识最重要的工具。获得图书资源的主要途径有如下几种。

2.3.1　通过图书馆借阅图书

各高校、科研院所都拥有自己的图书馆，各省市也有图书馆，国内最大的图书馆是中国国家图书馆、科学院图书馆。这些图书馆是免费开放的。

通过本校图书馆或本地区各种类型图书馆，可以查询、检索并借阅印刷版图书，可以在线阅读电子版图书，也可以联系图书馆员通过馆际互借获得图书。大型图书馆的图书资源多、学科门类齐全。通过图书馆获取图书资源的特点是免费或费用低。

2.3.2　通过书店或出版社购买图书

书店是销售图书的重要渠道。一般的书店只许购买，部分经营旧书的书店可提供借阅服务。目前书店包括实体店与网店。网上书店大部分提供内容简介（摘要）或目录。

读者不但可以通过网店购买到优惠的图书，也可以通过出版社购买到最新的图书，而且越来越多的人使用网购。

2.3.3　在线图书平台的利用

现代社会是一个信息网络化、服务个性化的社会，张扬个性、鼓励创新是这个时代的主旋律。网络图书平台是基于读者使用的习惯、特点、爱好以及不同的研究领域，主动提供满足其个性需求的信息内容和系统功能，它是图书馆常规定题服务、重点读者服务在网络环境

下的深化。网络图书平台可以为读者提供检索、下载、在线阅读、购买等服务。

目前，越来越多的图书馆构建了基于网络的图书服务平台。我们可以通过在线图书服务平台实现图书的检索、借阅、全文复印、下载等服务。

数字图书馆是将印刷版图书扫描成电子版，读者可以在线检索、浏览，以及阅读全文，如超星数字图书馆等。这为图书资源匮乏的地区提供了极大便利。

近年来，基于手机应用的图书馆 app（手机图书馆客户端）发展迅速。读者的手机下载安装图书馆的客户端应用程序，可以更方便地获取图书资源。目前大多高校、省市图书馆、网络图书馆都推出了自己的手机 app，如超星移动图书馆 app。

一些网站可以免费下载 PDF 电子书，部分网站可以在线阅读。

2.4　传统图书馆及数字化平台

随着因特网（Internet）的迅速发展，越来越多的参考工具书以不同形式（如：物质理化性质、产品及试剂的技术参数、规格等）出现在网络中。一些早期的图书也可以电子版的形式下载，例如：早期英文版《有机合成》（Organic Synthesis）可以免费下载电子版，这为普通读者检索文献提供了十分重要的手段。预计当前一些好的印刷版图书像专利一样，在将来都可以下载电子版。

在 Internet 上的化学资源无论是内容还是形式都非常广泛。服务器大都提供某一学科的各种资源和资源链接，通过所提供的资源和资源链接用户可以方便地找到自己所需要的信息。这类 www 服务器被称为“虚拟图书馆”（Virtual Library）。Internet 上的图书馆是获取图书、杂志资料的重要途径之一。网上图书馆信息主要由两部分组成：一是各图书馆的主页，上面有关于图书、杂志的检索和查询工具；二是在 Internet 网站上建立的虚拟图书馆或网上图书馆。

现在国内外图书馆特别是大学图书馆都已提供了公众访问的终端，其中有自由访问和限制访问两种。读者只要得到某一个图书馆的网址，就可以上网访问该图书馆，查找自己需要的资料。大多数公共图书馆和大学图书馆的访问终端可以随时使用，也有些图书馆需要图书卡和口令才能访问，其主要目的是方便本校的师生员工。

清华大学整理并列出了我国所有的网上图书馆、国外网上图书馆以及国内外图书馆组织与学会（www. lib. tsinghua. edu. cn/find/find_library. html）。

2.4.1　国内著名图书馆及网络平台

（1）中国国家图书馆（www. nlc. gov. cn）　是国家总书库，详见 2.4.3 节。

（2）中国科学院国家科学图书馆（www. csdl. ac. cn；www. las. ac. cn）　立足中国科学院，国家科学图书馆成立于 2006 年，总馆设在北京，下设兰州、成都、武汉三个法人分馆，并依托若干研究所（校）建立特色分馆。国家科学图书馆开通中外文的电子期刊、会议录、学位论文、专利、科学引文索引和网络信息导航等类型的文献数据库 169 个，另有中外文图书、期刊、学位论文、外文会议录数百万篇。国家科学图书馆开通了世界知名的化学化工外文全文数据库，以及外文文摘索引与事实数据库。

（3）国家科技图书文献中心（www. nstl. gov. cn）　国家科技图书文献中心（NSTL）也叫国家科技数字图书馆，是于 2000 年组建的一个虚拟的科技文献信息服务机构，成员单位包括中国科学院文献情报中心、工程技术图书馆（中国科学技术信息研究所、机械工业信息研究院、冶金工业信息标准研究院、中国化工信息中心）、中国农业科学院图书馆、中国医学科学院图书馆。NSTL 可以提供文献检索与原文传递、联机公共目录查询、期刊目次浏

览和专家咨询等服务，文献种类涵盖期刊、会议、学位论文、标准、专利和科技报告等。NSTL 部分数据库面向全国读者免费开通使用。

（4）中国高等教育文献保障服务系统（China Academic Library & Information System，简称 CALIS）（project. calis. edu. cn） 1998 年开始建设的以中国高等教育数字图书馆为核心的教育文献联合保障体系，目前形成了较为完整的 CALIS 文献信息服务网络。迄今参加 CALIS 项目建设和获取 CALIS 服务的成员馆已超过 500 家。建有西文期刊篇名目次数据库、高校学位论文库、专题特色数据库等多个数据库资源。中国高等教育文献保障体系——中国高等教育数字化图书馆（CADLIS）（www. calis. edu. cn），该数字图书馆包括资源检索（www. yidu. edu. cn）、期刊服务（外文期刊网） （ccc. calis. edu. cn）、e 得文献获取（www. yide. calis. edu. cn）等栏目。其中外文期刊网是普通用户获取外文期刊论文的最佳途径，收录 10 万余种高校收藏的纸质期刊和电子期刊信息。为读者提供“一个账号、全国获取”、“可查可得、一查即得”一站式服务的原文文献获取门户，CALIS 成员馆的读者用户均可获得 e 得所提供的文献获取服务，其检索界面如图 2-1 所示。

图 2-1 e 得文献获取检索界面

还有一些高校或地方图书馆，如：清华大学图书馆（www. lib. tsinghua. edu. cn）、北京大学图书馆（www. lib. pku. edu. cn）、上海图书馆（www. libnet. sh. cn）、中国科学技术大学图书馆（www. lib. ustc. edu. cn）。

2.4.2 国外知名网上图书馆

国外很多高校图书馆、组织协会网站有化学化工专业图书资源，可以检索、浏览、在线阅读或下载。

（1）美国国会图书馆（The Library of Congress；www. loc. gov）

（2）英国不列颠（大英）图书馆（The British Library；www. bl. uk）

（3）加拿大国家图书馆（Library and Archives Canada；www. collectionscanada. gc. ca）

（4）澳大利亚国家图书馆（National Library of Australia；www. nla. gov. au）

（5）日本国立国会图书馆（National Diet Library of Japan；www. ndl. go. jp）

（6）哈佛大学化学与化学生物学图书馆（www. chem. harvard. edu/library）

（7）麻省理工学院图书馆（Massachusetts Institute of Technology Library；libraries. mit. edu）

（8）斯坦福大学图书馆（Stanford University Libraries；library. stanford. edu）

（9）耶鲁大学科学图书馆（Yale University Science Libraries；www. library. yale. edu）

（10）英国剑桥大学图书馆（Cambridge University Library；www. lib. cam. ac. uk）

（11）英国牛津大学图书馆（University of Oxford Libraries；www. ox. ac. uk/research/libraries）

（12）新加坡国立大学图书馆（NUS Libraries；libportal. nus. edu. sg/frontend/index）

（13）美国威斯康辛大学麦迪逊分校化学图书馆（www. library. wisc. edu/chemistry）

（14）美国华盛顿大学图书馆（www. lib. washington. edu）　可综合检索 Internet 上可访问的热点图书馆及网上信息服务。

（15）图书馆研究协会（ARL；www. arl. org）　包括了美国和加拿大 125 家研究型图书馆，旨在资源共享、交换思想、促进发展。

（16）联机计算机图书馆中心亚太区中文网（Online Computer Library Center，OCLC；www. oclc. org/zhcn-asiapacific/about. html）　OCLC 是一个全球性的图书馆合作机制，致力于为成员和图书馆社区提供大量共享的技术服务、原创性研究和社区项目。OCLC 由全世界 100 多个国家的成千上万个成员图书馆组成，致力于携手合作提高信息的可获得性和可用性，支持推进前沿科学的发展和知识共享。

2.4.3　中国国家图书馆检索实例

中国国家图书馆（www. nlc. gov. cn）前身是北京图书馆，是综合性研究型图书馆，是国家总书库。现在馆藏居亚洲之首，是世界第 5 大国家图书馆，也是我国联网最早的图书馆之一。成立了中国国家数字图书馆（NDLC），其网页界面如图 2-2 所示。中国国家图书馆网页上也有图书馆导航，分为如下几类：公共图书馆、科研图书馆、高校图书馆、国外图书馆、其他图书馆。

图 2-2　中国国家数字图书馆网页界面

（1）查阅国家图书馆（简称国图，www. nlc. gov. cn）收藏主题包含“贵金属”的图书情况。

首先从国家图书馆首页点击“图书”书签进入“图书资源库”界面，选择左侧中文图书下方的“馆藏中文图书数字化资源库”，进入搜索界面（图 2-3），可搜索国图馆藏的普通中文图书、港台图书和海外出版的中文图书。

图 2-3　中国国家图书馆中文图书搜索界面

在检索界面的“题名”栏输入“贵金属”，点击检索，发现有 19 种题名包含“贵金属”

的图书。下面依次以图文的形式列出每种与贵金属相关的图书的封面、书名、作者、出版社、出版日期等情况；点击每种图书的标题链接还可以看到更详细的图书信息。如果是注册读者，还可以点击下方的在线阅读、目录、相关资源和文献传递。

（2）查阅国家图书馆（www.nlc.gov.cn）工具书在线关于“相转移催化”的词条。

国家图书馆图书资源库中文图书栏有一“工具书在线”数据库，提供8个中文工具书数据库与7个西文数据库的在线导航与检索，是对目前主要中外文工具书数据库进行检索的有效平台，点击可进入其检索页面，如图2-4所示。工具书在线收录的中文工具书数据库包括中国大百科全书、商务印书馆工具书在线在内的多个数据库和百度百科；收录的西文工具书数据库有：Credo全球工具书大全、Wikipedia（维基百科）、Guinness World Records（吉尼斯世界纪录大全）、HighBeam Encyclopedia（HighBeam百科全书）、Encyclopedia Britannica Online（大英百科全书网络版）、Biographical Dictionary（名人大词典）和Getty Thesaurus of Geographic Names online（地名词典）。这些数据库不仅能对工具书条目内容进行全文检索，也可对图片、图表、声像、声音、动画和视频等内容进行检索和引用。

比如，在检索栏输入“相转移催化”，选择“百度百科”数据库，就可以检索到百度百科中有关“相转移催化”的词条（图2-5）。

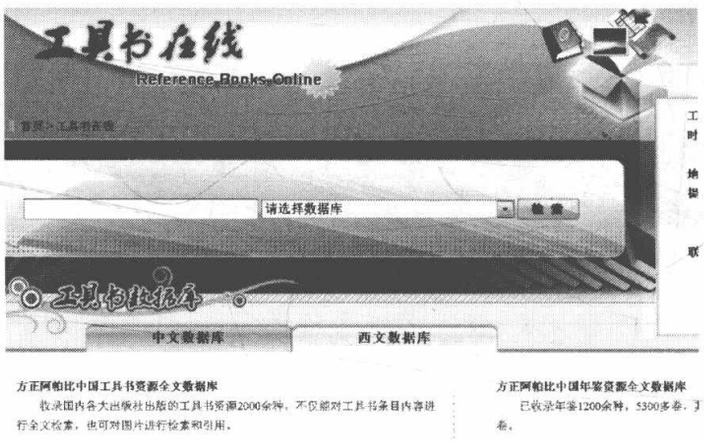


图2-4 国家图书馆工具书在线界面

图2-5 在百度百科数据库中检索有关“相转移催化”的词条

目前，国家数字图书馆已建有移动图书馆。进入国图首页后点击上面的“专题”栏，再次点击左下方的“移动图书馆”，就可以看到“掌上国图”，它为读者提供两种服务：短彩信手机报服务和国图的手机APP服务，读者可根据自身情况定制个性化、专业化图书服务。

2.5　超星发现的图书检索与全文浏览

超星发现是原来超星数字图书馆的升级版，现设有读书、讲座、课程与论文检测四个频道。超星发现（www.chaoxing.com）可对图书、期刊、学位论文、会议论文、网络问答、博客等网络资源进行综合检索（图 2-6）。

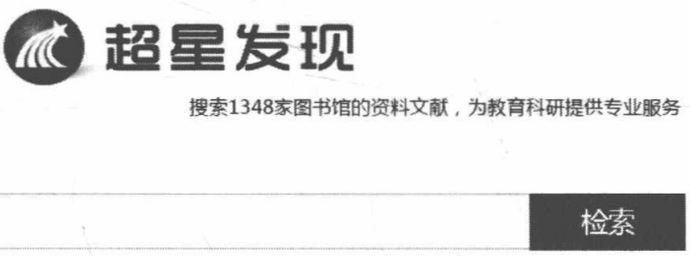


图 2-6　超星发现主页

（1）图书检索　在超星发现页面点击“读书”栏目，进入超星读书频道，在图书检索栏输入书名可进行检索。例如输入“有机半导体”，可获得 190 条相关图文记录，如图 2-7 所示。每一条检出结果不仅包括该图书的封面、书名、作者等信息，而且还包括本书简介、可免费在线阅读的章节链接。如果购买或注册成为会员，还享有网页阅读全文、阅读器阅读、下载全文的权利。

图 2-7　超星读书网页界面

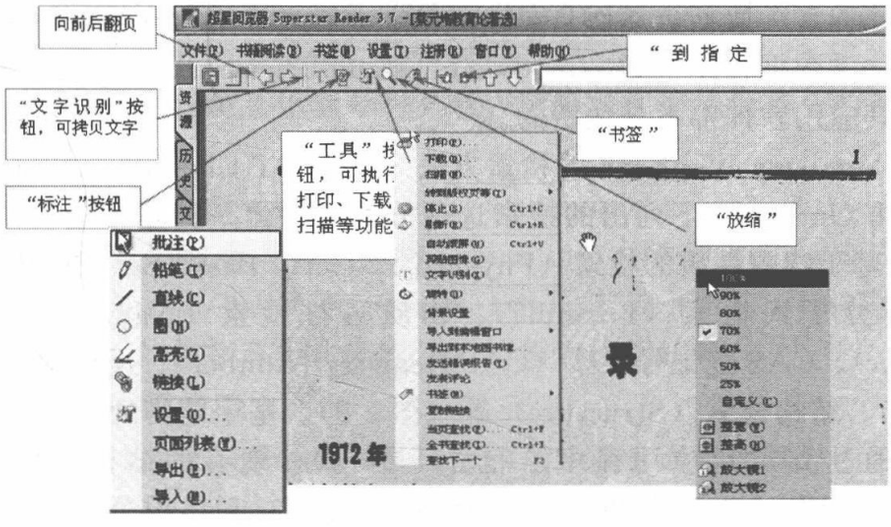


图 2-8　超星阅读器功能介绍

需要说明的是，使用阅读器阅读或下载后阅读，需先下载“超星阅读器”，该页面提供免费下载超星阅读器软件。

(2) 超星阅读器的功能　超星阅读器有多种功能（图 2-8），如：可以文字识别(OCR)、剪切图像、添加并管理网页（书籍）书签；可以自动滚屏、更换阅读底色；也可以在阅读图书时对需要重点标示的内容做标记（或批注），并能导出导入。

2.6 国际知名在线图书手册

在计算机网络发达的今天，在线检索各种图书手册以获取所需要的化学化工信息已非常方便，而且在线检索比印刷版图书检索表现出无可比拟的优势。

2.6.1 免费的 NIST 化学网络手册

NIST 是美国国家标准与技术研究院（National Institute of Standards and Technology）的简称。涉及化学学科的是化学科学与技术实验室（CSTL，Chemical Science and Technology Laboratory），它为化工制造、能源、保健、生物技术、食品加工和材料加工等方面的测试及全球市场竞争的需要提供技术和服务。NIST 的 Internet 服务站点上具有非常丰富而有价值的资源，读者可以从它的化学学科-产品与服务-数据库（Subjects-Chemistry-Products/Services-Databases）进入免费的在线标准参考数据库（Standard Reference Data），该页面左侧相关链接栏就有网络化学手册（Chemistry WebBook）。

(1) NIST Chemistry WebBook（NIST 化学网络手册，webbook. nist. gov/chemistry）是在标准参考数据项目（The Standard Reference Data Program）（www. nist. gov/ts/msd/srd）下由 NIST 编辑和发布的系列数据库中的一部分。提供的主要参考数据：①5000 多个有机和小的无机化合物的热化学数据（Thermochemistry Data）。②8000 多个反应的反应热化学数据（Reaction Thermochemistry Data），包括反应焓、反应自由能。③7500 多个化合物的光谱数据。④10000 多个化合物的质谱数据。⑤400 多个化合物的紫外/可见光谱(UV/Vis) 数据。⑥3000 多个化合物的电子和振动光谱数据（Vibrational and Electronic Spectra）。⑦600 多个化合物光谱数据的双原子分子常数（Constants of Diatomic Molecules）。⑧14000 多个化合物的离子能量数据（Ion Energetics Data）。⑨16 种流体的热物理数据。

以上这些数据，可以通过多种方法进行检索，该手册指南（A Guide to the NIST Chemistry WebBook)(webbook. nist. gov/chemistry/guide/）提供了详细的介绍和说明。此外，还有许多重要的参考数据被 NIST 安排在化学手册之外进行介绍，如化学与晶体结构数据、热力学和热化学数据程序（Thermodynamics and Thermochemistry Data Program）等，但这些数据库及其应用软件都不是免费的。

(2) NIST Chemistry WebBook 的检索方法　在 NIST Chemistry WebBook 的主页界面搜索选项（Search Options）下列出的搜索选项分为两种：一种是普通检索（General Searches）；另一种是基于物理性质的检索（Physical Property Based Searches）。

普通搜索有分子式检索（Formula）、物质名称检索（Name）、IUPAC 编号检索(IUPAC identifier)、CAS 登记号检索（CAS Registry Number）、反应检索（Reaction）、作者检索（Author）、结构检索（Structure）等（图 2-9）。基于结构的搜索有 3 种方法可以选择：Java 方式（通过 Java 小应用程序绘制分子结构）、现有的结构文件（将制作好的以 MDL 的 MOL 格式保存的分子结构文件作为结构查询式）和结构分类方式（选择结构的类别进行搜索，如选择结构属性和包含的基团）。

基于物理性质的搜索（Physical Property Based Searches）主要有离子能量搜索（Ion Energetics Properties）、振动及电子能级搜索（Vibrational and Electronic Energies）、分子量搜索（Molecular Weight）等。

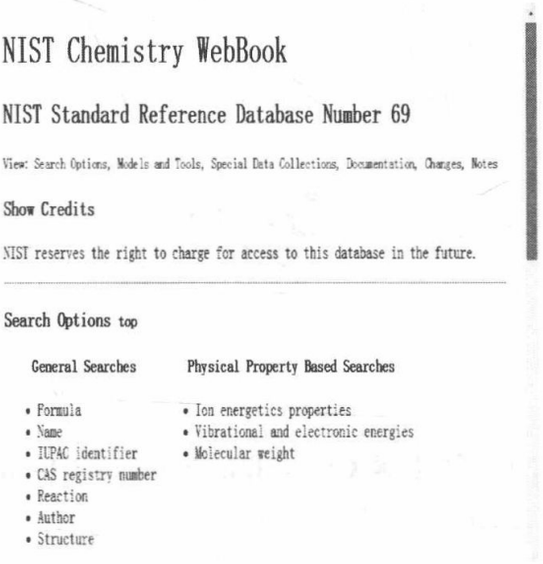


图 2-9　NIST Chemistry WebBook 的检索页面

（3）NIST Chemistry WebBook 搜索结果的显示　当选择显示的结果信息较多时，搜索结果页面会很长。例如：我们在分子式搜索方式中，使用分子式为 C_2H_6O 为查询式，得到的结果有 11 个，包括乙醇（Ethanol）、二甲醚（Dimethyl Ether）及各种氘代乙醇和氘代二甲醚。若要得到乙醇的详细资料，点击 Ethanol 超链接，即可显示详细的有关乙醇的资料。搜索结果页面最前端的内容是匹配结果的一般信息（General Information），这些信息是物质名称、分子量、CAS 登记号、结构图（2D 和 3D）的 MOL 格式文件，点击超链接后可独立显示。

2.6.2　Reaxys 数据库

Reaxys 数据库（www. info. reaxys. com；info. reaxys. com）是原来 CrossFire Database 的革新版。Reaxys 数据库是一个基于桌面的大型的功能强大的化学信息数据库，由 Elsevier 公司出版，它将原来 CrossFire 数据库的三个子库 CrossFire Beilstein、CrossFire Gmelin 和 Patent Chemistry Database（www. info. patentchemistrydatabase. com）整合在一起，通过同一界面进行检索（图 2-10）。

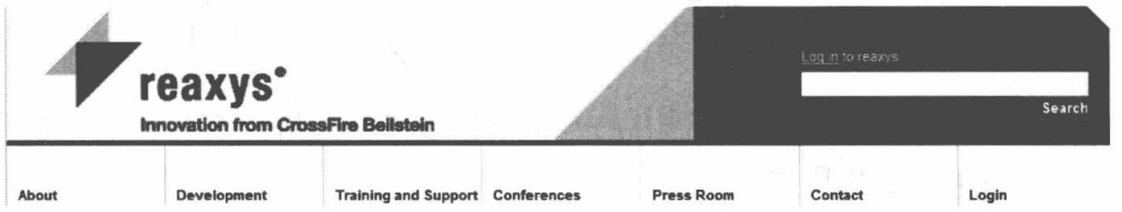


图 2-10　Reaxys 检索界面

Reaxys 数据库内容主要取之于原印刷版的《Beilstein 有机化学手册》和《Gamelin 无机化学手册》，除了支持化学结构式、子结构式、化学反应式检索外，还支持立体结构式、化合物的事实数据、文本关键词等检索，检索时间范围可追溯至 1772 年，是目前世界上有机化学、无机与金属有机化合物及化学专利文献方面资料搜集最为齐全的工具书，是化学家的重要参考源。

Indiana 大学的 CCIIM（www. indiana. edu/～cheminfo/cciim33. html）提供了 Beilstein 印刷型手册及数据库的使用教程及学习资源。Stanford 大学的 Beilstein Dictionary（www-sul. stanford. edu/depts/swain/beilstein/bedict1. html）提供了 Beilstein 手册使用中有关术语可供读者查阅和参考，如包括有机化学术语的英语和德语解释。

2.6.3　Organic Syntheses 网络版

自 1921 年始，《Organic Syntheses（有机合成）》就为读者提供仔细、可靠并经仔细核对的有机化合物的合成方法，有些方法针对特殊化合物的制备，有些则具有普适性。每一方法都比期刊所述更详尽，而且每一个反应和所有表征数据都由一位本书编委会成员在其实验

室进行仔细的核对以考察该方法的重复性。《有机合成》所述方法都可以从期刊的单卷目录查找，也可以在数据库中导入结构或关键词查找。目前，Organic Syntheses（有机合成）出现了网络版（www. orgsyn. org）（图 2-11）。

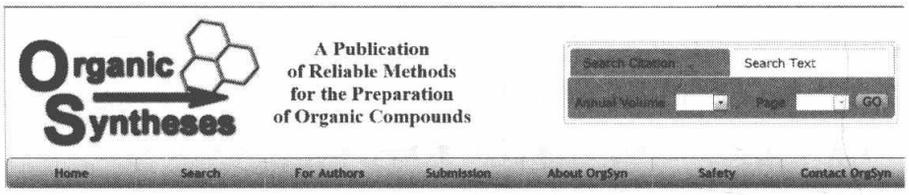


图 2-11 Organic Syntheses 网络版页面（局部）

2.6.4 网络版 CRC Handbook of Chemistry and Physics

CRC Handbook of Chemistry and Physics（www. hbcpnetbase. com） CRC 化学与物理手册网络版，也是第 90 版，可以为订购用户提供在线检索，有文本检索、结构检索和性质检索三种方式。

2.7 出版社与网上书店

2.7.1 出版社

目前，国内外大型出版社都建有自己的网页，为读者提供了图书目录或书目导航，而且大多出版社单独建有网上图书馆，提供图书检索、网上购买服务，读者可以看到图书简介和目录。显然网络是获取最新图书资讯和购买图书的捷径。

（1）化学工业出版社（cip. com. cn） 出版科技图书、辞书、教材、电子出版物及专业期刊。现已发展成为专业特色突出、品牌优势明显、图书市场覆盖面较宽、有较高知名度和信誉度的中央级综合科技出版社。在化学化工、材料、环境等专业图书领域零售市场的占有率长期保持第一。

（2）科学出版社（www. sciencep. com） 是全国最大的综合性科技出版机构，以科学、技术、医学、教育为主要出版领域。

（3）高等教育出版社（www. hep. edu. cn；www. hep. com. cn） 是教育部直属的以出版高等教育、职业教育、成人及社会教育教学用书等教育类、专业类、科技类出版物为主的综合性大型出版社，在国内高等、职业教育教材领域的占有率处于行业首位。

（4）人民教育出版社（www. pep. com. cn）。

（5）Elsevier Science 出版公司（www. elsevier. nl）。

（6）John Wiley & Sons，Inc. 出版公司（www. wiley. com/WileyCDA/Section/id-350192. html）。

（7）Taylor & Francis 出版集团（www. tandfonline. com）。

（8）Begell House，Inc.（www. begellhouse. com）。

（9）美国化学会（American Chemical Society，ACS；pubs. acs. org）。

（10）英国皇家化学会（Royal Society of Chemistry，RSC；pubs. rsc. org）。

2.7.2 网上书店

随着 Internet 的发展，在 Internet 上销售图书是非常受欢迎的新兴服务方法。通过网上书店的浏览和检索也是了解图书出版情况的一种手段。

（1）亚马逊中文网站（www. amazon. cn） 有图书频道，可以搜索和网购。

(2) 当当网 (book. dangdang. com)。
(3) 希望网上书店 (www. hopebook. net)。
(4) 北京图书大厦网络书店 (www. bjbb. com. cn; www. bjbb. com)。
(5) 中国书网网上书店 (www. sinoshu. com)。
(6) 拓扑网 (www. toopoo. com)。
(7) 中国图书网网上书店 (www. bookschina. com)。
(8) 文轩网 (www. winxuan. com)。
(9) 白鹿书院 (www. oklink. net)
(10) 蔚蓝网络书店 (www. wl. cn)。
(11) 金桥书城 (book. jqcq. com)。
(12) 互动出版网 (www. china-pub. com)。
(13) CPL 出版社在线书店 (www. cplbookshop. com)。

2.8　化学化工类工具书简介

化学化工类工具书按学科可分为综合性工具书和专科工具书。综合性工具书是指涉及许多学科、较完整地汇集了各个知识门类的资料、概括人类科学技术研究成果的工具书。与专科性工具书相比，有如下特点：① 面向一般读者；② 收录范围广泛；③ 风格上兼顾学术性和通俗性；④ 采用简单、常见的结构组织内容，便于使用者掌握。化学化工综合性工具书包括：文摘、索引和书目；专用词典；百科全书等。专科工具书指按照化学、化工所属的各二级学科编著的工具书。

下面按照化学、化工和化学化工相关列出各学科重要的工具书。

2.8.1　化学类工具书

见表 2-2。

表 2-2　化学工具书简介

1	《化学词典》,常文保主编，科学出版社,2008
	收集了化学学科各分支学科的常用、基础和新名词共 8000 余条,提供了简明扼要的定义或解释
2	《化合物词典》,申泮文、王积涛主编,上海辞书出版社,2002
	收录词目约 6613 条,分上下两篇,上篇为无机化合物,下篇为有机化合物
3	《兰氏化学手册(第二版)》(Lange's Handbook of Chemistry)(原著第 15 版,1998), J. A. Dean、McGraw-Hill 著,魏俊发等译,科学出版社,2003
	一部资料齐全、数据翔实、使用方便,供化学及有关科学工作者使用的单卷式化学数据手册,分 11 部分:有机化学,通用数据、换算表和数学,无机化学,原子、基和化学键的性质,物理性质,热力学性质,光谱法,电解质、电动势和化学平衡,物理化学关系式,聚合物、橡胶、脂肪、油和蜡,实用实验室资料等
4	《Gmelin 无机和有机金属化学手册》(Gmelin Handbook of Inorganic and Organometallic Chemistry), 8th edition,原书名为《Gmelin 无机化学手册》
	是收集无机物资料最完全、系统、全面的手册。所涉及的范围还包括化学史、地球化学、矿物学、冶金学、分析化学、工艺学等领域,有大量的图表及物理化学数据,资料非常丰富
5	《有机合成常用试剂手册:制备与处理》,晁建平主编,化学工业出版社,2010
	按照有机合成单元反应类型介绍了 130 种常用有机合成试剂的适用范围、制备反应式、制备装置图、制备步骤、操作注释、试剂鉴别、试剂储存、制备装置的维护与保养等内容

续表

6	《溶剂手册(第五版)》,程能林编著,化学工业出版社,2015
	分总论与各论两大部分。总论共五章,概要地介绍了溶剂的概念、分类、各种性质、纯度与精制、安全使用、处理以及溶剂的综合利用。各论分十二章,按官能团分类介绍了995种溶剂,包括烃、卤代烃、醇、酚、醚、缩醛、酮、酸及酸酐、酯、含氮化合物溶剂、含硫化合物溶剂、多官能团溶剂以及无机溶剂。重点介绍每种溶剂的理化性质、溶剂性能、精制方法、用途及使用注意事项等
7	《实用天然产物手册》系列丛书,化学工业出版社,2004～2006
	本书第一批八分册,分别是:《生物碱》,杨秀伟主编,2005;《皂苷》,庚石山主编,2005;《萜类化合物》,杨峻山主编,2005;《苯丙素》,赵毅民主编,2005;《海洋天然产物》,林文翰主编,2006;《抗生素与微生物产生的生物活性物质》,张致平、姚天爵主编,2005;《矿物与岩石》,吴良士、白鸽、袁忠信编,2005;《天然色素》,项斌、高建荣主编,2004
8	《化学进展丛书》,国家自然科学基金委员会化学科学部组织编写,化学工业出版社,2005
	从不同视野阐述了化学科学及其分支学科的研究现状和进展,并对化学科学未来发展方向、前沿、趋势和挑战进行了展望。共10册:《化学生物学进展》,张礼和、王梅祥主编;《功能材料化学进展》,朱道本主编;《能源化学进展》,袁权主编;《结构材料化学进展》,韩志超主编;《化学学科进展》,张礼和主编;《环境化学进展》,戴树桂主编;《天然产物化学进展》,于德泉、吴毓林 主编;《海洋化学进展》,张正斌、刘莲生编著;《地球化学进展》,张本仁、傅家谟主编;《药物化学进展》,白东鲁、陈凯先主编
9	《分析化学手册(第三版)》系列丛书,化学工业出版社,2016
	第1分册:《基础知识与安全知识》,郭伟强主编;第2分册:《化学分析》,王敏主编;第3A分册:《原子光谱分析》,郑国经主编;第3B分册:《分子光谱分析》,柯以侃、董慧茹主编;第4分册:《电分析化学》,苏彬主编;第5分册:《气相色谱分析》,许国旺主编;第6分册:《液相色谱分析》,张玉奎主编;第7A分册:《氢-1核磁共振波谱分析》,秦海林、于德泉主编;第7B分册:《碳-13核磁共振波谱分析》,杨峻山、马国需主编;第8分册:《热分析与量热学》,刘振海、张洪林主编;第9A分册:《有机质谱分析》,陈焕文主编;第9B分册:《无机质谱分析》,赵墨田主编;第10分册:《化学计量学》,梁逸曾、吴海龙、俞汝勤主编
10	《萨德勒标准图集》(Sudtler Standard Spectra Collection),是美国费城萨德勒研究实验室(Sadtler Research Laboratories)连续出版的活页光谱图集。该图集收集的谱图数量庞大,品种繁多,是当今世界上相当完备的光谱文献
	萨德勒标准光谱按类型分集出版,主要有:标准红外棱镜光谱、标准红外光栅光谱、标准紫外光谱、标准核磁共振波谱、标准碳-13核磁共振波谱、标准红外蒸汽相光谱、考勃伦茨红外光谱、标准荧光光谱、标准拉曼光谱、红外高分辨定值定量光谱等。另外还出版了若干篇幅较小的专业性光谱,供工业和实验室使用,如:商业红外棱镜光谱、商业红外光栅光谱、商业碳-13核磁共振波谱、拉曼参考光谱、荧光参考光谱等。
11	《分子探针与检测试剂》,分析化学新方法新技术丛书,张华山、王红、赵媛媛编著,科学出版社,2002
	较全面系统地阐述分析化学及生物分析用的有机试剂、分子及离子荧光探针。内容包括 :光度分析中的有机显色剂、荧光试剂、发光试剂、超分子显色剂的作用原理及应用;离子荧光探针、分子荧光探针及其在生物活性物质的测定和生命科学研究中的应用,高效液相色谱和气相色谱中的衍生试剂及应用。
12	《化学百科全书》[Encyclopedia Of Chemistry (Science Encyclopedia)]; D. Rittner, R. A. Bailey; Facts on File Science Library;2005
	收录2000多条化学术语、人物传记、相关网址、化学软件简介、诺贝尔化学奖获得者、元素周期表、化学反应类型、金属及合金、化学与社会等内容
13	《Dekker纳米科学与纳米技术百科全书》(Dekker Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology),第二版,全套六卷,J. A. Schwarz等,Taylor & Francis,2008
	收录1～100nm范围原子、分子水平上的材料与表面科学、化学、生物医药、计算机技术、信息处理、机械、光学及电子工程的设计、技术、装置、工艺与应用等内容
14	《有机合成》(Organic Synthesis),1921年开始编著,John Wiely & Sons出版,到1998年已出至76卷,该书除单卷本外还出版合订本,1998年出版了第九合卷
	收录介绍具有一定代表性的不同类型化合物的合成途径及详细操作步骤,每种方法在发表前都要经过两个不同实验室的有机合成专家进行核对验证,所以比较可靠。不仅可以作为合成某一具体化合物的实际指导,还可作为合成某一类型化合物的参考样板,是从事有机合成最重要的参考书之一

续表

15	《Beilstein 有机化学手册使用指南》,王正烈,王元欣编著,化学工业出版社,2006
	《Beilstein 有机化学手册》是当前国际上最系统、最全面、最权威的介绍有机化合物的巨型手册,共计 566 册,是从事有机化学、化工、制药、染料、香料、农药和生化等专业的高等学校、科研院所和工厂实验室的教师、研究生、科研人员在教学和科研中必不可少的工具书 该使用指南介绍了此手册的出版情况、编排特点、使用方法及注意事项。同时书中还结合读者实际情况列举了大量实例,并专章介绍了 CrossFire Beilstein 数据库的使用方法和 Beilstein 手册的补充及勘误
16	《有机化学手册(原著第二版)》.[美] George W. Gokel 编,张书圣、温永红、丁彩凤等译,化学工业出版社,2006
	全书共 11 部分,内容覆盖有机化学的各个研究领域。主要内容包括有机化合物的命名原则,纯物质的物理性质,原子、自由基及键的性质,物理常数,热力学常数,化学平衡常数,光谱学数据,物理化学关系,实验操作和分析中的常用数据,聚合物、橡胶、脂肪、油和蜡等物理常数及结构
17	《重要有机化学反应及机理速查手册》,汪秋安编,中国纺织出版社,2007
	精选了 290 个(类)重要的有机化学反应,每个反应均给出了详尽的电子转移机理过程,同时给出反应的应用示例,并列出了相关的参考文献,有助于深入理解和应用某个(类)反应,提高读者对有机化学问题的分析和解决能力
18	《聚合物基复合材料手册》,陈祥宝主编,化学工业出版社,2004
	主要包括了聚合物基复合材料的性能表征与试验技术、性能数据和材料使用与设计分析等三大部分。手册详尽地给出纤维、树脂、预浸料和各种层压板的性能表征和相关的试验测试技术,收集并汇总了国内外 140 多种复合材料体系的性能数据,涵盖了航空航天、舰船、兵工以及民用等领域使用的各种复合材料。
19	《生物高分子》(Biopolymers)是约翰·威利父子出版公司控股的德国 VCH 推出的力作,由化学工业出版社邀请了十几位国内生物高分子领域有着丰富一线工作经验、专业英文水平高超且有撰写经验的学者主译。
	共 10 分册,全面综述和汇编了生物高分子的研究资料。分别是:《生物高分子(第 1 卷)　木质素、腐殖质和煤》,[芬]M.霍夫里特、[德]A. 斯泰因比歇尔主编,郭圣荣主译,2004;《生物高分子(第 2 卷)　类聚异戊二烯》,[日]古山种俊、[德]A. 斯泰因比歇尔主编,刘燕刚等主译,2004;《生物高分子(第 3a 卷)　聚酯Ⅰ——生物系统和生物工程法生产》,[日]土肥義治、[德]A. 斯泰因比歇尔主编,陈国强主译,2004;《生物高分子(第 3b 卷)　聚酯Ⅱ——特性和化学合成》,[日]土肥義治、[德]A. 斯泰因比歇尔主编,俞雄主译,2005;《生物高分子(第 4 卷)　聚酯Ⅲ——应用和商品》,[日]土肥義治、[德]A. 斯泰因比歇尔主编,陈国强主译,2004;《生物高分子(第 5 卷)　多糖Ⅰ——原核生物多糖》[比]E.J.旺达姆、[比]S.De 贝特斯、[德]A. 斯泰因比歇尔主编,陈代杰、金飞燕主译,2004;《生物高分子(第 6 卷)　多糖Ⅱ——真核生物多糖》[比]S.De 贝特斯、[比]E.J.旺达姆、[德]A. 斯泰因比歇尔主编,陈代杰、罗敏玉主译,2004;《生物高分子(第 7 卷)　聚酰胺和蛋白质材料Ⅰ》[美]S.R.法内斯托克、[德]A.斯泰因比歇尔主编,李荣秀主译.2005;《生物高分子(第 8 卷)　聚酰胺和蛋白质材料Ⅱ》[美]S.R. 法内斯托克、[德]A. 斯泰因比歇尔主编,邵正中、杨新林主译,2005;《生物高分子(第 9 卷)生物高分子的多样性与合成高分子的生物可降解性》,[日]松村秀一、[德]A. 斯泰因比歇尔主编,朱春宝主译,2005;《生物高分子(第 10 卷)　总论与功能应用》,[德]A. 斯泰因比歇尔主编,陈学思、景遐斌、庄秀丽主译,2005。
20	《高分子科学前沿与进展Ⅱ》,董建华主编,科学出版社,2009
	对高分子科学近期的前沿方向与进展进行了全方位的介绍,反映了高分子科学研究的主流和发展趋势。全书共分七篇,分别讨论高分子合成化学、高分子物理与高分子物理化学、光电功能高分子、生物高分子与医用高分子、超分子组装与超分子聚合物、高分子微/纳米结构以及综合等
21	《有机化学学科前沿与展望》,国家基金委化学部,科学出版社,2011 《分析化学学科前沿与展望》,国家基金委化学部,科学出版社,2012 《无机化学学科前沿与展望》,陈荣,高松主编,国家基金委化学部,科学出版社,2012 《化学生物学学科前沿与展望》,蒋华良,陈拥军,陈鹏、张礼和主编,科学出版社,2013 《环境化学学科前沿与展望》,王春霞,朱利中,江桂斌主编,科学出版社,2011 《高分子科学前沿与展望》,国家基金委化学部,董建华,张希,王利祥主编,科学出版社,2011

2.8.2　化工类工具书

见表 2-3。

表 2-3 化工工具书简介

1	《化工辞典(第五版)》,姚虎卿主编,化学工业出版社,2014
	第五版修订是以化学工程技术学科为核心,全面反映化工基础理论和技术的应用与发展,以及与化工相关专业交叉的技术。重点增加了化学工程及其各单元过程、煤化工、石油和天然气化工、高分子化工、海洋化工、生物化工以及物理化学基本理论和应用等方面的词条;特别增设可供研究开发参考的单元过程耦合、换热和热回收网络、过程优化以及化学工程方法放大等方面的词条;补充化工与其他学科相互交叉的新材料、环境保护、废弃物循环利用、新能源和能量有效利用等方面的词条;对助剂、溶剂、添加剂、农药、医药等精细化工产品以及社会经济生活的内容进行了应用方面的补充和修订。属于化学元素和化合物基本性质方面的词条,已由《化学辞典》收录,故在本次修订中删简
2	《现代化工词典》,黄仲涛主编,科学出版社,2004
	内容包括一般化学工业、无机化工、有机化工、高分子化工、精细化工、食品与轻化工、石油化工及新能源化工、新材料化工、生物化工、环境化工、绿色化工、纳米化学化工技术及化学工程学新发展两方面,书中对词目给出相应的英文术语,同时用中文对词目进行解释和说明
3	《实用化工辞典》,朱洪法主编,金盾出版社,2004
	收录 3600 余种常用化工原料及产品。所选词目包括无机化工、有机化工、石油化工、精细化工、合成树脂、合成橡胶、合成纤维、涂料、染料、颜料、原料药、农药、表面活性剂、日用化工、胶黏剂、造纸、皮革、化妆品及助剂等专业。每条词目按中文名、英文名、分子式、分子量、结构式、理化性质、主要用途、简要制法予以说明
4	《佩里化学工程师手册(第七版)》(上、下),[美]Robert H. perry,[美]Dor .W.Green,科学出版社,2001
	提供最新的覆盖从基础知识到计算机应用与控制的化学工程各方面的详细内容。包括有关行业的最新进展、成就和方法;有关工艺流程、设备、性能及原理;有关解决手头难题合适的计算方法以及表现在优化设计、应用技术及解决专业之外难题的方法。本版包含如下最新资料:冷凝器、重煮器、蒸发器及反应罐;多组分及强化蒸馏,包括共沸、抽提及反应方法;气体吸收板性能、设计及填充塔的数据;超临界流体及膜分离过程;生物化学分离过程;结构材料;工艺应用材料
5	《新编实用化学化工配方手册》,史江恒编,中国建材工业出版社,2004
	收选了目前最新并具有较强实用价值的精细化工产品配方共 3200 种,配方分日常生活用品、建筑行业化学用品、纺织行业化学用品、密封类用品、摄影用品、胶黏剂、金属加工工艺用品共七大类。每个配方都有详细配比、配制说明、主要性能和用途
6	《化学工程手册(第二版)》(上、下),时钧主编,化学工业出版社,2003
	一部介绍化学工程原理的实际运用和化学工程操作数据的经典性工具书。它提供简明的理论,实用的设计计算方法,丰富的设备性能数据和图表。本手册共分 29 篇,主要包括化工基础数、化工热力学、流体流动、流体输送、搅拌及混合、传热及传热设备、工业炉、制冷、蒸发、结晶、传质、气体吸收、蒸馏、气液传质设备、萃取及浸取、增湿、减湿及水冷却、干燥、吸附及离子交换、膜过程、颗粒及颗粒系统、流态化、液固分离气固分离、粉碎、分级及团聚、反应动力学及反应器、生物化工、过程系统工程、过程控制。预计第三版将于 2017 年出版
7	《化工产品手册(第五版)》,系列丛书,化学工业出版社,2008
	本手册是一套全面介绍化工产品的综合性工具书,包括 11 个分册,分别是:《化工产品手册——有机化工原料》,王延吉主编,选编了目前社会上使用的国产及部分进口有机化工原料产品 1069 种。《化工产品手册——无机化工原料》,王光建主编,主要介绍了无机化工原料约 770 个产品。《化工产品手册——精细有机化工产品》,赵晨阳主编,主要介绍了精细有机化工产品约 1000 个品种。《化工产品手册——精细无机化工产品》,赵晨阳主编,以精细无机化学品应用领域为主线索,共介绍了各类精细无机化学品 13 个系列约 800 个品种。《化工产品手册——树脂与塑料》,童忠良主编,共收集醇酸树脂、高吸水性树脂、导电塑料和磁性塑料等共计约 800 个产品。《化工产品手册——生物化工产品》,欧阳平凯编著,选编了国内已批量生产或部分在国内常被使用的国外产品,共计 1053 种。《化工产品手册——专用化学品》,李东光编著,本书从应用角度列举了办公文教、公共场所与家庭、食品、种植与养殖、汽车、建筑及工业领域应用的化工产品 1200 余种。《化工产品手册——涂料》,童忠良主编,主要介绍了国内外涂料行业工业化产品、中试产品共计 1443 个品种。《化工产品手册——颜料》,项斌编著,共收集无机颜料、偶氮类有机颜料、酞菁类有机颜料、杂环类有机颜料及蒽类、三芳甲烷类等有机颜料和荧光颜料等共近 500 个品种。《化工产品手册——橡塑助剂》,张林栋主编,较系统地介绍了高聚物合成、塑料、橡胶及以塑料和橡胶为基材的胶黏剂常用和新开发助剂 615 种。《化工产品手册——精细化工助剂》,朱领地主编,共收集精细化工助剂 770 余种。部分分册已出版第六版
8	《实用液体洗涤剂配方手册》,李东光主编,化学工业出版社,2010
	本书提供了 300 多种液体洗涤剂的配方及生产方法、用途和产品特性

续表

9	《精细有机化学品生产工艺手册》，何汉文、陈熙东编，化学工业出版社，2003
	本书收集了国内外精细有机化学品 1000 余种，包括产品的中、英文正名和别名，CA 登录号，分子式，分子量，性质，用途，制备工艺路线，操作等。书后附有中、英文索引。
10	《精细化工产品配方与生产工艺丛书》，中国石化出版社，2000～2001 《食品添加剂》，刘树兴，李宏梁编，2001；《化妆品》，董银卯编，2000；《皮革化学品》，杨建洲编，2001；《油田化学品》，王中华编，2001；《纺织化学品》，邓舜扬编，2001；《造纸化学品》，张光华编，2000；《粘合剂与密封材料》，邓舜扬编，2001
	本丛书系统介绍了各类化学品的性状、生产工艺和配方、产品质量标准和产品用途等
11	《橡胶原材料手册(第二版)》，于清溪主编，化学工业出版社，2007
	本书从橡胶加工和产品应用角度论述了橡胶工业用各种橡胶、弹性体、配合剂、各种纺织材料和金属骨架材料以及外用材料等，同时介绍了橡胶配合、加工、试验方法和用途
12	《塑料制品实用手册》，赵启辉主编，中国标准出版社，2008
	该书按产品类型分类，共分七章，包括塑料管材及管件、塑料薄膜、泡沫塑料、包装制品和编织制品、塑料型材、卷材和革制品、其他塑料制品等
13	《实用橡胶手册(第二版)》，吕百龄主编，化学工业出版社，2010
	本书是橡胶行业的大型工具书，系统介绍了橡胶、配合剂、骨架材料、基本工艺及设备、橡胶模型制品、模具设计及各种橡胶制品的结构、性能、制备工艺、配方和应用
14	《化学纤维手册》，沈新元主编，中国纺织出版社，2008
	关于化学纤维的综合性著作，全面介绍了化学纤维的基本知识，阐述了化学纤维的生产原理，重点介绍了粘胶、聚酰胺、聚酯、聚丙烯、聚丙烯腈、聚乙烯醇等化学纤维大品种的原料、生产工艺、性能、改性及应用，并对高性能纤维、功能纤维、智能纤维和生态纤维等化纤新产品进行了论述
15	《无机盐工业手册(第二版)》(上、下)，天津化工研究院等编，化学工业出版社，2003
	本手册讲述无机盐工业的生产原理、生产设备、生产原料、生产工艺和方法，介绍了 1200 种无机盐产品，其中包括：产品性质、用途、生产方法、主要制法、流程、技术经济指标及物化数据。手册之末还附有中文、英文、分子式索引；生产厂家产品和通讯录
16	《工程材料实用手册(第二版)》，系列丛书，中国标准出版社，2002
	《工程材料实用手册》共十册，选录了近年来我国研制的钛合金、先进复合材料等新型材料。还列入了各科研、生产单位等近年来测定的各种持久、蠕变等的大量数据，全书采用统一的编写格式
17	《材料化学工程进展》，金万勤、陆小华、徐南平主编，化学工业出版社，2007
	本书介绍了材料化学工程学科的产生、内涵及科学问题，重点介绍了我国在材料化学工程中的最新研究进展，展望了材料化学工程的发展趋势
18	《化工与新能源材料及应用》，张淑谦、童忠良编，化学工业出版社，2010
	围绕化工环境技术和可持续的能源问题，全面阐述了化工与新能源的发展、能源与社会进步、能源与环境、能源安全、纳米化工新能源材料产业化进展及应用等问题。重点介绍太阳能利用中纳米技术的应用，并突出发展生活垃圾和工业垃圾处理技术
19	《煤化工手册——中煤煤化工技术与工程》，徐耀武、徐振刚主编，化学工业出版社，2013
	本书汇集了中国中煤能源集团公司已有、在建及规划建设的煤化工项目所涉及的主要产品、核心技术和关键设备以及国内外新工程技术成果和典型示范项目
20	《化学工程学科前沿与展望》，孙宏伟，段雪主编，科学出版社，2012
21	《20 世纪中国知名科学家学术成就概览——化工、冶金与材料工程卷·化学工程与技术分册》，干勇主编，科学出版社，2015

2.8.3　化学化工相关工具书

见表 2-4。

表 2-4 化学化工相关工具书简介

1	《化学化工物性数据手册(增订版)》,由全国图算学培训中心、青岛科技大学组织编写,刘光启、马连湘、项曙光主编,化学工业出版社,2013
	分无机卷和有机卷。无机卷共分 17 章,内容包括水和水蒸气、无机气体、无机酸、金属单质及其氧化物、非金属单质及其氧化物、氢化物和氢氧化物、氰化物和氰酸盐、氮化物和硝酸盐、氟化物和氟酸盐、氯化物和氯酸盐、溴化物和溴酸盐、碘化物和碘酸盐、碳化物和碳酸盐、硫化物和硫酸盐、磷化物和磷酸盐、金属酸盐和其他无机物料。有机卷共分 16 章,内容包括有机酸和酸酐、有机盐和有机碱、烷烃、烯烃、炔烃、芳烃、醇类、酚类、醚类、酮类、醛和醌、酯类、胺类、腈类、油类和燃料及其他有机物料
2	《CRC 环境控制实用手册》(CRC Practical Handbook of Environmental Control),Conrad P. Straub,CRC Press Inc.,1989
	大部分资料源自 5 卷本"Handbook of Environmental Control"。分五部分:空气、水源和水质、废水、固体废物、研究机构
3	《水处理药剂及材料实用手册》,祁鲁梁等主编,中国石化出版社,2001
	收集了 300 余种水处理药剂及用于水处理的离子交换树脂、膜和活性炭等材料,涉及给水、排水、循环冷却水、锅炉用水、油田用水和民用建筑及生活消费用水等各种药剂及材料
4	《危险化学品安全技术全书(第二版)》,第一卷,张海峰主编,化学工业出版社,2008
	本书是一本有关危险化学品安全管理的技术全书,主要是为全面落实(安全生产法)、《危险化学品安全管理条例》等法律法规,根据国家标准《化学品安全技术说明书编写规定》(GB 16483)的格式和要求编写而成的。本书选录的 1008 种化学品,是目前我国生产、流通量大,最常用的化学品;也是列入我国的一些重要的危险化学品管理名录、目录或标准,危害性大的化学品。每种物质列 16 大项,分别为化学品标识、成分与组成信息、危险性概述、急救措施、消防措施、泄漏应急处理、操作处置与储存、接触控制与个体防护、理化特性、稳定性和反应性、毒理学资料、生态学资料、废弃处置、运输信息、法规信息和其他信息;大项下又列出若干小项目,共 70 余项。
5	《化学危险品法规与标准实用手册》,国家质量监督检验检疫总局监督司综合处编,计量出版社,2001
	收录了化学危险品的命名、管理、登记、认可及使用规定方面的法规文件及强制性标准、推荐性标准和行业标准
6	《环境化学毒物防治手册》,江泉观、纪云晶、常元勋主编,化学工业出版社,2004
	本手册是一本实用性和权威性强的综合工具书,涉及化学化工、毒理、中毒临床、流行病学、生态环境与保护、安全与劳动保护六大学科领域,收集了 62 大类 950 余个化学物
7	《环境有害化学品实用手册》,王道等编,中国环境科学出版社,2007
	建立了 257 种化学品的环境档案。对每种化学品的中文名称、英文名称、别名、CAS 登记号、理化性质、应用情况、接触途径、毒理学资料、国际组织和各国控制指标、中国现有控制指标以及中国现有的标准检测方法进行了详细的介绍
8	《中国学科发展战略·材料科学》,中国科学院编,科学出版社,2013
	含石墨烯、准晶、光电功能材料、钢铁工业发展、核电材料、材料基因组工程、超构材料、材料组织结构研究八个专题,详细分析了材料科学各领域的发展现状和态势,以及我国材料科学各分支学科的未来发展战略
9	《化学物质环境风险评价原理、方法与实践》,王德高、王莹编,科学出版社,2015

2.9 免费图书的检索与全文下载

2.9.1 免费下载国外电子版图书的网站

一些网站,可以直接下载 PDF 电子书,部分网站可以在线阅读,典型网站如下。

(1) Bookfi (http://en.bookfi.org/) 完全免费的电子书图书馆(图 2-12),提供了 200 多万图书的电子版,大部分是国际大型出版社印刷版图书。类似网站还有:Booksee.org (http://en.booksee.org);BookZZ (http://bookzz.org/);BookSC (http://booksc.org)。这些网站还可以检索到大量期刊论文全文。

(2) Library Genesis (http://gen.lib.rus.ec/) 提供了大量可免费下载的图书(图 2-13)。类似网站还有:http://libgen.org/;http://www.sci-hub.org/;http://

noads. libgen. info/；http：//lib. freescienceengineering. org/等。

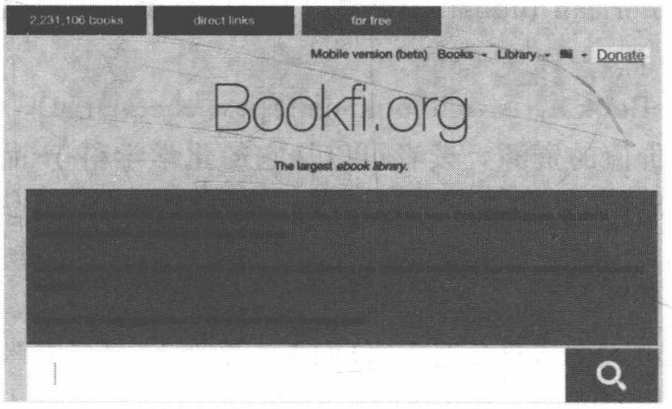


图 2-12　Bookfi 检索图书的界面

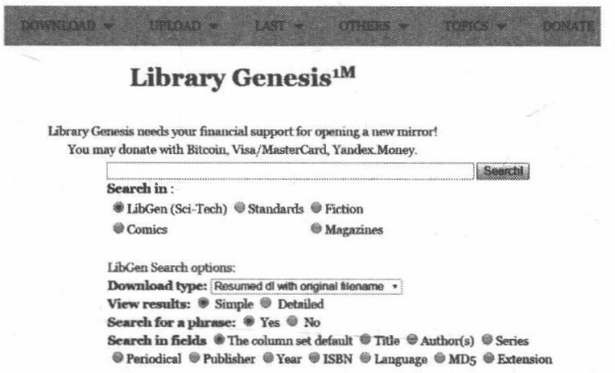


图 2-13　Library Genesis 检索图书的界面

(3) 世界数字图书馆（WDL）(www. wdl. org/zh/)　WDL 在互联网上以多语种形式免费提供源于世界各地各文化的重要原始材料。

(4) findpdfdoc (www. findpdfdoc. com)　免费搜索与下载 PDF、doc、PPT 类型文档。

(5) Freebookcentre. net (www. freebookcentre. net/)　包含数千种免费在线技术类图书供免费下载或在线浏览，图书类型包括计算机科学、医学等相关学科。

还有些网站，能搜索各类图书，如：PDF search engine (pdfgive. net)；eBook Search (www. ebookse. com)；Free pdf ebooks (freepdfbookdownload. com)；Free PDF Books (www. pdfsearchengine. info)；Download free ebooks (www. pdf-book-search. com)；PDF-HUNT (www. pdfhunt. com)；ebook-search-engine (www. ebook-search-engine. net)；openpdf (openpdf. info)；ebookvilla (www. ebookvilla. com)；ebook-engine (www. ebook-engine. com)。

2.9.2　免费下载国内电子版图书的网站

国内一些网站可以下载免费 pdf 电子书，部分需要下载安装专用阅读器，典型网站如下：

(1) 科学文库 (http：//reading. sciencepress. cn/) 是由中国科技出版传媒股份有限公司（科学出版社）创办。其内容最早可追溯至 1951 年，将图书馆下架的珍贵历史文献再现于读者眼前，涵盖了所有学科，其中收录了众多院士的著作，代表了国内最高学术水平。

(2) 还有一些网站也可免费下载电子图书，但化学化工类图书较少，如：E 书吧 (www. eshuba. com)；EBOOKEE (www. ebookee. net)。

2.9.3　免费网络百科全书和手册

(1) 百度百科 (baike. baidu. com)　是一部内容开放、自由的、全球最大的中文网络百科全书。

(2) Wikipedia (www. wikipedia. org)　维基百科是一个自由、免费、内容开放的网上互动式百科全书。汇聚了 255 种语言的百科知识版本，总词条数目突破 1000 万个，其中，英文版最丰富。

(3) Encyclopedia (www. encyclopedia. com)　可以检索 100 多部百科全书和辞典，检索内容包括人物简介、事实、定义、词汇、字源、缩略语、论文、图片、视频等在线信息。

(4) Encyclopedia Britannica (www. britannica. com)　是原来著名的印刷版《大不列颠大百科全书》的网络化服务。其中包含较大量的化学化工信息，并可以进行关键词搜索。

(5) Online Encyclopedia (encyclopedia. jrank. org)　在线百科全书，可免费访问和检

索大英百科全书第十一版的4000余篇文章；另外该网站还给出了科学百科（Encyclopedia of Science）、美国工业百科（Encyclopedia of American Industries）等12个百科全书的链接网址，可登录相关网站进行百科知识检索。

（6）NIST化学网络手册（Chemistry WebBook）（webbook. nist. gov/chemistry）NIST的Internet服务站点上具有非常丰富而有价值的资源，读者可以从它的化学学科-产品与服务-数据库（Subjects-Chemistry- Products/Services-Databases）进入免费的在线标准参考数据库（Standard Reference Data），该网站还提供了网络化学手册（Chemistry WebBook）。

（7）Dekker Encyclopedia of Nanoscience and nanotechnology（Dekker纳米科学与纳米技术百科全书网络版）（www. tandfonline. com/doi/book/10. 1081/E-ENN）。可以直接输入检索词检索或按检索词的首字母浏览，能免费看到文章的摘要，订购用户可浏览全文。

（8）物竞化学品数据库（www. basechem. org）收录基础化学品5万多种，标准品及标准物质2000多种，检测试剂盒500多种，收集了化学品基础信息、国际编码体系、物性、毒理学、生态学、分子结构、计算化学、化学特性、制备合成、应用、表征图谱、安全等方面的数据，是目前国内综合性最强、最全面的化学品数据平台。该数据库采用全中文化服务，方便国内从事化学、化工、材料、生物、环境等化学相关行业的工作人员查询使用。目前已经开发了手机APP。

练 习 题

1. 教科书、科技著作、参考工具书各专注于哪类知识？有什么特点？
2. 学术著作包括哪几种类型？
3. 我们从教科书、科技著作、参考工具书中，可获取哪些信息？
4. 举例说明可检索有机化合物制备和物性的重要工具书及网络检索平台。
5. 举例说明可检索无机和金属有机化合物制备和物性的工具书和检索平台。
6. 试列出三个国内化学化工图书出版商的名称和网址。
7. 列出三个可查阅化学化工图书的国内数字图书馆的名称和网址。

实践练习题

1. 试下载安装超星阅读器软件并下载一本免费电子图书阅读。
2. 检索《有机化合物制备手册》一书的电子版，并下载免费的PDF版本。
3. 通过百科类图书或网站，检索“汽车尾气”的组成与危害。
4. 练习在NIST网站查找化合物“苯酚”的生成焓、热容、相变热等物理化学数据。
5. 试在免费的电子书网站查找并下载一本关于“纳米材料”的英文专著。

第 3 章　期刊论文检索与全文下载

导　语

科技期刊论文属于一次文献，是科学交流的一种重要工具，也是科研工作者获取科技信息的重要渠道之一。通过阅读科技论文，我们可以获得当前研究的最新进展，以及具体方法与理化参数。目前，检索中文期刊论文的工具是《CNKI》，检索国际高水平期刊论文的工具是《Web of Knowledge》。另外，还有一些免费获得期刊论文的途径。

关键词

期刊论文；论文检索；全文下载。

期刊又称杂志（Periodical，Journal，Magazine），是指具有固定刊名、刊期、年卷（或年月），顺序编号，印刷成册的连续出版物。科技期刊则是以报道科学技术为主要内容的连续出版物。其主要特征有：连续性、时效性、创新性、渗透性等。据统计，目前全世界约有科技期刊 13 万种，每年发表的论文有 500 多万篇。

科技期刊论文是在科技期刊上发表的用于交流（或公开）的书面（或电子版）文件，是在科学技术某一领域新成果的科学记录，或对某一类知识的创新见解（或新进展）的科学总结。

科技期刊论文是文献检索的最终目标之一。许多新的成果、新的观点、新的方法往往首先在期刊上刊登。需要检索的内容，最终都要通过查阅科技期刊获得。在可利用的全部科技情报中，70％左右由科技期刊提供。因此，在科学交流中，科技期刊是特别重要的工具。

3.1　科技期刊的类型

科技期刊往往有年、卷（期）、页的标志，如：J. Am. Chem. Soc.，2005，127（45）：

159。科技期刊可按期刊内容、出版周期、载体形式、出版方式等多种发行方式分类。表 3-1为科技期刊不同分类。其中，学术期刊（Academic Journal）是一种经过同行评审的期刊。发表在学术期刊上的文章通常涉及特定的学科，学术期刊展示了研究领域的成果，并起到了公示的作用，其内容主要以原创研究、综述文章、书评等形式的文章为主。电子期刊包括机读型期刊、网络期刊等。目前，越来越多的科技期刊已经有网络版。

表 3-1 科技期刊的主要类型

分类方式	按期刊内容分类	按文章写作方式分类	按载体形式分类	按出版周期分类	
主要类型	综合性期刊 学术性期刊 技术性期刊 检索性期刊 科普性期刊	著作类期刊 译文类期刊 文摘类期刊	印刷型期刊 缩微型期刊 电子期刊	定期期刊	周刊(Weekly)、双周刊(Biweekly) 月刊(Monthly)、双月刊(Bimonthly) 季刊(Quarterly) 半年刊(Biquarterly)、年刊(Annually)
				不定期期刊	有少数一年出版 5 期、20 期的期刊

3.1.1 传统印刷型科技期刊的主要种类

（1）原始论文期刊（Primary Journal） 刊载原始研究成果的期刊，主要发表研究论文，属于一次文献。如：Journal of American Chemical Society、高等学校化学学报等。

（2）快报、简报类期刊（Letters and Communications） 为了使有关最紧迫问题和新开拓领域的研究论文迅速与读者见面，而出版的“快报”和“简报”之类的期刊。如：Analytical Letters、Chemical Physics Letters、Chemistry Letters、Chinese Chemical Letters、Tetrahedron Letters 等。也有些原始论文期刊增设“简报”、“快报”或“快讯”专栏（Letters，Notes and Communications）。

（3）文摘和检索性期刊（Abstracting and Indexing Journal） 用来报道、累积和查找文献线索的工具，包括文摘、题录、索引和目录等，是在原始文献的基础上编辑出版的二次文献。利用文摘和检索性期刊，既可以检索新的信息，也可以进行回溯检索。如美国《化学文摘》(CA)、我国《全国报刊索引》(科学技术版）等。

（4）综论性期刊（Review Journal） 专门刊载综述（或述评）性文章的期刊。它是针对某一学科、专业或课题，收集某一特定时期内有关的原始文献再加以分析、综合和浓缩，评论其成就和进展，并提出评价和建议，属于二次文献。阅读综述论文，可以花较少的时间和精力了解有关学科领域的近期进展情况，从引用的参考文献可查到所需的原始文献。如：Chemical Reviews、Chemical Society Reviews、Annual Reports on the Progress of Chemistry、化学进展、化工进展等。此外，有些原始论文期刊上也刊载学术水平很高的综论性文章。

（5）新闻性期刊（News Journal） 主要报道有关工业、金融及商业方面的技术新闻和经济新闻，包括技术动态、生产管理、新产品、新技术以及商品价格、市场销售等。阅读这类期刊可以实时了解和掌握相关的技术经济动态。具有代表性的新闻性期刊如：Chemistry and Industry、Chemical Week、Chemical & Engineering News、European Chemical News、科学时报等。

3.1.2 电子期刊与网络电子期刊

电子期刊（Electronic Journal），是指连续出版并通过电子媒体发行的期刊。经过数十年的发展，电子期刊已从最初的软盘期刊、CD-ROM 期刊，发展到网络化电子期刊。

电子期刊有如下优点：① 传递迅速，获取信息快；② 表现形式多样化；③ 检索方便，可操作性强；④ 真正实现资源共享。此外，电子期刊还具有成本低廉、出版周期短、更新

及时等特点。电子期刊的诸多优点及其迅速发展，特别是一次文献信息检索范围的广泛性和文献资源的深入性，使得科技人员对信息资源的吸收和利用尤为方便。

网络电子期刊，是指从投稿、编辑出版、发行、订购、阅读乃至读者意见反馈的全过程都是在网络环境中进行的，任何阶段都不需要用纸。网络电子期刊是目前最重要的信息源，也是最有发展前景的电子期刊。愈来愈多的传统印刷版期刊都开始在网络上进行投稿、审稿与出版发行，发行期刊网络版（Network Version）。

3.1.3　高水平期刊的评判与高质量论文的筛选

目前，全世界的科技期刊有 10 余万种，每年发表的论文约数百万篇，论文质量也参差不齐。因此而造成检索某一主题时文献的筛选和甄别困难。那么，如何评判期刊的水平和筛选高质量论文呢？

目前，国际上常用 SCI 影响因子（Impact Factor，IF）区分期刊的水平。期刊的 IF 越高，其刊载的论文水平越高。读者可以根据不同学科（分区）和影响因子，选择该学科高水平论文。国内外重要的化学化工类期刊见本章 3.6，IF 相关知识参见第 5 章。

近年来，谷歌推出的学术指标（Google Scholar Metric），开始冲击影响因子（IF）的地位。谷歌学术指标为 h5 指数（h5-index），即指某一期刊在过去 5 年间发表的 h 篇文章每篇至少都被引用过 N 次，这里 N 就是 h5 指数。例如：排名最高的 Nature，在 2010 年至 2014 年 h5 因子为 377，表明这一期间 Nature 共有 377 篇文章引用数不低于 377 次。和影响因子相比，谷歌学术指标有其优越性，可显示出版物综合整体实力，而不会像 IF 那样很容易受一篇高引用文章所扭曲。Google Scholar 另一个优点是可免费检索。

一般情况下，发表在高水平期刊上的论文质量较高，因为 IF 越高的期刊，其投稿率就越高，审稿越严格。也有一些论文虽然发表在 IF 较低的期刊上，但是如果受到广泛关注（高引用率），证明其质量也高。

3.2　科技期刊论文所承载的信息

从第 2 章中可知，从教科书中，我们可以获得相关学科基础而系统的知识，这是开展科学研究的基石。从学术专著中，我们可以了解某一知识领域所获得的新（前沿）的学术研究成果。从参考工具书中，我们可以获得可靠、系统完整的理化参数。但是，这些内容一般是一年（甚至很早）以前的研究成果，如果要获得最新且可靠的研究进展，需要从期刊论文、专利文献中获得。

从研究论文（包括原始研究论文、快报）中，我们可以获得最新的原始研究成果。

从综述论文（述评论文）中，我们可以获得近期最新研究成果的总结，虽然此类总结的系统性没有学术专著强，但很前沿。

3.2.1　研究论文的阅读与利用

首先，应该了解研究论文的框架结构。科技论文包括“前置”和“主体”两大部分，例如：实验性研究论文组成结构如表 3-2 所示。其中，前置部分包括题名（或副题名）、作者名、作者单位、地址、邮政编码、摘要、关键词、中图分类号；作者简历：出生年月、性别、学位、职称等。主体部分包括引言、正文（包括图、表）、结论（或讨论）、致谢（选择项）、参考文献等。

其次，对于不同阶段或水平的读者，所关注研究论文的侧重点不同。例如：对于新手，只关注标题、前言与结论即可，也可以从摘要中获得所需信息。对于正在该领域进行科学研究（实验）的研究生或科研人员，就需要关注实验部分、结果讨论等更加详细的信息。对于

准备撰写研究论文的人员，不但要关注上述内容，还要学习其表达方式、绘图方式、文献著录格式等。

表 3-2 实验性研究论文组成结构实例

组成结构	实例[科学通报，2011，56(17)：1360-1366]
论文标题	白蛋白锌卟啉结合体光解水产氢性能
作者	朱永峰，何玉凤，王荣民[1]，李岩，宋鹏飞
单位，地址	西北师范大学化学化工学院，兰州 730070 [1] 联系人，E-mail：wangrm@nwnu.edu.cn
注释 致谢	2010-11-01 收稿，2011-01-14 接受；国家自然科学基金(20964002)资助项目
摘要	将难溶性的锌卟啉(ZnTpHPP)与牛血清白蛋白(BSA)结合，制得一类新型水溶性生物高分子金属卟啉配合物(BSA-ZnTpHPP)。通过紫外可见光谱……对 BSA- ZnTpHPP 的结构进行了表征，发现二者以配位键结合……考察了 BSA-ZnTpHPP 的光敏感性，发现 BSA-ZnTpHPP 在光照条件下易变成三重激发态，可以将电子转移给甲基紫精(MV^{2+})。以三乙醇胺为电子供体，甲基紫精为电子中继体，考察了 BSA-ZnTpHPP 的光诱导水解产氢性能，结果表明，这类水溶性生物高分子金属卟啉光敏剂具有良好的光解水产氢性能
关键词	生物高分子光敏剂，金属卟啉，白蛋白，电子转移反应，产氢
前言	能源和环境是困扰当今及未来人类发展的关键问题，传统的化石能源不可再生，同时对环境造成很大的污染。在新型能源中，氢能[1]因具有无污染、碳的零排放、可再生等特点，被普遍认为是一种最有吸引力的替代能源[2]。在诸多制氢方法中，以太阳光为能源的光解水产氢体系是一种能量消耗较少，成本较低且无碳排放的高效产氢技术[3-5]。在此体系中光敏剂的选择至关重要。典型的光敏剂有金属络合物与半导体材料两大类。……金属卟啉也是一种优良的光敏剂[13]，……. 在模拟生物电子转移反应的光解水产氢体系中，金属卟啉作为光敏剂表现出优异的性能。然而，在水相中进行的光诱导电子转移反应体系，使用的金属卟啉光敏剂需要在水中可溶。而大部分人工合成的金属卟啉难溶于水，将其应用于光解水产氢体系中需要有机溶剂或采用胶束，使得金属卟啉在电子转移反应中的应用受到很大限制 来源相对丰富且稳定性良好的水溶性白蛋白常被用作天然高分子载体，其内部空腔可以与许多化合物结合[21]。将金属卟啉分子与白蛋白结合后，所得白蛋白金属卟啉结合体在水中有较好的溶解性[22]，从而在水溶液中金属卟啉能更好地发挥其功能特性[23]。本文将合成的水难溶性金属卟啉，即中位-四(4-羟基苯基)卟啉锌配合物(ZnTpHPP)与水溶性牛血清白蛋白(BSA)结合，制得了一类新型的水溶性生物高分子光敏剂，并将其应用于光解水产氢体系
实验部分 仪器和试剂 制备与性能 测试方法	1 实验部分 1.1 试剂与仪器 牛血清白蛋白(BSA，M_w=67000，上海伯奥生物科技有限公司，AR)；吡咯(国药集团化学试剂有限公司，使用前新蒸)；…… 透析膜(MWCO：3500，三光纯叶株式会社)使用前需处理；Agilent 8453 型紫外-可见分光光度计；…… 1.2 锌卟啉配合物的合成 中位-四(4-羟基苯基)卟啉配体(H_2TpHPP)按文献方法[23]合成 1.3 BSA-ZnTpHPP 的制备 分别配制 BSA/PBS 与 ZnTpHPP/EtOH 溶液。在结合瓶中制备牛血清白蛋白与锌卟啉的结合体，即在 1mL ZnTpHPP/EtOH 溶液中加入一定量的 BSA/PBS 溶液，使 ZnTpHPP 与 BSA 的分子数比例为 5∶1，避光条件下……，可分别得到锌卟啉/牛血清白蛋白结合比例不同的 BSA-锌卟啉结合体(BSA∶ZnTpHPP=1，3，10) …… 1.5 BSA-ZnTpHPP 的光解水产氢性能 (1)BSA-ZnTpHPP 的光敏性 以 TEOA 为还原剂，BSA-ZnTpHPP 为光敏剂，采用荧光法考察甲基紫精(MV^{2+})对 BSA-ZnTpHPP 的……电子转移情况 (2)BSA-ZnTpHPP 光解水产氢性能 以 BSA- ZnTpHPP 为光敏剂……，用 450W 高压汞灯作为光源，每间隔一定时间，用气体进样器抽取反应器中的气体，并进行气相色谱分析，测定 H_2 的含量

续表

结果和讨论	2.1　BSA-ZnTpHPP 的表征 首先考察了 ZnTpHPP 结合量对 BSA-ZnTpHPP 结合体溶解性的影响。即将不同配比的 ZnTpHPP 与 BSA 结合，……其中，锌卟啉与 BSA 以低比例结合时(BSA：ZnTpHPP＝1，3)较为稳定，能室温静置(避光)较长时间。其次，分别用 UV-Vis、CD、Native-PAGE 考察了 ZnTpHPP 与 BSA 的结合方式 (1)紫外可见光谱(UV-Vis)…… (2)圆二色谱…… (3)非变性聚丙烯酰胺凝胶电泳…… 2.2　BSA-ZnTpHPP 的光解水产氢性能 ……
结论	将易合成但难溶于水的锌卟啉(ZnTpHPP)与生物高分子 BSA 结合，制得了一类新的水溶性生物高分子光敏剂。白蛋白结合少量锌卟啉不会改变蛋白的二级结构、水溶性与稳定性；这类生物高分子金属卟啉光敏剂具有良好的光解水产氢性能，在光照 5h 后体系产氢率达到 1.73 mL H_2/L，光敏剂转化数达到 7.7。研究结果为太阳能的利用提供了新型的水溶性光敏剂，从而拓宽了光敏剂的选择范围
参考文献	[1]　Navarro R M, Pena M A, Fierro J L G. Hydrogen production reactions from carbon feedstocks: fossil fuels and biomass. Chem Rev, 2007, 107: 3952-3991 [23]　Wang R M, Song J F, He Y F, et al. Conjugation of chitooligosaccharide -5-fluorouracil with bovine serum albumin . Chin Chem Lett, 2006, 17: 1495-1498 [24]　王荣民，朱永峰，何玉凤，等．金属卟啉蛋白质结合体的结构与功能．化学进展，2010，22：1952-1963 ……
Title Authors Address	Albumin/zinc porphyrin conjugates for photosensitized reduction of water to hydrogen Zhu Yongfeng, He Yufeng, Wang Rongmin*, Li Yan, Song Pengfei College of Chemistry and Chemical Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China
Abstract	Abstract　A novel water soluble biopolymer metalloporphyrin complex (BSA-ZnTpHPP) was prepared …… The BSA-ZnTpHPP/MV^{2+}/TEOA/colloidal Pt system was applied to photosensitized reduction of water for preparation of hydrogen. The water-soluble biopolymer metallporphyrin complex was an excellent biopolymer photosensitizer
Keywords	Keywords　Biopolymer photosensitizer; Albumin; Metalloporphyrins; Photoinduced electron transfer reaction; Hydrogen production

3.2.2　综述性论文的阅读与利用

综述的特点就是综合叙述，是研究人员在论文撰写或进行研究工作前，运用逻辑的、数学的或直觉的方法，对从各种素材的分析中得到的新的信息加以全面的综合与归纳，从中找出共同性的或具有发展趋向性的特征和规律，并在此基础上提出研究人员的意见、观点、建议或方案，最后编写出信息分析研究成果的综述或评论，即综述论文。

综述论文的组成结构包括：论文标题、作者、单位、地址、摘要、关键词、引言、正文、结束语、致谢、参考文献等（如表 3-3 所示）。

由于综述来源于最新研究论文、专利、科技报告等，是作者是对最新研究成果的总结，因此，我们可以从中获得比教材、科技图书更新的知识体系，又避免了研究论文内容的散乱性。作为读者，根据自己所需可阅读或取舍相关部分内容。

表 3-3　综述论文的组成结构

组成结构	实例[化学通报，1999，(8)：8-12]
论文标题	O_2 选择氧化烷烃新进展
作者	王荣民[1,2]　王云普[1]　李树本[2]
单位，地址	([1] 西北师范大学化学系　兰州　730070) ([2]中国科学院兰州化学物理研究所羰基合成与选择氧化国家重点实验室　730000)

续表

摘要	摘要：综述了 20 世纪 90 年代以来有关金属络合物催化 O_2 选择氧化烷烃研究的进展。如：卤代卟啉铁络合物在无还原剂存在下催化烷烃羟基化，类卟啉金属络合物催化烷烃氧化及高分子或固载化金属络合物的催化性能
关键词	关键词：催化氧化作用，金属络合物，分子氧，烷烃
英文标题	Advanced in aerobic oxidation of alkane
作者 （单位，地址）	Wang Rong-Min[1,2] Wang Yun-Pu[1] LI Shu-Ben[2] ([1]Department of Chemistry, Northwest Normal University, Lanzhou, 730070) ([2]OSSO Key State Laboratory, Lanzhou Institute of Chemical Physics, Academia Sinica, Lanzhou 730000)
摘要 关键词	Abstract Researches on the aerobic oxidation of alkane catalyzed by metal complexes were reviewed Keywords Alkane Aerobic oxidation Metal complexes catalyzing
引言	分子氧对于地球上所有动物，包括人类来说都是至关重要的，由于它为生命提供能量、促进新陈代谢。在化学工业中也同样重要，作为最通用的氧化剂，分子氧已用于大规模生产……这些成功的过程，由于操作中的温度或压力的因素而受到限制。因此，化学家们热切地寻求一些在温和条件下能有效进行的氧化反应。在环境保护日益受到重视的今天，使用分子氧作氧化剂更具现实意义 由于生物生命活动体系中的氧化反应是在十分温和的条件下进行的，因此，生物模拟研究主要集中……已进行了大量的研究工作来模拟生物氧化反应[1]。90 年代以来，有关卟啉类和非卟啉类金属络合物活化分子氧及在催化氧化反应中的应用有了长足的进步，在此，只对金属络合物活化分子氧及在催化 O_2 氧化烷烃做一综述
正文部分	1 金属卟啉催化烷烃羟基化 1.1 高卤代金属卟啉催化氧化性能 Lyons[2]和……小组的最新研究表明，卤代金属卟啉是用 O_2 直接氧化烷基生成醇和羰基化合物有效的催化剂，而无需助还原剂、化学计量氧或光、电化学技术辅助，产率可达 90% 可以得到如下结果：…… 卤代铁卟啉的高催化活性和可循环性归结于如下因素：…….. 1.2 高分子固载金属卟啉 高卤代铁卟啉由于卤素原子对卟啉骨架环的保护作用，使其不能被其他卤代铁卟啉分子催化氧化，因此十分稳定，表现出高活性及可循环性。当金属卟啉固载于有机高分子或无机高分子后，也能达到类似的效果。…… 2 类卟啉金属络合物催化体系 2.1 水杨醛希夫碱络合物 2.2 冠醚络合物 2.3 β-二酮类络合物 2.4 氮杂环络合物 3 Gif 体系 4 烷基芳香烃侧连的氧化 4.1 高分子担载金属盐 4.2 水杨醛希夫碱络合物 4.3 高分子卟啉及类卟啉金属络合物
结束语部分	5 结束语 作为 O_2 氧化烷烃的催化剂，多卤代铁卟啉络合物由于在相对温和的条件下具有很高的催化活性且无需消耗助还原剂而受到注目。但其缺点是成本高、反应压力由 6.8 atm 降到常压时，转化数也随之迅速降低。通过研究取代卟啉络合物催化氧化机理和取代效应，能给我们一些启示来合成更有前途的催化剂，如配体的卤化、络合物的高分子化或固载化都有可能起到稳定作用及提高催化活性的作用。类卟啉金属络合物，尤其是高分子类卟啉金属络合物由于较高的催化活性和选择性以及易于合成也受到广泛关注，这些研究方向正在得到重视
致谢	感谢国家自然科学基金资助项目的资助
参考文献	[1]Montanari F, Casella L. Metalloporphyrins Catalyzed Oxidation. London: Kluwer Academic Publisher, 1994 [2] Grinstaff M W, Hill M G, Labinger J, et al. *Science*, 1994, 264: 1311-1313
脚注	1. 王荣民 男，教授，主要从事……研究和……的教学工作……

3.3　期刊论文的检索与获取方法

目前国内外绝大多数科技类期刊都有网络版，这有利于科技人员简便快速的检索摘要和下载全文。需要指出的是，大部分期刊数据库是有偿服务，这可视各单位订购情况下载。近年来，开放访问（Open Access）期刊越来越多，这类期刊论文可免费阅读和下载。

大多期刊可以通过相关网页浏览标题、作者、摘要等信息，对于免费或购买了数据库的网站，可以下载全文。

目前，全球出版的期刊种类数量巨大，仅我国就有 8000 余种期刊。全世界约有科技期刊 13 万种，科技类核心（SCI）期刊有 3000 余种，其中，我国的科技期刊进入 SCI 的只有几十余种，国内化学相关 SCI 期刊见表 3-6。从这些浩瀚的期刊源中检索所需论文，必须借助适当的检索工具。

3.3.1　通过传统的检索工具检索期刊论文

经过数百年的发展，各级图书馆（资料室）是我们获得传统印刷版期刊论文的主要途径。科技人员从图书馆中可以阅读、复印期刊论文。但是，从分布在不同地方的图书馆中获得分散的期刊论文，需要使用相应的检索工具。纸质版检索期刊论文的重要工具如下：

（1）《全国报刊索引》（自然科学技术版）《全国报刊索引》（自然科学技术版）为目前国内特大型文献数据库之一，也是印刷版检索中文期刊论文最重要的检索工具。检索方法参见 3.3.5 节。

（2）《美国化学文摘》《美国化学文摘》（Chemical Abstracts，CA）是世界最大的化学文摘库。也是目前世界上应用最广泛、最重要的化学化工及相关学科的检索工具。CA 已收文献量占全世界化学化工总文献量的 98%。CA 检索方法参见第 6 章。

3.3.2　通过网络图书馆检索和下载期刊论文

随着计算机技术和互联网的发展，现在绝大部分科技期刊使用网络作为媒介，因此，检索方式因此而改变。通过网络阅读和下载电子期刊论文的途径有：

（1）电子图书馆　科学院、高校与出版商联合，共同制作的期刊全文数据库，称之为电子图书馆。我国的许多高校单独或合作购买了 ACS、RSC、Elsevier（Science Direct）、Springer 系统的电子期刊全文数据库，校园网用户可以免费检索、阅览和下载全文。

（2）商用数据库　世界上知名的联机检索系统都在快速增加全文数据库的份量，如有名的期刊中间商美国 FAXON 公司从 1990 年开始建立电子期刊数据库，并提供电子服务。用户可经由因特网入口进行联机检索，如需原文，能在 24h 内传给用户。

（3）中国图书进出口（集团）总公司（periodical. cnpeak. com）报刊查询系统　向客户提供 160 多个国家和地区出版的 10 万多种各类载体报刊出版物的目录信息。

（4）国外期刊网络检索系统 cnpLINKer（http：//cnplinker. cnpeak. com）　中图链接服务共收录了国外 50 多家出版社的 12000 余种商业期刊，14000 多种 Open Access 期刊，900 万篇目次文摘数据和全文链接服务，400 家国内馆藏 OPAC 信息，并保持实时更新。

3.3.3　通过期刊出版机构的网站检索与下载

目前，绝大多数期刊或出版社，尤其是一些知名出版商已经通过网络发行期刊，因此，我们可以通过这些网站检索标题、摘要等信息，也可以免费下载或购买单篇论文。知名出版社有：

（1）美国化学会（American Chemical Society）出版物主页（pubs. acs. org）　为化学会公开出版的主要刊物。学科内容覆盖化学相关的多个领域。

（2）英国皇家化学学会（Royal Society of Chemistry）出版物主页（pubs. rsc. org）　欧

洲最大的化学科学组织，现有期刊 34 种，其中有部分世界一流的化学期刊。

（3）Sciencedirect 全文数据库（www. sciencedirect. com/） 由 Elsevier 公司出版，收录 2000 余种电子期刊，内容涉及数学、物理、化学、生命科学等学科。

（4）SpringerLink 期刊全文数据库（www. springerlink. com） 德国施普林格出版集团（Springer-Verlag）研发的在线全文电子期刊数据库。收录化学等多学科全文电子学术期刊。

（5）Wiley Online Library 全文数据库（www. wileyonlinelibrary. com） 由 John Wiley & Son，Inc 公司主办的一个涉及医学、材料科学、化学与化工等多学科的综合出版物网站。

上述重要数据库及其他数据库的使用方法将在第 9 章介绍。

3.3.4 通过期刊论文数据库网站检索与下载

经过多年发展，许多纸质版检索介质已经实现了网络化（如 CA、SCI、EI），也出现了新型网络化数据库（如 CNKI、Scopus）。但是，这些检索工具是收费的，国内一些科研院所订购了使用权，本单位的读者可免费使用。当然，Internet 上也有一些免费检索工具。一些知名的数据库有：

（1）SciFinder Scholar 数据库 为 CA《化学文摘》的网络版数据库，收录内容比 CA 更广泛，功能更强大。详见第 6 章。

（2）ISI 公司数据库 Web of Knowledge（isiknowledge. com）是 Thomson Reuters ISI 公司出版的，《科学引文索引》（SCI：Science Citation Index）的网络版。详见第 9 章。

（3）EI（www. ei. org） EI 是 The Engineering Index 的简称，是工程类综合数据库和检索平台 EnineeringVillage（EV）的一个子库。

（4）ProQuest CSA（www. proquest. com） 原剑桥科学文摘 CSA（Cambridge Scientific Abstracts）。覆盖生物、工程、环境科学、材料科学及社会科学等 100 多个主题数据库。

（5）Ingentaconnect Complete（www. ingentaconnect. com） 收录 1. 6 万多种出版物的 510 余万篇引文，学科覆盖化学、工程技术等领域。

（6）中国期刊网 CNKI（www. cnki. net） 中国知识资源总库，是世界上全文信息量规模最大的“数字图书馆”。收录中文期刊 9660 多种，详见 3. 4 节。

（7）万方数字化期刊（www. wanfangdata. com. cn） 万方数据资源系统收录十多个科技门类的数千种期刊。其使用方法参见第 9 章相关内容。

3.3.5 《全国报刊索引》及其使用方法

《全国报刊索引》创刊于 1955 年，月刊分“自然科学技术版”与“哲学社会科学版”。为目前国内特大型文献数据库之一，现已出版光盘数据库。《全国报刊索引》自然科学技术版，每期收录当年期刊 5000 余种，共收录篇名 1. 7 万余条。年文献报道量达 18 万条以上。其中化学化工信息分散于各类信息中，见表 3-4。

表 3-4 《全国报刊索引》中与化学化工信息相关的类别

总分类目录	与化学化工信息相关的分类	
N 自然科学总论 O 数理科学和化学 P 天文学、地理科学 Q 生物科学 R 医药、卫生 S 农业科学 T 工业技术 U 交通运输 V 航空、航天 X 环境科学、安全科学	O6 化学 O61 无机化学 O62 有机化学 O63 高分子化学(高聚物) O64 物理化学、化学物理学 O65 分析化学	P59 地球化学 Q 生物科学 R9 药学 S48 农药防治 TQ 化学工业 X13 环境化学

(1) 著录格式　自 2000 年第 1 期起，增加第一作者的所属单位。每期均附作者索引(含个人与团体)，按汉语拼音顺序排列，其中个人作者最多报道三人。此外，从 1998 年第 1 期起，增编“题中人名索引”、“引用报刊一览表”，皆附于报刊索引之后。

该索引的著录格式根据国家标准《检索期刊条目著录规则》(GB 3793—83)，结合报刊文献的特点进行著录，其著录格式为：

①顺序号②文献题名③/责任者④(第一作者所属单位)
⑤//报刊名⑥.-年,卷(期)⑦,-页码.

实例：

010101290 超分子体系中的分子识别研究/尤长城(南开大学化学系);张雯;刘育//化学学报.-2000,58(3).-338-342.

其中，第一个“01”代表 2001 年；第二个“01”代表第一期，01290 是按顺序依次排列的顺序号。

(2) 检索方法　以 2001 年第一期为例，检索有关元素有机化合物的内容。从分类目录中找到“O 数理科学和化学”，其中有“O62 有机化学 21 页”；在 21 页找到“O62 有机化学”，在其子类下找到“O627 元素有机化合物”；“O627 元素有机化合物”下有 8 篇文章，找到自己所需的文章。如：

010101172 酸式邻苯二甲酮的合成与晶体结构的研究/罗兆福(武汉大学化学系);杨毅涌;袁良杰等//分析科学学报.-2000,16(2),-112-117.

《全国报刊索引》除书本式外，还建有与之对应的网络数据库《全国报刊索引数据库》(www.cnbksy.cn/shlib_tsdc/index.do)，该数据库分综合数据库和专题数据库两类；前者又分为目次库、篇名库、会议库和西文库。《全国报刊索引数据库》具有信息量大、检索点多、查检速度快等特点，并有光盘和软盘两种载体形式。2000 年起电子数据库分社科版和科技版两个单列库发行。

3.4　中国知网——中文期刊论文全文下载途径

1998 年，我国提出国家知识基础设施 (Chinese National Knowledge Infrastructure，CNKI) 的概念，自主开发数字图书馆技术，建成了世界上全文信息量规模最大的“CNKI 数字图书馆”。中国知网 (www.cnki.net) 即中国期刊网 (www.edu.cnki.net)。

中国知网的所有用户都可免费阅读文摘。目前，国内大多数单位购买了其网络使用权，在高校、科研、企事业单位的科研工作者可以免费使用。对于通过公众网上网的用户，可通过购卡、在线充值等手段支付下载全文的费用。

目前，中国知网一些重要的数据库容量如下：

(1) 中国学术期刊网络出版总库　收录国内学术期刊 8000 余种。

(2) 中国博士学位论文全文数据库

(3) 中国优秀硕士学位论文全文数据库

(4) 中国重要会议论文全文数据库　重点收录 1999 年以来国内外学术会议论文集。

(5) 中国学术辑刊全文数据库　是目前国内唯一的学术辑刊全文数据库，共收录国内出版的重要学术辑刊 561 种，累积文献总量 18 万多篇。

(6) 国家科技成果数据库 (知网版)　主要收录正式登记的中国科技成果 46 万多项。

（7）国际学术文献总库　包括 12 个国外数据库，收录文献题录共 31 多万条。

（8）中国专利全文数据库（知网版）　包含发明专利、实用新型专利、外观设计专利三个子库。另有国外专利、工具书检索、学习教育等数据库。

3.4.1　通过中国知网免费检索摘要

通过中国知网可以免费检索论文摘要。例如：在知识搜索主页（search. cnki. net）输入“高分子絮凝剂”，进行搜索（图 3-1），得到题录。点击其中所需的文献标题，就可以得到摘要、标题、作者等信息，也可以看到该篇文献的参考文献、相似文献和相关期刊。另外根据使用权限情况还可以下载该文档（图 3-2）。

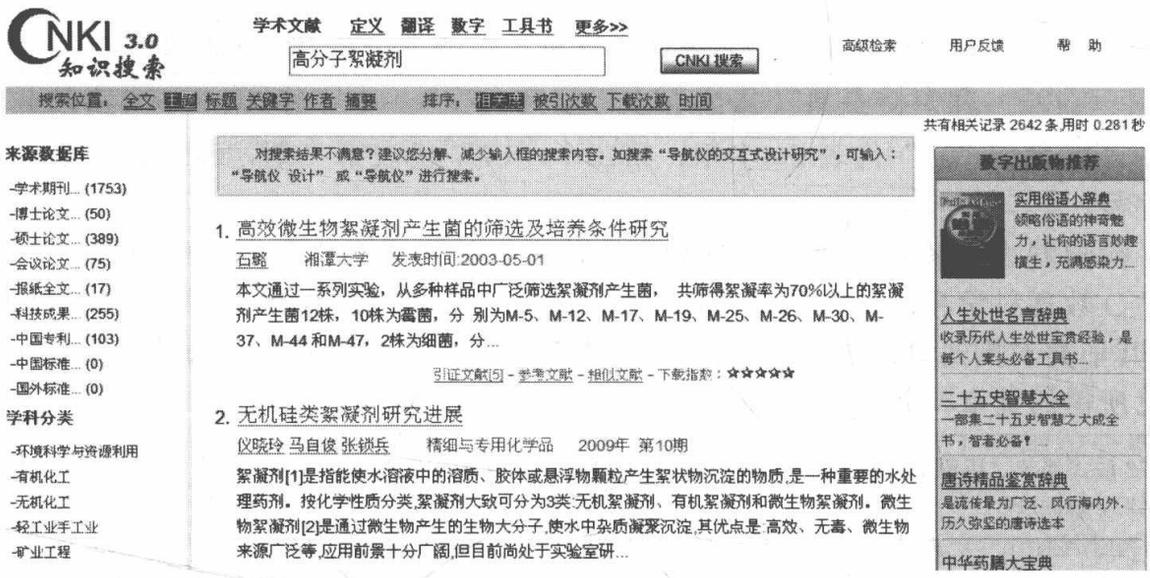


图 3-1　中国知网检索界面（一）

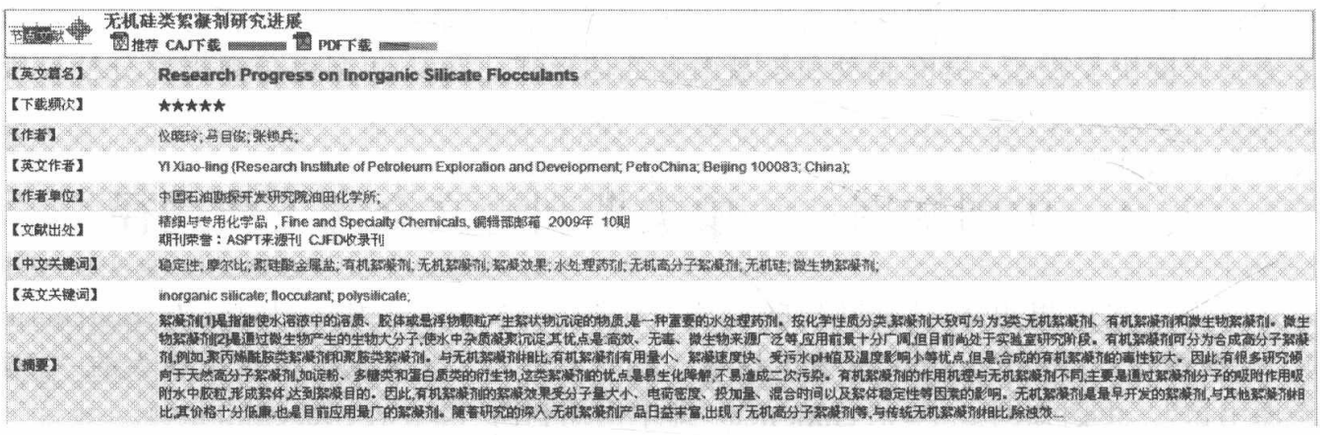


图 3-2　中国知网检索界面（二）

3.4.2　通过中国学术期刊网络出版总库下载全文

首先进入 CNKI 在各自学校（或科研单位）的镜像站点（主页），以有效用户身份登录，直接点击中国学术期刊网络出版总库。根据检索课题的具体情况首先输入检索年代、来源期刊、作者及其单位等检索控制条件，其次输入检索词，如“高分子絮凝剂”，同时设置合适的检索项、匹配、词频等，点击“检索文献”进行检索，结果如图 3-3 所示。在图 3-4 中检出文献默认按相关度排序并显示摘要，点击文献篇名，即可链接到该文献详细信息的界面。CNKI 为全文提供了两种显示格式，一种是 PDF 格式，一种是 CAJ 格式，这些软件都可以免费获得。点击检索结果页面的“PDF 下载”或“CAJ 下载”就可以获得全文。

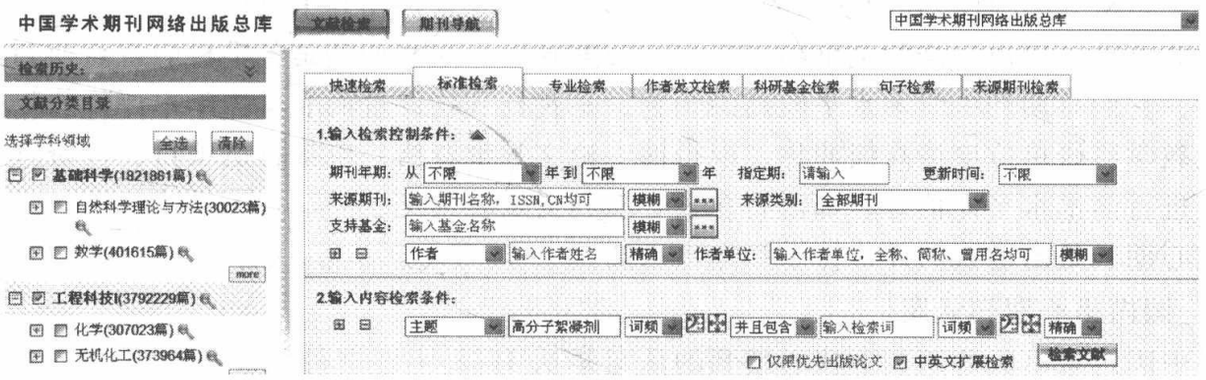


图 3-3　中国学术期刊网络出版总库检索界面（一）

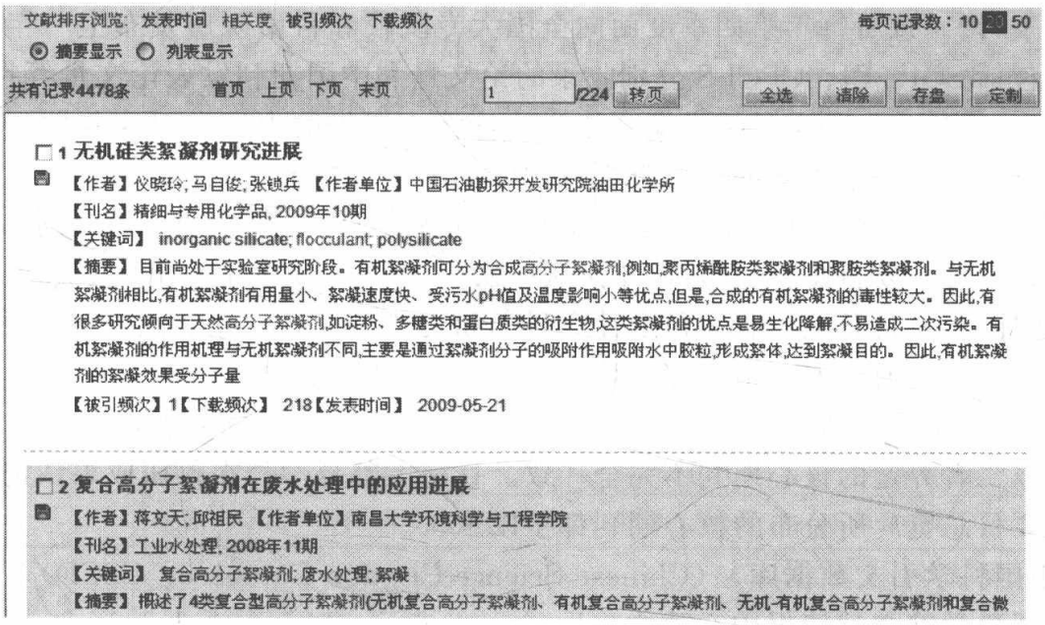


图 3-4　中国学术期刊网络出版总库检索界面（二）

3.5　检索国际核心期刊论文的工具——Web of Knowledge

美国科学信息研究所（ISI）出版的科学引文索引（SCI），收录了国际高水平期刊论文及摘要。ISI Web of Science 数据库是 Thomson Reuters（汤森路透）集团开发的 ISI Web of Knowledge 平台的一个数据库（www. isiknowledge. com）。

Web of Science 收录各学科领域中最权威的期刊论文的编目信息、作者、摘要、参考文献等资料，它是研究信息领域内最全面综合多学科文献资料的数据库。有关 SCI 及 ISI 的介绍与用法参见第 5、9 章。

3.6　国内国际重要化学化工期刊

科技期刊种类繁多，刊载文献的数量庞大。据统计目前全世界约有科技期刊 13 万种，每年发表论文约 500 万篇。2010 年，国内已有 5300 多种科技期刊。但是，价值较高的文献资料的分布，却是不均衡的。例如：1975 年美国《化学文摘》从大约 12000 种期刊摘引的论文中，有 50%的文章是从 325 种期刊中摘录的，75%的文章是从 1384 种期刊中摘录的，

90%的则是从3589种期刊中摘录的，而从其余的8400余种期刊中仅摘录了10%。

由此可见，价值较高的文献集中在少部分期刊中，这些期刊是各学科的重点期刊，即核心期刊。它们是期刊中学术水平较高的刊物，是进行刊物评价而非具体学术评价的工具。相当一批教学科研单位申请高级职称、取得博士论文答辩资格、申报科研项目、科研机构或高等院校进行学术水平评估等，都需要在核心期刊上发表论文。

核心期刊是由适当的评价体系筛选出来的。

3.6.1 国内核心期刊认定

对中国内地出版的期刊中核心期刊的认定是从1988年由中科院文献情报中心组织专家首次进行评议的，其后变化较大。目前国内比较权威的有以下几种版本。

(1)《中国科技期刊引证报告》(限理工科期刊) 由中国科技信息研究所每年出版一次，简称《引证报告》。该所每年第四季度面向全国大专院校和科研院所发布上一年的科研论文排名。排名包括SCI、EI、CPCI-S分别收录的论文量和中国期刊发表论文量等指标。《引证报告》以1300多种中、外文科技类期刊作为统计源，报告的内容是对这些期刊进行多项指标的统计与分析，其中最重要的是按类进行“影响因子”排名。

(2)《中文核心期刊要目总览》 由北京大学图书馆与北京高校图书馆期刊工作研究会联合编辑出版，简称《要目总览》。每四年出版一次，1992～2008年共出版了五版，第五版收录期刊1983种。《要目总览》收编包括社会科学和自然科学等各种学科类别的中文期刊。其中对核心期刊的认定通过五项指标综合评估。

《引证报告》统计源期刊的选取原则和《要目总览》核心期刊的认定各依据了不同的方法体系，所以二者界定的核心期刊不完全一致。目前大部分学校在科研成果认定中对《引证报告》和《要目总览》所公布的核心期刊都予以承认。

(3)《中国科学引文数据库》(Chinese Science Citation Database，CSCD) 限于理工科期刊。由中国科学院文献情报中心建立（http：//sciencechina.cn/cscd_source.jsp)，分为核心库（C）和扩展库（E)。核心库的来源期刊经过严格评选，是各学科领域中具有权威性和代表性的期刊。2015～2016年中国科学引文数据库来源期刊1200种，其中英文版期刊194种，中文版期刊1006种。

(4)《中国人文社会科学核心期刊要览》 由中国社会科学院文献信息中心和社科文献计量评价中心共同建立的核心期刊库，在科研成果认定中均认定为核心期刊。

3.6.2 国内重要的化学化工类期刊

为了有选择地查阅文献和投稿，参照中国科学引文数据库核心库期刊目录，这里列出国内与化学化工相关的部分核心期刊（不含被SCIE收录的国内化学化工期刊）供读者参考(表3-5)。由于核心期刊目录时有变化，请读者在使用时核对。注意：中国科学引文数据库期刊目录（http：//sciencechina.cn/cscd_source.jsp）可以免费查阅。

表3-5 国内几种重要的化学化工及相关核心期刊

刊　名	编辑部(或出版社)地址［网址(或邮箱)］
化学通报	北京2709信箱《化学通报》编辑部 中科院化学所 100190 ［www.hxtb.org］
应用化学	长春市人民大街5625号 中科院长春应化所 130022 ［yyhx.ciac.jl.cn］
化工进展	北京市东城区青年湖南街13号 100011 ［www.hgjz.com.cn］
化学试剂	北京市东四南大街160号 100010 ［www.chinareagent.com.cn］
化学研究与应用	成都市武侯区望江路29号四川大学化学学院 610064 ［www.chemistryra.com］

续表

刊　名	编辑部(或出版社)地址［网址(或邮箱)］
化学世界	上海市南昌路 203 号　200020　［hxsj. qikan. com］
分析测试学报	广州市先烈中路 100 号　510070　［www. fxcsxb. com］
色谱	大连市中山路 457 号 中科院大连化学物理研究所　116023　［www. chrom-china. com］
电化学	福建省厦门市厦门大学 D 信箱　361005　［electrochem. xmu. edu. cn］
分析科学学报	湖北 武汉大学化学系《分析科学学报》编辑部　430072　［www. fxkxxb. whu. edu. cn］
环境化学	北京 2871 号信箱 中科院生态环境中心　100085　［hjhx. rcees. ac. cn］
高分子通报	北京市海淀区中关村北一街 2 号　100190　［gfztb. periodicals. net. cn］
高分子材料科学与工程	四川省成都市四川大学(西区)高分子研究所　610065　［www. firstknow. cn］
功能材料	重庆北碚 龙凤三村 26 号 重庆功能材料期刊社有限公司　400700　［www. gncl. cn］
功能高分子学报	上海市梅陇路 130 号(华东理工大学 436 信箱)　200237　［gngfzxb. periodicals. net. cn］
化工学报	北京市东城区青年湖南街 13 号　100011　［www. hgxb. com. cn］
化学反应工程与工艺	杭州市浙江大学玉泉校区化工系　310027　［hxfygcygy. periodicals. net. cn］
精细化工	大连市黄浦路 201 号大连 304 信箱　116023　［www. finechemicals. com. cn］
石油化工	北京市朝阳区北三环东路 14 号北京化工研究院　100013　［syhg. chinajournal. net. cn］
中国塑料	北京市海淀区阜成路 11 号轻工部塑料加工所　100048　［www. plaschina. com. cn］
化学教育	北京市新街口外大街 19 号北京师范大学化学院　100875　［www. hxjy. org］
化学教学	上海市中山北路 3663 号华东师范大学　200062　［www. chemedu. cn］
大学化学	北京大学化学学院 大学化学编辑部　100871　［www. dxhx. pku. edu. cn］

3.6.3　国际核心期刊与 SCI 期刊分区

(1) 国际核心期刊　一般指被 SCI (Science Citation Index) 收录和检索的期刊，目前该库有核心版 (SCI)、扩展版 (SCIE) 两种版本。每年核心刊物目录和影响因子 (Impact Factor) 都在发生变化，但是总体上相对稳定。SCI 核心版收录报道并标引了 3000 多种自然科学、工程技术、生物医学领域的领先期刊；扩展版 (Science Citation Index Expanded，SCIE) 收录期刊 8200 多种 (包含核心版)。

The ISI Impact Factor 网站 (www. isiknowlege. com) 提供影响因子等概念的定义，SCI 最新收录的刊物及 SCIE 数据库查询等信息。

(2) SCI 分区　由于不同学科之间的 SCI 期刊影响因子 (IF) 差异较大，这使期刊影响因子在不同学科之间可比性很差。因此，中国科学院文献情报中心组织相关学科资深专家，以当年 SCI 期刊的影响因子 (IF)、总被引频次 (CI) 以及最近两年的期刊被引频次 (IFCI) 三个评价指标，利用 ISI 出版的 Jouranl Citation Reports (JCR) 的数据进行统计计算，结合该期刊在本学科的影响度，将各学科的全部 SCI 期刊分为 1 区、2 区、3 区和 4 区 4 个等级，其中 1 区为最高区。

按 SCI 期刊分区表对 SCI 论文进行评价已被国内部分高校采纳。它有利于鼓励科技工作者向本学科的高级区域投稿，尤其是发表在 1、2 区的论文，通常被认为是该学科的标志性成果。SCI 期刊分区为科研部门的学术成果评价提供参考依据，分区法确定的国际一流期刊都具有较高的影响因子和被引频次，可以为科研部门鉴定科技成果、评价研究水平提供定量的参考依据。值得注意的是，科研成果的评价更重要的是以同行专家评审意见为基础，不能简单的根据其是否发表在国际一流期刊上确定研究质量。

3.6.4 SCI收录的化学化工类中国期刊

近期SCI、SCIE收录的部分国内化学化工相关期刊的名称、网址、刊号及影响因子等信息见表3-6。需要说明的是国内期刊，大部分属于SCI第4区。

表3-6 SCI、SCIE收录的部分中国化学化工相关期刊

Title《中文刊名》(英文版/中文版)[相关网址]	刊期/ISSN	收录库/IF
Acta Chimica Sinica《化学学报》(中文版)(sioc-journal. cn)	半月刊/ 0567-7351	SCI/0. 611
Chinese Journal of Chemical Physics《化学物理学报》(cjcp. ustc. edu. cn)	双月刊 1674-0068	SCIE/0. 642
Chemical Journal of Chinese Universities-Chinese《高等学校化学学报》(中文版)(www. cjcu. jlu. edu. cn)	月刊/0251-0790	SCI/0. 656
Chinese Journal of Chemistry《中国化学》(onlinelibrary. wiley. com/journal/10. 1002/(ISSN)1614-7065)	月刊 1001-604X	SCI/0. 773
Chinese Science Bulletin《科学通报》(英文版)(csb. scichina. com)	半月刊 1001-6538	SCI/1. 087
Journal of The Chinese Chemical Society(Taiwan)《中国化学会》(台湾)(英文版)(chemistry. org. tw/public_jour. php)	双月刊 0009-4536	SCI/0. 718
Acta Physico-Chimica Sinica《物理化学学报》(中文版)(www. whxb. pku. edu. cn)	月刊/1000-6818	SCIE/0. 734
Acta Polymerica Sinica《高分子学报》(中文版)(www. gfzxb. org)	双月刊 1000-3304	SCIE/0. 481
Chemical Research in Chinese Universities《高等学校化学研究》(英文版)(www. cjcu. jlu. edu. cn)	双月刊/1005-9040	SCIE/0. 460
Chinese Chemical Letters《中国化学快报》(英文版)(www. journals. elsevier. com/chinese-chemical-letters)	月刊/1001-8417	SCIE/0. 775
Chinese Journal of Analytical Chemistry《分析化学》(中文版)(www. analchem. cn)	月刊/0253-3820	SCIE/0. 798
Chinese Journal of Catalysis《催化学报》(中文版)(www. bjb. dicp. ac. cn/chxb/cuihua. htm)	月刊/0253-9837	SCIE/0. 752
Chinese Journal of Chemical Physics《化学物理学报》(英文版)(iopscience. iop. org)	双月刊 1003-7713	SCIE/0. 642
Chinese Journal of Inorganic Chemistry《无机化学学报》(中文版)(wjhxxb. periodicals. net. cn)	双月刊 1001-4861	SCIE/0. 670
Chinese Journal of Organic Chemistry《有机化学》(中文版)(sioc-journal. cn)	月刊/0253-2786	SCIE/0. 555
Chinese Journal of Polymer Science《高分子科学》(英文版)(www. cjps. org)	双月刊 0256-7679	SCIE/0. 478
Chinese Journal of Structural Chemistry《结构化学》(中文版)(www. jstructchem. cn)	双月刊 0254-5861	SCIE/0. 624
Journal of Environmental Sciences-China《环境科学学报》(英文版)(www. jesc. ac. cn)	月刊/1001-0742	SCIE/1. 513
Journal of Inorganic Materials《无机材料学报》(英文版)(www. jim. org. cn)	双月刊 1000-324X	SCIE/0. 397
Journal of Materials Science & Technology《材料科学技术学报》(英文版)(www. jmst. org)	双月刊 1005-0302	SCIE/0. 759
Journal of Rare Earths《中国稀土学报》(英文版)(www. re-journal. com)	双月刊 1002-0721	SCIE/1. 085
Progress in Biochemistry and Biophysics《生物化学与生物物理进展》(中文版)(www. pibb. ac. cn)	月刊/1000-3282	SCIE/0. 236
Progress in Chemistry《化学进展》(中文版)(www. progchem. ac. cn)	月刊/1005-281X	SCIE/0. 560
Rare Metals《稀有金属》(英文版)(www. springer. com/materials/special+types/journal/12598)	双月刊 1001-0521	SCIE/0. 643

3.6.5　SCI 收录的化学化工类国外期刊

Thomson Reuters（汤森路透）集团定期公布国际核心期刊（SCI、SCIE）的刊名、影响因子及分区等信息，近期信息见表 3-7。

表 3-7　近期 SCI、SCIE 收录的部分国外主要的化学化工相关期刊影响因子和分区

刊名缩写(ISI)	英/中文刊名（ISSN）	IF	分区
Chem Rev	Chemical Reviews/化学评论（0009-2665）	41.298	1
Nature	Nature/自然（0028-0836）	41.456	1
Science	Science/科学（0036-8075）	33.611	1
Chem Soc Rev	Chemical Society Reviews/化学会评论（0306-0012）	24.892	1
Prog Polym Sci	Progress in Polymer Science/聚合物科学进展（0079-6700）	26.932	1
Accounts Chem Res	Accounts of Chemical Research/化学研究述评（0001-4842）	22.323	1
Energ Environ Sci	Energy & Environmental Science/能源环境科学（1754-5692）	20.523	1
Nat Chem	Nature Chemistry/天然化学（1755-4330）	21.757	1
Annu Rev Phys Chem	Annual Review of Physical Chemistry/物理化学年度评论（0066-426X）	16.842	1
Coordin Chem Rev	Coordination Chemistry Reviews/配位化学评论（0010-8545）	12.239	1
J Am Chem Soc	Journal of the American Chemical Society/美国化学会志（0002-7863）	10.677	1
Angew Chem Int Edit	Angewandte Chemie-International Edition (in English)/应用化学—国际版（1433-7851）	11.261	1
Nat Prod Rep	Natural Product Reports/天然产物报告（0265-0568）	10.178	1
Anal Chem	Analytica Chemistry/分析化学（0003-2700）	5.695	1
Chem Mater	Chemistry of Materials/材料化学（0897-4756）	8.354	2
Chem Sci	Chemistry Science/化学科学（2041-6520）	8.314	2
Green Chem	Green Chemistry/绿色化学（1463-9262）	6.828	2
Adv Organomet Chem	Advances in Organometallic Chemistry/有机金属化学进展（0065-3055）	6.750	2
Chem Commun	Chemical Communications/化学通讯（1359-7345）	6.378	2
Catal Rev	Catalysis Reviews-Science and Engineering/催化评论:科学与工程（0161-4940）	6.375	2
Org Lett	Organic Letters/有机快报（1523-7060）	6.142	2
J Catal	Journal of Catalysis/催化杂志（0021-9517）	5.787	2
Biomacromolecules	Biomacromolecules/生物大分子（1525-7797）	5.750	2
Chem-Eur J	Chemistry-A European Journal/化学 A 欧洲杂志（0947-6539）	5.731	2
Prog Surf Sci	Progress in Surface Science/表面科学进展（0079-6816）	5.696	2
J Med Chem	Journal of Medicinal Chemistry/医药化学杂志（0022-2623）	5.614	2
J Chem Theory Comput	Journal of Chemical Theory and Computation /化学理论计算杂志（1549-9618）	5.498	2
Adv Catal	Advances in Catalysis/催化进展(0360-0564)	5.250	2
J Phys Chem C	The Journal of Physical Chemistry, C/物理化学杂志,C 辑（1932-7447）	4.772	2
J Chromatogr A	Journal of Chromatography A/色谱学报 A(0021-9673)	4.612	2

续表

刊名缩写(ISI)	英/中文刊名 (ISSN)	IF	分区
Inorg Chem	Inorganic Chemistry/无机化学 (0020-1669)	4.593	2
J Org Chem	Organometallic Chemistry/有机化学杂志 (0022-328x)	4.564	2
Langmuir	Langmuir(The ACS Journal of Surface and Colloids)/表面与胶体化学杂志 (0743-7463)	4.457	2
Talanta	Talanta/塔兰塔 (0039-9140)	4.398	2
Anal Chim Acta	Analytica Chimica Acta/分析化学学报 (0003-2670)	4.387	2
J Chromatogr A	Journal of Chromatography A/色谱学报 A (0021-9673)	4.169	2
Organometallics	Organometallics/有机金属 (0276-7333)	4.145	2
Analyst	Analyst/化验师 (0003-2654)	4.107	
Dalton T	Dalton Transactions/道尔顿汇刊 (1477-9226)	3.806	2
J Comput Chem	Journal of Computational Chemistry/计算化学杂志 (0192-8651)	3.589	2
Org Biomol Chem	Organic & Biomolecular Chemistry/有机生物分子化学 (1477-0520)	3.562	2
J Anal Atom Spectrom	Journal of Analytical Atomic Spectrometry/分析原子光谱学杂志 (0267-9477)	3.466	2
Chemphyschem	ChemPhysChem/化学物理化学 (1439-4235)	3.419	2
Food Chem	Food Chemistry/食品化学 (0308-8146)	3.334	2
J Phys Chem B	The Journal of Physical Chemistry, B/物理化学杂志,B辑 (1520-6106)	3.302	2
J Polym Sci Pol Chem	Journal of Polymer Science, Part A: Polymer Chemistry/聚合物科学杂志,A辑:聚合物化学 (0887-624x)	3.113	2
Dalton T	Dalton Transactions/道尔顿汇刊 (1477-9226)	4.197	3
Polymer	Polymer/聚合物 (0032-3861)	3.562	3
Eur J Med Chem	European Journal of Medicinal Chemistry/欧洲药学化学(0223-5234)	3.499	3
Anal Bioanal Chem	Analytical and Bioanalytical Chemistry/分析与生物分析化学 (1618-2642)	3.436	3
J Biol Inorg Chem	Journal of Biological Inorganic Chemistry/生物无机化学杂志 (0949-8257)	3.353	3
Eur J Org Chem	European Journal of Organic Chemistry/欧洲有机化学杂志(1434-193X)	3.344	3
J Nat Prod	Journal of Nature Product/天然产物杂志 (0163-3864)	3.285	3
J Inorg Biochem	Journal of Inorganic Biochemistry/无机生物化学杂志 (0162-0134)	3.197	3
Catal Commun	Catalysis Communications/化学通讯 (1566-7367)	2.915	3
J Phys Chem A	The Journal of Physical Chemistry, B/物理化学杂志,A辑 (1089-5639)	2.771	3
Adv Inorg Chem	Advances in Inorganic Chemistry/无机化学进展 (0898-8838)	2.714	3
Synlett	Synlett/合成通讯 (0936-5214)	2.655	3
Tetrahedron	Tetrahedron/四面体 (0040-4020)	2.641	3
Anal Biochem	Analytical Biochemistry/分析生物学 (0003-2697)	2.582	3
Molecules	Molecules/分子 (1420-3049)	2.416	3
Tetrahedron Lett	Tetrahedron Lett/四面体快报 (0040-4039)	2.397	3

续表

刊名缩写(ISI)	英/中文刊名（ISSN）	IF	分区
Planta Med	Planta Medica/植物药学（0032-0943）	2.348	3
Appl Clay Sci	Appl Clay Sci/应用黏土科学（0169-1317）	2.342	3
Chem Phys Lett	Chemical Physics Letters/化学物理快报（0009-2614）	2.145	3
Inorg Chem Commun	Inorganic Chemistry Communications/无机化学通讯（1387-7003）	2.016	3
Chem Lett	Chemistry Letters/化学快报（0366-7022）	1.594	3
Anal Sci	Analytical Science/分析科学（0910-6340）	1.569	4
Helv Chim Acta	Helvetica Chimica Acta/瑞士化学学报（0018-019x）	1.383	4
Med Chem	Medicinal Chemistry/药物化学（1573-4064）	1.373	4
Anal Lett	Analytical Letters/分析快报（0003-2719）	0.965	4
Pharmazie	Pharmazine/药学（0031-7144）	0.962	4
J Chem Educ	Journal of Chemistry Education/化学教育杂志（0021-9584）	0.817	4
J Chromatogr Sci	Journal of Chromatographic Science/色谱科学杂志（0021-9665）	0.794	4
Indian J Chem A	Journal of Inadian Chemistry A/印度化学杂志 A（0376-4710）	0.787	4
J ChemRes	Journal of Chemistry Research/化学研究杂志（1747-5198）	0.596	4

3.6.6　免费检索 SCI 期刊及其影响因子途径

目前，SCI 最新收录的刊物名称、缩写、影响因子（IF）及分区信息，以及编辑部网址可通过搜索引擎找到，也可以从如下网站查询：

（1）Chemistry Journals（化学期刊）（www-jmg. ch. cam. ac. uk/data/c2k/cj）　该网站提供了互联网上全球最全和最新的以出版商分类的化学相关期刊。

（2）Journal Title Abbreviations（www. abbreviations. com/jas. php）　可查询期刊名称缩写。

（3）MedSci（www. medsci. cn/sci/）　可免费查询 SCI 期刊最新影响因子（IF）。

3.7　免费检索期刊论文与获取全文的途径

作为一名科技工作者，要从本单位、本地区的免费资源检索和下载（或复制）全文，也需要了解一些免费资源。这里总结一些免费检索论文基本信息与获取全文的途径。

3.7.1　利用本单位图书馆订购的资源

国内绝大多数高校与研究所订购了化学相关出版社（如 Elsevier、ACS 等）或检索机构（如 ISI、CAS 等）的专业数据库（见第 9 章）。因此，首先要了解本单位订购的资源有哪些，这些资源对个人来说是免费的，要充分利用。同时，许多高校、科研院所、省级图书馆也订购了印刷版期刊，这些都可以阅读和复印。可以借助高等学校图书馆的馆际互借服务免费借阅和复印其他单位的图书、期刊论文。

3.7.2　利用本校图书馆的文献传递服务

文献检索与全文下载，可借助高等学校图书馆的馆际互借与文献传递服务来获取免费文献资料。如通过以下途径获得。

（1）读秀（www. duxiu. com）　由海量全文数据及资料基本信息组成的超大型数据库。

收录了430多万种中文图书、10亿页全文资料。是一个学术搜索引擎及文献资料服务平台。

（2）百链云图书馆（www.blyun.com） 是一种查找学术资源的新途径。目前与600多家图书馆OPAC系统、电子书、中外文期刊、外文数据库系统集成。内容包括中外文纸质、电子版本的书、报、刊、标准、专利、论文、视频、网页各种载体等。其主页中的“一站式检索”便是百链搜索引擎系统。它将电子图书、期刊、论文等各种类型资料整合于同一平台，集文献搜索、试读、传递为一体，实现了基于内容的检索，使检索深入章节和全文。

3.7.3 利用开放电子期刊资源与免费期刊论文搜索工具

绝大部分传统期刊的网络版需要付费阅读或下载全文。随着网络的发展，只在网络上编辑和发行的电子期刊大部分免费，而且免费检索和下载全文的开放访问（Open Access）期刊资源越来越多。

近年来，越来越多的传统期刊为作者提供了Open Access（开放阅读）选项，即：为了扩大论文内容的影响力，作者付费后读者可免费阅读。因此，我们也可以免费阅读知名期刊的部分论文。

（1）OALib（hwww.oalib.com/） 开放访问资源图书馆（Open Access Library，缩写为OALib） 提供的开源论文超过200万篇，涵盖所有学科（图3-5）。所有文章均可免费下载。

（2）DOAJ（www.doaj.org）（https：//doaj.org） 开放访问期刊目录（Directory of Open Access Journals） 可免费检索和下载全文的网上电子期刊资源（图3-6）。已收录了1万余种期刊，化学化工期刊近150种。已成为开放访问运动中最有影响的热点网站之一。

图3-5 开放存取资源图书馆检索界面

图3-6 DOAJ检索界面

（3）Highwire（http：//highwire.stanford.edu） 提供免费全文。由美国斯坦福大学图书馆创立，全球最大的学术文献出版商之一。

还有一些免费检索摘要或下载全文的检索工具，典型网站有：

（4）期刊界（www.alljournals.cn） 可免费检索中文期刊论文（图3-7）。

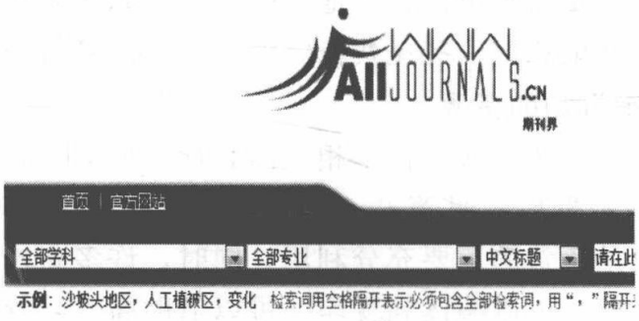


图3-7 期刊界检索界面

（5）专业Google学术搜索（http：//scholar.google.com.secure.sci-hub.org/） 可免费检索英文期刊论文、专利，并可免费下载全文。

（6）The Free Library（http：//www.thefreelibrary.com/） 免费图书馆自2003年以来，免费提供传统文献的全文版本，近年来，扩展到数百种核心期刊，包括科技、社会科

学、商业与工业、通信、健康、法律政策等诸多领域的自1984年至今的数百万种论文。

(7) Freefullpdf (www.freefullpdf.com)　可获得图书、论文、专利等全文。有两周免费试用期，包含如下学科：生命科学、健康学、物理学、数学、社会与人文科学。

(8) Ingentaconnect (www.ingentaconnect.com)（免费）　是可搜索超过9000种出版物的数据库。

(9) JournalSeek (http://journalseek.net/)　是最大的完全分类数据库，可通过internet免费搜索期刊信息。

(10) Article Finder (www.infotrieve.com)　可免费检索图书、论文信息，通过该机构付费获得全文。检索页面链接为 www.copyright.com/search.do? operation = show&page=last。

3.7.4　利用中科院国家数字图书馆全文传递服务系统

中国科学院国家科学数字图书馆（China Science Digital Library，CSDL）提供中外文电子期刊、会议录、学位论文、专利、科学引文索引和网络信息导航等类型的文献数据库169个，内容涉及数学、物理、化学、生命科学、资源环境、工程技术等。CSDL用户(www.csdl.net.cn)（http://discovery.las.ac.cn/）利用其跨库检索引擎可直接查询上百个全文、文摘和馆藏目录数据库，并获取电子版全文；利用其文献传递系统与国家科技图书文献中心网络服务系统，用户可在48h内获得18000种西文期刊的全文传递服务；CSDL的随易通（电子钥匙）服务，使用户在任何地点上网，均可查询所在单位购买开通的数据库。

CSDL开通的全文数据库有Elsevier、SpringerLink、VIP维普中文期刊、ACM、ACS、IEEE/IEE、AIP、方正电子图书、APS、Springer丛书和LB、ProQuest博士论文全文数据库、Knovel工具书、Blackwell、Science、Johnwiley、Cell Press等。

CSDL开通的文摘数据库有Web of Science（SCI）、Biosis Preview（BP）、Eivillage、CSA、INSPEC、Derwent、ISTP、CURRENT CONTENT CONNECT（CCC）、JCR、GeoRef、Beilstein/GmeLin、PQDD-B等。

中科院外部用户，可以先在国家科学图书馆的LCAS文献提供与馆际互借服务系统注册账户，然后以注册用户身份请求原文。CSDL全文传递服务系统的特点：①丰富的文献资源、免费检索、全文提供。②服务快速、费用经济，包括即查即得、4小时文献传递、一天文献传递和两天文献传递等，也可加急服务；网络化的全文传输——全文扫描传送到用户的电子邮箱。③第三方委托代理服务："无法确定所需全文可以从哪里获得，怎么办?"，用户只要在系统中填写一份"委托代查单、选定一个服务馆"，系统可以在全国、全球范围为其查找各年代、各类型、各文种的全文文献并传送到您的电子邮箱。④方便用户的服务方式：注册付费。

3.7.5　利用部门或地方政府的公共服务平台

一些发达地区地方政府开发的公共服务平台，不同程度的对外开放，如：

(1) Socolar (www.socolar.com)　由中国教育进出口公司管理的开放存取一站式检索服务平台，为用户提供Open Access资源检索和全文链接服务的公共服务平台，收录了6000多种来自互联网的OA期刊、仓储等学术资源信息，提供一站式检索和全文链接服务。

(2) 上海研发公共服务平台 (http://lib-ebook.sgst.cn/)　上海研发公共服务平台数字图书资源整合了方正Apabi数字图书馆高质量的电子图书资源，为用户提供文献检索、全文下载、中英文全文传递、电子图书在线阅读、科技查新、情报信息等文献服务。注册用户可免费进行科技文献跨库检索和在线提交原文传递请求服务。

(3) 广东省科技文献共享平台 (http://lms.lsp.gdstl.net/ResourceSearch/index)　是广

东省科技图书馆虚拟参考咨询系统，是基于广东省科技图书馆订购的中外文全文数据库、馆藏印刷版资源以及馆外第三方合作机构的文献资源，注册用户（每个用户凭本人身份证号可注册一个账号）可免费查找电子图书、期刊论文、学位论文、会议论文以及专利、标准等文献的检索与远程文献传递服务。另外广东省科技图书馆的资源统一检索平台整合了CNKI期刊论文库、CNKI优秀硕士论文库、CNKI优秀博士论文库和维普期刊等中文数据库，以及Sciencedirect、Springerlink、ACS、Nature等知名外文数据库，供读者免费检索查询。注册用户通过统一检索查询到的文献，可直接提交到原文请求平台，由咨询专家和虚拟参考咨询系统中的注册用户应助答复。

3.7.6 利用专业论坛的求助功能

小木虫学术科研第一站（http：//emuch. net/），简称“小木虫”，是中国最有影响力的学术站点之一。它创建于2001年，会员主要来自国内各大院校、科研院所的博硕士研究生、企业研发人员。其已成为聚集众多科研工作者的学术资源、经验交流平台。可通过求助功能获得全文或相关信息。

3.7.7 向作者索取全文

当通过检索工具检索到作者信息后，可直接向作者索取全文电子版，也可以通过Researchgate（www. researchgate. net）检索作者与论文信息，然后直接通过网站索取。

练 习 题

1. 简述科技期刊的主要类型。

2. 我们从期刊论文中可以获得哪些信息？

3. 研究论文与综述论文所承载的信息有何不同？

4. 举3～5例说明查阅和下载中、外文电子期刊论文的网络数据库的名称和网址。

5. 对科学研究新手来说，SCI期刊分区有什么作用？

6. 分别说明Elsevier、Wiley、ACS出版社涉及的领域与检索摘要的途径，并从中找到一种重要的化学化工期刊。

7. 列举一些免费下载全文的途径。

实践练习题

1. 通过中国知网数据库查找最新一期《大学化学》杂志的电子版，阅读其中一篇文章的摘要，并下载全文。

2. 通过中国知网查找有关“超临界二氧化碳（supercritical carbon dioxide）”的研究论文3～5篇，摘录其摘要。

3. 通过Sciencedirect查找有关“离子液体（Ionic Liquids）”的期刊论文3～5篇。

第 4 章　专利知识与专利信息检索

导　语

科学技术的发展推动着人类社会的进步，专利制度保障了人类文明的持续发展。对发明人而言，当拥有一项发明成果时，通过申请专利，可有效保护自己的知识产权。在互联网时代，我们很容易免费获得开放的专利技术。本章主要介绍专利基础知识与检索方法，使读者可以快速获得专利技术。

关键词

知识产权；发明创造；专利技术；专利申请；专利文献；专利检索。

发明创造是科技工作者的重要任务，大家都希望研究成果能够得到应用和推广，为社会做出贡献（获得社会、经济效益）的同时，个人也获得相应效益。当然，发明人最不想遇到的状况莫过于花费许多时间和精力将自己新的构思付诸实现后，才发现同样的发明早已有人做过，并已发表或申请了专利。那么，如何知道自己的发明是首创呢？这就需要在研发初期做好信息检索工作。因此，专利的检索和申请十分重要。科技工作者，不但要学会从图书、期刊中获取信息，还需要学会专利信息的检索与利用。

专利（Patent）是政府授予个人或法人（单位）的一种权利。专利一旦过期就可以被任何人使用。专利是科学发现的重要组成部分，无论从事技术发明，还是致力于科学研究，专利文献都是学术文献不可或缺的组成部分。根据国际经合组织（Organisation for Economic Co-operation and Development，OECD）统计，全世界每年科技出版物中约有 1/4 为专利文献。90％以上的发明曾以专利文献形式发表，但其中 80％不再以任何其他形式发表，也就是说，这些专利的信息不可能从其他的技术文献中获得。因此查询和利用专利信息就显得尤为重要。

以前（印刷版时代），专利文献的查找比较困难，人们对专利文献的利用并不能令人满

意。欧洲专利局的统计指出：欧洲每年大约浪费 200 亿美元的投资；若能应用好专利文献，能节约 40%的科研开发经费，少花 60%的研究开发时间。在我国，专利文献是尚未普及的情报源之一，是一个陌生的文献角落。调查结果表明：各专业科技人员利用专利文献的情况是：化学化工 48.4%，电子电气 17.4%，机械 19.4%，其他 14.8%。

随着 Internet 的发展，可通过网络检索专利数据库，与专利有关的信息也越来越丰富，解决了以往难以获得专利文献，尤其是较新专利文献的难题。科技部已经把“专利战略”列为中国科技发展的三大战略之一，专利的申请和专利情报的查询利用必将日益重要。本章在对专利知识进行简单介绍的基础上，通过实例重点介绍专利申请和专利信息检索方法。

4.1 知识产权与专利制度

4.1.1 知识产权

随着科技的发展，为了更好保护各类产权人的利益，知识产权制度应运而生。“知识产权”来自于“Intellectual Property”（智力财产权），指人们可以就智力创造的成果所依法享有的专有权力。广义的知识产权，可以包括一切人类智力创造的成果。狭义（或传统）的知识产权，则包括工业产权（Industrial Property）和版权（Copy Right）两部分（如图 4-1 所示）。其中，工业产权指人们在生产活动中对其取得的创造性的脑力劳动成果依法取得的权利。而“工业”泛指工业、农业、交通运输、商业等，这种权利需要由国家管理机关确认和批准才能成立。

与有形资产权不同，知识产权具有无形性、专有性、地域性、时间性等特点。知识产权对促进科学发展和技术进步，提高商品质量和服务水平，促进国际贸易发展都起到了推动作用。加入世界贸易组织（World Trade Organization，WTO）后，我国知识产权利用和保护面临新的机遇和挑战。

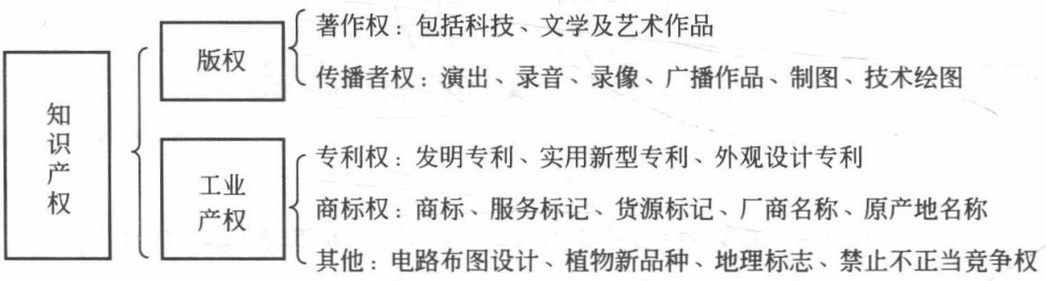


图 4-1 知识产权的主要类型

4.1.2 专利与专利权

在知识经济时代，知识产权在经济和社会发展中的地位和作用越来越重要。专利作为知识产权的核心内容，其重要性日益凸显。

（1）专利 专利的基本概念：发明人所做出的发明创造，经申请被国家专利主管机构批准后，在一定期限内，授予受保护的专利权，即专利权人享有独占利益。如果他人要使用该项专利，应取得专利权人的同意，并协商付给一定报酬；如果他人侵权，则要受到法律的追究。

作为获得这种权利的前提，权利申请人必须以专利（申请）说明书的形式公开自己所申请专利的技术内容及细节。待到保护期满后，专利即从个人占有变为公有，成为社会公共财产，可以推进科学技术的进一步发展。

“专利”的英文名称是 Patent，源自于拉丁文，是由 Royal Letters Patent（皇家特许证

书）一词演变而来，系指由皇帝或皇室颁发的一种公开证书，通报授予某一特权。

“专利”的概念已外延到包含三种意思：第一，从法律角度可理解为专利权。即专利局依照专利法授予发明人的一项发明创造（含发明、实用新型和外观设计）享有的专利权，他人未经过专利权人许可，不得制造、使用和销售该项发明，否则就侵犯该项专利权，会受到法律制裁。第二，从技术角度，是“被保护的技术发明”。即获得专利局认可，并受法律保护的发明。第三，从文献角度理解，是指“专利文献”。查“专利”就是检索（查找）专利文献。

各国的专利大多分为三种类型：发明专利、实用新型专利、外观设计专利。其中，发明专利指对产品、方法或其改进提出的新的技术方案或技术思想；实用新型专利指对产品的形状、构造或组合提出的新的实用技术方案；外观设计专利指对产品的形状、图案、配色或其结合作出的适合于工业上应用的新颖设计。以上3种类型专利，前两种是主要的，占专利文献的90%以上。专利按其类型的不同，各国都规定有一定的保护年限，在保护期内，专利权人对其发明享有垄断权（包括产品生产和市场的垄断）。专利也和其他财产一样，可以自由转让或买卖。

（2）专利权　专利权是指专利申请人就某一项发明创造向专利局提出专利申请，符合专利法并审查合格后，由专利局向专利申请人授予在规定期限内享有的专有权。

专利权具有排他性、时间性、区域性等三特点。其中，排他性（独占性）指专利权人对其发明享有的制造、使用、销售的权利；时间性指专利权只在法律规定的时间内有效；区域性指专利权在某个地区获得，则其只在一定的区域范围内有效。

专利权人的权利包括：①自己实施专利的权利；②专利权人转让其专利所有权的权利；③专利权人许可他人实施其专利的权利；④禁止他人未经许可实施其专利的权利；⑤标明专利标记和专利号的权利；⑥专利权人有从专利实施中获取经济效益的权利；⑦专利权人享有署名权；⑧专利权人有请求法律保护的权利。专利权人的义务是缴纳专利年费。

专利技术的所有人，在法律规定的期限内，享有使用、制造和销售其发明技术的专有权，任何人如果使用其发明必须事先征得专利技术所有人的同意，并支付专利使用费，对未经同意而使用他人专利技术的，专利权所有人有权向主管当局提出控告，要求予以制止，并要求赔偿相应损失。

（3）专利法　专利法是国家制定的用以调整因确认发明创造的所有权和因发明创造的利用而产生的各种社会关系的法律规范的总和。它是专利制度的核心，是实行专利制度的依据。

专利法的主要内容包括：专利申请权和专利权归属、授予专利权的条件限制、专利的申请和审批程序、专利权人的权利和义务、专利权期限终止和无效、专利实施的强制许可和专利权的保护等。

我国专利法所保护的发明创造有三大类：发明、实用新型和外观设计。发明专利权的期限为20年，实用新型和外观设计专利权的期限为10年，均自申请日起计算。对未经专利权人许可的侵权行为，专利权人或者利害关系人可以请求专利管理机关进行处理，也可直接向人民法院起诉。侵犯专利权的诉讼时效为两年。自专利权人或利害关系人得知或应当得知侵权行为之日起计算。

4.1.3　专利制度是科技进步的推进器

专利制度是科技进步和商品经济发达的产物，它是依照专利法的规定，通过授予发明创造专利权来保护专利权人的独占使用权，并以此换取专利权人将发明创造的内容公之于众，以促进发明创造的推广应用，推动科技进步和经济发展的一种法律制度。

专利制度一般具有四项基本特征：受到法律监护、接收科学审查、必须公开通报、可以国际交流。

(1) 专利制度的发展历史　威尼斯共和国是第一个建立专利制度的国家，第一件有记载的专利是1416年批准的关于有色玻璃的制造。英国是近代专利制度的鼻祖，它在1623年制定了专利法，1852年正式成立专利局。美国于1790年，法国于1791年，俄国于1814年，印度于1859年，德国于1877年，日本于1885年，都相继实行了专利制度。中国历史上第一部专利法典于1944年5月29日由中华民国政府公布，1949年1月1日实施，现仅在我国台湾省适用。中华人民共和国于1985年4月1日开始实施专利法，建立了专利制度。

目前全世界大约有160多个国家和地区建立了专利制度，有将近100个国家公布专利申请说明书和正式批准的专利说明书。1970年成立了《世界知识产权组织》（World Intellectual Property Organization)。这是一个促进各国之间在知识产权方面进行合作的国际组织。

专利技术的内容以专利说明书为载体向全世界公开通报。目前，全世界已积累专利2000多万件，每年以大于100万件的速度呈指数函数递增。在2000多万件专利中，只有350多万件是处于有效期内的专利，其余的1000多万件作为专利已经失效。但作为技术情报，它们蕴藏着应用价值。

(2) 专利制度的贡献——科技进步的推进器　在商品经济社会，由于技术封锁，对需要进行交换的商品生产来说，是十分不利的。专利制度在一定程度上为解决这个矛盾创造了条件。这就是向全社会公开技术，然后通过法律来保护专利权。专利经过科学审查，就打上合格标记。这样，为专利技术这个“无形商品”进入市场打开了绿灯。

专利制度是国家利用法律和经济手段，保证和鼓励发明创造，推动技术进步的管理制度。专利制度能够调动各方面从事技术发明人员的积极性。一项创造发明获得专利权以后，能促进产品在竞争中处于十分明显的有利地位。世界上许多实行专利制度国家的经验都证明，专利制度强有力地促进了本国的技术发明发展，调动了广大科技人员探索先进、尖端、适用技术的积极性，结果为整个国家带来了巨大的好处和财富。

从人类社会的角度看，专利制度的实施，极大地促进了人类科学技术的发展，它是人类社会进步的推进器。

4.2　专利信息相关知识

4.2.1　专利技术与专利文献

从技术角度考虑，专利是指受专利保护的技术发明，简称“专利技术”。专利技术的“新颖性、创造性、实用性”是授予专利权的条件。

从文献角度讲，狭义的专利文献指“专利说明书”；广义的专利文献是各国专利局及国际专利组织在审批过程中产生的官方文件及其出版物的总称。

公开出版的专利文献主要有：专利说明书、专利公报、专利文摘、专利索引、专利分类表等。中国专利公报有《发明专利公报》《实用新型专利公报》《外观设计专利公报》，每周出版一次。中国专利说明书有《发明专利申请公开说明书》《发明专利申请审定说明书》《发明专利说明书》《实用新型专利申请说明书》《实用新型专利说明书》。

(1) 专利说明书　当专利申请过程中的不同阶段被公布时，这些不同阶段的专利文献就会反映不同的获得专利权的程度，一般分以下几种类型：申请说明书、公开说明书、专利说明书（又叫公告说明书)、审定说明书。

发明专利申请公开说明书是一种未经实质（专利性）审查、也尚未授予专利权的发明专利申请说明书。公开说明书只进行初步形式审查；授权说明书已审查过专利性，并且出现授权说明书说明已经获得专利权。

专利说明书起了三重作用：第一，起了法律文件作用，公开宣称专利技术归谁所有；第二，起了“商品样品”的作用，专利说明书必须达到有关专业人员看了就能实施的程度；第三，起了科技情报传播的作用。专利是公开了的最及时、最可靠的技术情报，是进行技术发明的重要参考对象。

（2）同族专利与优先权项　同族专利指同一个发明为了在不同国家得到保护，而在这些国家分别申请的一系列内容相同或基本相同的专利。由于同族专利或相同专利都具有相同的优先权项，所以通过优先权项可以方便、快捷地检索出有关同一发明的全部相同专利或同族专利。依靠同族专利，选用自己熟悉的文种去查阅所需专利文献。同时，还可以用它来调查某项发明专利垄断国际市场的范围等情况。同族专利还有助于了解一项发明技术从萌芽阶段到不断改进、发展，以致逐步完善的发展过程。

如果申请人就同一项发明向不同国家申请专利，这样产生的专利文献就会附加上如下一些类型，即基本专利、相同专利、非法定相同专利等。

优先权（Priority）指专利申请人就其发明创造第一次在某国提出专利申请后，在法定期限内，又就相同主题的发明创造提出专利申请的，根据有关法律规定，其在后申请以第一次专利申请的日期作为其申请日，专利申请人依法享有的这种权利，就是优先权。专利优先权的目的在于，防止在其他国家有抄袭此商标者，抢先提出申请，取得注册之可能。优先权分为外国优先权和本国优先权。同一发明或实用新型在一个国家申请，只要时间间隔不超过一定期限，则后来向其他国家就相同主题提出申请，申请日期按最早的那次算。

（3）专利文献的特点、内容构成与作用　专利文献不同于一般的科技文献，专利文献是具有法律规范意义的文献，体现专利制度的法律保护和公开功能，同时也是集科技、法律、经济信息为一体的经过标准化的信息资源。专利文献的特点：①数量庞大，内容广泛；②反映最新科技信息；③著录规范，便于交流；④经审查的专利技术内容可靠。专利文献（主要是专利说明书）加入科技文献的行列，成为其中一类重要文献。

专利文献的内容构成。一般专利文献（专利说明书）通常包含三部分：①题录部分，包括文献号（如专利号、公开号、公告号）、专利国别、专利申请号、专利申请日期、国际专利分类号、本国专利分类号、发明名称、申请人、发明人、受让人（专利权人）。②说明书正文，是关于发明内容的详细介绍，一般包括序言、发明细节叙述、权利要求三部分。序言通常是关于发明技术水平及产生背景的报告。其后是发明的详细描述，并结合实例进行说明。权项一般放在正文的最后，但也有在正文的开始部分。③附图，一般用于解释或说明发明内容或原理，一般放在说明书的最后。

4.2.2　专利组织机构

世界知识产权组织（World Intellectual Property Organization，简称 WIPO）：是 1967 年成立的一个促进各国之间在知识产权方面进行合作的国际组织。1974 年 WIPO 成为联合国组织系统的一个专门机构，总部设在日内瓦。现有 175 个国家成为世界知识产权组织成员国，我国于 1980 年加入该组织。

世界各大洲和相应国家都设有知识产权局或专利局等机构，负责专利的审批和相关事务。例如：欧洲专利局、欧亚专利局、美国专利商标局等，我国专利的审批机构为中华人民共和国国家知识产权局。

4.2.3 专利信息概念及相关网站

专利信息是指以专利文献为主要内容，经分解、加工、标引、统计、分析、整合和转化等信息化手段处理，并通过各种信息化方式传播而形成的与专利有关的各种信息的总称。

随着网络技术的普及，检索专利信息日益快捷方便。目前，通过网络可以查询到有关专利的各种信息，如：专利知识，各种专利法律法规，专利申请步骤，专利审批程序，专利权的终止、维持、撤销等，各地代理机构、涉外代理机构，也可以下载专利申请相关各类表格。常见一些重要的专利信息网站分类如下：

(1) 政府机构网站　如：中华人民共和国国家知识产权局（www. sipo. gov. cn）。

(2) 专业检索网站　如：中国知识产权网（www. cnipr. com）是知识产权出版社主办的知识产权信息与服务网站。中国专利信息网（www. patent. com. cn）国家知识产权局专利检索咨询中心是目前国内科技及知识产权领域提供专利信息检索、专利事务咨询、专利及科技文献翻译、非专利文献加工等服务的权威机构。中国专利信息中心（www. cnpat. com. cn）。

(3) 服务机构网站　如：中国专利保护协会（www. ppac. org. cn），主要在知识产权领域实现政府与企业之间的桥梁、纽带作用。

(4) 分类法相关网站　如：WIPO（www. wipo. int/eng/clssfctn/ipc/ipc6en/index. htm），提供法文和英文的专利分类手册和关键词索引。国际专利分类法（International Patents Classification，简称 IPC）（www. wipo. int/classifications/ipc/en）；USPTO 分类手册（www. uspto. gov/web/offices/pac/clasdefs/index. htm）；叙词表与专业词汇（www. thesaurus. com）。

4.3 专利申请相关知识

科技工作者将自己的创新成果申请专利后，若发现有人侵权，如何判定？判定是否构成专利侵权，既不是以被告的产品与专利权人生产的产品进行比较，也不是以被告的产品与专利文件附图中所示的产品进行比较，而是看被告的产品是否落入专利权利要求的保护范围之中。因此，一项权利要求所述的往往不是一种具体产品，而是具有该权利要求所述技术特征的一系列产品。

4.3.1 中国专利申请条件

发明创造必须符合专利法规定的条件，才能被授予专利权。授予专利权的发明和实用新型应当具备新颖性、创造性、实用性。授予专利权的外观设计应当具有新颖性、创造性、实用性和美感。这就是人们通常说的授予专利权的条件，简单说就是专利条件或专利性。

(1) 新颖性（Novelty）　在专利申请之日以前，该项发明是前所未有的，未被公众所知的。

(2) 创造性（Inventiveness）　比现有的技术水平先进，具有独创性，比以往的技术有显著的进步。

(3) 实用性（Practical applicability）　专利内容必须能够实际运用，能够制造或者使用，并且能够产生积极效果。

专利法是实行专利制度的法律依据，是国家制定的解决有关发明创造权利归属问题和推广利用问题的法律。有资格申请和获得专利权的是：①非职务发明创造的发明人或设计人；②职务发明人或设计人所属的单位；③协作或者委托完成发明创造的单位；④在中国没有经常居所或营业所的外国人、外国企业或者外国其他组织（必须符合一定条件）。

4.3.2　中国专利类型及其特点

发明专利是指对产品、方法或者其改进所提出的新的技术方案。发明专利审批周期长（3～5 年），审查严格，申请费用高，专利权期限为 20 年（自申请日算起）。

实用新型专利是指对产品的形状、构造或者其结合所提出的适于实用的技术方案，保护期为 10 年。

外观设计专利是指对产品的形状、图案色彩或者其结合所提出的富有美感且适于工业上应用的新设计。实用新型及外观设计专利审批周期较短（半年至 1 年），申请费用较低，专利期限为 10 年。

同一件产品申请不同的专利，具有不同的保护效果。

4.3.3　中国专利申请程序

发明创造完成后，不能自动得到专利保护。要想获得专利权，还必须向专利局提出申请，发明专利申请流程如图 4-2 所示。专利局收到发明专利的申请后，经初步审查认为符合专利法要求的自申请日起满 18 个月，即行公布。也可以根据申请人的请求早日公布其申请。发明专利申请自申请日起三年内专利局可以根据申请人随时提出的请求，对其申请进行实质审查，经实质审查没有发现驳回理由的，专利局应当做出授予发明专利权的决定，颁发发明专利权证书，并予以登记和公告。

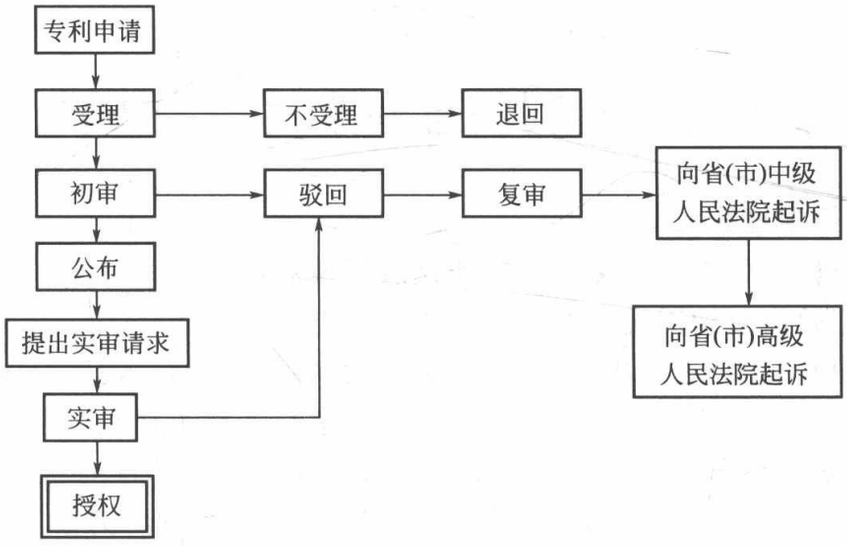


图 4-2　发明专利申请流程

发明人完成一件发明创造后，向专利代理机构提供专利申请书相关材料，代理人按照专利法的要求撰写、修改专利申请文件，然后上报国家专利局。国家专利局受理后即向申请人发出受理通知书，到此即完成全部申报程序，后续的审查程序则由代理机构完成，代理人在对专利局发出的审查意见通知不能准确答复时，即通知申请人，由申请人和代理人共同完成审查意见的答复，直至授予专利权。

4.3.4　如何撰写专利申请书

申请专利并取得专利保护的重要前提应该是撰写出一份拥有较大保护范围的高质量的专利申请文件。申请人可以自己撰写申请文件，也可请专利代理人撰写。

构成专利说明书的主要内容如下：①发明（或实用新型）的名称：简单明了地反映技术内容，该名称一经确定，各项文件及以后的文件均要一致（一般限定在 25 个字以内）。②所属技术问题领域。③现有技术，同时指出现有技术的不足。④发明的目的。⑤发明的内容。⑥发明的效果（或优点）。⑦必要时要提供现有技术的附图。一般附图中不要出现文字。

⑧实施例：列举实施上述内容的实例。用好实施例子，可增加该发明的实施性，提高该发明的分量。实施例的描述要包括构成、作用和效果。必要时可列举多个实施例。

4.3.5 不给予专利的情况

中国专利指的是发明、实用新型和外观设计三种专利。有的发明虽然具备了三性，但是以下情况也不给予专利：①对违反国家法律、社会公德或者妨害公共利益的发明创造不授予专利权（我国专利法第5条）。例如：助长人们饮用酒精饮料的发明、赌博用的玩具、吸毒工具、会爆炸的保险柜、刑罚工具、撬锁工具等。②出于国家利益不能公布的发明。例如：罗斯福与丘吉尔之间的秘密通话装置，在1941年申请后，到1976年才获批准，整整封锁了35年；军事工业的发明不给专利；原子能工业的发明也不受专利保护，由于原子能的和平利用与军事用途一般很难分开，所以不予批准。

我国专利法第25条规定下列5项技术不授予专利权：①科学发现。②智力活动的规则和方法。③疾病的诊断和治疗方法。④动物和植物品种。⑤用原子核变换方法获得的物质。

4.3.6 申请外国专利

向国外申请专利，由于涉及国家利益，因此中国单位或个人将其在国内完成的发明创造向国外申请专利时，应首选向中国专利局申请专利，并按专业系统，经国务院有关主管部门同意后，委托国务院指定的涉外专利代理机构办理。向国外申请专利时，应委托国务院指定的专利代理机构办理申请手续。

4.4 专利信息检索途径与方法

4.4.1 专利文献检索途径

专利文献信息检索的途径较多，包括印刷版资源和网络在线检索，目前主要通过网络检索实施，包括利用政府机构网站、专利检索网站、专业数据库等。

（1）利用各国政府知识产权局网站或专利检索网站　目前，大部分国家的知识产权机构将该国专利信息通过网络公开，因此，可以免费检索与下载专利说明书。例如：中国国家知识产权局专利检索（http：//www.sipo.gov.cn/zljs/）；美国专利检索（www.us-patent-search.com）。另外，Internet也包括大量免费专利检索网站，例如：世界知识产权组织（www.wipo.int/）；欧亚专利组织（www.eapo.org/）；世界专利索引（World Patent Index，WPI）等。

（2）利用专利文献检索工具　利用专利的其他出版形式，包括使用专利数据光盘，以及印刷版专门报道专利的书、期刊等。美国《化学文摘》整合了Derwent（德温特）世界专利索引数据库，可快速检索专利信息。

（3）从其他资源中获取专利信息　有效利用其他资源中的专利信息。例如：关注图书、期刊论文等引用文献中的专利信息；了解产品说明书或产品样本，很多厂家把专利权标记在产品上，也注明了产品的专利号。

4.4.2 专利文献检索方法

根据专利文献与信息领域对专利检索种类认识的演变历史，可以把专利检索分成两大类型：基本检索和专家检索。基本检索是指根据所使用的检索工具的特点和功能划分的专利检索种类，包括主题检索、名字检索、号码检索等。专家检索则是指按检索人通过检索要达到的目的划分的专利检索种类，包括专利技术信息检索、新颖性检索、专利性检索、侵权检索、专利法律状态检索、同族专利检索、技术引进检索等。

专利检索过程大致如下：①确定检索主题名称及检索系统名称；②选择中外文关键词、专利分类号等检索点，确定检索入口；③选择检索方式（手检、机检）；④确定检索系统；⑤记录检索结果：文献号、发明名称、文种代码等；⑥根据文献号找到专利说明书。

读者根据检索目的查找所需专利信息，如果为解决技术攻关中的难题而查找参考资料时，应选择专利技术信息追溯检索。追溯检索可以找到前人在同一技术领域解决难题的具体方案。当人们为开发新产品、新技术而查找技术信息或专利项目作为参考时，可选择专利技术信息的追溯检索或基本检索方法中的名字检索。当人们开发出新产品、准备投放市场时，为避免新产品侵犯别人的专利权，应选择防止侵权检索。当人们有了发明构思或获得新的发明创造时，为保护自身的利益准备申请专利时，为保证能够获得专利权，应选择新颖性检索。当人们进行技术贸易、引进专利技术时，应进行专利有效性检索或技术引进检索。专利有效性检索可以为引进技术的单位提供引进的专利技术是否是有效专利的信息；而技术引进检索不仅提供专利有效性信息，还可提供用以判断引进技术水平的信息。在企业竞争中，及时了解对手的情况是非常必要的，为此，应选择专利申请人、专利权人、专利受让人检索，可随时做到知己知彼，百战不殆。

4.4.3　中国专利信息检索

4.4.3.1　中国专利文献概况

典型的中国专利文献有《专利公报》、《中国专利索引》、《中国专利文摘数据库》。目前，可以通过网站，尤其是国家知识产权局专利检索平台查询相关专利。

一件发明专利从申请到批准共有 4 个号码，一件实用新型或外观设计专利从申请到批准均有 3 个号码。了解、掌握这些号码的含义和它们之间的关系，有利于准确使用有关检索工具，迅速查找我国的专利文献。这些号码（见表 4-1）如下。①申请号：专利申请时，专利局给的号码。②公开号：发明专利申请经形式审查合格后，公开其申请说明书时给的号码，只有发明专利有此号码。③审定号：发明专利经实质审查合格后，公布其审定说明书时给的号码，只有发明专利有此号码。④公告号：实用新型专利或外观设计专利经形式审查合格后，公开其申请说明书时给的号码，发明专利无此号。⑤专利号：专利申请经审查合格后，专利局授权时给的号码。一项发明创造被授予专利权后，申请号即变为专利号，并在专利号前冠以 ZL 两个汉语拼音字母。

表 4-1　中国专利号码及含义（1993 年以后）

专利类型	号码类型	实例	含义
发明专利	申请号	200810231728. X	2008 年代　1 发明　02317828. 流水号　X 计算机校验号
	公开号	CN101367912A	A　公开
	授权公告号	CN101367912B	B　审定
	专利号	ZL200810231728. X	
实用新型专利	申请号	93215139. X	2（第 3 位）　实用新型
	公告号	CN2045678Y	Y 公告
	专利号	ZL93215139. X	
外观设计专利	申请号	93321154. 3	3（第 3 位）　外观设计
	公告号	CN3003022D	D　公告
	专利号	ZL93321154. 3	

中国专利说明书的编号体系，由于 1989 年和 1993 年两次作了修改而分成三个阶段。

1985～1988 年为第一阶段，1989～1992 年为第二阶段，1993 年以后为第三阶段。1985～1988 年，中国专利说明书的编号采用了申请号、专利号、公开（告）号、审定号共用一套号的方式。

4.4.3.2 中国专利信息检索网站

国内检索专利信息的网站分类如下：

（1）政府机构 国家知识产权局（www.sipo.gov.cn）：可下载说明书全文、专利请求书。

（2）专利检索 可以提供专利信息的专业检索服务。

中国专利信息网（www.patent.com.cn）：用户在中国专利信息网既能实时了解和中国专利相关的任何信息，又能方便快捷地查询专利的详细题录内容，以及下载专利全文资料。包含了中国专利局自 1985 年 4 月至今，公布的所有发明专利和实用新型专利的申请。

中国知识产权网（http：//www.cnipr.com/）：是国家知识产权局知识产权出版社在国家支持下创建的。中国专利信息检索系统（search.cnpat.com.cn/Search/CN/）：中国专利信息中心主办。

（3）数据库 万方数据资源系统（www.wanfangdata.com.cn）；CNKI 中国知网（www.cnki.net）等。

（4）免费检索 包括一些免费的搜索引擎。

4.4.3.3 国家知识产权局专利信息检索系统使用实例

国家知识产权局（www.sipo.gov.cn）网站提供了我国的专利检索系统。免费提供 1985 年 9 月 10 日以来公布的全部中国专利信息，包括发明、实用新型和外观设计三种专利的著录项目及摘要，并可浏览各种说明书全文及外观设计图形。

该检索系统提供了申请（专利）号、名称、摘要、地址、分类号等字段的检索入口，并且在多个字段支持模糊检索。其中，字符“?”（半角问号），代表 1 个字符；模糊字符“%”（半角百分号），代表 0～n 个字符。

典型检索方法如下。

（1）进入国家知识产权局专利检索界面（http：//www.sipo.gov.cn/zljsfl/），提供了四种检索路径，读者可以根据自己的需要实施，如图 4-3 所示。

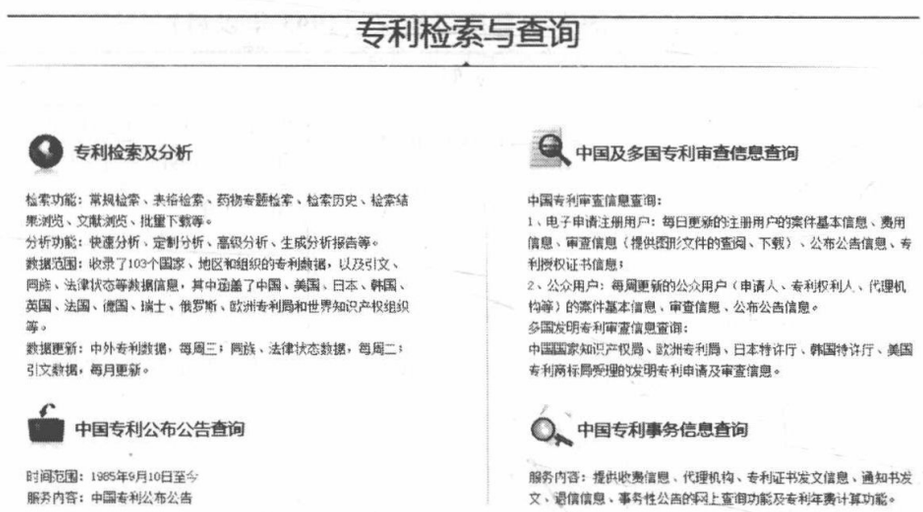


图 4-3 国家知识产权局专利检索页面 1

注意，目前基于国家知识产权局网站检索专利，最好能够在网站注册，要不然只能浏览专利的图像文件，注册登录后点击专利检索及分析，进入检索界面（www.pss-system.gov.cn/sipopublicsearch/search/searchHomeIndex.shtml），如图 4-4 所示。

图 4-4　国家知识产权局专利检索页面 2

（2）在“名称”中输入感兴趣的标题如“絮凝剂 and 高分子”，点击按钮“检索”，结果如图 4-5 所示。

（3）点击检索页面下方的查看文献详细信息”，结果如图 4-6 所示。

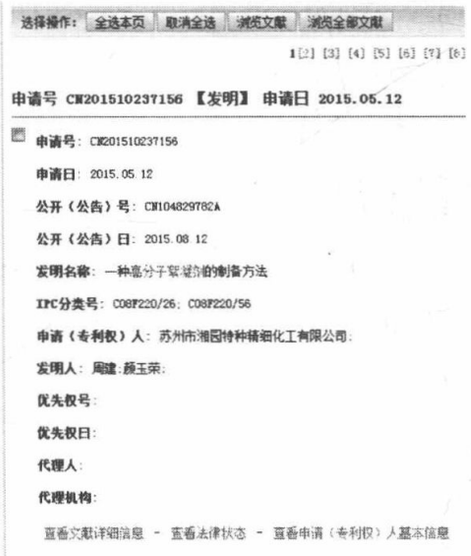


图 4-5　国家知识产权局专利检索页面 3

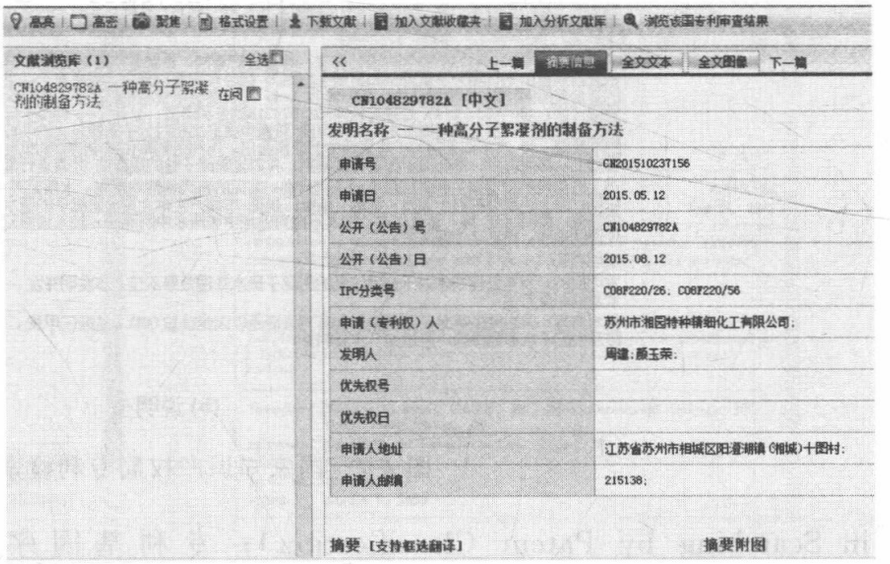


图 4-6　国家知识产权局专利检索页面 4

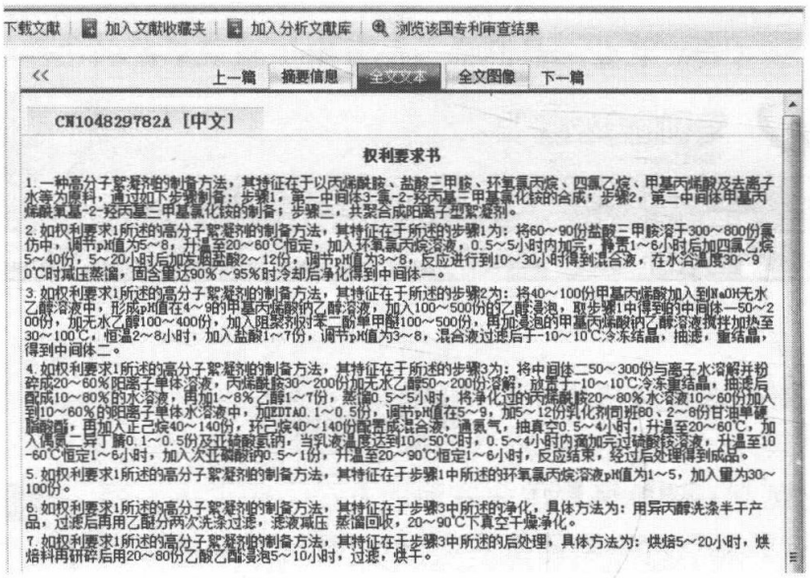
（4）点击“全文文本”，就可以浏览、下载说明书正文 Word 版本；点击“全文图像”可以浏览说明书正文图像版本。浏览过程中可以打印或保存当前页面。

（5）权利要求书和说明书 Word 版本如图 4-7 所示。

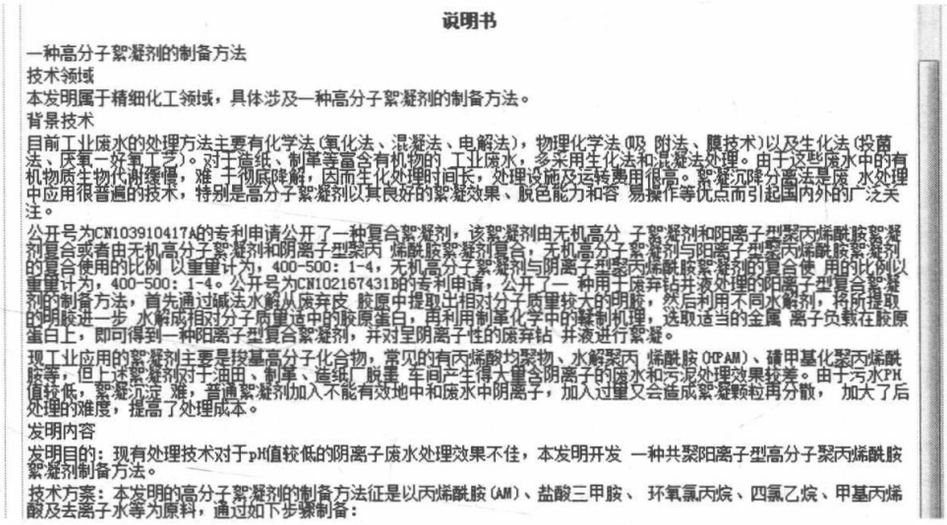
4.4.4　美国专利信息检索

美国专利类型有发明专利（Utility）、设计专利（Design）、植物专利（Plant）、再公告专利（Reissue）、再审查专利（Reexamination Certification）、防卫性公告（Defensive）、依法注册的发明（SIR）。

美国专利数据库：专利授权数据库（Issued Patent）；专利申请公布数据库（Published Applications）；法律状态检索数据库（Patent Application Information Retrieval，PAIR）；专利权转移检索数据库（Patent Assignment Database）；专利分类表数据库（Tools to Help



(a) 权利要求书



(b) 说明书

图 4-7 国家知识产权局专利检索页面 5

in Searching by Patent Classification)；专利基因序列数据库（Published Sequence Listings)；外观专利数据检索。

4.4.4.1 通过美国专利商标局（USPTO）免费检索美国专利

美国专利商标局网站（www.uspto.gov）是美国专利商标局（The US Patent and Trademark Office，USPTO）建立的政府性官方网站，该网站向公众提供全方位的专利信息服务。美国专利商标局已将1790年以来的美国各种专利的数据在其政府网站上免费提供给世界上的公众查询。

(1) 专利授权数据库 进入美国专利商标局政府网站（www.uspto.gov)，进行专利检索时，点击“Patents”下的选项“Patent Search”，可以选择多种检索途径。例如：点击“USPTO Patent Full-Text and Image Databases（PatFT）”可进入Patent Full-Text Databases（专利全文数据库)，该页面中包含有几种检索方式的入口，包括快速检索（Quick Search)、高级检索（Advanced Search)、专利号检索（Number Search）等。

在快速检索（http：//patft.uspto.gov/netahtml/PTO/search-bool.html）提供的两个检索入口Term1和Term2中分别以“flocculant”和“polymer”在Title中进行检索（图4-

8、图 4-9）。检索发现有 5 条专利（图 4-10）。选择其中第一个，即“6,569,968”，就能得到该专利全文（图 4-11）。如果点击“Images”，则以图像型显示全文（图 4-12），发现该专利有 25 页。需要注意的是，如果不显示图像，则需要安装 TIFF 浏览器插件，这可通过 Alternatiff 主页（www. alternatiff. com/install-ie）自动安装。

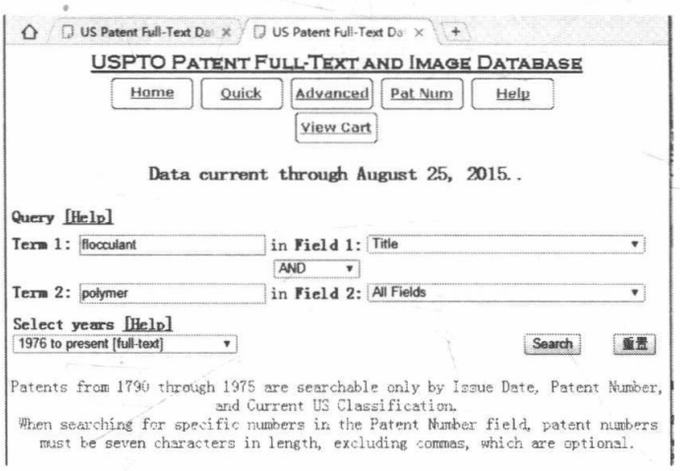


图 4-8　专利授权数据库检索界面

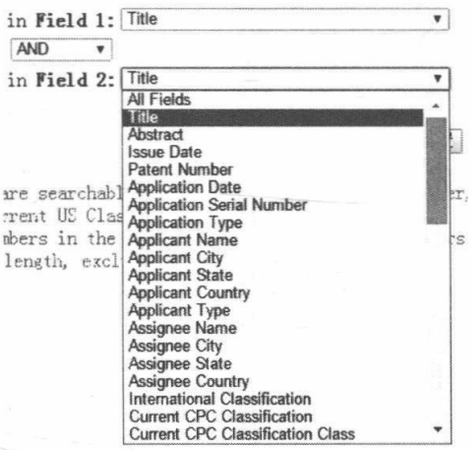


图 4-9　可选择检索词语

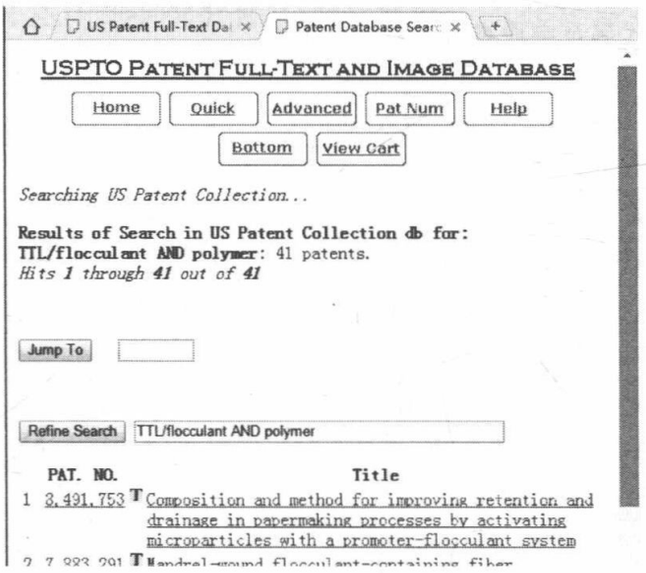


图 4-10　专利授权数据库检索结果列表

图 4-11　文本型（Text）专利全文显示

在高级检索界面上，有一个供输入检索表达式的文本框 Query，一个供选取检索的年代范围的选项（1976 年至今的美国授权专利的全文文本和 1790 年至今的整个数据库内的授权专利），下面的字段框内有 31 个可供检索的字段，包括“Field Code（字段代码）”和“Field Name（字段名）”的对照表。点击“Field Name”可查看该字段的解释及具体信息的输入方式。检索的表示方法为：检索字段代码/检索项字符串。表 4-2 显示检索字段的字段代码及字段名称。

在专利号检索（Publication Number Search）　（patft. uspto. gov/netahtml/PTO/srchnum. htm）界面上，只设有一个专利号检索入口输入框。将已知的专利号在输入框中输入进行检索即可。

（2）专利申请公布数据库　收录自 2001 年以来美国公布的数据。美国专利申请公布检索系统也提供快速检索、高级检索和专利申请公布号检索等三种检索方式。其中，高级检索的检索字段代码及名称有 PD（Publication Date，公布日期）、PN（Published Application

Number，申请公布号）、KD（Kind Code，文献种类代码）。

图 4-12 图像型（Images）专利说明书全文显示

表 4-2 USPTO 检索字段的字段代码及字段名称与中文含义

代码 (Code)	英文全称 (Field Name)	中文名称	代码 (Code)	英文全称 (Field Name)	中文名称
PN	Patent Number	专利号	IN	Inventor Name	发明人姓名
ISD	Issue Date	公布日期	IC	Inventor City	发明人所在城市
TTL	Title	标题	IS	Inventor State	发明人所在州
ABST	Abstract	摘要	ICN	Inventor Country	发明人所在国家
ACLM	Claim(s)	权利要求	LREP	Attorney or Agent	律师或代理人
SPEC	Description/Specification	说明书	AN	Assignee Name	受让人姓名
CCL	Current US Classification	当前美国分类	AC	Assignee City	受让人所在城市
ICL	International Classification	国际分类	AS	Assignee State	受让人所在州
APN	Application Serial Number	申请序列号	ACN	Assignee Country	受让人所在国家
APD	Application Date	申请日期	EXP	Primary Examiner	主要审查员
PARN	Parent Case Information	母专利信息	EXA	Assistant Examiner	助理审查员
RLAP	Related US App. Data	相关国内申请	REF	U. S. References	US 参考文献
REIS	Reissue Data	再版数据	FREF	Foreign References	外国参考文献
PRIR	Foreign Priority	国外优先权	OREF	Other References	其他参考文献
PCT	PCT Information	PCT 信息	GOVT	Government Interest	政府权利
APT	Application Type	申请类型	DN	Document Number	文件号码

（3）专利分类检索 为了能够准确检索专利，美国专利商标局也介绍了收录专利分类，点击 Patents 下拉菜单的“learn about patent classification”，进入 Classification Standards and Development 页面，该页面针对读者对于检索内容分类的了解程度提供相应检索方式。

4.4.4.2 如何检索因未付年费而提前失效的美国专利

相当数量的发明专利在保护期届满之前就失效了。据统计，因未付年费而提前失效的专利占当年批准量的 52%。美国公报为因未付年费而提前失效的美国专利新辟了一个专栏，名为 Notice of Expiration of Patents Due to Failure to Pay Maintenance Fee（因未付年费而

提前失效的专利的通知）。

如何检索一件美国专利是否已因未付费而失效？可以从 1986 年以后的美国公报中的有关栏目查找，但这实际操作很烦琐，因为需要翻检自该专利批准日起 12 年来所有的美国公报。如果使用 CD-ROM 光盘产品，则容易实现上述检索。由美国专利商标局（USPTO）出版的美国专利文摘光盘数据库 Cassis2 收录了美国自 1969 年以来的发明专利、1977 年以来的其他专利（外观设计专利、植物专利）、2001 年 3 月 15 日以来公开的专利申请文献。

4.4.4.3　如何阅读美国专利

专利除了可以保护产品外，专利也像产品的使用手册，有文字及图标叙述产品的组件、特征、用途，以及使用方法。此外，专利信息还包括任何可以从专利局发行的文件中所获得的信息，包括技术资料、市场信息、法律信息以及公司的任何信息。

以美国的“发明专利”为例，专利内容常分为四大部分：

（1）封面　提供专利的基本资料（如专利号码、专利申请日、发明人姓名等）和发明摘要（如图 4-12 所示）。在基本资料旁都印有以［ ］框起来的号码，即 INID 码。每个 INID 码各代表不同的数据项，例如［54］代表发明名称，［75］代表发明人姓名与户籍地。

（2）图标　专利中常会以图标来协助读者了解发明，图式中会对不同的组件标示号码，方便在文字部分作说明。此外，图标对英文非母语的读者也有很大的帮助，对于简单的发明，常常可以用看图说故事的方式了解发明的内容。

（3）说明书的内容部分　包括文字描述。

（4）申请专利范围　申请专利范围的部分包括一个以上的请求项，各请求项以阿拉伯数字依序编号，站在法律的角度，请求项是专利中最重要的部分。请求项是专利中用来界定专利保护范围的地方，也是用来判断是否侵权的指针。

专利文献中有专利相关术语（Glossary of Patent Terms），例如权利项（Claims），又称请求项、权项要求，是用来定义专利的保护范围的部分。在“权项要求”部分，常常在每一零（器）件前加上“said”（该）一词。句子往往很长，有时甚至整段才一句话。文章大量使用官方文件中常用的复合关系副词。例如：hitherto（迄今）、herein（其中，在）、hereinabove（上文）、hereinafter（下文）、heretofore（迄今）、therefrom（由此）、therein（其中）、thereof（它的）、thereon（关于那）、thereto（至该处）、thereafter（此后）、thereinafter（下文）、thereinbefore（上文）、therethrough（由于）、whereat（该处）、whereby（靠）、wherefore（为此）、wherein（其中）、whereof（所述）、whereon（因此，在该处）、whereupon（于是，因此）。阅读时要抓住原文的实质，跳过一些专业术语。太长的句子可作适当的分解或组合。详细信息可参阅相关网站列出的中英文对照的《专利文献相关术语》《知识产权相关组织与条约》和《商标相关术语》。

4.4.5　欧洲专利信息检索

欧洲专利文献数据库（esp@cenet）属于欧洲专利局（EPO，European Patent Office）（www.epo.org），其专利文献检索和阅读的入口为 ep.espacenet.com。欧洲专利文献数据库除了能检索阅读欧洲专利，还可检索美国、日本、PCT 等 50 多个国家和专利组织的专利文献，并能免费获取 20 多个国家的专利文献。文献格式为 PDF 格式，可按页下载。该专利数据库的最大特点是可以查询同族专利（同一个专利在不同国家申请的专利），这样，可以很方便地找到非英文专利的英文文本，便于克服语言障碍。

esp@cenet（ep.espacenet.com）是欧洲专利组织成员国共同在 Internet 上提供的免费专利服务。它提供世界范围的专利数据，并且能检索到数量最多、完整的专利文献。能检索

最近两年内由欧洲专利局和欧洲专利组织成员国出版的专利，世界知识产权组织 WIPO 出版的 PCT 专利的著录信息以及专利的全文扫描图像。还提供欧洲专利局所收集的 1920 年以来的世界各国专利的信息检索，其中 1970 年以后所收集的专利都有英文标题和文摘可供检索。而“比利时专利”（Belgian patents）则仅提供最近两年公开的比利时专利文献。

数据库提供四种检索模式，快速检索（Quick Search）、高级检索（Advanced Search）、专利号检索（Number Search）和分类号检索（Classification Search），支持逻辑式和通配符，比如，查询所有以 micro 打头的词，可以输入“micro*”进行检索。除了使用该入口，欧洲专利局专利文献检索还可以通过其组织的 27 个成员国的入口进行检索，这样，不仅仅提供了不同种语言的选择，还可以检索到该成员国的专利申请文献。表 4-3 为欧洲各国专利局主页地址。

表 4-3 欧洲主要国际专利局主页地址

国家	网址	支持语言
爱尔兰(Ireland)	ie. espacenet. com	英语(English)
爱沙尼亚(Esthonia)	ee. espacenet. com/	爱沙尼亚语(Estonian)
奥地利(Austria)	at. espacenet. com	德语(German)
保加利亚(Bulgaria)	bg. espacenet. com/	保加利亚语(Bulgarian)
丹麦(Denmark)	dk. espacenet. com	丹麦语(Danish)
德国(Germany)	www. epo. org	德语(German)
法国(France)	fr. espacenet. com	法语(French)
芬兰(Finland)	fi. espacenet. com	法语(French)
荷兰(Netherlands)	nl. espacenet. com	荷兰语(Dutch)
捷克(Czech)	worldwide. espacenet. com	捷克语(Czechish)、英语(English)
卢森堡(Luxemburg)	lu. espacenet. com	法语(French)
罗马尼亚(Roumania)	ro. espacenet. com	罗马尼亚语(Romanian)
葡萄牙(Portugal)	pt. espacenet. com	葡萄牙语(Portuguese)
瑞典(Sweden)	se. espacenet. com	瑞典语(Swedish)
瑞士(Switzerland)	ch. espacenet. com	法语(French)、德语(German)、意大利语(Italian)
土耳其(Turkey)	tr. espacenet. com	土耳其语(Turkish)
西班牙(Spain)	es. espacenet. com	西班牙语(Spanish)
希腊(Greece)	gr. espacenet. com	希腊语(Greek)
匈牙利(Hungary)	hu. espacenet. com	匈牙利语(Hungarian)
意大利(Italy)	worldwide. espacenet. com	意大利语(Italian)
英国(United Kingdom)	gb. espacenet. com	英语(English)

4.4.6 日本专利信息检索

日本是专利大国，对日本专利的研究非常重要。日本特许厅（JPO）（www. jpo. go. jp）专利文献检索英文入口为 www. ipdl. inpit. go. jp/homepg _ e. ipdl，提供了日本专利的英文检索入口，方便了不懂日文的人员进行检索。如果精通日文，使用日文进行检索是最好的选择。

英文入口提供了 1976 年以来的日本公开特许（也就是发明申请公开）英文文摘数据库，

并自1993年开始包括了法律状态信息。英文检索结果可以链接到电脑翻译的专利公报全文，如果需要看日文原始文献，只需要点击日文按钮，便可以获得GIF图片格式的说明书。

4.4.7　世界范围的专利信息检索

能够综合检索世界范围专利的数据库，除欧洲专利文献数据库（esp@cenet）外，还有其他一些重要检索网站：

（1）政府机构网站　包括国际、地区组织网站和部分国家专利机构网站，例如世界知识产权组织（WIPO）（www. wipo. int），专利文献检索和阅读的入口为Intellectual Property Digital Library（www. wipo. int/ipdl/en）。世界知识产权组织可以检索PCT专利申请文献，收录了1997年以来PCT公布的专利申请原始资料，专利文献的格式为PDF格式。PCT国际专利（pctgazette. wipo. int）、新加坡专利（www. gov. sg/molaw/rtmp）可查世界各国专利全文，主要为欧美国家专利。

（2）搜索引擎网站　例如谷歌专利检索（www. google. com/advanced _ patent _ search），可在线阅读和直接下载PDF文件，主要为美国专利。PriorSmart，是一个专业的国际通用专利搜索引擎（www. priorsmart. com），可以通过一个简单的界面搜索不同的专利数据库，并下载专利说明书PDF格式全文。

（3）免费网站　免费专利在线（www. freepatentsonline. com），提供美国、欧洲专利的PDF文件下载，需免费注册。The Free Patents Online（www. freepatentsonline. com），是一个功能强大免费的专利查询网站，目前提供美国专利和专利申请、部分欧洲专利、日本专利和WIPO（世界知识产权组织）专利的查询与下载，也提供了化学品（Chemical）检索。

（4）特定类别专利检索网站　IBM知识产权信息网（www. patents. ibm. com）、药物在线专利查询（www. drugfuture. com/eppat/patent. asp）等。

中国国家知识产权局网站（www. sipo. gov. cn）提供了世界各国专利机构、数据库网址，主要是相应国家、地区知识产权局或专利局网站。常见网站有：英国专利网站（England）（www. gov. uk/government/organisations/intellectual-property-office）；澳大利亚专利网站（Australia）（www. ipaustralia. gov. au）；俄罗斯专利网站（www. rupto. ru）提供英文版站点；加拿大专利数据库（www. ic. gc. ca/eic/site/cipointernet-internetopic. nsf/eng/Home）；韩国专利网站（Korea）（www. kipo. go. kr）可选择英文版站点浏览；罗马尼亚专利网站（Romania）（www. osim. ro）；新西兰专利网站（New Zealand）（www. govt. nz）；印度尼西亚专利网站（Indonesia）　（www. dgip. go. id/）；冰岛网站（Iceland）（www. hpo. hu）；香港专利检索（www. ipd. gov. hk/）；台湾专利检索（www. patent. org. tw）。

4.5　《世界专利索引》简介

德温特（Derwent）（www. derwent. com）是全球最权威的专利情报和科技情报机构之一，1948年由化学家Monty Hyams在英国创建。Derwent隶属于全球最大的专业信息集团——Thomson集团，并与ISI、Delphion、Techstreet、Current Drugs、Wila等著名情报机构共同组成Thomson科技信息集团（Thomson Scientific）。德温特出版公司编辑出版的世界专利索引文献形式有：①印刷版《世界专利索引》（WPI）的出版体系；②光盘版；③国际联机版；④网络版。德温特公司已推出网络数据库产品，并通过网络在线方式向用户提供使用。

4.5.1　印刷版德温特专利体系

Derwent出版有《世界专利索引》（World Patents Index，WPI）和《中心专利索引》

(Central Patents Index，CPI) 等多种专利报道和检索系统。CPI 报道化工和材料方面的专利文献分 12 个分册出版，每个分册分别用 A-M（I 除外）中的一个字母表示。分别为：A，Plasdoc（聚合物）；B，Farmdoc（药物）；C，Agdoc（农药、化肥；D，Food，Detergents（食品、洗涤剂）；E，Chemdoc（一般化学品）；F，Textiles，Paper，Cellulose（纺织、造纸、纤维）；G，Printing，Coating，photographic（印刷、涂料、照相）；H，Petroleum（石油、燃料）；J，Chemical Engineering（化学工程）；K，Nucleonic，Explosives，Protection（原子能、爆炸物、防护）；L，Refractories，Ceramics，Cement（耐火材料、陶瓷、水泥）；M，Metallurgy（冶金）。

4.5.2 网络版德温特专利体系

由德温特公司单独制作或与其他单位合作制作的国际联机版数据库主要有以下几种。①德温特《世界专利索引》数据库；②德温特马库会分子结构数据库（Derwent World Patents Index Markush，DARC）；③德温特专利引文索引数据库（Derwent Patents Citation Index，DPCI）；④德温特《生物技术文摘》数据库（Derwent Biotechnology Abstracts，DBA）；⑤英国德温特/美国石油协会联合专利索引数据库（Derwent World Patents Index/API Merged）；⑥化学结构索引数据库（Merged Markush Service，MMS）；⑦德温特基因系列数据库（DGENE）。

德温特公司和美国科学情报研究所（ISI）合作推出了一种基于 Internet Web 环境的数据库产品——《德温特世界专利创新索引》（Derwent Innovation Index，DII）(www. webofknowledge. com/diidw)，可以通过在线方式向用户提供使用。该产品的实质是将《世界专利索引》（WPI、WPIL）与《专利引文索引》（DPCI）的内容加以组合，并且与《科学引文索引》（SCI）链接，以每周更新的速度，提供全球专利信息。因此该数据库不但能够进行一般的专利文献检索，还能够通过专利之间、专利和其他文献之间建立的引证关系，扩大检索范围和深度，并为进行其他研究，例如专利引文分析、机构和个人科研能力及学术水平评价、发展动态调研提供条件。

4.6 专利信息检索技巧

4.6.1 专利文献检索方式的选择

专利文献检索方式的选择要基于自身条件，了解相应检索途径的优缺点，选择合适的检索方式。

（1）利用 Internet 上的免费或者部分免费的专利数据库及网站进行：①各国专利机构及国际专利组织网站；②一些专业性机构建立的网站，主要包括一些数据库网站，例如 NCBI 基因序列数据库网站可以进行基因序列相关专利检索；③其他相近机构网站。

（2）利用以盈利性方式运行的商业性国际联机检索。其特点是检索内容系统、全面，可信度高，但是费用比较高、检索要求较高。

（3）利用印刷版、光盘检索工具进行。例如，利用《世界专利索引》（WPI）、《化学文摘》（CA）等。其优点是使用比较方便，相对其他版本，使用成本比较低。也可利用各个系统出版的光盘数据库进行检索。

4.6.2 专利信息检索操作

（1）应用布尔逻辑运算符　在大多数的 Internet 数据库中，我们可通过布尔逻辑组配的方式编写检索提问式，将专利文献的主题词通过运算符 AND、OR、NOT 连接起来。但使用时应特别注意 NOT 运算符是用来排除另一记录的。

（2）关于最新技术的检索策略　为了查全一个特殊主题的专利文献，须将一切可以利用的检索字段如关键词、分类号、团体或发明者名称都用上。

（3）找相关的国际专利分类号（IPC）　这是检索的第一步。有 4 种基本的方法可以找到与检索的专利文献概念对应的 IPC 符号。此外，美国专利按 USPTO 分类手册（类似于 UCLA）分类。这个手册的原则和 IPC 不同。它的分类号码只能用来查全美国专利。在 USPTO 中常有许多分类号对应一个特殊的概念，但一个特殊的主题在手册中又不一定能找到其唯一对应的分类号。具体见 USPTO 分类手册。

（4）关于 Internet 中专利数据库的族性检索——专利的地域覆盖面　世界上不同地区和国家的专利常有某个字段项相同，即优先权号。如 esp@cenet 虽然不是世界上查全所有相关专利最权威的工具，但它是我们查找世界范围所有相关专利的最好工具。该项查找从“search in worldwide patents”开始，具体步骤：①确定待查地域覆盖面的专利优先权号；②在 worldwide patent 检索项的 PR priority 字段项下依次输入优先权号，如 US85021111 或 US85021113；③结果显示其收藏的相应专利文献。但这不一定是最完整的资料。因为即使某一专利已归档，但它在另一国家的优先权号仍可能还未公开。如一个 WO 专利或 EP 专利在世界或欧洲的几个国家已获得专利保护，但这些国家对此专利还未做最后的审批。因此，要查找更多的详细资料，还应利用商业数据库 INPADOC、专利局或专利资料中心等。

（5）查找专利发明者或团体的名称时应注意的问题　①有多个拼写法。②像“3M”这样的缩略词不一定能检到预期的结果，此时应试着用名称缩略词和全称两种方法检索。这种情况也适用于常以缩略形式出现的第一名字的检索。③一个专利可能已被卖给了另一个团体，但在数据库里只有最初登记的专利拥有者的名字。这时要从数据库中找到新的确切的专利持有人就很困难了。

（6）关注某一领域最新发展的检索　Internet 上专利数据库都在不断地有规律地更新。为了紧跟某一领域的最新发展，可经常查看最新公布的专利文献。其检索方法与常运用的定义了检索轮廓的最新技术的检索一样。

4.6.3　快速获取专利文献——专利下载软件及网站的使用

各个国家的专利文献全文下载很不方便，主要表现为专利文献下载必须用鼠标逐页点击，按页保存，保存好的专利文献也是分成许多个文件，每个文件为专利文献的一页，阅读很不方便。因此，出现了许多专利下载和专利合并软件，大多为免费软件或者共享软件，典型专利下载软件如下。

典型专利下载工具有 GetIPDL、PatSee、PatMate、Patenthunter、PatOrder 及中文专利下载器。大部分专利下载软件解决了下载的麻烦，只要输入专利号，然后点击下载，即该软件自动将相应专利全文下载到本机，并将下载后的多个文件，合并成一个文件。另外，目前一些网站也提供专利打包下载，例如 Drugfuture 网站、佰腾网（www. baiten. cn）等。

使用这些软件或网站，既加快下载的速度，也便于日后的使用和管理。另外注意在中国、美国、欧洲等政府专利局网站提供了图片形式的专利说明书，在浏览时需要安装相关软件，例如 AdobeAcrobat Reader、Alterna TIFF 软件等。

4.6.4　专利文献打包下载软件 Drugfuture 简介

Drugfuture 网站（www. drugfutur. com）提供了中国专利、欧洲专利和美国专利的检索下载，输入专利申请号或公开（公告）号，即可打包下载 PDF 格式专利全文（图 4-13）。

4.6.5　检索非英语国家专利——翻译网站的利用

欧洲的科技发展水平很高，所以专利质量也很高，原创性很强（比较著名的是法国、德国、西班牙、比利时、英国等国家专利）。但对于我们最大的障碍就是法语、西班牙语、德

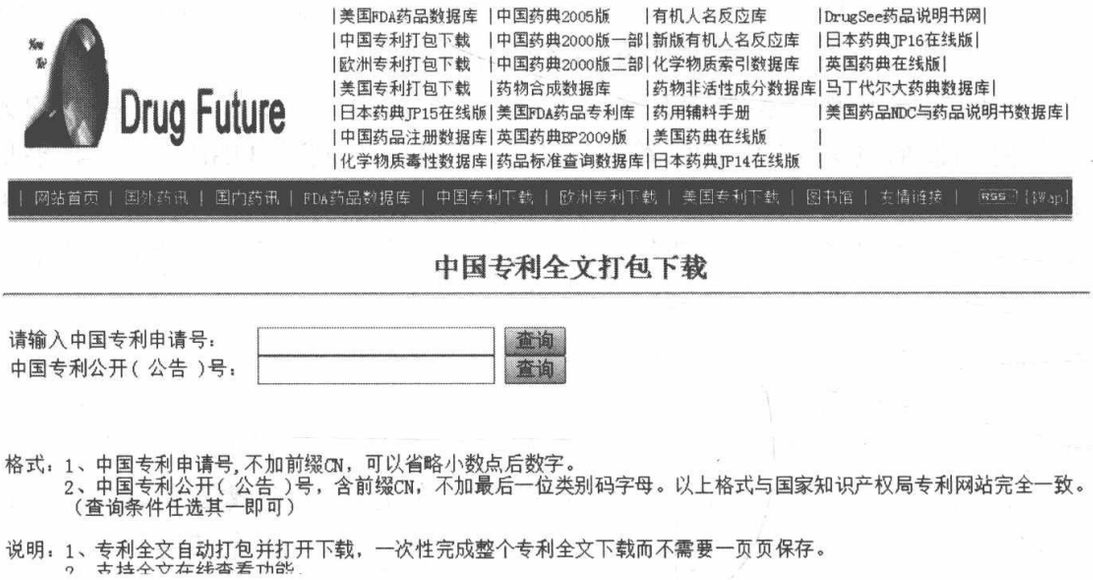


图 4-13 Drugfuture 专利全文打包下载界面

语等语言屏障。然而，语言屏障可通过网络在线词典翻译解决。另外，拉丁语系有一定的相似性，尤其许多专业词汇与英文词汇相同（或相近），因此，基于专业知识，可基本读懂非英语的专利文献。欧洲专利网站由欧洲专利局提供，可用于检索欧洲及欧洲各国的专利，包括欧洲专利（EP）、英国专利、德国专利（DE）、法国专利（FR）、澳地利专利、比利时专利（BE）、意大利专利，以及芬兰、丹麦、西班牙（ES）、瑞典、瑞士等 15 个欧洲国家的专利。

著名的翻译网站有：

（1）Windows Live Translator（translator. live. com/Default. aspx） 速度快，除了支持 500 个字以内的文字在线翻译之外，还提供了 Web 页面翻译，支持中文、日语、韩语、俄语、德语、意大利语、法语、西班牙语等近十种语言。

（2）Google 翻译（translate. google. com） 该网站速度不错，并且不需要输入特殊字符，西班牙语中特有的字符直接用等同英文字母代替，如 á＝a、é＝e、í＝i、ó＝o、ú＝u、& ntilde＝n；从而认识与利用法语、德语中的字符。

（3）西班牙语译成英语（www. spanishdict. com/index. cfm） 法国专利在欧洲专利中可以查到，欧洲专利网站提供了自动翻译功能，可以把法语翻译成英语。比如输入 FR2760015，找到该专利，然后点击 scription 就出现 translate this text，就可以自动译成英文。

4.7 专利信息利用及注意事项

4.7.1 专利信息利用

基于专利的新颖性、创造性和实用性特点，专利信息的使用主要包括两个方面：

（1）参考专利信息来规划研究方向 发明人可藉由专利信息取得技术协助，解决技术瓶颈。并藉由专利信息可以启发研究灵感，避免重复研发或侵犯已取得专利的发明技术。

（2）专利信息中同时包含专利权人的资料，可作为发明人日后考虑合作对象的参考。藉由专利信息来追踪竞争对手的研发进展；发明人可利用专利信息了解竞争对手在相关领域的研究成果以及在市场上的规划。

4.7.2　专利利用要注意的问题

（1）专利文献的局限性　专利文献纵然有许多可贵之处，也有不足之处，特别是把专利文献作为情报加以使用时，应正视这些薄弱之处。专利说明书是一个呈批的文件，撰写者的心理状态是矛盾的，不想过多地披露发明细节，又不得不把技术发明说清楚。专利所代表的技术成果还只是纸面上的，没有工业规模的验证和结论，投产前可能还会作很大改动。因此，专利文献有如下局限性：没有指出发明的具体应用；没有当前的经济观点；缺乏具体实施参数；核心技术隐瞒；有效时间和内容的局限性。

（2）利用专利而不迷信专利　专利一般是实用方法的汇总，高质量的专利说明书，提供了具有经济价值的文献。但是不能迷信专利，由于技术竞争的需要，有些国家（包括我国）的专利质量相当差，或者是没有科技含量。有些专利不具原创性，而是“组合物”专利，只能起到提示作用。所以要特别注意专利的筛选，根据专利申请人的国家、单位，以及相关的论文等信息结合，获得高质量的专利申请书，开展相应的发明创造。

练　习　题

1. 专利文献的特点是什么？

2. 我们从专利中能获得什么信息？

3. 中国专利分哪几类？申请专利需要满足什么条件？

4. 什么是同族专利？什么是相同专利？什么是优先权？

5. 我国于什么时候开始实施专利法？

6. 我国的专利国别代码是什么？

7. 试列举几个检索中国专利的网站名称和地址。请列出检索美国专利、欧洲专利和日本专利的官方网站地址。

8. 试述专利文献在国民经济生活中的重要作用。

9. 为什么可以说专利制度是人类社会进步的推进器？

实践练习题

1. 从中国专利网站检索：

a. 有关脱除室内甲醛的材料与方法；

b. 调湿涂料的主要成分与用途。

2. 以“碳纳米管（Carbon nanotube）催化（Catalysis）”为主题词检索相关美国专利数据库和欧洲专利数据库，试下载一篇文献并阅读。

第 5 章　传统化学化工文献与检索工具

导　语

传统的印刷版化学化工文献中，图书、期刊、专利、科技报告、学位论文、会议文献、标准文献、技术档案、政府出版物、产品资料等是获取资料的 10 种途径。常通过印刷版检索工具（期刊），从分散的文献源中检索有价值的资料。Internet 为检索这些文献源提供了便利的平台。本章分别介绍 10 大传统文献源及其网络检索方法。另外，介绍中英文检索工具。

关键词

检索工具；科技报告；学位论文；会议文献；标准文献；技术档案；政府出版物；产品资料。

所谓传统化学化工文献，是指在网络检索工具之前的纸质印刷版文献。按出版形式分类，主要包括图书、期刊、专利文献、科技报告、学位论文、会议文献、标准文献、技术档案、政府出版物、产品样本和说明书，即人们常说的 10 大文献源，是获取化学化工科技文献的主要来源。随着 Internet 的普及，这些文献不但有印刷版，也有网络版、电子版。本章除简单介绍图书、期刊、专利文献外，重点介绍其他 7 类文献源。另外，还将介绍传统检索工具，概述其主要检索方法。数据库作为特殊的情报源，其重要性日益显著，可以称之为第 11 类信息源，有关数据库将在第 9 章介绍。

5.1　印刷版 10 类文献源及其作用

印刷版各种类型的文献各有特点，各有所用。其内容特征与作用如表 5-1 所示。

表 5-1　印刷版化学化工 10 类文献源及其用途

出版形式	内容特征	用途
科技图书(Books)	是对已发表的科研成果、生产技术或经验，或者某一知识领域系统地论述或概括	了解学科领域基础知识
期刊论文 (Periodicals Paper)	科技期刊论文是在科技期刊上发表的用以交流(或公开)的书面(或电子版)文件，是在科学技术某一领域新的研究成果(或创新见解和知识)的科学记录	科学研究前沿与进展
专利文献 (Patents)	主要指专利说明书，它是专利申请人向政府递送的说明新发明创造的书面文件	开展技术发明、研制新产品
学位论文	是指作者为取得专业资格的学位而撰写的介绍自己研究结果的文献，学位论文在美国称为 Dissertation，在英国称为 Thesis	可参考的系统性研究方法
会议文献 (Proceedings)	有学术会议的报告、记录、论文集及其他文献	掌握科技动态
科技报告 (Reports)	是关于某项研究成果的正式报告，或者是对研究过程中每个阶段进展情况的实际记录	了解国家需求与最新的研究领域
标准文献 (Standards)	是指技术标准、技术规范和技术法规等	定型产品的检验
技术档案 (Technical Archives)	指具体工程建设及科学技术部门在技术活动中形成的技术文件、图纸、图片等原始技术记录	找到可重复的技术方案
政府出版物 (Government Publications)	是各国政府部门及其所属的专门机构发表、出版的文件	了解社会需求与政府导向
产品资料 (Product information)	通常指产品说明书，是对定型产品的构造原理、规格、性能用途、使用方法和操作规程等所作的具体说明	了解产品的结构组成、原理与使用方法

5.2　科技图书、期刊与专利文献

5.2.1　科技图书

科技图书（Books）是对已发表的科研成果、生产技术或经验，或者某一知识领域系统地论述或概括的出版物，详见第 2 章。

5.2.2　科技期刊论文

科技期刊论文（Paper）是在科技刊物上发表的用以交流（或公开）的书面（或电子版）文件，是在科学技术某一领域新的研究成果（或创新见解和知识）的科学记录。详见第 3 章。

5.2.3　专利文献

专利文献（Patents），主要指专利说明书，它是专利申请人向政府递送的说明新发明创造的书面文件，详见第 4 章。

5.3　学位论文

学位论文（Dissertation）是指作者为取得专业资格的学位而撰写的介绍其研究成果的文献。学位论文在美国称为“Dissertation”，在英国称为“Thesis”。常有“Diss.”（Dissertation）标志而且有学位论文编号，如 Order NO. DA 8328940 From *Diss. Abstr. Int. B* 1984，44（8），2428。

常见的学位论文有学士论文、硕士论文和博士论文 3 种。学位论文是非卖品，不发行。学位论文一般不正式出版，以往获取的手续也比较麻烦，因而不宜为读者所利用。1984 年

我国教育部规定，所有研究生的博士、硕士论文，一律交中国科技情报研究所收藏，并提供中国学位论文的缩微胶片。目前，硕博士论文已经可以通过网络及相关数据库查询。

5.3.1 学位论文的特点与用途

化学化工相关的学位论文，尤其是硕士、博士学位论文，其框架结构与期刊论文相似。一般情况下，第一章属于综述论文，后续各章为研究论文，主要包括标题、前言、实验部分、结果与讨论、结论、参考文献等信息，作者、摘要、关键词等信息集中放置。学位论文的作者、全文摘要（中、英文）、关键词等信息集中放置。

从内容来看，学位论文比期刊论文更为翔实，参考价值更高。学位论文大多都比较详尽地总结了前人的工作，再通过科学实验，提出了自己的观点，但其中也有所侧重。一些论文参考了大量的资料，进行了系统的概括，数据资料也比较充分，可作为对某一特定问题的总结。另一些论文则提出了新的论点、新的论据，虽然尚不成熟、不全面，有时甚至还不能作定论，不过对科技工作者来说，仍有其重要的启发作用。

博士论文全文是不同于期刊或书本的一种高水平的全文资料，对于研究和跟踪世界最新科学前沿有不可替代的作用。在韩国、日本和我国台湾地区，收藏论文的服务每年都能达到100万美元以上的订购量。国外的许多学术机构和大学利用其丰富的论文馆藏作为其吸引高级学者和优秀研究生、博士生的一种非常宝贵的资源，是其他形式的媒体（如期刊、图书）所不能代替的独特的学术资源。

5.3.2 国内外学位论文检索系统

（1）中国知网学位论文（www. acad. cnki. net） 包含中国博士学位论文全文数据库和中国优秀硕士学位论文全文数据库，有关内容参阅第3章。

（2）国家科技图书文献中心学位论文查询（www. nstl. gov. cn） 可方便进行中文和外文学位论文检索，并免费获得摘要信息。

（3）CALIS（www. calis. edu. cn） 中国高等教育文献保障系统（China Academic Library & Information System）可获取CALIS高校博硕士学位论文文摘与全文数据库。迄今参加CALIS项目建设和获取CALIS服务的成员馆已超过500家。

（4）万方中国学位论文全文数据库（c. wanfangdata. com. cn/thesis. aspx） 收录自1980年以来我国自然科学领域各高等院校、研究生院及研究所的硕士、博士论文及博士后工作报告共计100余万篇。

（5）中国国家图书馆博士论文库（mylib. nlc. gov. cn/web/guest/boshilunwen） 收藏博士论文近23万种。此外，该中心还收藏部分院校的硕士学位论文、台湾博士学位论文和部分海外华人华侨学位论文。可供在线浏览前24页，不提供电子版的下载和打印服务。

（6）DiVA portal（www. diva-portal. se） 可以检索到瑞典37所大学和机构的研究论文和毕业论文。部分论文可以免费下载。

另外，部分高校如清华大学、北京大学等建有本校学位论文数据库服务系统。如东京大学学位论文摘录数据库（gazo. dl. itc. u-tokyo. ac. jp/gakui/index. html）收录被东京大学授予的论文博士、课程博士的学位论文摘录数据库。

5.3.3 ProQuest博士论文全文数据库

ProQuest Dissertations & Theses（PQDT）（proquest. umi. com/login）学位论文数据库，是美国UMI公司推出的博硕士学位论文网络版。原名为PQDD（ProQuest Digital Dissertations），收录了欧美2000余所大学的160多万篇学位论文，是目前世界上最大和最广泛使用的学位论文数据库。内容覆盖理工、人文和社科等领域。目前中国集团可以共享的论文已经达到近50万篇，涉及文、理、工、农、医等多个领域。

PQDT 具有收录时间长（从 1861 年开始）、报道速度快、报道内容深入等特点。除能够获得题录和文摘外，通过 PQDT 学位论文数据库还可以免费下载 1997 年以来的学位论文的前 24 页。另外 UMI 公司还在 PQDT 全文数据库的基础上建有 PQDT Open 免费开放访问学位论文数据库（pqdtopen. proquest. com），可检索、下载 pdf 格式学位论文全文。

有关 PQDT 相关信息，可参阅清华大学图书馆 ProQuest 数据库平台（lib. tsinghua. edu. cn/database/proquest. htm）、北京中科进出口有限责任公司（proquest. calis. edu. cn）等单位网页介绍。

ProQuest 博硕士论文文摘数据库（www. proquest. com/products-services/dissertations/）（wwwlib. global. umi. com/dissertations/gateway）涵盖了从 1981 年以来的博硕士论文信息。网站页面可选择中文进行浏览，同时国内也有“知网版”（图 5-1）。

图 5-1　全球博硕士学位论文全文数据库页面

5.4　会议资料

科技会议是科技交流的一条重要渠道。会议资料（Conference Proceedings）也称会议文献（Conference Proceedings），包括会议论文、会议程序等文件。其中，会议论文（Conference Papers）是指在学术会议上所做的学术报告、交流的论文及讨论问题的会议录经编辑整理后的正式出版物。会议文献是整个科技文献的一个重要组成部分。

目前的会议种类很多，主要有国际会议、全国会议、地区会议及基层会议。会议类型有学术报告会、专题研讨会、经验交流会（Conference，Symposium，Convention，Seminar，Workshop）等。

会议文献大致可分为会前文献、会间文献和会后文献。会前文献主要指论文预印本（Preprint）、论文摘要（Abstracts）、会议日程表（Proceedings）及代表名单等。会间文献包括会议安排、开幕词、闭幕词、会议记录等，参考价值不大。会后文献指会议论文经修改、整理后出版的资料，大多数会议文献以图书形式出版，部分以专刊、增刊的形式出版或分散在期刊上，也有部分采用缩微胶片、声像等形式出版。近年来，越来越多的会议文献不提供纸质印刷版，只提供电子版论文集。

5.4.1　会议论文的特点与用途

目前，绝大多数科技会议的参会者需要提前提交会议论文（详细摘要或全文），会议组织者经过审查后编辑整理、装订成册，为参会者提供印刷版或电子版论文集。会议论文框架结构与期刊论文相似，大部分会议论文包含标题、作者、单位、关键词、详细摘要（引言、结果讨论、结论）、致谢、参考文献。

在学术会议上，科技工作者宣读论文，讨论相关问题，交流经验与情况。因此学术会议的报告、记录、论文集及其他文献，包含了大量的一次文献。此类文献代表某学科领域的最新成就，反映该学科领域的最新水平和发展趋势。所以会议文献是了解国际及各国的科技水平、动态及发展趋势的重要情报文献。许多学科中的重要发现，有很大一部分是在科技会议

上作为首次公布的成果。一次会议发表的科技论文从数十篇至数百篇，甚至上千篇。时间比科技期刊早，刊登量一般也比科技期刊要大。

值得注意的是，由于会议文献以其新、快为特点，许多会议论文数据的完整性、系统性、成熟性和可靠性不及科技报告和期刊论文。此外，由于会议文献出版的分散性和不规则性，也给文献的收集带来了一定的困难。

5.4.2 会议文献的检索与原文索取

《中国学术会议文献通报》是检索国内学术会议文献的主要检索工具。以题录形式比较全面地报道国内各类专业学术会议论文。下列数据库也可提供国内、国际会议文献检索。

(1) CNKI 中国重要会议论文全文数据库（acad. cnki. net/Kns55/brief/result. aspx?dbPrefix=CPFD） 收录我国 1999 年以来国家二级以上学会、协会、高等院校、科研院所、学术机构等单位的会议论文集。

(2) 万方中国学术会议论文全文数据库（c. g. wanfangdata. com. cn/Conference. aspx） 收录由中国科技信息研究所提供的 1985 年至今世界主要学会和协会主办的会议论文。

(3) 国家科技图书文献中心中外文会议库（www. nstl. gov. cn） 主要收录 1985 年以来国内及世界各主要学/协会、出版机构出版的学术会议论文，部分文献有少量回溯。

(4)《会议录索引——科学辑》(Conference Proceedings Citation Index-Science，CPCI-S) 是美国《科学技术会议录索引》(Index to Scientific & Technical Proceedings，ISTP，四大检索工具之一）的 Web 版，由美国科技信息所（Institute for Scientific Information，ISI）编辑出版。提供 1990 年以来以专著、丛书、预印本、期刊、报告等形式出版的国际会议论文文摘及参考文献索引信息，涉及自然科学和工程技术的所有领域。

(5)《世界会议》(World Meetings，WM） 由美国世界会议情报中心编辑，主要预告两年内全世界将要召开学术会议的有关消息，包括会议名称、内容、地点、日期以及主办机构（Sponsor）和提交论文期限（Deadlines）等。

(6)《会议论文索引》(Conference Paper Indexs，CPI) 由美国世界会议信息中心出版，月刊，可以在 Cambridge Scientific Abstract（www. csa. com）中检索。

机读目录或联机公共目录是获取会议文献信息的有效检索工具。通过一些专门的会议目录或联合目录，如《西文科技会议录联合目录》可查找会议论文的馆藏单位，也可向发行单位订购或通过网络索取会议论文。对以图书形式和期刊形式发表的会议论文，可在相应的图书目录和期刊目录中查找。一般网络索取全文需交费，也可通过包库用户来获取全文。

中国国家图书馆、中国科技信息研究所、中国科学院图书馆以及中国国防科技信息中心收藏的会议文献较多。

5.4.3 巧用 Internet 获得会议原始文献、了解学科前沿

目前，绝大多数国际或国内大型学术会议都建立有相关网页，网页中经常会公开报告人姓名与报告题目，部分会议网页甚至公开主要报告的摘要或全文。因此，只要经常关注相关网页，就能提前获得相关学科的最新动态，下载最新研究成果信息。

通过一些综合网站或搜索引擎可以检索已经召开或即将召开化学会议的相关信息，如在 Google、Bing、Excite（www. excite. com）等综合搜索引擎中，使用“chemical conference”可获得有关化学会议的信息，包括会议的名称、主题、时间、地点以及主办单位和有关 E-mail 地址。在第 7、9 章中，专业数据库或搜索引擎中包含大量会议信息资源。其他途径如下：

(1) IUPAC 化学会议信息（www. iupac. org/home/conferences. html） 可以搜索世界众多学科组织举办的重要学术会议信息，其中主要为与化学学科相关的学术会议。

（2）美国化学会（ACS）ChemCenter的Meeting Locator（www.acs.org/content/acs/en/meetings.html）可免费浏览今后3个月内与化学有关的国际会议消息。

（3）英国皇家化学会（Royal Society of Chemistry，RSC）的Conferences and Events（www.rsc.org/ConferencesAndEvents/index.asp）提供国际会议消息和RSC事务信息。

（4）中国化学会会议信息（www.chemsoc.org.cn/Meeting/Home/）详细提供中国化学会主办的各类学术会议信息。

（5）化学学科信息门户（www.chinweb.com.cn）可查询到大量国内外的会议信息。

（6）高科技学术会议启事网（Calendar of Upcoming Technical Conferences）（www.techexpo.com/events）提供即将召开的高科技领域国际会议，可以对主题词、地点、会议名称、主办者等信息进行检索。

（7）技术会议信息中心（Technical Conference Information Center）（www.techexpo.com/events）提供给用户一个很方便的查询界面，可根据会议名称、内容、组织单位、国家、城市及州来查找即将召开的有关科技会议信息。

（8）会议信息门户Conferencealerts（www.conferencealerts.com）和全球会议门户（www.allconferences.com）可以按照主题浏览。国内有关学术会议的相关网站：中国学术会议在线（www.meeting.edu.cn，教育部科技发展中心主办）；中国会议网（www.chinameeting.com）

另外，许多专业机构利用网上提供的会议平台，组织召开网上虚拟会议，对会议感兴趣的人可以在会议召开之前免费注册，获得参加会议所需要的用户名和密码，上传论文并在规定时间内登录参与在线讨论等。

5.5　科技报告

科技报告（Reports）是关于某科研项目（或活动）的正式报告（或记录），大多是单位（或个人）以书面形式向提供经费和资助部门或组织汇报其成果或进展情况的报告。因内容一般具有保密性，故往往以内部资料的形式出现，或在一定时期后公开。

5.5.1　科技报告的有限使用性

科技报告出现于20世纪初，但自第二次世界大战以来，由于国外不少军事、科研、工业机构利用政府研究报告对内、对外传递科技情报，成为科技文献的一大门类。科技报告基本上都是一次文献（少数书目索引也被编入科技报告）。它的内容比较专深具体，大致可分为基础理论研究和生产技术两大类，在检索工具的文摘中，常有“*Report*”标志。由于它是研究的记录和成果，代表了一个国家和某一专业的科技水平，因而可以对科研工作起到直接的借鉴作用。许多最新的研究课题与尖端学科的资料，往往首先反映在科技报告中。

科技报告的特点：①不拘形式，每份报告独立成册，编有序号；②内容新颖；③研究内容往往涉及尖端项目和前沿课题，有较强的前瞻性；④内容详实专深，既反映成功经验，又有技术失败教训，往往附有详尽的数据、图表和事实资料；⑤发行范围受到控制，大部分属于保密文献，不公开发行，只作内部交流使用。只有小部分在一定范围内公开或半公开发行，绝大部分要在相当长的一段时期之后才被解密公开。

科技报告一般分为保密报告（Classified）、非密限制发行报告（Restricted/Limited）、非密报告（Unclassified）、解密报告（Declassified）。属于机密的报告在认为没有必要保密时可解密而成为公开的文献。但大多数科技报告不在期刊上发表。我国科技报告分为“内部”、“秘密”、“绝密”三个保密级别。

5.5.2 科技报告的主要类型

科技报告是描述科研活动的过程、进展和结果，并按照规定格式编写的一种特殊形式的科技文献，其目的是实现科技知识的积累及在一定范围内的传播和交流。其类型包括专题报告、进展报告、最终报告和组织管理报告。科研人员依据科技报告中的描述能重复实验过程或了解科研结果。

科技报告的类型主要有以下几种：①技术报告（Technical Report，TR），是正式技术文件，内容完整详细，多属总结性的研究报告。②技术札记（Technical Notes，TN），是研究过程的记录和小结，内容不完整，属于试验研究的第一手资料。③技术论文（Technical Papers，TP），是准备在学术会议或期刊上发表的论文，着重于理论而删除了关键的技术内容。④技术备忘录（Technical Memorandum，TM），是同一领域内科技人员沟通时用的材料。⑤技术通报（Technical Bulletin，TB），是对外公布的摘要性文献。⑥技术译文（Technical Translations，TT），是外国有参考价值的翻译文献。

科技报告按其内容可分为研究成果报告、生产报告、评估报告和技术经济分析报告等。

各个国家都有自己的科技报告，但数量最大、品种最多的是美国政府报告。美国政府报告由美国商务部下属的国家技术情报服务局（National Technical Information Service，NTIS）编辑出版，涉及许多学科领域，系统全面地记录了美国科技发展的成就与经验，是美国科技信息中的一个重要组成部分。美国有四大科技报告：①PB（Publication Board）报告，是指美国商务部出版局（Office of the Publication Board）整理出版的资料。最早是战后为了利用德日意等战败国的科技资料，后又开始汇集美国国内各科研机构的研究报告。其内容也逐渐的由军事技术转为民用。包含化学与化工信息。②AD报告（ASTIA Document），是美国武装部队技术情报局（Armed Services Technical Information Agency，ASTIA）的报告文献。报告涉及军事及许多技术领域，其中，数学、物理学、化学以及医学等的内容超过了50%，是从事科技研究的重要情报来源。③DOE（Department of Energy）报告，由美国能源部出版。主要报道美国能源部所属及合同单位的科技报告，内容除涉及能源（能源开发、能源供应、能源管理、安全技术等）外，还有化学化工、材料、工程以及环境科学、地球科学等，是一种综合性的科技报告。④NASA（National Aeronautics and Space Administration，美国国家航空与航天局）报告，内容涉及机械、化工、天体物理、生物等基础学科，是一种综合性的科技报告。

5.5.3 可免费浏览的国家科技报告服务系统

建立国家科技报告制度，对财政科技投入形成的科技信息资源进行全面保存和共享，将为科研人员提供科研基础信息，为科技管理者提供决策支持，为社会公众了解和利用国家科研成果提供服务平台，对于提升国家科技实力和创新能力具有重要意义。

2013年开始，我国科技部在国家科技计划中启动了科技报告试点。2014年，国家科技报告服务系统（www.nstrs.cn/index2.aspx）正式上线（图5-2），向社会公众无偿提供科技报告摘要浏览服务；向专业人员提供在线全文浏览服务；向各级科研管理人员提供面向科研管理的统计分析服务。专业人员需要实名注册，通过身份认证即可检索并在线浏览科技报告全文，不能下载保存全文。

欧美等国家都有系统的科技报告制度。美国政府科技报告工作从1945年开始有组织的开展，目前已形成世界上规模最大、内容最丰富、管理最完善的国家层面上的科技报告管理体系。来源单位主要是美国各级政府机构及其合同户（包括大学、营利和非营利组织、国家实验室等）。美国政府科技报告实行分类分级交流服务模式，在方式上大致划分为公开科技报告、受限科技报告和保密科技报告。其中，提供公开科技报告的交流使用，例如，国家技

图 5-2　国家科技报告服务系统

术信息服务局通过交换收藏其他国家政府及研究单位的科技报告扩大收藏范围，各部门信息中心通过本系统网站提供科技报告服务等。

5.5.4　科技报告的检索工具与免费下载网站

虽然各类科技报告专业内容不同，检索工具名称也不同，但检索途径和方法大致相同。目前，已公开出版的检索科技报告文献的主要检索工具有以下几种。

(1) 美国《化学文摘》(Chemical Abstracts，CA)　CA 收录科技报告，但时间上滞后，且提供的信息不如专用检索刊物系统全面。CA 具体介绍及使用方法见第 6 章。

(2)《政府报告通报及索引》(GRA&I)　是由美国国家技术情报局 (NTIS) 编辑出版用于四大报告 PB、AD、NASA 和 DOE 的文摘性检索工具。它报道全部的 PB 报告、所有公开或解密的 AD 报告、部分 NASA 报告和 DOE 报告及其他类型的报告。

① 美国政府出版局 (United States Government Printing Office，www. gpo. gov)：可了解美国政府机构出版物，并有多个政府报告数据库可检索。

② NTIS (www. ntis. gov)：可免费检索科技报告。NTIS 是美国国家技术情报社出版的美国政府报告数据库，该文摘数据库收录了美国政府几个部门所有的重要报告，以收录美国政府立项研究及开发的项目报告为主，少量收录西欧、日本及世界各国包括中国的科学研究报告。该库 75%的文献是科技报告，其他文献有专利、会议论文、期刊论文、翻译文献。专业内容覆盖科学技术各个领域。

(3) 航空与航天科技报告 (Scientific and Technical Aerospace Reports，STAR) 是 NASA 最主要的专业性检索工具 (半月刊)。文献内容包含化学和材料科学。

NASA Technical Report Server (NTRS) (ntrs. nasa. gov)　是 NASA Centers 提供的航空航天方面的科技报告摘要，可以在 20 个数据库中进行检索。数据库大部分只能看到文摘，部分可获得全文的扫描版。

(4) 能源文摘 (Energy Research Abstract，ERA)　是 DOE 报告的主要检索工具，半月刊，由分类表、文摘和索引三部分组成。美国能源部 (www. doe. gov) 可查找美国能源部 (DOE 报告) 的解密报告。DOE Information Bridge (www. lib. utexas. edu/indexes/titles. php? id=417) 能检索并获得美国能源部提供的研究与发展报告全文，内容涉及物理、化学、材料、生物、环境、能源等领域。

EnergyFiles（www. energyfiles. com）是由美国能源部（DOE）科技信息办公室（OSTI）创办的能源科学与技术虚拟图书馆。包括五个数据库：①EnergyFiles Web Site，提供能源方面的网页和 PD 文件。②DOE Information Bridge，收录 1995 年以来 23 万多篇 DOE 全文报告及文摘索引报告，内容涉及物理、化学、材料、生物、环境科学及能源。③DOE R&D Accomplishments，收录 DOE 过去有重要影响的研发报告，可下载摘要或全文。④DOE R&D Project Summaries，收录 2 万多篇 DOE 在研项目摘要，内容涉及能源研究、化石能源、环境管理、能源效率和可再生能源等。⑤Energy Citations Database，收录 1943 年至今约 260 余万篇能源领域研究论文，可免费访问。⑥Federal R&D Project Summaries（www. osti. gov/fedrnd），可交叉检索 8 个联邦研发项目摘要数据库。

OSTI（Office of Scientific and Technical Information）（www. osti. gov） 可免费检索 DOE 信息。

（5）SciTech Connect（www. osti. gov/scitech/）（www. osti. gov/bridge/index. jsp）可检索 DOE Information Bridge 免费资源。TIB 对于 DOE 调查及发展报告的全文和著书目录提供开放的资源，这些调查及报告记录有关物理、化学、材料、生物、环境科学、可再生能源等。可免费下载全文。

（6）美国国防部科技信息库 STINET（http：//stinet. dtic. mil/dtic/） 免费检索 AD 报告。通过第三方搜索引擎快速检索到一些科技报告的论文，它提供的论文编号可看到论文摘要，部分可免费下载全文。

（7）万方数据资源系统科技成果数据库（c. wanfangdata. com. cn/cstad. aspx） 收录了从 1964 年以来各省市部委鉴定后上报国家科委/科技部的科技成果及星火科技成果，内容包括新技术、新产品、新工艺、新材料和新设计等技术成果项目，总计约 80 余万项，内容涉及自然科学的各个学科领域，每月更新。

5.5.5 科技报告的原文索取

以 NTIS 订购号在国内收藏部门索取或通过网络索取，也可直接向 NTIS 订购科技报告的复印件或缩微胶片。中国科技信息研究所、上海科技信息研究所有四大报告的原文馆藏；中国国防科技信息中心有大量 AD、NASA 报告；核工业部有 DOE 报告；中国科学院文献信息中心是收藏 PB 报告最全的单位。

当然，目前可通过免费网站检索与下载各国政府公开的科技报告。

5.6 标准文献

标准文献（Standard Documents）是技术标准（Technical Standards）、技术规范（Technical Specification）和技术法规（Technical Regulations）等的统称。是人们在从事科学试验、工程设计、生产建设、技术转让、国际贸易、商品检验中对工农业产品和工程建设质量、规格及其检验方法等方面所作的技术规定，是从事生产、建设和行政、组织管理时需共同遵守的具有法律约束性的技术依据和技术文件。每一件技术标准都是独立完整的资料。它作为一种规章性的技术文献，有一定的法律效力。标准资料也是一种主要科技情报来源。通过它可以了解有关国家的工业发展情况，也可以供我国研制新产品、整顿老产品、改进技术操作水平等方面参考和借鉴。

标准文献按标准的约束性分为强制性标准和推荐性标准。按照标准化对象，通常把标准分为技术标准、管理标准和工作标准三大类。从技术内容分，有计量单位、符号、术语、尺寸、形式、品种、基本参数、技术要求、试验方法、计算方法、工艺过程、包装标志、运

输、保藏等标准。

标准的新陈代谢非常频繁。随着经济条件与技术水平的改变，技术标准常常不断进行修改或补充，或以旧代新，或过时作废。

5.6.1　国际标准组织及相关网站

国际标准是由国际标准化团体批准或由国际标准组织认可的各种国际专业学会、协会等组织制定的标准。如ISO标准、IEC标准。通过这些组织的网站可以检索标准信息。

(1) ISO标准（www.iso.org/iso/home/standards.htm）　是由目前世界上最大、最具有权威性的国际标准化专门机构，即国际标准化组织（International Organization for Standardization，ISO）制定的标准。ISO下设178个技术委员会（Technical Committee，TC），近600个技术委员会分会（Sub-Committee，SC）和约1500个工作组（Working Group，WG），其成员来自世界各国的专家。

检索ISO标准的工具是《国际标准化组织标准目录》（ISO Catalogue），报道ISO的现行标准（包括新近批准生效和废止的标准）。ISO目录有主题索引（Subject Index）、标准号序表（Listin Numerical Order）、作废标准目录（Withdrawals）、ISO技术委员会编号对照索引（UDC/TC Index）以及技术委员会序号目录（Technical Committee Order）等。通过ISO主页可免费检索相关标准。

(2) IEC标准（www.iec.ch）　国际电工委员会（International Electrotechnical Commission，IEC）标准，是与ISO并列的两大国际性标准组织之一，专门负责电子电工技术方面国际标准的制定。主要包括综合性基础、电工设备材料、日用电器及通信设备、各类仪器仪表等。

(3) ASTM标准（www.astm.org）　由美国实验与材料协会（American Society for Testing and Materials，ASTM）制定。主要涉及工业用材料和产品性能方面的标准，大部分标准与化学化工有关，是美国国家标准的重要组成部分，也是应用研究常使用的标准之一。《ASTM标准年鉴》是ASTM标准的主要检索工具。由总索引和专业标准两大部分组成。总索引含有主题索引（Subject Index）和标准号索引（Alphanumeric List）。

(4) 美国国家标准与技术研究所（National Institute of Standards and Technology，NIST）（www.nist.gov）　提供了仪器测量标准，包括化学制造、能源、生物技术等。通过此网站可以查询大多数化合物相关光/色谱数据，如XRD、XPS、IR、MS等。

(5) 国际自动化学会（International Society of Automation，www.isa.org）　一个全球性的非营利组织，负责制定自动化标准，出版相关标准资料，提供培训与教育。

此外，常用的标准还有美国国家标准（American National Standards Institute，ANSI标准）、英国国家标准（British Standards Institution，BS标准）、日本国家标准（JIS标准）、全俄国家标准（ГОСТ）、德国国家标准（DIN）和法国国家标准（NF）等。

5.6.2　国内技术标准

我国标准分为国家标准、行业标准、地方标准和企业标准四级。技术标准的编号结构为：标准代号＋标准顺序号＋制定或修改年份。

(1) 国家标准　是指在全国范围内统一使用的标准，由国家标准局组织审定并发布。国家标准分为正式标准和推荐性标准，其正式标准的代号为“GB”（即“国标”的汉语拼音的首字母），如GB 209—2006《工业用氢氧化钠》；推荐性标准的代号为“GB/T”，如GB/T 16496—1996《化学试剂 硫酸钾》。

(2) 行业标准　是指在全国的行业范围内统一的标准。原有的代号为“ZB”的专业标准，如ZB G12023—90《牙膏工业用磷酸氢钙》，现已过渡为行业标准。

（3）地方标准　是指某一地方制定并执行的标准。地方标准代号为“DB”，一般针对有地域特色的产品而制定，如 DB32/T 1438—2009《亚氨基二苯的含量分析核磁共振氢谱法》。

（4）企业标准　是指由企业制定的标准。一般在国家标准和部颁标准尚未颁布或企业为了提高产品质量制定的比国家标准和部颁标准要求更高的“内控标准”时采用。企业标准的代号为 Q（即“企”字的汉语拼音首字母）。

5.6.3　标准文献检索与免费下载

国家及各省、市的质量技术监督局收藏的标准文献较为齐全。此外，专业应用研究机构常有相应专业的有关技术标准收藏。通过网络或一些专门的目录检索，如《中华人民共和国国家标准目录》等查找所需的标准信息，通过网络或收藏单位索取。

国内外标准文献有相同的检索途径。主要有分类、标准号、主题词三种。标准文献的检索步骤见图 5-3。

目前，可通过 Internet 搜索和下载化学化工标准资料，部分网站可下载全文。典型网站如下：

（1）国家标准化管理委员会（www. sac. gov. cn）　属于政府网站，有法律法规、国家标准公告、国家标准计划、国家标准修改通知、标准化动态、全国专业标委会等内容。

（2）中国标准化研究院（www. cnis. gov. cn）是我国从事标准化研究的国家级社会公益类科研机构，提供权威标准信息服务。

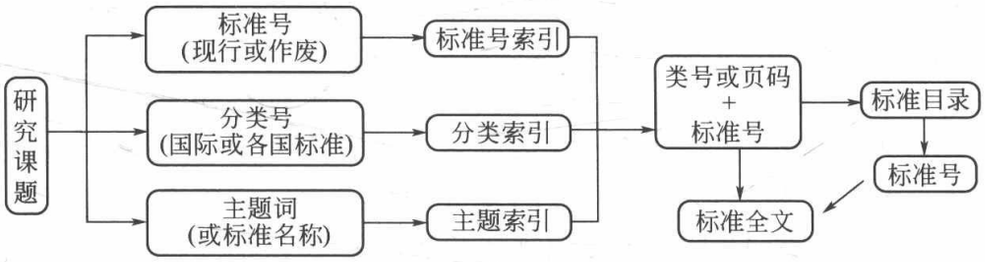


图 5-3　标准文献的检索步骤

（3）国家标准文献共享服务平台（www. cssn. net. cn）　是国家标准馆的门户网站，提供标准动态信息采集、编辑、发布，标准文献检索，标准文献全文传递和在线服务等功能。

（4）中国标准化协会信息网（www. china-cas. org）　传播我国标准化工作现状、企业采用标准、技术及产品等信息，免费提供标准的简介。

（5）美国文献中心（www. document-center. com）　是一个查询并从 Internet 上投寄有关政府及工业标准的服务器，可查到美国国防部及美国实验与材料协会（ASTM）的标准。

（6）万方数据中外标准数据库（c. wanfangdata. com. cn/Standard. aspx）　是国内开发的标准文献最全的数据库。内容包括中国行业标准、中国国家标准、国际标准化组织标准，以及美国、英国、德国、法国、日本等国家标准，每月更新。

此外，各省市质量技术监督局的网页也可进行部分标准的查询，如广东省质量技术监督局（www. gdqts. gov. cn）、广州市质量技术监督局（www. gzq. gov. cn）网站。

一些专业性网站也常含有标准文献数据，如：中华食品网（www. foods-info. com）可免费检索食品（包括食品添加剂）的相关国家标准；中国环境标准网建立环境标准项目管理数据库（www. es. org. cn/cn/index. html），可检索环境相关技术标准；中国环保网可检索到环境保护标准的全文（www. chinaenvironment. com）。

5.7　技术档案

技术档案（Technical Archives 或 Technical Dossier）是指具体工程建设及科学技术部门在技术活动中形成的技术文件、图纸、图片、原始技术记录等资料。

科学技术档案（科技档案）主要产生于从事自然科学研究、生产技术和基本建设等活动的单位，包括图纸、图表、文件材料、计算材料、照片、影片以及各种录音、录像、机读磁带、光盘等，是档案的一大门类。一些专业主管单位也颁发有关科技工作的指示、决定、规程、规范和审批文件等，在基层科技单位也将这些文件归入科技档案中。这些材料是科研工作中用以积累经验、吸取教训的重要文献。

技术档案大多由各系统、各单位分散收藏，一般具有保密和内部使用的特点。因此在参考文献和检索工具中极少引用。

5.8　政府出版物

5.8.1　政府出版物及法律法规

由各国政府部门及其所属专门机构负责编辑、采用印刷或其他方法印刷的、并通过各种渠道发送或出售的文字、图片以及磁带、软件等，均称为政府出版物（Government Publications）。它是政府用以发布政令和体现自己的思想、意志、行为的物质载体，同时也是政府的思想、意志、行为产生社会效应的主要传播媒介。目前，大部分政府出版物通过网络公开。

政府出版物内容广泛，其中科技文献占 30%～40%，通过这类文献可了解一个国家的科学技术、经济政策、法令、规章制度等。政府出版物按其形式主要分为三类：第一，政府颁布的法律、法令、行政法规、条例等；第二，政府的公文；第三，政府的机关报纸、刊物及其他宣传、信息资料。

政府出版物的作用和影响覆盖全社会，其主要作用为：①对外公布各级政府政策法规，引导社会趋向；②指挥和协调政府各部门之间的工作；保证和维护政府机构工作的正常运转；③传播和沟通政府内部与外部、各级政府之间、各国政府之间的信息。

法律法规本身是公开的资源，但世界上的法律法规之多不可胜数，学会搜索这些资源对化学学习研究、工商业活动有很大用处。涉及化学化工领域的法律法规很多，如化工生产、安全、健康、卫生、环境保护、物质储运、有毒化学品的管理等。

中国国家图书馆“国际组织与外国政府出版物阅览室”收藏自 1949 年以来联合国总部及其下属 17 个专门机构、美国政府、欧共体（欧盟）、经济合作发展组织、美国国会信息服务公司、美国兰德公司以及其他近百个国际组织的出版物。

5.8.2　通过政府网站免费获取政策法规

目前，世界各国政府陆续将政府信息通过政府网站公布各种政策、法规信息，并提供了各种重要链接等。我国政府十分重视政府网站的建设，新型网站不断增多。

一些重要的政府网站如：中华人民共和国科学技术部（www. most. gov. cn）、中华人民共和国教育部（www. moe. edu. cn/）等。也可从政府主办的网站或行业网站检索信息，如：中国科技情报网（www. chinainfo. gov. cn）、中国化工信息中心（www. cncic. cn/）等。

法律法规的搜索可以使用通用工具，也有专门提供法规服务的站点，如中国法律信息网（service. law-star. com）、化学联盟（www. chemalliance. org，是美国一个专门提供对化学

工业有影响的联邦法规的最新信息的一站式在线资源服务站点）等。

如果已知某个法规的名称，可以直接使用搜索工具进行搜索。例如：美国著名的空气清洁法案 Clean Air Act 及其修正案 Clean Air Act Amendments，通过搜索引擎可找到美国环境保护署网站上的具体内容（www. epa. gov/air/caa）。又如有毒物质控制法案 Toxic Substances Control Act（TSCA）的搜索等。

5.8.3 大数据时代政府网站的有效利用

Science. gov（www. science. gov）是检索美国政府科学信息的通道，目前已经发展到第5代，可检索60个科学数据库与2亿科学信息主页，以及超过2200个科学网站（图5-4）。内容包括传统10种文献源，以及新闻、百科等多项信息。

图5-4 Science. gov 搜索界面

5.9 产品资料

5.9.1 产品样本和说明书

产品资料（Product Information）包括产品样本（Catalogue）和说明书（Specification）。产品样本是国内外生产（或经销）商为推销产品而印发的企业出版物，用来介绍产品的品种、特点、性能、结构、原理、用途和维修方法、价格等。查阅、分析产品样本，有助于了解产品的水平、现状和发展动向，获得有关设计、制造、使用中所需的数据和方法，对于产品的选购、设计、制造、使用等都有较大的参考价值。由于产品不断更新，因此产品样本也容易过时。

产品说明书是生产商用来说明产品的性能和使用方法的技术资料。一般每种产品一册（或一套）。产品说明书的内容比产品样本详细和具体。它大体包括产品的性能、规格、用途、结构（或电路）、工作原理、操作使用方法、安装维修（或校准）方法、零件部件目录等，并附有产品的图形照片以及必要的技术数据。这类资料国外通称为说明书（Specification），有的称为“说明手册”（Instruction Manual 或 Description Manual）、“操作与维修手册”（Operation and Service Manual）、“用户手册”（User's Manual）等。有的说明书只有产品性能、操作使用方法等内容，称为“操作手册”（Operating Manual）或“操作指南”（Operating Guide）等。

样本和说明书对化学研究工作者来说，使用价值并不是很大，但对化工产品设计和化工设计人员有较大的参考价值。

一些国际性大公司或高端企业在技术上比较成熟，因而对编制新产品的试制规划、产品设计、试制、造型等都有较大的实际参考价值。此外，外贸部门和使用单位为了选购国外产品，有时在查阅产品样本的基础上，还要进一步查阅产品说明书，详细了解有关产品的性能、特点和结构等内容，以决定造型或是否进口。产品说明书也是使用部门对进口产品进行安装、使用、计量、校准、维修的重要参考资料。

5.9.2 通过生产、经销商网站免费检索产品资料

为了便于查找或掌握产品的发展动向，各国（或企业）都出版有检索工具，大部分是免

费提供的。

随着网络的发展，国际国内生产、经销商开始关注产品网站的建设。为了吸引顾客，一些公司提供了除包装、规格、价格以外的产品详细参数，如：Sigma-Aldrich 公司的网页（www. sigmaaldrich. com）提供了名称、结构等检索途径，如：Product Name、Product Number、CAS Number、Molecular Formula、Select an Identifier、Keyword（Full Text）、Supplier Part Number。读者可以利用该网站查询各种试剂的英文名称、结构、物理参数以及安全参数等众多信息。

详细内容参加第 7 章。

5.10　传统化学化工文献检索工具

检索工具是用来存储、报道和查找文献资料线索的工具。它是在一次文献的基础上，经过加工、整理、编辑的二、三次文献。

任何检索工具，都具有存储和检索两个基本职能。一方面把文献的特征一一著录下来，成为一条条文献线索并将其体系化，这就是文献的存储过程；另一方面，它能够提供一定的检索手段，从中检索出所需文献线索，这是文献的检索过程。检索工具具有以下特征：①对收录文献外部特征（如篇名、著者、出版地等）和内容特征（摘要、述评）进行描述；②能提供各种检索标识和途径，如分类、主题、著者以及其他如文献序号等；③有比较完备的检索体系。严格的讲，只有具备上述条件，才能称为检索工具。

正因为检索工具具有以上职能和特征，科学工作者可以省去大量查阅文献资料的时间，较快地获取大量的情报信息。因此，学会使用检索工具，是人们了解和掌握科技动态，进行科学研究的捷径。

搜索引擎是网络时代的检索工具。目前，许多手工检索工具已经被数据库所取代。这里只对重要手工检索工具进行简单介绍，以便网络尚未完善的地区能够充分利用现有条件对化学信息进行查阅。

5.10.1　手工检索工具

一部完整的检索工具通常由使用说明、著录正文、索引和附录几部分组成。正文由题录（或目录）、文摘组成。检索工具按著录方式可分为目录、题录、文摘和索引。

5.10.1.1　手工检索工具的主要类型

① 目录（Bibliography、Catalogue）　是对图书、期刊等出版物特征的揭示和报道。是历史上出现最早的一种检索工具类型。目录主要用于检索出版物的名称、著者及其出版、收藏单位。常用的目录有国家书目、馆藏目录、专题目录、联合目录、出版发行目录、期刊年终目录（一般期刊的年终最后一期有全年的目录）等。

② 题录（Title）　是对单篇文献外表特征的揭示和报道，著录项目一般有篇名、著者、文献来源、文种等。其著录项目比较简单、收录范围广、报道速度快、揭示文献内容很浅，只能作为临时过渡性检索工具。文摘一出版，它的作用就被文摘所代替。如：美国《化学题录》（Chemical Titles），我国的《全国报刊索引》也属这种类型。

③ 文摘（Abstract）　是系统报道、累计和检索文献的主要工具，是二次文献的核心。文摘以单篇文献为报道单位，不仅著录一次文献的外表特征（即文献的标头部分），还著录文献的内容摘要。不看原文，往往便可决定文献资料的取舍，从而节约查阅原始文献资料的时间。国际上化学类最著名的文摘是美国的《化学文摘》（Chemical Abstracts）。

④ 索引（Index）　是揭示各种文献外部特征或内容特征的系统化记载工具。大多数索

引不能直接查到原始文献资料。学习检索工具的使用方法，主要是学习索引的使用方法。如：CA 索引分主题索引、作者索引、分类号索引、期索引、卷索引、累积索引等。

除上述几种典型的检索工具外，参考工具书（Reference Tools）（见第 2 章）、综述与述评（Review）（见第 3、11 章）、简报（Bulletin）、文献指南（Guide）等也具有检索功能。其中，简报是根据实际需要精选出来并加以编辑出版的一种文献报道形式，是介于文摘与题录之间起补偿作用的一种形式。通过阅读简报来了解有关文献的主要内容，能节约不少时间，是一种辅助性检索工具。文献指南就某学科领域主要图书、期刊及其他类型文献的状况及检索方法，介绍各有关检索工具的使用方法。这种指南性读物，对于要着手进行检索的人来说，能提供文献检索策略的参考，启发检索思路，提高文献检索的水平。

据统计，世界范围文献检索工具数量约 2000 种，其中直接和间接报道化学化工文献的，约有几百种。印刷版检索工具正在被网络版取代。

5.10.1.2 国内科技文献印刷版检索工具

中文科技文献检索工具，是用中文报道我国和美、俄、日、德、英、法等国家出版的科技文献，大致有以下三种类型：一是只报道国内出版物的文献；二是翻译国外检索工具中的有关内容；三是部分报道国内外的有关文献。其优点是用中文报道，无语言障碍，所报道的文献国内有收藏，易于获取原始文献。

典型报刊期刊检索工具有：①《全国报刊索引》。为目前国内特大型文献数据库之一。②《中文科技资料目录》。专门报道国内期刊论文、会议文集和专题资料、译文等的刊物。有化学工业、综合科技与基础科学等 34 个分册。③《中国学术期刊文摘》。④《中文科技资料馆藏目录》，报道中国科技情报所收藏的各种中文科技资料。

科技图书检索工具：①《全国总书目》。是目录工具书；《全国新书目》是为补充报道全国新书出版情况而编的月刊。②《科技新书目》和《社科新书目》。是预订中文图书的主要目录工具。

其他文献检索工具：①《国内学术会议文献通报》。是专门报道全国性学术会议，专业会议及其他会议论文的检索刊物。②《科学技术研究成果公报》。公布经国家科委研究成果办公室正式登记的重大成果。③《中国学位论文通报》。④《中国标准化年鉴》。⑤《标准新书目》。⑥《中华人民共和国国家标准目录》。⑦《中国专利索引》和各种专利公报是检索中国专利文献的工具。

国内早期出版的印刷版检索工具并不系统，有停刊与复刊的情况。目前，大部分检索工具已经停刊或被网络数据库替代。

5.10.1.3 检索印刷版国外科技文献的工具

检索国外期刊论文和科技资料的工具：《国外科技资料馆藏目录》《国外科技资料目录》《全国西文期刊联合目录》（科技部分）、《外国报刊目录》《科学技术译文通报》，以及其他科技文摘刊物，如《橡胶文摘》《化肥工业文摘》《分析化学文摘》《化工机械文摘》等 80 多个专业分册。

检索国外科技图书的工具有《外文新书通报》，以及各种外文图书征订目录，如：《外文图书征订目录》《国外新书征订目录》《国外新书预订目录》等。

检索国外其他文献的工具：①《ISO 国际标准目录》。②《国外标准资料报导》。③《政府报告通报及索引》（GRA&I）。④《航空与航天科技报告》（STAR）。⑤《能源研究文摘》（Energy Research Abstracts，ERA）。⑥《世界会议》（World Meeting）。⑦《会议论文索引》。⑧《国际学位论文文摘》（Dissertation Abstracts，International）。由美国的大学缩微胶片公司编辑出版。

目前，国内出版的上述大部分印刷版检索工具已经停刊。

5.10.2　国内化学化工相关文摘简介

随着网络的迅速发展，部分传统印刷版文摘被电子版替代，部分已经停刊，也有一大部分转型为原始研究论文或综述类期刊。尚保留文摘内容的有：

(1)《化纤文摘》大量报道国外有关化纤工业的科技文献资料，并提供世界各国化纤工业发展的新信息。现有网络版。

(2)《石油与天然气文摘》每期收录国外科技文献的文摘或题录 1000 篇以上，是油田相关单位和石油科技工作者重要的科技检索工具。

(3)《中国石油文摘》1985 年创刊，收录范围包括石油工业上下游的 12 个专业；收录的文献类型有期刊、论文、汇编、内部资料、专利、标准等。每期收录国内外科技文献 2500 余篇，其中 95%为文摘，5%为题录。现尚无网络版。

已经改型的文摘有：①《中国无机分析化学文摘》，2011 年更名为《中国无机分析化学》。②《精细石油化工文摘》，2000 年起改名为《精细石油化工进展》。③《化工文摘》，原《中国化工业》，2010 年改为《自动化应用》。④《涂料技术与文摘》，创刊于 1962 年，原名《涂料文摘》，2006 年起将《涂料涂装资讯》合并。⑤《环境科学文摘》，现改名为《环境工程技术学报》。已经停刊的国内文摘有：《中国化学化工文摘》《日用化学文摘》《分析化学文摘》。

5.10.3　国外重要文摘及其网络版

(1) 美国《化学文摘》(Chemical Abstracts，CA)　创刊于 1907 年，由美国化学会化学文摘社 (Chemical Abstracts Service，CAS) 编辑出版，是检索化学化工文献的主要工具之一。详见第 6 章。《化学题录》(Chemical Titles)，1961 年创刊，双周刊，由美国化学文摘服务社编辑出版。它是在《化学文摘》出版之前使读者及时了解化学各领域科研最新进展情况的快报型检索工具。《化学工业札记》(Chemical Industry Notes) 由美国化学文摘社出版，1971 年创刊，文摘按八大类编排，即生产、价格、销售、设备、产品与加工、公司活动、政府活动、人事等，现有网络版。

(2) 英国《科学文摘》(Science Abstracts，SA)　1898 年创刊，其电子版《科学文摘数据库》(INSPEC)，覆盖了全球发表在相关学科领域的期刊、会议录、报告、图书等。

(3) 日本《科学技术文献速报》　创刊于 1958 年，由日本科学技术情报中心 (The Japan Information Center of Science and Technology，JICST) 编辑、出版的文摘性检索工具。

(4)《分析文摘》(Analytical Abstracts)　1954 年创刊，英国分析化学学会编辑出版，现有网络版。

(5)《环境文摘》(Environment Abstracts，EA)　于 1971 年创刊，现改型为《环境科学文摘数据库》(www.csa.com)，收录的文献主要覆盖人类以及技术的发展对人类赖以生存的环境所产生的方方面面的影响，以及一些补救性的政策和技术措施产生的效果。

(6)《污染文摘》(Pollution Abstracts，PA)　由美国剑桥科学文摘社 (Cambridge Scientific Abstracts，CSA) 编辑出版，创刊于 1970 年。PA 收录世界上 50 多个语种的 2500 余种出版物，有网络版。

(7)《石油文摘》(Petroleum Abstracts)　1961 年创刊，周刊。该文摘收录美国及其他国家的科技期刊约 700 种，此外还收录专利和技术报告文献，有网络版。

(8)《工程材料文摘》(Engineered Materials Abstracts)　1986 年创刊，收录聚合物、陶瓷材料、复合材料的研究、设计、开发的文献资料，有网络版。

(9)《英国橡胶与塑料研究协会文摘》(RAPRA Abstracts/Rubber & Plastics Research Association of Great Britain) 由 Pergamon 出版，1968 年创刊，收录橡胶、塑料及聚合物复合材料等方面的科学技术文献和产品，同时出版网络版数据库。

《色谱学文摘》(Chromatography Abstracts)、《气相色谱-质谱文摘》(Gas Chromatography-Mass Spectrometry Abstracts)、《电分析文摘》(Electroanalytical Abstracts)、《气体文摘》(Gas Abstracts) 等知名期刊已经停刊 (Discontinued)。

5.10.4 美国《科学引文索引》简介

(1) 引文 (Citation) 的概念、作用与意义 基础研究的特点是通过对未知现象的探索，发现规律或创造新技术，使人类获得新知识。基础研究成果是科学家对整个人类文明的贡献，重在被人们所利用。对科学家或科研机构而言，发表论文是争取优先发现或使用权的重要手段。但是，在为数众多的基础研究成果中，在短期内如何客观评判各自的价值所在？这一问题很难有客观标准。

1955 年 Garfield 博士在 Science 发表论文，提出将引文索引 (Citation Index) 作为一种新的文献检索与分类工具。将一篇文献作为检索字段从而跟踪一个 Idea 的发展过程。这是美国《科学引文索引》(Science Citation Index，SCI) 理论的起源。

引文 (Citation) 原理：假设第 1 位作者发表论文 (即文献 A) 后，第 2 位作者在阅读文献 A 的基础上发表了论文 (即文献 B)，且第 2 位作者在文献 B 中引用了文献 A，即 A 是 B 的参考文献。A 文献与 B 文献从内容上一定是密切相关的。此时称 A 为 B 的引文 (Citation)。“引文索引”是对所有被别人引用过的文献建立索引。这样，就可以通过一个作者或一篇文献检索到该作者或文献的参考文献；检索到与该作者引用相同参考文献的文献，即相关文献，从而扩大检索范围，而且检索到的文献一般都是密切相关的文献。

通过“引文索引”检索，还可以判断一篇文献的科学价值，如果一篇文献自其发表一直没有人引用，则说明该文献的科学参考价值不高，或目前还没有人研究该方面的内容。影响论文被引用的因素有：论文的学术水平、撰写所用的语言文字 (一般是以英文发表在国外刊物上) 和发表刊物的名气等。

由于被引用次数体现着所发表论文被他人阅读和利用的程度，因此，世界各国均将被美国 SCI 收录的论文数作为大学或研究所在基础研究方面实力评价的一个重要指标。

对科技工作者来说，SCI 有如下重要作用：①了解某一课题发生、发展、变化的过程；②查找某一重要理论或概念的由来；③跟踪当前研究的热点；④了解自己以及同行研究工作的进展；⑤查询某一理论是否仍然有效，以及是否已经得到证明或已被修正；⑥考证基础理论研究如何转化到应用领域；⑦评估和鉴别某一研究工作在世界学术界产生的影响力；⑧发现科学研究新突破点；⑨了解你的成果被引用情况。发表论文能否被广泛使用通过已发表论文的被引用情况来判断，并进一步评价该研究论文的科学价值。

目前，世界各国均将被美国《科学引文索引》(Science Citation Index，SCI) 收录的论文数作为大学或研究所在基础研究方面实力评价的一个重要指标。中国科学技术信息研究所 (www.istic.ac.cn) 也定期发布中国大学和研究所被 SCI 收录的论文数和“排行榜”，但它只代表了大学和研究所在“基础研究方面”的实力。

(2) ISI、SCI、JCR、IF 概述 美国科学情报研究所 (Institute for Scientific Information，ISI) (ip-science.thomsonreuters.com) 是世界上著名的文献情报机构，编辑出版多种索引，其中三个最重要索引分别是：

① 科学引文索引 (Science Citation Index，SCI) 创刊于 1961 年。SCI 主要考察文献

间的联系，即通过文献的参考文献将不同的文献联系起来，并由此建立一个数据库，揭示文献之间的关系，并提供即时前瞻与回溯进展的方法。

② 社会科学引文索引（Social Sciences Citation Index，SSCI）。

③ 艺术和人文科学引文索引（Art & Humanities Citation Index，A&HCI）。

JCR（Journal Citation Reports，期刊引用报告）由 ISI 出版。JCR 是目前比较独特的期刊评估资源，有全世界 3000 多个出版公司所出版的 7000 多个学术性期刊和综合性期刊的引文数据，其 Science Edition 有 4500 种左右的期刊数据；其 Social Sciences Edition 有 1500 种左右的期刊数据。JCR Science Edition 内容主要包括影响因子（Impact Factor）、及时指数（Immediacy Index）、引证半衰期（Cited Half-Life）、总引文数（Total Cites）、总论文数（Total Articles）。这些数值没有可比性，不同学科不能对比，在应用时要具体分析。

IF（Impact Factor）是 JCR 中期刊的影响因子，指的是该刊前两年发表的文献在当年的平均被引用次数。一种刊物的影响因子越高，即其刊载的文献被引用率越高，一方面说明这些文献报道的研究成果影响力大，另一方面也反映该刊物的学术水平高。因此，JCR 以其大量的期刊统计数据及计算的影响因子等指数，而成为一种期刊评价工具。目前，ISI 公司每年 6 月中下旬公布上一年度的期刊引证报告数据，有权限的读者可直接进入该网站数据库查阅。

（3）印刷版与网络版引文索引　印刷版引文索引为双月刊，分以下几种索引：

① 引文索引（Citation Index）　按引文作者姓名字顺排列，并列出该引文发表的年月，该文献的出处及引用该文献的作者，引用作者发表的文献出处等。

② 来源索引（Source Index）　按引用他人文献的作者字顺排列。其著录格式为：

WANG　JIE　----第一引用作者
LIBRARY　AUTOMATION OF BEIJING UNIVERSITY　----题名
HI　TE　LIB　90(4)：89-94　----来源期刊

③ 轮排主题索引（Permuterm Subject Index）　按引用文献题名中的主要词的字顺编排，在每个主要词之下，有若干个按字顺排列的配合词。

Web of Science 是 ISI 出版的 SCI 网络版，详细检索方法参见第 9 章。

5.10.5　美国《工程索引》简介

美国《工程索引》（The Engineering Index，EI）创建于 1884 年，现由美国工程信息公司（The Engineering Information Inc.）（www.ei.org）编辑出版。它是世界上著名的科技文献检索系统之一，是工程技术人员必查的检索工具。EI 收录的文献类型包括期刊、会议论文、各学会、协会、大学、研究所、实验室、政府机构的报告和各工业机构的文献等。现已成为世界级的权威检索体系，并成为国际通用的文献统计源。

《工程索引》名为索引（Index），实为文摘（Abstract），主要报道工程技术信息，内容涵盖化工、农业、生物工程、环境、燃料工程、石油、冶金、矿产、核能、宇航工程、汽车与机车、控制工程、电工与电子以及软件科学等领域。

（1）EI 的出版形式及特点　EI 目前按出版周期分三种版本：月刊、年刊、机读增强版（EI Compendex Plus）；按出版载体可分为印刷版、光盘版和网络版。EI 是综合性的检索工具，报道量大，文献数量增长快，报道的内容比较广泛，对新学科和边缘学科反应迅速。随着科技发展不断更新内容，不断引进新主题是 EI 的优点之一。作为世界范围的工程文献检

索体系，EI以收录工业技术领域（应用学科）的论文为主，EI更关注各国工程技术类期刊及论文。

（2）网络版EI Engineering Village（www.elsevier.com/solutions/engineering-village）即“工程村”网络版，是一个综合工程信息检索平台，有多个数据库支持。EI Village以核心数据库EI Compendex Web为主，并提供与世界范围内大量数据库的链接，在世界范围内收集、筛选、组织工程类型的网络信息资源。EI Compendex Web是EI网络版的核心数据库，收录文献的内容涉及工程技术的所有学科，其中化工和工艺类的期刊文献最多，约占15%。国内部分高校与科研院所可免费检索。

利用EI Engineering Village检索平台检索工程技术文献的具体方法见第9章。

5.10.6 美国《会议录引文索引——自然科学版》简介

美国《会议录引文索引》（Conference Proceedings Citation Index，CPCI）分自然科学版（CPCI-Science，CPCI-S）和社会科学版（CPCI-Social Sciences & Humanities，CPCI-SSH，原名ISSHP，Index to Social Sciences Humanities Proceedings），是与SCI、EI、ISR（Index to Scientific Reviews）并列的四大索引检索工具之一。

CPCI-S原名《科学技术会议录索引》（Index to Scientific & Technical Proceedings，ISTP），创刊于1978年，由美国科学情报研究所编制，主要收录国际上著名的科技会议文献。CPCI-S提供1990年以来以专著、丛书、预印本、期刊、报告等形式出版的国际会议论文文摘及参考文献索引信息，涉及自然科学和工程技术的所有领域，数据库每周更新。

CPCI-S作为一种综合性的科技会议文献检索工具，在国际上占有显著地位，并受到我国学术界的广泛重视。CPCI-S在会议录的选用上有严格的标准，将近75%～90%著名的、重要的会议文献在CPCI-S中有收录，成为报道会议文献和查阅会议文献引文索引的权威性刊物和评价学术成果水平的统计工具，目前每年报道会议4000多种，收录会议论文20万篇左右，约占每年主要会议论文的75%以上。我国早期使用CPCI-S的印刷本及光盘版，现部分高校购买了其网络数据库供读者查阅。

CPCI-S有月刊和年刊累积本，但各自独立，均包括以下7部分内容。①会议录内容（Contents of Proceedings）。②分类索引（Category Index）。按其所收录的会议录的内容分成大约56类，按类名字母顺序排列，读者可根据会议名称，查出会议号，再通过会议号获得该会议及会议录的详细信息。③轮排主题索引（Permuterm Subject Index）。④会议主办单位索引（Sponsor Index）。⑤作者或编者索引（Author/Editor Index）。⑥会议地点索引（Meeting Location Index）。⑦团体单位索引（Corporate Index）。

CPCI-S的检索可以通过联机光盘系统检索其光盘版，也可以通过ISI Web of Knowledge的检索平台进行网络检索。

美国科学情报研究所基于ISI Web of Knowledge的检索平台，将CPCI-S和CPCI-SSH两大会议录引文索引集成为ISI Proceedings，ISI Proceedings汇集了世界上最新出版的会议录资料，包括专著、丛书、预印本以及来源于期刊的会议论文，提供了综合全面、多学科的会议论文资料。

CPCI-S的Internet网页（ip-science.thomsonreuters.com），有权限的用户才能登录。其数据库已经并入SCI网络版，见第9章。

5.10.7 美国《科学评论索引》简介

美国《科学评论索引》（Index to Scientific Reviews，ISR）创刊于1974年，由美国科学情报研究所编辑出版，半年刊，每年收录200多种综述性出版物和3000多种期刊中的综述类文献约6万余条。从某种意义上来说，ISR是SCI的一种延伸。ISR是我们通常所说的

与 SCI、EI、CPCI 并列的四大检索工具之一，目前只发行印刷本。

ISR 收录的文献来源有两个方面：一是评论性期刊和出版物，收录其中全部文献条目；二是普通期刊中的综述性文献条目，这是从 SCI 数据库中通过计算机自动抽提出来的。这种抽提出来的文献除一般意义的综述外，还包括另外两种“综述型”文献：文献主题中含有关键词“发展”（Advances）、“综述”、“评论”（Review）和“进展”（Progress）等的文献；列有 55 篇以上参考文献的文献。ISR 收录的文献覆盖了自然科学、医学、工程技术、农业和行为科学等 100 多个学科。

ISR 是收录各个学科有关综述类型的论文，这种论文的撰写，一般是在该学科领域里经历多年研究、造诣较高的资深专家，查阅并消化大量资料的基础上才完成的。因此，论文主题内容高度浓缩，可读价值较高。ISR 将这些论文通过索引编辑成册，并设置了研究范畴专题归并，可以说，这种科技情报工作达到了最高层次。它给人们全方位了解和掌握某一学科领域的概况和发展动态，提供了一条非常敏捷的途径，大大方便了读者。查阅 ISR 至少可以给读者回答这样的问题：是否有自己需要研究课题的综述？这项研究是否已得到拓展？它的研究发展前景如何？这项研究方法是否已被别人取代、改进或拓展？近年来在这个研究领域中有谁在从事同样的研究？

5.11　检索工具的发展趋势

总之，经历上百年发展起来的经典印刷版检索工具，随着网络迅速发展，部分检索工具停刊，部分转型为原始论文或综述期刊，一些重要的检索工具升级为网络数据库，使普通读者也可有机会使用。

可以预测，网络化是检索工具的发展趋势。对化学化工工作者而言，CA、SCI 及其网络版还是必不可少的检索工具。

对于初学者来说，需要通过《全国报刊索引》、CA 了解中、英文检索工具的基本结构与检索原理，这将有利于熟练运用网络版检索工具。

练　习　题

1. 说明传统 10 大文献源的内容特征以及对科技工作者的作用。
2. 学位论文有哪些类型？举例说明可检索学位论文的数据库名称和网址。
3. 科技会议有哪些类型？举例说明可检索会议文献的数据库名称和网址。
4. 什么是标准文献？举例说明可免费检索标准文献的网站名称和网址。
5. 解释下列概念并说明其典型的免费检索方式：

a. 科技报告；b. 政府出版物；c. 产品资料。

6. 举 3～5 例说明检索国内、国外化学化工文献的主要文摘。
7. 简述 SCI、EI、CPCI-S 和 ISR 是什么？它们有什么用途？
8. SCI 期刊影响因子（IF）是什么？有什么用途？
9. 对科技工作者来说，SCI 有哪些重要作用？

实践练习题

1. 通过中国知网查找有关“智能高分子”或“光敏剂”的一篇硕士或博士学位论文。

2. 通过网络查找一个即将召开的化学化工领域的国内或国际会议，下载其侧重在哪个领域以及对摘要的要求。

3. 从我国“国家科技报告服务系统”下载与“天然高分子”或“光催化剂”相关的研究报告标题、作者及摘要信息。

4. 通过网络查找我国有关“防腐剂”作为食品添加剂的相关国家标准。

5. 从我国的政府网站，了解国家对水污染、大气污染治理的一些国家政策与导向。

6. 从药店或已经购买的药品说明中，找到一个有机化合物的结构信息，分析其中英文名称、分子式与分子量等详细参数。

7. 通过 SCI 检索作者“张希”（单位：清华大学）在国际核心刊物发表的论文及其被引用情况。

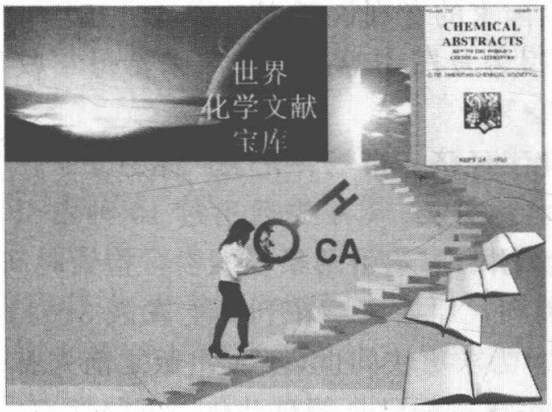
第6章　美国《化学文摘》

导　语

美国《化学文摘》（CA）被称为“打开世界化学文献的钥匙”，是目前检索世界化学化工文献最权威的工具，具备十分完备的检索体系，目前已更新为网络版SciFinder。本章主要介绍印刷版和网络版CA的基本内容，使读者掌握CA的主要内容和使用方法。附录列出了CA中的缩写词（中、英文对照）与及常见官能团名称。

关键词

化学文摘；CA；CAS登记号；SciFinder期索引；卷索引；累计索引。



6.1　CA——打开世界化学文献的钥匙

美国《化学文摘》（Chemical Abstracts，CA），由ACS（American Chemical Society，美国化学学会）旗下的CAS（Chemical Abstracts Service，化学文摘社）编辑出版。它是检索化学化工文献的主要工具。因CA是纸质版中收录化学化工文献最为广泛的检索工具，被称为“打开世界化学文献的钥匙”。特别是其引入CAS化学物质登记系统，开创了科学研究的新纪元，使用独特的CAS登录号（CAS Registry Number）标识每一个化学物质，避免了化学命名的模糊性，该系统为化学研究、健康和安全信息及化学信息在诸多媒体间的交流沟通提供了更大的便利。

6.1.1　发展历史、卷期沿革

CA创刊于1907年，其前身是美国在1895～1901年出版的《美国化学研究评论》（Review of American Chemical Research）和1867～1906年间出版的《美国化学会杂志》（J. Am. Chem. Soc.）中的文摘部分。1909年CA编辑部迁到位于俄亥俄州首府哥伦布市的俄亥俄州立大学校园内。1956年由CAS编辑出版，并成为美国化学会的一个分支机构。经不断更新，已日益完善。1969年又兼并了具有140年历史的德国《化学文摘》（CE）（1830

年创刊），其卷号、卷期变化见表 6-1。

表 6-1 CA 卷期出版变化情况

年 份	卷 号	性 质	每年卷数	每卷期数	分 类
1907～1944	V. 1～V. 38	半月刊	1	24	30
1945～1960	V. 39～V. 54	半月刊	1	24	31
1961	V. 55	双周刊	1	26	31
1962	V. 56～V. 57	双周刊	2	13	73
1963～1966	V. 58～V. 65	双周刊	2	13	74
1967～1981	V. 66～V. 95	周刊	2	26	旧 80
1982～今	V. 96～	周刊	2	26	新 80

6.1.2 特点

（1）收录面广 它不仅报道各国有关化学领域、化工文献，也报道和农业、冶金、矿物、生化、印染等化学相关学科。CA 的收录数量、报道方式、检索方法都不断发展和变化。特别是近 20 年来，发展更快。现在它摘录 150 多个国家和地区 50 多种文字的近 15000 种期刊论文。此外包括 28 个国家的专利说明书、评述、技术报告、专题论文、会议录、讨论会文集、学位论文、政府报告及图书等。近几年来，每年收集的文摘 70 余万条。据称，CA 摘录了世界化学文献的 98%。

CA 不报道的内容有：化工经济、市场、化工产品目录、广告、化工新闻消息。

（2）检索途径多 若从名称分类，CA 先后出过 10 种索引，它通过各种渠道检索所需文献。若从时间划分，有期索引、卷索引及累积索引，检索时间大为缩短。

（3）报道迅速 CA 为周刊，原始文章在刊物上发表 3～4 个月之内，CA 上即有报道。美国国内最快一周即可报道。为求更快问世，CA 出版之前先有《化学题录》（Chemical Titles）公开发行。目前，CA 编排过程已全部自动化，网络版 SciFinder 已经广泛使用。

（4）忠于原文 CA 摘录内容为原始文献的缩影，不另作评价。

（5）出版形式多样化 CA 除了书本检索工具外，还有磁带、缩微胶卷与缩微平片。另外，从 1976 年起出版《化学文摘选辑》（CA Selects），至 1986 年发展到 164 个专题文摘。这些选辑都是双周刊，内容选自 CA 中有关该专题的全部文摘和目录情报。1971 年 CA 增编《化学工业札记》（Chemical Industry Notes，CIN），收集世界上 93 种化工经济刊物，弥补 CA 的不足。

随着计算机及网络的普及，CA 出版发行光盘版和国际联机在线检索，取代了缩微胶卷。目前国内许多科研单位能够通过网络在线检索 CA。

6.1.3 CA——具有参考工具书性质的检索工具

作为一个综合性文摘检索工具，CA 收录了大部分新书条目，包括工具书。实际上，以 CA 为代表的文摘类二次文献和各种工具书都是对一次文献中的信息和数据进行加工整理的产物，只是编辑的目的不同，收集的范围不同和排检方法不同。CA 是以一篇文献为单位进行加工，工具书以一篇文献中的某项数据为单位进行加工。由于 CA 的收集范围很广，检索途径又十分完善，基本上已经揭示了文献中有价值的检索点。据此，著者认为：在化学文献检索中，利用 CA 也可达到利用一些工具书获取各种数据的目的，尤其能获得尚未收录到参考工具书中的理化参数、制备方法等最新研究成果。相反，由于各种工具书的篇幅有限，有些数据最终还得通过 CA 找到原始文献，再从原始文献中取得具体数据。

6.2 《化学文摘》的分类

CA 以化学主题内容为依据进行分类。创刊时分为 30 类，1982 年（V.96）起改成 80 类，包含如下 5 大部分。

6.2.1 Biochemistry Sections（生物化学部分）

生物化学部分包括如下 20 类：①Pharmacology（药理学）；②Mammalian Hormones（哺乳动物激素）；③Biochemical Genetics（生物化学遗传学）；④Toxicology（毒物学）；⑤Agrochemical Bioregulators（农业化学生物调节剂）；⑥General Biochemistry（普通生物化学）；⑦Enzymes（酶）；⑧Radiation Biochemistry（放射生物化学）；⑨Biochemical Methods（生物化学方法）；⑩Microbial，Algal，and Fungal Biochemistry（微生物、藻类及菌类生物化学）；⑪Plant Biochemistry（植物生物化学）；⑫Nonmammalian Biochemistry（非哺乳动物的生物化学）；⑬Mammalian Biochemistry（哺乳动物的生物化学）；⑭Mammalian Pathological Biochemistry（哺乳动物的病理生物化学）；⑮Immunochemistry（免疫化学）；⑯Fermentation and Bioindustrial Chemistry（发酵和生物工业化学）；⑰Food and Feed Chemistry（食品及饲料化学）；⑱Animal Nutrition（动物营养学）；⑲Fertilizers，Soils，and Plant Nutrition（肥料、土壤与植物营养学）；⑳History，Education，and Documentation（历史、教育及文献工作）。

6.2.2 Organic Chemistry Sections（有机化学部分）

有机化学部分包括如下 14 类：㉑General Organic Chemistry（普通有机化学）；㉒Physical Organic Chemistry（物理有机化学）；㉓Aliphatic Compounds（脂肪族化合物）；㉔Alicyclic Compounds（脂环族化合物）；㉕Benzene，Its Derivatives，and Condensed Benzenoid Compounds（苯及其衍生物和稠环化合物）；㉖Biomolecules and Their Synthetic Analogs（生物分子及其合成类似物）；㉗Heterocyclic Compounds（One Hetero Atom）[杂环化合物（一个杂原子）]；㉘Heterocyclic Compounds（More Than One Hetero Atom）[杂环化合物（多杂原子）]；㉙Organometallic and Organometalloidal Compounds（有机金属与有机准金属化合物）；㉚Terpenes and Terpenoids（萜烯与萜类化合物）；㉛Alkaloids（生物碱）；㉜Steroids（甾族化合物）；㉝Carbohydrates（碳水化合物）；㉞Amino Acids，Peptides，and Proteins（氨基酸、肽和蛋白质）。

6.2.3 Macromolecular Chemistry Sections（高分子化学部分）

高分子化学部分包括如下 12 类：㉟Chemistry of Synthetic High Polymers（合成高聚物化学）；㊱Physical Properties of Synthetic High Polymers（合成高聚物的物理性质）；㊲Plastics Manufacture and Processing（塑料制造及加工）；㊳Plastics Fabrication and Uses（塑料制品及用途）；㊴Synthetic Elastomers and Natural Rubber（合成弹性体与天然橡胶）；㊵Textiles and Fibers（纺织品及纤维）；㊶Dyes，Organic Pigments，Fluorescent Brighteners，and Photographic Sensitizers（染料、有机颜料、荧光增亮剂及照相敏化剂）；㊷Coatings，Inks ，and Related Products（涂料、油墨及有关产品）；㊸Cellulose，Lignin，Paper，and Other Wood Products（纤维素、木质素、纸及其他木制产品）；㊹Industrial Carbohydrates（工业碳水化合物）；㊺Industrial Organic Chemicals，Leather，Fats，and Waxes（工业有机化学品、皮革、脂肪及蜡）；㊻Surface-Active Agents and Detergents（表面活性剂与洗涤剂）。

6.2.4 Applied Chemistry and Chemical Engineering Sections（应化与化工部分）

应用化学和化学工程部分包括如下 18 类：㊼Apparatus and Plant Equipment（仪器和工厂设备）；㊽Unit Operations and Processes（单元操作和工艺过程）；㊾Industrial Inorganic Chemicals（工业无机化学品）；㊿Propellants and Explosives（推进剂和炸药）；(51)Fossil Fuels, Derivatives, and Related Products（矿物燃料、衍生物及有关产品）；(52)Electrochemical, Radiational, and Thermal Energy Technology（电化学能、辐射能和热能技术）；(53)Mineralogical and Geological Chemistry（矿物和地质化学）；(54)Extractive Metallurgy（萃取冶金学）；(55)Ferrous Metals and Alloys［黑色（铁类）金属及合金］；(56)Nonferrous Metals and Alloys（有色金属及合金）；(57)Ceramics（陶瓷）；(58)Cement, Concrete, and Related Building Materials（水泥、混凝土和有关建筑材料）；(59)Air Pollution and Industrial Hygiene（空气污染和工业卫生）；(60)Waste Treatment and Disposal（废物处理与处置）；(61) Water（水）；(62) Essential Oils and Cosmetics（香精油和化妆品）；(63) Pharmaceuticals（药物）；(64)Pharmaceuticals Analysis（药物分析）。

6.2.5 Physical, Inorganic and Analytical Chemistry Sections（物化、无机及分析化学部分）

物理化学、无机化学与分析化学部分包括如下 16 类：(65)General Physical Chemistry（普通物理化学）；(66)Surface Chemistry and Colloids（表面化学与胶体）；(67)Catalysis, Reaction Kinetics, and Inorganic Reaction Mechanisms（催化、反应动力学和无机反应机理）；(68)Phase Equilibriums, Chemical Equilibriums, and Solutions（相平衡、化学平衡和溶液）；(69)Thermodynamics, Thermochemistry, and Thermal Properties（热力学、热化学和热性质）；(70)Nuclear Phenomena（核现象）；(71)Nuclear Technology（核技术）；(72)Electrochemistry（电化学）；(73)Optical, Electron, and Mass Spectroscopy and Other Related Properties（光谱、电子光谱、质谱及其他有关性质）；(74)Radiation Chemistry, Photochemistry, and Photographic and Other Reprographic Processes（辐射化学、光化学、照相和其他复制过程）；(75)Crystallography and Liquid Crystals（结晶学与液晶）；(76)Electric Phenomena（电现象）；(77)Magnetic Phenomena（磁现象）；(78)Inorganic Chemicals and Reactions（无机化学制品及反应）；(79) Inorganic Analytical Chemistry（无机分析化学）；(80) Organic Analytical Chemistry（有机分析化学）。

6.3 《化学文摘》著录格式

CA 对于各种文献源的著录格式虽大致相同，但仍可从特定标志区别，现举例说明。以下展示文摘号、标题、作者、单位出处等，文摘正文部分省略。

6.3.1 期刊论文

期刊论文（Serial-Publications Abstract Heading）的特点标志是刊名及卷号和期号。CA 期刊论文的著录格式参见图 6-1。

著录格式说明如下：

① 卷号后的文摘号以黑体字表示，全卷连续编号。文摘号后的字母为计算机核对字母，自 V. 66（1967）开始采用；以前采用的字母为分段标识，便于查找文摘位置。计算机核对字母是由卷号和文摘号按公式计算出来的，核对字母只与前面的文摘号发生关系，与文摘内容无关。

② 论文题目。用黑体字表示，各文种均译成英文。

③ 作者姓名（全名）。姓前名后。有数位作者合著时，每一人名之间用分号隔开，按原

①　②

133:308569h A Probe for the Versatile Analysis and Characterization of N-Linked Oligosaccharide. Charlwood, Joanne; Birrell, ③ Helen; Gribble, Andy; Burds, Vincent; Tolson, David; Camilleri, Partrick ④(New Frontiers Science Park, Smithkline Beecham Pharmaceuticals. Harlow Essex, Uk CM19 5AW). *Anal. Chem.* **2000**, 72(7). 1453-1461 (Eng), American Chemical Society …… ⑤　⑥　⑦　⑧

⑨　⑩　⑪

图 6-1　CA 期刊论文的著录格式

文顺序排。如果人数太多，加省略号“et al”。中国和日本的作者姓名如原文用罗马字母，CA 仍采用；否则对日本姓名用黑本式对译，中国大陆作者姓名用汉语拼音，其他地区华人作者采用威吉制。俄罗斯作者姓名翻译见作者索引中的相应介绍。

④ 作者单位及地址。姓名后括号中的单位及地址为第一作者单位及地址。

⑤ 刊物名称。用斜体字印刷。缩略词采自“List of Serial Title Word Abbreviations”及其补充本。有关期刊刊名、参考本、收藏图书馆及刊名变更等情况可参见化学文摘社源索引（CSAAI）。非印刷版在括弧中注明，网络版为“Online computer file”，光盘版为“Computer optical disk”。

⑥ 出版年份。用黑体字印刷。

⑦ 卷号及期号。卷号后括弧中为期号。

⑧ 论文起止页码。

⑨ 原始文献的语种。放在括弧内，其缩略词代号见附录。

⑩ 出版商。

⑪ 摘要正文（这里省略）。

6.3.2　会议录和汇编

会议录和汇编（Proceedings and Edited-Collections Abstract Heading）中会议录的特定标志是“Proc.”、“Inst.”、“Symp.”等。

6.3.3　技术报告

CA 技术报告（Technical Reports Abstract Heading）著录格式参见图 6-2。

①　②　③

133:185169t Removal of radon and other natural radionuclides from household water with domestic style granular activated carbon filters. Turtiainen, T.; Kokkonen, P.; Salonen, L. (Radiation and Nuclear ④ Safety Authority, STUK, FIN-00881 Helsinki, Finland). *Sateilvtur-Vakeskus, [Rapp.] STUK-A* **2000**, (STUK-A172), 1-102(Eng). ⑤

⑥　⑫　⑧　⑨

图 6-2　CA 技术报告著录格式

著录格式说明如下：

图 6-2 中①～④、⑥、⑨同“期刊论文”。

⑤ 技术报告名称。如系已制定系列的部分内容时，题目用缩略的斜体字印刷。如不属部分内容时，用斜体“*Report*”印刷。

⑧ 总页数。接于科技报告号后。

⑫ 报告号及（或）报告订购号。需与原始文献号完全一致。

6.3.4 学位论文

学位论文（Dissertation Abstract Heading）的特定标志是“Diss”。CA 中所包括的学位论文来自《国际学位论文摘要》（Dissertation Abstracts International）的文献目录。

学位论文的来源及其序列号排在原始文献的文种后。《国际学位论文摘要》中包含的一些学位论文可以从某些组织机构获得，这些组织机构在 CA 标题中有相应的编码。美洲地区的用户可以从美国 PQDD 博硕士论文全文数据库（原名为 UMI）（地址：300 North Zeeb Road，Ann Arbor，Michigan 48106-1346，USA）获得相应论文，其他地方的用户需从 Gower Publishing，Gower House，Croft Rd.，Aldershot，Hampshire GU 11 3HR United Kingdom 定购。

6.3.5 新书及视听资料

新书及视听资料（New Book and Audio-Visual Material Announcement Heading）包括科技新书、教材、手册、影片、录音带及其他资料和实习资料。其识别著录种类的特定标志是均有总页数“pp.”及出版国货币价格。

6.3.6 电子预印版

电子预印版（Electronic Preprint Abstract Heading）特定标识有：预印集名、preprint、网页上张贴时间、网页所有者名称、网址及预印号。

6.3.7 专利文献

CA 专利文献（Patent Document Abstract Heading）著录格式见图 6-3。

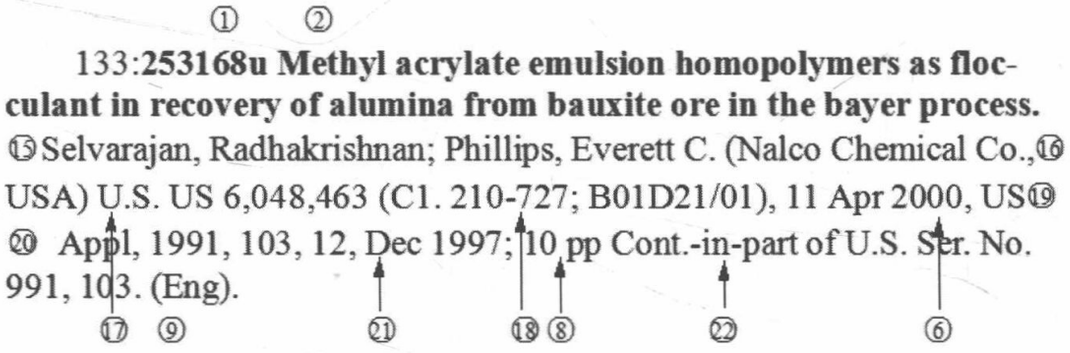


图 6-3 CA 专利文献著录格式

著录格式说明如下：

① 文摘号与其他 CA 文摘号是相连的。

② 专利题目。经 CA 加工的原始专利文件题目。

⑥ 专利出版日期。位于分类号项下。

⑧ 专利页数。位于申请日期项下。它包括未注明页码的题目页、插图在内的总页数。

⑮ 被授予专利权的单位、个人或发明者姓名。位于题名项下。

⑯ 按法律程序被指定为受权人的单位或个人名称。放于括号内。

⑰ 国际标准化组织（ISO）规定的专利国代号，该专利类别的代号及特定专利文献号。

⑱ 专利分类号。位于专利号后的括号内。美国专利在本国分类号后还列出国际专利分类号，此两项用分号分开，其他国家只列国际专利分类号。

⑲ 优先权国家的代号。位于出版日期后。无优先权国家代号时，表示国内申请。

⑳ 专利申请号。前面以“Appl.”表示。有优先权国家时，该国代号及申请号也列入。

㉑ 专利申请日期。位于专利申请号后，有优先权的他国，其申请日期也列入。

㉒ 国内有相关内容的法定参考专利号或申请号。位于总页数后，此种相关内容可以是追加、分割、继续、再版等。

6.3.8　交叉参考

交叉参考（Cross-References，又名相互参照）在 80 大类每类结束后均列出。例如：

For papers of related interest see also Sections：

36 92e Advances in the chemistry of nitrogen-containing cross-linking agents.

38 111x Structure of reagent residues in cootton cellulose treated with divinyl sulfone.

说明：粗体字告知如欲了解有关内容的论文可参考下列各节。例如参考 36 节 92 条文摘及 38 节 111x 条文摘等。但交叉参考中不包括专利。

6.4　《化学文摘》索引及其使用

CA 在每一期后都附索引（Index），称之为期索引，期索引包括关键词索引、作者索引、专利索引。CA 为每卷提供索引，即卷索引，每 10 卷提供累积索引，有作者索引、分子式索引、专利索引（专利对照索引、专利号索引）、主题索引（普通主题索引、化学物质索引）、环系索引、索引指南等，还有登记号索引（登记号手册）、资料来源索引、母体化合物手册等。常见各种索引及其出版变化情况见表 6-2。正是 CA 各种索引为文献检索提供了极大方便。

表 6-2　常见各种索引及其出版情况

项　目	期　索　引 出版年限(卷号)	卷　索　引 出版年限(卷号)	累积索引 (10 卷)	说　明
关键词索引	1963～ (V. 58～)			keywords index
作者索引(A)	1949～ (V. 43～)	1907～　(V. 1～)	1907～	
分子式索引(F)		1920～　(V. 14～)	1947～	1907～1948(V. 1～42) (每卷末期副刊)
专利号索引 专利对照索引 专利索引(P)	1958～1980 1963～1980 1981～	1935～1980 (V. 29～93) 1963～1980 (V. 58～93) 1981～　(V. 94～)	1937～80 1967～80 1977～	V. 94 起合并成专利索引
主题索引 普通主题索引(GS) 化学物质索引(CS)		1907～1971 (V. 1～75) 1972～　(V. 76～) 1972～　(V. 76～)	1907～71 1972～ 1972～	1972 年起分为两部分
环系索引		1916～　(V. 10～)	1957～	
杂原子索引		1967～1971	1967～71	1971 年后停
索引指南		1968～　(V. 69～)	1968～	
登记号索引		1969～　(V. 71～)		1971 年后改为登记号手册
资料来源索引		1920～　(V. 14～)	1970	现出六版
母体化合物手册		1977～		

6.4.1　关键词索引

关键词索引（Keywords Index）为每期文摘后面的索引之一。CAS 编者均选出几个词汇作为每一课题的关键词，引导使用者通过关键词检索文摘。关键词可选自文摘标题、文摘

内容或原始文献。关键词未经规范化，编制速度快。关键词索引只用于期索引中。

(1) 著录格式 著录格式如图 6-4 所示。

① 关键词。有关文摘以 Membrane 为关键词检索时，均缩格排在其下。

② 关键词索引中常用缩略词。

③ 文摘号。

Hydrogen
Sepn porous inorg membrane 8428m
Membrane①
Porous inorg hydrogen sepn② 8424m
Sepn② gas review 8121f③

图 6-4 关键词索引著录格式

(2) 编排特点

① 关键词按首字母顺序排列在期文摘后面。

② 元素符号及分子式不能作为关键词，但可在关键词短语中出现。

③ 化合物的定位号、顺反异构体及指示氢均不列入字母顺序。例如 cis-polyisoprene，直接查 P 部。

④ 化合物全部用单数名词表示。

⑤ 复杂化合物名词的排列有时以母体结构作关键词，其余部分列入关键词短语中，但母体结构在末位时不拆开排。例如 Adipi-cacid，将 Adipic 作关键词，isoprolpylphenanthrene 不能单独将 isopropyl 或 phenanthrene 作关键词，而用全部名称作关键词。

⑥ 复杂化合物常用商品名或习惯名称作关键词。例如丙烯腈、丁二烯、苯乙烯共聚物直接查 ABS。

⑦ 较为熟悉的词汇整个可作关键词。例如“催化裂化石油”(catalyst cracking petroleum)。

⑧ 选择关键词时可使用相关内容的词。如 hear 与 enthalpy (焓) 可通用；查“血压”(blood pressure) 时可考虑到“低血压”(hypotension) 及“高血压”(hypertension)。

⑨ 同义词在一般情况下不常采用。不能分辨同义词时，可查 CAS 编的“自然语言术语表”(A Natural Language Term List)。

⑩ 80 大类的类名尽量不作关键词用，非用不可时在最后一条词汇中予以说明“Also scan”。如 67 大类为“Catalysis, Reaction Kinetics, and Inorganic Reaction Mechanisms”，采用 Catalysis 为关键词时，最后一条关键词短语为“Also scan Section 67”。

(3) CA 索引文摘号前常用的缩写和符号 在文章标题后和文摘号前可能会有某些表明文献类型的大写字母。例如：R—Review (综述)；B—图书和音像材料；P—专利。参见附表 6-5。

6.4.2 作者索引

作者索引 (Author Index) 包括各个作者的姓名、合作者的姓名、专利申请人的姓名、专利权人姓名。在第一作者的名下列出了所有合作者的姓名。用相互参照可以从合作者查第一作者。作者索引中作者姓名的拼写按照他们在文章中发表时的拼写。但是读者要考虑作者在因期刊或媒体的要求而拼写不同的可能。

(1) 编排特点 在论文中署名时，署名方法可能有所不同。但在 CA 编制索引时，规定姓放在前面，按姓的英文字母次序排列。姓与名之间必须加一逗号。

在英文论文中，西方人的姓名著录格式是先名后姓 (见表 6-3)。如：Keith John Smith。姓 (Surname, Last name) 也称为家族的名字 (Family name)，一般在正式场合或尊称时用。如 Mr. Smith, Prof. Smith。在熟悉的人之间往往直呼其名 (First Name)，如同学或同事间就称 Keith，而不称 Mr. Smith。Middle Name 通常是教名，一般情况下不告诉别人。

表 6-3　西方人的姓名“Keith John Smith”结构与排列次序

姓　名	西文含义(中文含义)	项目	论文著作署名	CA 索引排列
Keith	First Name(名)(第一个名字)	名全缩写	K. J. Smith	Smith, K. J.
John	Middle Name(教名)(第二个名字)	名缩写	Keith J. Smith	Smith, Keith J.
Smith	Last Name(Family Name)姓(即“家族的姓”)	全称	Keith John Smith	Smith, Keith John

在期刊发表论文时，有的期刊要求前两个名字缩写，有的期刊要求第一个名字写全，第二个名字缩写。少数情况要求第一个和第二个名字都写全。所以在查找某一作者的文献时，要考虑到所有的可能。

(2) 著录格式　作者索引著录格式见图 6-5。

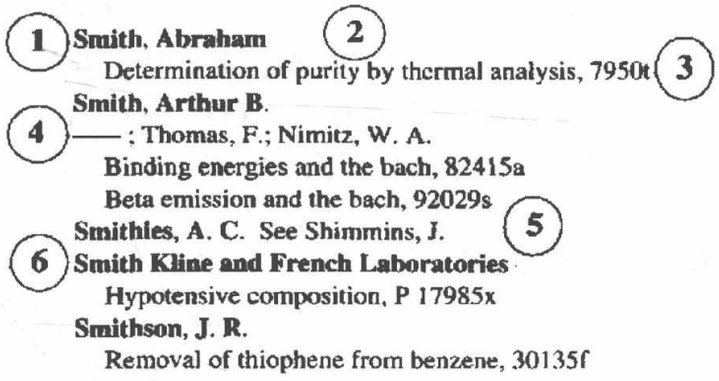


图 6-5　CA 作者索引著录格式

① CA 的作者索引中，作者姓名用粗体字印刷，姓放在前面（用逗号隔开），后面跟第一个名字（First Name）和第二个名字的缩写（即 Middle Name，如果有的话）。

② 原始论文和专利的标题，放在作者姓名下面一行。每篇文章的标题均缩进几格。文章的次序按照在该卷中出现的文摘号排列，即按 CA 文摘号增加的次序排列。

③ 在文章标题后和文摘号前可能会有某些表明文献类型的大写字母。例如：B—图书；P—专利。

④ 一个作者有几篇文章时，单独的个人著作排在前面，与他人合作的排在后面，用“—”表示同一作者的名字，以免重复。作者名字排列按照文章中的次序，作者太多时用 et al。

⑤ 对于多位作者，提供了相互参照（Cross-Reference）。只有在第一作者的名下列出了文章题目、文摘号等信息，在其他作者名下参照第一作者。

⑥ 团体作者姓名，包括那些工业企业、专业学会、委员会、政府机构、大专院校和研究单位，加上所有的专利权人。所有团体的名称按照它们在原始文献中出现的名称。

(3) 为了防止在索引中出现作者姓名不一致的现象。例如，一份文献列出了作者的全名，而另一份文献只列出该作者名字的缩写，CAS (Chemical Abstracts Service) 在作者索引中采用了下列字母排序规则：

a. 第一字母顺序是作者的姓。作者索引中姓名的顺序和常规习惯相反，第一是姓，后面是第一个名字（First Name）和第二个名字（Middle Name）或者缩写（Initial）。

b. 第二字母顺序是第一个名字（First Name）和（Middle Name）的缩写，不管它是否全称。因此，Jones, Arthur Brady 放在 Jones, Alan D. 的前面。因为“AB”在“AD”前面。

c. 在执行规则 a 和 b 后，含有很少信息的名字排在含有较多信息的名字前面。例如，Smith, A 放在 Smith, A. R.，前面，他们依次排在 Smith, A. R. D. 前面。类似地，缩写的名字领先于完整的名字：Smith, I. M. W. 领先于 Smith, Ian M. W。

d. 在执行规则 a、b 和 c 后，按照名字或缩写的英文字母/顺序排列。例如，Brown, Palph D 领先于 Brown, Richard D.。因为“Ra”在标准的英文字母顺序中排在“Ri”前面。类似地，Brown, Donald R. 排在 Brown, D. Robertson 前面，因为“DO”在“DR”前面。例如：

Watson, A. E.	Watson, D.
Watson, A. R.	Watson, Douglas
Watson, B.	Watson, Donald A.
Watson, B. M.	Watson, Denton B.
Watson, C. Arthur	Watson, David Harris
Watson, C. James	Watson, James K. G.
Watson, Carter M.	Watson, R. G. H.

(4) 加连字符的姓在按字母排列时，看作一个整体，即不考虑连字符的影响。例如 Margaret Martin-Smith 在作者索引中为 Martin-Smith, Margaret。

(5) 如果作者姓名中只有一个姓，而其中有一项是他（她）的称呼的话（例如：Mr.、Mrs.、Miss），或者作者另外一个名字似乎很像姓的话，如：Watson、Klein 或 Brown，则把称呼和看来很像另一个姓的字看作他（她）的第一个名字（First Name）。例如：

姓名	（First Name）
Sampson	Mrs.
Kovacs	Klein
Brown	Mr.

其他称呼不保留，如：Mr.、Dr.、Count、Lord、Sir、Reverend 等和在其他语言中相当的称谓。

(6) 有些表示家族地位、等级等的称谓（例如：Sr.、Jr.、2nd、II 等和在其他语言中相当的称谓），在作者索引中把它们看作是名字的一部分。其中的 2nd 或 3rd 等转换成相应的罗马数字。例如：

Jones, W. M.	Jones, W. M., Jr
Jones, W. M., III.	Sabo, M., Ifj

(7) 如果姓名中含有宗教的等级称谓，把它看作是完整姓名的一个整体。这些姓名不能颠倒，在作者索引中把它们看作是一个整体。例如：

Brother James Kelly	Sister Marguerite Rose
Brother John Francis	Sister Mary Rose
Father Paul Phillips	

(8) 作者姓名中若含有前缀“Mc”或“M”，在按字母排列时把它们看作是以“Mac”起头。若作者的姓名是以西里尔字母翻译而来（注：西里尔字母是 19 世纪传教士西里尔发明的字母，系现代俄语等字母的本源），以“Mch”开头时，按照它的字母顺序排列。在姓名中间如果有大写字母时，不影响该姓名在作者索引中的次序。例如：McCormack, T. J.; M' dougal, J. T.; MacGavran, S. M.。

(9) 作者姓名若有前缀如：“De”、“Des”、“Du”、“La”、“Le”、“Della”、“Van”、“Vanden”和“Vonder”等时，把前缀和姓看作是一个整体。如果有空格或有大写，不影响该姓名在作者索引中的次序。例如：

De Lefeore, Alfred	Van Kampf, R.
DeLong, A. G.	Von Gusterf, G. L.
Vanden Bergh, G. M.	

(10) 在所有格时表示省略的省略号（'）在按字母排列的作者索引中不予考虑。例如：

Johnstoff' s Paint and Glass Co.	Johnstons Paint and glass Corp.

L' Her, Maurice　　L' Homme, G. A.
Lherbier, Louis W.

(11) 在严格按照字母顺序排列的作者索引中，“St”是一个例外。如果姓名中含有“St”，把它看作为“Saint”按这样的次序排序。例如：

Achy, Jack W.　　Saint-Cyr, Simonne
A. E. C. Societe de Chimie Organique et Biologique　　Sainteny-Debove, Francoise
AEG-Elotherm G. m. b. H,　　St. Genies, J. W.
Aegerter, Simon　　Saint-Ghislain, M.
A. E. L-John Thompson Nuclear Energy Co., Ltd.　　Saint-Gobain Industries
Aepli, Otto T.
St. Clair, Richard W.

(12) 第一个名字 (First Name) 不按照外文的拼写转换成英文的拼写。例如：Istvan 和 Elena 按照他们本国的拼写，不把它转成英文惯例 Stephen 和 Heleno。

(13) 在原始文献中出现的作者姓名中的发音符号全部不用。在把两个字符，如“ae”和“oe”印成一个字符时 (例如：“ae”和“oe”)，把它们分成两个字符。德文中的“β”可能转换成“s”或“ss”。因为在按照原始文献直译成英文时，对变音符号做了变动，鼓励读者核对另外可能的拼写方法。例如，作者姓名中有德文“ä”、“ö”和“ü”时，它们可能简单表示为“a”、“o”和“u”，或者直译为“ae”、“oe”和“ue”。

(14) 俄文中的作者姓名按照附录 6-2 所表示的方法直译。来自中国大陆作者的姓名按照汉语拼音方法拼写。来自中国台湾、中国香港和新加坡作者的姓名按照 Wade-Gille 法音译。日本人的姓名按照修订的 Hepburn 法音译。

(15) 西班牙作者有时使用他们父亲的姓，有时再加上他们母亲婚前的姓。例如，西班牙作者可能用 Savador Gallego 或者 Salvador Gallego Royo。这一姓名在作者索引中一般为 Gallego Royo, Salvador。使用这一复合姓是为了尽量容易区分作者，但是读者在搜索作者姓名时，还需要考虑另外可能的形式。

6.4.3　主题索引

CA 的 10 多种索引中以主题索引 (Subject Index) 篇幅最多，应用最广。以便使用者有效检索主题索引，在每卷的主题索引前面都有说明。从 Vol. 76 起将主题索引分成普通主题索引和化学物质索引。

期索引中使用的是未经过规范化处理的关键词，而卷索引中使用的是经过挑选和规范化的主题词，在“主题索引”中可以作为主题词使用词的词汇有下列几种：① 元素或化合物的名称。新发现的元素或化合物，或是以前发现的元素或化合物，在分析、生物研究、来源、制备、反应、性质、用途等方面有新的成就。② 反应名称。新的反应或通过某一反应合成新的物质。③ 性能、研究、测试等名称。物理性能及研究、生物毒性、理论、概念及数据等方面的创新均可作主题范围。④ 化工单元操作或过程名称。⑤ 新的用途名称。

6.4.4　普通主题索引

文摘量逐年增多，CA 于 Vol. 76 起，主题索引分为普通主题索引 (General Subject Index, GS) (包括概念性主题和化学物质类) 及化学物质索引 (CS) 两种。

普通主题索引包括所有不适合特定化学物质的主题词。因此，普通主题索引包括某一类化学物质、组成不完全明确的物质与材料、岩石、物理化学概念和现象、反应、工业化学和化学工程的装置和过程、生物化学和生物学、动植物俗名和科学名称等。

CA 索引基于主题，而不是单词。普通主题索引有单数和复数主题词 (Headings)。每

个都有其相关范围。原则如下：

（1）单数主题索引（Singular Index Headings） ①无唯一组成的特殊物质。如：空气、花岗岩、汽油、蒸汽。②动、植物及它们的一部分。如：动物、心脏、根、橡树。③无形的概念、力、性质、过程等。如：密度、Diels-Alder 反应、能级、熔点。④一些通常以单数使用的集合名词，当用复数时意义改变。如：Coal（单数是煤，coals 表示责备）、Wood（单数是木头，woods 表示森林）。

（2）复数主题索引（Plural Index Headings） ①化学物质种类。如：醇类、电荷转移络合物、铜矿石、氧化物、聚酯。②唯一主题的集合名词。如：涂料、清洁剂、氧化催化剂、聚酯纤维、分光计。③ 以拉丁文出现的词条。如：原子核、细菌、光谱等。

主题索引的这个大变动，使索引中的化学物质的名称起了更大的变化。如果感到无从下手时，可以使用 1999 年及以前的索引指南（Index Guide）。

6.4.5 化学物质索引

化学物质索引（Chemical Substance Index，CS）收录所有具体化学物质的主题词，它们是由化学文摘社（CAS）登录系统予以登记的。对于每一种具体化学物质，CAS 都给予一个特定的登记号，称为化学物质登记号。

化学物质索引中包括下列内容：各种元素和化合物（包括它们明确的和不明确的衍生物）；各种金属的合金；各种矿物（不是岩石）；化合物具体的混合物和聚合物；具体的抗生素、酶、激素、蛋白质和多糖；大多数基本粒子；具有代号和商品俗称的物质（而不是通常看作商品总称的少数商品）。

6.4.6 分子式索引

由于分子式是化学物质不变的一种表达方法，很容易从它的分子结构中推出。CA 中的分子式索引（Formula Index，FI）提供了一个迅速找到有关化合物文献的方法。识别所需化合物的分子式索引名称比从结构式中得到相同的名称要简单得多。

在分子式索引中的索引名称与化学物质索引中印出的名称完全相同。但是，有几个化合物的分子式已知，而其结构式未知，只在分子式索引中列入。

分子式索引中的特殊分子式，常常是几种类型衍生物的组合。分子加成化合物和离子配位络合物通常以其母体的分子式（不是以全部的分子式）编制索引。聚合物以它们的单体分子式出现。醇类、胺类、酸的金属盐、氢氧化物、乙酸盐以它们衍生的物质的分子式编制索引。对于含有 70 个氨基酸以上的肽链（缩氨酸）和含有 8 个以上核苷酸的多核苷酸的分子式索引的条目从第 117 卷起已停止使用。这些生物聚合物现仅在化学物质索引中用其名称进行检索（见 1999 年版索引指南，附录Ⅳ）。

（1）FI 著录格式 分子式索引著录格式见图 6-6。著录格式说明：①分子式。对聚合物结构中重复的单元，分子式中把重复的单元放在括号内，重复数 n 用下标表示。②母体标题。③取代基。④标题说明语。另起一行。⑤CAS 登记号。⑥文摘号。⑦短线代表母体。⑧如果一篇原始文献对于某化学物质仅有分子式，没有完整的名称或足够的结构细节来得到一个确定的物质名称，它不收录在化学物质索引中，该分子式收录于分子式索引中，用 Compd 化合物或者化合物的类型（酸、酯、酮）表示索引，加入所报道的物理性质。⑨交互参照。⑩衍生物交互参照。

（2）FI 著录规律 ①化合物按结构式先列出各种元素的原子数目，再查分子式索引。②无机物分子式按字母顺序排列。如 H_2SO_4 排成 H_2O_4S，Na_2CO_4 排成 CNa_2O_4。③含 C 化合物（包括有机物）分子式排列顺序先为 C 及 H，按原子数目编排，其他元素按字母顺序及原子数目编排。分子式按照字母顺序排列，每种化学元素符号以其所含的数目作为下

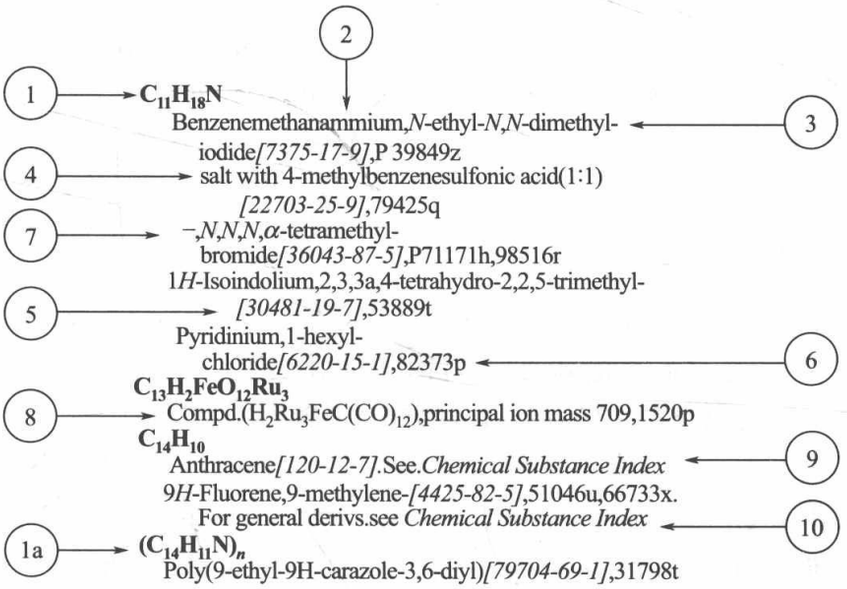


图 6-6　CA 分子式索引著录格式

标，可以看作是一单独的单元。因此，H_4 排列在 H_5 前面，所有以 CH 开头的分子式要放在以 CH_2 开头的子式前面。如：

$Al_6Ca_6O_{14}$	C_2Ca	CH_2O	$C_2H_5AlBr_2$
CCl_4	C_2H_4O	CH_3Cl	CaO_3Ti
CHC_{l3}	$(C_2H_4O)_n$	CO	H_4Sn
CHNO	$C_2H_4O_2$		

④ 一个分子式代表多种化合物时，各同分异构体的名称按名称母体的字母顺序编排，取代基后面加一横线，排在母体之后。⑤ 化合物名称后有说明语时，应合并确定分子式。⑥ 结晶水不列入分子式索引中计算，只在名称中提及。⑦ 化合物与另一物质聚合、加成、成盐时，常在分子式下标出 polymer with、compd. with、salt with 等词，此后化合物不计算字母。例如：

$C_6H_{12}O_2$：

Acetic acid

1，1-dimethylethyl ester [540-88-5]，16075a

C_3H_7NO

2-Propanone

oxime [127-06-0]，P 68173a

C_2H_3Cl

Ethene，chloro-

polymer. . with 2-methyl-1-propene，graft

[126968-92-1]，P 63637f

C_4H_8

1-Propene，2-methyl-

polymer with chloroethene，graft [126968-92-1]，

P 63637f

共聚物、分子加成化合物、离子配位络合物的组分：

$C_4H_4O_4$

2-Butenedioic acid (2Z) -

polymer with 1-propene [38809-92-6]，P 26139z

$C_{18}H_{15}AsO$

Arsine oxide，triphenyl-

compd，with (iodoethynyl) benzene (1：1)

[77190-20-6]，1531 In

C_8H_5I

Benzene，(iodoethynyl) -

compd，with triphenylarsine oxide (t：1)

[77190-20-6]，15311n

$C_{l3}S$

Sulfur (1+)，trichloro-

(OC-6-11) -hexachloroantimonate (1-)

[36487-44-2J，184750w

⑧ 酸、醇、胺的金属盐，碱性母体化合物的酸盐，均不列入分子式索引中计算字母。例如：

BH_3O_3

Boric acid (H_3BO_3)

aluminum holmium (3+) salt (4: 3: 1) [51580-72-4], 17149x

$C_2H_4O_2$

Acetic acid

aluminum salt [139-12-8], 22487c

$C_5H_{11}NO$

2-Butanone, 1-amino-3-methyl-

hydrochloride [21419-25-0], P 97300x

$C_8H_{10}NO$

Pyridinium, 3-acetyl- 1-methyl-

iodide [6965-62-4], 110671r

⑨ 对于简单或普通物质的分子式，只在分子式下告知：see Chemical Substance Index。⑩ 原始文献中只有分子式，无完整名称或结构式的化合物，化学物质索引不予著录，但列入分子式索引。在分子式项下标注 Compd.，并告知物理常数。

6.4.7 专利索引

(1) 专利号索引 (Numerical Patent Index) 1935～1980 年有专利号索引。已知某国的专利号及其大概批准年代，即可方便地查到。按专利国家名称的罗马字母与专利号顺序排列。

(2) 专利对照索引 (Patent Concordance Index) 1963～1980 年有专利对照索引。

(3) 专利索引 (Patent Index) 从 1981 年第 94 卷开始将专利号索引与专利对照索引合并为“Patent Index”。每期、每卷和五年积累本均有专利索引。

专利索引收录了该周内专利文献的信息。它包括了新编入文摘的专利文献，对已经编过索引的发明，如果有不止一篇文献介绍了该发明，则编有相互参照，还有对于某一发明第一次编入索引的文献与该发明有关的所有专利文献的清单。在每个国家下面，专利文献按数字次序排列。化学文摘中专利文献的代码见表 6-4。

表 6-4 化学文摘中专利文献的国家代码 (Country Codes)

国家代码:国家(中文)	国家代码:国家(中文)	国家代码:国家(中文)
AT:Austria(奥地利)	CZ:Czech Republic(捷克)	IL:Israel(以色列)
AU:Australia(澳大利亚)	DE:Germany(德国)	RO:Romania(罗马尼亚)
BE:Belgium(比利时)	DK:Denmark(丹麦)	RU:Russian(俄罗斯)
BR:Brazil(巴西)	FI:Finland(芬兰)	SE:Sweden(瑞典)
CA:Canada(加拿大)	FR:France(法国)	SK:Slovakia(斯洛伐克)
CH:Switzerland(瑞士)	GB:United Kingdom(英国)	US:U. S. A.(美国)
CN:China(中国)	HU:Hungary(匈牙利)	ZA:South Africa(南非)

EP:Europe Patent Organization(欧洲专利组织)
WO:World Intellectual Property Organization(世界知识产权组织)
SU:Union of Soviet Socialist Republics(前苏联)

化学文摘中专利文献的类别代码 (Kind Codes) 因国家或地区组织而不同。

6.4.8 环系索引

环系索引 (Index of Ring System) 是专门为查找环状有机化合物文献编制的一种索引。复杂的环状物的命名和分子式测算都比较困难，但检索环系索引较为容易。检索环系索引不仅掌握化合物的名称，而且可以根据有无收载，决定是否需要进一步检索化学物质索引。

6.4.9 登记号索引

CAS 在 CA 中，给化学成分、结构及化学键性质确定的每一种化学物质都编一个登记号，这被称为登记号索引 (Registery Number Index)。登记号由三部分组成，用短线连接，第一部分最多六位数，第二部分两位数，第三部分一位数，如：4-乙基溴苯的化学物质名称为 Benzene, 1-bromo-4-ethyl；登记号为 [1585-07-5]；分子式为 C_8H_9Br。

在庞大的化学文摘社的处理系统中，这一编号把结构和有关的物质名称和其他索引数据联系起来了。CAS 于 1969 年起出版登记号索引（71、72～73、74～75 卷），1974 年起改出登记号手册（CAS Registry Handbook Number Section）。

目前，CA 登记号在国际文献与试剂厂商的产品目录中通用。

6.4.10　化学文摘社来源索引

CAS 为了节省字数，将 CA 所摘录的刊物或图书名称以缩写形式表示。名称中的介词（如 of、in、for）和冠词（如 the）一律省去，并对非拉丁语系统的杂志名称音译为英文名称，也采用缩写形式表示。这对读者寻找不太熟悉的期刊原文增加困难。为便于读者了解 CA 所摘录的期刊名称，在第 66 卷以前的一些卷号中刊出了摘录期刊一览表（List of Periodical Abstracted）。1970 年独立出版《化学文摘社来源索引》（Chemical Abstracts Service Source Index，CASSI）。包括了各期 CA 摘录一览表，内容包括期刊的缩写和全称、出版文种、初刊与现期卷号和年份、定价、出版机构、各大图书馆统一编目名称及馆藏情况等。已经出版六次累积本，见表 6-5。

表 6-5　CASSI 出版时间和覆盖时间范围

版次	出版时间/年	时间范围/年	册数	版次	出版时间/年	时间范围/年	册数
第一版	1970	1907～1969	1	第四版	1985	1907～1984	2
第二版	1975	1907～1974	2	第五版	1990	1907～1989	
第三版	1980	1907～1979	2	第六版	1995	1907～1994	

每次累积本出版后，在每季度出季刊补充本（CASSI Quarterly Supplement），报道每季度内 CA 摘录刊物的变化情况；在每年第四季度出补充本，报道该年前三季度补充本的内容。

6.4.11　索引指南

索引指南（Index Guide）是使用 CS 和 GS 的重要工具。1968 年首次出版，包括正文和附录部分。正文是将原来分散在主题索引中的 See（见）、See Also（参见）、Indexing Notes（索引注释）、Synonyms（同义词）、Structural Diagram（结构式图解）等内容全部抽出来，进行统一标准化、按标题词字顺排列而成。

6.5　CA 检索途径及实例

6.5.1　CA 检索途径

CA 是一种索引体系比较完整，检索途径较多的工具，下面列出 CA 主题、分类、著者、序号和分子式五种途径及其相互关系图，供检索 CA 时使用（见图 6-7 与图 6-8）。

（1）期索引检索途径

（2）卷索引检索途径

6.5.2　检索实例——甲醇氧化制甲醛

检索课题：甲醇氧化制甲醛。

检索途径：主题途径、分类途径、分子式途径和序号途径。

首先分析研究课题：甲醛是重要的基本有机原料，甲醛的水溶液是有刺激味的无色液体，俗称福尔马林。工业上常用银、铜作催化剂将甲醇氧化脱氢制甲醛，但成本极高，在此预找到一条甲醇制甲醛的最佳工艺过程或找到一种高活性、低成本的工业用催化剂。

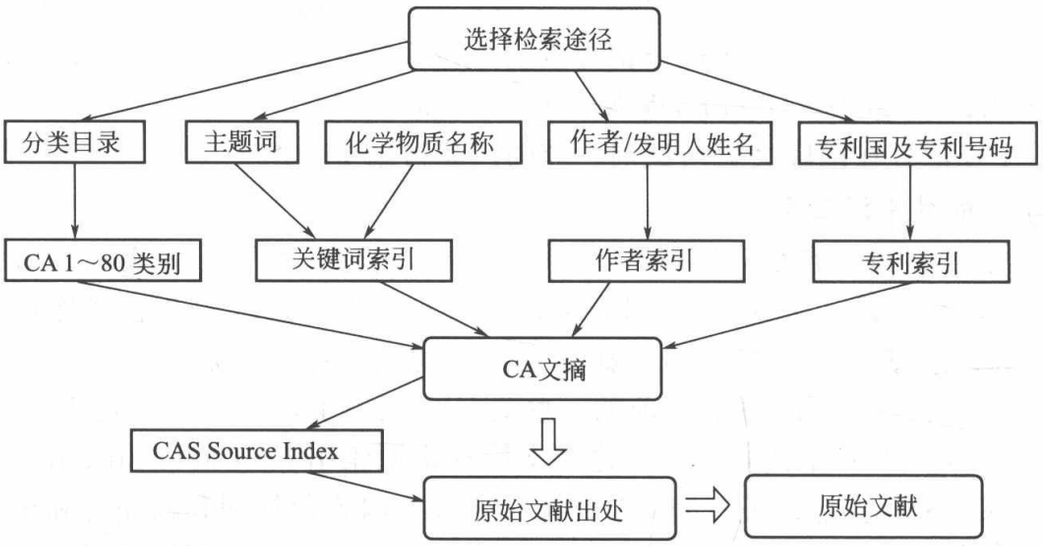


图 6-7 CA 期索引检索途径

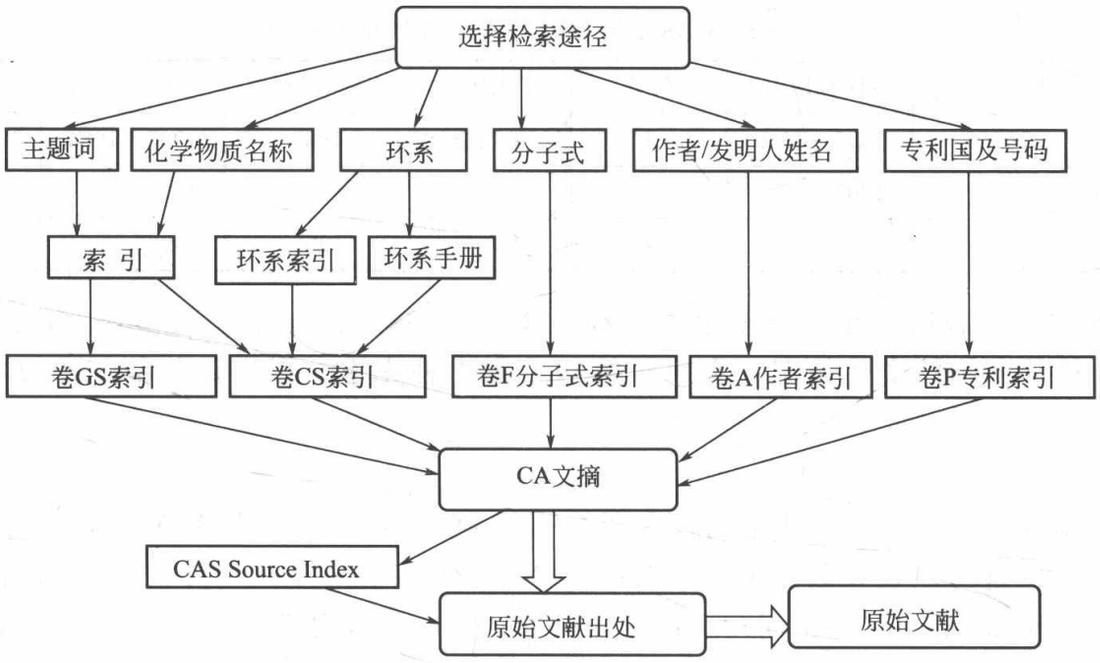


图 6-8 CA 卷索引检索途径

选择索引标题（主、副标题词）：若使用“甲醛（Formaldehyde）”为索引标题，则副标题词为“制备（Preparation）”、“制造（Manufacture）”；使用“甲醇（Methanol）”为索引标题；则副标题词为“反应（Reactions）”、“氧化（Oxidation）”。甲醇的分子式为 CH_3OH；甲醛为 HCOH，按分子式索引元素符号的排列规则，应重新改写为 CH_4O 和 CH_2O。

在此使用关键词索引和分子式索引。

6.5.3 以“关键词索引”入手查阅期文摘

（1）选择关键词 甲醛；Formaldehyde；制造；Manufacture。甲醇；Methanol；氧化；Oxidation。

（2）查 Vol 76，No11 的“Keyword Index”按字顺查得：

Formaldehyde① manuf. ② 58985k③

Methanol① Oxidn② 58985k③

说明：①主要关键词；②其他关键词；③文摘号。

（3）利用文摘号在同期文摘部分查得：

76:58985k ① Production of formaldehyde by oxidation of methanol ② Dostal, Jasef; Hajek, Jaroslay③. Czech. 139, 407 ④(CL C07C) ⑤, 15 Dec 1970 ⑥, Appl. 15 Nov 1968 ⑦; 3pp. ⑧ The title process employs an app. …… ⑨ L. J. Urbanek⑩

说明：①文摘号；②专利题名；③发明人；④专利号（专利国代码及专利流水号）；⑤国际专利分类号；⑥专利公布日期；⑦专利申请日期；⑧专利说明书页数；⑨专利内容摘要；⑩文摘员。

（4）利用专利号（Gzech. 139，407）向专利说明书收藏单位索取专利说明书。

6.5.4　分子式途径检索卷索引

（1）已知甲醇的分子式为 CH_4O；甲醛为 CH_2O。

（2）查阅 Vol 126 分子式索引 F_2 得：

CH_2O
Formaldehyde [50-00-0] See Chemical Substance Index
CH_4O
Methanol [67-56-1] See Chemical Substance Index

由上可知甲醇 Methanol 和甲醛 CH_2O 都是规范主题词，可以直接到化学物质索引中查找文摘。

另外知道任何一个国家的专利号，均可以用“专利索引”去检索有关的专利文献。也可以利用著者姓名去检索有关化学化工文摘，这与各种检索工具利用著者途径去检索的方法一致。

6.6　网络 CA 检索

基于 CA 在化学化工信息检索方面的重要性，化学文摘社（CAS）于 1966 年创建了计算机可读取数据库，1977 年已提供光盘检索系统，1995 年开发了 SciFinder，2008 年发布了 SciFinder 网页版，为用户提供更强大的检索功能并使全世界的用户可以随时随地访问 CAS 的数据库。

6.6.1　化学文摘社主页直接检索

CAS 是一家世界上最大的拥有化学信息数据库的最有影响力的机构，它提供了世界上最全的化学物质登记和索引（CAS Registery），其信息来源于全世界，包括 1 万多种科技期刊和 59 个权威专利机构。

CAS 的主页网址为 www. cas. org 或 info. cas. org，其检索服务是收费的，最近新推出的免费物质检索（substance search），主要是联合了 Wikipedia 检索平台，其检索网址为 http://en. wikipedia. org/wiki/Main _ Page，可免费检索各种物质的详细信息。

CAS 持续开发新型产品（www. cas. org/news/product-news），其中，最知名的是 SciFinder，其使用模式越来越贴近用户，有关其使用方法，建议阅读 SciFinder Help (https://scifinder. cas. org/help/scifinder/R38/index. htm # references/search _ by _ research _ topic. htm)，其中有十分详细的使用帮助。

6.6.2　《化学文摘》光盘检索

CA 光盘版数据库在 20 世纪末应运而生，目前 CAS 提供了 1977 年以来的美国《化学文摘》（CA on CD）光盘检索系统。光盘版 CA 结构基本上与印刷版相同，如“普通主题”“高级检索”“化学物质”“分子式”等几个主要检索入口的检索结果与印刷版完全相同。光

盘检索系统 CA on CD 提供四种基本检索途径：Browse（浏览检索）、Search（高级检索）、Substance（化学物质名称检索）、Formula（分子式检索）。也有其他检索途径：相关词检索、登记号检索。但是，目前 CA 光盘版订购单位较少，而且收录内容更新速度慢，检索中也不能实现全文链接。

6.6.3 CA 网络数据库 SciFinder Scholar

从 1995 年 CAS 开发 SciFinder 数据库，开始实现了在线检索 CA 及相关数据库资源。CA 网络检索就是通过 SciFinder Scholar（SFS）数据库检索，网络版化学文摘 SciFinder Scholar，更整合了 Medline 医学数据库、欧洲和美国等三十几家专利机构的全文专利资料以及化学文摘 1907 年至今的所有内容。它有多种先进的检索方式，如化学结构式和化学反应式检索等，还可以通过 Chemport 链接到全文资料库以及进行引文链接。

SciFinder Scholar 数据库资料包含 5 大数据库：文献数据库（CAplus 与 MEDLINE）、结构数据库（REGISTRY）、反应数据库（CASREACT）、商业来源数据库（CHEMCATS）和管制数据库（CHEMLIST）。其中，CAplus 数据库包含 9500 多种期刊的文献和 50 多个专利发行机构的专利，还有会议摘要、技术报告、图书、学位论文、评论等。MEDLINE 数据库包含来自 70 多个国家、生物医学相关的 3900 多种期刊文献。REGISTRY 结构数据库是世界上最大、最全的物质数据库，有 2950 多万个有机和无机物质，5700 万个蛋白质核酸序列，还包括金属、合金、矿物质、有机金属化合物、配合物、同位素、聚合物等物质。CASREACT 反应数据库包括 900 多万条单步和多步的反应，涵盖了无机反应、有机反应、有机金属反应、生化反应等多个方面。CHEMCATS 商业来源数据库提供来自全球 734 家化学品供应商的 834 种产品目录，包括产品价格信息和供应商联络方式；目前有超过 860 万条商业化学物质记录，收到新的商品目录随即更新。CHEMLIST 管制数据库提供来自 19 个国家和国际性组织的管制化学品清单，包括物质特征、详细目录、来源以及许可信息等。有超过 23 万种管制物质的详细清单，每周更新。

2012 年以前，SciFinder Scholar 数据库检索主要基于 SciFinder Scholar 客户端软件，目前，SciFinder Scholar 主要提供 Web 方式访问，SFS 开发的网页版拥有更加强大的功能，更加方便在线检索。

6.6.4 SciFinder Scholar 客户端检索

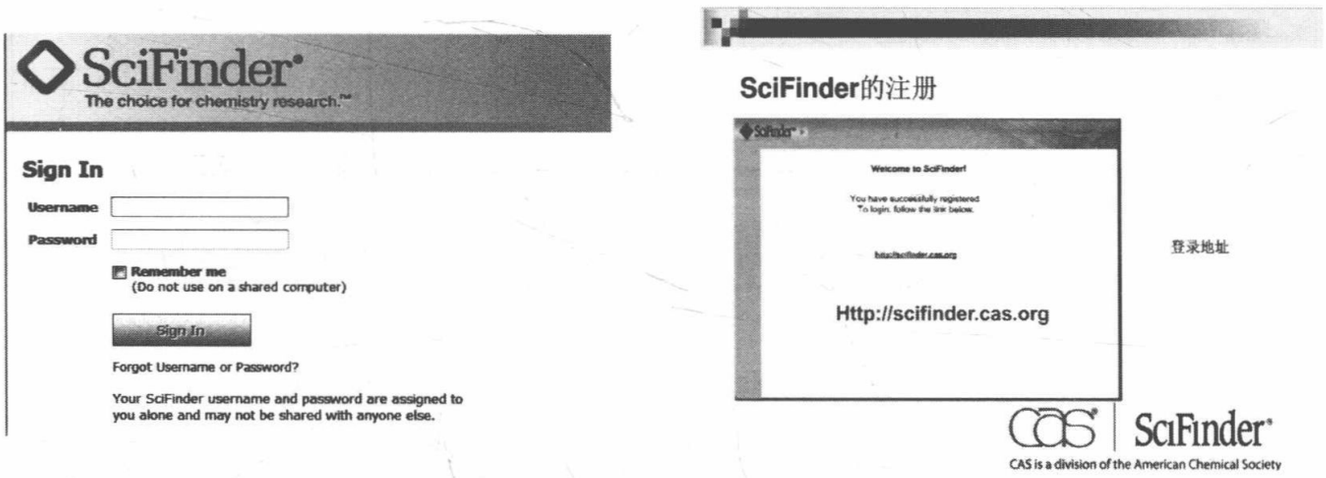
利用 SciFinder Scholar 客户端检索 CA 数据库，首先需要安装 SciFinder Scholar. exe 程序，也可以同时安装 ViewerLite 用于查看 3D 结构。安装成功后运行程序，通过点击 New Task 功能键，创建检索任务，相应出现三种检索方式，包括普通检索（Explore）、精确检索（Locate）和浏览（Browse）。读者可根据自己的需要选择点击三种检索菜单，分别出现相应的检索界面实施检索。所得检索结果的后处理，包括检索结果的存储和全文的链接。进一步分析处理检索结果包括检索结果分析（Analyze）、检索结果精简（Refine）和检索结果的相关信息（Get related）三种功能，可以帮助读者分析整理检索结果。

6.6.5 SciFinder Scholar Web 版检索

目前，基于 SciFinder Scholar 数据库的网络检索主要是利用 Web 版。SciFinder Scholar Web 版不需要安装软件，只需要 Web 浏览器，但需要注册有邮件地址的用户信息，其检索功能比客户端更加强大。下面主要介绍 SciFinder Scholar Web 版的使用。

（1）注册　使用 SciFinder Scholar Web 版（https：//scifinder. cas. org/）首先要以用户身份注册，建立自己的 SciFinder 用户名和密码。在提交表格之后，CAS 为您发送电子邮件，指导您完成注册过程。注册成功后，打开并阅读 CAS 的电子邮件，如果您接受

SciFinder 的使用条款，请单击邮件内的链接完成注册过程，显示确认页面（图 6-9）。



(a) 主页　　(b) 注册界面

图 6-9　SciFinder Scholar Web 版注册界面

（2）检索方式　登录成功后，进入主界面。页面上方菜单提供三种功能（图 6-10），包括检索（Explore）、保存（Saved Searches）和 SciPlanner 平台；左侧菜单显示相应三种检索方式的具体限定条件，包括文献检索（Explore References）、物质检索（Explore Substances）和反应检索（Explore Reactions）。其中文献检索可以通过 6 种途径，包括研究主题、作者姓名、单位名称、文献名称、期刊、专利和标签；物质检索限定 5 种途径，包括化学结构、Mukush 检索、分子式、性质、标示；反应检索主要通过反应物、反应式结构检索。页面中间提供简单检索和高级检索菜单。

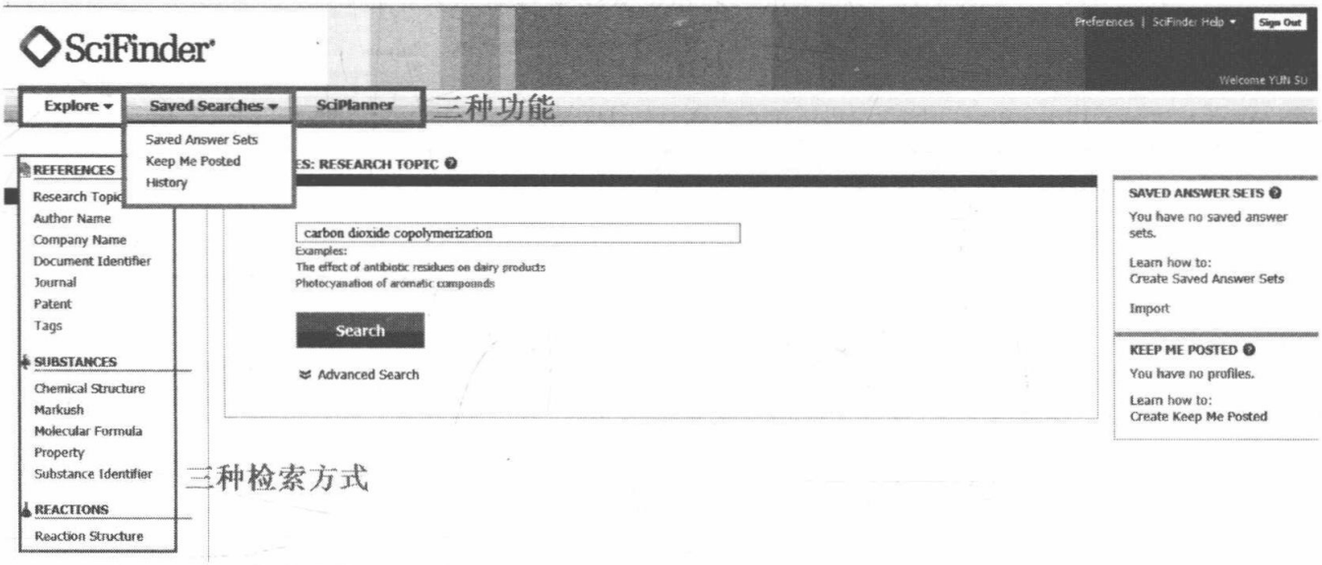


图 6-10　SciFinder Scholar Web 版主界面

检索结果按照输入检索内容的相关性排列，包括完全一致的、同时出现在句子或者标题中、同时出现在标题、摘要、索引中、包含同义词和近义词的。根据自己的检索目的选择相应的结果，更清楚了解检索结果，最大程度获得检索结果信息。例如，利用主题检索，输入检索词“carbon dioxide copolymerization”，检索结果如图 6-11 所示，包括两种结果，其一是文献题目中包含检索词且其出现形式和输入格式一致；其二是文献题目中包含检索词但其出现形式和输入格式不一致。读者可以根据自己的检索要求选择相应的检索结果，也可以全部选择。分别打开两种检索结果，其页面如图 6-12 和图 6-13 所示。

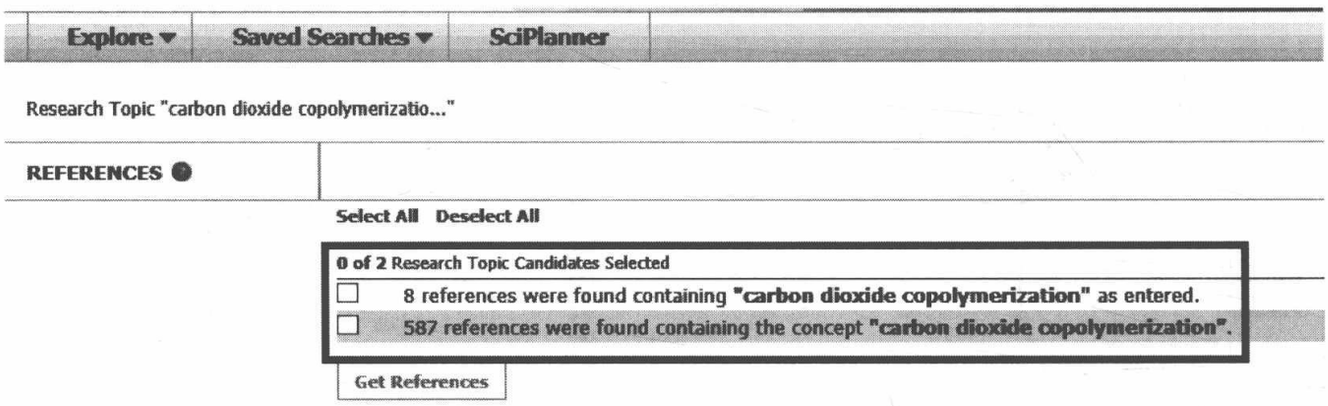


图 6-11 SciFinder Scholar Web 版检索结果界面 1

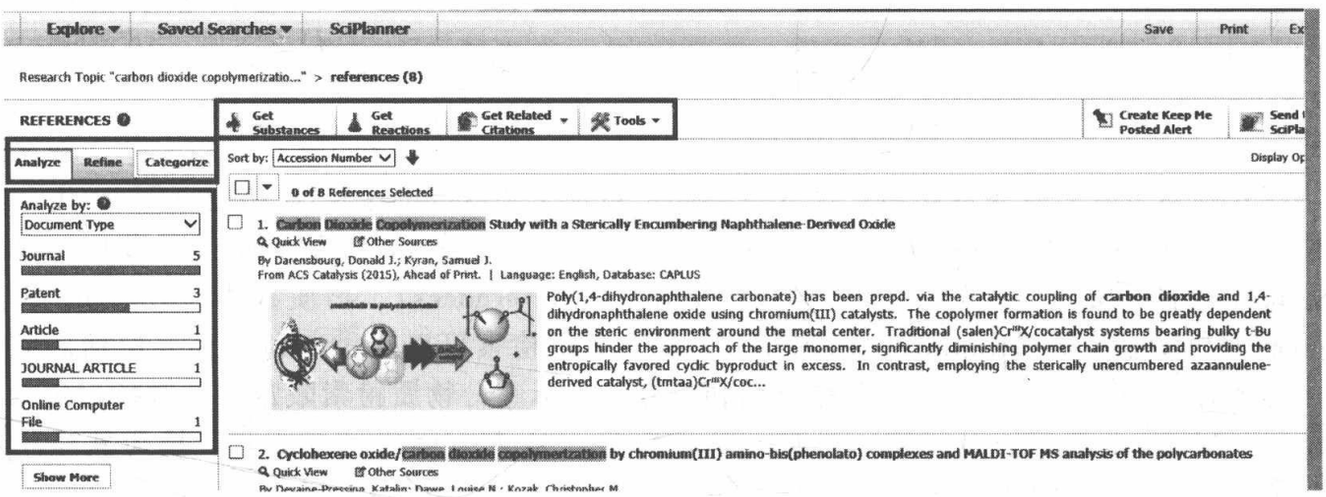


图 6-12 SciFinder Scholar Web 版检索结果界面 2

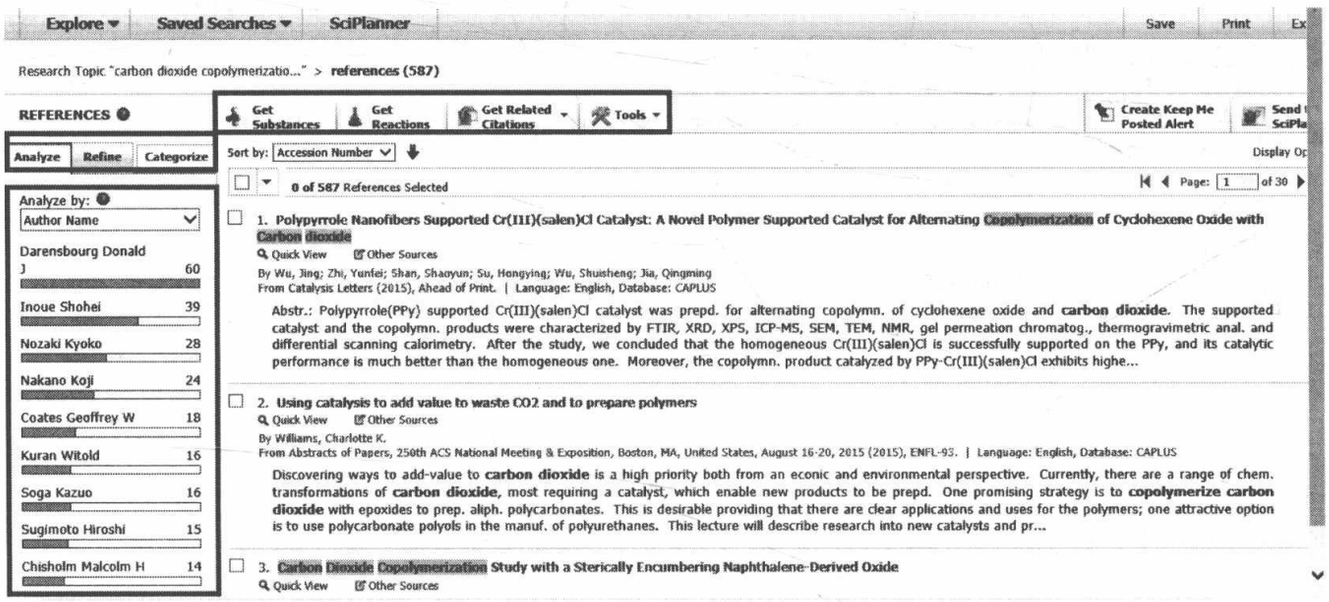


图 6-13 SciFinder Scholar Web 版检索结果界面 3

(3) 检索结果处理 SciFinder Scholar Web 版对于检索结果的处理提供多种方式(图 6-12和图 6-13),能够让读者全面了解检索结果。其一,检索结果页面的左边菜单,包括 Analyze(分析)、Refine(精炼)和 Categorize(分类)三种功能,其中分析工具提供 12 种分析方法,包括作者名、CAS 登录号、题目、机构名、数据库、文献类型、索引词、CA 标题、期刊名称、文献语种、出版年限和附加术语;精炼工具提供 7 种限定方法,包括主题

词、作者名、机构名、文献类型、出版时间、数据库和文献语种；分类工具主要是对文献按照学科方向进行分类，可以逐级进行分类。其二，检索结果页面的上边菜单，包括物质获取（Get Subtances）、反应获取（Get Reactions）、引用文献获取（Get Related Citations）和文献工具（Tools）四种，可以有效从检索结果中获取所需要的文献信息。例如，点击物质获取和反应获取菜单其界面如图 6-14 和图 6-15 所示。第三，检索内容的查看和保存，SciFinder Scholar Web 版提供检索结果和历史的输出、存储，包括 Save 和 Export 等功能菜单；确定文献摘要的查看可以点击相应文献题目（图 6-16），同时也提供相应文献全文链接（图 6-17）。特别是对于专利文献，目前提供 pdf 格式全文链接，可以方便直接地从 SciFinder 获取美国专利的全文，而不需要通过访问美国专利局官网。

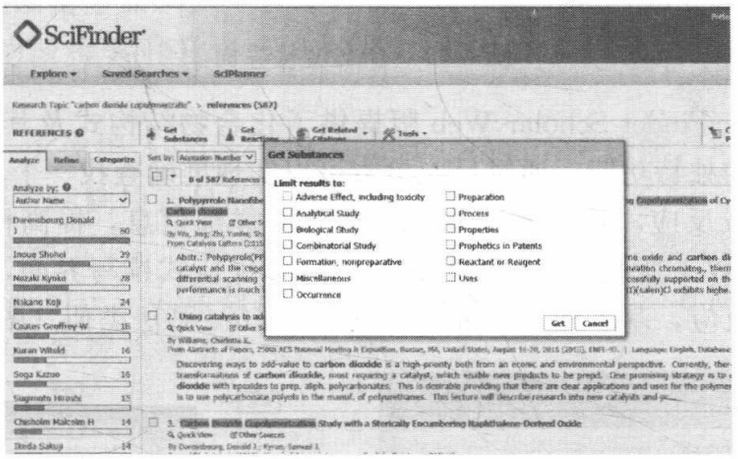


图 6-14　Get Subtances 检索界面

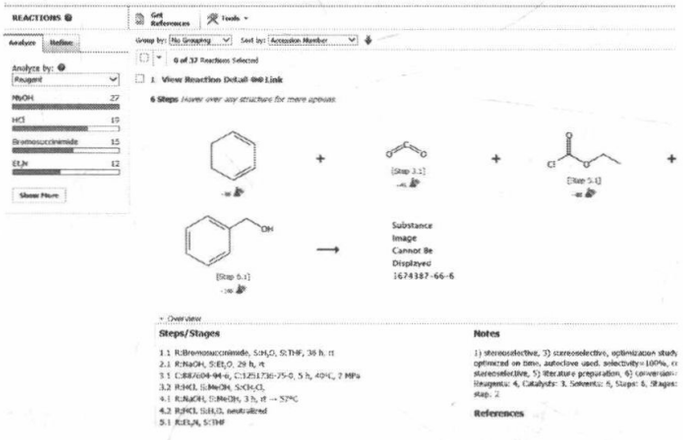


图 6-15　Get Reactions 检索界面

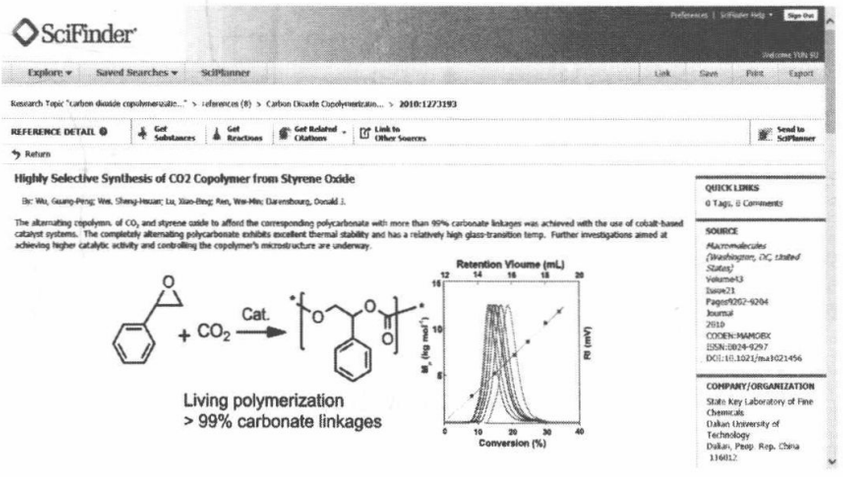


图 6-16　摘要查看界面

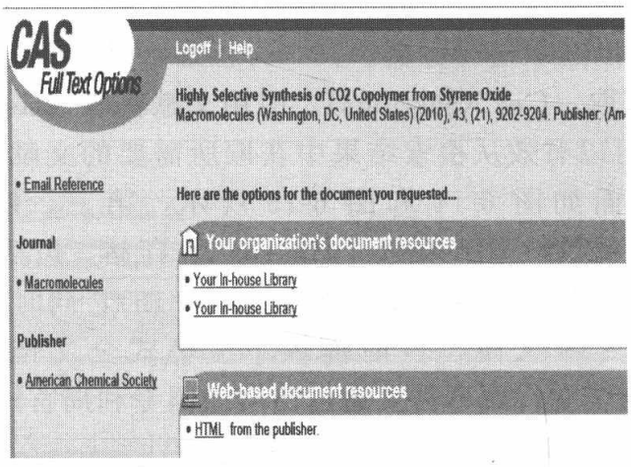
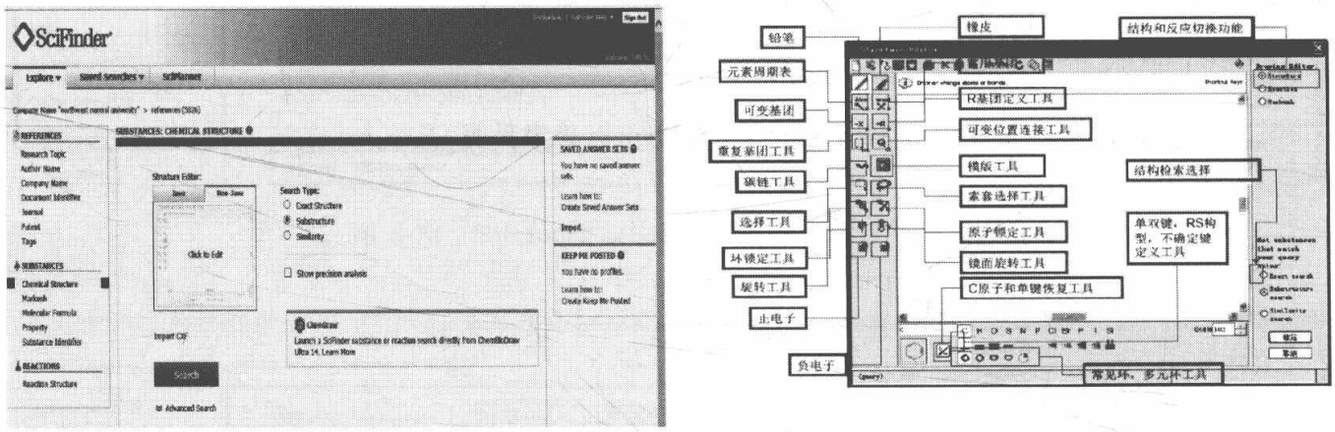


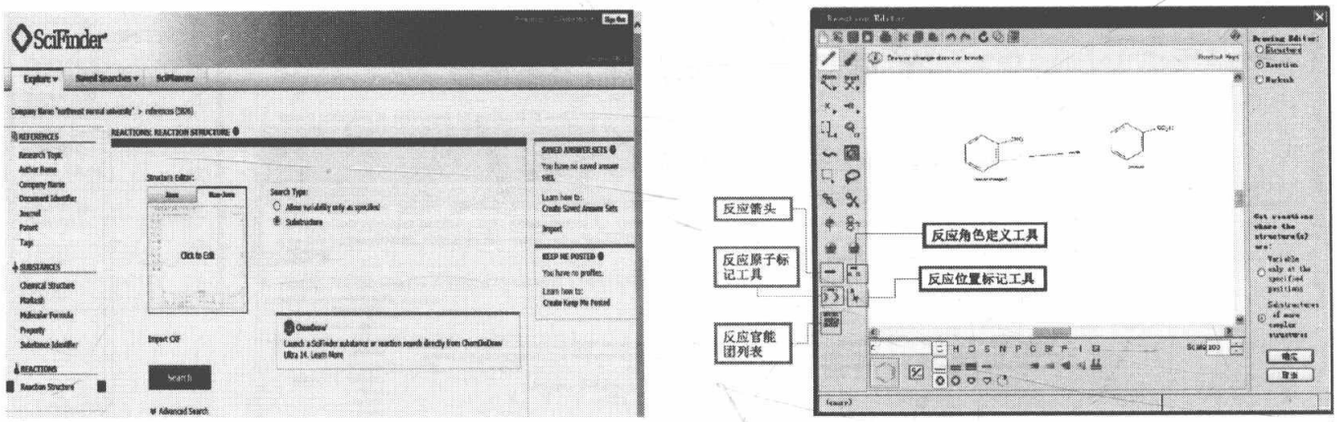
图 6-17 全文链接界面

（4）反应检索 SciFinder Scholar Web 版提供了化合物结构式及其反应的检索，这是 CA 网络数据库在线检索的独特功能。通过反应检索可以实现准确查找一个具体物质或反应，同样也可以查找一类物质或反应，获取相应物质和反应的详细信息，提高检索效率，扩大检索途径。SciFinder Scholar Web 版提供了化合物的结构式和反应式撰写界面，不需要安装 Java 插件即可编辑物质结构和反应，基本和 Chemdraw、Chemoffice 画法类似（图 6-18 和图 6-19）。



(a) (b)

图 6-18 SciFinder Scholar Web 版化学物质检索界面



(a) (b)

图 6-19 SciFinder Scholar Web 版化学反应检索界面

（5）检索注意事项

① 使用 SciFinder Scholar Web 版注册用户名，用户名必须是唯一的，且包含 5～15 个

字符。它可以只包含字母或字母组合、数字和/或以下特殊字符：——（破折号）、_（下划线）、.（句点）、@（表示“at”的符号）。密码必须包含 7～15 个字符，并且至少包含三个以下字符：字母、混合的大小写字母、数字、非字母数字的字符（例如@、#、%、&、*）。

② 目前 SciFinder Scholar Web 版检索都有并发用户数限制，请读者在检索结束后点击网页左上角的“Sign Out”及时退出，以方便其他读者使用（若登录后超出 15 分钟未进行操作，用户会自动退出）。

③ 对于检索内容输入，一般最好选择 2～3 个关键词；最好使用介词而不用布尔逻辑运算符，如 AND、OR、NOT 等；介词能被识别；常用缩写、复数、过去式能被识别；输入必须规范，否则会自动要求重输；输入时不同元素之间可用空格隔开，系统也会自动分割；聚合物则输入单体组成以括号加 X。

④ 有效使用化学物质检索和化学反应检索，实现物质信息及其反应信息资源的准确获取。

⑤ 对于检索结果，多使用 Analyze、Refine 和 Categorize 功能，可以获得更多的参考信息，深入了解检索结果，达到检索目的。

⑥ 可以随时查看检索历史，了解自己的检索历程，多尝试检索路线。

总之，SciFinder Scholar web 版数据库检索，用途广泛，使用方便，更新速度快，科研工作者应经常使用，熟练掌握其检索方法。

练　习　题

1. 简述美国《化学文摘》的主要特点。

2. 目前 CA 每年出版多少卷？每卷出版多少期？CA 包含哪五大部分？包含哪 80 类？

3. 在 CA 期文摘中“130：67985d”，其中 130 代表什么？67985 代表什么？d 代表什么？

4. 在 CA 索引的文摘号前常见“R”“B”“P”“cat”“pr”“rct”字符，它们所代表的含义分别是什么？

5. 印刷版 CA 索引中 Keyword Index、P、A、F、CS、GS。它们所代表的含义分别是什么？

6. 举例说明 CA 期刊论文的著录格式。

7. 举例说明 CA 卷索引中分子式索引的著录格式。

8. SciFinder Scholar 数据库包含哪些内容？

实践练习题

1. 分别以指导教师姓名、本人姓名为例，说明在欧美国家的英文期刊论文中作者姓名出现的可能形式，以及在 CA 作者索引中作者姓名出现的可能形式。

2. 将自己选定课题的主题词翻译为英文，然后从印刷版 CA 的期索引与卷索引中查找相应的文献信息并记录。

3. 在 SciFinder Scholar Web 版数据库中检索自己感兴趣的文献（或者从综合练习题中选择主题），记录检索过程，并对检索结果进行分析、总结。

第 7 章　Internet 化学化工资源

导　语

高速发展的 Internet 化学资源不但包括了传统文献的 10 大类型，还出现了大量新的信息类型。本章在对网络化学化工资源进行梳理后，从专业网站、网络数据库、化学试剂和仪器信息等方面进行介绍，另外介绍免费化学化工信息资源的获取方法。

关键词

Internet；化学化工资源；网站；免费资源。

高速发展的 Internet 正在改变着我们的学习、生活方式。Internet 化学资源不但包括传统 10 大文献类型，还出现了新的信息类型。与印刷版化学化工信息相比，网络信息内容范围与数量大幅增加，检索速度大幅度加快。当然，网络化学信息中诸多内容与印刷版相同，但也有其独特之处，如期刊与杂志网络版、Internet 上召开的化学类电子会议、化学软件、在线服务、在线讨论等，其优越性是印刷版无法比拟的。

本章在对网络上海量的化学化工资源进行梳理的基础上，主要介绍网络化学化工信息查找方法、化学化工专业信息网站、网络化学数据库、博客与论坛、网络会议与讨论、有关机构组织信息、仪器、试剂商业信息以及 Internet 上免费化学化工信息的获取方法等。一些基于传统化学化工文献更新换代后的相关网络资源在 2～6 章中已经做了介绍，如有关网上图书馆、书店、图书手册参见第 2 章，有关网上期刊、出版社参见第 3 章。

7.1　Internet 化学化工信息类型

近十年来，互联网的迅速发展为化学信息的传播提供了十分重要而便捷的平台，包含了丰富的化学化工信息资源，而且内容在不断扩充。其分类方式与传统出版物分类方式大相径庭，目前主要有以下 5 大类型。

(1)化学化工专业资源与数据库
化学化工相关图书、期刊、专利信息
化学化工专业数据库
化学化工教育资源与科普知识
化学化工软件
化学品数据与信息

(2)动态及相关动态与信息
化学化工新闻
化学化工会议信息
化学相关的讨论组、论坛等
化学相关的专家信息
招聘、求职信息

(3)化学相关机构信息
化学化工相关政府、科研教学机构
化学化工相关非官方协会与学会
化学品生产、销售及电子商务
(4)免费在线资源及在线服务
化学相关的教学资源
在线结构与理化参数
在线软件与翻译工具
(5)化学相关信息检索导航
搜索引擎、资源导航
主要参考工具
具体查找方法实例
其他资源搜寻工具

以上各个大类，可按照学科领域（主题、资源）特点分为若干小类。例如：化学数据库将主要包括以下类别：材料数据库、化学反应数据库、化学工业相关的数据库、化学品目录、化学数据库相关新闻、化学文献数据库、环境化学数据库、谱图数据库、数据在线计算程序、物性数据库、物质安全数据库、与高分子有关的数据库、与药物设计有关的数据库、与有机化学相关数据库、与材料相关数据库、专家数据库/化学家地址簿等。有关信息请查阅中国国家数字图书馆化学学科信息（The Chemical Information Network）门户网站（chin. csdl. ac. cn 或 www. chinweb. com. cn）。

值得注意的是，除政府、科研、教学、生产单位基于宣传的需要，提供了大量的动态且免费信息外，越来越多的单位也在提供不同类型的免费资源和在线服务，如：化学、材料、生物相关理化参数；在线翻译、在线软件、在线教学视频等。

7.2 Internet 化学化工信息查找方法

经过多年发展，Internet 网络中信息数量正在迅猛增加，查找具体问题的策略也经历着从分类查询到精准检索的发展。

7.2.1 在相关门户网站中进行分类逐级查询

分类逐级查询如同在图书馆分门别类地寻找专业图书，不是针对特定的书名或作者，而是按照类别、学科等进行分类，在各类别或学科下再依次缩小检索范围直至查询到目标标题。例如：通过化学信息门户网站浏览有关诺贝尔奖获得者“W. S Knowles”研究组的信息：首先进入化学信息门户网站（http：//chin. csdl. ac. cn/），进入网页主界面［图 7-1(a)］，点击网页底部“学科分类＞有机化学＞有机合成”链接［图 7-1(b)］，进入“资源浏览＞分类列表”界面，点击“不对称合成”链接，进入页面［图 7-1(c)］，即可看到有关 W. S. Knowles 研究组链接，点击进入就可以浏览相关信息。

分类逐级查询适合直接检索不到或检索条目涵盖范围较大的情况，它适用范围广，分类详细，信息量大，更适合交叉学科、新兴学科相关信息的查询。

7.2.2 通过综合网站或搜索引擎查找

在互联网发展初期，大型综合网站与搜索引擎网站分工不同。如果只是浏览最新成果或拓宽知识面，通过大型综合网站的分类目录逐级查找相关内容十分方便；如果已选定课题，通过搜索引擎搜索信息则方便快捷，具有传统图书馆不可比拟的优势。

目前，许多综合网站与搜索引擎网站都具有分类目录和搜索引擎功能。在此，重点介绍国内外典型知名网站与搜索引擎网站。

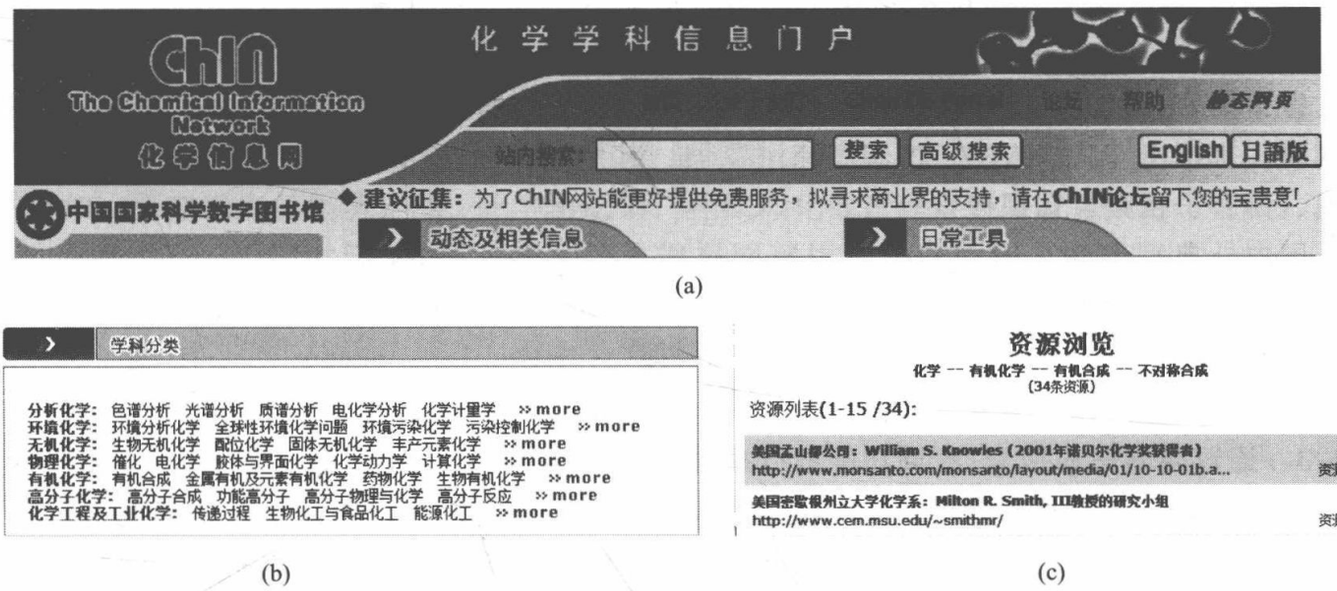


图 7-1　化学信息门户网站

(1) 百度 (www. baidu. com)　百度公司于 2000 年成立，是目前全球最大的中文搜索引擎。起名源于“众里寻她千百度”的中国古诗词。除具有搜索网站的功能外，还有许多功能 (www. baidu. com/more) (图 7-2)。典型的有：百科 (一部由全体网民共同撰写的百科全书)、词典、地图、常用搜索、大学搜索 (将搜索限定在某个大学的网站内)、地区搜索 (锁住特定区域，寻找身边信息)、教育网站搜索 (帮助用户轻松查找各类教育信息)、图片、文档搜索 (报告、论文、申请书，全部文档轻松找到)、政府网站搜索、知道 (总有一个人知道你问题的答案)、资讯、百度云等。有关百度的知识，可通过该网站获得。

(2) 谷歌 (www. google. com)　Google 是目前全球最大的搜索引擎 (图 7-3)，支持 132 种语言 (包括简体和繁体中文)，是一个快速、强大的搜索引擎。它的数据库是目前最大的，能找到别的搜索引擎所不能找到的资料。但是，其中文检索逊于百度。

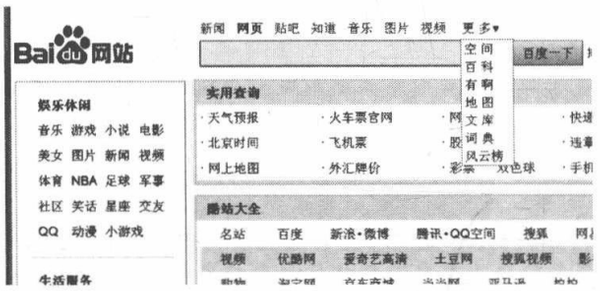


图 7-2　百度搜索界面

图 7-3　谷歌首页

(3) WorldWideScience (http://worldwidescience. org)　世界科学搜索引擎，可同时对 70 多个国家的 60 多个数据库进行一站式跨语言 (英语、中文等 9 种) 搜索。

(4) Academic Search (http://academic. research. microsoft. com/；http：//libra. msra. cn/) 微软学术搜索引擎，包括个人资料页、可视化搜索、会议征文、学科趋势、用户编辑等。

(5) 必应搜索 (cn. bing. com)　必应 (Bing) 是微软公司于 2009 年推出的全新搜索引擎服务。搜索内容包括网页、图片、视频、词典、翻译、资讯、地图等全球信息。对我国用户来说，在检索外文文献时，必应 (Bing) 是替代 Google 功能的重要工具。

(6) 雅虎 (www. yahoo. com)　雅虎 (Yahoo!) 是 20 世纪末互联网奇迹的创造者之一。雅虎是最老的“分类目录”搜索数据库，也是最重要的搜索服务网站之一。由于种种原因，目前国内雅虎服务已经全面停止，用户如需检索，需登录雅虎官网或其他站点，如雅虎

新加坡站点（sg. search. yahoo. com/）。

（7）搜狗（www. sogou. com） 搜狗是搜狐公司2004年推出的全球首个第三代互动式中文搜索引擎，目的是增强搜狐网的搜索技能，主要经营搜狐公司的搜索业务。在搜索业务的同时，也推出搜狗输入法、搜狗高速浏览器。其搜索内容包括音乐、图片、新闻、地图、说吧、博客、视频、知识搜索等。

国内外典型的知名网站与搜索引擎网站还有：hotbot（www. hotbot. com），WiseNut（www. wisenut. com），天网（maze. tianwang. com），excite（www. excite. com），go（go. com），ask（www. ask. com），好搜（www. haosou. com），有道搜索（www. youdao. com），中国搜索（www. chinaso. com）等。

7.2.3 通过网站站内搜索/查询功能进行搜索

利用搜索引擎中的“站内查询”功能，也可以方便地查找指定网站中的相关搜索内容。具体地说，如果你知道某个站点中有自己需要找的信息，就可以把搜索范围限定在这个站点中，以提高查询效率。“站内查询”功能的使用方式，是在查询内容的后面加上“site：站点域名”即可。例如：在搜狗中输入“张朝阳 site：news. sohu. com”，就可以在搜狐新闻中查找和张朝阳相关的信息。利用这种“站内查询”功能可以通过输入人名或专业名词来搜索化学工作者个人相关的研究工作及专业知识资源。

7.2.4 利用网络实名、浏览器搜索项直接查找

近年来，网络实名迅速发展，在浏览器（如：Internet Explorer）中添加网络实名软件后，在地址栏输入网站中、英文名称后按回车键，则迅速进入相应网站。

另外，在各浏览器界面上一般都有“搜索”项，或集成了“搜索”工具栏，可直接进行搜索。如腾讯TT浏览器中包含“搜搜”（www. soso. com）工具条。

7.2.5 通过化学化工专业搜索引擎查找

查找方法与综合网站相同。需要指出的是，化学专业科研活动的绝大多数资料都是以英文报告、论文等形式出现的，读者如想获得尽可能完全的搜索结果，就需要加强对化学专业英语和专业词汇的学习。

7.3 化学化工专业网站与数据库

有关化学化工专业网站与搜索引擎的建设，国内较国外起步晚，但近年来化学化工专用搜索引擎和网站的数目与内容不断更新，日趋完善。一般通过站点导航网站可以链接化学化工专用搜索引擎和专业网站。这里只介绍目前比较知名的一些网站。

7.3.1 国内重要网站与搜索引擎

（1）化学学科信息门户网（chinweb. com. cn；chemport. ipe. ac. cn） 是中国科学院知识创新工程科技基础设施建设专项“国家科学数字图书馆项目”的子项目，建设的目标是面向化学学科，建立并可靠运行Internet化学专业信息资源和信息服务的门户网站，提供权威和可靠的化学信息导航，整合文献信息资源系统及其检索利用，并逐步支持开放式集成定制。该网站介绍和链接各种专业数据库与许多国内化学化工信息网站。

（2）中国化工信息网（www. cheminfo. cn） 中国化工信息中心由化工部科技情报研究所和化工部经济信息中心合并而成，有对应英文网站（www. chem. cn）。“中国化工信息网”为国内外企业提供以下服务：综合信息服务、专业频道服务、产品信息服务、检索咨询服务、企业推广策划、企业竞争情报、网络营销推广等。

（3）CODATA 中国理化数据中心（dc. codata. cn/navigation/hx _ gj02. html）　提供了大量数据库与化学软件链接。包含化学领域 24 个专业数据库和天然气水合物方面 6 类专业数据库，所有数据均上网公开共享。其“理化数据导航”（dc. codata. cn/navigation/index. html），不但提供了数百个化学化工数据库链接网址，同时提供了大量其他信息源网站，如：研究机构、化学软件、化学出版物；在线理化数据库、产品目录及电子商务，而且标识免费的网站。这对普通上网用户十分重要。

（4）中国石油和化工文献资源网（www. chemdoc. com. cn/default. aspx）　现由国家科技图书文献中心化工分中心运营，有中外文科技期刊 2000 余种，科技报告、专题资料、会议录等文献十万余册，同时还馆藏有中外样本 5 万余册。

（5）化工引擎（www. chemyq. com）　内容包括网站、产品、性质、新闻、词典、图书等检索功能，可提供产品的供应或求购信息，自认为是国内最大的化工网站（图 7-4）。

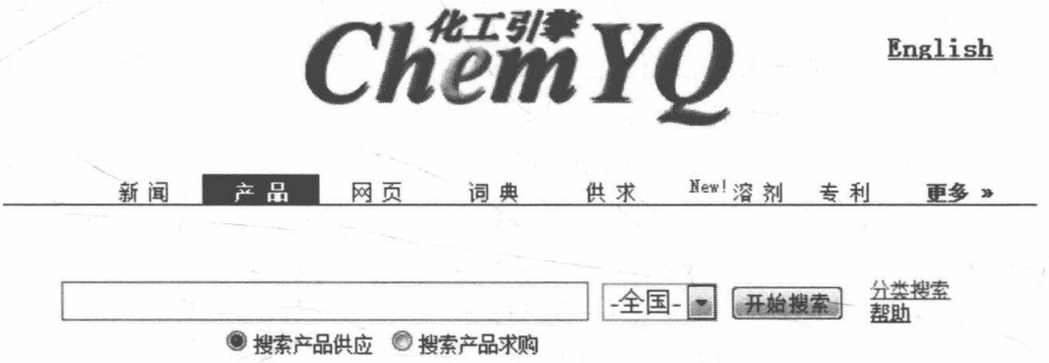


图 7-4　化工引擎网站界面

（6）中国化工网（china. chemnet. com）　是目前全国较具权威性的化工产品和设备数据库。在该网站可检索绝大多数化工产品设备的生产、报价、销售、求购、出租、转让等信息，也有一些常用的数据库可供检索（图 7-5）。

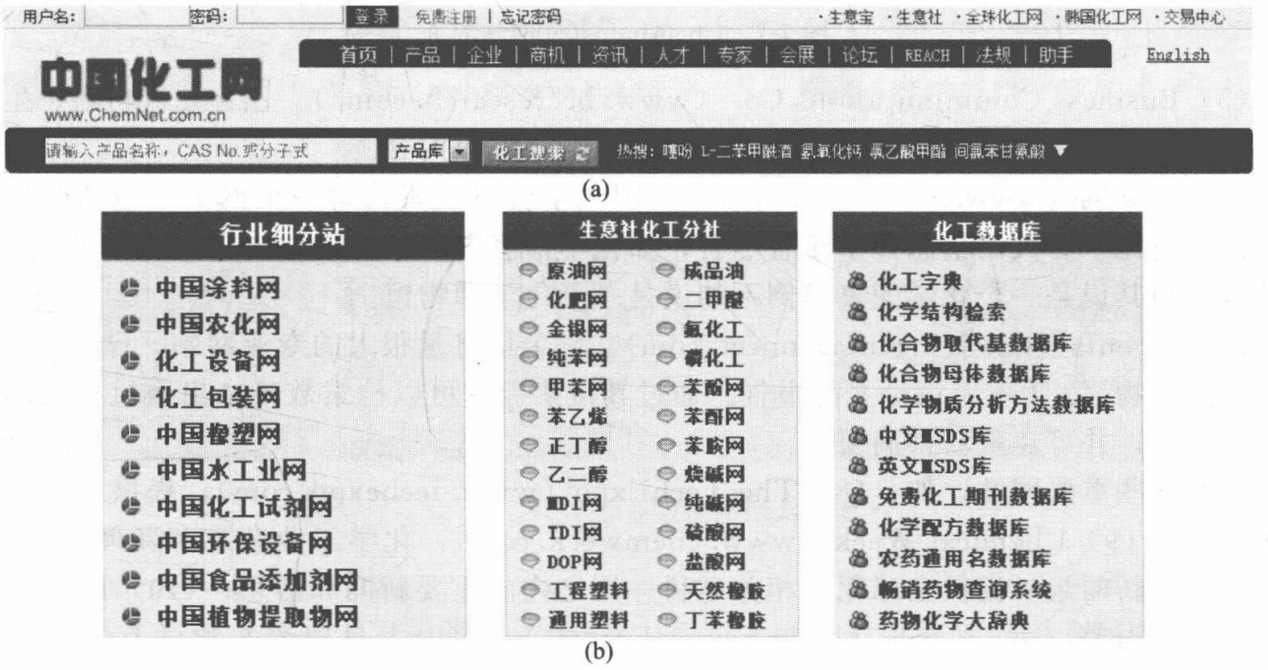


图 7-5　中国化工网及其检索分类

（7）中国科技情报网（www. chinainfo. gov. cn/）　是中国科学技术信息研究所信息分析研究中心制作的专业科技信息网站。可检索国内大部分科技相关信息与情报，亦可按照“国家导航”检索部分相关国外科技信息。

（8）外文文献服务网（book. spousecare. com/book） 有偿为科研工作者搜索下载文献全文；指导科研工作者利用 Internet 检索外文资料；提供国际主要文献检索站点的介绍。

7.3.2 国外重要网站与搜索引擎

（1）化学网 Chemweb（www. chemweb. com） 包括大量免费化学信息。有数据库（Databases）、书刊（Books）、期刊（Journals）、免费杂志（Free Magazines）、工作（Jobs）、新闻快报（Newsletter）、事件（Events）等。有中文提示，可免费注册（图 7-6）。

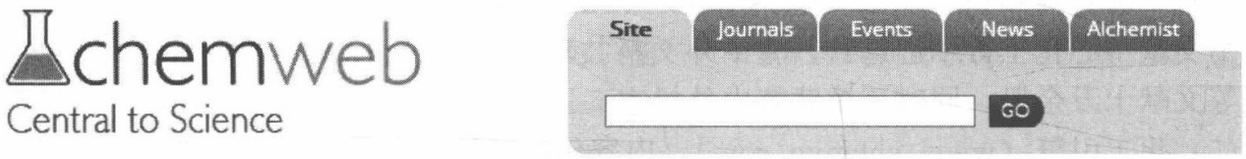


图 7-6 Chemweb 网站界面

（2）ChemSpy（www. chemspy. com） 为化学专业人员、学生、教育工作者提供了一个大范围的搜索引擎（普通搜索引擎和化学搜索引擎）。可以查找化学新闻、资源、数据库、缩写（Acronyms）、定义（Definitions）及化学工业信息。

（3）STN International（www. stn-international. de） The Scientific and Technical Information Network（科技信息网），提供了全世界最新科技数据。

（4）ChemIndustry（www. chemindustry. com；www. neis. com） 提供有关化学工业信息资源。包含化学与相关工业的专业目录与搜索引擎。分为如下几大类：化工生产商、实验室设备和消耗品、色谱/分离设备、软件、农用生物材料、工业设备、行业服务等（图 7-7）。值得注意的是：该网站部分内容已经有中文内容。

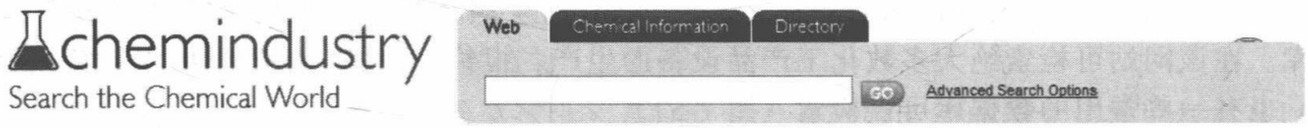


图 7-7 ChemIndustry 网站界面

（5）Business Communications Co.（www. bccresearch. com/） 包含先进材料、生物技术、化学品、能源、工程、环境、纳米技术、药物等许多内容。

（6）化学网（www. chemistry. org） 美国化学会下属机构的一个网页。包括的信息特别丰富，与化学有关的信息几乎应有尽有，如化学信息资源、化学试剂、化学新闻、化学俱乐部等。与其说是一个化学图书馆倒不如说是一个化学博物馆。

（7）Ingenta（www. ingentaconnect. com） 一个信息量很大的专业网站，已经收录了 3 万多种出版物、2 千多万篇论文与报告。通过其搜索引擎可以检索数千个出版机构与图书馆收录的论文，并可免费获得摘要。

还有一些重要网站，如：（8）The TechExpo（www. techexpo. com），提供工程与科学社团链接；（9）Chemical Week（www. chemweek. com），化学工业杂志和新闻、出版物、邮件列表和新闻组。提供全球化学相关学科一周之内的重要新闻和信息；（10）Entrez 生命科学的搜索引擎（www. ncbi. nlm. nih. gov/Entrez/），其中大量内容与化学有关。详见第 8 章。

7.3.3 Internet 化学化工专业数据库

随着 Internet 的发展，网上数据库也在高速发展，国内高校与科研机构的图书情报部门也在逐步建立和完善自己的数据库。对于普通读者，大部分数据库需付费查询，部分可以免费或暂时免费使用。而在高校或科研机构内部的读者，数据库为信息的查阅提供了极大的

方便。

目前，Internet 数据库资源大致分为四种类型，即：网上图书馆、综合性数据库、专业型数据库、试剂厂商专业网站等。其中，网上图书馆参见第 2 章，试剂厂商专业网站参见 7.5 节。

专业型数据库往往提供某一学科或某一方面化合物的数据资料，检索起来相对于综合性数据库更为方便。因此用户检索时，如果已经确定具体内容，则可立即从这类数据库进行检索。化学数据库除包含传统的化学文献外，还有与物质化学结构、性质有关的信息，如谱图数据、物理化学参数、热力学性质、相平衡以及传递过程等方面的数据。其实数据库和网上图书馆目前没有明确区分，一般图书馆都提供或多或少的数据库资源或相关链接，以下给出一些常用的国内外大型数据库及其链接。

（1）中科院上海有机所化学专业数据库（www. organchem. csdb. cn/scdb/default. asp）提供化合物有关的命名、结构、基本性质、毒性、谱学、鉴定方法、化学反应、医药农药应用、天然产物、相关文献和市场供应等信息。化学专业数据库目前规划有 24 个方面的数据内容，实现数据网络共享服务功能（图 7-8）。

图 7-8　化学专业数据库网站界面

（2）ScienceWatch（http：//sciencewatch. com/）（免费）对化学、医学、材料等学科的研究热点进行综合评估，可检索 hot paper，有利于研究者了解学科研究现状。Thomson Reuters ScienceWatch is an open Web resource for science metrics and research performance analysis. Since 1989, ScienceWatch has offered features that include data and commentary on the people, places and topics at the forefront of science today, illustrating the power of bibliometrics for providing a prospective view into the research landscape. As a part of Thomson Reuters research analytics suite of solutions, ScienceWatch highlights the important role of

research evaluation and management in support of strategic decision-making.

另外，还有可以下载期刊论文、会议论文、学位论文的数据库网站。如：中国知网 CKNI（www.cnki.net）；万方数据（www.wanfangdata.com.cn）；维普网（www.cqvip.com/）；ProQuest 博、硕士论文文摘数据库（www.proquest.com/products-services/dissertations/）；Web of Sciences 数据库（wokinfo.com/）；ScienceDirect（www.sciencedirect.com）；Wiley 在线图书馆（onlinelibrary.wiley.com）。这些内容详见第 3、9 章。

7.3.4 有机化学与药物合成相关网站

有机化学是化学中的核心学科，也是发展最迅速的学科。目前有机化学及其合成制品已经深入人们社会生活的方方面面，以下列出一些有机化学与药物合成相关网站。

（1）Organic Chemistry Portal（有机化学门户网站）（www.organic-chemistry.org）一个可以查询有机化学反应机理、人名反应、化学品性质等的强大门户网站（图 7-9）。

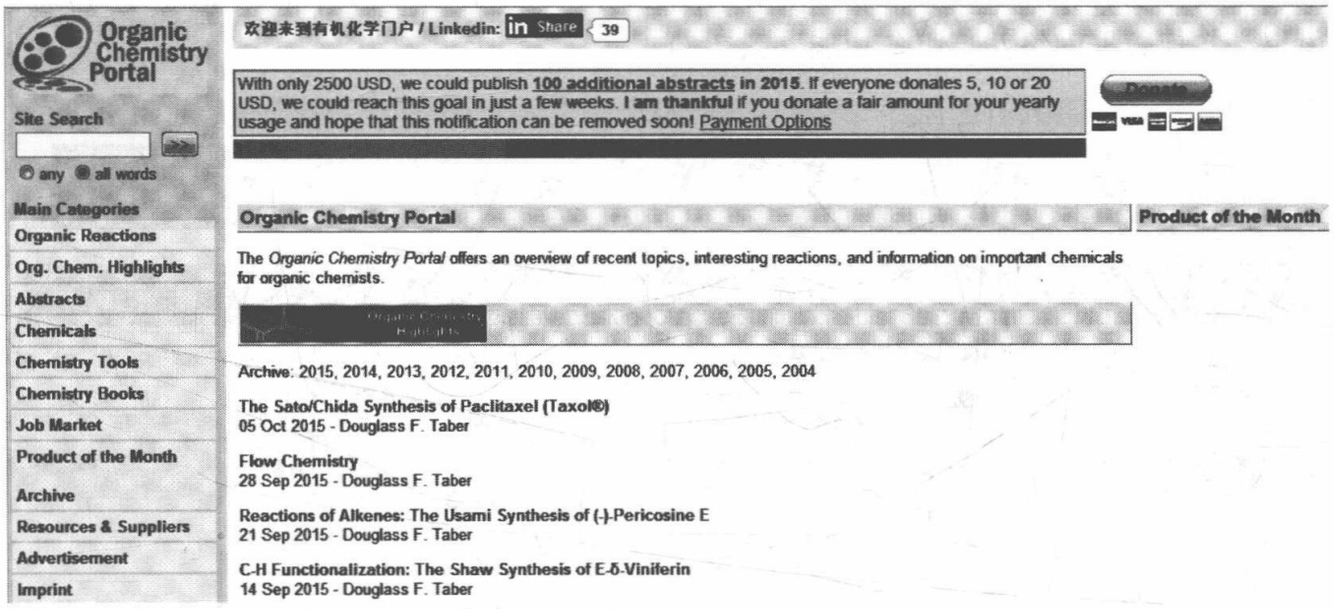


图 7-9 Organic Syntheses 检索界面

（2）Organic Syntheses（www.orgsyn.org）［有机合成（Org Syn）网络版］ 该网站免费提供多种有机化合物的合成方法，这些方法都经过众多研究人员验证，同时还提供这些化合物合成方法文献的 PDF 原文下载。可以免费下载 Organic Syntheses 中的合成方法，有 3000 多个化合物；有多种检索方式，包括通过结构式检索。

（3）Reaction Finder（www.stolaf.edu/depts/chemistry/courses/toolkits/247/practice/medialib/data/） 有机反应查找网站，几乎可以查到所有有机化学反应的信息。

（4）ChemExper（chemexper.com） 可查询物质结构和相关性质的网站。可通过“Quick search”“Structure search”（绘制分子结构进行检索）、“Advenced search”（绘制分子结构进行检索的同时提供物理数据如分子式、分子量、熔点、沸点、密度、IR、NMR 等）以及“Top products（网站上检索最多的化合物）”等方式进行检索。

（5）ChemSpider SyntheticPages（cssp.chemspider.com）（免费） 可查询化学合成数据库合成化学中的具体操作与相应的文献。有些反应已经工业化应用。免费提供由众多化学工作撰写的化合物合成具体操作与相应的文献，这些合成途径，有些反应已经实现工业化应用。

（6）WebReactions（www.webreactions.net）（免费） 化学反应数据库，为合成找到

文献先例，按照化学反应中化学键的变化（断裂与形成）进行检索，甚至可以找到特别的聚合物的转换形式或者相似物的反应，对化合物的反应查询很便捷。

（7）ChemIDplus（chem. sis. nlm. nih. gov/chemidplus/setupenv. html）　化合物别名、结构式字典库。记录有名称、CAS 登记号、分子式、毒性等性质。包含 40 万种生物医学产品。

（8）Organic Compounds Database（www. colby. edu/chemistry/cmp/cmp. html）　有机化合物结构查询数据库，有 2000 多个化合物，通过输入一些物理参数，如熔点、沸点、质谱、紫外吸收、分子式等数据，推测化合物的可能结构。

（9）溶剂数据库 SOLV-DB（solvdb. ncms. org/solvdb. htm）（免费）　由美国制造科学中心（National Center for Manufacturing Sciences）建立，提供各类溶剂相关信息（包括理化数据、毒性与环境参数）、溶液回收技术。可通过名称、CAS 号、分子式等进行检索。

（10）PubChem（pubchem. ncbi. nlm. nih. gov/）　可查询药物化学品的相关信息。

还有一些常见的与有机化学和药物化学品相关的网站，如：Dictionary of Organic Compounds（doc. chemnetbase. com/），有机化学论坛（bbs. organicchem. com），Organic Compounds Database（www. colby. edu/chemistry/cmp/cmp. html），ChemBlink（www. chemblink. com/products），eMolecules（www. emolecules. com），Thieme Chemistry（www. thieme. de/de/thieme-chemistry/home-51399. htm）等。

7.3.5　无机、分析、物化及结构表征技术相关网站

（1）WebElements Periodic Table（www. webelements. com）　一家基于网络的元素周期表数据库，可以查询周期表中所有元素的详细信息（图 7-10）。目前，从 Internet 上可以下载不同类型的元素周期律表。

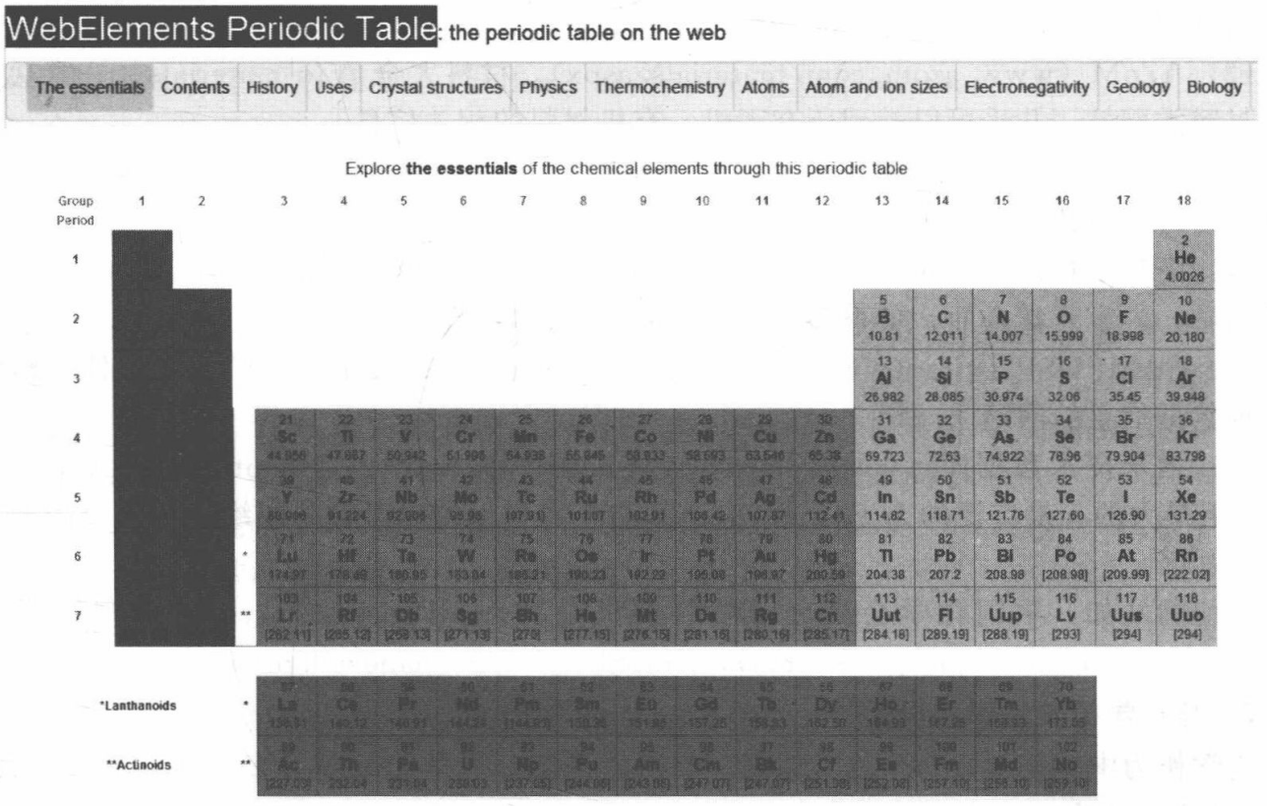


图 7-10　WebElements Periodic Table 检索界面

（2）The Analytical Chemistry Springboard（www. anachem. umu. se/jumpstation. htm）　提供全面的 Internet 上有关分析化学的资源，包括各种分析技术与信息资源。

（3）Spectroscopic Tools（www. science-and-fun. de/tools/） 谱图解析工具包括 NMR、IR、MS 的谱图数据查询。用户可以输入要解析的峰数据，查询其相应的基团。包括^{13}C 的化学位移计算、^{13}C-NMR 数据库、^{1}H-NMR 数据库、元素周期表、NMR 溶剂的化学位移和偶合常数，其他元素如^{11}B、^{15}N、^{17}O、^{19}F、^{27}Al、^{29}Si、^{31}P 等的化学位移。

（4）水溶液反应库及平衡计算（http：//jess. murdoch. edu. au/jess _ home. htm） 免费数据库，是用来研究在复杂的水环境下化学形态的动力学及热力学的工具，主要解决溶液化学的问题，可模拟在复杂的水环境中的化学形态。

（5）化学动力学数据库（kinetics. nist. gov/kinetics/index. jsp） 是由 NIST（National Institute of Science and Technology）建立的一个免费的化学动力学数据库。根据气相反应中的动力学数据，可以很快地查到相应的反应数据，由反应方程式直接查询反应的原料与生成物。可根据作者名进行检索。

（6）不同压力条件下的沸点转换工具（www. ch. cam. ac. uk/magnus/boil. html） 由剑桥大学化学教授 Jonathan Goodman 课题组建立并维护。

（7）晶体之星（www. crystalstar. org/Index. html） 是一家有关晶体结构的专业网站，可以查询大多数晶体的结构数据。

（8）Learn to TEM（www. rodenburg. org/guide/index. html） 一个专门用于学习 TEM 及其检测技术的网站。

7.3.6 高分子与材料学科相关网站

材料科学是当代社会发展的基础，与我们的日常生活息息相关。材料科学包括材料化学和材料物理。高分子化学与物理是连接化学与材料的桥梁。材料也是化学学科为人类社会做出贡献的出口，以下列出一些常见的材料类网站。

（1）中国聚合物网（www. polymer. cn） 开通于 2003 年，自称是中国第一家高分子聚合物领域的专业门户网站。

（2）AZoM（www. azom. com/materials. aspx） 材料大全 AZo materials，一家功能强大的材料类网站，几乎可以查到所有无机、有机材料的相关信息。

（3）高分子网（www. gaofenzi. org） 一家高分子专业网站，有高分子材料相关资料，并有大量的材料相关即时信息。

（4）高分子材料（dc. gdut. edu. cn/polymer） 广东工业大学网站内高分子材料与工程专题网站，内容非常全面，可查询大多数高分子材料相关信息。

（5）CAMPUSPlastics（www. campusplastics. com） 一家免费提供相同条件下塑料相关各种数据信息的网站。

（6）纳米技术数据库（www. dmoz. org/Science/Technology/Nanotechnology） 是 Internet 上最大的、最广泛的人工目录。它有来自世界各地的志愿者共同维护与建设的最大全球目录社区。

其他网站如：中国化学会高分子学科委员会（www. pdccs. org. cn），中塑互联论坛（bbs. ourplas. cn/index. php? m=area），nanoSPD（www. nanospd. org）等。

7.3.7 与化学相关的学科网站

化学作为中心科学，与生物、医学、材料、环境、天体与地球等多个学科交叉。其中，有关生物医药的网站详见第 8 章。

（1）化合物毒性数据库（toxnet. nlm. nih. gov/）（免费） 由美国国家图书馆医药分馆建立，提供各类化合物的毒性数据。

（2）美国环保署（www. epa. gov）（免费）（United States Environmental Protection

Agency，EPA）网站中有中文界面（www2. epa. gov/languages/simplified-chinese），有美国环保署与环境有关（影响美国本土的空气、水、土壤等）的化学数据的集成检索入口。

（3）中国科学院资源环境科学数据中心（www. resdc. cn）由中国科学院整合其内部各个研究所有关资源环境方面的宏观与微观数据而建立起来的一个数据库。

（4）Scorecard（scorecard. goodguide. com/index. tcl）提供美国大气、水、农业等环境的污染状况。

（5）Acute Toxicity Database（www. cerc. usgs. gov/data/acute/acute. html）提供化合物急性毒性数据库。

（6）National Pesticide Information Center（npic. orst. edu/）美国国家农药信息中心（NIPC）提供了自 1947 年以来在美国使用的 5 万多种农药产品信息，并提供中文服务。

（7）天体化学数据库（http：//udfa. ajmarkwick. net/）（免费）对天体化学（Astrochemistry）有较详细的科目分类。如：天体生物学、天体化学、宇宙环境等。

（8）National Geochemical Database（minerals. cr. usgs. gov/projects/geochem _ database/）美国国家地球化学数据库。

7.4　国内外重要网站

7.4.1　政府、科研、教育机构

各国政府、科研、教育机构与组织都有自己的网站，公布各种政策、法规信息，并提供各种重要链接等。我国网络化速度也很快，新型网站不断增多。有关政府网站的介绍参见第 5 章。这里只给出一些重要网站。

（1）中国教育和科研计算机网（www. edu. cn）提供了大量相关链接，如图 7-11 所示，也可以检索教育法规。

（2）中国科学院网（Chinese Academy of Sciences）（www. cas. ac. cn）1949 年伴随着新中国的诞生，中国科学院成立。它是中国自然科学最高学术机构、科学技术最高咨询机构、自然科学与高技术综合研究发展中心。拥有 12 个分院、100 多家科研院所、3 所大学、130 多个国家重点实验室和工程中心、210 多个野外观测台站，承担 20 余项国家重大科技基础设施的建设与运行。科学院下属化学化工相关研究所有：中国科学院化学研究所（www. iccas. ac. cn）、上海有机化学研究所（www. sioc. ac. cn）、长春应用化学研究所（www. ciac. jl. cn）、大连化学物理研究所（www. dicp. ac. cn/）、兰州化学物理研究所（www. licp. ac. cn）、理化技术研究所（www. ipc. ac. cn）、中国科学院过程工程研究所（www. ipe. ac. cn）、福建物质结构研究所（www. fjirsm. ac. cn）等。

（3）中国工程院（Chinese Academy of Engineering）（www. cae. cn）。

（4）中华人民共和国教育部（www. moe. edu. cn）。

（5）中华人民共和国科学技术部（www. most. gov. cn）。

（6）国家自然科学基金委员会（www. nsfc. gov. cn）。

一些国外的科研机构网站，也提供了大量网络资源信息。典型网站如下：（7）Chemistry Index（www. chemie. fu-berlin. de/chemistry/index _ en. html # external），是德国柏林自由大学生物、化学与药学系网站，提供了大量网络资源信息。（8）ChemDex（www. chemdex. org/），英国谢菲尔德大学网站，“元素周期表”也是在 Internet 上具有广泛影响的化学资源，它给出了元素的基本描述、被发现的历史、原子的性质、物理性质、该元素的化合物、同位素、晶体结构等。（9）弗吉尼亚大学图书馆（www. library. virginia. edu），通过该网站可搜索到大量化

图 7-11 中国教育和科研计算机网网站界面

学化工相关专业资源，并链接到资源的源出处。

国内一些化学化工相关的知名单位的网站还有：北京大学化学与分子工程学院（www. chem. pku. edu. cn）；北京化工大学（www. buct. edu. cn）；中国食品药品检定研究院（www. nicpbp. org. cn）；中国广州分析测试中心（www. fenxi. com. cn）等。

国外一些化学化工相关的知名单位的网站还有：The Hamner Institute for Health Sciences（www. thehamner. org）；Chemical Institute of Canada（www. cheminst. ca）；Institute of Materials Science（www. ims. uconn. edu）；Institution of Chemical Engineers（UK）（www. icheme. org）；Korea Research Institute of Chemical Technology（www. krict. re. kr）；Federal Institute for Materials Research and Testing（www. bam. de/en）；Biotechnology Research Institute（www. bri. ust. hk/index. shtml）；Max Planck Institute（www. mpg. de/institutes）；National Insitute of Advanced Science and Technology（www. aist. go. jp）；Lawrence Berkeley National Laboratory（www. lbl. gov）；Brookhaven National Laboratory（www. bnl. gov/world）；Oak Ridge National Laboratory（www. ornl. gov）；Los Alamos National Lab（www. lanl. gov）；Argonne National Laboratory（www. anl. gov）；Fermi National Laboratory（www. fnal. gov）；Cavendish Laboratory（www. phy. cam. ac. uk）等。

7.4.2 学会与专业科研院所

（1）中国化学会（www. chemsoc. org. cn） 1932 年在南京成立。目前，中国化学会有会员 5 万多人。宗旨：团结组织全国化学工作者，促进化学学科和技术的普及、推广、繁荣

和发展。

(2) IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) (www. iupac. org) 即国际纯粹与应用化学联合会。可以了解其组织结构及组织成员如 IUPAC 秘书处、官员、执委会 (Executive Committee)、常委会 (Standing Committees)、专业委员会 (Divisions) 等，也可以了解与化学学科发展密切相关的内容，如 IUPAC 各专业委员会的项目 (Projects) 和报告 (Reports)、IUPAC 即将主办或协办的会议 (Symposia)、IUPAC 的出版物等。IUPAC 目前有物理化学、无机化学、有机化学、高分子化学、分析化学、化学与环境、化学与人类健康 7 个专业委员会。IUPAC 出版的期刊有 Chemistry International 和 Pure and Applied Chemistry、会议文集 Macromolecular Symposia 以及系列丛书。它所编辑出版的系列丛书目录，其中近期出版的专著的介绍等都可以在 IUPAC 的 Web 站点浏览 (图 7-12)。

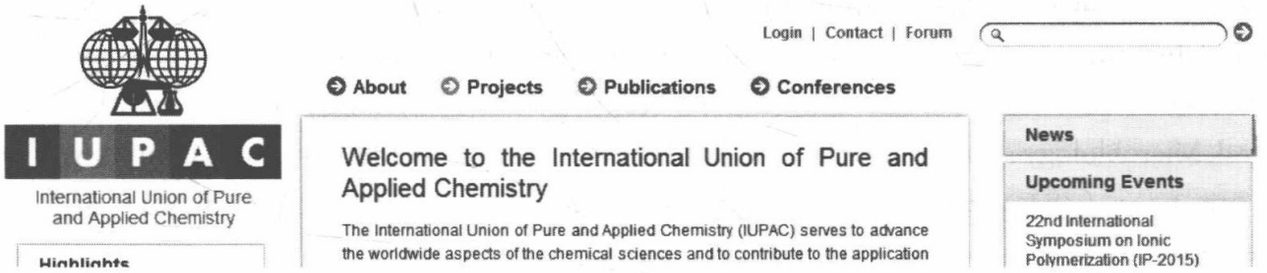


图 7-12　IUPAC 网站界面

(3) 中国科学技术协会 (www. cast. org. cn)。

(4) 中国石油和化学工业协会 (www. cpcia. org. cn)。

(5) 联合国教科文组织 (www. unesco. org/new/zh/natural-sciences/)　提供包含自然科学与社会科学在内的众多文档，支持中文 (图 7-13)。

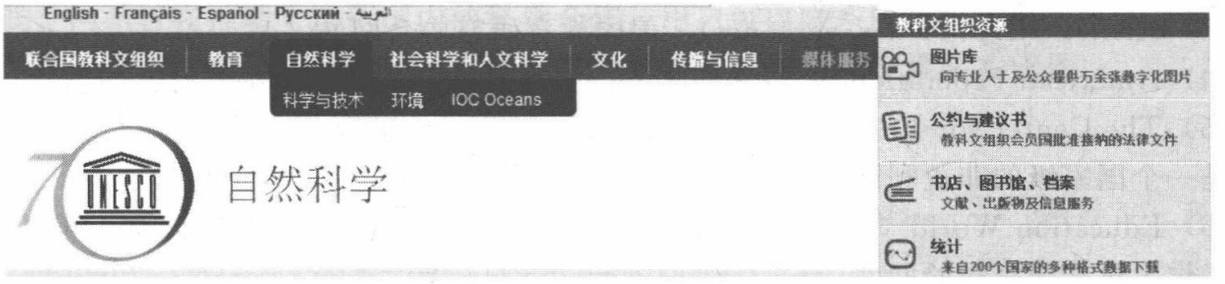


图 7-13　联合国教科文组织网站界面

(6) American Chemical Society (美国化学会) (www. acs. org/content/acs/en. html) 美国化学会 (ACS) 利用 Internet 上最活跃的化学学术团体。目前有 30 多个专业委员会。各委员会都在分别维护各自的 Web 网页，随着专业委员会负责人的变动，Web 站点的网址 URL 也在发生变动，ACS 的 Divisions 链接着各专业委员会的 Web 站点。

还有一些国家与地区的化学化工学会与专业学会，如：　(7) 美国化学工程师协会 (www. aiche. org) (American Institute of Chemical Engineers)；(8) 英国皇家化学会 (Royal Society of Chemistry) (www. rsc. org)；(9) 德国化学会 (www. gdch. de)；(10) American Peptide Society (www. americanpeptidesociety. org/index. asp)；　(11) American Society for Biochemistry and Molecular Biology (www. asbmb. org)；　(12) American Society for Mass Spectrometry (www. asms. org)；(13) American Organization of Analytical Chemists International (www. aoac. org)；(14) Association of the British Pharmaceutical Industry (www. abpi. org. uk)；(15) The Biochemical Society (www. biochemistry. org/)；(16) British Crystallographic Association

(www. crystallography. org. uk)； (17) British Mass Spectrometry Society (www. bmss. org. uk)；(18) Chemical Heritage Foundation (www. chemheritage. org)；(19) C hemical Industries Association (www. cia. org. uk)；(20) Chemical Structure Association Trust (www. csa-trust. org/?page _ id=11)；(21) The Electrochemical Society (www. electrochem. org)；(22) European Federation for Medicinal Chemistry (www. efmc. ch)；(23) European Federation of Biotechnology (www. efb-central. org)；(24) International Society of Electrochemistry (www. ise-online. org)；(25) International Union of Crystallography (www. iucr. org)；(26) National Academy of Sciences (US) (www. nasonline. org)；(27) Society for Applied Spectroscopy (www. s-a-s. org)；(28) Society of Chemical Industry (www. soci. org)；(29) Society for Electroanalytical Chemistry (electroanalytical. org)；(30) Society of Environmental Chemistry and Toxicology (www. setac. org)；(31) Chemical Society of Japan (www. chemistry. or. jp)；(32) Royal Australian Chemical Insitute (www. raci. org. au)；(33) Institute of Chemistry of Ireland (www. chemistryireland. org)；(34) Chemical Institute of Canada (www. cheminst. ca/chemistry)；(35) South African Chemical Institute (www. saci. co. za)；(36) American Cancer Society (www. cancer. org/index)；(37) Society for General Microbiology (www. sgm. ac. uk)；(38) New Zealand Institute of Chemistry (www. nzic. org. nz)；(39) American Association of Engineering Societies (www. aaes. org)；(40) Adhesion Society (www. adhesionsociety. org) 等。

7.4.3 科普、教育信息网站

目前，国内外出现了大量科普、教育信息网站，典型网站有：

(1) ASCD (www. ascd. org) 美国教学视导与课程开发协会 (ASCD) 网站。

(2) U. S. Department of Education (www. ed. gov) 美国教育部网站。美国教育部网页包罗万象，列有总统和教育部的工作重点、获取资金机会、学生资助、研究和统计、新闻事件、研究产出和出版物、教育部预算以及其他网站等。

(3) AERA. NET (www. aera. net) 美国教育研究协会网站。

(4) American Federation of Teachers (www. aft. org) 美国教师联合会网站。

(5) The Center for Education Reform (www. edreform. com) 美国教育改革中心网站，是一个国家级的非盈利网站，提供有关学校改革方面的资源和相应的指导。

(6) Education World (www. education-world. com) 一家致力于为教师、管理人员和学生提供大量在线资料的网站。

(7) Education Resources Information Center (www. eric. ed. gov) ERIC 是美国国家教育图书馆的教育资源信息中心。

(8) Education Week (www. edweek. org) “网上教育周刊”是美国的教育在线报纸。

(9) 教育技术网站 (www. techlearning. com) 由《技术与学习》(Technology & Learning Magazine) 杂志社创建，主要为教育者怎样把技术运用于课堂和课程中提供观念、工具和资源。

(10) 虚拟教师中心 (www. timeplan. com) 收集了中小学教育工作者和学生感兴趣的信息，通过课程和教学主题寻找有关内容与支持。

(11) 中国科普博览网站 (www. kepu. com. cn)。

(12) 中国教育资源网 (www. cern. net. cn)。

(13) 化学教学资源 (www. hxu. edu. cn/partwebs/huaxuexi/work)。

(14) 中国科普网 (www. cpus. gov. cn)。

(15) 大科普网 (www. ikepu. com)。

（16）北京科普之窗（www. bjkp. gov. cn）。

（17）中国科学技术大学网上科技博览馆（st. ustc. edu. cn）。

（18）中国科学院大连化学物理研究所科普网站（www. kepu. dicp. ac. cn）。

此外，部分期刊网站，如《科技生活》周刊（www. bkweek. com）、《化学通讯》杂志（hxtx. ciac. jl. cn）等也提供一些最新的科技资讯。

7.4.4　会议论坛、博客及新闻等信息

电子论坛（Forum）是网上众多形式和名称各异的通信组（如 Newsgroup、Mailing list、Discussion group、Listserv、Interest group 等）的统称。这些通信组实际上是由网上对某一专题有共同兴趣的一组用户组成的专题讨论组，它们之间虽然在形式和名称上有区别，但在本质上均是电子邮件通信进一步演变的结果。与论坛功能和内容类似的还有社区，如 Chemistry Community。下面列出几个主要网站。

（1）科学网（www. sciencenet. cn/）　科学网由中国科学报社主办，由中国科学院、中国工程院、国家自然基金委员会、中国科学技术协会主管。是全球最大的中文科学社区，近百万海内外科技界专家正在使用科学网的博客、论坛、圈子、图片等服务。有多个学科，读者可以查阅化学科学（www. sciencenet. cn/chemistry/）、工程材料（www. sciencenet. cn/material/）等领域的新闻与动态（图 7-14）。

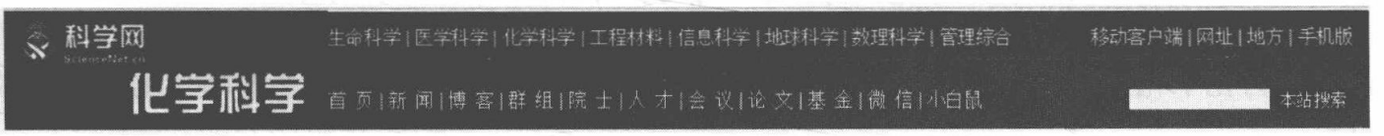


图 7-14　科学网网站界面

（2）ResearchGate（www. researchgate. net）　是一个社交网络服务网站，于 2008 年 5 月上线。网站旨在推动全球范围内的科学合作，用户可以联系同行，了解研究动态，分享科研方法以及交流想法。近年来，大量国内科学家加入该网站，交流学术成果。

（3）小木虫论坛（emuch. net/bbs）。

（4）博研联盟（bbs. myboyan. com）。

还有一些知名的论坛，如：（5）化学化工论坛（www. chembbs. com. cn）；（6）科学松鼠会（songshuhui. net）；（7）果壳网（www. guokr. com）；（8）零点花园（www. soudoc. com/bbs）；（9）中国色谱网论坛（www. sepu. net/dvbbs/index. asp）；（10）Chemistry Chat Room（chemistry. about. com/mpchat. htm）；（11）Chemical Forums（www. chemicalforums. com）；（12）The Surface Analysis Forum（www. uksaf. org/news/newsletter. html）等。

博客（Blog），即网络日志，是一种通常由个人管理、不定期张贴新的文章的网站。博客专注在特定的课题或领域发表个人见解、评论或新闻，可以看作是公开的个人日记。一个典型的博客结合了文字、图像、其他博客或网站的链接及其他与主题相关的媒体，能够让读者以互动的方式留下意见。以下列出几个化学博客的网址。（1）科学网博客（blog. sciencenet. cn）；（2）新浪博客（blog. sina. com. cn）；（3）网易博客（blog. 163. com）；（4）腾讯博客（blog. qq. com）；（5）搜狐博客（blog. sohu. com）；（6）Chemistry Central Blog（blogs. openaccesscentral. com/blogs/ccblog）；（7）Nature Peer-review Blog（blogs. nature. com/ peer-to-peer）；（8）Nature Chemistry Blog（blogs. nature. com/thescepticalchymist）；（9）David Bradley’s Blog（www. sciencebase. com）；（10）北京大学饶毅的个人博客（blog. sciencenet. cn/u/饶毅）；（11）清华大学施一公的个人博客（blog. sciencenet. cn/u/施一公）。

随着博客的兴起，以发表化学化工专业知识、资源为主要内容的学术博客也越来越多。可以预测，博客将是一种新型的网络资源。

7.4.5 招聘与求职信息

目前，各级政府部门网站建立了劳动服务网站，一些综合网站具有求职服务功能。也有大型职业介绍网站，如：58同城、找工作网等。典型化学化工求职网如下。

（1）百大化工人才网（hg.baidajob.com/） 一家专门为化工类人才提供招聘信息和各类资讯的网站，是百大英才网化工站点。特别指出的是，该网站设有“应届生”栏目，专门为化学化工类应届毕业生提供招聘信息和相关就业指导。

（2）应届生招聘网——化学（www.yingjiesheng.com/major/huaxue/） 自称为中国领先的大学生求职网站，专门提供各类应届生就职岗位。

（3）化学人才网（job.chemrc.com）。

（4）化工英才网（www.chenhr.com）。

（5）涂料英才网（dope.job1001.com）。

（6）有机化学人才网（www.ochr.cn）。

（7）中国化工人才网（www.hgrencai.com）。

7.5 通过试剂仪器网站获得信息

作为化学化工科技工作者，试剂仪器及消耗品是科学研究、实验教学过程中必不可少的材料。

国内外许多大型试剂、仪器及设备厂家与经销商为了产品宣传需要，开设了相关网站，介绍其产品的技术参数、使用指南及价格信息。读者可以充分利用该资源，检索自己所需信息，如化学试剂的物理参数、仪器设备的技术参数等，同时在采购时，可货比三家，选择自己最中意的产品购买。另外，也可以免费获得相关信息。

7.5.1 国内试剂仪器厂商

随着我国科技水平的提高，化学化工试剂仪器网站不断增加，有些经销自己的产品，有些为供销商。通过一些采购网也能找到相关网站，如慧聪网（www.hc360.com），其中包含化学化工信息，可以分类查找厂商。

（1）中国试剂网（www.reagent.com.cn） 是中国医药集团上海化学试剂公司的主页，可以提供化学试剂的价格查询，主要以国内试剂为主，也提供英文检索页面。产品查询可以通过编号、名称、关键字等字段、组合查询找到所需产品。

（2）中国试剂信息网（www.cnreagent.com/index.php） 包括中文产品索引、英文产品索引、CAS产品索引、化工字典、会展信息、产品展示等信息（图7-15）。

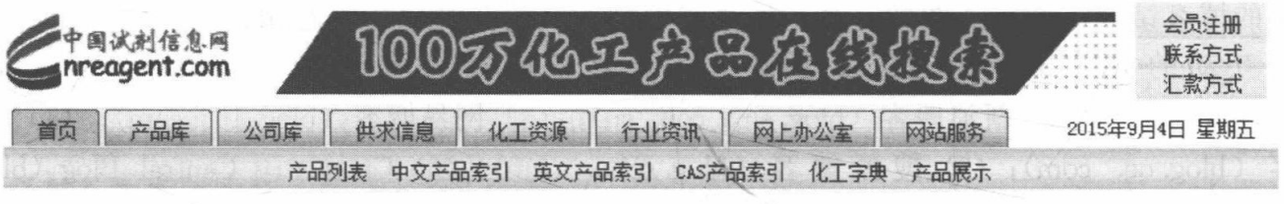


图7-15 中国试剂信息网网站界面

（3）化学世界网（www.chemworld.com.cn） 化学世界网为一家专业从事化工类进出口贸易信息服务的商业网站，其所有权属于芜湖市鸿祺营销有限公司，是国内专业的化工进

出口交易平台。

(4) 中国化学品安全网（www. nrcc. org. cn） 是由青岛诺诚化学品安全科技有限公司建立并经营的以化学品登记、鉴别、安全代理为主的一家网站。

(5) 全国稀土信息网（www. cre. net） 除产品信息外，还有稀土数据库。

(6) 上海迈瑞尔化学技术有限公司（www. meryer. net/cn/index/） 迈瑞尔产品涵盖有机试剂、无机试剂、分析试剂和生化试剂，其中包括医药中间体、催化剂、高纯溶剂、特种高分子材料、标准物质及其他特殊化学品共十万余种。

(7) 中国化工仪器网（www. chem17. com） 以化工、制药、食品、生物、石油、农业、医院、学校、质检、疾控、科研所等单位为服务对象，提供最便捷的网上采购平台。

(8) 中国分析仪器网（www. fxyqw. com） 是国内专业的分析仪器行业门户，汇集分析仪器产品。

(9) 中国生物器材网（www. bio-equip. com） 是一个提供生物仪器设备和耗材、化学试剂、实验动物信息的专业网站，它提供器材采购导航服务。

还有一些厂商，如：上海化学试剂研究所（www. scrri. com），国药集团化学试剂有限公司（SCRC）（sinoreagent. cn. alibaba. com），北京益利精细化学品有限公司（www. yilishiji. com），北京鼎国昌盛生物技术有限公司（www. dingguo. com），吉尔生化（上海）有限公司（www. glbiochem. com/cn/index/index. aspx），北京伊诺凯科技有限公司（www. inno-chem. com. cn）等。

7.5.2　国际知名试剂仪器公司

(1) Sigma-Aldrich 公司（www. sigmaaldrich. com） 该网站是世界最著名的两家化学、生化试剂 Sigma 和 Aldrich 公司合并后主办的一个网站。Sigma-Aldrich 是一个生物/化学试剂领先的高科技企业。客户遍及生命科学、公司、大学、研究机构、医院以及工业部门，遍及 160 个国家地区，在 35 个国家有分支机构，雇员超过 6800 人。收录了绝大多数化学试剂、生化制剂、实验室仪器。

Sigma-Aldrich 公司网页提供了名称、结构等检索途径，如：Product Name、Product Number、CAS Number、Molecular Formula、Select an Identifier、Keyword (Full Text)、Supplier Part Number。读者可以利用该网站查询各种试剂的物理参数、英文名称、结构等众多信息。目前已经有中文网页。

(2) 百灵威（www. jkchemical. com） 国际化学巨头百灵威化学公司，在国内有代理商，提供化学试剂的价格查询。生产功能性材料、各类有机、无机、生化试剂、各类标样、分析化学试剂、溶剂、医药中间体原料等。

(3) Acros（www. acros. com） 可提供超过 18000 种化学产品，30000 多个不同纯度产品和包装，从毫克到公斤级别的常规基础试剂，到百公斤乃至吨级的工业原料。该网站也可查询化学试剂的 IR 等谱图资料。

(4) Alfa-Aesar（www. alfachina. cn） 是 Johnson Matthey 集团的子公司，是一家科研化学品、金属和材料的生产商及供应商，并提供售后和相关技术咨询服务。

(5) Merch（www. merck. com） 国际知名药物及仪器经销商。创建于 1668 年，拥有约 350 年历史，主要致力于创新型制药、生命科学以及前沿功能材料技术。

(6) Spectrum Laboratory Products（www. spectrumchemical. com） 提供各类精细化学品、光谱试剂、实验用品。

(7) Perkin-Elmer Corporation（www. perkinelmer. com） 国际知名仪器经销商。

(8) 安捷伦公司（www. agilent. com/home） 国际上最著名的色谱仪器生产商。

(9) Zyvex 公司 (www. zyvex. com) 提供碳纳米管制造以及相关仪器和技术。

7.5.3 综合经销商

这类网站非常多，用户可在各类搜索引擎和化学类门户网站中搜索得到，也可登录国家数字图书馆化学学科信息门户网站 (chemport. ipe. ac. cn/ListPageC/Companies. shtml)，那里提供大量的化学相关仪器设备公司网址链接。

(1) 中国万维化工城 (www. chem. com. cn) 国内最全的化工产品数据库，收集国内外化工厂商信息，提供交易平台、企业建网、网络增值、海外推广等服务。

(2) 中国医药化工网 (www. chinayyhg. com) 一个能为世界医药、化学、医疗器械、商业及研究提供服务的中国公司网页。

(3) 中国化工联盟 (www. cnchemadd. com/index. asp) 提供试剂、仪器网站链接与厂商。

(4) Chemical Online (www. chemicalonline. com) 化学制造业第一网站，提供化学制造、化学过程、化工、化学产品信息。

(5) Chem. com (www. chem. com/) 包括化学公司产品目录、仪器目录、委托合成目录等，可以进行仪器、试剂搜索。

(6) 化工世界网 (www. chemworld. com. cn)。

(7) 化学信息网 (chem. icxo. com/chin/zy. html)。

(8) 化工热线 (www. chemol. com. cn)。

(9) 中国化工在线 (www. chemsino. com)。

(10) 中国开门化工网 (www. chemn. com)。

(11) 中化网 (www. chembb. com)。

(12) 勤加缘化工市场 (chem. qjy168. com)。

(13) 安迅思化工 (www. chemease. com)。

7.6 免费资源的利用

Internet 网上大量有价值的化学化工数据库是经过加工整理的，因此，许多信息需要有偿使用。当然，也有一些信息可以免费使用，这里介绍一些典型数据库与网站。

7.6.1 重要的免费数据库与网站

在 7.3 节中已经包含了大量免费网站与数据库，这里只介绍几个重要的免费数据库与网站。

(1) 中国科学院数据云 (www. csdb. cn) 包含化学主题数据库暨化学科学数据网格元数据 (www. chemdb. csdb. cn/)，集成了中国科学院多个研究所在化学领域所建设的数据资源，数据涵盖化学研究的多个重点学科。例如：使用“porphyrin”就能免费检索到结构信息 (图 7-16)。

(2) PubMed (www. ncbi. nlm. nih. gov/PubMed) 包含了大量免费的生物、医学、化学数据。将在第 9 章详细介绍。

(3) Protein Bank (蛋白质银行) (www. rcsb. org/pdb/home/home. do) 提供各类蛋白质的结构数据及其相应的 3D 分子模拟结构。参见第 9 章。

(4) 氨基酸数据库 (www. chemie. fu-berlin. de/chemistry/bio/amino-acids _ en. html) 由德国柏林自由大学 (Freie Universität Berlin) 化学与生物化学研究所建立并维护，提供 20 种氨基酸的结构式和 3D 模拟结构以及相关数据。

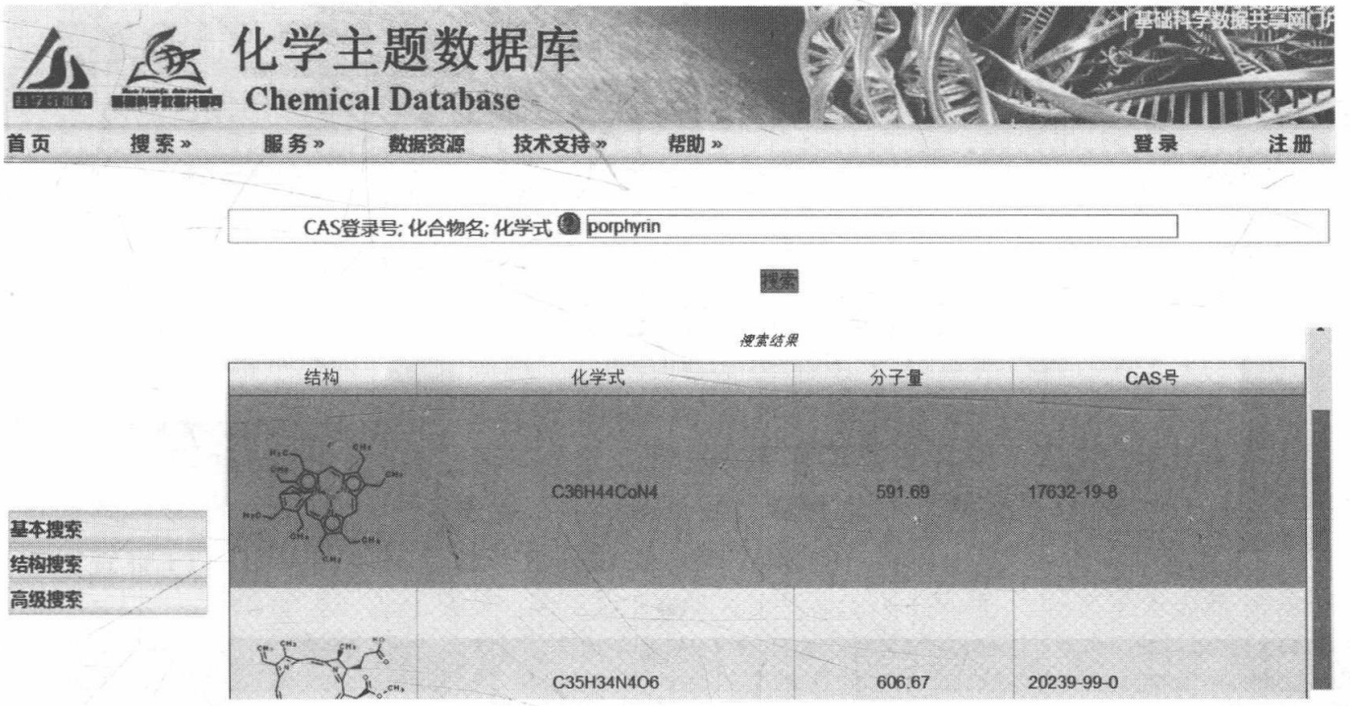


图 7-16　在中国科学院数据云中检索有关“porphyrin”的词条

(5) MedSci (www. medsci. cn)　MedSci 是国内领先的医学科研与学术服务平台。对于化学工作者来说，该网站最大的好处就是能查询各类 SCI 及 SCIE 收录杂志的主页、影响因子、投稿经验、投稿链接，并提供国家自然科学基金项目 (NSFC) 在线查询 (在网站首页的“在线工具”栏目下)，如图 7-17 所示。

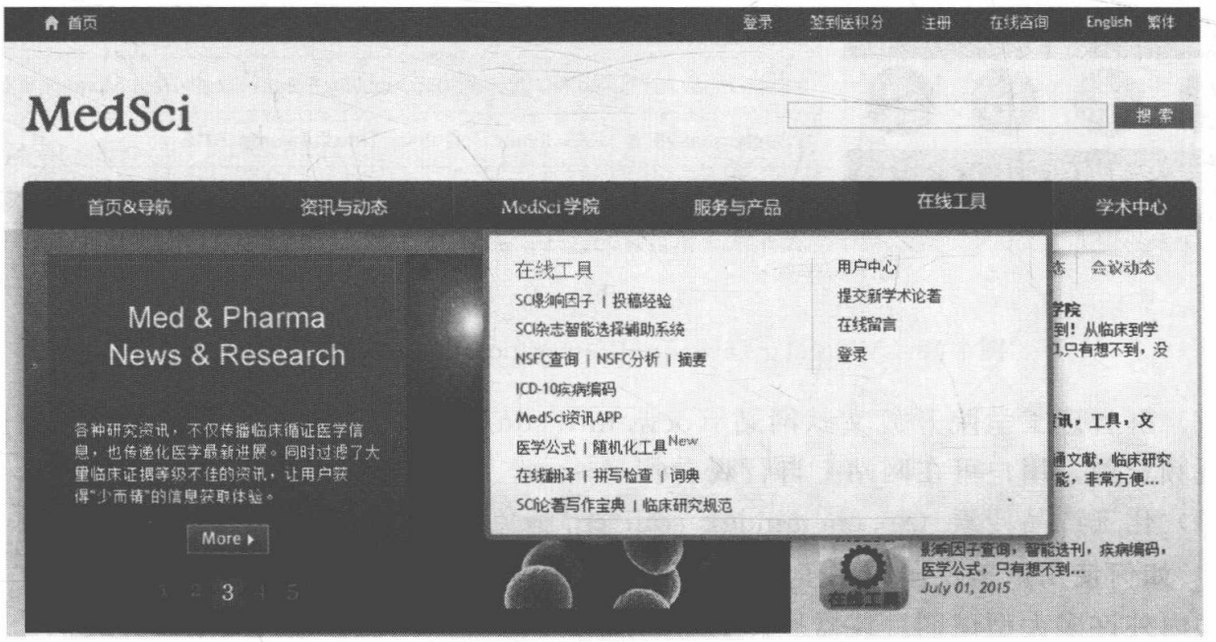
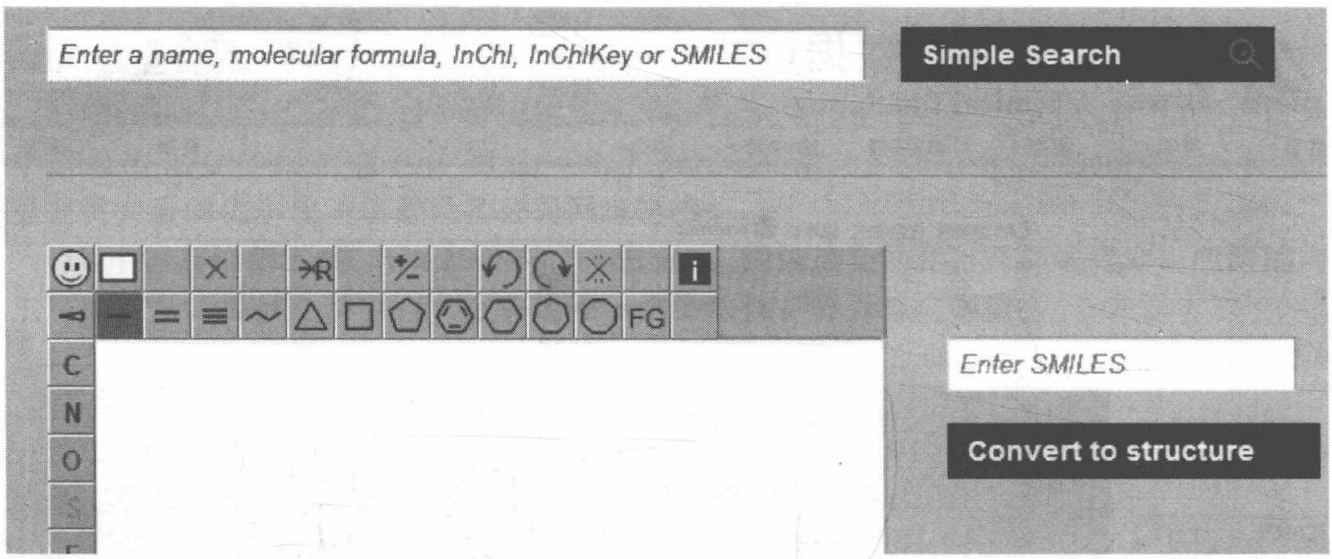


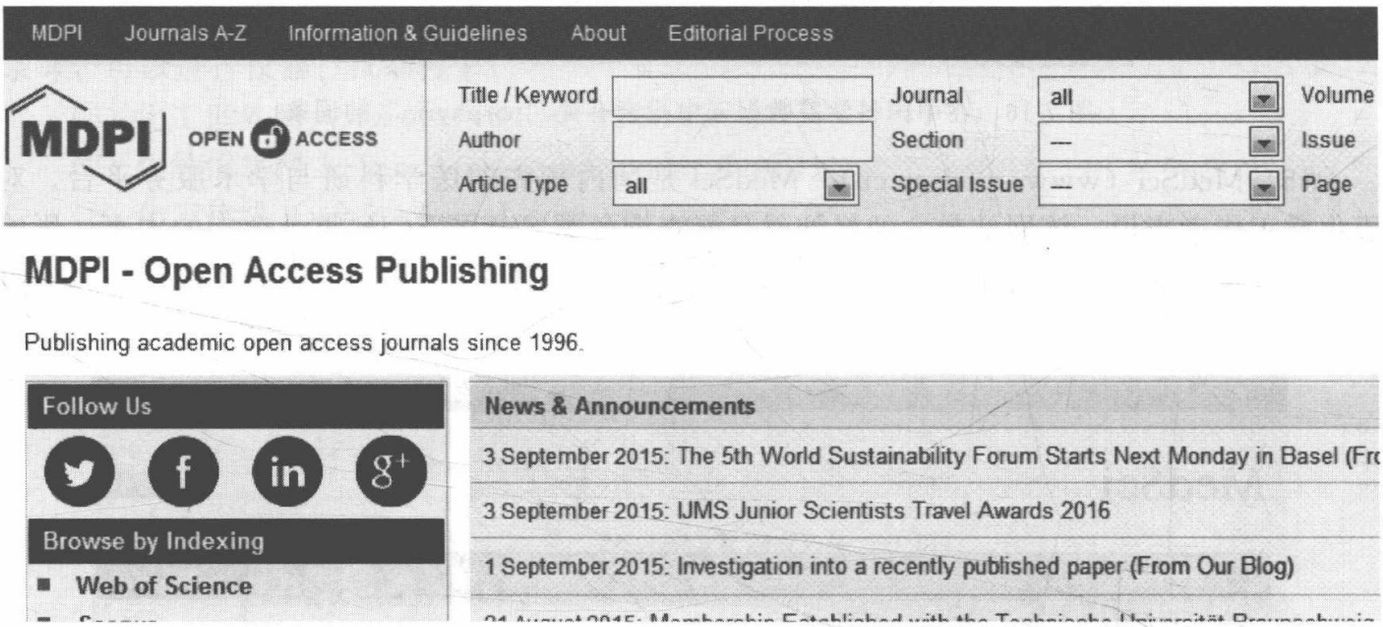
图 7-17　MedSci 网站界面

(6) Molecular Diversity Preservation International (MDPI) (www. mdpi. org)　是一个存放与交换分子和生物分子样品的组织。MDPI 分为三个分库，即 MDPI 样品库“MDPI Chemical Samples Preservation” (www. molmall. net) [图 7-18(a)]、MDPI 开放期刊“MDPI Online, Open Access Journals” (www. mdpi. com) [图 7-18(b)] 以及 MDPI 学术会议“MDPI Scientific Conferences” (www. mdpi. org/conferences. htm)。

(7) 古滕堡数字图书馆 (www. gutenberg. org)　始建于 1971 年，是世界上最早的免费数字图书馆。已经收录了 4 万多部免费书籍，其规模仍在不断扩大中。



(a)



(b)

图 7-18 Molecular Diversity Preservation Interational 搜索界面

(8) 麻省理工学院开放文献网站 (ocw. mit. edu/index. htm) 该网站提供大量的免费教学视频资源，用户可在网站上自行观看。

(9) 化工产品搜索 (sp. chemindex. com/cn) 免费提供化学品数据库与供应商。

7.6.2 如何使用试剂仪器网站查询化合物参数

国内外许多大型试剂、仪器厂商为了产品宣传需要，开设了相关网站，并提供公司所提供的化学试剂物理参数，用户可以免费获得这些信息。下面以 Sigma-Aldrich 公司 (www. sigmaaldrich. com) 的网页为例进行介绍。

Sigma-Aldrich 公司网页提供了名称、结构等检索途径，如：Product Name、Product Number、CAS Number、Molecular Formula、Select an Identifier、Keyword (Full Text)、Supplier Part Number。读者可以利用该网站查询各种试剂的物理参数、英文名称、结构等众多信息。目前已经具备中文网页。

【例 7-1】 如何通过 Sigma-Aldrich 公司网页查找有关 1-甲基咪唑 (1-methylImidazole) 的信息呢?

首先进入 www.sigmaaldrich.com 主页，在网页下方选择“China”进入中文界面（图 7-19）。

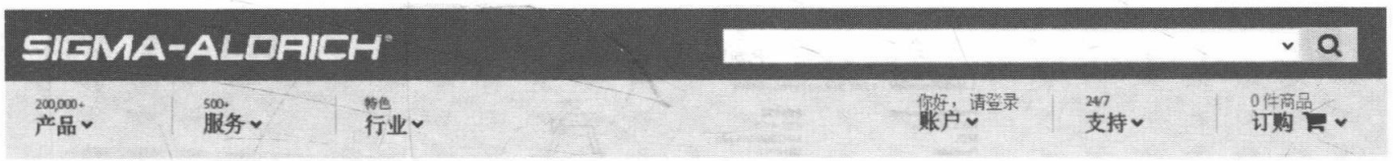
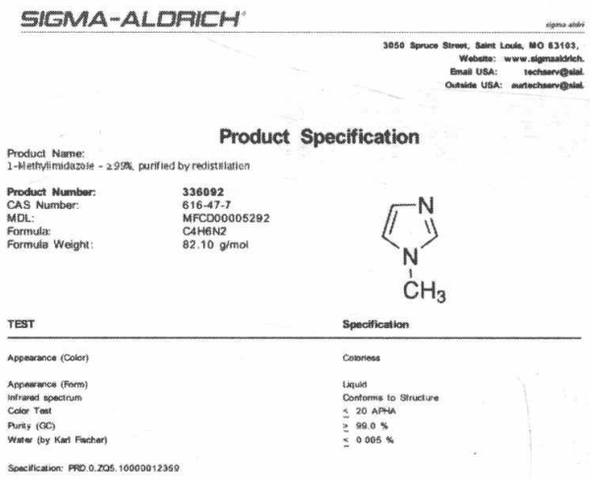


图 7-19　Sigma-Aldrich 中文界面

然后在上方侧“搜索”栏中输入“1-methylImidazole”，点击放大镜图标，得到 39 条查询结果（图 7-20）。点击其中最接近的词条，如化合物编号 336092，点击“价格与基本信息”得到其包括结构在内的详细物理参数、价格、库存等情况（图 7-21）。点击该页面上的“Specification Sheet（PDF）”标签，弹出新页面，右键点击“网页另存为（S）…”，即可下载并查看 PDF 格式的该化合物的相关数据（图 7-22）。

图 7-20　Sigma-Aldrich 查询页面 1

图 7-21　Sigma-Aldrich 查询页面 2



SIGMA-ALDRICH

3050 Spruce Street, Saint Louis, MO 63103,
Website: www.sigmaaldrich.
Email USA: techserv@sial.
Outside USA: eurtechserv@sial.

Product Specification

Product Name:
1-Methylimidazole - ≥99%, purified by redistillation

Product Number:	**336092**
CAS Number:	616-47-7
MDL:	MFCD00005292
Formula:	C4H6N2
Formula Weight:	82.10 g/mol

TEST	Specification
Appearance (Color)	Colorless
Appearance (Form)	Liquid
Infrared spectrum	Conforms to Structure
Color Test	≤ 20 APHA
Purity (GC)	≥ 99.0 %
Water (by Karl Fischer)	≤ 0.005 %

Specification: PRD.0.ZQ5.10000012359

图 7-22 Sigma-Aldrich 查询页面 3

近年来，国内一些商家也关注网页的建设，如中国化学试剂网（www.cnreagapoa.com）的“试剂应用”栏目可检索到部分中文原文文献，也是文献检索的一种途径。

练 习 题

1. Internet 上化学化工信息有哪些类别？

2. 从 Internet 网下载的非 10 类传统文献源的化学化工信息，在论文参考文献中如何著录？

3. 如何从 Internet 网检索图书、期刊论文信息？如何检索专利信息？

4. 分别举 3 例说明专业的国内外化学化工网站和搜索引擎的名称和各自的特色。

5. 从下列网站能检索到什么信息？① 中国教育科研网；② 中国化学会；③ 科学网。

6. 各举 1 例说明如何利用试剂、仪器厂商网站查阅化学化工信息。

7. 列举 3 例可检索有机化合物（如苯酚）物理性质和谱图的数据库名称和网址。

实践练习题

1. 练习用百度学术搜索检索化学化工文献（例如：智能涂料、光催化剂）。

2. 在百度学术中检索清华大学张希院士的研究论文。

3. 练习利用 Sigma-Aldrich 网站查询化合物 4-甲基苯胺的 NMR 谱图。

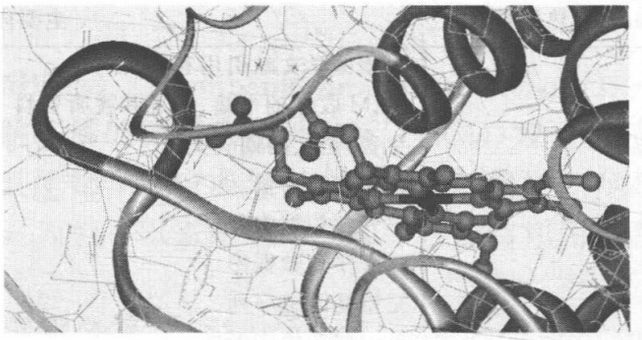
第 8 章　Internet 生物医药信息资源

导　语

生命是包含大量且分子结构复杂的有机物。目前，从生物信号的检测到疾病治疗药物的大规模合成，都离不开化学化工。因此，化学化工信息也大量分散于生物、医学数据库中。本章介绍与化学相关的生物医学信息源，并举例说明免费数据库的使用方法。

关键词

生物；医学；药学；信息资源；药物信息；蛋白质资源。



21 世纪是生命科学的时代，与生命科学相关的生物医药学科，如：生物化学、药物化学、基因组学、蛋白组学、化学生物学等分支学科正在迅速发展。“生物医药”可分属生物学、医学和药学三个学科，这三个学科都与化学紧密相关，从生物信息分子的检测、药物的设计合成到工业生产都离不开化学化工。

生物医药学科的发展必须紧紧依靠信息。获取生物医药信息的一个重要手段是进行信息检索，其网络信息检索与化学资源的检索方式密不可分。与化学相关的内容检索参见前几章。前几章介绍的数据库如 CA、ISI Web of science、PQDT 等同样可以查找生物医药信息，本章将侧重生物医药网络信息的查找方式、网络资源数据库及常用网站的介绍。

8.1　生物医学及药物网络信息

一些大型的综合网站和搜索引擎，如百度、Google、Bing、雅虎、搜狐、网易等，内容丰富，查询简洁快速方便，根据不同的主题与关键词便能得到相关信息。具体的使用方法详见第 7 章。除此之外，以下是一些与生物医药相关的综合信息网站和搜索引擎。

8.1.1　生物医学范畴与网站类型

生命科学（Biology）即生物学，是自然科学六大基础学科之一。是以分子遗传学为主的研究生命活动规律、生命的本质、生命的发育规律，以及各种生物之间和生物与环境之间

相互关系的科学。最终能够达到治疗诊断遗传病、改善人类生活、提高农作物产量、保护环境等目的。

生物学源自博物学，经历实验生物学、分子生物学而进入了系统生物学时期。生物化学的统一性深刻地揭示了生物的统一性：组成生物体生物大分子的结构和功能，在原则上是相同的。例如：各种生物的蛋白质的单体都是氨基酸，种类不过 20 种左右；各种生物的核酸单体都是核苷酸，种类不过 8 种，这些单体都以相同的方式组成蛋白质或者核酸的长链，它们的功能对于所有生物都是一样的。

当代生命科学的显著特点是：分子生物学的突破性成果，成为生命科学的生长点，使生命科学在自然科学中的位置起了革命性的变化。

医学（Medicine）是通过科学或技术的手段处理人体的各种疾病或病变。它是生物学的应用学科。

美国国立生物技术信息中心（National Center for Biotechnology Information，NCBI）提供大量的信息源（www. ncbi. nlm. nih. gov），如表 8-1 所示。可以看出，生物医学信息源类型有数十种之多。

表 8-1 NCBI 提供的生物医学信息源类型

序号	Popular Resources(热门资源)	主要内容
1	PubMed	生物医学文献引用和摘要
2	Bookshelf	NLM 收藏的书籍、杂志和视听资料
3	PubMed Central	免费，全文的期刊文章
4	PubMed Health	临床疗效评价
5	BLAST	序列相似搜索程序
6	Nucleotide	核酸序列数据库
7	Genome	完整基因组序列
8	SNP	单一核苷的多形性
9	Gene	基因情报
10	Protein	蛋白序列数据库
11	PubChem	化学物质资料

8.1.2 生物医学网站与数据库

（1）《生物学文摘》及其数据库（ip-science. thomsonreuters. com）（www. biosis. org）

BIOSIS Preview 数据库（BP）是由美国生物科学信息服务社（BIOSIS）建立的世界上最大的有关生命科学的文摘和索引数据库。BP 收录了世界上 100 多个国家和地区的 5500 多种期刊和 1650 多个会议的会议录和报告。报道的学科范围广泛，涵盖所有的生命科学。该数据库对应的出版物是《生物学文摘》（Biological Abstracts）、《生物学文摘——综述、报告、会议》（Biological Abstracts/RRM）和《生物研究索引》（BioResearch Index）。《生物学文摘》（BA）一直是各综合性院校、医学院校、农业院校的重要工具书。

BP 检索有 40 多种不同检索字段，包括：①输入学科主题查询相关研究领域文献；②利用生物分类名称（拉丁学名、俗名）检索；③进行概念检索；④输入生物体的大分子结构，包括组织、器官、系统等检索；⑤输入各种动物、植物、人类的疾病及异常现象检索；⑥输入化学合成物质和生化物质（包括药物）检索；⑦利用化学物质登录号检索；⑧输入大分子物质序列进行检索。

（2）MEDLINE 数据库（www. medline. com） 由美国国家医学图书馆（National Library of Medicine，NLM）于 1997 创建，并免费向全世界开放。MEDLINE 是目前世界上最权威的大型生物医学数据库和检索系统，是全面反映世界医学进展动态的重要窗口。覆

盖了医学的所有领域。它对应 Index Medicus、Index to Dental Literature 和 International Nursing Index 的印刷版索引。目前包含了 4800 多个索引题录和 1100 多万篇论文，其在 ProQuest 上的平台提供全文服务。

（3）EMBASE《荷兰医学文摘》（www. embase. com）　是世界上最有影响的医学二次文献之一；提供世界范围内的生物医学和药学文献，被认为是关于人类医学及相关学科文献的一种重要的综合性索引，是医学领域著名的数据库之一。下属的 Emtree 是一个独一无二的生命科学词库，其结构完善，可提供所有生物医学术语的解释和无可比拟的药物及疾病索引（www. elsevier. com/solutions/embase/coverage）。

（4）蛋白质数据银行（Protein Data Bank，PDB）（www. rcsb. org/pdb/home/home. do）　PDB 是美国结构生物学合作研究协会（Research Collaboratory for Structure Bioinformatics，RCSB）建立的全世界最完整的包括蛋白质、核酸、蛋白质-核酸复合物及病毒等生物大分子的三维结构数据库。PDB 生物大分子结构数据库的内容来自全世界相关研究者提交的生物大分子的原子坐标、注释、一级结构、二级结构、晶体结构因子、NMR 实验数据，由 RCSB 维护。每周大概生成 50～100 个新数据。这些分子结构信息可以从 PDB 主页检索，也可以通过其镜像站点或者 FTP 站点下载。该数据库是互联网免费资源，也可以通过网络注册获得光盘版本。该网站内容在德国、英国、新加坡等多个国家的大学设有镜像。

（5）化学银行（ChemBank）（chembank. broadinstitute. org）　是基于网络的公共数据库。由美国国立卫生研究院下属的国家癌症研究所（NCI）建立，希望全世界的科学家将所有小分子化合物的结构及其生物学效应或与蛋白质作用的信息，存入一个公共的数据库。通过实施“化学银行”计划，人们可以系统地寻找和分析能够作用于蛋白质或细胞的具有生物活性的化合物。

（6）中国生物医学文献服务系统（SinoMed）（sinomed. imicams. ac. cn）　由中国医学科学院医学信息研究所/图书馆开发，整合了中国生物医学文献数据库（CBM）、西文生物医学文献数据库（WBM）、协和医大博硕士学位论文数据库等多种资源。学科范围广泛，年代跨度大，更新及时。SinoMed 涵盖资源丰富、专业性强，能全面、快速反映国内外生物医学领域研究的新进展。

（7）生命科学图书馆（www. sicls. ac. cn）　由中国科学院上海生命科学信息中心建立，提供了大量生物信息资源的链接。

（8）生物谷（www. bioon. com）　建于 2001 年，国内生物行业最大的综合服务商。提供生物、产业、医学、药学等的专业平台及生物出版物、数据库等信息。该网站还提供许多生物试剂、设备。此外，还有生物技术交流论坛、生物草案系统介绍、资源中心相关学会、协会和科学家的详细介绍。

（9）美国国家医学图书馆（chem. sis. nlm. nih. gov/chemidplus/chemidlite. jsp）（免费）　通过该网站可以查询大量药物化学相关物质的结构、性质等信息。

此外，由下列网站也可获得一些有关生物、医药以及医疗方面有价值的信息：

（10）《BMC》杂志网站（www. biomedcentral. com/bmccomplementalternmed）　该杂志收录的文章重点关注对干预疗法的生物学机制的探索，以及其有效性、安全性的研究。

（11）MedlinePlus　是美国国立卫生研究院所属的，为患者及其家属和朋友提供相关信息的网站（www. nlm. nih. gov/medlineplus/complementaryandalternativemedicine. html）。该网站由世界上最大的医学图书馆——国家医学图书馆建立，它通过通俗易懂的语言，提供可靠的、最新的有关疾病、环境和健康问题的信息。可以在任何时间，任何地方，免费获取

这些信息。此外，可以使用 MedlinePlus 获取最新的治疗方法，查找药物或补充信息，查明医学专业词汇的含义，并可以查看医疗视频或插图。

（12）EFCAM（www. efcam. eu） 综合了欧盟成员国中不同方式的补充和替代医学方式，例如反射治疗及指压治疗等。其主要目标是向整个欧盟成员国公民提供平等的接受补充和替代医学方式治疗，并对补充和替代医学方式从业者提供实践机会。

（13）MedicineNet（www. medicinenet. com/alternative _ medicine/article. htm） 是一个在线的医疗媒体出版公司。通过其强大的、以用户为中心的交互式的网站，向读者提供明晰易懂的、深入的、权威的医疗信息。

（14）Bandolier（www. medicine. ox. ac. uk/bandolier） 向英国乃至世界范围的医疗人员及读者提供最优质的循证医学资源。

（15）Herbmed（www. herbmed. org） 一个交互式的电子草药数据库。其提供的超链接可访问关于应用草药治疗的相关数据。这是一个由非营利的替代医学基金会提供的、公正的、以证据为基础的信息资源。

（16）英国补充医学研究委员会官方网站（www. rccm. org. uk）（Research Council for Complementary Medicine，RCCM） 该委员会网站提供补充和替代医学的相关课程。

8.1.3 临床医学网站与数据库

临床医学科研的基本特征是对象特殊、方法困难、内容复杂。医学科学分成基础医学、临床医学、预防医学与卫生学、军事医学与特种医学、药学、中医学与中药学。医学科研活动中，基础研究、应用研究和试验发展是整个研究工作的三个不同阶段，分别属于三个不同的科技活动类型。循证医学数据库，系统评价内容可包括病因、诊断、治疗、预后、预防、卫生经济和定性研究。

权威的医学网站包括行业的现状、动态、进展、诊疗知识、病例分析、临床实践、临床技巧、继续医学教育、患者教育、医学会议及新闻等。

（1）National Institute of Health（NIH）（www. nih. gov） 美国国立卫生研究院，有两个对医学专业人员有价值的栏目：Clinical Trials（临床试验），Research Highlights（研究重点）。由 NIH 下属的美国国立辅助替代医学中心（NCCAM）创建的美国 NIH 替代医学数据库（nccam. nih. gov），包括以下栏目：Health Information、Clinical Trials。“辅助与替代医学”指的是那些尚未在传统医学中被使用的医学保健系统、技术以及产品。

（2）National Center Library of Medicine（NLM）（www. nlm. nih. gov/hinfo. html） 美国国立医学图书馆为大众和医务人员提供医药卫生知识和信息的事实型数据库，有卫生专题、药物信息、医学百科全书、医学词典、新闻、医生和医院名录等。

（3）Centers for Disease Control and Prevention（wonder. cdc. gov） 美国疾病控制与防治中心（CDC）最早的职责只是研究对美国某个地区的一种单一疾病的控制方法。渐渐地，其管辖范围不断扩大，除传染性疾病以外，还负责很多慢性病、职业性身体失调及诸如暴力和事故等社会疾病。常发布一些权威的糖尿病、肥胖等数据。

（4）MDLinx（www. internalmdlinx. com） 由内科医师自发组织创建，其目的是为内科临床提供最集中的信息资源，主要包括各种内科疾病的诊断、治疗等信息。将每日的最新医学信息以 E-mail 方式免费发送给用户。其主要栏目包括：①Top Internal Medicine Articles，每日提供最新（多选自世界著名医学杂志）医学文献；②Resource Directories 导航系统，提供 14 种疾病相关资源的链接。

（5）American College of Physician-American Society of Internal Medicine 美国内科医师学会（APC)-美国内科学会（www. acponline. org）是国际影响最大的内科学社会团体。其

网站的对象为内科医生和相关人员，服务内容涉及临床、科研和教育各方面。

（6）CochraneLibrary（www. cochranelibrary. com/）　汇集了六个数据库，能够提供不同类别独立的最佳临床证据的评价系统，可以帮助医生做出最佳临床决策。

（7）Trip（www. tripdatabase. com）　临床搜索引擎，旨在让用户快速、方便地找到和使用高质量的研究依据，为临床医疗提供支持和指导。Trip 可直接检索出二级研究杂志上的系统评价等，也可对一些在线的高质量的原始研究杂志进行检索。

（8）National Guideline Clearinghouse（NGC）（www. guideline. gov）（美国国立指南库）　隶属于美国卫生和公众服务部。使命是为医生和其他卫生专业人员、医疗保健提供者、健康计划整合型医疗卫生服务系统、采购商等提供一种可访问的机制，以获取详细而客观的信息作为临床实践指南，并进一步推广、实施和使用。

（9）Doctor’s Guide（www. docguide. com）　医师指南提供了大量医学信息（www. docguide. com/general-practice/popular/30days）。

（10）Cliniweb International（国际临床网）（www. ohsu. edu/cliniweb/）　由美国 Oregon 医学院组建，基于分类目录的临床医学搜索引擎。特别适用于预防保健专业的医学生和开业医生，不适于科研人员。

（11）Medical world search（医学世界检索）（www. mwsearch. com/）　由美国 The Polytechnic Research Institute 建立的一个医学专业搜索引擎，收集了数以千计的医学网点近 10 万个 Web 页面。免费全文检索。

8.1.4　药学网站与数据库

（1）Food and Drug Administration（www. fda. gov）　美国食品与药物管理局（FDA）提供多种与药物监控有关的信息：①New Prescription Drug Approvals（新批准处方药物）；②Prescription Drug Information（处方药物信息）；③Major Drug Information Pages 主要大类药物信息）；④Consumer Drug Information（针对消费者报告药物信息）；⑤Over-the-Counter Drug Information（OTC 药物信息）；⑥Drug Safety & Side Effects（药物安全及副作用信息）；⑦Public Health Alerts & Warning Letters（公共卫生警报）；⑧Reports & Publications First Data Drug Databases（报告及出版物）；⑨Special Projects & Programs（专门研究课题及项目）。

（2）欧洲药品管理局（EMA）官方网站（www. ema. europa. eu/ema/）。

（3）国家药监局基础数据库（www. hyey. com/freedata）　包括中国上市药品数据库、国内进口药品数据库、中药保护品种数据库、OTC 中西药说明书数据库、OTC 药品数据库等多个数据库。

（4）国家人口与健康科学数据共享平台中医药学中心（dbcenter. cintcm. com/cms/dbc）是国家人口与健康科学数据共享平台的主要内容，建有期刊文献类、中药类、方剂类、药品类、不良反应类、企业类等数据资源，有多库融合检索平台。

（5）中国药物专利数据检索系统（chmp. cnipr. cn）　世界上唯一进行深度加工标引的中国药物专利数据库。收录了 1985 年至今公开的全部中国药物专利。分三个组成部分：中药专利数据库（题录数据库、方剂数据库、中药材辞典数据库）、西药专利数据库（题录数据库、西药辞典数据库、确定化学结构数据库、族性化学结构数据库）、生物序列数据库。

（6）Drugfuture（www. drugfuture. com）　Drugfuture 提供了大量国内外药物数据库及检索信息，提供了中国、美国、欧洲专利打包下载的链接（图 8-1）。

（7）中医药在线（www. cintcm. com）　由北京中研信中医药信息网络有限公司创办，提供中医药学信息服务的专业化信息网站。

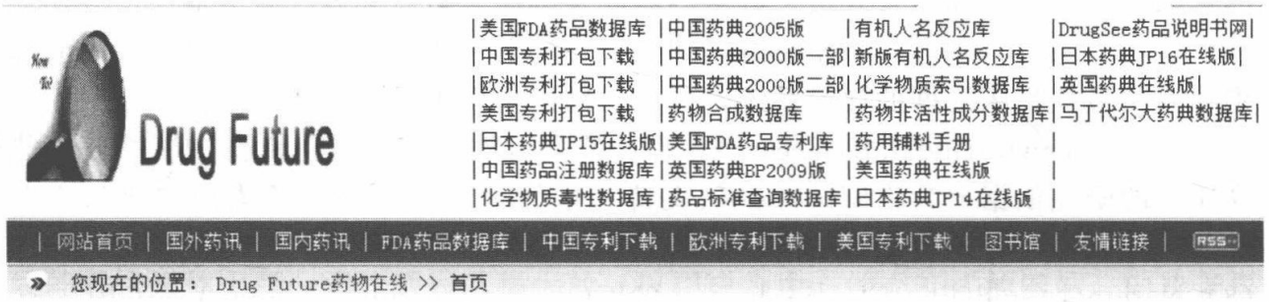


图 8-1 Drugfuture 网站主页

(8) 中国中医科学院中医药信息研究所 (www. cintcm. ac. cn) 提供多个中医药数据库在线检索与服务。

还有一些有价值且免费的数据库：AIDSDRUGS (www. nlm. nih. gov/pubs/factsheets/aidsinfs. html) (免费查阅艾滋病药物)；美国 FDA 审查的药物目录 (www. centerwatch. com/patient/drugs/druglist. html) (免费)；华源医药网 (www. hyey. com)，医药行业最大的电子商务交易平台。

8.1.5 化学品安全与毒性相关网站

(1) ChemicalHealth & SafetyData (ehp. niehs. nih. gov/ntp/docs/chem _ hs. html) 2000 余种化学品健康与安全数据：包括美国国家毒理学计划的相关研究内容、多种化学药品的健康和安全指标，还可通过化学药品的名称搜索到与该药品相关的文献，可看到摘要。

(2) TOXNET 化合物毒性相关数据库 (toxnet. nlm. nih. gov/) 毒理学数据库包含毒理学、危险化学品、环境卫生学、毒物释放等相关内容及其对人体健康的影响。从中可以检索到各种化合物的名称、分子式、结构、性质、分类、毒性等内容。

8.1.6 生物、医学、药学相关教学网站

值得关注的有关生物、医学、卫生教学与信息检索教学相关的网站如下。

(1) 生物医学文献与网络资源教学网站 “爱课程”网 (www. icourses. cn) 是我国高等教育课程资源共享平台，集中展示“中国大学视频公开课”和“中国大学资源共享课”。其中，中国医科大学上传的“生物医学文献与网络资源” (www. icourses. cn/coursestatic/course _ 4422. html) 在国内同类课程中居于领先地位，有效培养了医学生的信息意识、信息能力及综合素质。

(2) 灵滋 (www. natureleads. com) 网站不但提供了中草药文献的检索窗口，而且提供了大量学术讲座视频。

医学在线教育课程正在发展中。可通过搜索引擎检索。

8.2 免费生物医药类网站与数据库

8.2.1 免费搜索引擎

下面介绍免费搜索行业的现状与动态、相关知识与技术、医学会议及新闻等。

(1) PubMed 检索系统 (www. ncbi. nlm. nih. gov/pubmed) Pubmed 是美国国立卫生研究所 (NIH) 下属美国国立医学图书馆 (NLM) 开发的 Internet 检索系统，建立在国立生物医学信息中心 (NCBI) 平台上。Pubmed 主要提供基于 Web 的 MEDLINE 数据库检索服务，其中包括医学文献定购、全文在线阅读链接、专家信息查询、期刊检索以及相关书籍链接等。PubMed 免费向公众开放，在本章 8.3 中将进行详细介绍。

（2）世界卫生组织（WHO）（www. who. int）　WHO 提供的世界各国卫生统计资料最为丰富和权威。其电子版的 Weekly Epidemiological Record 免费向全世界读者开放。国内可查看卫生部的网站。另外，亚洲可查询日本东南亚医学情报中心（SEAMIC）（www. seamic-imfj. or. jp）的卫生统计资料。

（3）Medical Matrix（www. medmatrix. org）　“医源”是目前最重要的医学专业搜索引擎。它是一个免费的网络临床医学数据库，提供关键词搜索和分类目录搜索，最适合临床医师使用。

（4）Medscape（医景）（www. medscape. com/）　是 Web 上最大的免费提供临床医学全文文献和继续医学教育资源的网点。由功能强大的通用搜索引擎 AltaVista 支持，可检索图像、声频、视频资料，至今共收藏了近 20 个临床学科 2. 5 万多篇全文文献。可选择 Full-text、Medline、DrugInfo、AIDSLine、Toxline、Whole、Web、News、Medical Images、Dictionary、Bookstore 等 10 多种数据库进行检索，同时还可浏览每日医学新闻，免费获取 CME 各种资源，同时可查找医学词典和回答用户咨询，提供根据疾病名称、所属学科和内容性质（会议报告、杂志的全文或摘要等）的分类检索（The Medscape Index）。

（5）MedExplorer（医学浏览器）（www. medexplorer. com）　主要检索医学信息，还可检索 250 多个医学新闻组信息和世界各地召开的会议消息，同时提供与 HealthGuide 的链接。

（6）MedHunt（www. hon. ch/MedHhunt）　“医药猎手”是瑞士日内瓦的非盈利性组织“健康网络基金”1996 年建立的一个免费全文医学搜索引擎，专为医学工作者使用。它使用网际 robot 技术从网上搜索医药卫生资源并进行处理。该搜索引擎提供了两个独立的数据库 Honoured databast 和 Auto-Indeced datdbase。

（7）MedFinder（www. netmedicine. com/medfinder. htm）　Triple Star System 公司 1996 年研制，是一个由专家手工编制的免费全文医学专业搜索引擎，提供数千个医学网址，该网站提供大量的病理切片、ECG、CT、MRI、核医学、超声医学方面的内容，其形式包括各种图片、照片、视频和动画。

（8）Healthatoz（www. healthatoz. com）　Internet 上用户较多的医学专业搜索引擎。

（9）Achoo（www. achoo. com/）　加拿大安大略 MNI 系统公司 1996 年创建并维护的医学搜索引擎，其目的是向用户提供全面可靠的卫生保健信息，涉及临床、替代医学和医药经营等方面。是 Internet 上用户较多的医学专业搜索引擎。

（10）WebMD（www. webmd. com）　提供有价值的健康信息和健康管理工具，信息及时而可靠。

8. 2. 2　免费生物医学全文的获取

大部分期刊论文可以通过网络免费查到摘要，同时出现了大量免费阅读的期刊（Open Access Journals），免费检索与下载期刊全文详见第 3 章。这里介绍几类专业网站：

（1）斯坦福大学 HighWire（highwire. stanford. edu/）　是全球第二大提供免费全文的学术文献出版商，1995 年由美国斯坦福大学图书馆创立。最初仅出版著名的周刊“Journal of Biological Chemistry”，现提供 1300 余种期刊，涵盖生物科学、人文、医学、物理科学、社会科学等大类。标为 free 的可免费访问全文（highwire. stanford. edu/lists/freeart. dtl）。

（2）Free Medical Journals（www. freemedicaljournals. com）　该网站提供 1500 余种免费的医药学杂志链接，有的全免费，有的是六个月或更长时间以后免费，其中不乏 IF 很高的杂志，如 Science、Cell 是一年后免费（图 8-2）。

（3）BioMed Central（www. biomedcentral. com/）　出版 286 种科学技术和医学领域的

图 8-2 Free Medical Journals 检索系统界面

期刊，坚持在网站免费为读者提供信息服务，其出版的网络版期刊可供世界各国的读者免费检索、阅读和下载全文。

(4) Public Library of Science（科学公共图书馆，PLoS）（www. plos. org/） 是一家由众多诺贝尔奖得主和慈善机构支持的非盈利性学术组织，旨在推广世界各地的科学和医学领域的最新研究成果。PLoS 出版了 8 种生命科学与医学领域的开放期刊，可以免费获取全文，比较具有影响力。

8.3 PubMed 检索方法与实例

PubMed 是医学、生物医学领域使用最多的免费文摘数据库，Pubmed 数据库包含引自 MEDLINE、生命科学期刊和在线书籍等的 2400 万份文献数据。这些引用包括从 Pubmed 中心及出版商网站查阅文献全文的链接，是一种方便快捷的文献获取途径。

PubMed 检索系统（www. ncbi. nlm. nih. gov/pubmed）覆盖全世界 70 多个国家 4300 多种主要生物医学期刊的摘要和部分全文。其类型有期刊论文、综述，以及与其他数据资源的链接。其覆盖的时间可追溯至 20 世纪 60 年代，更新周期仅为 1 天。因而利用 PubMed 可以查阅到最新的文献信息。右上角 PubMed Commons 可方便作者分享其对于文章及杂志的意见及信息（图 8-3）。PubMed 检索模式分简单检索和高级检索。

8.3.1 PubMed 简单检索

在 PubMed 检索框（www. ncbi. nlm. nih. gov/pubmed）中输入要查询的英文关键词。关键词有多个时，用 AND 链接，点击“Search”会出现相关文献，检索结果直接显示在主页下方。需要注意几点：①检索词可以是具有任何实际意义的单词，无大小写区分。如药品名称、疾病名称、人名、地名、期刊名称、期刊 ISSN 号等，系统自动转换和匹配后显示检索结果。②可使用布尔逻辑运算符 AND、OR、NOT，必须全部大写。

【例 8-1】 需要查阅与“Vitamin C（维生素 C）”相关的文献，可以在检索框中输入 VitaminC，结果如图 8-4 所示，得到 54295 条文献，此页面中有许多相关信息，可以通过多种方式筛选，如：年代、时间、是否综述、是否全文等。

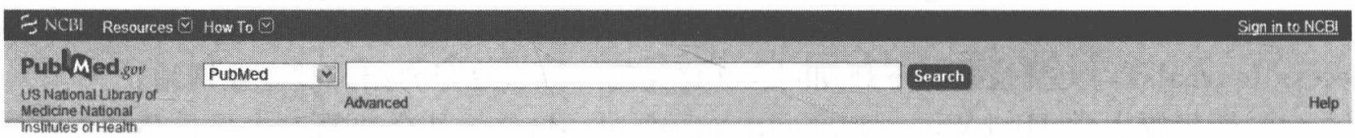


图 8-3 PubMed 检索系统界面

【例 8-2】 检索与伤口愈合相关的 Vitamin C 信息。

① 确定关键词，即“Vitamin C（维生素 C）”和“wound healing（伤口愈合）”。

② 分析所要检索的两个关键词之间的关系，定义为“AND”。在检索框内输入“Vitamin C And Wound Healing”，然后点击“Search”，结果如图 8-5 所示，得到 434 条文献。

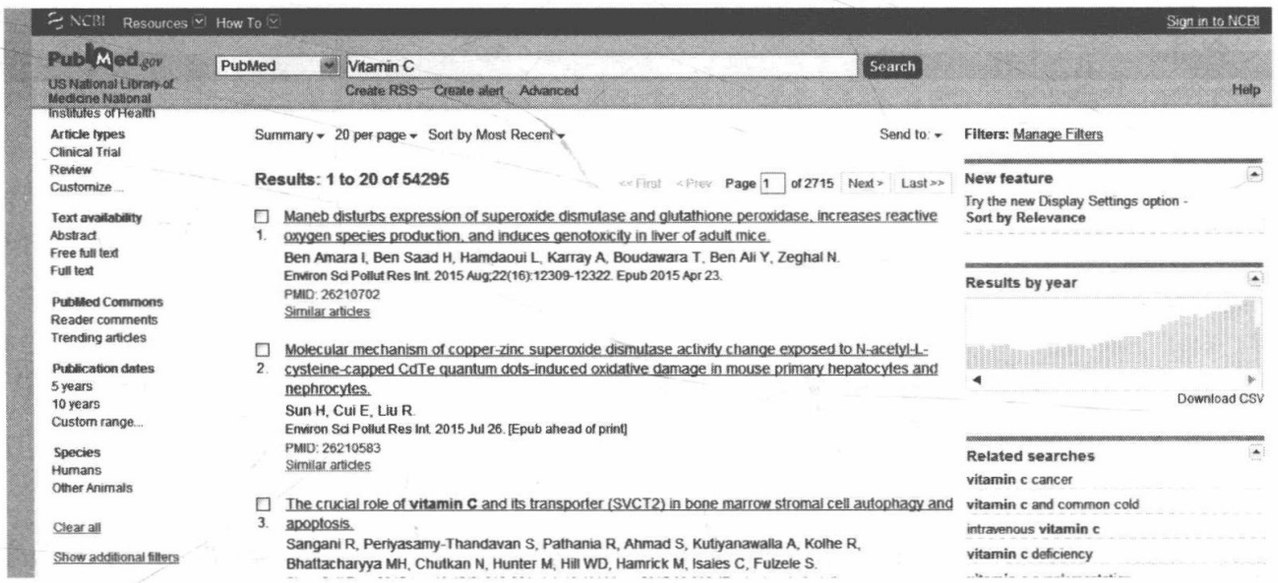


图 8-4　在 PubMed 检索框检索有关“Vitamin C”的信息

③ 图 8-5 显示结果为默认的 SUMMARY 格式，可依据提供的标题进一步筛选所需文献，点击第 1 条，看到摘要与出处信息（图 8-6），右上角显示 Elsevier 数据库，点击右上角“Full Text Sources”给出的链接可以直接打开全文。

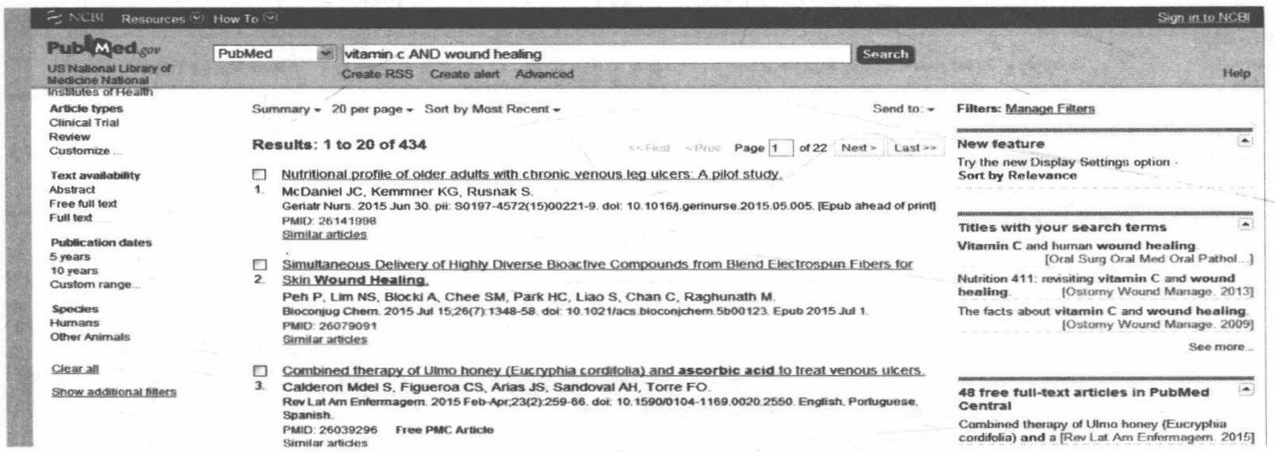


图 8-5　在 PubMed 检索框检索与伤口愈合相关的“Vitamin C”的信息

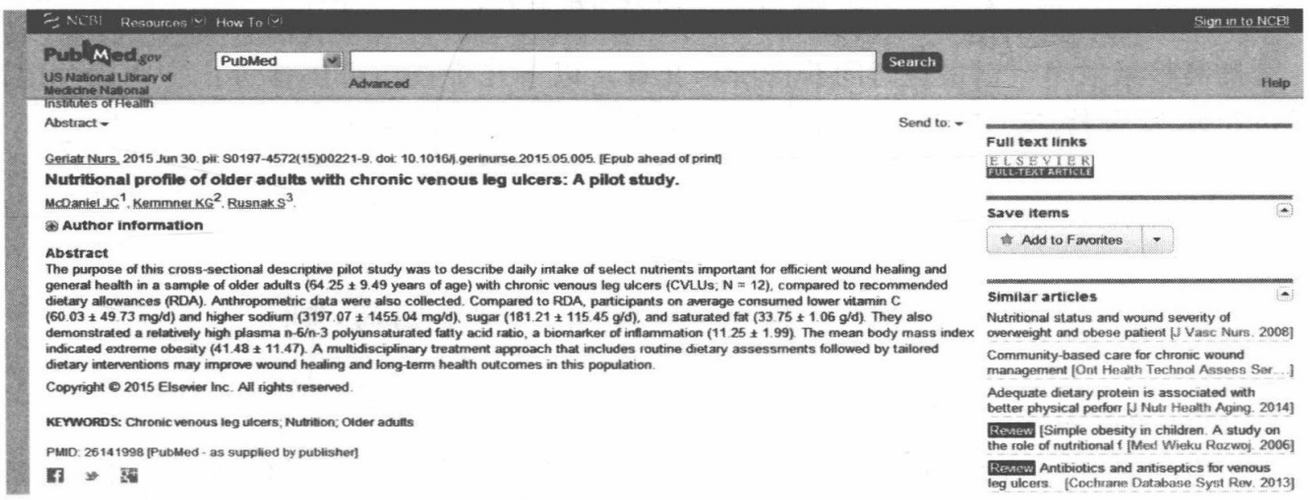


图 8-6　PubMed 简单检索的结果

8.3.2　PubMed 高级检索

方法：在 PubMed 检索框下方点击蓝色字体的“Advanced”进入高级检索界面。如

图 8-7所示。

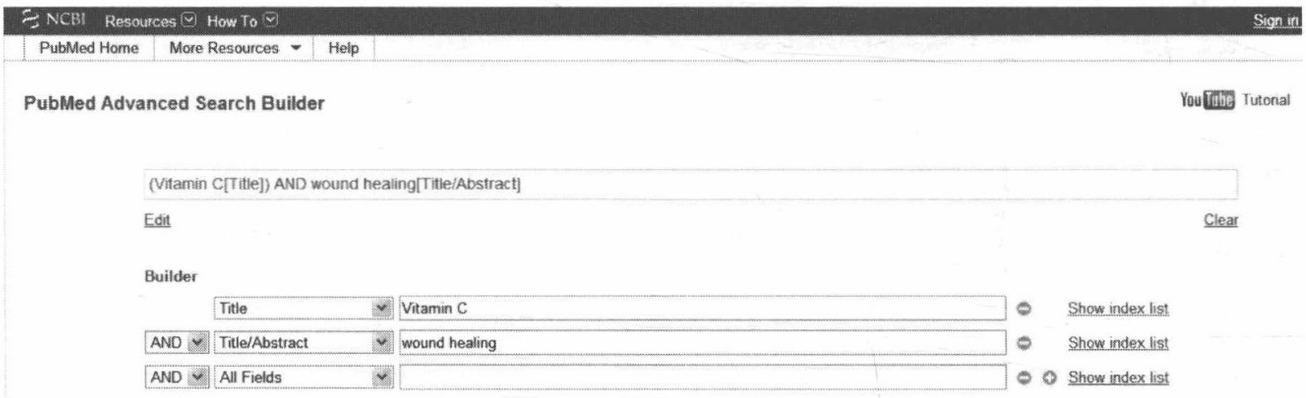


图 8-7 PubMed 高级检索界面 1

【例 8-3】 同样以“Vitamin C”和“wound healing”作为关键词检索，可将“Vitamin C”限定在 Title（标题），“wound healing”限定在 Title/Abstract（标题/摘要），如图 8-7 所示。点击“Search”就可得到检索结果，如图 8-8 所示，可以看出，检索到 37 篇文献。此范围大幅度缩小。

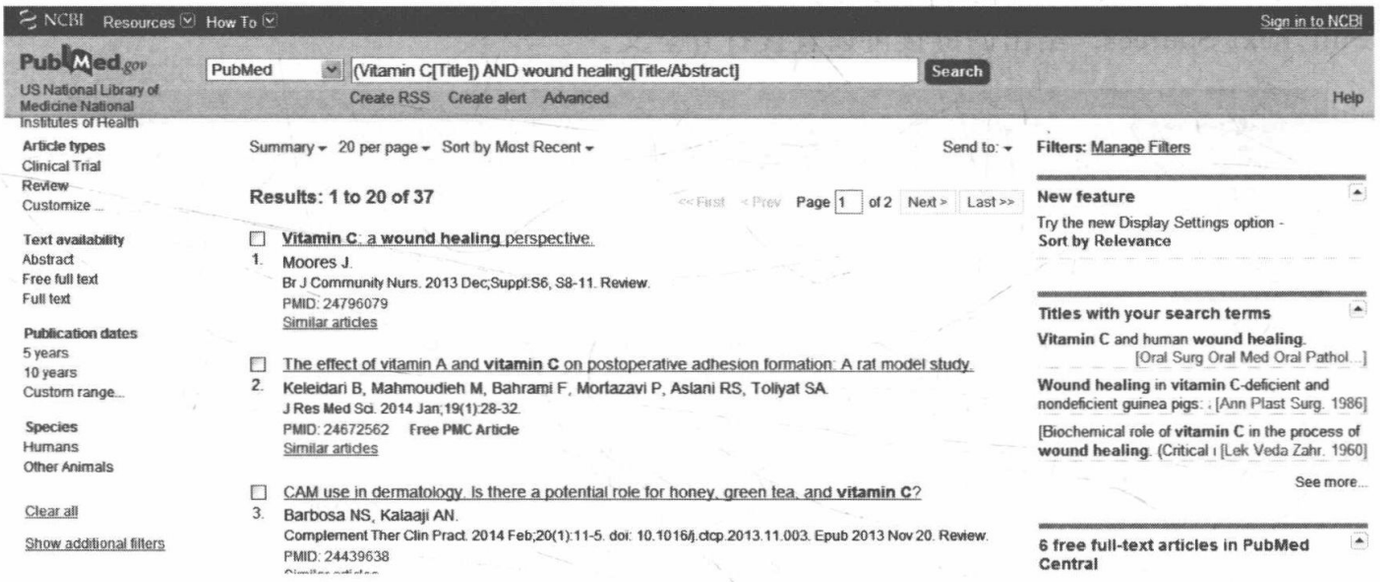


图 8-8 PubMed 高级检索界面 2

为提高检索效率，以最短时间获得所需文章，以下几个技巧可供参考：①明确关键词；②通过布尔逻辑检索，提高检索效率，在检索框中输入布尔逻辑运算符 AND、OR 或 NOT。③点击检索界面的“Limits”按键，通过限定 DATES、STUDY GROUP 等，可精炼检索范围。

8.4 PubChem 检索方法与实例

8.4.1 PubChem 简介

2004 年开始使用的 PubChem 是专门针对查询小分子结构与生物活性的搜索引擎，系统由隶属美国国立卫生研究院（NIH）的国家生物技术信息中心（NCBI）维护，拥有上百万组化学结构和相关文字数据，并可免费由 FTP 下载。

PubChem 目前是化学界学者熟知的美国化学学会（ACS）化学文摘服务搜索系统（cas. org）的最大竞争对手。

PubChem（pubchem. ncbi. nlm. nih. gov）由 NCBI's Entrez 信息检索系统内三个相互链接的数据库组成的。①PubChem Compound：可利用名称、同义词或关键词来检索独特的化学结构，并提供与每一种化合物有关的生物特征信息链接。②PubChem Substance：可利用名称、同义词或关键词来检索所收录的化学物质数据，并提供有关生物特征信息和收录者网站地址。③PubChem BioAssay：可利用源自生物测定描述的术语检索生物测定记录，并提供有关活性复合物和生物测定的链接，包含生物活性数据。

PubChem 也是一个化学结构相似性的快速搜寻工具。还提供多种符合化学研究者需求的搜索功能，例如化学结构（Structure Search）、名称片段、化学式、分子量、油水分配系数、氢键给体和受体数等，除此之外，还可在线绘制结构或片段来做搜寻，并有 CID、SMILES、InChI 系统可输入和输出所有常用化学档案格式。

注意：如果通过药物名称，检索较为容易，但是通过化合物名称，有时候不能直接得到结果，需要更换检索词。

8.4.2　PubChem 检索实例

这里以“Vitamin C”为例，通过 PubChem Compound 检索，如图 8-9 所示，检索结果如图 8-10 所示。

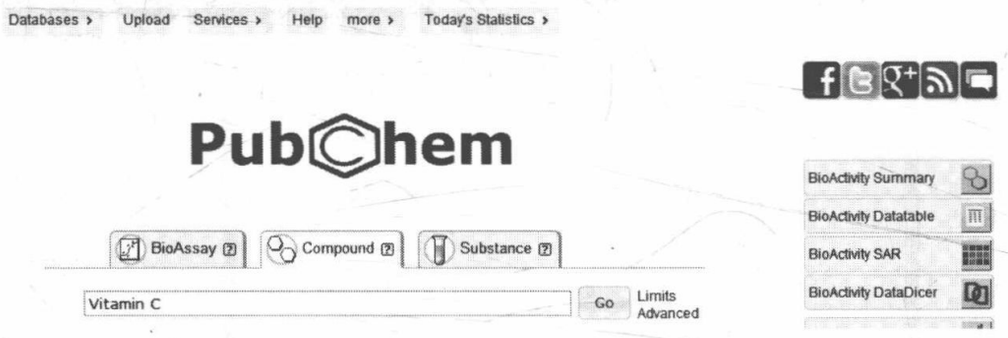


图 8-9　PubChem Compound 检索界面

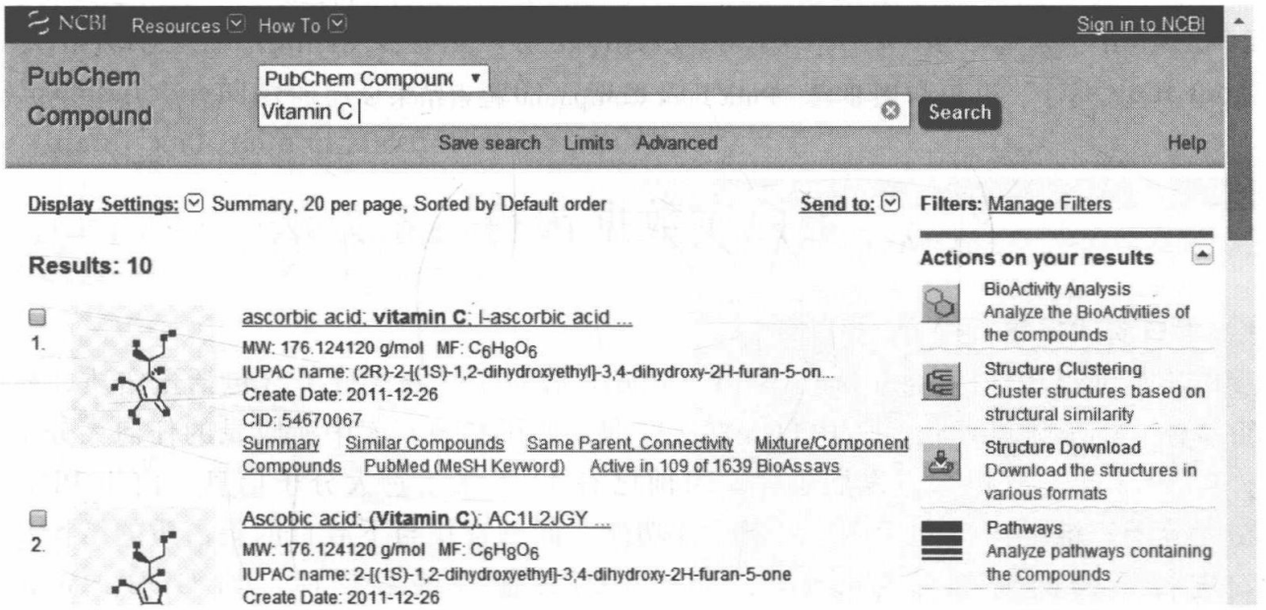


图 8-10　PubChem Compound 检索结果 1

点击第一个结果的标题后，结果如图 8-11 所示，可以得到该化合物的基本性能描述。还提供了如下链接：Vendors（销售商）、Drug Information、Bioactivities 等信息。点击“Drug Information”，就可以得到如图 8-12 所示的一系列信息。

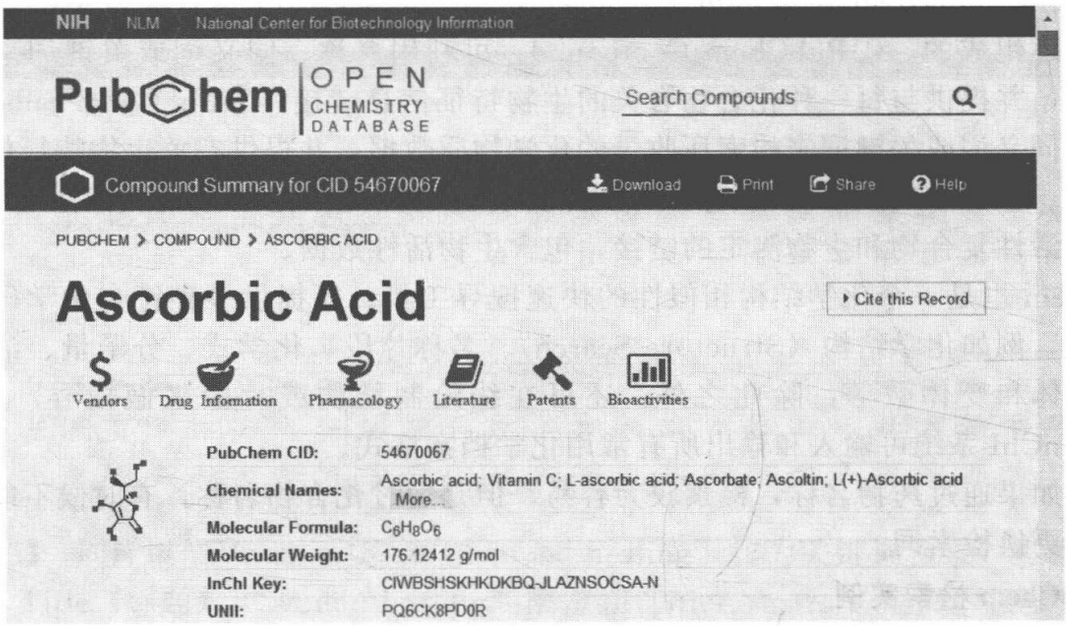
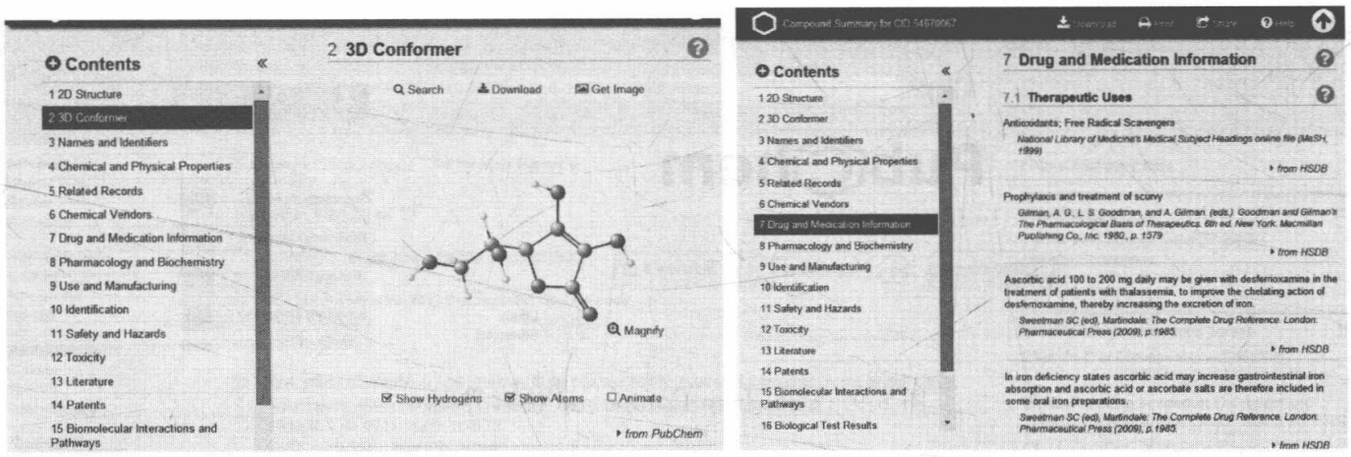


图 8-11 PubChem Compound 检索结果 2



(a) (b)

图 8-12 PubChem Compound 检索结果 3

8.5 蛋白质数据银行检索方法

8.5.1 蛋白质数据银行简介

蛋白质数据银行（Protein Data Bank，PDB）收录了生物大分子（包括蛋白质、核酸及复合组装体）的三维结构信息。用户可直接查询、调用和观察库中所收录的任何大分子三维结构。自 1971 年建立以来，发展迅速，目前已有 11 万条生物大分子信息。由于 PDB 主要由生物大分子三维结构组成，具有以下几种功能：能够查找与下载目的蛋白质的结构及相关信息，进行结构的简单分析，与 Internet 上的其他一些数据库，如 GDB、GenBank、SWISS-PROT、PIR 等链接。

目前，有多个网站提供 PDB 入口，如：the Research Collaboratory for Structural Bioinformatics（RCSB）PDB（www. rcsb. org/pdb），Worldwide PDB（www. wwpdb. org）。

PDB 可通过关键词或 PDB 标识符等进行查询。在序列分析中，PDB 主要应用于蛋白质结构预测和结构同源性比较。其中 NRL-3D 数据库是 PDB 数据库中所有蛋白质序列的信息。

8.5.2　蛋白质数据银行检索实例

以血红蛋白为例，从 PDB 网页（www.rcsb.org/pdb/home/home.do）中检索血红蛋白结构信息。首先，在主界面（图 8-13），输入“Hemoglobin”，点击“Go”，结果如图 8-14所示。显示不同类型结果。

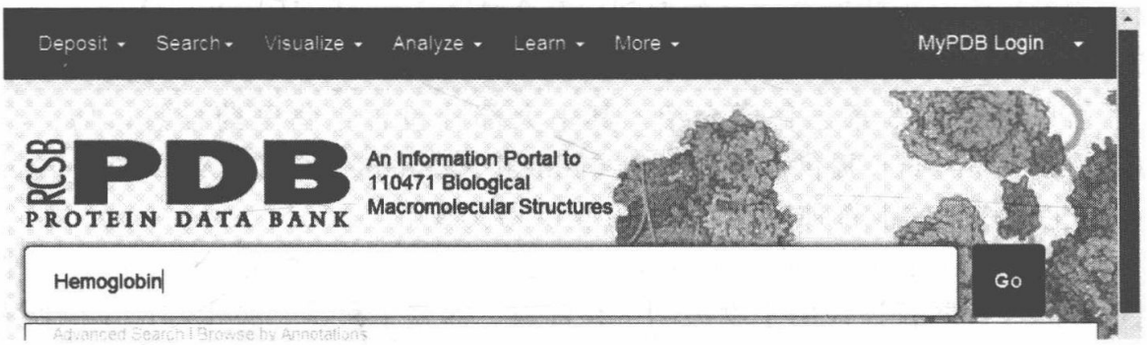


图 8-13　PDB 网站主界面

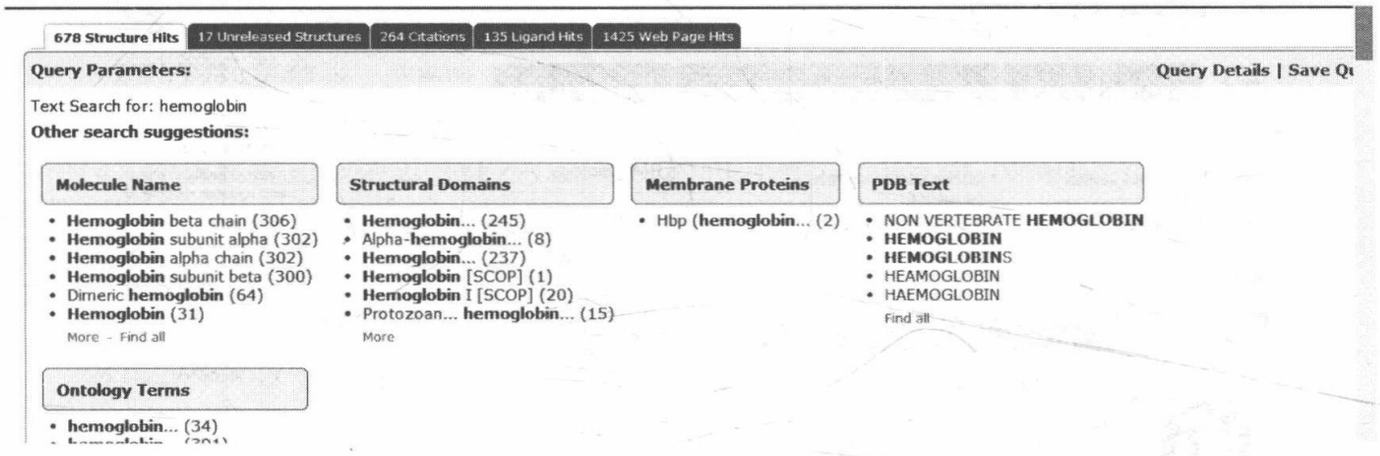


图 8-14　PDB 检索结果 1

选择其中的“Hemoglobin subunitalpha”，得到相关蛋白质数据（图 8-15），点击第一个“structure of human foetal deoxyhaemoglobin”，可以得到 human foetal deoxyhaemoglobin 的结构信息（图 8-16），如在 2D View 界面，你可以“Use your mouse to drag，rotate，and zoom in and out of the structure”。

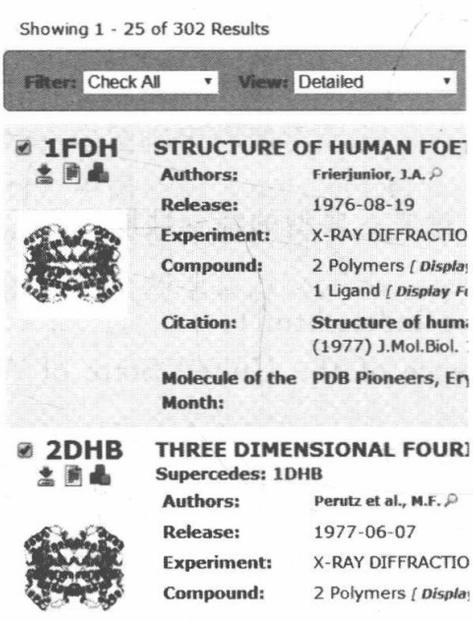


图 8-15　PDB 检索结果 2

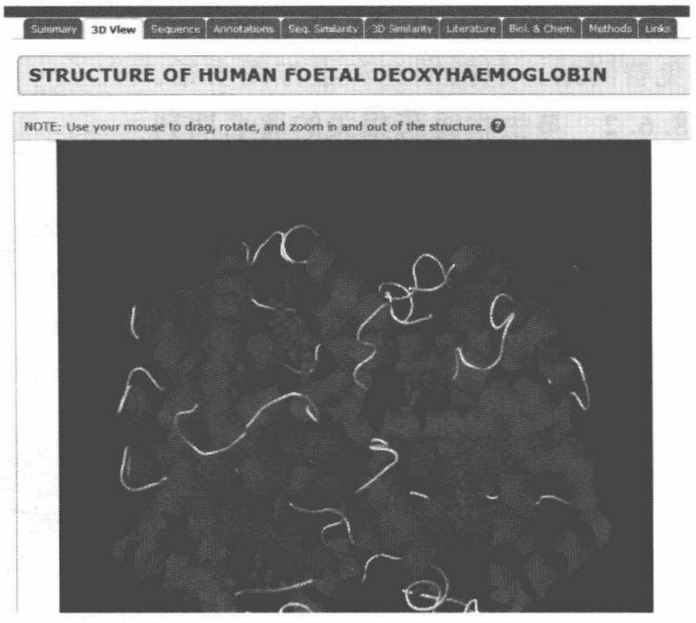


图 8-16　PDB 检索结果 3

8.6 Internet 生物医学期刊

许多期刊目前都有网络版，都可以从 Internet 网阅读目录或下载全文。重要的期刊数据库及出版社均发行大量生物医药方面的期刊，简介如下。

8.6.1 出版社与图书馆

综合性出版社在第 3 章已作了介绍，其中大部分包含生物医药信息，如：CCC（ISI Current Content Connect）提供的相关分册 Clinical Medicine（CM）及 LifeSciences（LS）。Elsevier 提供生命科学的上百种期刊、Wiley 全文数据库。

（1）BioMed Central（www. biomedcentral. com） 是一个独立开放访问的出版商，提供在线免费查阅经过同行评议的生物医学研究资料，涵盖了科学、技术和医学的所有主要领域，共 57 个分支学科，收录 200 多个期刊（图 8-17）。

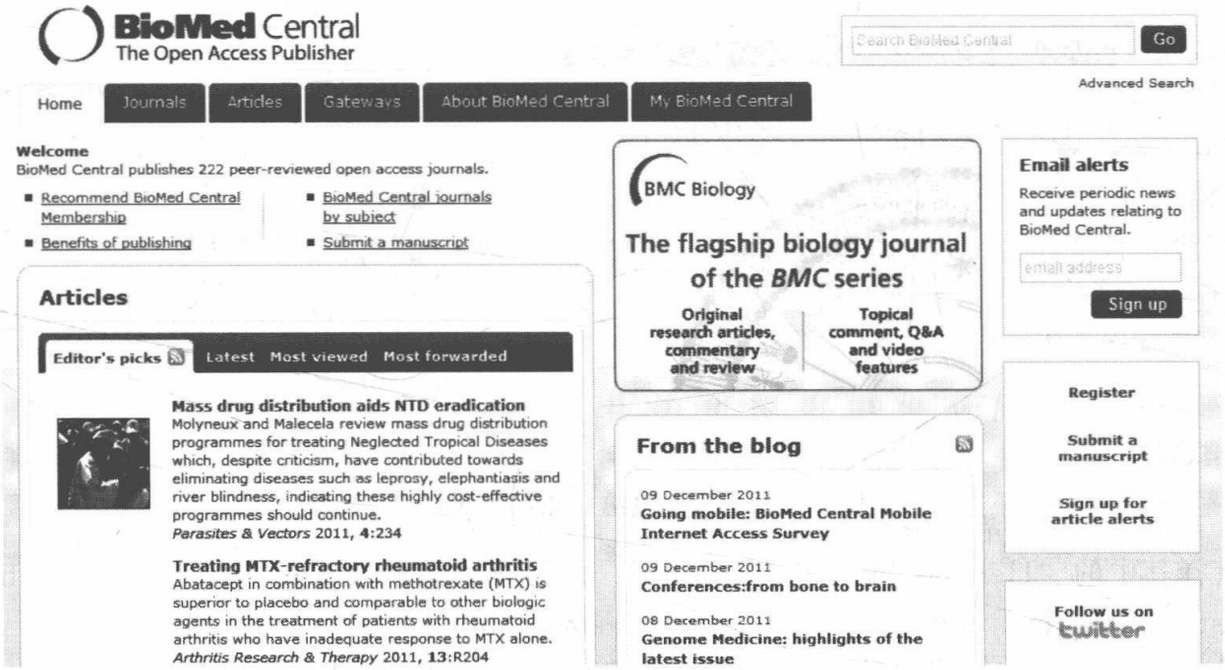


图 8-17 BioMed Central 网站界面

（2）Bioscience（FBS，www. bioscience. org） 是包含生物学和医学等多个领域的在线免费网站，包括期刊和虚拟图书馆。

8.6.2 与生物医药相关的著名期刊

8.6.2.1 一些综合性期刊

综合性期刊既发表化学类论文，也发表生物医学类论文。典型的综合性期刊有：

（1）Science（《科学》）（www. sciencemag. org）。

（2）Nature（《自然》）（www. nature. com/nature/index. html）。

（3）Proceedings of the National Academy of Science of the United State of America（PNAS，美国国家科学院院刊）（www. pnas. org）。

8.6.2.2 一些生物医学专业期刊

（1）Cell（细胞）（www. cell. com） 是生命科学的顶尖刊物，创刊于 1976 年。Cell 以发表具有重要意义的原创性科研报告为主，许多生命科学领域最重要的发现发表在 Cell 上。

（2）Annual Review of Celland Developmental Biology（细胞及发育生物学年度评论）（www. annualreviews. org/journal/cellbio）。

（3）The Journal of Cell Biology（细胞生物学）（jcb. rupress. org）。

（4）Molecular Biology of the Cell（细胞分子生物学）（www. molbiolcell. org）。

（5）Annual Review of Biochemistry（生物化学年度评论）（www. annualreviews. org/journal/biochem）。

（6）The FEBS Journal（欧洲生物化学联合会杂志）（onlinelibrary. wiley. com/journal/10. 1111/（ISSN）1742-4658）。

（7）Genome Research（基因组学研究）（genome. cshlp. org）。

（8）Annual Review of Microbiology（微生物学年报）（www. annualreviews. org/journal/micro）。

（9）Journal of Bacteriology（细菌学杂志）（jb. asm. org）。

（10）Journal of Experimental Medicine（实验医学杂志）（jem. rupress. org）。

（11）Biochemistry（生物化学）（pubs. acs. org/journal/bichaw）。

8. 6. 2. 3　国内部分知名生物医药期刊

（1）中国科学 C 辑：生命科学（life. scichina. com）。

（2）中国药学杂志（www. cpa. org. cn/zazhi/Default. asp）。

（3）中国药师（www. zgys. org）。

（4）中国医院药学杂志（zgyyyx. periodicals. net. cn/default. html）。

（5）中国新药杂志（www. newdrug. cn）。

（6）中国药理学报（英文）（www. chinaphar. com）。

（7）中国药理学与毒理杂志（www. cjpt. ac. cn）。

（8）药物分析杂志（www. ywfxzz. cn）。

（9）医药导报（www. yydbzz. com）。

（10）中国药物依赖性杂志（www. cqvip. com/QK/98337A）。

（11）药学学报（www. yxxb. com. cn）。

（12）中国细胞生物学学报（www. cjcb. org）。

（13）中国医药工业杂志（www. cjph. com. cn）。

（14）中国新药与临床杂志（xyyl. cbpt. cnki. net）。

（15）中国药理学通报（www. zgylxtb. cn）。

（16）中国抗生素杂志（www. zgkss. com. cn）。

（17）中国药科大学学报（www. zgykdxxb. cn）。

（18）中国临床药理学杂志（www. cpa. org. cn）。

（19）中国药房（zgya. chinajournal. net. cn）。

（20）中国现代应用药学（www. cpa. org. cn）。

（21）华西药学杂志（www. scypzc. com）。

练　习　题

1. 请列出几个常见的生命学科网站名称和网址。

2. 简单介绍《生物学文摘》(Biological Abstracts) 有何用处。
3. 列举几个查找药物信息的网站名称和网址。
4. 如何查找中草药信息?
5. 列出 3～5 个重要而免费的检索生物医药信息的网站。

实践练习题

1. 在 PubMed 中检索增塑剂“邻苯二甲酸二辛酯 DEHP”的相关生物医药文献。
2. 在 PubChem 中查找“三聚氰胺 (melamine)”的毒理学性能。
3. 在 PDB 中检索并下载细胞色素 P-450 分子结构的信息。

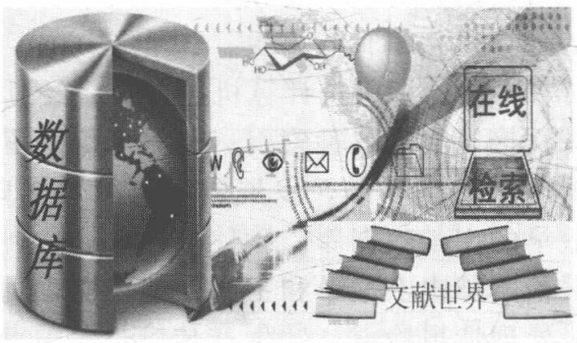
第 9 章　重要网络数据库与在线检索工具

导　语

随着网络的高速发展，以网络数据库为主要代表的在线检索工具已成为获取专业信息的常规手段。本章将化学化工相关的网络数据库与在线检索工具进行分门别类，并介绍几种重要的专业数据库（如：CNKI、ScienceDirect、ACS、RSC 等）检索实例，让读者掌握网络数据库的使用方法。

关键词

网络数据库；在线检索工具。



Internet 的高速发展有效推动了无纸化办公，也推动着网络数据库的高速发展。利用网络数据库为主的检索工具检索科技信息已成为科技工作者一项常规的工作。另外，我们也可以通过在线检索工具找到网络数据库的摘要信息。通过阅读摘要信息，筛选有价值的原始文献，从而大幅度降低获得有价值原始信息的成本。本章主要介绍化学化工相关网络数据库与在线检索工具。

9.1　检索工具与网络数据库

9.1.1　从检索工具到搜索引擎

在印刷版文献时期，为了从大量而分散的文献源中有效检索到有价值的文献，有专门的机构收集原始文献线索并将其体系化（即文献存储），然后提供检索线索或手段，使读者从中检索所需文献（即文献检索），这就是检索工具（Retrieval Tools），即用来存储、报道和查找文献资料线索的工具。典型检索工具如美国《CA》、《全国报刊索引》。

高级的检索工具具有如下特征：①对收录文献外部特征（如篇名、著者、出版地等）和内容特征（如摘要、述评）进行描述；②能提供各种检索标识和途径；③有比较完备的检索体系。因此，科学工作者使用检索工具可以从大量文献源中快速、准确地获取大量的情报信息。学会使用检索工具，是人们了解和掌握科技动态，进行科学研究的捷径。

计算机互联网网站开放初期，为了方便用户找到有价值的信息，从综合网站的目录浏览、目录索引，逐渐走向具有强大检索功能的搜索引擎（Search Engine），即根据一定策略、运用计算机程序将互联网信息进行组织和处理后，为用户提供检索服务的系统。为了适应大量出现的内容与形式各异的网站，诞生了综合搜索引擎网站，即提供互联网络信息资源检索服务的网站。

搜索引擎是网络时代的检索工具。它可以帮助用户从海量的网络信息中查找到所需要的各类信息。搜索引擎不但具备传统检索工具的基本功能，而且超越了其检索方式与检索特征，并节省了大量时间。随着智能手机的大量普及，使用搜索引擎更加便捷。

目前，一些知名的传统手工检索工具已经实现了网络化检索。因此，搜索引擎已成为我们经常使用的检索工具。

9.1.2 数据库及其在线检索

数据库（Database）是按照数据结构来组织、存储和管理数据的仓库。数据库技术随着计算机与网络等信息技术的迅速发展而发展。不同类型的数据库，从最简单的存储各种数据的表格，到能够进行海量数据存储的大型数据库系统已经广泛应用。数据库技术是管理信息系统、办公自动化系统、决策支持系统等各类信息系统的核心部分，是进行科学研究和决策管理的重要技术手段。

文献数据库是指计算机可读的、有组织的相关传统文献与信息的集合。文献数据库起源于二次文献（检索工具）的计算机化编辑与出版。20 世纪 60 年代初，为克服因信息爆炸而带来的困难，一些文摘社（如 CA 社）引进计算机技术，将经过整理、加工的文献信息由计算机进行编辑、排版、印刷文摘刊物和各种索引。同时，仍保留在计算机中的机器可读的文献信息，作为二次文献编辑出版的副产品，发展成为文献数据库。1964 年美国 CA 社推出的《化学文摘数据库》是最早的文献数据库。

文献数据库是网络情报检索历史上最早和主要处理和检索对象。文献数据库主要用于情报检索，包括：①由计算机处理情报检索；②生产传统性的文献产品，如文摘刊物、书目、索引等；③生产机读文献产品，如综合或专题文献数据库磁带、软盘、光盘等；④生产文献缩微产品，如计算机输出缩微片（COM）。

随着互联网快速发展而出现网络数据库，使文献数据库资源可以通过网络在线检索。网络文献数据库可以将传统文献（包括图书、期刊论文、学位论文、专利、标准、会议录、政府出版物等多种文献资源）记录在网络载体上，并实现远程检索与下载利用。

另外，网络数据库不但可以收录传统的文献源，还可以收录基于网络的新型文献源，如科技新闻、软件、各种组织机构、生产销售单位在线资源。网络数据库不但可以用文字、图形、符号等方式记录，还可以通过声频、视频等方式记录信息资源。网络数据库的商品化是其成熟的重要标志，检索平台增多、检索功能多样化。

目前，一些数据库可以通过搜索引擎实现免费在线检索。还有许多专业数据库，经过（订购）授权后，可以实现在线检索。

由于一些基于检索工具发展起来的数据库提供了全文（即文献源）的链接，所以，搜索引擎、在线数据库及在线检索工具的功能与形式（检索界面）越来越接近。

9.1.3 重要的化学化工网络数据库与在线检索工具

化学化工相关网络数据库种类繁多，可以按照学科、内容分类，也可以按照检索方式分类。按照内容特征，数据库（或检索工具）分为三大类，即综合数据库、专业数据库、特色数据库（或检索工具）。表 9-1 列出了一些重要的化学化工在线数据库与检索工具。其中，大部分检索工具（搜索引擎）可以免费使用，但对应的数据库需要付费。这里，综合数据库

表 9-1　重要网络数据库与在线检索工具特点

类型	名称	内容特征【订购单位】	内容章节
综合检索工具	百度 Google	中、英文检索工具。可搜到 30%以上与主题相关的文献线索。百度与 Google 都有学术搜索。【免费】	7
	Bing 学术	原为 Academic Search(微软学术搜索引擎),包括个人资料页、可视化搜索、会议征文、学科趋势、用户编辑等。【免费】	7;9
	Scopus	收录了科技与医学期刊、会议录、专利、科学网页。【订购较少】	9
专业检索工具	CA 数据库	收录了全世界 98%以上的化学文献,包括期刊、会议及学位论文、图书、专利、科技报告等文献源。SciFinder Scholar 提供大量化学化工相关商业信息。【部分单位订购】	6
	Pubmed	生物医学相关文摘数据库。【文摘免费】	8
综合数据库	SCI 数据库	检索高水平期刊(SCI)与会议论文(CPCI)的摘要及引用情况,网络版(Web of Science)提供全文链接。【部分单位订购】	3;5
	EI 数据库	摘录世界工程技术期刊、会议文献、图书、技术报告和学位论文等,网络数据库为 Ei Compendex Web。【部分单位订购】	5
	中国知网(CNKI)	收录中国的期刊全文、博士硕士论文全文、重要报纸和会议论文全文,及部分专利、标准、专业翻译助手。【大部分单位订购】	3
	万方维普	涵盖期刊与会议论文、学术成果、专利、标准、图书、文献共享平台、论文检测系统等。【部分单位订购】	9
专业数据库	Science Direct	涵盖 2500 多种期刊全文数据库和 11000 图书数字资源。【摘要免费;大部分单位订购】	9
	ACS Publications	美国化学会(ACS)期刊全文数据库,提供高水平期刊论文及全文。【摘要免费;部分单位订购全文】	9
	RSC 数据库	RSC(英国皇家化学学会)出版的期刊论文数据库。【摘要免费;部分单位订购全文】	9
	Wiley 数据库	John Wiley 全文电子期刊数据库。【摘要免费;部分订购全文】	9
	SpringerLink	SpringerLink 学术期刊及电子图书。【摘要免费;部分订购全文】	3
	期刊数据库	高水平期刊数据库独立网站。【免费检索摘要】	9
	ProQuest 检索平台	ProQuest 博硕士论文数据库,收录欧美 1000 多所大学的逾 200 万篇博、硕士学位论文的题录和文摘。【多数论文前 24 页可免费预览,部分图书馆可订购全文】	5
	数字图书	超星数字图书较早的中文图书全文在线。【大部分单位订购全文】	2
	学科数据库	各专业学科相关网络数据库。【检索免费】	7.3
	专利数据库	各国专利局网站,检索下载专利文献全文。【免费】	4
	标准数据库	各国机构网站,专业网站。【免费】	5.6
特色检索工具与数据库	NIST 化学手册	检索已知化合物的谱图与热动力学数据。【免费】	2.6
	Reaxys 数据库	结构式、化学反应式检索。【免费】	2.6
	溶剂数据库	SOLV-DB 提供各类溶剂理化数据、毒性与环境参数。【免费】	9
	OA 免费资源	OpenAccess 资源:DOAJ;Highwire;Socolar。【免费】	3.7
	政府网站	各国政府网站(如 www. science. gov)。【免费检索】	6
	试剂仪器网站	Sigma-Aldrich 查阅化合物相关数据。【免费】	7

收录多种学科专业（包括化学化工类）或多种形式的文献源；专业数据库主要收录化学化工专业或某一种形式的文献源；特色数据库主要包括特定检索的内容。

另外，还有一些重要的检索工具，但是目前国内尚未大量使用，如：

(1) Scopus（斯高帕斯）　是 Elsevier 旗下的检索工具。Elsevier（爱思唯尔）公司集团(包括 Pergamon、Academic Press）是世界上最大的科技出版集团。Elsevier 旗下有 Sci-

enceDirect、Scopus、Scirus、Embase、EngineeringVillage、Compendex、Cell Press 等多个检索工具或数据库。Scopus 收录了来自 5000 多个出版商的 2 万多种科技与医学期刊，以及会议录、专利、科学网页。可直接链接到全文、图书馆资源。Scopus 比 Google 容易使用，针对的是科研人员信息的需求。目前，该检索工具的订购单位较少。

（2）Socolar　是中国教育图书进出口公司建设的 OA 资源（Open Access）一站式服务平台，收录重要的 OA 资源检索及全文链接服务（www. socolar. com），该平台是国内首个综合性的开放式获取资源的平台。Socolar 的宗旨是全面揭示全球范围内的 OA 资源，其搜索引擎强大而高效，可以让用户方便快捷地在学科庞杂和数以万计的文献中找到所需要的资料。Socolar 支持各种搜索方式。

（3）期刊数据库　目前，国内外绝大多数高水平期刊都有独立的数据库网站，读者可以直接从相关网站浏览近期与以往发表的论文及摘要信息。如：Nature（《自然》）、Science（《科学》）、《中国科学》、《科学通报》、《化学进展》等。这些主页通过搜索引擎就可以检索到网址。

其他数据库资源请参阅“清华大学学术资源门户”（http：//lib. tsinghua. edu. cn/dra/）（图 9-1）。

图 9-1　清华大学学术资源门户

9.2　综合搜索引擎的使用

搜索引擎是在线检索工具的典型代表。通过搜索引擎搜索信息方便快捷，具有传统检索工具不可比拟的优势。检索中文信息的典型搜索引擎是百度、搜狗（www. sogou. com）；检索外文（尤其是英文）信息的典型搜索引擎是 Google（谷歌）、Bing（必应）、Yahoo（雅虎）等。

9.2.1　搜索引擎主要功能的利用

目前，许多综合网站与搜索引擎网站功能不断增加。

（1）百度学术搜索（xueshu. baidu. com/）　提供海量中英文文献检索的学术资源搜索平台，2014 年上线。涵盖了各类学术期刊、会议论文。可检索到收费和免费的学术论文，并可通过时间、标题、关键字、摘要、作者、出版物、文献类型、被引用次数等细化指标提高检索的精准性。百度学术搜索无广告，页面简洁大方（图 9-2）。

图 9-2　百度学术搜索

（2）谷歌学术搜索（scholar. google. com）　化学化工及相关专业工作者可以利用 Google 进行专业知识与资源、图书的检索，可以查阅中英文对照字典以帮助阅读英文文献。Google 学术搜索提供广泛搜索学术文献的简便方法，可以从一个位置搜索众多学科和资料来源：来自学术著作出版商、专业性社团、预印本、各大学及其他学术

组织同行评论的文章、论文、图书、摘要和文章。

值得一提的是：Google 搜索因种种原因，包括中国大陆等部分国家或地区难以使用。部分用户使用类似网站进行 Google 学术搜索，可参见百度经验。

（3）必应搜索（cn. bing. com）　必应（Bing）是微软公司于 2009 年推出的全新搜索引擎服务。对我国用户来说，在检索外文文献时，Bing（必应）是替代 Google 的重要工具。

另外，Academic Search（微软学术搜索引擎）（http：//libra. msra. cn/；http：//academic. research. microsoft. com/），包括个人资料页、可视化搜索、会议征文、学科趋势、用户编辑等。

9.2.2　中英文关键词的筛选与优化

许多用户虽然经常使用搜索引擎，了解搜索引擎的特点。但是要注意一些问题：①习惯一种检索模式，就会忽略更好的检索模式；②了解已有检索功能，容易忘记开发更新的检索功能。如：大家都知道 Google 有学术搜索，以为百度没有学术搜索，事实上，2014 年就出现了百度学术搜索。

另外，检索一个课题资料时，初次使用的主题词与关键词，并不一定是最合适的词汇，需要阅读百科或相关原文，经过筛选与优化，找到更合适的词汇或词汇组合，这样才能精准（或大范围）找到原始文献。

9.2.3　搜索语法与技巧

使用以上通用搜索引擎或专业搜索引擎时，由于搜索引擎覆盖的范围越来越大，为了得到更准确的内容，必须使用一些技巧，明确搜索目标，选择合适的搜索引擎。如果主题范围狭小，可简单地使用 2～3 个检索词。检索词之间使用一定的语法，可以提高搜索的精确度。一般而言，不同的搜索引擎都有一些语法是通用的，如布尔逻辑运算符“与”（“and”、“＋”或“&”）、“或”（“or”、“;”）、“非”（“not”、“－”）。使用引号组合关键词，可以通过搜索引擎将关键词或关键词的组合作为一个整体在其数据库中进行搜索。当组合操作时，布尔逻辑操作符优先级不同，and 和 not 命令通常在 or 命令前执行。可通过括号“（”和“）”来改变顺序。

9.3　化学化工专业检索工具

专门检索化学化工相关信息的数据库主要有 CA（印刷版、网络版）、Pubmed 与 Pubchem（网络版）。

9.3.1　CA——网络数据库

作为最全的化学检索工具，CA 网络版（SciFinder Scholar Web 版）数据库具有先进的检索方式，使用方便，检索内容全面，已成为化学、生命和医学科学研究领域中不可或缺的参考和研究工具。具体内容详见第 6 章。

9.3.2　PubMed——生物医学相关免费检索工具

PubMed 是一个免费搜索引擎，由美国国立医学图书馆（NLM）所属国家生物技术信息中心（NCBI）开发，提供生物医学方面的论文搜索，其数据库来源为 MEDLINE。其核心主题为医学，同时包含了大量化学相关信息。PubMed 界面提供与综合分子生物学数据库的链接，其内容包括：DNA 与蛋白质序列、基因图数据、3D 蛋白构象、人类孟德尔遗传在线，也包含与提供期刊全文出版商网址的链接等。具体内容详见第 8 章。

9.3.3　PubChem——生物医学相关免费检索工具

PubChem 是专门针对查询小分子结构与生物活性的搜索引擎，是化学界学者熟知的美

国化学学会（ACS）化学文摘服务搜索系统（www.cas.org）的最大竞争对手。PubChem是一个化学结构相似性的快速搜寻工具。还提供多种符合化学研究者需求的贴心搜索功能，还可在线绘制结构或片段来进行搜寻。具体内容详见第8章。

9.4 综合数据库及使用方法

国际科学研究领域，检索高水平学术论文的检索工具为ISI出版的SCI数据库，目前已经升级为网络版，即Web of Science。在工程技术领域，检索高水平成果的检索工具为EI数据库。国内检索期刊论文、学位论文等学术成果的数据库为《中国知网》。

9.4.1 ISI数据库——Web of Science

美国科学信息研究所（ISI）出版的科学引文索引（Science Citation Index，SCI），收录国际高水平期刊论文及摘要。引文（Citation）知识参见第5章。

1955年Eugene Garfield博士首先提出了将引文索引应用于科研检索，随后创建了美国科技信息研究所（ISI），并在1963年出版了科学引文索引SCI，之后又出版了SSCI、A&HCI等。1997年诞生网络版Web of Science数据库。2008年Web of Science又整合了原来的ISI Proceedings（国际会议录，其中自然科学版即三大检索之一的CPCI-S）并扩充了会议录的引文索引功能，从而使其覆盖面进一步扩大，涉及自然科学、社会科学和艺术与人文领域的信息，包括来自全世界9000多种最负盛名的高影响力研究期刊及12000多种学术会议，并实现收录内容的科学分析。

ISI Web of Science数据库（www.isiknowledge.com）是Thomson Reuters（汤森路透）集团开发的ISI Web of Knowledge平台的一个数据库。收录各学科领域中最权威的期刊论文的编目信息、作者、摘要、参考文献等资料，是研究信息领域内最全面综合的多学科文献资料数据库。

（1）Web of Science数据库简介　Web of Science数据库功能强大，主要包括如下几种数据库。

① Web of Science核心数据库　包括Science Citation Index Expanded（SCIE）、Social Sciences Citation Index（SSCI）、Arts & Humanities CitationIndex（A&HCI）、Conference Proceedings Citation Index（CPCI-S）、Current Chemical Reactions（收录了1993年以来新的化学物质数据）、Index Chemicus（化学反应数据）。还有其他数据库，如：BIOSIS Previews（生命科学与生物医学研究工具）、KCI（朝鲜语期刊数据库）、MEDLINE（美国国家医学图书馆主要生命科学数据库）、SciELO Citation Index。

② InCites（科研评估工具数据库）　InCites是Thomson Reuters公司基于Web of Science Core Collection引文数据建立的综合性科研评估工具。主要功能包括：实时跟踪机构的研究产出和影响力，将本机构的研究绩效与其他机构及全球平均水平进行对比，了解和发掘机构内具有学术影响力或具有发展潜力的研究人员，建立评价基准，准确合理地分配研究基金，了解本机构的合作研究状况。

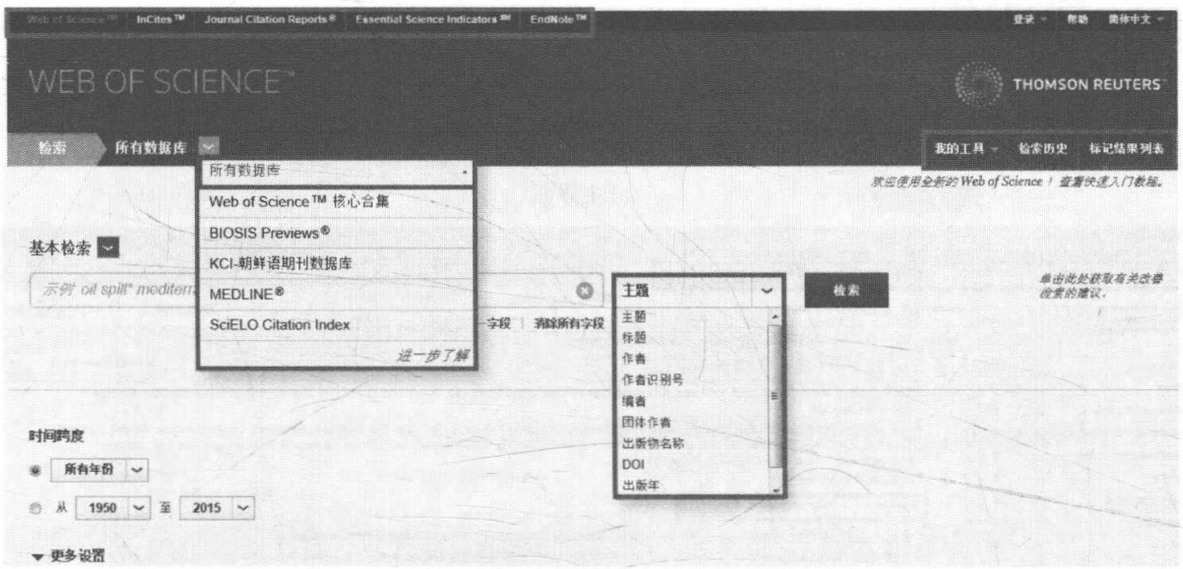
③ ESI（基本科学指标数据库）　Essential Science Indicators是在汇集和分析Web of Science（SCI/SSCI）所收录的学术文献及其所引用的参考文献的基础上建立起来的一个深层分析评价数据库。可以系统地、有针对性地分析国际科技文献，提供对科学家、研究机构、国家/地区和期刊论文排名的数据；探究科研绩效统计和科学/学科发展趋势的数据；确定学科领域的科研成果和影响力；分析评价员工、合作者、评审人和竞争对手的能力。

④ JCR（期刊引用报告）　Journal Citation Reports是重要的期刊评价工具，通过对科

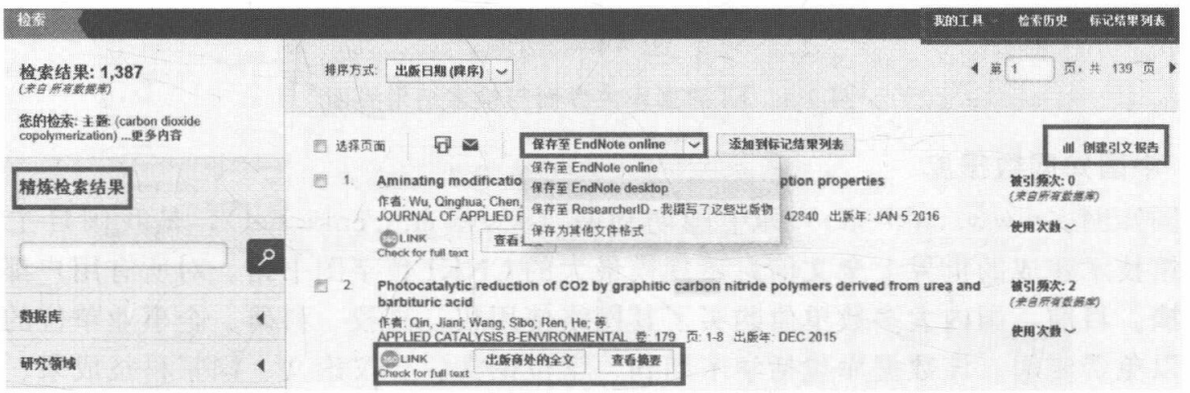
学引文索引（SCI）和社会科学引文索引（SSCI）的数据进行分析，帮助用户评价、比较各学科期刊的影响力。JCR 分为 Science Edition 和 Social Science Edition 两辑。

⑤ EndNote　读者创建 EndNote 图书馆后，可以直接在 Web of Science 上将参考文献添加进 EndNote 图书馆，可以创建格式符合各种出版要求的参考文献列表，随时随地访问自己的 EndNote 图书馆。

（2）Web of Science 检索指南　Web of Science 数据库检索界面可以选择中文版，界面左上方的菜单显示数据库的应用［图 9-3(a)］，Web of Science 数据库页面提供了基本检索菜单，输入检索内容，所得检索结果如图 9-3(b) 所示，对于检索结果也提供了进一步分析功能，包括精炼检索结果、创建引文报告等，相应检索结果的阅读下载也提供了链接，可以保存在 EndNote 中，注册后也可以保存检索历史。



(a) Web of Science数据库主界面



(b) 检索结果界面

图 9-3　Web of Science 数据库

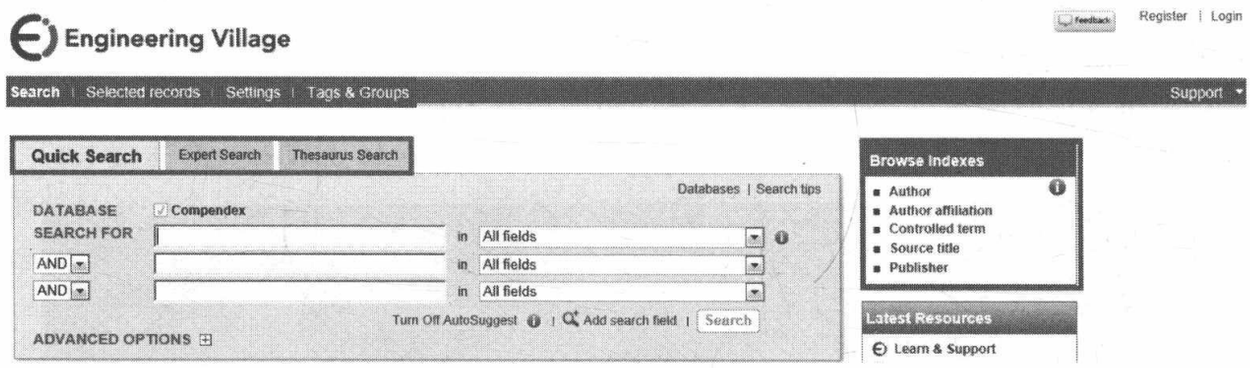
9.4.2　EI 数据库

美国《工程索引》（The Engineering Index，EI）数据库是工程技术领域的综合性文摘数据库，由美国工程信息公司（Engineering Information Inc.）编辑出版，涵盖了工程的各个分支学科，数据库资料来自 5100 多种期刊、行业杂志、会议论文集和技术报告，可检索到 1969 年至今的数据。现已成为世界级的权威检索体系，并成为国际通用的文献统计源。相关基础知识参见第 5 章。

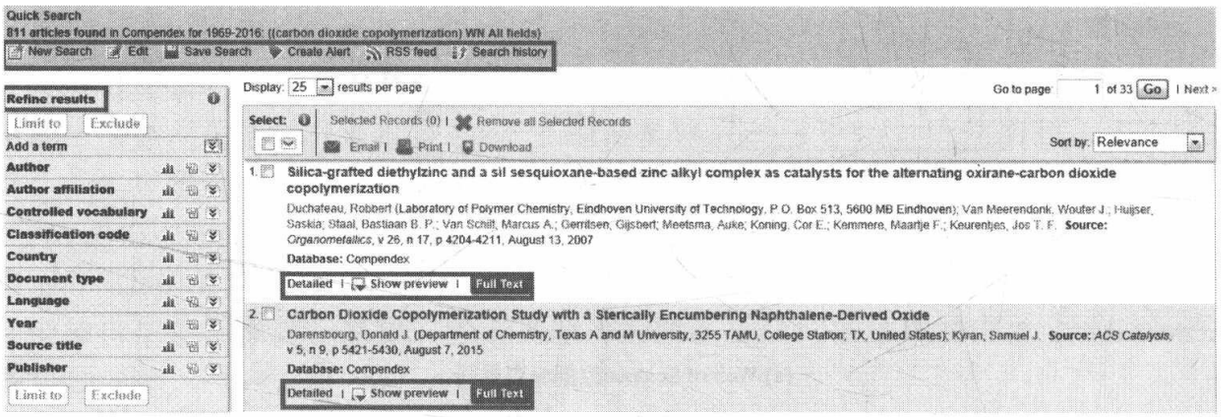
Engineering Village（www. elsevier. com/solutions/engineering-village）即“工程村”网络版，是一个综合工程信息检索平台，有多个数据库支持。Engineering Village 检索平台

界面提供了三种检索方式（Quick Search、Expert Search 和 Thesaurus Search）[图 9-4(a)]，所得检索结果可以进一步精炼和分析（Refine results），检索结果的查看包括详细信息（Detailed）、摘要（Show Preview）和全文（Full Text）链接 [图 9-4(b)]。

EI Compendex Web 是 EI 网络版的核心数据库，收录文献的内容涉及工程技术的所有学科，其中化工和工艺类的期刊文献最多，约占 15%。国内部分高校与科研院所可免费检索。



(a) 主界面



(b) 检索结果界面

图 9-4 EI 数据库主界面与检索结果界面

9.4.3 中国知网数据库

中国知网（www. cnki. net）即中国期刊网（www. edu. cnki. net），是我国自主开发数字图书馆技术建成的世界上全文信息量规模最大的 CNKI 数字图书馆。对所有用户都可免费阅读文摘。目前，国内大多数单位购买了其网络使用权，高校、科研、企事业单位的科研工作者可以免费使用。该数据库包括学术期刊、学位论文、会议论文、国家科技成果、专利全文等多个数据库，是目前检索中文成果的最权威数据库。方法参见第 3 章。

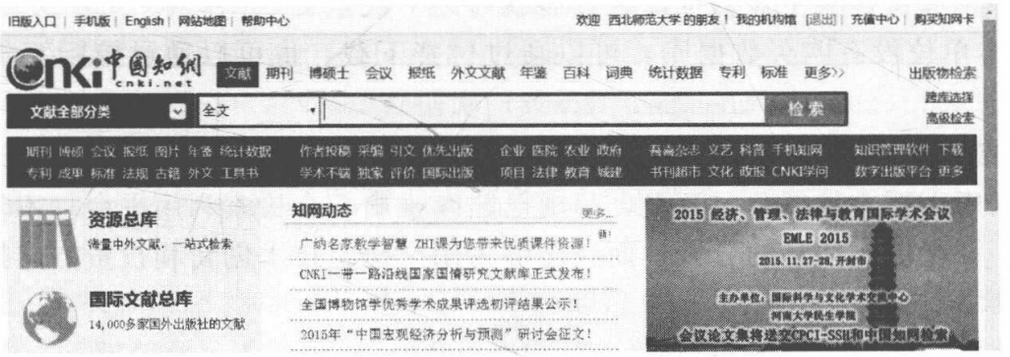
这里以“壳聚糖”为例，在 CNKI 数据库中检索有关“壳聚糖抗菌材料”的相关成果。

① 首先进入中国知网（www. cnki. net）网页 [图 9-5(a)]，可看到中国知网包含期刊、博硕士、会议、专利、标准、工具书等诸多文献源，还有功能强大的 CNKI 词典。

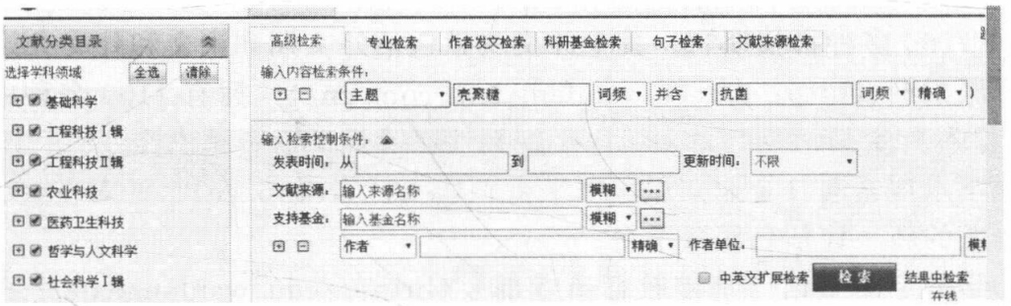
② 点击“高级检索”，进入高级检索界面 [图 9-5(b)]，在主题词中输入“壳聚糖”与“抗菌”，然后筛选领域、年代、作者等（默认不筛选），得到 1671 条记录 [图 9-5(c)]。

③ 在“壳聚糖”与“抗菌”检索结果 [图 9-5(c)] 中，可以继续筛选，缩小领域、时间等范围，也可以从结果中继续添加检索词，缩小检索范围。从检索结果中，可以看到标题、作者、出版社名称、年代等信息。

④ 从检索结果中，选择标题为“纤维素/壳聚糖共混透明膜的制备及阻隔抗菌性能研究”的结果，点击标题后就可以看到摘要信息 [图 9-5(d)]，该网页提供了 CAJ 与 PDF 格

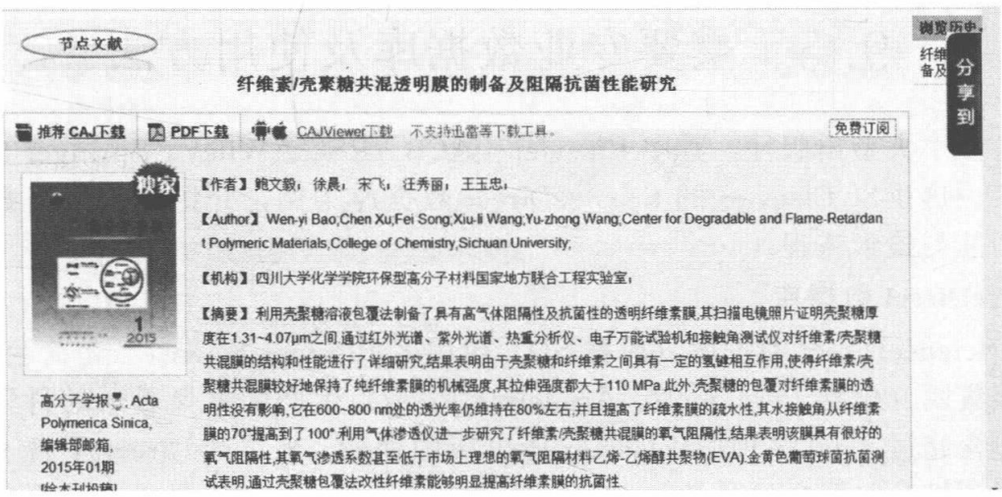


(a)



(b)

(c)



(d)

图 9-5　中国知网（CNKI）数据库检索流程

式文件，如果本单位购买了该数据库，读者就可以下载全文。

⑤ 如果本单位没有购买数据库，可以通过付费下载，也可以通过馆际互借等手段免费获得全文。

9.4.4 万方数据库

万方数据库由万方数据公司开发，目前已陆续推出5个检索利用平台，不仅提供用户对信息的检索、深度层次信息的分析，而且能够为用户确定技术创新和投资方向提供决策。包括如下几种网络数据库：

（1）万方数据知识服务平台（www.wanfangdata.com.cn） 涵盖期刊、学位论文、学术会议论文、专利、标准、图书等资源。其收录期刊包括了理、工、农、医、人文五大类70多个类目共7600多种科技期刊。其中外文文献包括外文期刊论文和外文会议论文。

（2）万方医学网（http://med.wanfangdata.com.cn/） 拥有1100余种中文生物医学期刊，2.6万余种外文医学期刊，大量医学视频等高品质医学资源。

（3）中国学术搜索网（企业知识服务平台）（www.sciinfo.cn） 针对企业、政府、科研院所等单位研发的新一代信息服务平台。

（4）中小学数字图书馆（基础教育事业部）（http://edu.wanfangdata.com.cn） 专门针对中小学教学应用的数字图书馆产品，旨在为全国中小学教师、教研人员和学生提供“一站式”教育教学资源服务。

（5）地球与环境产品中心（万方视频）（http://video.wanfangdata.com.cn/）：“Earthinsight发现·地球”的定位是集聚国内外优质的地球与环境科学资源的学科纵深型知识服务平台，平台包含天文学、地球科学、环境科学三大学科。

9.4.5 维普网络数据库

维普数据库是重庆维普资讯有限公司的产品，包括《中文科技期刊数据库》《中文科技期刊数据库（引文版）》《中文科技期刊评价报告》《外文科技期刊数据库》、中国基础教育信息服务平台、维普-Google学术搜索平台、《中国科学指标数据库》《中国科技经济新闻数据库》、维普考试服务平台、图书馆学科服务平台、文献共享服务平台、维普期刊资源整合服务平台、维普机构知识服务管理系统、文献共享平台、维普论文检测系统等。维普公司收录有中文期刊1.2万多种、外文期刊6000余种、报纸1000余种，相应平台提供了信息的检索下载、深度分析和处理，已成为我国图书情报、教育机构、科研院所等系统必不可少的基本工具和获取资料的重要来源。

9.5 重要专业数据库及使用方法

国际上有多个大型出版社，其中Elsevier、ACS、RSC、Wiley、Springer出版社与化学化工密切相关。这里以Elsevier的ScienceDirect数据库为例，介绍典型网络数据库的检索界面有哪些功能与检索流程。

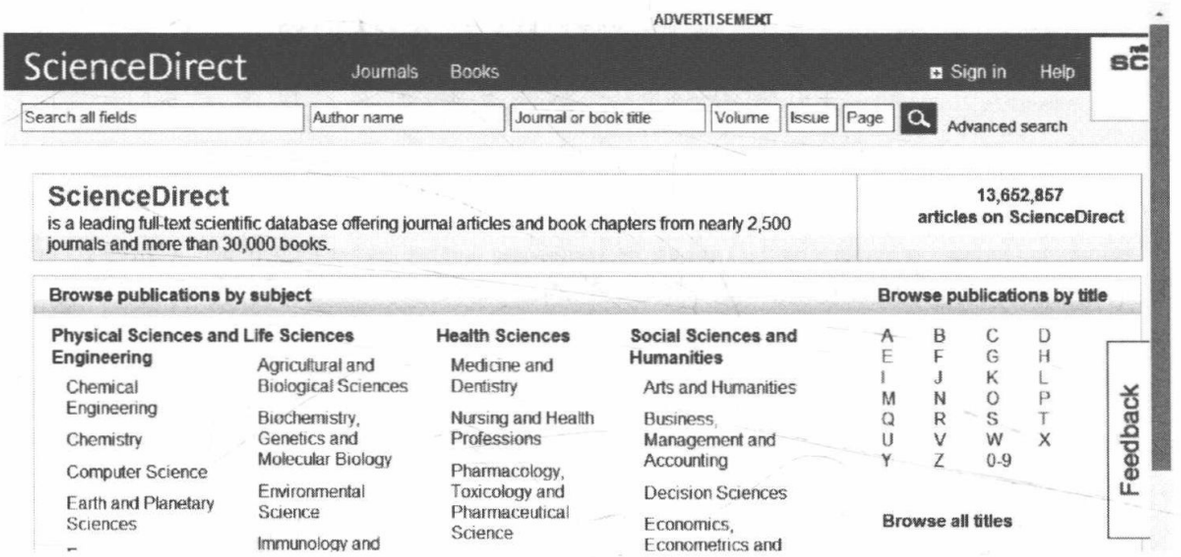
9.5.1 ScienceDirect数据库

Elsevier ScienceDirect数据库（简称SD，曾用名Elsevier Science）是荷兰Elsevier（爱思唯尔）出版集团（包括Pergamon、Academic Press）生产的世界著名的科学文献全文数据库之一，包含超过2500多种由Elsevier所出版的期刊。ScienceDirect平台上的资源主要分为四大学科领域，包括自然科学与工程、生命科学、医学/健康科学、社会科学与人文科学，收录超过全世界四分之一的相关文献，涵盖24个学科。目前许多高校与科研单位征订了该数据库。

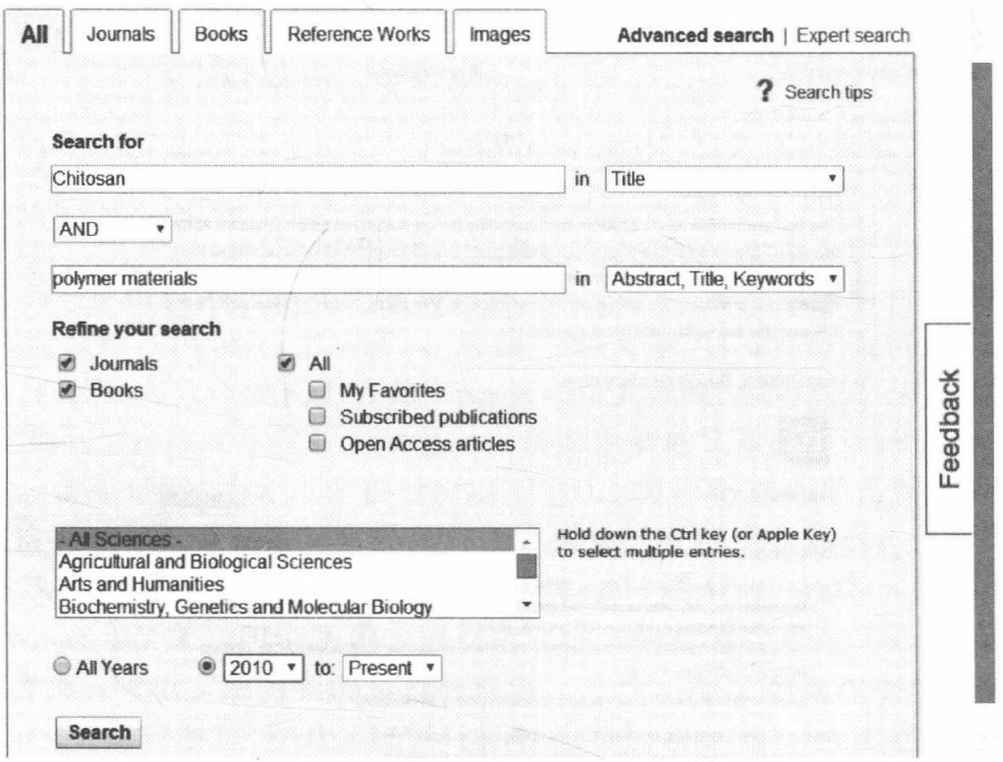
这里以 Chitosan（壳聚糖）为例，在 ScienceDirect 数据库中检索与壳聚糖相关研究的论文。使用的关键词为 Chitosan、polymermaterials。

（1）进入本单位的 ScienceDirect 数据库（www. sciencedirect. com）网页［图 9-6(a)］。可以看到，ScienceDirect 数据库主页有许多信息与链接。可以分领域逐步浏览，也可以通过期刊标题浏览。可以简单检索，也可以高级检索。如果单位征订了 Scopus，也可以使用 Scopus 检索。

（2）点击“Advanced Search”进入高级检索［图 9-6(b)］，选用 Chitosan（分类 Title)＋polymer materials（分类 Abstract、Title、Keywords），进一步筛选数据库（期刊＋图书）、年代（2010-present）。然后点击“Search”，得到检索结果［图 9-6(c)］，共有 200 条结果。

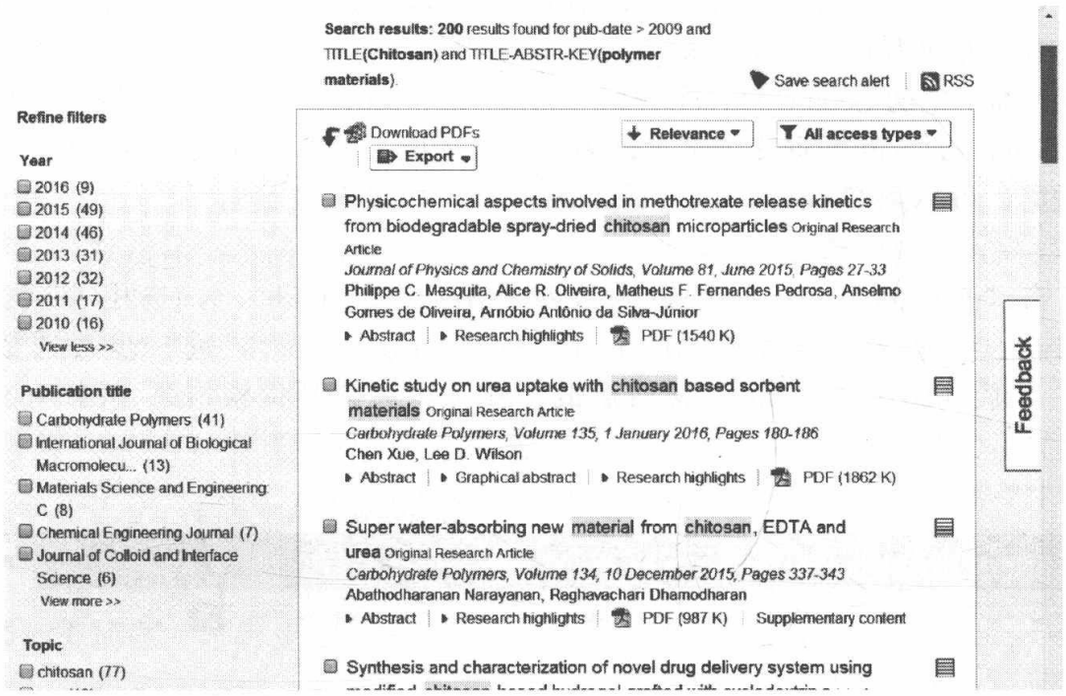


(a)

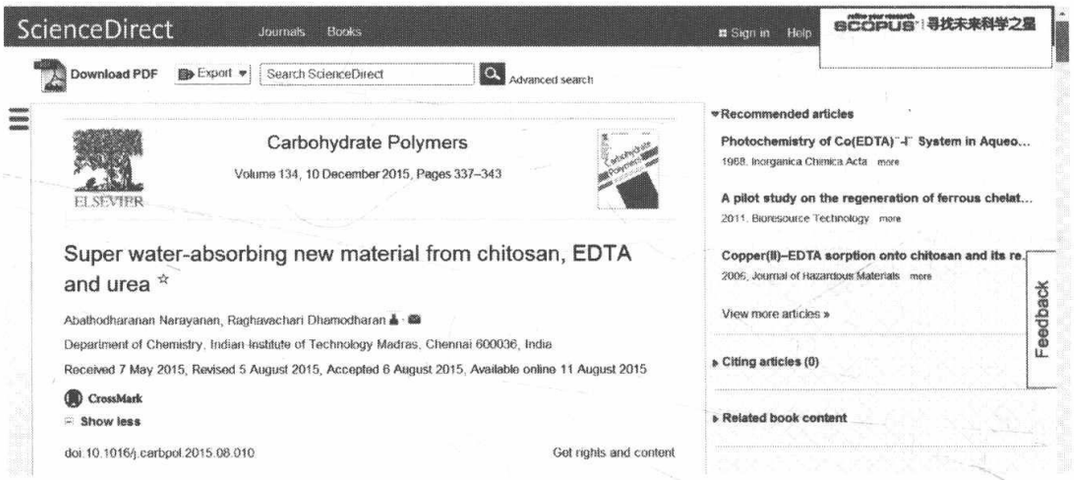


(b)

图 9-6



(c)



(d)

(e)

图 9-6 ScienceDirect 数据库中全文检索过程

（3）Advanced Search 检索“Chitosan＋polymer materials”结果界面中［图 9-6(c)］，可以看到有多个精选功能区，如：可以通过 Year（年代）、Publication Title（出版物名称）、Topic（主题）缩小范围，也可以按照 Relevance（相关度）、Date（发布时间）排列结果。每条结果显示“标题、期刊名称＋年、卷（期）页码”等信息。

（4）如果看到哪条信息有价值，可以下载 PDF 全文，也可以浏览摘要、图文摘要，这里点击第 3 条，标题为“Super water-absorbing new material from chitosan，EDTA and urea”进入该论文（发表在 Carbohydrate Polymers，Volume 134，10 December 2015，Pages 337-343）全文界面［图 9-6(d)］。通过滑动鼠标，就可以浏览全文。在页面顶部，可以发现数据库推荐的相关论文。在页面底端［图 9-6(e)］，可以下载 Supplementary data（补充材料），在 References（参考文献）中，部分参考文献可以全文打开或下载，拓展相关信息。

9.5.2　ACS 数据库——高水平论文数据库

ACS 数据库属于世界上最大的科技学会——美国化学学会（American Chemical Society），ACS 出版的化学及相关学科期刊具有很高的质量，其期刊被 ISI 的 Journal Citation Report（JCR）评为“化学领域中被引用次数最多的化学期刊”。每一种期刊都回溯到了期刊的创刊卷，最早的到 1879 年。ACS 出版的期刊内容涵盖了 24 个主要的化学研究领域，包括生化研究方法、药物化学、有机化学、科学训练、普通化学、环境化学、材料学、燃料与能源、植物学、毒物学、食品科学、药理与制药学、物理化学、环境工程学、工程化学、微生物应用生物科技、应用化学、分子生物化学、分析化学、聚合物、无机与原子能化学、资料系统电脑化学、学科应用和农业学。ACS 目前出版的期刊有 40 余种，其中多种期刊已成为相关领域的顶级期刊，例如：Journal of the American Chemical Society（化学综合方面）、Chemical Reviews（化学综述方面）、Analytical Chemistry（分析化学方面）、Inorganic Chemistry（无机化学方面）、Macromolecules（高分子化学方面）、Journal of Agricultural and Food Chemistry（农业和食品化学方面）、Industrial & Engineering Chemistry Research（化学工程方面）、Journal of Medicinal Chemistry（药用化学方面）等。另外，ACS Symposium Series 数据库还提供高质量化学化工类书籍。

这里简单介绍 ACS 出版物（http：//pubs. acs. org/）的浏览与检索功能。

（1）浏览功能　从 ACS 出版物的主页面，点击左边的或者上方的 ACS Journals 或 ACS Publications 标签（图 9-7），就能看到 ACS 的所有期刊名称，可浏览按照首字母依次排列的 ACS 的所有期刊。点击所需要查看的期刊名称（图 9-8），能看到该期刊刚接收文章（Just Accepted）、在线文章（Articles ASAP）、最新一期文章（Current Issue）或高阅读文章（Most Read）。同样，可以通过左上方的 Browse the Journal 菜单或者右下方的 Browse By Issue 实现相应期刊已出版文章内容的浏览。点击所需要的文章条目下的 Abstract，能看到该文章的摘要，点击 HTML 或 PDF 能分别以 HTML 或 PDF 两种形式查看全文。

（2）直接检索　ACS 数据库检索界面右上方提供了直接检索菜单，包括简单检索和高级检索。其中 Search 栏中输入关键词，可以在 Title（题名）、Author（作者）、Abstract（摘要）、Anywhere（全文）四个字段中进行论文的快速检索；通过 Advanced Search 菜单进入高级检索界面，可以实现内容的更精确检索。另外，ACS 数据库中期刊的界面右上方也提供 Citation（引用检索）、DOI（数字目标标识符）和 Subject（主题）三种检索方式，可以根据已知的检索内容信息，选择相应的检索菜单，准确检索。

（3）检索结果　ACS 数据库检索结果显示可以按照页面右上角的菜单排序（图 9-9），包括相关性、出版时间、类型、题目、作者等。对于检索结果也提供了分析统计（Search

Filters)，如页面左边，从出版形式、内容、期刊种类、作者、出版年份等方面做了分类，便于读者了解检索结果。同时也提供了检索结果的进一步限定（Search Criteria），精简检索内容。

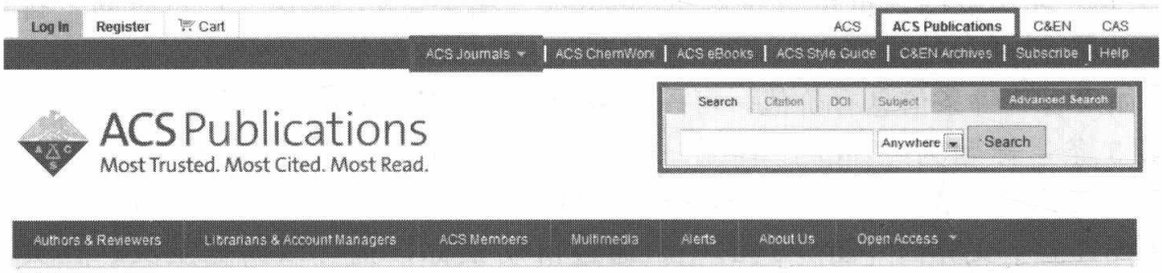


图 9-7 ACS 数据库主界面

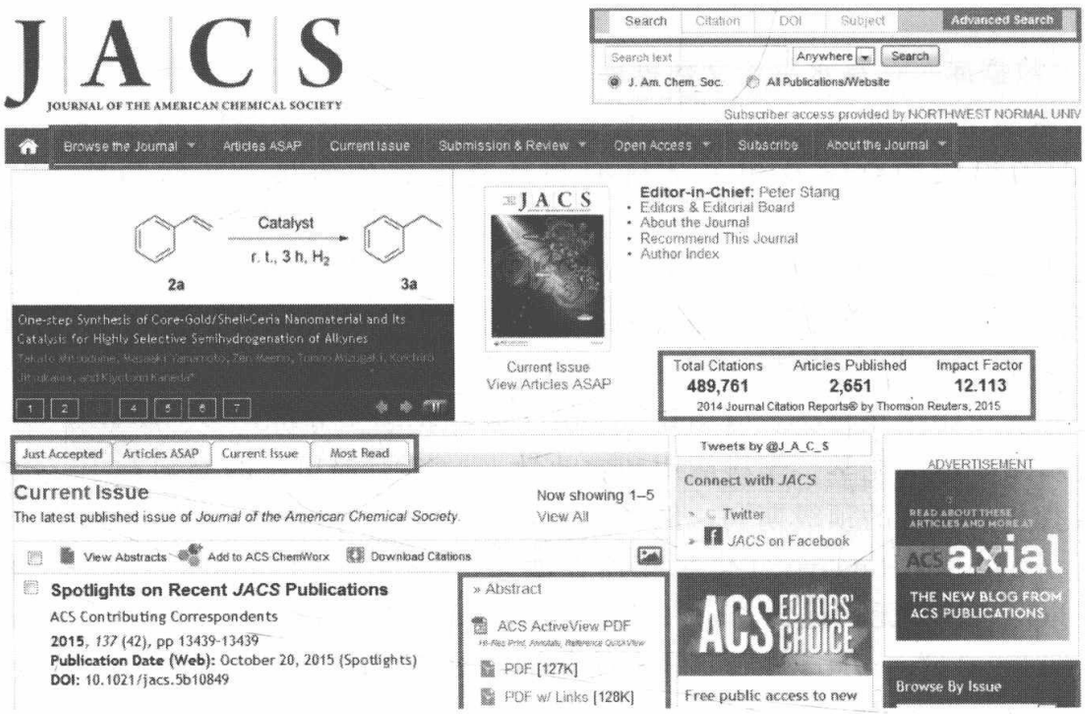


图 9-8 Journal of the American Chemical Society 期刊界面

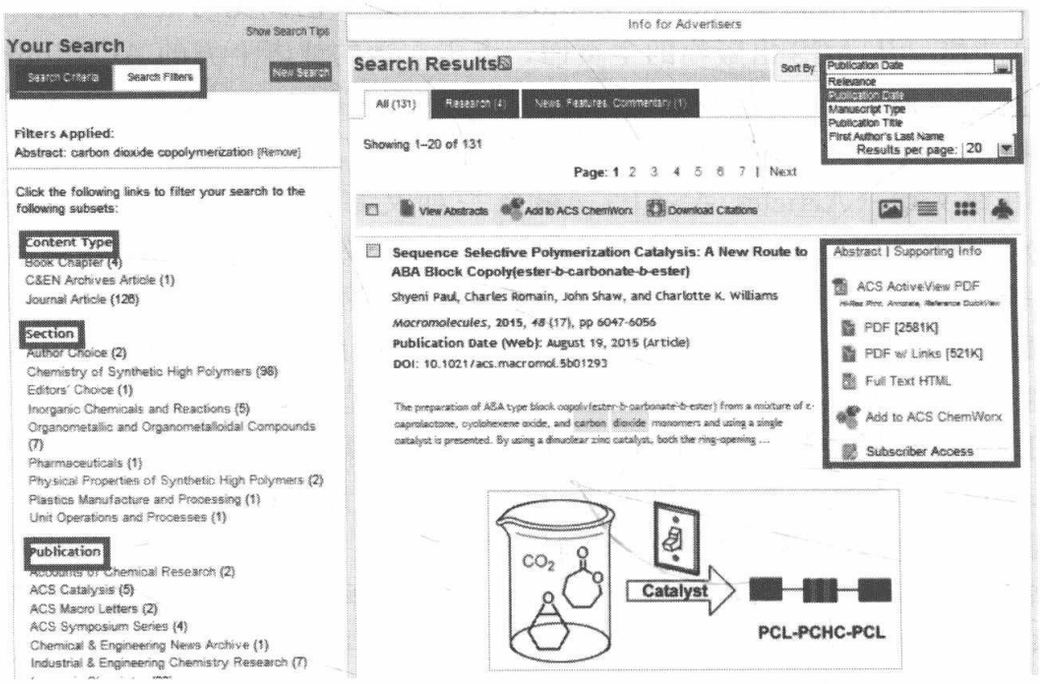


图 9-9 Journal of the American Chemical Society 期刊检索界面

对于期刊全文的下载和阅读，ACS 数据库除提供 HTML 或 PDF 两种格式外，在页面右下角也提供了 Active View PDF 阅览模式，专为 2010 年至今期刊而设计的 Active View PDF 阅览模式可以为用户收藏的期刊文章加上高亮和批注、通过 SciFinder 的 Reference Quick View 视窗查看引文来源的摘要、并将带有标记的文章自动添加到 ChemWorx 收藏中。

9.5.3　RSC 数据库

英国皇家化学学会（Royal Society of Chemistry，RSC），是一个国际权威的学术机构，是化学信息的一个主要传播机构和出版商。RSC Publishing 是 RSC 旗下的非营利出版单位，出版了许多在化学领域具有相当权威及核心的期刊、资料库及书籍。

RSC 出版的期刊均被 SCI 收录，2011 年平均影响因子为 5.64，其中高于 5.0 的期刊达到 43%。涉及的领域包括化学化工、食品加工、制药、能源与环境、生命科学、材料等领域。RSC 目前提供 60 余种期刊、年报等定期出版物，具有代表性的刊物包括：综合化学（Chemical Communications、Chemical Science、Chemical Society Reviews）、食品科学（Food & Function、Analytical Methods、Soft Matters）、制药与生物化学（MedChemComm、Natural Product Report、Molecular Biosystems）、材料科学（Biomaterials Science、CrystEngComm、Journal of Materials Chemistry）、生命科学（Integrative Biology、Photochemical & Photobiological Sciences、Metallomics）等。

RSC 数据库页面链接功能强大，提供了 RSC 出版品、会员专区、图书信息中心、学术研讨信息等。RSC 数据库同样也可以实施出版物浏览和内容检索。其中浏览功能可以点击页面上方的 Journals、Books 等菜单，出版物按照英文名称首字母排序，可以快速找到相应期刊、图书等。同时，在页面上方也提供了 Search 和 Advanced Search 菜单，可以通过全文、题目、作者、DOI 号和 ISBN 号实施检索。

对于检索结果，RSC 数据库也提供了分析统计、存储下载和跟踪功能。首先可以按照出版形式、作者、出版时间、期刊种类等对于检索结果实施分类；其次，检索结果可以选择使用 PDF 或 HTML 的档案格式阅读或下载；最后，如果在 RSC 页面注册后，可以利用页面右边的菜单将检索结果和检索历史保存在自己账户中，或者设置检索内容的提醒功能（Email alerts for this search），便于文章的跟踪。

RSC 数据库检索功能与 ScienceDirect 和 ACS 相似。

9.5.4　Wiley Online Library

约翰威立父子出版公司（John Wiley & Sons Inc.）创立于 1807 年，是一家全球性的印刷和电子产品出版商，拥有世界第二大期刊出版商的美誉，以质量和学术地位见长。

John Wiley 也是全球最主要的服务于自然科学、工程技术、生命科学和医学科研人员的出版商，出版期刊、百科全书（工具书）、实验室操作指南以及其他参考资料。目前出版超过 1500 种期刊，拥有众多国际权威学会会刊和推荐出版物，例如：德国《应用化学》（Angewandte Chemie）、《先进材料》（Advanced Materials）、《高级合成和催化》（Advanced Synthesis & Catalysis）等，大多数被 SCI、EI 和 SSCI 收录。

John Wiley 也是最早进入电子出版物领域的出版商，在 1997 年将期刊电子化。Wiley Online Library（http：//onlinelibrary. wiley. com/）提供了在线检索出版期刊、图书等，出版物的浏览可以按照英文名或主题内容查找，同时系统也提供了简单检索、高级检索以及检索结果的后处理等功能。

9.5.5　SpringerLink 期刊全文数据库

SpringerLink 期刊全文数据库（www. springerlink. com）是德国施普林格出版集团（Springer-Verlag）研发的在线全文电子期刊数据库。收录多学科全文电子期刊与图书。

9.6 特色网络数据库与在线检索工具

特色网络数据库主要集中在特定方面信息内容的收录，读者可以根据自己的检索目的选择查询。

9.6.1 NIST 化学手册

NIST WebBook（http://webbook.nist.gov/chemistry）是对美国国家标准与技术研究所（NIST）数据汇集进行访问的一个入口。可在线访问 NIST 标准参考数据计划所编辑和发布的全部数据。现阶段 ChemistryWebBook 提供免费查找。

内容包括 4000 多种有机和无机化合物的热化学数据，1300 多个反应的反应热，5000 多种化合物的红外谱，8000 多种化合物的质谱，12000 多种化合物的离子能量数据。可通过名称、分子式、CAS 登记号、分子量、电离能或光子亲和力来查找化合物的各类数据。

9.6.2 Reaxys 数据库

Reaxys 数据库是一个全新的辅助化学研发的在线解决方案，它将著名的 CrossFireBeilstein、Gmelin、Patent Chemistry 数据库进行整合。Beilstein 是世界上最大的关于有机化学的数据库，能帮助有机化学研究人员形成新思路、设计合成路径（包括起始原料和中间体）、确定生物活性和物理性质、了解外界环境对化合物的影响等。Gmelin 是关于无机和金属有机化合物的结构及相关化学、物理信息的数据库，可以用结构、亚结构和反应式检索，记录包含 800 多种化学和物理数据字段的内容，包括电、磁、热、晶体以及生理学数据。

9.6.3 溶剂数据库

溶剂数据库 SOLV-DB（solvdb.ncms.org/solvdb.htm）提供各类溶剂相关信息（包括理化数据、毒性与环境参数）。可通过名称、CAS 登记号、分子式等进行检索（图 9-10）。如：可以检索溶剂 1,4-Dioxane（1,4-二氧六环或 1,4-二噁烷）的诸多信息。

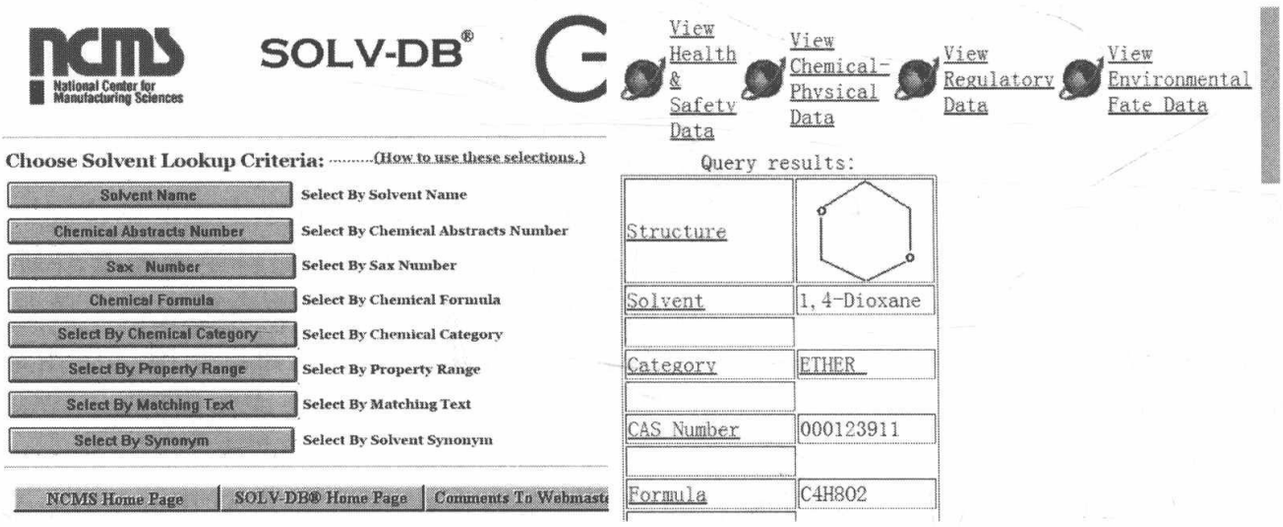


图 9-10 通过溶剂数据库 SOLV-DB 检索溶剂参数

9.7 网络数据库与在线检索工具使用策略

基于目前大量网络数据库和在线检索工具在信息获取中的重要性，实际使用过程中

应熟悉其收录内容和应用特点，根据自己的检索目的和检索环境，综合考虑，有效利用。

9.7.1　网络数据库及在线检索工具选择

由于目前各个领域的网络数据库和在线检索工具逐步增多，为了提高检索效率，对于检索平台的选择相当重要。相比较，专业数据库的检索范围仅限于本数据库收录内容，而综合数据库或者在线检索工具检索内容比较全面。选择检索平台还要考虑读者自己的检索内容、目的和拥有的检索环境。

首先是检索内容的熟悉程度，如果不熟悉，应该先考虑通过网络常用的百度、谷歌等搜索引擎检索、了解检索内容，包括其名称、学科分类、应用等，为后面的检索做准备。其次是检索目的，要明确检索是为了全面了解，还是追踪最新进展，或是调研其在某个领域的应用等。明确检索目的，再根据检索内容，结合网络数据库及在线检索工具的收录内容和特点，确定获取相应检索内容应该选择的检索平台。最后，由于很多网络数据库全文的获取是收费的，因此，若以详细了解和全文下载为目的，应该实际考虑自己所处的检索环境。付费的数据库可以看到相应信息的摘要。

9.7.2　检索方法选择

确定选择相应的网络数据库及在线检索工具后，具体检索的实施应该考虑检索方法，从而提高检索效率。目前专业数据库和综合数据库都提供了收录内容的浏览功能及检索平台，首先要了解两种方法的优缺点。

（1）浏览功能　网络文献数据库一般都具有图书、期刊等信息资源的浏览功能，主要是基于数据库对于所收录信息资源的分类。为了有效介绍收录信息资源，数据库一般都按照一定的方式分类，可以是学科分类，或者信息资源英文名称首字母排序分类等。读者可以根据自己的兴趣，按照数据库的分类，检索浏览相应的信息资源。浏览功能有利于读者了解该数据库收录的信息资源，能够定期、全面浏览专题资源，系统掌握相应信息资源。但是，基于学科交叉和跨学科应用等方面的研究内容难以全面检索。

（2）专题检索　主要是利用数据库的检索平台，通过相应检索界面的功能菜单实现，是数据库目前主要的检索方式。数据库检索平台一般提供简单检索（Search）和高级检索（Advanced Search），能够实施关键词、作者、题目、期刊名等检索。优点在于操作简单，检索速度快，但是要求读者明确检索内容。

9.7.3　检索结果处理与利用

目前网络数据库和在线检索工具都提供了检索结果的处理功能，包括检索结果的精炼、分析和统计、下载、保存和追踪等，有效利用检索结果的处理功能将全面了解检索信息。对于检索结果的精炼可以分为检索结果的扩大和缩小，其中扩大功能是为了更全面了解检索内容，包括交叉学科领域；缩小功能是为了更准确了解检索内容，直接找到所需信息。检索结果的分析和统计，是为了更深入了解检索结果，可以实施检索结果的分类，按照不同的分类，明确检索内容的研究方向、发展过程、应用领域、研究者及单位分布等，便于读者深入掌握检索内容的相关信息。

网络数据库和在线检索工具可以提供检索结果的下载和保存，全文的下载可以是直接下载也可以是通过文献管理软件实施。但是要注意，一般专业数据库直接提供全文下载，而综合数据库和在线检索工具主要提供全文下载链接。对于检索历史的保存和检索结果的追踪，一般需要读者在数据库页面注册建立账号，通过账号管理和电子邮箱提醒获取。

练 习 题

1. 说明化学化工相关网络数据库主要类型。
2. 介绍几种化学化工专业的重要网络数据库及其特点。
3. Elsevier（爱思唯尔）出版集团有哪些检索工具？
4. 分析 Web of Science 数据库的用途。
5. EI 数据库有何特点？
6. 简单介绍几种有机化学专业的特色在线检索工具。

实践练习题

1. 选择本单位订购的化学化工相关网络数据库，通过检索实践，说明该数据库可以检索哪些文献源。

2. 以“角蛋白”为检索关键词，通过在线检索工具检索近期有关“角蛋白材料”的研究成果，并记录检索过程。

3. 使用 Web of Science 数据库或 ACS 或 RSC 数据库，检索近 5 年来“二氧化碳聚合”相关研究成果。

第 10 章　化学化工信息检索与利用——策略与技巧

导　语

本章从准备从事科研活动的学生（本科生、研究生）角度，以撰写一篇综述论文为目标，讨论如何有效地检索与收集化学化工信息，得到的信息如何整理、如何阅读，以及如何总结并撰写论文、提出科研设想。

关键词

检索策略；综合；信息利用；检索实例。

对于化学化工及其相关领域（如生物医学、材料科学、环境科学等）从事科研、教学及生产的同行来说，通过阅读本书介绍的检索方法可以了解学科之间的关联性，也可以快速通过 Internet 追踪最新研究成果。

前面章节分门别类介绍了几种重要化学化工信息源的特点及其检索方法，其中，第 2～4 章介绍了如何检索与利用科技图书、期刊论文、专利文献。后面两章将介绍如何撰写论文、如何使用软件。

对于准备从事或刚步入科学研究工作行列的大学生（或研究生）来说，在进行学年论文、毕业论文或学位论文的研究和撰写过程中，包含着典型的化学信息检索与利用过程。由于时间的紧迫性（学制要求），如何既快速，又较为全面地检索与获取所需文献资料显得十分重要。因此，只有学会化学信息检索与利用的策略与技巧，才能事半功倍。本章从科技工作者的角度介绍化学化工信息检索、收集、阅读、利用的一些策略与技巧。

10.1　化学化工信息检索与收集策略

对于从事科学研究的工作者来说，“科学无国界”就是指要从全世界范围获得信息，才有可能不落后。因此，查阅需要的外文文献（尤其是英文文献）必不可少。那么，在浩瀚的

信息源中，如何快速、精确地检索对自己工作有帮助的信息呢？

简单流程如图 10-1 所示。①根据目标确定检索策略与途径。②了解当前可以利用的检索工具或信息源。③由简单到专业地进行文献检索与下载，阅读与整理。一个课题经过多次循环后，方可获得较为全面的课题信息。

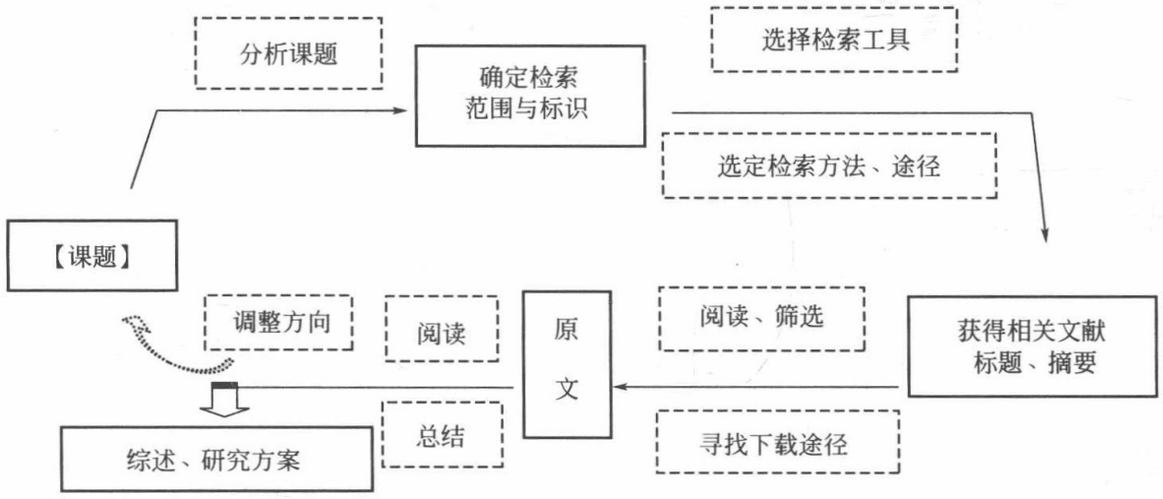


图 10-1 化学信息检索与利用流程示意图

10.1.1 根据目标确定检索策略与途径

表 10-1 罗列了印刷版与网络版化学化工文献源的获取途径与重点利用价值。简单来说：①通过科技图书、学位论文、网络等了解基础知识、基本方法、背景资料。②通过期刊论文、会议资料、网络等了解学科前沿。③通过专利文献、标准文献、科技报告、产品资料、网络等获得技术发明、具体方法、检验方法等。④通过政府出版物、政府与科研单位网站了解政府导向、各单位研究成果与重点领域。⑤通过网络检索，可以便捷地找到相关信息。同时，不能忽略本单位、本地区已有的资源。

表 10-1 印刷版与网络版化学化工文献源的获取与利用

出版形式	用途	检索与原文获取途径	章节
科技图书(Books)	了解学科领域背景资料；获得经典实验方法	传统与在线图书馆；网购；电子图书	2
期刊论文(Papers)	获取科学研究前沿成果与进展	传统与网络检索标题、作者、摘要等信息；通过本地或网络数据库获得全文	3
专利文献(Patents)	开展技术发明、研制新产品	通过各国专利局网站或检索工具免费检索或下载全文	4
学位论文(Dissertation)	获得可参考的系统性研究方法	国内可通过 CNKI 获得；国外可通过专业网站下载	5.3
会议资料(Proceedings)	掌握不同前沿领域的科技动态	通过检索工具可获得摘要；通过会议或相关期刊获得部分摘要或全文	5.4
科技报告(Reports)	了解不同国家最新的研究领域	通过政府或检索工具可获得已经解密的摘要或全文	5.5
标准文献(Standards)	获得权威的检验方法、各组分含量要求	通过专门机构；大部分信息可通过网络检索与下载	5.6
技术档案(Technical Archives)	找到可重复的技术方案	内部信息居多，较少引用	5.7
政府出版物(Government Publications)	了解社会需求与政府导向	通过政府网站公开获得	5.8
产品资料(Product information)	了解产品的结构组成、原理与使用方法	购买试剂仪器附带；通过生产商(经销商或用户)网站获得具体信息	5.9
数据库与网络信息(Internet Database)	可获得基本知识与研究前沿，以及个人经验	免费的 Internet 信息；本单位购买的数据库；部分付费网站	7；9

进入网络时代，数据库和搜索引擎的选择至关重要，表 10-2 罗列了一些重要网站（数据库）与检索工具的特点与用途。

表 10-2　重要网站与检索工具的特点与用途

检索目标	数据库名称	特点【用户群】	知识章节
获得简单信息	Google、百度 www. science. gov	学术搜索、百科可以搜到 30%以上与主题相关的论文。【免费】	7
中英文图书	超星数字图书 Bookfi、Genesis	较早图书逐步入库。【大部分高校】 大量英文图书 PDF 版【免费】	2
综合信息检索	CA 数据库(SFS)	SciFinder Scholar 收录全世界 98%以上的 6 类化学文献的摘要。【科学院、部分高校】	6
了解高水平成果	ISI（SCI 库）Web of Knowledge	高水平期刊论文摘要及被引用情况，提供了全文链接。【科学院、部分高校】	5；9
获取专利技术	各国专利网	可检索到各国专利全文。【免费】	4
查阅化合物参数	Sigma-Aldrich 公司	全球最大试剂、仪器网站。【免费】	7
国内研究情况	中国知网	获得国内最全面的期刊论文。【摘要免费】	3

在检索与收集文献时，首先应考虑充分利用本单位、本地区可以利用的专业数据库或搜索引擎检索和下载所需文献。对于近期期刊论文，可以考虑向作者免费索取。其次，可以通过付费方式下载或邮购所需文献资料。最后才考虑本人前往或委托朋友去相关图书馆或信息中心复印或下载。

10.1.2　通过专业数据库检索与收集化学化工信息

对于自然科学来说，英文文献检索首推 ISI、Elsevier、Springer 等出版机构发行的电子数据库，部分数据库已由中国科学院或高等院校购买了使用权。其中，可通过 ISI Web of Knowledge（即 SCI 数据库）检索到高水平期刊论文摘要及被引用情况，其网页提供了全文链接，可以直接下载全文。所以，读者首先需要了解本单位可以免费使用的数据库。近年来，免费搜索引擎及数据库不断增加，对于普通用户来说，充分利用这些信息源就可以获得大部分有用信息。

国内大部分科研院所已经购买了与化学相关的专业数据库，如表 10-3 所示。它们的检索方式已经在前面相关章节中做了详细介绍。

表 10-3　重要数据库的特点与用途

数据库/网站	特点/用途(网址)	用户群
Science Direct	Elsevier Science 公司是目前国际上最大的出版社(www. sciencedirect. com/)	大部分高校与科研院所订购
ACS	美国化学会出版的国际最高水平的科技期刊论文(pubs. acs. org/)	科学院、部分高校征订该数据库
RSC	英国皇家化学学会(Royal Society of Chemistry)出版的期刊及数据库(pubs. rsc. org)	部分高校与科研院所订购
Wiley	世界第一大独立的学术图书出版商和第三大学术期刊出版商(onlinelibrary. wiley. com)	部分高校与科研院所订购
Springerlink	世界知名出版商(www. springerlink. com)	部分订购
Nature	顶级期刊(www. nature. com/index. html)	摘要免费
Science	顶级期刊(www. sciencemag. org/content/current)	摘要免费
PubMed	医学相关数据库(www. ncbi. nlm. nih. gov/pubmed)	文摘免费

续表

数据库/网站	特点/用途(网址)	用户群
PDB	Protein Data Bank(蛋白质数据银行)收录了生物大分子(包括蛋白质、核酸及复合组装体)的三维结构信息(www. wwpdb. org)	免费
ChemBioFinder	在线化学与生物文献数据库,提供化合物及相关链接(ChemBioFinder. com)	免费使用5次

10.1.3 充分利用图书馆的免费资源

对于在校的本科生、研究生而言，首先要通过本校或研究所的图书馆已经购买的网络资源（如表10-2、表10-3所示），免费获得其中的化学化工信息。如果本单位没有购买该数据库，可用如下途径获得：

方法1：直接让所在单位图书馆的管理员从其他单位图书馆进行文献传递。也可以通过读秀（www. duxiu. com）、百链获得全文。

方法2：中国国家图书馆、中国科学院图书馆均设有读者服务部，可以通过求助他们复印和传递全文，虽然需要付服务费，但代价不大。

10.1.4 免费检索信息的途径

虽然上述大型数据库的文献已经不算少了，但有时还会碰到查不到的文献，而这些文献的数据库本单位又没有买，怎么办？可通过以下几个方式检索和收集文献。

方法1：通过免费网站检索（见3.6节）。表10-4为可免费获得全文的网站。如：Google学术搜索等进行搜索，一般会检索到所需文献，在Google学术搜索中通常情况会出现“每组几个”等字样，进入后依次点击链接，其中某个有可能下载到全文。注意，Google学术搜索一般能检索到所需30%～60%的文献，而且并不是所有全文都能打开。

表10-4 几个免费网站的特点与用途

网站名称	特点/用途(网址)
NIST	NIST Chemistry WebBook,可免费检索已知化合物的谱图与热动力学数据(http://webbook. nist. gov/chemistry/)
Sigma-Aldrich	全球最大的化学试剂、仪器网站。免费查阅化合物相关数据
WorldWideScience	世界科学搜索引擎可同时对70多个国家的60多个数据库进行一站式跨语言(英、中文等9种文字)搜索。(http://worldwidescience. org)
Academic Search Bing学术	微软学术搜索引擎:包括个人资料页、可视化搜索、会议征文、学科趋势、用户编辑等。(http://academic. research. microsoft. com/;http://libra. msra. cn/)
DOAJ	开放存取期刊目录(Directory of Open Access Journal)具有免费、全文、高质量特点。有8600多种开放期刊被收录(https://doaj. org/)(http://www. oalib. com/)
Highwire	提供免费全文。(http://highwire. stanford. edu/lists/allsites. dtl? view = by + publisher # O)
Freefullpdf	获得图书、论文、专利等全文(www. freefullpdf. com)
期刊界	中、英文论文数据库(www. alljournals. cn)
读秀	读秀学术搜索(http://www. duxiu. com/)
FreeDictionary	免费词典(www. thefreedictionary. com/)
JournalSeek	可免费搜索完全分类期刊数据库信息(http://journalseek. net/)
ResearchGate	科研人员自己的FaceBook。科研人员在该网站上可以分享研究成果、学术著作,也可以发信息交流(www. researchgate. net)

方法2：用文章的作者姓名或标题在搜索引擎（Google或百度）中搜索。因为许多作者喜欢将自己已发表论文的电子版直接挂在个人网页上，这样也是为了让别的研究者更加了解

自己的学术领域。因此你有机会免费下载到所需文献的全文。甚至可以下载到该作者的其他文章。如果文献是由多个作者撰写，若第一作者查不到个人主页，可查通讯联系人或第二、三作者，以此类推。用文章的标题（Title）来搜索，例如：有些国外大学的图书馆会把本校一年或近几年的学术成果的全部 Publications 以 PDF 格式挂在网上，或者在这个大学的 ftp 上也可能会有这样类似的全文。这样就会免费下载到你想要的全文了。

方法 3：直接写邮件向作者索取全文。一般情况下作者都愿意免费提供自己已发表的论文，这有利于传播他自己的学术思想。如果作者能够提供全文，出于礼貌，请不要忘记回信致谢。若不提供，也可以理解。

方法 4：发贴在一些学术交流站点（如化学吧、小木虫、博研联盟）上求助。

10.2　文献整理与文件夹管理

在文献的检索和收集过程中，如果不进行有效的管理，当收集或下载到大量（百篇以上）文献后，会发现从自己的下载文件夹中找到所需电子版文献比从网上再次下载更困难。因此，对所收集的文献必须进行有效管理。对于下载的文献，要以其内容建立以专题或杂志并按时间先后的专门分类。如：哪些需要仔细阅读并保存，哪些用处不大待删除，哪些需要阅读却尚未阅读，以后想到时，还能及时找到。

文件管理方法要因人而异，这里介绍一些简单的方法。

10.2.1　文件的分类与文件夹的命名

对于一位初学者来说，电子版文献管理经验如下：

（1）下载电子版文献时（DOC、CAJ、PDF、HTML 等格式），使用论文出版年代和文章题目作文件名（注意，文件名不能有特殊符号，要把 \ / : * ? < > | 以及换行符删掉）。下载的文件名称中如果使用“出版年代-期刊名称-标题”作文件名（图 10-2），可以避免重复下载，而且不容易混乱。也可在文件名后加入作者或期刊名称，或进行重要性或关键词标记，方面快速找到所需文件。

图 10-2　电子文件夹实例

（2）文件必须分类放置，不同主题存入不同文件夹。文件夹的名称要体现其关键词及下

载时间，文件夹的题目要简短。这样，如果忘记一个文件的具体位置，只要通过上述几种参数中的任何一个，用电脑的“搜索”功能就可以很快找到所需文件或文件夹。

(3) 看过的文献可以归入子文件夹，也可以在文件名称中加标记（如文件最后加“已读”或“重要”等字样），最起码要把有用和没用的分开。重要文献根据重要程度在文件名中进行标记，然后按名称排列图标，最重要的文献一目了然。

(4) 复印或打印的文献，用打孔器打孔，活页装订，便于根据需要重新组合。

10.2.2 文件的分类技巧

如何将所收集的文献进行分类呢？首先要有一个分类标准。对初学者来说，一种简捷的办法就是看别人是如何分类的，可以从相关综述中获得，特别是近几年内发表在高水平期刊上的综述。通过浏览近几年的综述（注意，只是浏览而不是精读）可以大致把握课题方向的脉络。通过别人综述里面的小标题也基本清楚了该如何对文献进行分类。

当然，虽然文件的分类在不同课题组有自己的传统，但目的是高效利用。

10.2.3 利用软件管理文件

上述介绍的文献管理方法虽然简单易行，但在信息化的今天，这些方法势必会很低效。随着计算机科学的发展，有越来越多的专用工具软件，如：EndNote、Reference Manager、CypEndnote 等，可帮助用户轻松完成参考文献的整理和标注。其中，EndNote 的使用最广泛，具有文献检索、文献整理、引文标注、在文末自动按特定格式生成参考文献列表等强大功能。有关软件的使用参阅第 12 章。这些软件的使用方法可以通过网络搜索到，这里不再赘述。但有人反映其缺点是：看完就忘，不易整理，笔记时间长就没有了印象。

也可以利用通用的硬盘搜索软件来辅助管理硬盘中的大量文献，只需稍微设置就可以很快捷地从本机硬盘中查找出所需的文献。典型工具软件如“百度硬盘搜索”，百度硬盘搜索是全球第一款可检索中英文双语的硬盘搜索软件，让你轻松管理硬盘。有关知识参阅“百度百科”，也可从网上找到免费下载安装的软件。

10.2.4 所获信息的鉴别与筛选

文献情报对于用户有有关与无关之别，代表性与一般性之分，欲要利用，就离不开对文献的鉴别与筛选。文献资料的鉴别，主要是分析判断文献的可靠性、先进性和适用性。

(1) 可靠性判断　文献的可靠性主要表现在其真实性，通常可从 7 个方面来判断。①从内容判断：对报导科研成果的文献，要注意逻辑推理是否严谨，有无实验数据为依据；对有关应用技术的文献，要注意它是处于实验室研究阶段，还是生产应用阶段。②从密级程度来判断：密级、秘密和内部资料比公开资料的可靠性大。③从类型来判断：科技图书、科技报告、专利文献、技术标准、技术档案比其他类型的文献可靠性大；最终报告比进展报告的可靠性大。④从来源的渠道来判断：官方来源比私人来源的文献可靠性大；从专业研究机构来的文献比一般社团来的文献可靠。⑤从出版单位来判断：著名大学、著名科研单位、著名出版社出版的文献可靠性大；一些著名学会、协会创办、出版的期刊论文也比较可靠。⑥从作者的身分来判断：国内外知名学者、专家、教授、工程师撰写的文章所提供的情况比较可靠。⑦从引用率高低来判断：引用率高的文献可靠性大。

(2) 先进性判断　先进性指在科学技术上有某种创造或突破，可从 4 个方面来判断。①从文献资料发表的时间来判断：一般来说发表或出版的时间越近，可能越先进。②从文献资料的来源来判断：通常是技术先进国家发表的资料先进；世界有名望的期刊互相转载的资料先进。③从经济效果来判断：通常从产量、质量、品种、成本、劳动生产率、利润等技术经济指标来衡量一项技术的经济效果优劣，经济效果优者一般较为先进。④从有关评论来判断：一项技术出现后，国内外有关专业期刊往往要加以评论，从这些评论中一般可知道它是

否先进。

（3）适用性判断　适用性指文献资料对用户适合的程度，可从两个方面来判断。①从内容来判断：主要考虑文献资料中介绍的技术和提供的原料、工艺、产品等是否合乎国情。一般来说，来自科学技术发展处于同一水平、同一发展阶段、自然条件相似的国家或地区的文献资料，适用性较大。②从读者方面来判断：读者越多，一般说明使用价值越大；读者的职业面越宽，说明该项技术适用范围越广。

筛选则是在鉴别的基础上，对文献资料及其情报内容进行取舍，将陈旧的、重复的、无关的资料与部分内容剔除，保留或提炼有价值的文献和知识内容。以上两者紧密关联，往往是对文献进行鉴别的同时，又对文献进行筛选，二者几乎同步进行。

通过鉴别、筛选，就能从看似凌乱的信息中获得真正需要的文献，从而有效利用。

10.3　化学化工信息的利用——文献的阅读

文献分类好了，但如果不经过阅读和吸收，那还是属于电脑的，只有经过个人的消化，才能转化为自己的知识。科研训练的一个重要组成部分就是科研论文的阅读。广泛阅读文献是提高综合能力及水平、优化知识结构、转换思维方式、拓展研究视野的必由之路。

在科学技术日益发达的今天，不看文献要做好科研，可以说一点可能都没有。只有广看文献，深入学习，才能厚积薄发，做出高水平的成果、撰写高质量的论文。

10.3.1　不同类型文献的利用

表 10-1 罗列了印刷版与网络版化学化工文献源的重点利用价值。简单来说：①从科技图书、学位论文获得基础知识、基本方法、背景资料。②通过期刊论文、会议资料了解学科前沿。③通过专利文献、标准文献、科技报告、产品资料、网络等等获得技术发明、具体方法、检验方法等。

10.3.2　阅读综述

对于新手或者刚进入某个领域的研究人员，最主要的还是文献阅读的积累，一般要多读文献，建议文献研读的顺序是："学术专著入门→研究论文→博（硕）士论文→综述论文→高水平期刊论文与专利文献"。

通过学术专著了解学科前沿与相关理论基础，通过阅读近期研究论文了解最新研究成果。读综述，可以快速全面地了解将要从事的课题，大致了解已经做出什么，自己要做什么。这样做的好处是，通过中文综述，可以了解学科的基本名词，基本参量和常用的制备、表征方法。这样会比一开始直接看外文文献理解地快得多。博（硕）士论文则会更加详细地介绍该领域的背景以及相关理论知识，通过阅读可以更清楚地理清一个脉络。而国外的综述多为相关研究领域的权威人士撰写，信息量大，论述精辟，读后不但有助于掌握相关研究的重点和热点内容，而且能帮助我们掌握研究领域的大方向和框架，了解哪些人、哪个大学或研究所、在哪个方向比较强等。

10.3.3　广泛浏览与专业精读

对于一位准备在学科（或专业）领域快速入门的学子，以及希望具备持久创新能力的青年学者来说，学科信息的收集、消化、利用策略十分重要。

大家知道，在铺天盖地的信息海洋中，高效获取有价值的信息，方法很重要。有关科技文献的获取与阅读一般采用金字塔形策略（图 10-3）。这里，以从事环境友好高分子材料领域的初学者角度进行描述。

第一层（底层）：需要从各种途径获得相关专业与科技前沿知识，包括国内外新闻媒体、

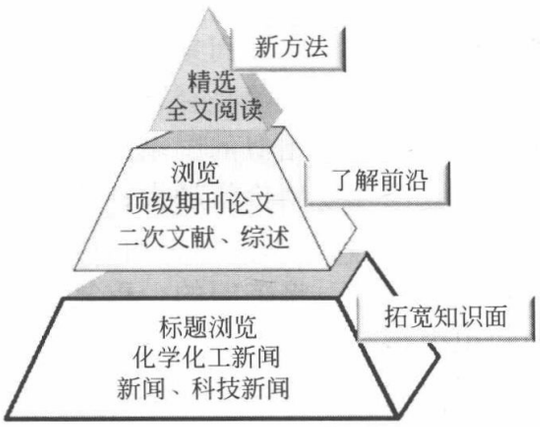


图 10-3 信息阅读策略

朋友聊天，以及在线新闻、在线软件（如科学网、QQ、微信等）。

第二层（中层）：专业领域缩小到化学相关领域，需要经常浏览学科顶级期刊与综述性期刊论文，如：Nature、Science、JACS、Chem Rev、科学通报、化学进展，当然，也可以浏览一些摘要性期刊、专业期刊，如 CA 专辑。目前，许多在线期刊通过网络可以直接订阅 RSS，也可以直接阅览目录与摘要，这为浏览专业前沿提供了极大便利。

第三层（顶层）：需要定期浏览与专业十分密切的几种高水平期刊（如 Adv Mater、Adv Funct Mater、高分子学报、高分子通报、功能材料、Carbohydrate Polymers、Carbohydrate Research 等），采用“天然高分子、环境友好高分子、多糖、蛋白质”等关键词，精选与研究方向一致的论文，同时检索其他刊物中与研究方向一致的论文，下载并阅读，从而获得参考价值极大的信息，为自己的研究提供可行的方法，为实验结果提供参比。

10.3.4 善于总结

在文献阅读中要养成总结的好习惯，否则读的时候好像什么都明白，一合上就什么都不知道，相当于白读。这是读文献的大忌，既浪费了时间，也没有形成良好的阅读习惯。在读文献的时候，往往能发现好的英文句型和常用短语，最好将其摘抄在笔记本上，反复记忆。这样以后自己写作时，有现成的句型，写作效率自然会高些，比自己在那里半天琢磨出一个句子强得多。当然读文献的主要目地不是为了学英语，而是获取信息，所以要将重要的结论、精巧的试验方案记下来，供参考和学习，为自己的科研所用。每次读文献时（不管是精读还是泛读），一定要和自己的数据相结合。在文献的“分析与讨论”部分，想一下，如果这些结果是自己的，那我会怎么写这部分的分析与讨论。再想一下，如果用自己的数据，又该怎样解释。文献阅读完毕，再分析其核心是什么，若不清楚，再从“摘要”“结论”里找，并从“结果与讨论”里确认。

10.3.5 巧妙利用 Internet 查生词

在文献阅读时总会遇到不认识的英文词汇或不知道的专业知识，当它们不影响对文献的整体认识时可忽略，但对于一些关键或重要的词汇或概念，必须了解其涵义或背景。对于英文词汇，可以使用金山词霸、CNKI 翻译助手等进行翻译；通过维基百科、百度百科的免费网站可以了解绝大多数的背景知识，相关网站如表 10-5 所示。

表 10-5 化学相关免费工具网站

网站名称	特点	用途
维基百科(Wikipedia)	自由的百科全书；详细、权威；英文网站更丰富	相关知识入门
FreeDictionary	与 google、bing 齐名的网站(www. thefreedictionary. com/)	词典与相关知识
百度百科、知道	基础知识	相关知识入门
CNKI 翻译助手	专业词汇翻译	可查阅手头词典未收录的专业词汇
Google 翻译	词汇翻译	采用中英文词汇输入法可查到最新词汇
有道词典、金山词霸	词汇翻译	有桌面版与网络版
化工词典	专业词汇翻译	可获得化合物不同名称及 CA 登记号

10.4　研究生如何读文献

每一位研究生必须经过严格的科研论文阅读的训练。除了自己的习惯性阅读外，还应在研究生阶段选修以阅读分析专业文献为主的一至两门课，在实验室内也要有定期的科研论文讨论（一般在课题组的组会报告中进行）。

10.4.1　研究课题确定前后检索与阅读文献

（1）当研究课题未确定时　这里列举一些确定阅读文献或课题领域的方法。第 1 种方案是由导师指定研究课题：这时首先要了解基础知识，然后按照要求检索并阅读重要文献。第 2 种方案是从相关学科的前沿寻找课题：通过对新型研究领域和研究相对成熟的课题进行对照，就有可能找到需要探索的领域。第 3 种方案是从基础知识中找课题：首先从教科书开始找到自己最感兴趣的问题，查找相关综述，你会发现书上一些所谓的成熟观点，在综述中是“推测”，然后找原始文献，会发现有许多实验证据是在当时条件较差时的初步探索。如果你去验证一下，结果证实可靠了，那你就是用最新技术验证一个很正确的观点，给它提供了新证据，这属于好工作。另外你发现前人的观点有瑕疵或错误，那你就找到一个将来的科研方向，继续做下去，有可能有重要发现。所以一定得知道自己所研究的方向在世界上是怎样的研究现状，做到了何种程度，还有哪些关键问题急待解决。这一点对于自己找题目的同学来说尤为重要。

（2）课题确定后　首先要做的是寻找权威杂志上相关研究领域权威人士撰写的综述类文章。这类文章信息量大，论述精辟，读后不但有助于掌握相关研究的重点和焦点内容，而且能帮助读者掌握研究领域的大方向和框架，了解哪些人、哪个大学或研究所在哪个方向比较强等；其次是泛读摘要，挑选最相关的进行精读。精读文章同时做笔记和标记是非常关键的，因为好文章可能每读一遍就有不同的收获，每次的笔记加上心得最后总结起来就会对自己大有帮助；最后是针对不同的需要对论文进行泛读和跳读。

10.4.2　带着问题阅读文献

千万不要只是为看文献而看文献，阅读的目的是能为自己的科研所用，所以阅读过程中一定要和自己的实验结果（或研究方向、或研究思路）相结合。针对你自己的方向，找相近的论文来读，从中理解文章中回答什么问题，通过哪些技术手段来证明，有哪些结论。从这些文章中，了解研究思路，逻辑推论，学习技术方法。

看完一篇文献后，要认真总结，考虑如果用自己的数据或观点，又该如何解释其中的推测或现象。

表 10-6 以期刊论文为例，介绍了读重要文献的策略与步骤。需要注意的是，并不是所有文献都按此方法阅读，只有阅读与本人研究工作密切相关的文献时采用该方法，一般文献根据需要阅读其中的不同部分。

还有一些高水平刊物上的文章，不但要学习文章里面的知识，还要学习其写文章的文风。好的文章肯定会有好的文风，这些都是我们将来写文章要学习的。

（1）论文侧重点与阅读顺序　一般情况下，论文阅读顺序如下。①摘要、引文、引用的主要信息，研究背景。②图表：了解主要数据和解释。③讨论和结论：将图表和结论联系起来，根据图表判断结论是否恰当。④结果：详细阅读结果，看数据是如何得到的，又是如何分析的。⑤材料和方法：详细阅读材料和实验方法，看实验是如何进行的。⑥讨论和结果：深入了解研究结果。注意讨论中的关于从已知的知识和研究如何解释本文获得的结果。另外对于论文中大量的图表来说，当你能够重新画出这张图，并且能用自己的语言解说这张图，表明已经读懂了。

表 10-6 阅读期刊论文的策略与步骤

次序	读什么	读论文哪部分	读的策略:找问题答案
1	①论文的主题是什么？研究背景是什么？	标题	（1）看 Introduction 回答问题①和② （2）看图片回答问题(3a) （3）看结论和摘要回答问题(6a) （4）再看图回答问题(3b)和(3c) （5）图和结论相结合回答问题(6b)和(6c) （6）阅读摘要和结果回答问题④、(5a)和(5c) （7）比较结果和结论回答问题⑦ （8）比较以前的文献回答问题(6b)和⑨ （9）比较同类文献回答问题⑧ （10）回答问题(7b)和⑩ （11）最后全部问题过一遍
2	(2a)论文主要解决什么问题？其重要性在哪里？ (2b)我为什么要读这篇文献？是否还有人做过类似工作？设想若是自己做，会如何设计方案？	前言	
3	(3a)通过图表，你获得什么信息？ (3b)作者用图说明了什么问题？自己要获得此图会用什么方法？作者用什么方法？ (3c)你会画出此类图并用自己的语言表达吗？	图表	
4	(4a)作者采用什么方法来解决问题？理论（或文献）依据是什么？ (4b)方法的必要性？ (4c)通过此方法，你觉得大概能得到怎样的结果？ (4d)是否有得到更好结果（或更简单）的方法？ (4e)给你的灵感：为什么这样设计实验？是怎么想到的？有什么创新？	前言-实验部分-结论	
5	(5a)论文中的方法能否满足需要？方法与分析有什么缺陷？ (5b)实验步骤之间的逻辑关系？每项实验的意义？必要性？ (5c)我从这些结果中会得到什么结论？是否能够得到更好的结论？	结论	
6	(6a)文章的结论是什么？和你想的差异在哪里？ (6b)结论可靠性如何？对原来的结论有什么支持或变化？你如何评价？ (6c)讨论中是如何从已知的知识得到结论的？	结果与讨论	
7	(7a)实验结果是否支持文章的结论？问题、设计、方法和讨论的逻辑关系是什么？作者是如何达到目的的？ (7b)还有哪些不确定的地方？我能否进一步确定？ (7c)文章是如何描述结果、如何解析图表趋势的？论据如何组合？如何表达自己的观点？	讨论	
8	⑧和同类文献，方法和结果有什么共同点和不同点？	参考文献	
9	⑨与以前的文献相比，作者在思路与方法上有什么变化？下一步是什么？我能否有进一步改进办法？		
10	⑩别人还有哪些地方没做？要是我接着此方向继续做，哪些是在本人工作条件下可以做的？哪些必须要做？哪些别人肯定比我做得更好更快？	结论-参考文献	

一篇论文中最重要的部分依次是：图表、讨论、文字结果、方法。高水平期刊对图表的要求都很高，必须做到仅通过阅读图表及其说明文字即能把握文章的方法、结果，再结合读者自己的原有知识，就大概知道其意义了。这符合现代人必须在最短的时间内把握最必要的信息的要求。因此，在某个领域做了一段工作后，定期查新得到的文章只需看摘要、图表即

可，个别涉及新方法或突破性结果，再看讨论、文字结果和方法。这也提示我们在写外文文章时，注重图表及其说明文字，做到形象化、信息最大化。

作者的水平体现在讨论部分：如果时间充裕，建议研读和模仿高水平论文的讨论部分。不同的人对同样的数据可能有不同看法和分析方式。图表的趋势解析，论据的组合，都是非常看功力的部分。如果某篇 SCI 级别的文章让新手来写，可能发国内核心都非常困难。

要理解讨论中的精髓：这是作者 Idea 创新性以及与旧有的实验结果比较的关键部分，可以看出作者设计此实验的思路，在做出比较以后，对自己的课题会有很大启发。

(2) 阅读侧重点因人、因时而异　阅读的侧重点因人而异，这是因为不同个体，甚至一个人在不同阶段，其背景知识与水平不尽相同。

自己熟悉的领域：最省事的是只看摘要，因为依靠背景知识通过摘要即可大致勾勒出文章内容，但有时这是不够的，相对省事的方法是细看摘要，略读前言，再看结果中的图表，最后读一下自己感兴趣的讨论部分。但如果文章对自己很有意义，那就应该通读全文了。

寻找课题阶段：重点读讨论、结论及展望，在课题设计阶段，主要是材料和方法。若只需了解一下该研究的思路，可选取摘要及引文与结论进行泛读。尽量去把握作者的研究思路、学习分析方法、写作技巧和写作语言方式等。

完善研究思路阶段：课题设计或实验思路永远要走在实验之前，凡事都应该先计划再实施。在实验方案的设计和实验细节方面一定要多下功夫，力求用目前最成熟的技术。对于一些自己没有做过的实验，一定要搞清楚原理，尽可能了解详尽实验过程后再开展研究，切忌盲目。有些实验若在自己的实验室操作确有困难，可以考虑合作，因为一个人不可能在短时间内把什么都做好，必要时须请教同行专家。

10.4.3　用批判的目光阅读文献

当科研论文的阅读能力提高到一定程度后，就要学会批判阅读。不要迷信已发表的论文，哪怕是发表在非常好的期刊上。要时刻提醒自己：该论文逻辑是否严谨，数据是否可靠，实验证据是否支持结论，你是否能想出更好的实验，你是否可以在此论文的基础上提出新的重要问题。

古人云："尽信书不如无书。"以追踪当前发展动态为目的阅读文献时，需要发挥自己的判断力，不可盲从，即使是知名科学家和教科书有时也会有错误。在追踪当前发展的重要方向时，切记：你看到的问题别人也同样会看到，越是重要的问题竞争必然越激烈，在研究条件不如他人时，如果没有创新的研究思想和独到的研究方案是不可能超越他人获得成功的。

我国在一些重要课题的研究时，有一哄而起的情况。缺乏自己的创新思想，片面一哄而起追求热点，很难取得突出成果，最多只能是为别人的成果锦上添花，或只是做一些小修小补的工作而已。

创新思想来自何处？虽然灵机一动产生了重要的创新思想的例子在科学史上确实有所记载，但这毕竟是比较罕见的，而更为常见的是天才出于勤奋，创新出于积累，积累可以是个人积累，也可以是本单位的长期积累。

10.4.4　如何阅读不熟悉领域的文献

在阅读一些和专业有关的新领域的文献时，如果该领域和原专业距离比较远，那么一开始就去查外文文献往往找不出好结果，特别是一些关键词常有臆断的情况，导致检索效果不好。值得借鉴的程序是：

(1) 阅读与领域相关的中文教科书（知识较系统，但较旧）和新书（通常汇集了最近 5～10 年的主要研究内容和结果）。可以对这个领域的发展历史和近期状况有个全面的了解，对一些专门的术语和英文单词也有了概念。

（2）根据研究内容通查最近3～5年的中文期刊，通过综述了解最新进展和一些国内发表论文的人名和期刊名，以及国内做到什么程度了，为该类项目研究打个基础。你可以知道国内哪些同行在做这方面的工作。如果实验中碰到一些具体的细节问题的话，你可以联系他们，这样可以使你避免走不必要的弯路。

（3）根据上面学习掌握的专业词汇、人名、期刊名查国外文献。可以阅读一些国外的原始论著，它将会告诉你如何去完成你要研究的题目。等到文献量积累到一定程度后就可以开始你的课题了。但要注意，时刻关注你正在研究的相关领域的研究进展，它可能会给你的课题带来新的补充。

10.4.5 文献追踪的重要性

在现在这个信息时代，你的Idea会有与别人不谋而合的情况，所以要特别关注这个领域的最新动向。在抓紧自己出成果的同时，随时根据有可能出现的“撞车”进行调整，做到心中有数。和自己课题相关的文章一定要勤跟踪，现在许多Group科研做得又快又漂亮，我们在做到心中有数的情况下，可以扬长避短，做出新东西来。了解与自己研究方向有关的机构，密切关注在该研究领域和方向的顶尖Group所发表的论文。对数据库进行定题、定词地定期搜索，才能保证不丢下每一篇重要的文献。追踪文献总要紧密结合自己的研究方向并为科研工作服务。

10.4.6 阅读文献的方式与经验

知名院士、专家曾总结过一些有价值的文献阅读经验，典型有：①文献阅读需要积累；②天天学习、相对集中；③多数文章看摘要，少数文章看全文；④准备引用的文章要亲自看过；⑤注意文章的参考价值；⑥利用Word文档做电子笔记。传统的方法是写笔记，我们常说“好记性不如烂笔头”。随着电脑与网络的普及，出现了新方法“利用Word文档做电子笔记”。

目前大部分学生都熟悉电脑的使用，可以在阅读一篇文献（电子版或打印版）时，建立一个Word文档电子版笔记本。将阅读文献中精彩和重要的部分，尤其是重要的结构式或机理图，直接复制到Word文档里。同时以脚注（或尾注）形式记录文献的标题和作者等相关信息（即完整的参考文献著录格式），将文献分类集中。

这种方法操作简单，将来要查询和反复阅读时会有很大帮助。尤其在写文章时，相关文献及其亮点一目了然，可以将文字与参考文献直接复制到论文中，减少错误。也可以把一些很经典的英文语句翻译成中文，进行中英文对照放置。这样，在以后写文章时直接利用，不但省事省时，还能锤炼英汉互译能力，有利于以后国际交流时的口语表达。

具体来说，先将每篇综述的核心内容总结成几句话，附上其框架结构（可以是该综述中的小标题），而后将自己感兴趣或与目前个人或课题组研究相关的部分加粗或加彩。这样在总结一系列综述论文后，会得到一个综述提纲形式的文档。最后汇总得到立体化的提纲。

这样做的好处有很多：①避免了文献阅读的盲目性，否则没头绪看了一堆文献而不能根据一个主题有机地联系起来，时间一久便会忘掉；②提高了自己建立提纲的能力，一般来说无论是写论文、开题报告都需要首先建立提纲；③还可以提高自己分类总结的能力，而这正是写文章乃至以后写报告、写总结所必需的。

10.5 论文写作——基于文献的创新

有关学术论文的类型与格式，已经在相关章节中做了详细介绍。这里只从化学信息检索与利用的关系角度进行讨论综述论文和研究论文的写作。

10.5.1　学会从文献中提炼精华

科技论文一般有较为固定的格式，因为其反映的是客观规律，无需华丽的词汇与语句，否则会喧宾夺主。也有人说："写英文文章就像写八股文"，就是要在文章的每一部分先用经典的句式搭建结构框架，然后灌注内容，注意每段要有中心意思概括句，直接表明本段话的目的。段与段之间要有承上启下的过渡词，这样文章的主体结构就会清晰明了，结构严谨。而对于那些已经通过国家大学英语 4 级以上的学生来说，大多都是英语阅读理解的高手，都知道阅读时找"中心句""中心段"等，如果把这些快速阅读的"技巧"，应用到自己的英文写作中，其实就是触类旁通，举一反三。

另外，在平时读英文专著和文献时，及时留心收集经典句型和短语，建一个属于自己的写作数据库，以便写文章时，随手套用，文章写起来就顺畅，不必临时大海捞针苦苦寻觅词语或句子了。

10.5.2　研究论文写作的题材

(1) 靠压倒一切的新颖性（即 first to report）来发文章。由于你是基于文献检索（即 To the best of our knowledge, … have never been reported in public），所以需要先讲清楚自己通过什么方法制备或合成了一种特殊的、有潜力的材料，然后对其进行所需的常规表征（… was characterized by IR, XRD, XPS, EXAFS, TPR, NMR, etc.），之后选一个典型的反应进行评价，画一张图或者列一个表，表明其有一定的催化效果，最后得出结论：The novel catalytic material… shows promising performance in…。

(2) 靠改进现有技术。例如，通过优选现有技术进行组合改性或通过引入 additive * * * 以后发现效果或性能有所提高之类的文章，可以这样描述：…compared with A, B modified by * * * exhibits better activity and stability。因为是改进现有技术效果好了，自然效果好的原因是这篇文章强调的对象。To find out the crucial factors leading to better performance…，你就需要精心设计实验方案，全面表征，把所有可能给出合理解释的实验和表征分类列举，加以分析解释。最后写结论：The conclusions can be reasonably summarized as follows: first, …; second, …。让审稿人读后，觉得思路清晰，论据充足。

以上两类是基本的文章发表模式，其实万变不离其宗。不管实验怎么设计，文章怎么写，牢记要条理清楚、逻辑性强，明确每个实验和表征的目的［The aim of the present work is to investigate * * *; In order to determine (examine; investigate; whether…, * * * characterization was carried out)。］这样才能有的放矢，紧扣主题，即使审稿人提出疑问，你大可镇定自若地回答他，因为没有人比你更了解你自己的实验工作，只要你经过深思熟虑，任何问题都能给出比较合理的解释。

10.6　化学化工信息的检索与利用实例

在第 1 章中已有介绍，文献检索过程包括 5 个步骤：①根据自己的兴趣或教师的安排，确定专题领域，明确检索范围及要求；②选择有效的检索系统，确定检索途径和检索方法；③查找文献线索，找到标题、摘要、信息源等信息；④查找和获取原始文献；⑤阅读原始文献，根据获得的知识，调整拟综述的专题范围，调整检索方法，精确查找文献，总结文献的方法，撰写综述（或设计研究方案）。

这里分别以"洗涤剂"和"智能高分子"为例，介绍应用性（或传统）课题与前沿性课题在文献检索与利用中的主要步骤。

10.6.1 传统、应用性课题——洗涤剂

洗涤剂为广泛使用的日用化学品，属于应用性（或传统）课题。因此，其检索策略如下：①通过使用专著、教材、期刊论文或网络了解大概情况，确定范围。②确定洗涤剂所属领域——日用化学品。③通过 CNKI、专业期刊（如《日用化学品工业》）或“全国报刊索引”查找文献线索。④查找和获取原始文献。⑤总结、写报告。

检索途径和结果如图 10-4～图 10-8 所示。首先，在百度中检索洗涤剂，检索到 2000 多万条有关洗涤剂的信息（图 10-4）。阅读“洗涤剂　百度百科”时，看到“手洗餐具洗涤剂”，判断有价值。然后使用“手洗餐具洗涤剂”，范围缩小到 2.6 万条（图 10-5）。进一步阅读发现，该领域既有研究论文、综述论文，也有国标（图 10-6）。

因此，改用 CNKI 检索，可以找到“手洗餐具洗涤剂”相关的研究论文（包括配方）、综述论文（图 10-7），以及餐具洗涤剂配方（图 10-8）。以获得的下载论文内容为基础，进一步检索国内外相关研究论文，就可以获得手洗餐具洗涤剂研究新进展。

图 10-4　用百度检索框检索“洗涤剂”的信息

10.6.2 化学前沿领域研究课题——智能高分子

“智能高分子”进行文献检索与利用的主要过程如下：①通过专业图书、网络搜索引擎、CNKI、超星数字图书等了解大概情况，确定范围。发现智能高分子与材料密切相关，也与高分子、精细化工有关。②确定智能高分子相关文献可以从高分子、材料、精细化工的相关领域文献中获得。要确定相关英文词汇。③选定并通过检索工具搜索特定文献。可使用 CNKI、SCI 等搜索。④阅读获取的原始文献，进行知识积累。⑤分类、文献阅读，总结、撰写报告。

如果研究方向是用某种技术制备（A）一类智能高分子（B），并研究其某领域的应用（C）。那么可分别以制备（A）、智能高分子（B）、应用（C）为关键词检索综述论文。结果

经过整理后得到一个以课题方向为内涵的外延式提纲体系。具体包括：制备技术有哪些（其中不同技术的优缺点）；智能高分子包括哪些，其刺激因素、响应形式包括哪些；智能高分子目前研究内容包括哪些；应用的领域有哪些等。以此提纲为基础，进一步检索国内外相关综述论文、研究论文和专利，就可以总结并撰写出内容丰富的综述论文。

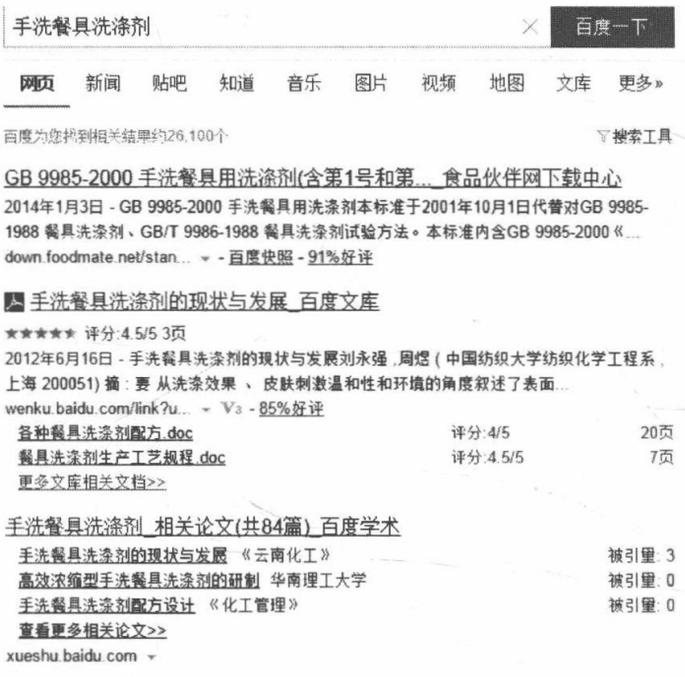


图 10-5　百度查询页面 1

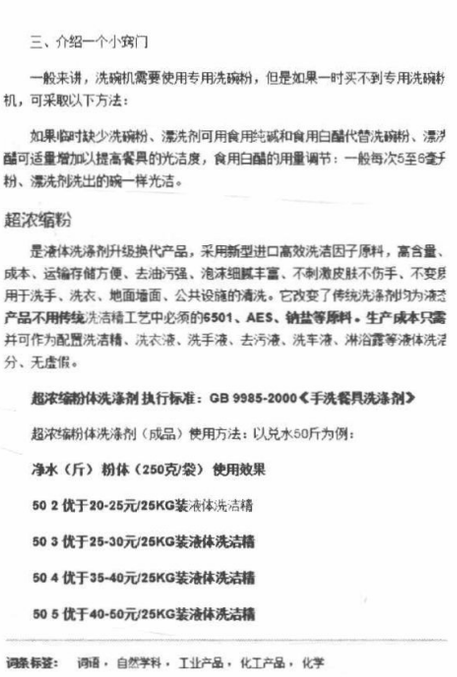
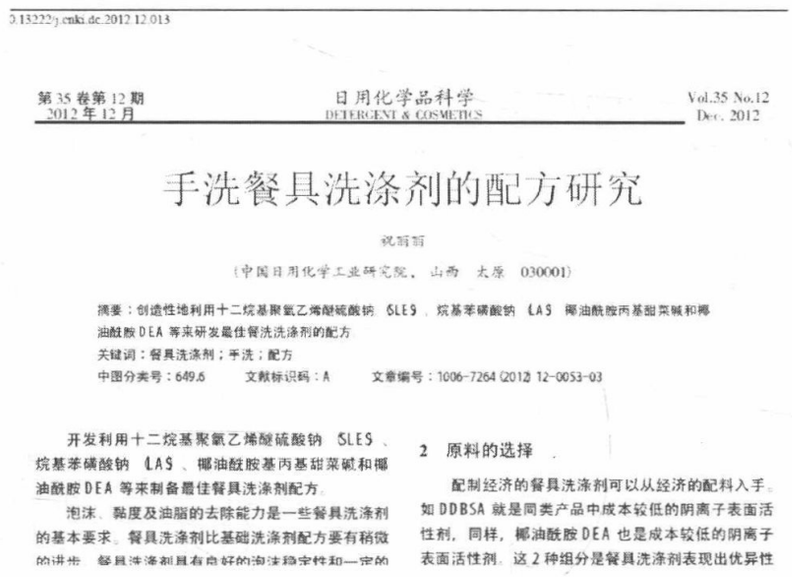


图 10-6　百度查询页面 2

图 10-7　用中国知网检索框检索“手洗餐具洗涤剂”的信息

也可以围绕智能高分子的某一个应用领域展开综述，写出一个十分前沿的综述论文，典型的实例请参阅发表在《化学进展》[2008，20（2/3），351-361] 中的综述论文：《智能涂料制备方法探索与应用》。

总之，对于已经通过专业学习的大学生而言，只要掌握适当方法，就可以快速检索与利用专业信息。若已经通过大学英语四级的考试并进行适当专业英语训练，也能够检索英文文献并进行有效利用。



3.13222/j.cnki.dc.2012.12.013

第35卷第12期 日用化学品科学 Vol.35 No.12
2012年12月 DETERGENT & COSMETICS Dec. 2012

手洗餐具洗涤剂的配方研究

祝丽丽

(中国日用化学工业研究院，山西 太原 030001)

摘要：创造性地利用十二烷基聚氧乙烯醚硫酸钠 SLES、烷基苯磺酸钠 LAS 椰油酰胺丙基甜菜碱和椰油酰胺DEA等来研发最佳餐洗洗涤剂的配方

关键词：餐具洗涤剂；手洗；配方

中图分类号：649.6 文献标识码：A 文章编号：1006-7264(2012)12-0053-03

开发利用十二烷基聚氧乙烯醚硫酸钠 SLES、烷基苯磺酸钠 LAS、椰油酰胺基丙基甜菜碱和椰油酰胺DEA等来制备最佳餐具洗涤剂配方。

泡沫、黏度及油脂的去除能力是一些餐具洗涤剂的基本要求。餐具洗涤剂比基础洗涤剂配方要有稍微的进步，餐具洗涤剂具有良好的泡沫稳定性和一定的

2 原料的选择

配制经济的餐具洗涤剂可以从经济的配料入手。如DDBSA就是同类产品中成本较低的阴离子表面活性剂，同样，椰油酰胺DEA也是成本较低的阴离子表面活性剂。这2种组分是餐具洗涤剂表现出优异性

图 10-8 中国知网查询页面

10.6.3 检索实例——纳米二氧化钛

以课题“纳米二氧化钛的制备”为例，文献综合检索步骤如下。

(1) 分析研究课题，确定检索范围和检索工具 该课题属于无机材料范畴。选用美国《化学文摘》为主要检索工具，查找近几年的国内外有关文献。此外，对近期中文文献选用中国知网、中国专利数据库进一步查询。若所制备的纳米二氧化钛将作为商品出售，则还需查询有关国内标准。

(2) 确定检索主题词 从课题分析主题词为“二氧化钛”“纳米”“制备”。

(3) 确定检索途径和步骤 ① 利用美国《化学文摘》的“Chemical Substance”卷索引。对没有卷索引的最新文献采用期索引的“Keywords”索引。以“Titanium dioxide”为主题词，“nano”和“preparation”为说明语进行检索。②中国学术期刊网（CNKI）、中国专利数据库，选用“二氧化钛”“纳米”“制备”为关键词，从关键词途径进行检索。通过文摘内容确定所需要的文献，并直接下载全文（收费或包库用户）。③《中国学术会议文献通报》《中国科技成果大全》以及《中国学位论文通报》选用“二氧化钛”“纳米”“制备”为关键词，从关键词途径进行检索。若通过联机检索也可直接获得原文（收费或包库用户）。④ 通过 Internet 上的搜索引擎“Google”或“百度”，输入主题词“二氧化钛 + 纳米 + 制备”或“Titanium dioxide + nano + preparation”搜索相关网站。

(4) 获取全文 将检索到的文献，通过中文或西文期刊联合目录确定馆藏单位，到有关部门借阅、复印或下载即可获得有关原始文献。

(5) 阅读原始文献，拟定综述论文大纲。根据获得的知识，调整拟综述的专题范围，调整检索方法，精确查找文献，缩小综述内容范围。

(6) 总结文献的方法，完善综述论文。

练 习 题

1. 化学化工 11 类文献源有哪些各自的特点？

2. 重要的化学化工信息检索工具有哪些？
3. 化学化工信息检索的策略有哪些？
4. 如何高效利用检索到的化学化工信息？
5. 根据检索经验，总结本校图书馆、本院（系）资料室有哪些化学化工信息源。
6. 根据自己查阅文献的经历，谈谈阅读文献有哪些可以借鉴的经验。
7. 举例说明化学化工信息检索的意义及在科研工作中的重要性。

实践练习题

1. 通过百度、CNKI、专利网站等工具，检索“无磷洗衣粉”发展状况并进行总结，提出发展趋势。

2. 通过 Google 学术、Bing 学术、百度学术、维基百科及国际化学相关搜索引擎检索“环境友好高分子”最新研究进展，并提出个人观点。

3. 根据自己的专业特长或兴趣选定一个课题并系统查阅中、外文文献，了解该领域研究现状和存在的问题，总结提纯或表征方法。

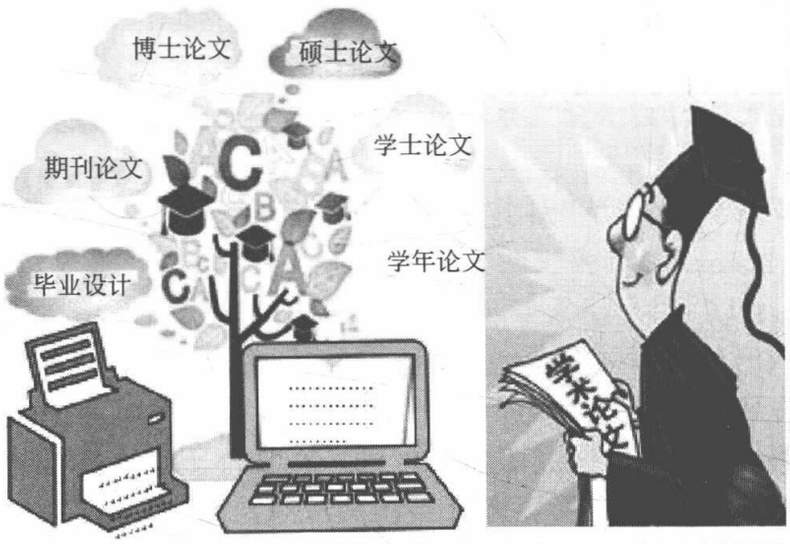
第 11 章　学术论文撰写与在线投稿

导　语

基于科学研究工作总结的学术论文，其灵魂是创新与应用，主要有期刊论文、会议论文、学位论文。为了便于研究者之间交流、检索机构收录，学术论文的格式相对固定。通过本章学习：掌握学术论文的格式与撰写要求；了解学术论文的投稿方法。

关键词

学术论文；论文格式；撰写经验；在线投稿。



学术论文是对某一学术课题所取得新成果的科学记录，或对某一类知识创新见解（或新进展）的科学总结，用以发表、交流或用作其他用途的书面（或电子版）文件。科学技术领域的学术论文称为科技论文。

11.1　学术论文主要类型

学术论文（Academic Paper，Article）有多种类型（表 11-1），用于期刊发表的学术论文属于期刊论文；用于会议交流的学术论文称为会议论文；用于申请学位（Degree）的学术论文称为学位论文（Thesis，Dissertation），包括学士（Bachelor）学位论文、硕士（Master）学位论文、博士（Doctor）学位论文。

学术论文按学科分为自然科学论文和社会科学论文。按研究的内容分为理论研究论文和应用研究论文。理论研究重在对各学科的基本概念、基本原理的研究；应用研究侧重于如何

将各学科的知识转化为专业技术和生产技术，直接服务于社会。

按写作目的，学术论文可分为交流性论文（目的只在于专业工作者进行学术探讨、发表各家之言、显示学科发展的新态势）和考核性论文（目的在于检验学术水平，成为有关专业人员升迁晋级的重要依据）。

表 11-1　学术论文主要类型

分类方式	按用途分类		按内容性质分类	按学科分类	
主要类型	期刊论文 会议论文 学位论文	科学技术论文	基础(实验或理论)研究论文 应用、开发研究论文 综述论文	自然科学论文	化学类论文 材料学论文 生物技术论文
		教学研究论文	教学理论论文 教学技术论文 教学经验论文	社会科学论文	….

与科研、教学密切相关的学术论文有以下三大类。① 科学研究论文：如实验研究论文、理论计算论文、综述论文。② 教学研究论文：包括教学理论研究论文、教学技术研究论文。③ 学位论文：分博士学位论文、硕士学位论文、学士学位论文。近年来，为了培养本科生的科学研究素养，许多高校要求本科生在大学（2～3 年级）期间进行科学研究，撰写学年论文。

11.2　检索信息的再利用——撰写学术论文

当科技工作者在科学技术领域有重大发现时，首先会通过撰写、发表学术论文，公布其研究成果。作为在校学生，检索大量的文献信息后，需要总结。通过撰写综述论文，可以进行归纳总结、提出自己的观点。而综述则是研究生的学位论文、本科生的学年论文与学位论文的重要组成部分。

学术论文的写作有别于文艺写作、公文写作和日常应用文写作，它融科学技术的丰富内容和成熟的写作理论技巧于一体，是借助于书面语言，完成知识产品制作的一种行为过程，是熟练运用各种书面表达手段，准确严谨地表述思维能力的体现。它具有一般写作所具有的目的性、综合性、实践性等特征，同时又具有其自身的特点：

① 内容的科学性、先进性、创新性、实用性。

② 语言的二重性，即“自然语言”和“人工语言”的有机结合。

所谓“自然语言”一般是指用现代文字、语言来描述科学技术内容的一种语言表达形式；而“人工语言”一般是指用符号、线条、字母、图表、照片与自然语言的词语相结合表达的一种特殊语言。在某些方面，用人工语言往往比用自然语言表达某事物、某现象更为鲜明、直观，甚至更为准确。比如科技文章中常配合一些图表，其目的是使要表达的内容更清楚，更容易理解。

11.3　学术论文的结构及撰写要求

科技论文是在公开刊物上发表的文章，都有一定的规范和编写格式要求。规范性是对论文语言文字和表现形式方面的质量要求。我国对此做出了明确规定，制定了相关国家标准，如 GB/T 3179—2009《期刊编排格式》、GB/T 3860—2009《文献主题标引规则》、GB/T

7713.3—2014《科技报告编写规则》等。表 11-2 列出了科技论文写作的基本格式。

表 11-2 科技论文写作的基本格式

位 置	内 容	备 注
前置部分	题名(或副题名)、作者名、作者单位、地名、邮政编码、摘要、关键词、中图分类号	内容都要有中、外(通常为英文)两种文字
	作者的简介:出生年月、性别、学位、职称等	国家统计源所需
主体部分	引言、正文(包括图、表)、结论(或讨论)、致谢(选择项)、参考文献等	

本章主要介绍化学化工类学术论文的基本格式和撰写要求。

11.3.1 论文标题

标题（Title，Topic）也称题名、文题或篇名，是以最恰当、最简明的词语反映论文中最重要的特定内容的逻辑组合。标题是论文内容的高度概括，既要有概括性，又要醒目，有时需要副标题。

下列 3 种情况，可以用副标题对主标题作进一步具体说明：① 标题语意未尽，确有必要补充说明其特定内容。② 系列报道文章或是分阶段所得的研究成果。③ 其他有必要用副标题作为引伸或说明者。典型实例见图 11-1。

11.3.2 作者署名

署名（Author），一是为了表明文责自负，二是记录作者的劳动成果，三是便于读者与作者联系及文献检索（作者索引）。署名可以是个人作者，也可以是合作者或团体作者。作者名需真实姓名，不得用笔名、化名，不带头衔或职称，署名在文章总标题下一行。

署名原则：① 在选定课题和制定研究方案中做出主要贡献的全部或主要研究参加者。② 论文的讨论或执笔者。③ 对论文全部内容具有答辩能力者。

论文作者应同时具备以上三个条件。不够署名条件但确实对研究成果有所贡献者可作为“致谢”中的感谢对象。

11.3.3 作者单位与个人信息

作者和单位（Address）是作者的重要信息之一。一般在论文题名下列出所有作者姓名，工作单位写在作者下一行。作者工作单位必须用全称标注，包括作者单位、地址、邮编、国家等。若作者并不永久在一个单位工作，应署上作者现在通讯处和永久通讯处。

根据国家统计源的需要，有些刊物要求注有通讯作者的出生年月、性别、学位、职称、研究方向和通讯地址等。此外，如果论文有产出的资助背景，还应注明基金项目名称并在圆括号内标出项目编号，实例见图 11-1。

11.3.4 摘要及图文摘要

摘要（Abstract）又称文摘、概要、内容提要，是文章内容的缩略而又准确的表达形式。摘要应具有独立性和自明性，并且拥有与文献同等量的主要信息，即不阅读全文，就能获得必要的信息。其基本要素包括研究目的、方法、结果和结论。具体地讲就是研究工作的主要对象和范围，采用的手段和方法，得出的结果和重要的结论，有时也包括具有情报价值的其他重要信息。典型实例见图 11-1。

一篇完整的论文都要求写随文摘要，摘要的主要功能：①让读者尽快了解论文的主要内容。②为科技情报文献检索数据库的建设和维护提供方便。科技论文的摘要一般有报道性摘要（信息性摘要）、指示性摘要、报道指示性摘要等 3 种形式。

摘要写作注意事项：①应排除本学科领域已成为常识的内容。②不重复题名中已有的信

息。③结构严谨、表达简明、语义准确。④一般不用数学公式和化学结构式，不出现插图、表格。⑤要使用规范化的名词术语。⑥不用引文。有些缩略语、略称、代号、首次出现时加以说明。⑦用第三人称。

目前很多国内外期刊要求图文摘要，使得论文核心内容或创新点一目了然。典型实例见图 11-2。

科学通报 2011 年 第 56 卷 第 17 期：1360 ~ 1366
论 文
www.scichina.com csb.scichina.com
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS

白蛋白锌卟啉结合体光解水产氢性能

朱永峰，何玉凤，王荣民*，李岩，宋鹏飞

生态环境相关高分子材料教育部重点实验室，甘肃省高分子材料重点实验室，西北师范大学化学化工学院，兰州 730070
* 联系人，E-mail: wangrm@nwnu.edu.cn

2010-11-01 收稿，2011-01-14 接受
教育部新世纪优秀人才支持计划(NCET-06-0909)、国家自然科学基金(20964002)和甘肃省科技支撑计划(1011GKCA017)资助项目

摘要　将难溶性的锌卟啉(ZnTpHPP)与牛血清白蛋白(BSA)结合，制得一类新型水溶性生物高分子金属卟啉配合物(BSA ZnTpHPP)．通过紫外可见光谱(UV-Vis)、圆二色谱(CD)及非变性聚丙烯酰胺凝胶电泳(Native-PAGE)对BSA-ZnTpHPP的结构进行了表征，发现二者以配位键结合，BSA 与锌卟啉以较低比例结合时蛋白质二级结构保持．考察了 BSA-ZnTpHPP 的光敏感性，发现 BSA-ZnTpHPP 在光照条件下易变成三重激发态，可以将电子转移给甲基紫精(MV^{2+})．以三乙醇胺(TEOA)为电子供体，甲基紫精(MV^{2+})为电子中继体，以 BSA-ZnTpHPP/MV^{2+}/TEOA/胶体 Pt 四组分体系考察了 BSA-ZnTpHPP 的光诱导水解产氢性能，结果表明，这类水溶性生物高分子金属卟啉光敏剂具有良好的光解水产氢性能．

关键词
生物高分子
光敏剂
金属卟啉
白蛋白
电子转移反应
产氢

图 11-1　研究论文的前置部分

化学进展，2015 年 8 月第 27 卷 第 8 期

基于蛋白质骨架的人工水解酶的理性设计

赵媛，曾金，林英武*

2015, 27(8): 1102-1109 | DOI: 10.7536/PC150232

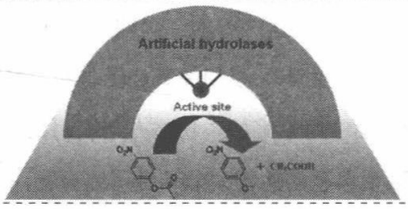


图 11-2　图文摘要示例

11.3.5　关键词

关键词（Keywords）是指那些出现在论文标题、摘要与正文中，能够表达论文主题内容且具有实质意义的规范化的、带关键性的、可以作为检索“入口”用的词语。典型实例见图 11-1。

关键词的作用：① 供读者用“扫描”方式阅读，可以帮助读者节省时间。② 使读者通过关键词对一篇文章起到“一目了然”的作用。③ 是文章的重要检索点。读者可以通过关键词先查到文章的线索，再到科技期刊上查找文章。

选取关键词时，数量一般选 3～8 个为宜。一般将论文内容中的核心词抽出，用分号隔开。

11.3.6　英文标题、作者、单位、摘要、关键词

根据联合国教科文组织规定：“全世界公开发表的科技论文，不管用何种文字写成，都必须附一篇短小精悍的英文摘要”。我国现有的“公开发行”或部分“限国内发行”的学术刊物，也都在中文摘要（或全文）之后，加排英文标题、作者、单位、摘要、关键词。目的是提高档次，扩大对外学术交流。目前，化学化工期刊论文都有英文标题、作者、单位、摘

要、关键词。如图 11-3 所示。

Albumin/zinc porphyrin conjugates for photosensitized reduction of water to hydrogen

ZHU YongFeng, HE YuFeng, WANG RongMin, LI Yan & SONG PengFei

Key Laboratory of Eco-Environment-Related Polymer Materials of Ministry of Education, Key Laboratory of Polymer Materials of Gansu Province, College of Chemistry and Chemical Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China

A novel water soluble biopolymer metalloporphyrin complex (BSA-ZnTpHPP) was prepared by combination of insoluble meso-tetra(4-hydroxyphenyl) porphyrin zinc complex (ZnTpHPP) and bovine serum albumin (BSA). The complex was characterized by UV-Vis spectroscopy, circular dichroism, and native polyacrylamide gel electrophoresis. The secondary structure of BSA was maintained after coordination of the metalloporphyrin complex at a low ratio. The photosensitivity of BSA-ZnTpHPP was also investigated. Its fluorescence was quenched by methyl viologen (MV^{2+}), which suggests that photo-induced electron transfer occurs from BSA-ZnTpHPP to MV^{2+} in the BSA-ZnTpHPP/MV^{2+}/triethanolamine (TEOA) system. Under light, BSA-ZnTpHPP was easily excited to the triplet state, and then transferred an electron to MV^{2+}. The BSA-ZnTpHPP/MV^{2+}/TEOA/colloidal Pt system was applied to photosensitized reduction of water for preparation of hydrogen. The water-soluble biopolymer metalloporphyrin complex was an excellent biopolymer photosensitizer.

biopolymer photosensitizer, albumin, metalloporphyrins, photoinduced electron transfer reaction, hydrogen production

doi: 10.1360/972010-1508

图 11-3 英文标题、作者、单位、摘要、关键词

11.3.7 分类号

分类号亦称中图分类号，通常是指《中国图书馆分类法》或《中国图书资料分类法》中的分类号。分类号是分类语言的文字表现，功能与主题词一样，同属于情报信息检索语言。如果一篇论文涉及到多学科内容，可以同时给出几个分类号，但主次分类号须按先后顺序排出。部分刊物，无需提供分类号。常用图书分类号见第 2 章。中图分类号一般在摘要和关键词下一行给出，如图 11-4 所示。

具有模拟 SOD 功能的大分子*

裴菲 何玉凤 李晓晓 王荣民** 李刚 赵婷婷

（生态环境相关高分子材料教育部重点实验室，西北师范大学化学化工学院，兰州 730070）

摘要：生命活动中用于维持生物体内超氧阴离子自由基动态平衡的超氧化物歧化酶 (Superoxide dismutase, SOD）是一类金属酶，属于典型的生物大分子金属络合物，因其在生命活动中所起的重要作用而倍受关注。目前，有关……。合成高分子模拟 SOD 的工作主要集中于高分子接枝金属配合物的研究，其中典型的合成高分子有聚乙二醇（Polyethylene glycol, PEG）…… 和一些嵌段共聚物，其抗氧化活性与金属配体有关，是一类潜在的抗癌药物。

关键词 超氧化物歧化酶 高分子抗氧化剂 大分子 酶模拟

中图分类号：O636; O629; Q51 文献标志码：A 文章编号：1005-281X(2013)02/3-0340-10

图 11-4 分类号实例

11.3.8 前言

前言（Introduction）又叫引言、导言、绪言、绪论等。它是论文主体部分的开端，向读者解释论文的主题、目的和课题的研究背景、目的、内容、方法、范围及其重要性。

撰写要求：①开门见山，突出重点。②言简意明，条理清晰，容易理解。典型实例如图 11-5 所示。

11.3.9 正文部分

正文（Main body）是论文的核心部分。引言的中心内容是提出问题，正文的中心内容就是分析问题和解决问题。主要包括：研究对象、材料（原料）、实验（或计算）方法、仪器与测试方法、数据处理和分析、结果讨论等。

实验研究性论文的正文一般包括：实验部分、结果与讨论。

能源和环境是困扰当今及未来人类发展的关键问题 ，传统的化石能源不可再生 ，同时对环境造成很大的污染. 在新型能源中，氢能[1]因具有无污染、碳的零排放、可再生等特点，被普遍认为是一种最有吸引力的替 代能源[2]. 在诸多制氢方法中 [3], ……而大部分人工合成的金属卟啉难溶于水,……应用受到很大限制[19,20]. 本文将合成的水难溶性金属卟啉 ，即中位-四(4-羟基苯基)卟啉锌配合物 (ZnTpHPP)与水溶性牛血清白蛋白 (BSA)结合， 制得了一类新型的水溶性生物高分子光敏剂， 并将其应用于光解水产氢体系.

图 11-5　前言实例

(1) 实验部分 (Experimental)[材料和方法 (Materials and methods)] 实验部分包括测试仪器的型号、生产厂名或公司名、测试条件和精度；所用材料、试剂的纯度和纯化方法；所用的标准技术和方法；凡已见报道的实验，只需列出参考文献。实验注意事项应予注明。理论计算中采用的计算程序、来源及计算机型号、语言应予注明。

撰写时应注意：①实验方法可重复进行，并能得出同样或近似的结果，这是科学实验的特点之一。②涉及保密和专利的内容不要写进去。③技术上的要害问题应含而不露，引而不发。④写进报告的数据和方法过程，必须有原始记录，并且任何时候都不得改变。根据论文的具体情况决定是否需要这部分内容。

(2) 结果与讨论 (Results and Discussion) 对于以实验为研究手段的论文和以调查研究为主的论文，应对所测得的数据和所观察到的现象加以有序的描述，并将其中的一些内容制成便于分析（讨论）的图或表，有的还要拍成照片。

撰写时应注意：①选取数据，实事求是。②描述现象要分清主次，抓住本质。③图和表要精心设计、制作，使人一目了然，看出规律。

插图作为一种辅助手段，可以形象、直观地表达技术内容，经常起到用文字代替不了的作用。插图有各种曲线图、构造图、示意图（或模式图）、框图、流程图、照片等。曲线图结构见图 11-6。

三线表是有线表的一种，只有 3 条线：顶线、底线和栏目线，因此称为“三线表”。三线表中的顶线和底线通常为粗线，栏目线为细线。三线表克服了传统有线表的缺点，几乎保留了传统有线表的全部功能，使表格更为简洁。科技期刊一般采用三线表。其构成要素如图 11-7所示。

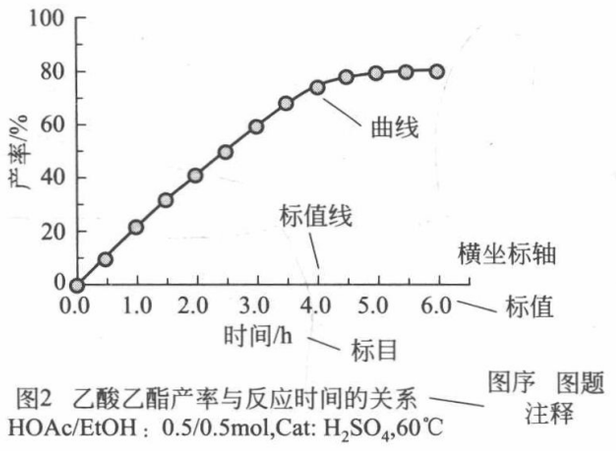


图 11-6　曲线图的结构

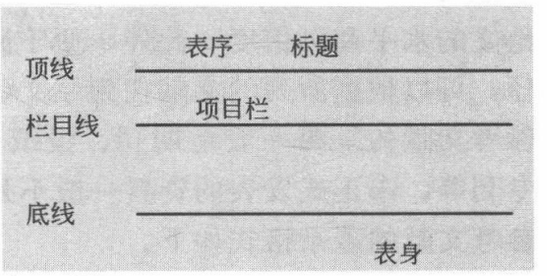


图 11-7　三线表的构成要素

讨论是指从理论（机理）上，对已有结果加以解释，阐明自己的新发现或新见解。分析讨论问题必须以事实为基础，以理论为依据，不能主观臆断。公式推导要严密，假说的产生也要有一定的事实和理论为依据，要有逻辑性。

撰写讨论时应注意：① 与其他文献上同一问题进行比较。② 没有比较的新发现，要强调指出。③ 对发现问题的实用性、有效性提出自己的见解，提出本研究不足之处和需要进一步研究的方向与问题。④ 讨论时，引用别人的文献也必须在引用文献后加括号，注明原作者的姓名和文章的年代。有些则要求文中用上标标序，文后标注对应参考文献。典型实例见第 3 章表 3-2。

11.3.10 结论

结论（Conclusion；Summary）是学术论文的收尾部分，是围绕本论所作的结束语。它是在理论分析和实验结果的基础上，通过严密的逻辑推理而得出的富有创造性、指导性、经验性的结果，是作者认识上的升华。其基本的要点就是总结全文，加深题意。

主要内容包括：论文研究结果说明了什么问题，得出了什么规律，解决了什么理论和实际问题。

撰写时应注意：对于新发现、创新见解的表达要肯定、准确。

也有很多文章没有单独的结论，有的是以文中的小标题呈现，有的与“讨论”放在一起，夹叙夹议的，要区别情况对待。典型实例见第 3 章表 3-2。

11.3.11 致谢

致谢（Acknowledgement）是作者对论文的指导者、协助者，特别是对贡献很大的帮助者，一般单独放在“结论”之后，参考文献之前，以最简单的词句表示感谢。

致谢对象和范围：①为完成论文工作提供指导帮助的人员；②对资助研究工作的学会、国家科学基金会、合同单位，以及其他组织或个人。

常见句式：“感谢……基金资助”“本文曾得到×××帮助（赞助、指导、修改），谨此致谢（特此致谢或深表谢意）”。被致谢人可直书其名，也可写敬称，如×××博士、×××教授等。典型实例见图 11-8。

致谢: 国家自然基金的资助(No.123456)；化学化工学院测试中心结构分析上的协助。

Acknowledgements: We appreciate the help from Prof. Dong C.M. (Northwest Normal University, China) for the identification of the original plant. We are also thankful to Profs. Wang J.Q. and Zhu W.G. (Northwest Normal University, China) for their help in the NMR spectra measurement.

图 11-8 致谢实例

11.3.12 参考文献

在科技论文中，凡是引用（或参考）前人文献的数据、材料和论文等，均应按文中出现的先后顺序给予标明。著录参考文献（References）不仅反映作者的科学态度和求实精神，表示作者对他人成果的尊重，而且反映出作者对本课题的历史和现状的了解程度，便于读者衡量论文的水平和可信度。此外，便于读者了解该领域的情况，是读者进行追溯性检索的有效途径，可以根据所列的文献找到原文。也便于评审人员查找原文，认真审稿。

参考文献的来源一般是期刊、报纸、资料汇编、技术报告、专著、档案资料、学位论文、专刊等，未正式发表的资料一般不列入。

参考文献的著录格式如下。

专著：作者．书名．版本（第一版不必标注）．出版地：出版者，出版年：书页码．

连续出版物：作者．题名．刊物名．出版年，卷（期）：页码．

实例如下：

[1] R.-M. Wang, Z.-F. Duan, Y.-F. He, Z.-Q. Lei. “Heterogeneous catalytic aerobic oxidation behavior of Co-Na het-

erodinuclear polymeric complex of Salen-crown ether". *J. Mol. Catal. A: Chem.*, 2006, 260: 280-287. (期刊论文)

[2] 谢昕，李鑫，王荣民．高取向聚对苯二甲酸乙二酯纤维的热收缩应力．高分子学报，2006，(3)：536-540. (期刊论文)

[3] 王荣民 主编．化学化工信息及网络资源的检索与利用．北京：化学工业出版社．2003：199. (专著)

[4] R. Guglielmetti. Photochromism, Molecules and Systems. Ed. by H. Durr & H. Bouas-Laurent. Amsterdam: Elsevier. 1990: 314. (专著)

[5] J. A. Christopher. Progress in Zeolite and Microporous Materials, Studies in Science and Catalysis. Vol. 105, Ed. by H. Chon, S. K. Ihm, Y. S. Uh. Amsterdam-Lausanne-New York-Oxford-Shannon-Tokyo: Elsevier, 1997: 1667. (专著)

[6] A. Benninhoven (Ed.). Ion Formation from Organic Solids. Proceedings of the 2nd International Conference. Berlin: Springer-Verlag, 1983: 234. (会议录)

[7] L.-G. Zhu, Ph. D. Thesis, Zhejiang University, Hangzhou, 1995 (in Chinese). (学位论文)
朱利国．浙江大学博士论文．杭州，1995. (学位论文)

[8] A. Abraham. WO 96 14270, 1996 [Chem. Abstr., 1996, 125, 37381]. (专利)

注意：在初次撰写论文时要写清楚所有作者和标题。因不同刊物具体要求不完全一致，投稿时根据具体投稿的期刊投稿须知缩减即可。

11.3.13　附录

附录包括其他对正文有补充说明的功能，但不便列入正文部分的资料以及图表。如中间体的表征谱图。

11.4　科技论文撰写知识网站

学术论文有多种类型，相关内容可在百度百科（baike.baidu.com）中输入“学术论文”“论文写作”“论文范文”“参考文献”“综述论文”等查阅相关信息。

不同领域或研究方向的学术期刊，对论文撰写的要求各不一样，如各部分排列顺序、参考文献著录格式等。目前，Internet 上有许多介绍各种学术论文背景知识与撰写方法的中英文网站，如中国知网知识空间，有一些论文写作知识与经验。如：①论文的写作要求、流程与写作技巧（www.cnki.com.cn/delivery/lunwen-ruhexielunwen-0.htm）；②科技论文格式和写作技巧（www.cnki.com.cn/delivery/lunwen-kejilunwen-2.htm）；③教学论文的三种类型及其写作方法（www.cnki.com.cn/delivery/lunwen-jiaoxuelunwen-6.htm）。

也有一些介绍论文撰写经验的网站，如 MedSci（www.medsci.cn/sci/）。

有关英文论文（Paper、Essay、Thesis）的撰写请参阅网页：Writing Guide for Chemistry(www.chem.orst.edu/writing/WritingGuide2000.htm)；Writing the Chemistry Paper (www.dartmouth.edu/～rwit/)；Writing Research Papers(www.ruf.rice.edu/～bioslabs/tools/ report/reportform.html)。也可以下载电子版 A Brief Guide to Writing in Chemistry (http://chemistry.kenyon.edu/getzler/08F-CourseFiles/Brief GuideWritingChemistry.pdf)。

11.5　科学研究论文简介

研究性论文（Research Paper）是对在科学实验过程中获得结果的总结，报道学术价值显著、实验数据完整、具有原始性和创新性或社会效益和经济效益大的研究成果。

撰写要求：① 要有尊重事实，坚持实事求是的科学态度。② 要注意论点鲜明，结构严

谨。③ 采用国家统一的规范化名词和专业术语。④ 在内容和文字方面力求简明。

11.5.1 科研论文类型

科学研究论文从内容上分为实验性研究论文和理论性研究论文；从形式上分为研究专题、研究论文、研究简报、研究快报（研究通讯）等。

（1）研究论文　报道学术价值显著、实验数据完整、具有原始性和创造性的研究成果，全文包括图、表、参考文献和中、英文摘要。

（2）研究通讯、研究快报　迅速报道学术价值显著的重要研究工作最新进展，全文有字数或幅面限制。以研究通讯发表的文章，待进一步研究工作结束后，仍可以研究论文形式重新发表。

（3）研究简报　主要报道阶段性的研究成果，全文有字数或幅面限制。

（4）研究专题　系统介绍作者从事某一研究领域的工作及取得的学术成就。其格式类似综述论文。

11.5.2 综述论文

综述论文在纵的方向上，能全面系统地反映研究对象的历史、现状和发展趋势；在横的方向上，则能全面系统地反映主要国家、主要科研机构或主要科学家、生产单位现阶段的实际研究水平。综述也是作者的一种研究成果，不是资料的简单罗列，是一种再创造。

综述论文的组成结构包括：论文标题、作者、单位、地址、摘要、关键词、引言、正文、结束语、致谢、参考文献等。

综述论文常用标题："××进展""××概况""××动态""××现状""××发展动向"。结束语部分包括本文课题的重要意义；存在的主要问题；展望。

综述论文的撰写实例见第 3 章表 3-3。

科技述评，也叫科技评述、科技评论。述评是对一特定课题，全面搜集国内外有关文献，经过加工、整理、鉴别、分析、综合，然后根据国家科技政策和学科理论，进行描述和评论的一种信息研究成果的文体写作。

述评的特点是有述、有评。述评性论文一般由在本行业有多年研究经历的专家撰写。

11.5.3 实验与理论研究论文

实验研究性论文的组成结构包括上述学术论文基本要素，即论文标题、作者、单位、地址、摘要、关键词、前言、正文部分、结论、致谢、参考文献、附录。实验性研究论文组成结构实例见第 3 章表 3-2。

理论研究论文基本组成和实验研究论文基本相同，没有实验部分，一般说明理论方法。

11.6 教学研究论文简介

教学论文是教师教学经验和教学研究成果在写作上的表现，简单说，就是教师将平时教学中的一些经验或研究进行总结，并综合运用综合理论知识进行分析和讨论。一般情况下，教学论文的基本框架与学术论文一致。但是，教学论文没有固定的结构格式，这是由于教学及研究的课题、研究过程和方法、逻辑推理，以及研究成果有所不同，因此，教学论文的写作形式也不尽相同。

11.6.1 教学研究论文类型

由于教学论文本身的内容和性质不同，研究领域、对象、方法、表现方式不同，教学论文有不同的分类方法。通常有以下几种：

（1）教育理论研究　如“科学教育研究”“教学研究”等。

（2）教学方法与教学技术研究　如“实验与创新思维”“实验教学与教具研制”“计算机辅助教学”“教学设计”“教学研究与改革”等。

（3）教学经验与知识介绍　如“国外化学教育”“化学史与化学史教育”“化学与生活”“国内外信息”“今日化学”等。

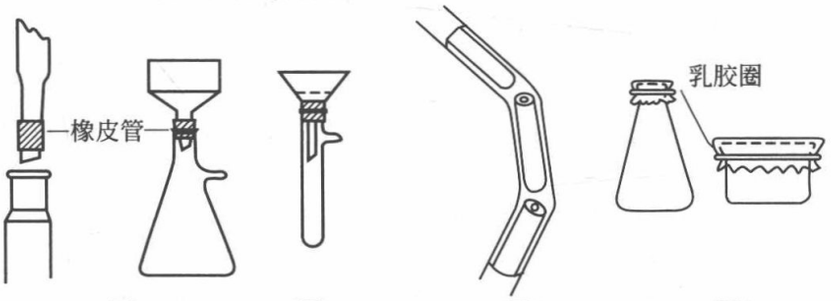
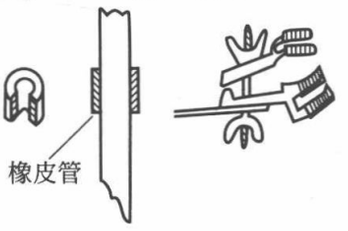
（4）课程与教材体系　如“教学设计”“教师论坛”“课程与教材研讨“等。

（5）应试　如“化学奥林匹克”“高考改革”“复习指导”“问题讨论与思考”“自学之友”“习题与解题思路”“考试研究”等。

11.6.2　教学技术研究论文

教学方法与教学技术研究论文的组成结构与学术研究论文有相似之处。该类论文一般情况下，无摘要及关键词（因不同期刊而定）；主要在结果讨论中展开论述。参考文献可有可无。表 11-3 为教学方法与教学技术研究论文的组成结构与实例。

表 11-3　教学方法与教学技术研究论文的组成结构与实例

组成结构	实例[化学教学，1998，(2)：11]
论文标题	橡皮管在化学实验中的多种用途
作者	王荣民，何玉凤，王云普，刘玉阳
单位、邮编	西北师范大学化学系　兰州　730070
引言	橡皮管是化学实验中必不可少的材料，常常被用作导管，固定温度计，我们在化学实验的教学实践中，利用橡皮管具有易于连接、富有弹性、不易损坏等特点，将橡皮管改造，给实验带来很多方便，拓宽了橡皮管在实验操作中的用途
正文部分	(1)转换接口　有些密闭性要求较高的实验，常需标准口或磨口玻璃仪器，当手头缺少磨口仪器时，可以用橡皮管实现磨口与非磨口仪器的连接，从而增加气密性。如图 1 所示，……  图1　图2　图3　图4 (2)实现抽滤瓶一瓶多用　抽滤是有机实验中经常遇到的操作，当抽滤瓶单一、根据产品量的多少用不同的漏斗进行抽滤时，需根据漏斗下端的粗细配一橡皮塞并打孔，既费时又费力，这时，……，如图 2 所示，当使用标准口抽滤时更为方便 (3)用作抽真空管　……如图 3 所示 (4)用做橡皮筋　……如图 4 所示 (5)保护滴定管、玻璃电极等玻璃仪器　……如图 5 所示  图5 (6)固定活塞　实验室中许多仪器带有玻璃活塞，如酸式滴定管、分液漏斗、滴液漏斗等，在实验中常需将其活塞固定，否则会不慎打碎或给实验带来误差。传统固定活塞的方法是用橡皮筋“五花大绑”，这样会因橡皮筋的拉力使活塞旋转不灵活。如剪一截粗细相近的橡皮管套在活塞较小的一端，既方便，又可防止活塞脱落

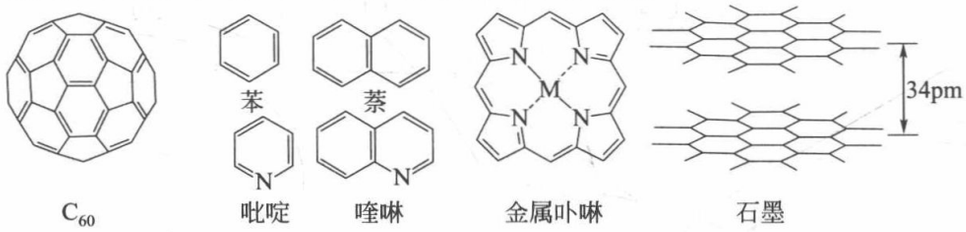
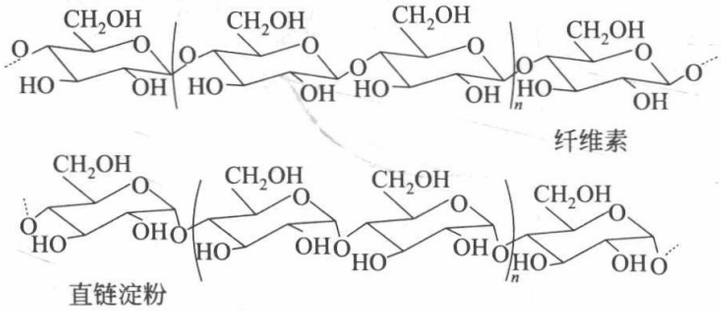
续表

组成结构	实例[化学教学，1998，(2)：11]
正文部分	(7)用作水龙头垫圈　水龙头闭合不严的主要原因是水龙头垫圈磨损，维修时需专门配套的垫圈，若手头无专用垫圈时，可将橡皮管纵向切开，从其上剪一大小合适的垫圈，也能起到很好的密封效果
结束语部分	
参考文献	

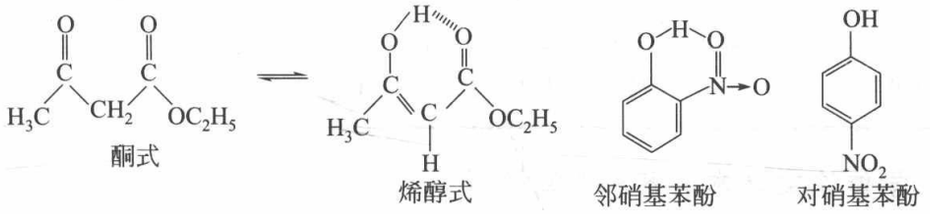
11.6.3 知识介绍论文

知识介绍论文与综述论文相似。该类论文一般无摘要及关键词（因不同期刊而定），参考文献可有可无，论文内容可以是新知识介绍，也可以是有关学科、专业发展动向的叙述和总结。表 11-4 为知识介绍论文组成结构与实例。

表 11-4　知识介绍论文组成结构与实例

组成结构	实例[化学教育，1998，(3)：44]
论文标题	五、六元环结构对有机化学的贡献
作者	王荣民[1,2]，何玉凤[1]，魏邦国[1]，王云普[1]，李树本[2]
单位、邮编	([1] 西北师范大学化学系，兰州，730070) ([2] 中科院兰州化物所 OSSO 国家重点实验室)
引言	以五、六元环结构存在的有机化合物 自然界中的万物繁衍生息，在不断的进化过程中，选择并造就了许多美妙的具有五、六边形的几何体作为永恒的造型。譬如老幼皆知的蜂房是由许多六角形的小室构成的[1]，就充分利用了空间和材料。曾在 1985 年，英国 Sussex 大学的 N. W. Kroto 等人[2]在激光汽化石墨实验中偶然发现了富勒烯 C_{60}（或称巴基球、足球烯），一时轰动了全世界，并因此与 R. F. Curl 及 R. E. Smalley 共同获得 1996 年诺贝尔化学奖。其结构最初就是由五、六边形拱顶的建筑物联想而获得，并用建筑师名字命名的。近十年内，又有 Kratschmer、Haward 等[3]许多化学家投入了富勒烯 C_{60} 的研究，经 X 射线结构分析表明，富勒烯是由 C_5、C_6 元环构成的球笼状结构，如图 1 所示。实际上作为自然界，尤其对生命界至关重要的有机化合物（包括天然高分子化合物），五、六元环的存在是很普遍的，某些有机反应的中间体、过渡态也以五、六元环形式存在 芳烃与杂环化合物具有代表性，其部分结构如图 1 所示。其中，石墨中的碳原子排列在无数的六边形组成的平面上，形成碳层；为植物生命活动提供能量进行光合作用的叶绿素，及在动物体内运载氧气的血红素的核心结构也是由五、六元杂环构成的金属卟啉的衍生物[4]  图 1　常见具有五、六元环结构的化合物
正文部分	碳水化合物，即作为生物结构材料的纤维素和能源物质淀粉，更是典型的六元环物质，结构如图 2 所示。现代有机分析已表明，碳水化合物中糖类化合物主要以五、六元环的形式存在，大部分醛糖是由五个碳原子和一个氧原子组成的六元环状化合物，大部分酮糖是由四个碳原子和一个氧原子组成的五元环状化合物。构成纤维素、淀粉的基本单元则是具有六元环结构的葡萄糖  图 2　纤维素与直链淀粉的结构

续表

组成结构	实例[化学教育，1998，(3)：44]
正文部分	抛开碳水化合物，再对乙酰乙酸乙酯的结构特点进行分析[5,6]，一般情况下，由于烯醇式结构极不稳定，酮或酯羰基以酮式结构存在，而乙酰乙酸乙酯的烯醇式结构很容易被分离出来。这也是有机化学对五、六元环的选择，即分子内以氢键形成一稳定的六元环化合物，结构如图 3 所示  乙酰乙酸乙酯互变异构现象 图 3　氢键参与的六边形结构 又如邻硝基苯酚分子内很容易形成稳定的六元环状分子内氢键，而不易形成分子间氢键，对硝基苯酚则形成分子间氢键，这就为在苯酚的硝化反应中邻对位产物的分离带来极大的方便 五、六元环结构稳定的原因 由此看来，五、六元环在有机化学中占有举足轻重的地位，大自然为什么要选择五、六元环呢？从五、六元环的结构来看，现代价键理论认为，……，因为各种张力，尤其角张力最小，所以能稳定存在 正是由于五、六元环大到足以不具备角张力，小到足以使闭环成为可能，这一优点，才会受到大自然的如此钟爱 五、六元环结构在有机反应中的应用 许多化学反应的中间体、过渡态也是以五、六元环的结构而存在。……从二元羧酸的脱水反应，进一步说明了大自然对五、六元环的选择。二元羧酸的脱水反应如式 1～式 7 所示。丁二酸和戊二酸单独加热或与乙酐一起加热，则生成五元环和六元环的酸酐；己二酸和庚二酸在加热后生成稳定的五元环酮和六元环酮；…… 五、六元环稳定性差异也被应用于其他化学反应中[9]，如在尼龙 6,6 的改性过程中脱保护反应(如式 9 所示)，就是六元环比五元环稳定的缘故
结论	总之，由于五、六元环的特殊稳定性，使其在自然界，尤其在有机化合物中普遍存在。……，五、六元环结构对有机化学的贡献还有待于进一步验证
参考文献	[1]叶佩根编．动物趣闻集锦．北京：北京工业大学出版社，1991. [2]Kroto，H. W.，Smalley，R. E.，et. al. Nature，1985，318：162. ……

11.7　学位论文与毕业设计说明书

学位论文（Thesis，Dissertation）和毕业设计说明书是学生完成学业的最后一个环节，目的在于总结专业学习的成果，培养综合运用所学知识解决实际问题的能力。因此，学位论文的撰写及答辩和毕业设计说明书是学生取得毕业文凭的重要环节之一，也是衡量毕业生是否达到本专业学历水平的重要依据之一。

学位论文是表明作者从事科学研究取得创造性的结果或有了新的见解，并以此为内容撰写而成，作为提出申请授予相应学位评审用的学术论文。学位论文有学士学位（Bachelor Degree）、硕士学位（Master Degree）、博士学位（Doctor Degree）论文，不同级别的学位论文对论文水平的判定与相关要求见表 11-5。其中，学士论文应能表明作者的确已较好地掌握了本门学科的基础理论、专门知识和基本技能，并具有从事科学研究工作或担负专门技术工作的初步能力。

表 11-5 学位论文各层次的要求对比

项 目	学士(Bachelor)学位论文	硕士(Master)学位论文	博士(Doctor)学位论文
本门学科的基础理论	较好地掌握	掌握坚实	掌握坚实宽广
本门学科的专门知识基本技能	较好地掌握	系统地掌握(并对所研究课题有新的见解)	系统深入地掌握
科学研究工作的能力	初步能力	从事	独立从事
专门技术工作	担负的初步能力	独立担负能力	在科学或专门技术上做出了创造性的成果

11.7.1 学位论文基本内容和撰写要求

完成毕业论文的撰写可以分两个步骤，即选择课题和研究课题。

选题是论文撰写成败的关键。实际上就是确定“写什么”的问题，亦即确定科学研究的方向。一般应遵循的原则：①选择有科学价值和现实意义的课题。②选题时要了解本学科、本课题领域发展的状况。③要根据自己的能力选择切实可行的课题，尤其注意选题宜小不宜大。

对学位论文的研究课题，开展工作与撰写论文的一般程序是：课题选定后检索与获取资料，阅读与研究资料，明确研究主题（或范围），选定材料与方法，开展实验工作，分析结果与总结，撰写论文。总之，撰写毕业论文是一种复杂的思维活动，对于缺乏写作经验的学生来说，有一定难度。因此，一定要虚心请教指导教师。

学位论文（或学年论文）作为单行本时需要封面。封面上一般包括以下内容：① 分类号；② 密级：按国家保密条例分为机密、秘密、公开和内部四级（公开发行的可以不标注密级）；③ 题名和副题名；④ 申请学位级别：如博士、硕士、学士；⑤ 作者署名；⑥专业名称：主修专业名称；⑦ 工作完成时间：包括报告、论文提交日期、学位论文答辩日期、学位授予日期等。

正文部分可分不同章节，一般有综述部分和实验、研究部分，每章可以是独立的一篇学术论文。正文部分是学位论文的主体，一般包括：实验装置、测试方法、理论分析、计算方法以及实验结果分析等。

附录部分：包括附录（如：原始数据、图、表、缩写符号、攻读学位期间发表的论文、个人简历、索引等）、致谢。

论文印制规格及要求因学校而异。其装订格式的排列顺序：封面、目录、论文详细摘要(中、英文摘要)、正文部分、附录部分、封底。

论文中涉及的科技名词术语及设备、元件的名称，应采用国家标准或部颁标准中规定的术语或名称。一些特殊名词或新名词应在适当位置加以说明或注解。采用英语缩写词时，除本行业广泛应用的通用缩写词外，文中第一次出现的缩写词应用括号注明英文全文。

11.7.2 毕业设计说明书

毕业设计说明书是针对工科院校毕业生接受毕业考核而言的。毕业设计与其他学位论文一样，都在有经验的教师指导下进行选题和写作。但题目不宜过大，篇幅不宜太长，解决的问题要具体，注意理论联系实际，能解决生产中的某些关键问题，尽量在前人研究的基础上提出一些新的见解。

毕业设计内容包括以下几点。

(1) 绪论 也称为概论、前言，主要说明设计的目的和意义；设计项目发展简介；设计原理及主要设计指标。毕业设计说明书一般起到解释设计的作用，多数设计说明书都写得简

略。通常用一段较长的文字作绪论，说明设计背景材料、目的、意义、规模及主要技术指标等。

(2) 正文部分　正文部分依设计对象的结果顺序展开，先描述设计对象的结构和几何形状，然后交待主要尺寸和技术指标。关键部分详细说明过程、设计思想和理论依据，并指出本设计的优点所在。结尾可以写点感想，也可以舍去不要。正文部分可包括如下几方面：①设计方案说明。指设计方案论证；设计思想说明及实验验证。②设计计算说明。包括各种重要参数的计算过程和计算结果；列出零部件规格。③使用技术条件。包括使用条例及说明；维护条例及说明。

(3) 附录　包括参考文献；附表、附图及计算机程序等。

11.8　论文投稿

根据论文内容选定刊物，然后根据其具体投稿要求进行打印、投递。不同刊物对投稿有不同要求，可通过相应出版物或网站查阅该刊具体投稿要求。一般论文的发表过程如下：

投稿→审稿↔退修→用稿通知→办理相关费用→出刊→寄送样刊

根据论文的内容和性质选定期刊后，查找拟投稿期刊联系方式（或投稿网址），按编辑部的要求打印（或准备电子版文件），邮寄稿件（或在线投稿），收到期刊（或网站）回执后等待审稿结果。如果论文通过审稿或经修改后录用，按编辑部的要求办理相关费用，包括审稿费、版面费（视不同期刊费用不等）。办理完毕后，论文就会被安排版面并邮寄刊样、给予发表。

11.8.1　纸质版论文投稿与校对符号

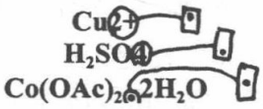
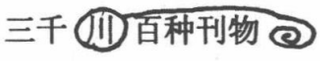
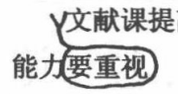
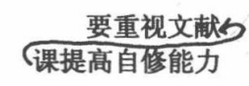
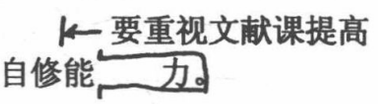
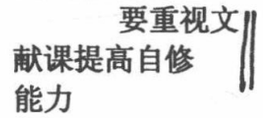
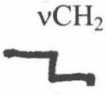
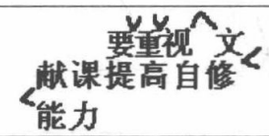
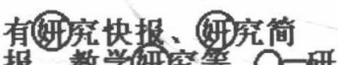
论文发表过程，审稿是关键。一般情况下，高水平刊物审稿周期短，最快在 15 日之内，大部分期刊审稿时间为 3 个月，超过 3 个月可写信催审。通常论文经过初审、复审、终审的审核程序。审核后需要修改的稿件须在规定时间内修改并返回修改稿，附以修改说明。

论文的修改注意修改格式，特别是校对符号的规范使用。校对符号是出版印刷业中文（包括少数民族文字）各类校样的校对工作中通用的符号。国家出版事业管理局于 1981 年发布了我国专业标准《校对符号及其用法》（The proof marks and their application），并于 1982 年试行。该标准中规定的符号共 21 种。表 11-6 列出了一些常用校对符号。

表 11-6　常用校对符号一览表

校对符号	说　明	实例	改正后文字
	改正		申请专利
	删除		有机化学
	增补		无机化学
	换损		文字要清晰

续表

校对符号	说　明	实例	改正后文字
	改正上下角		Cu^{2+} H_2SO_4 $Co(OAc)_2 \cdot 2H_2O$
	转正		三千三百种刊物
	对调		要重视化学文献课
	转移		要重视文献课提高自修能力
	接排		要重视文献课提高自修能力
	另起段		完成了任务。 明年…….
	上移 下移		序号　名称　数量 01　烧瓶　50
	左移 右移		要重视文献课提高自修能力。
	排齐		要重视文 献课提高自修 能力
	排阶梯型		ν_{CH_2}
	正图		
	加大空距 减小空距		要重视文 献课提高自修 能力
	分开		Polymer Chemistry
	保留		有机化学
	代替		有研究快报、研究简报、教学研究等
	说明		化合物

11.8.2　国内刊物在线投稿

目前，越来越多的期刊要求网上投稿，许多期刊已经拒绝传统的纸质函件投稿，只接受网上投稿，相关网站地址参见第 3 章。现以《化学学报》投稿为例进行说明。

首先，进入《化学学报》主页（sioc-journal.cn）后（如图 11-9 所示），点击进入“作者中心”，免费下载投稿须知、论文模板、版权转让协议、单位介绍信模版等。作者可按照投稿须知（诸如稿件形式、投稿手续和联系方式、稿件审理过程、稿件准备等详细信息）准备论文内容，并按论文模板撰写论文。

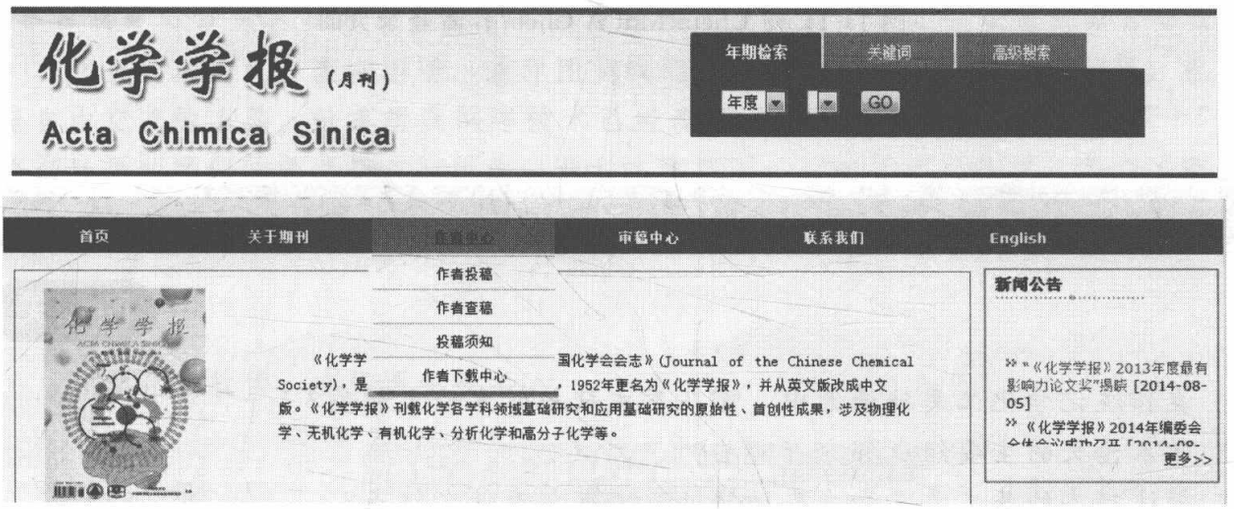


图 11-9　化学学报主页面

然后，从《化学学报》主页（https://mc03.manuscriptcentral.com/hxxb），免费注册账号后登录作者中心，按提示逐步进行网上投稿。投稿成功后，按照网站提示在线完成版权转让协议书，确认并提交。论文审稿期间，作者可以随时登录并查阅审稿进展情况。最后，稿件录用后，办理相关费用，等待论文刊出。

11.8.3　国外刊物在线投稿

现以“J Chem Mol A Chem”刊物为例进行说明。首先进入主页（ees.elsevier.com/molcaa）浏览主要内容（图 11-10），然后点击右侧作者须知（Guide for Authors）查看投稿要求。将论文按要求撰写完成后就可以按提示进行在线投稿（Submit an Article）。

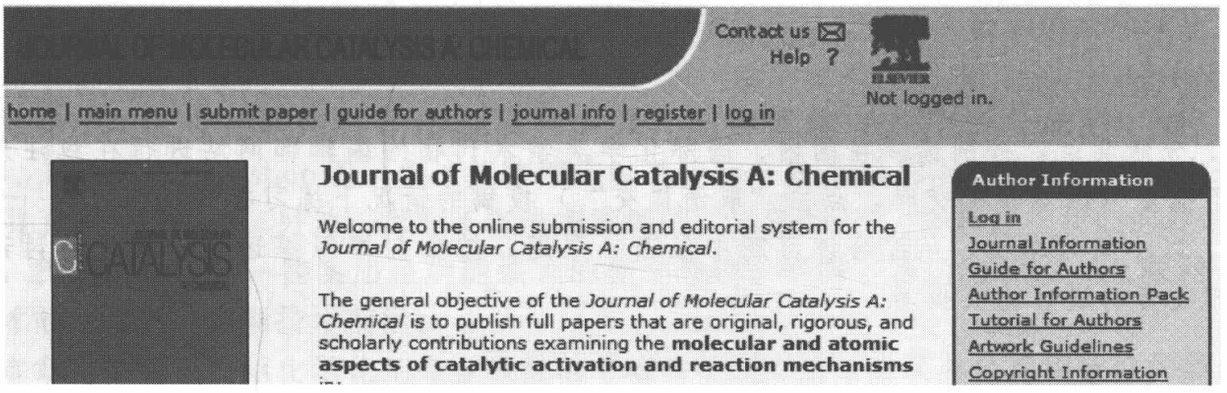


图 11-10　J Chem Mol A Chem 主页

第一次向该期刊投稿时，同样需要先注册（register），记住用户名（username）与口令（password）。然后点击“log in”以作者身份进行登录（图 11-11）。登录后，点击 Submit paper 进行投稿，根据网页提示逐步完成投稿。在投稿过程中可以暂时中断，改日继续剩余步骤；投稿成功后编辑部会给作者发信确认。在等待稿件审稿过程中，作者也可以随时登录

该网站查阅审稿状态。

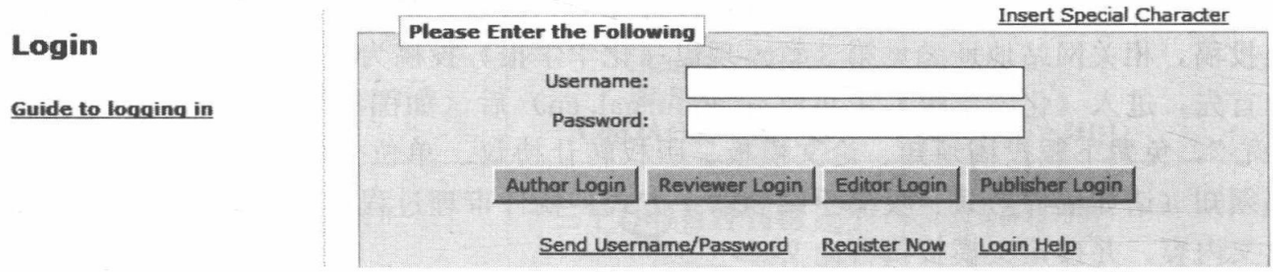


图 11-11 J Chem Mol A Chem 作者登录页面

练 习 题

1. 在传统化学化工文献资源中，哪几类文献与学术论文相关？
2. 学术论文的主要组成部分有哪些？
3. 简述摘要的基本要素和主要功能，图文摘要有什么特点？
4. 论文的结论部分主要阐述什么？
5. 研究性论文的撰写要求是什么？
6. 综述论文具有什么特点？如何写好一篇综述论文？
7. 教学研究论文分哪几种？它们的写作重点分别是什么？
8. 学位论文的基本内容包括哪些方面？
9. 本科生毕业论文（设计）如何选题？

实践练习题

1. 分组尝试：分别选择在国内、国际化学类学术刊物的编辑部网站进行在线注册，在最终不提交（即确认提交时，点击“取消提交”）投稿的情况下练习在线投稿。

2. 以小组为单位，从综合练习题中任选一课题，就如何撰写综述性论文进行讨论，并查阅相关资料进行论文撰写。

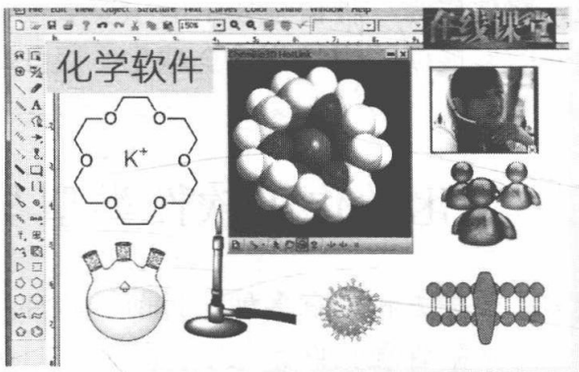
第 12 章　化学化工软件与在线课堂

导　语

化合物结构式、表征图谱、流程图使我们可以形象地认识物质微观世界，也是自由交流的工具。计算机及网络技术已经改变了教与学的方式。“互联网＋”将彻底更新我们的教育模式。因此，通过本章学习，让我们认识化学化工相关软件与网络技术，走在新技术革命的前沿。

关键词

化学化工软件；在线课堂技术。



作为化学工作者，在进行科研与生产实践、教与学的过程中，往往要做一些必要的数据处理、结果总结与表达。尤其是在理论计算、撰写论文、课件制作等过程中，经常要书写各类化学方程式、绘制化学结构式，以及结构优化与计算等，这些工作需要借助化学化工相关软件，才能有效完成。

随着计算机与互联网技术的发展与普及，出现了诸多通用办公软件，如：WPS、Word、Excel、Photoshop 等。但这些软件难以适应化学化工的要求，化学软件的出现为我们提供了很大的便利。另外，目前正在迅速发展的“互联网＋”，即将改变我们的教学模式。因此，我们需要认识一些实用且功能强大的化学软件，同时，认识与使用“互联网＋”技术，才能使我们利用新技术前沿。

本章主要重点介绍化学化工专业软件的下载与使用方法（有关办公通用软件的使用方法可在网上查找，这里不详细介绍），期望对同行在选择、获取、使用软件等方面有所帮助。

12.1　软件的过去与将来

计算机的发明，为我们认识世界、描绘世界提供了物质基础。随着计算机硬件、软件系统的发展，人类利用计算机的程度不断深入，其发展历史大致分为如图 12-1 所示的五个

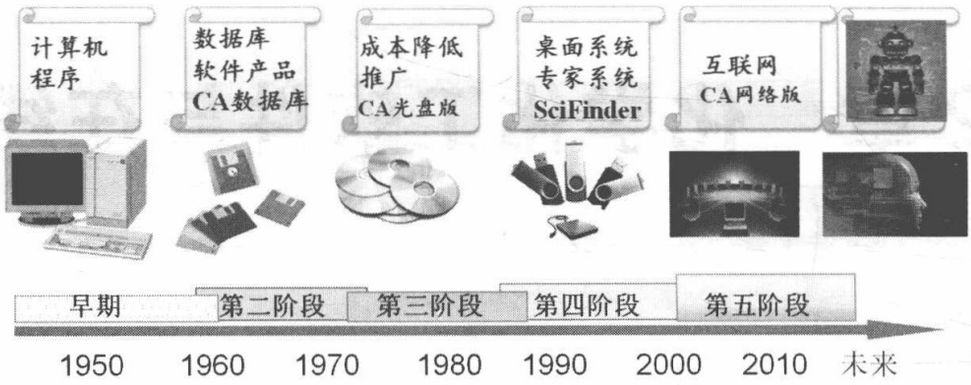


图 12-1 计算机硬件、软件系统的发展

阶段。

在早期阶段，人们认为计算机的主要用途是快速计算，不存在什么系统化的方法。在第二阶段，在线存储的发展产生了第一代数据库管理系统。20 世纪 70 年代中期开始的第三阶段，计算机系统的复杂性提高了，微处理器的出现和广泛应用，孕育了一系列智能产品。第四阶段，强大的桌面系统和计算机网络迅速发展的时期。第五阶段，互联网普及，基于手机软件的迅速普及。

随着信息技术的发展，软件作为一种信息技术的主要载体日益渗透到社会与个人生活的各个方面和各个层次。软件的发展朝着网络化、全球化、服务化的方向发展，即将进入“互联网＋”时代。

12.2 化学化工软件类型与用途

化学化工软件种类较多，分类方式也有多种。目前，软件主要有化学结构绘制软件、数据处理软件、图谱解析软件、文献管理软件、化学实验软件、化学工程软件、生命化学软件等类型。下面以各种软件在化学化工研究中的用途分类介绍。

12.2.1 化学结构绘制软件

绘图软件是可以描绘化合物的结构式（包括三维结构）、化学反应方程式、化工流程图、简单的实验装置图、进行化学计算等的软件。常见的绘图软件：

（1）ChemOffice 是美国剑桥公司开发的一款优秀的化学软件，它集强大的应用功能于一身，目前正被无数化学相关工作者使用（www. cambridgesoft. com）。在 12.4 将详细介绍。

（2）ChemWindow（www. bio-rad. com） 出自 Bio-Rad 实验室，软件包括三类常用图形的模板，包括 4500 种以普通命名法和商品名称组织起来的有机物和药物的分子结构，130 种常用实验室玻璃仪器图形和 250 种工艺流程符号。

（3）ACD/Chem Sketch（www. acdlabs. com） 全免费软件，是通用化学制图与画结构软件，该软件包可单独使用或与其他 ACD 软件共同使用。能检查并生成有机结构的最常见的异构体。软件里提供了数千种常见结构式的命名，而且使用标准的 IUPAC 命名法。利用 ChemSketch 丰富的模板，强大的绘图功能和导入、导出功能，可以制作出各式各样的图形、图像素材，使其具有一定的创作兼教育性。

（4）Chem4-D Draw（www. cheminnovation. com） 是 Chem Innovation 软件公司的产品。除了化学结构的绘制功能，该软件集成了 Nam Expert 和 Nomenclater。

（5）ISIS/Draw（mdl-isis-draw. software. informer. com/） 是一个智能的化学绘图软

件包，著名的绘制有机化合物结构的软件。

（6）3DS Max（www. autodesk. com/）　3D Studio Max，简称为 3DS Max 或 MAX，是 Discreet 公司开发的（后被 Autodesk 公司合并）基于 PC 系统的三维动画渲染和制作软件。在 12. 5 节将详细介绍 3DS Max。

（7）化学金排（www. kingedu. net/；zhangzc. jahee. com）　是专门为化学工作者定制基于 Word 平台的一套专业软件，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、反应条件的输入、化学常用符号的输入、化学仪器、化学装置、图片图形调整等许多实用功能。软件还提供了 PowerPoint 模块，为制作化学课件带来便利。

12. 2. 2　数据处理软件

目前常用的科技绘图及数据处理软件有 Excel、Origin、SigmaPlot 等。

（1）Excel　是微软 Office 系统软件之一，网上也可查到大量有关使用方法与技巧。

（2）Origin　是美国 OriginLab 公司开发的图表制作和数据分析软件，下载试用和技术支持可访问网页（www. originlab. com）。Origin 容易掌握且兼容性好，其主要有两大类功能：图表绘制和数据分析。网上（如 www. docin. com/p-116707491. html）也能找到有关使用方法与技巧。

（3）SigmaPlot　绘制图形的精美程度超过 Excel 与 Origin，操作方便，适合于科技工作者。在众多的国外顶级知名杂志期刊如 Science、Nature 等发表论文中的精致细腻的统计图形大多出自 SigmaPlot。SigmaPlot 与 Microsoft Office 系列全面兼容。下载试用和技术支持可访问网页 www. sigmaplot. com。

12. 2. 3　图谱解析软件

目前，常用表征手段，如红外光谱仪、紫外-可见光谱仪、核磁共振仪、光电子能谱仪等，仪器自身配备了数据处理软件，可以将数据转化为谱图。我们也可以将数据提取，然后使用通用软件（如 Excel、Origin 等）处理。也可以用一些专业软件处理，具体如下。

（1）核磁数据处理软件　包括 NUTS、MestRe-C、Gifa 等几种软件。NUTS 可以处理一维、二维核磁数据，其功能包括付立叶变换、相位校正、差谱、模拟谱、匀场练习等几乎所有核磁仪器操作软件的功能，为收费软件，其演示版可以在相关网站（www. acornnmr. com）下载。MestRe-C 为处理一维核磁数据的免费软件，功能完善。可查看相关网页（mestrelab. com/）。

（2）红外光谱软件 OMNIC（www. thermonicolet. com）　是 Nicolet 公司发行的红外软件，在 PC 机上广泛使用，可以读取和处理世界上大多数厂家的红外图谱，功能强大。

（3）电镜图粒径统计软件 SmileView（www. jeol. co. jp/cn/）　SmileView 是对扫描电镜（SEM）照片进行长度测量、调整对比度、调整明暗等的工具软件。

12. 2. 4　文献管理软件

随着计算机科学的发展，越来越多的专用工具软件可帮助用户轻松完成参考文献的整理和标注。

（1）EndNote（www. endnote. com）　是 Thomson Scientific 公司的官方软件，占用系统资源很小。支持 4000 余种国际期刊的参考文献格式，能直接连接上千个数据库，并提供通用的检索方式，从而提高科技文献的检索效率。一般 EndNote 软件主要用在两个方面：其一是在线搜索文献并导入到 EndNote 的文献库内，建立个人文献库；其二是定制文稿，利用文稿模板直接撰写符合杂志社要求的文章。

（2）NoteExpress（www. scinote. com）　是安装在个人电脑上的一种参考文献管理工具

软件，其核心功能是帮助用户收集整理文献资料，在撰写学术论文、学位论文、专著或报告时，可在正文中的指定位置方便地添加文中注释，然后按照不同的期刊格式要求自动生成参考文献索引。

（3）Mendeley 文献管理软件（www. mendeley. com/） 免费软件，不仅具有上述文献管理软件的绝大部分功能，还有一些突出的优势，如：Mendeley 可自动从 pdf 文件中提取题录、DOI 号等信息。信息不符合时，联网通过 DOI 号，即可自动校正、完善题录信息。Mendeley 数据库将文献条目与 pdf 文件相关联，输入关键词，Mendeley 便会列出包含此关键词的所有文献。如果想看某一作者的论文，只需在 Mendeley 里输入作者名字，搜索后点击对应的 pdf 文件，就可通过 Mendeley 的内置阅读器进行阅读。

（4）CNKI E-learning（www. cnki. net） 是中国知网（CNKI）推出的一个数字化学习与研究平台（www. cnki. net/software/xzydq. htm＃CNKIe-Learning），主要用于文献管理。软件操作界面旨在为您量身定做探究式学习工具，展现知识的纵横联系，洞悉知识脉络，是一款免费软件。

有关文献整理与管理的知识见 10. 2 节。

12. 2. 5 化学实验软件

广泛涉及化学化工的科研、教学和生产等领域的交互式化学实验模拟软件可用于结构检索、结构解析、物性计算，还可以进行合成路线设计。

（1）ChemLab（modelscience. com） 加拿大 Model Science Software 公司开发的一种交互式化学实验模拟软件，可用于结构检索、结构解析、物性计算，是预习实验、演示实验、准备实验、进行危险实验和由于时间原因不能进行实验的理想工具。

（2）LabVIEW（www. ni. com/labview/zhs） 是美国国家仪器公司（National Instruments，NI）推出的虚拟仪器开发平台软件，为用户快捷地构筑自己在实际生产中所需要的仪器系统创造了基础条件。

（3）仿真化学实验室（ccn. mofcom. gov. cn/1015306/p4396522. html） 专门针对中学化学教学而打造的教学平台，也是化学教师的课件制作平台和学生交互式学习的平台。目前，通过第三方机构，如华军软件园（www. onlinedown. net/softdown/4956 _ 2. htm）下载。该仿真化学实验室系列软件由三个模块组成：仿真化学实验室、化学三维分子模型、中学化学百科。如图 12-2 所示。

图 12-2 仿真化学实验室使用界面

12. 2. 6 化学计算软件

计算化学的基本问题就是利用模拟分子的化学结构和性质，并可提供通过实验无法获得

的信息，可快速地通过计算机完成这些工作。

（1）Hyperchem（www. hyper. com）　应用比较广泛的软件，能预测能量、分子结构、频率等。

（2）Gaussian（www. gaussian. com）　使用最广泛的量子化学软件，可用来预测气相和液相条件下，分子和化学反应的许多性质。

（3）MOLCAS（www. molcas. org/）　可用于计算分子结构、键能、化学反应的能垒、激发能（包括自旋-轨道耦合）、振动分辨吸收光谱，以及各种分子特性等。

（4）GAMESS-UK（www. cfs. dl. ac. uk）　电子结构从头计算程序，GAMESS-UK 对英国科研用户免费。还可以免费申请运行于 Macintosh OSX、Windows 和 Linux 的 GAMESS-UK 演示程序，包含了全部功能，对原子数和基函数数目有限制。

（5）ADF（www. scm. com）　基于密度泛函理论（DFT），专门做密度泛函计算的软件。广泛应用于医药化学、材料学等研究及应用领域。特别应用于同类和异类催化，无机化学、重元素化学、生物化学及多种光谱学。

（6）Crystal（www. crystal. unito. it）　研究晶态固体最流行的程序之一。

（7）MOPAC（www. cachesoftware. com）　MOPAC 早先作为免费软件发布，后成为商业软件。世界上使用最广泛的半经验量化程序，用于研究气体、溶液和固体的化学特性，包括 Gibbs 自由能、活化能、反应路径、偶极矩、非线性光学特性以及红外光谱等。它还可以用作结构-特性（或活性）定量的基础，预测生物学及其他特性，包括致癌性、蒸气压、水溶解性、反应率等。

（8）Cache（www. cachesoftware. com）　用于生命科学、材料和化学的计算机辅助化学建模软件包。适用于实验化学家、生物化学家、药物化学家、计算化学研究者以及高等教育工作者。Cache 使用经典和量子力学方法，并有 Dgauss 的图形界面，可以使用密度泛函理论进行计算。

12.2.7　化学工程软件

20 世纪 50 年代中期开始流程模拟软件的研制和开发，到 20 世纪 80 年代，化工过程模拟进入成熟期，模拟软件的开发、研制走向专业化、商业化。包括 gPROMS、PRO/II、ASPEN PLUS、HYSYS Hysys、KBC PROFIMATICS 等，广泛应用于石油化工、电解质、制药、气体处理等相关领域。可以模拟化工过程，用于过程与设备模拟、分析、设计、优化及开停车指导、动态仿真培训、设计先进控制系统等。

（1）gPROMS（general Process Modeling System）　英国帝国大学系统工程中心（Imperial College，Centre of Process Engineering）开发的基于联立方程法的流程模拟软件（www. psenterprise. com/gproms/platform. html）。

（2）PRO/II（software. schneider-electric. com/simsci/）　是 Simulation Sciences 公司著名的稳态模拟商业化软件，它是在 PROCESS 基础上发展起来的。该公司为促进 PRO/II 的应用，在 PRO/II 网页（SIMSCL on-line）（www. sinsci. com）上推出免费的 PRO/II 演示程序以供学习之用。

（3）ASPEN PLUS（www. aspentech. com/）　ASPEN 是 Advanced System for Process Engineering（先进过程工程系统）的简称。ASPEN PLUS 是美国 Aspen Tech 公司对 ASPEN 进行升级换代的产品，是著名的稳态模拟商业化软件。

（4）CHEMCAD（www. chemstations. com/）　是台湾开发的模拟优化软件，可对化工单元操作以及组分简单的化工流程进行模拟计算和流程优化。

（5）ECSS（putech. qust. edu. cn/info/1964/1082. htm）　青岛科技大学计算机与化工研

究所于1987年正式推出的ECSS模拟系统。用于化工过程设计、优化及过程系统改造，并可根据各种模拟要求方便地进行二次开发。

（6）VMG Sim（www. virtualmaterials. com/） 加拿大阿尔波特省卡尔加里市的虚拟物流集团公司创建，是新一代流程模拟软件的代表。可以详细预测工艺装置和工厂的性能。

（7）SPYRO（www. technip. com/en） SPYRO软件是针对裂解炉辐射段的产率模型，其基础模型是以自由基和分子反应机理描述反应进程的理论机理模型。

（8）KBC PROFIMATICS公司（kbc-profimatics-umt3-2. software. informer. com/）是由世界上仅有的提供炼油厂反应装置工艺流程模拟与优化的两家公司：英国KBC与美国PROFIMATICS于1998年合并而成。提供炼油反应模拟软件，这一模型是基于炼油化工的基本原理，以严格的动力学与质能平衡理论为基础，加上其炼油反应工艺专家多年的实际经验及现场数据优化确认而研制的。

（9）DESIGN II（iibyiv. com/） DESIGN II是强大的流程模拟计算工程，可以为大量的管线和单元操作做热量平衡和物料平衡。它简便而精确的模块，使工艺工程师把注意力集中在工程上而不是计算机操作上。

12.2.8 生命化学软件

生命化学软件基于Windows系统和个人电脑，面向生命科学领域的新一代分子建模和模拟环境Discovery Studio™（DS）。它服务于生命科学领域的实验生物学家、结构生物学家、药物化学家、计算生物学家和计算化学家，应用于蛋白质组、基于靶点药物研究，为科学家提供易用的蛋白质模拟、优化和基于结构药物设计工具。建立在最新的流程管理平台Pipeline Pilot基础上的DS让数据的共享和交流变得更为方便和简洁，同时这个开放平台技术还为使用者整合自己或第三方软件工具提供了接口。科研人员可以在一个统一的平台上完成从基因到先导化合物设计的一系列工作。DS目前主要功能包括：蛋白质的表征、同源建模、X射线分析、基于结构药物设计工具（包括配体-蛋白质相互作用、全新药物设计和分子对接）。DS可应用于生命科学以下研究领域：生物信息学、结构生物学、酶学、免疫学、病毒学、遗传与发育生物学、肿瘤研究、新药开发。如图12-3所示。

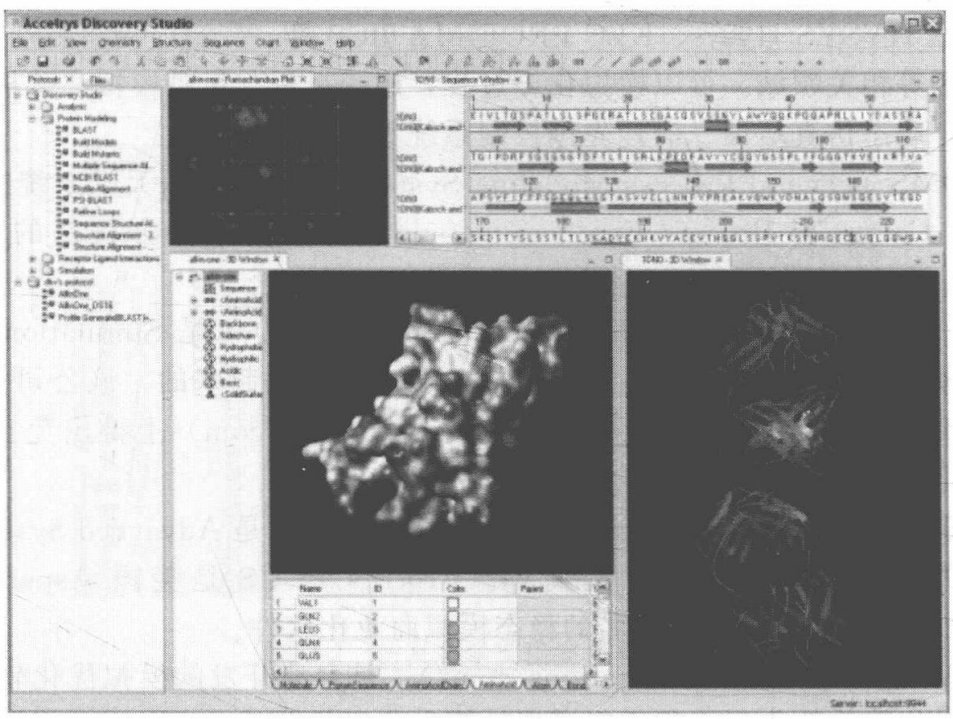


图12-3 Discovery Studio使用界面

ViewerLite 是一个查看 3D 模型的视图工具，在 SciFinder Scholar 检索出的物质结果中，有很多都提供 3D 视图，如果安装了 ViewerLite，直接点击即可查看。

12.3　化学化工软件下载途径

化学化工软件的下载地址可以在网络上搜索获得，主要下载地址包括一些综合网站、软件厂商网站和专业网站。

12.3.1　综合网站

（1）中国科学软件网（www. sciencesoftware. com. cn）　提供大量免费软件链接，以及正版软件。

（2）Trinity Software，Inc.（www. trinitysoftware. com）　提供大量免费或收费化学软件下载。

（3）百思网站（www. baisi. net/forum-411-1. html）　提供大量化学化工软件的下载、使用方法以及使用技巧等。

12.3.2　软件厂商网站

（1）Bio-Rad Laboratories（www. bio-rad. com）　Bio-Rad 的 Sadtler 光谱数据库、光谱软件 KnowItAll 为客户和业界提供了一套数据全面的化学信息处理数据库平台解决方案。萨特勒（Sadtler）光谱数据库是世界上优秀的谱图收藏数据库，包括红外、拉曼、核磁、质谱谱图以及未数码化的气相色谱谱图与紫外光谱谱图。

（2）CambridgeSoft Corporation（www. cambridgesoft. com）　剑桥软件公司产品包括软件、数据库以及网络支持。Chem&Bio office 套件已经成为事实上的化学桌面系统的标准。

（3）Accelrys（www. accelrys. com）　全球最大的面向生命科学和材料科学领域提供分子模拟、生物信息学、化学信息学和材料信息学的软件产品和信息系统的公司。

（4）北京宏剑公司（www. hongcam. com. cn）　国内最大的化学软件代理商之一，共代理 300 多种软件产品。主要面向化学科学、生命科学、基础医学、药物学、化学工程及环境科学等诸多学科。

（5）创腾科技有限公司（www. neotrident. com）　提供分子模拟技术产品、化学信息与流程综合管理平台、实验室信息管理系统以及专业化学信息与情报服务。

（6）CompuChem（www. compuchem. com）　世界上最著名的化学软件公司之一，产品包括 HyperChem、Electrochemical Cells Pro、UltraMol Office、GlassyChemistry 等。

12.3.3　专业网站

（1）MDL′s Chime WebPlugin（mdl-chime. software. informer. com/）　提供免费化学结构可视化插件，网上化学分子结构显示的事实标准。成为其免费会员后，可免费下载其最新软件，并有相关使用教程和讲座。

（2）ORTEP-III for Windows（www. ornl. gov/sci/ortep/ortep. html）　提供晶体结构插图软件。

（3）Schrodinger（www. psgvb. com）　薛定谔软件是药物设计软件包，包括：基于受体（和配体）结构的诸多对接模式，如：诱导契合和柔性、配体极性、溶液环境性质；组合化学库设计及基于组合库的对接模式；基于配体结构的药物设计、药效团和 3D-QSAR；生物分子结构模拟，蛋白、糖、核酸、小肽等；基于靶点的药物设计；ADME 性质预测。薛定谔软件的虚拟筛选功能在 35 个 CPU 的集群上每天可以筛选 150 万个化合物。

（4）Wavefunction，Inc.（www. wavefun. com） 为教育研究和工业开发功能足够强大但同时容易使用的化学软件，其代表作为 Spartan 系列，主要用于量子计算。

（5）数据统计软件（www. sigmaplot. com） 提供从基础的描述性统计到基于高端算法的高级统计方法的各种功能和进行高效数据分析时所需要的各种统计功能。

（6）Biomer（www. biomer. de/） 一个使用 JAVA 语言编制的在线生物分子建模软件包，能初始化生物高分子和有机小分子结构，自动取得最小能量状态的结构。

（7）3D 分子图形显示工具（www. openrasmol. org）（RasMol and OpenRasMol）（免费）

（8）MOLMOL（perso. ens-lyon. fr/torsten. herrmann/Herrmann/Software. html） 生物大分子 3D 结构分析和显示、NMR 结构解析，免费。

（9）OSIRIS Property Explorer（www. organic-chemistry. org/prog/peo） Log*P*、溶解度、成药可能性预测，免费。

（10）Sweet（www. dkfz. de/spec/sweet2/doc/） 依据标准命名方法和分子顺序建立糖类三维模型。

（11）Swiss PDB Viewer（PDB 蛋白质结构可视化软件） （www. usm. maine. edu/spdbv/或 www. usm. maine. edu/spdbv/text/disclaim. htm）。

12.4 ChemOffice 及其使用方法

ChemOffice 作为一款优秀的化学软件。化学工作者可以使用 ChemOffice 完成自己的设想，与同行交流化学结构、模型和相关信息。在实验室，可以使用 E-Notebook 整理化学信息、文件和数据，并从中取得所需结果。

ChemOffice 软件是针对专业化学绘图所设计，可以绘制各式各样的化学键、环、轨道等，并可以与软件中的数据库连接；对于不确定的结构组成，可以通过输入适当的搜寻条件，查出可用的结构式；可以将化合物名称直接转为结构图，省去绘图的烦琐；也可以对已知结构的化合物命名，给出正确的化合物名称。ChemOffice 完整的应用系统涉及各个研发领域，从合成路线、化合物设计、药物合成、细胞实验到结果和报告分析。ChemNMR 可预示分子化学结构的^{13}C 和^{1}H-NMR 化学位移。

ChemOffice 主要包括 ChemDraw（化学结构绘图）、Chem3D（分子模拟分析绘图）和 ChemFinder（化学信息搜寻整合系统）模块，此外还加入了 E-Notebook、BioAssay Pro、量化软件 MOPAC、Gaussian 和 GAMESS 的界面，ChemSAR、Server Excel、ClogP、BioViz、CombiChem/Excel 等一系列完整的软件。

（1）ChemDraw（化学结构绘图）模块 该模块是世界上最受欢迎的化学结构绘图软件，是各论文期刊指定的格式。该模块包括以下几个组件。①AutoNom：是 Beilsteiny 最强的软件，现已包含于 ChemDraw Ultra 中，它可按照 IUPAC 的标准自动命名化学结构。②ChemNMR：预测^{13}C NMR 和^{1}H NMR 谱图，节省实验费用。③ChemProp：预测沸点（BP）、熔点（MP）、临界温度（Tc）、临界气压（CP）、吉布斯自由能（*G*）、lg*P*、折射率（*n*）、热结构（HF）等性质。④ChemSpec：提示用户输入 JCAMP 及 SPC 频谱数据，以比较 ChemNMR 预测的结果。⑤ClipArt：高质量的实验室玻璃仪器图库，用于搭配 ChemDraw 使用。⑥Name⟺Struct：输入 IUPAC 化学名称后可自动生成 ChemDraw 结构。

（2）Chem3D（分子模拟分析绘图）模块 该模块提供工作站级的 3D 分子轮廓图及进

行分子轨道特性分析，并与数种量子化学软件结合在一起，可计算分子轨道的形状、显示分子表面及分子轨道。Chem3D 可以形象地描绘大分子化合物、蛋白质和核酸，并突出其二级结构。

（3）ChemFinder（化学信息搜寻整合系统）模块　该模块可以建立化学数据库、储存数据及搜索化学数据库。ChemFinder 是一个智能型的快速化学搜寻引擎，所提供的 ChemInfo 信息系统是目前世界上最丰富的数据库之一，包括 ChemACX、ChemINDEX、ChemRXN 以及 ChemMSDX，并不断有新的数据库加入。ChemFinder 可以从本机或网上搜寻 Word、Excel、PowerPoint、ChemDraw 和 ISIS 格式的分子结构文件。还可以与微软的 Excel 结合，可连接的关联式数据库包括 Oracle 及 Access，输入的格式包括 ChemDraw、MDL、ISIS、SD 及 RD。

另外，ChemOffice 组件中还包括 ChemOffice WebServer——化学网站服务器数据库管理系统。用户可将 ChemDraw 和 Chem3D 发表在网站上，使用者可以使用 ChemDraw Pro Plugin 网页浏览工具在 Web 上查看 ChemDraw 的图形，或使用 Chem3D Std Plugin 网页浏览工具查看 Chem3D 的图形。同时 ChemOffice WebServer 提供 25 万种化学品数据库，包括 Sigma、Aldrich 和 Fisher Acros 等国外著名公司提供的信息。

12.4.1　ChemOffice 在线工具

ChemDraw 的“Online（在线工具）”菜单中含有多个命令，用户可以使用这些命令在数据库中查询有用的信息，下面分别介绍各个命令。

（1）结构式与 ACX 编号的互查　利用“查询 ACX 编号（Find ACX Numbers from Structure）”命令可以直接通过结构式查询 ACX 编号。选择结构式后，单击“Find ACX Numbers from Structure（由结构式查询 ACX 编号）”命令，在弹出的对话框中即可查询该结构式的 ACX 编号。由 ACX 编号查询结构式（Find Structure from ACX Numbers）命令的功能与查询 ACX 编号功能相反，可以直接通过结构式的 ACX 编号绘制出结构式。如图 12-4 所示。

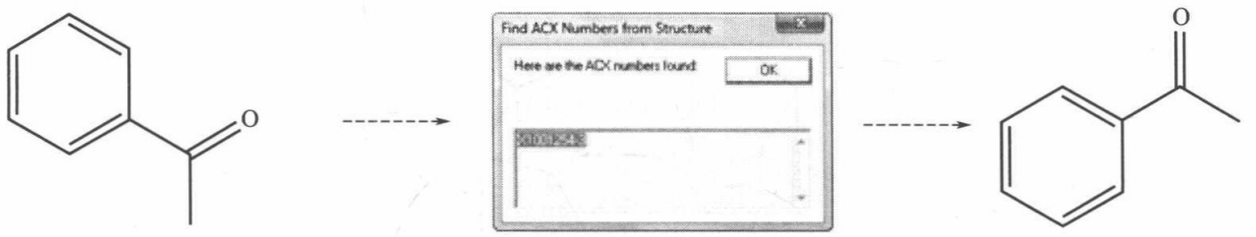


图 12-4　通过结构式的 ACX 编号绘制结构式

（2）由名称查询结构式　“由名称查询结构式（Find Structure from Name at ChemACX.com）”的功能与“Find Structure from ACX Numbers（由 ACX 编号查询结构式）”功能类似，不同之处在于它可以直接从结构式的化学名称查询出其结构式。单击该命令，在弹出的对话框中输入化合物的名称，单击“OK”按钮，即得到该化合物的结构式，如图 12-5 所示。

图 12-5　由名称查询结构式

（3）查询供应商　用户可以直接利用“查询供应商（Find Suppliers on ChemACX.com）”命令从 ChemACX 数据库中查询所绘结构式的供应商。

12.4.2　立体化学反应历程的绘制

本节将结合立体化学结构式以及反应历程的绘制来介绍如何利用 ChemDraw 绘制立体化学反应历程图。

（1）绘制立体结构式　化学立体结构式的绘制方法有两种：一种是手动绘制结构式；另一种是直接采用模板工具中的已有结构式，然后在该基础上稍加修改。

① 手动绘制立体结构式。观察如图 12-6(a) 所示的结构式可以发现，该结构式完全由实键组成。因此选择实键工具，然后在绘图区绘制如图 12-6(a) 所示的图形（注意绘制图形时实键的拖动角度，在 ChemDraw 中，以每 15°逐步递增）。然后将光标定位到如图 12-6(a) 所示下部中间的原子上，按住〈Alt〉键的同时向上拖动光标至合适长度，如图 12-6(b) 所示。再将光标定位到上端中间的原子上，按住〈Alt〉键后拖动光标，使实键的尾端与刚绘制的实键尾端重合，最终图形如图 12-6(c) 所示。

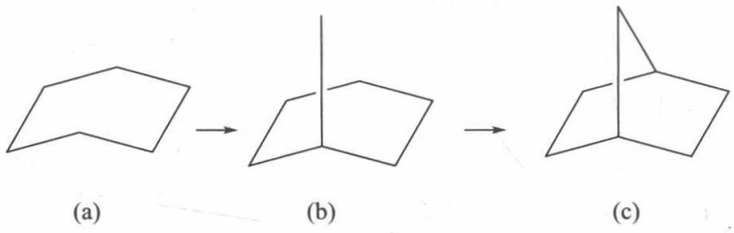


图 12-6　手动绘制立体结构式

② 采用模板工具绘制立体结构式。首先选择图形工具箱中的（模板）工具，在弹出的菜单中选择“Biocyclics”，再选择需要的立体结构式并在绘图区单击，得到如图 12-7(a) 所示的结构式。然后选择实键工具，在相应的位置添加实键；使用双键工具在结构式中将单键变成双键，如图 12-7(b) 和图 12-7(c) 所示；最后选择文本工具，标记原子。整体流程如图 12-7 所示。

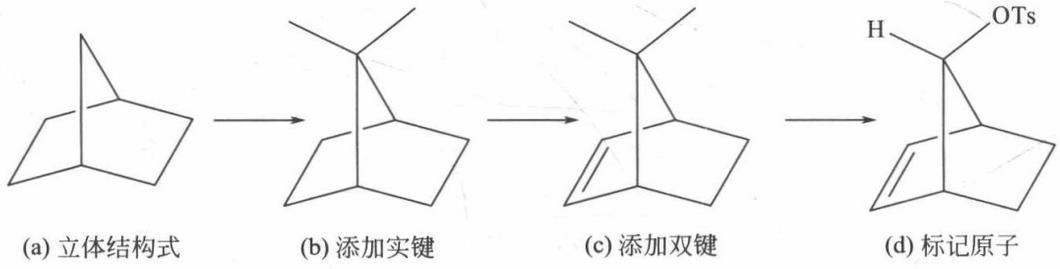


图 12-7　采用模板工具绘制立体结构式

（2）绘制反应历程　亲核取代反应历程如图 12-8 所示。绘制该历程时，首先要绘制出图中的结构式，然后用箭头将其连接起来。首先绘制如图 12-9 所示的过渡态结构式，具体步骤如下。①按照前面的方法绘制如图 12-9(a) 所示的结构式。②选择（虚双键）工具，在结构式左边的实键上单击，将其转化为虚键，如图 12-9(b) 所示。③选择（虚键）工具，再按住〈Alt〉键从结构式左端的上、下原子处分别向顶端原子拉出两条虚线，并使该虚线尾端与顶部原子重合，如图 12-9(c) 所示。④选择（电荷）工具，在如图 12-9(d) 所示的位置添加正电荷。

（3）绘制整个反应历程　在前面的过程中，我们已经完成了反应起始物的绘制，而反应产物与起始物的结构基本相同，只需采用文本工具将起始物的原子标记改成产物的即可，在

此不再详细介绍。此处将介绍如何完成整个反应历程的绘制，其具体步骤如下。

① 选择（箭头）工具，在绘图区沿着与 X 轴正向成 45°夹角方向向斜上方绘制一个箭头，如图 12-10(a) 所示。然后将光标移动到刚绘制的箭头上，箭头变成如图 12-10(b) 所示。在箭头的中间位置向上拖动光标，使箭头呈一定弧度，如图 12-10(c) 所示。另外，还可以自己调节箭头的大小和方向，并将绘制的箭头移动到合适位置，如图 12-10(d) 所示。

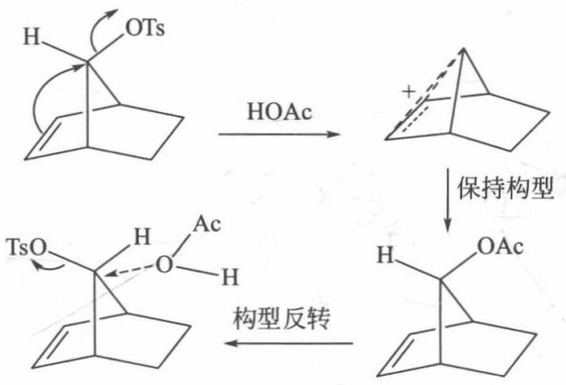


图 12-8　亲核取代反应历程

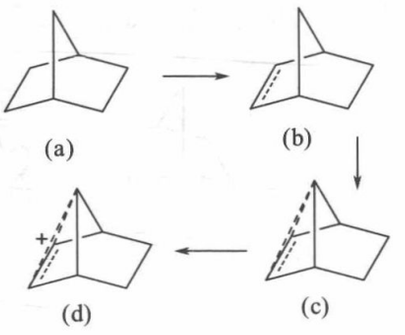


图 12-9　绘制反应历程

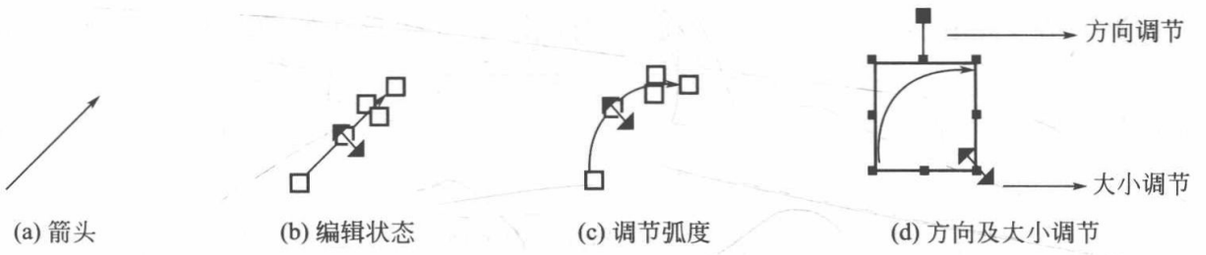


图 12-10　整个反应历程绘制步骤

② 选择**A**（文本）工具，在绘图区输入氧原子符号“O”，然后选择（实键）工具，从氧原子上拉出两根实键，并使两实键之间成 60°夹角。再选择（虚箭头）工具，从氧原子上引出一个虚箭头。最后选择**A**（文本）工具，分别在两实键的末端输入“Ac”和“H”。整个过程如图 12-11 所示。

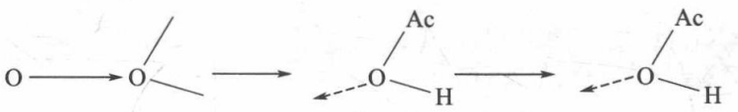


图 12-11　绘制整个反应历程

③ 完成反应历程。选择**A**（文本）工具，在结构式中标记原子，同时在需要的位置注明文本说明，然后用箭头工具将各个结构之间连接起来，最终反应历程如图 12-8 所示。

另外，还经常涉及采用电子轨道的形式表示立体化学的反应历程，一般结构式表示如图 12-12所示。

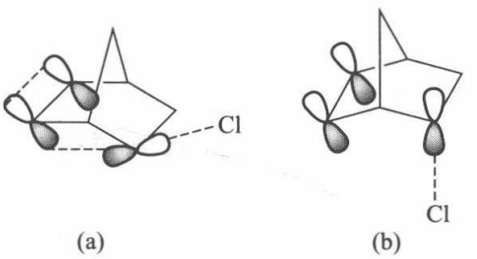


图 12-12　采用电子轨道的形式表示立体化学的结构式

下面详细介绍如图 12-13 所示反应历程的绘制过程。①绘制立体结构式。按照前面的方法绘制如图 12-13(a) 所示的立体结构式。②添加电子轨道。选择（轨道）工具，弹出轨道工具面板，从中选择（p 轨道）工具，然后于该立体结构式的左侧原子上单击添加 p 轨道，如图 12-13(b) 所示。③旋转电子轨道。选择 p 轨道，然后右击，在弹出的快捷菜单中选择“Rotate（旋转）”命令，弹出“Rotate Objects（旋转对象）”对话框。在其中设置需要旋转的角度和方向，单击“Rotate（旋转）”按钮，旋转结果如图 12-13(c) 所示。④添加虚键及原子标记。选择（虚键）工具，在合适的位置添加虚键和原子标记，完成电子轨道结构式的绘制，如图 12-13(d) 所示。

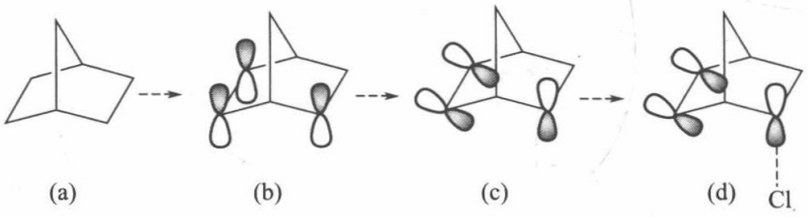
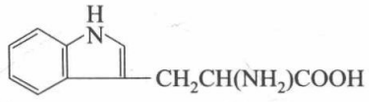


图 12-13 绘制电子轨道结构式的步骤

12.4.3 ChemOffice 预测红外光谱

【实例】试在 Chem3D 中建立色氨酸的结构，用最低能量法优化结构，并预测其红外光谱图。

【解析】色氨酸的结构式为



(1) 绘制结构 首先在 Chem3D 右边的 ChemDraw 窗口中绘制出其结构图，则在左边的 Chem3D 窗口中出现色氨酸的 3D 结构，如图 12-14 所示。

(2) 执行能量最低计算 单击菜单栏中的“Calculations（计算）”→“MM2”→“Minimize Energy（能量最小化）”命令（或直接单击工具栏中的工具），如图 12-15 所示，弹出“Minimize Energy（能量最小化）”对话框。

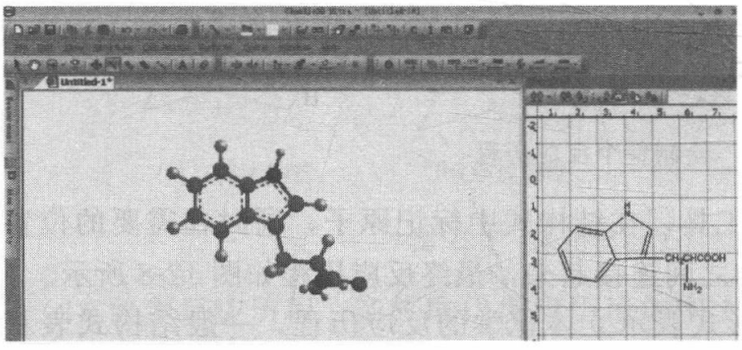


图 12-14 用 Chem3D 绘制结构

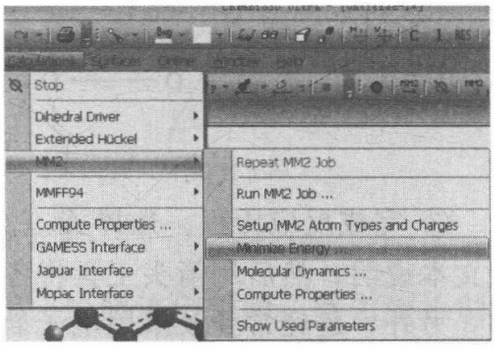


图 12-15 用 Chem3D 执行能量最低计算

(3) 设置参数 在“Job（工作）”下拉列表中选择“Minimize Energy（能量最小化）”选项，然后单击“Run（运行）”按钮进行计算，如图 12-16 所示。

(4) 计算结果 在 Output 窗口中显示的计算结果如图 12-17 所示。由计算结果可知，色氨酸的总能量为 3.2617kcal/mol。

(5) 预测光谱 单击菜单栏中的“Calculations（计算）”→“GAMESS Interface（高斯界面）”→“Predict IR/Raman Spectra（预测红外/拉曼光谱）”命令，弹出“GAMESS In-

terface（高斯界面）”对话框。在“Job Type（工作类型）”下拉列表中选择“Predict IR/Raman Spectra（预测红外/拉曼光谱）”选项，单击“Run”按钮开始计算（以 HF/3-21G 为标准参数进行计算），得到红外光谱图，如图 12-18 所示。

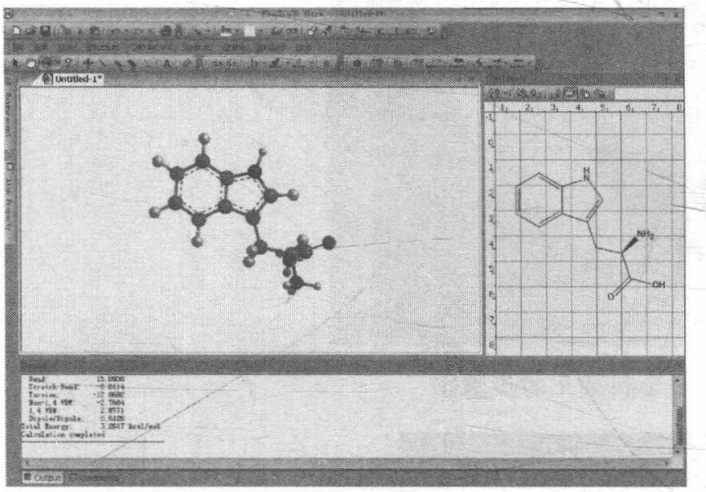


图 12-16　用 Chem3D 设置参数

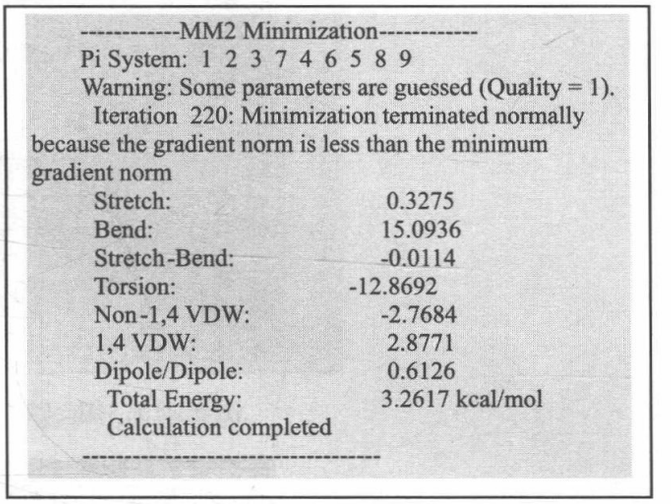


图 12-17　用 Chem3D 计算结果

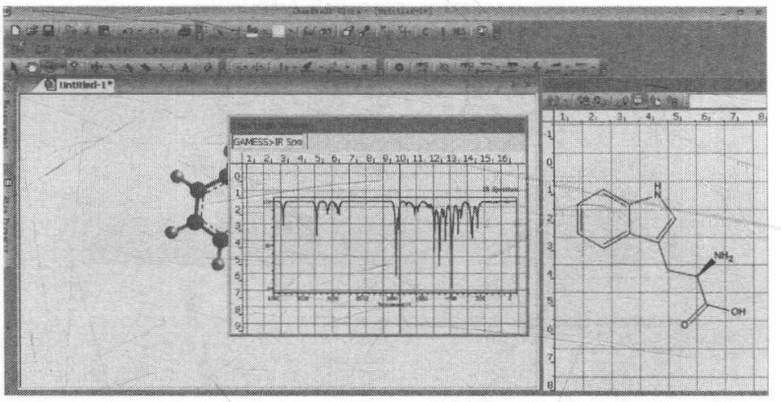


图 12-18　用 Chem3D 预测光谱

12.5　三维制作软件 3DS Max 及其使用实例

12.5.1　3DS Max 简介

3D Studio Max（简称 3DS Max 或 MAX）是 Discreet 公司开发的（后被 Autodesk 公司合并）基于 PC 系统的三维动画渲染和制作软件。它是集造型、渲染和制作动画于一身的三维制作软件。从它出现的那一天起，即受到了全世界无数三维动画制作爱好者的热情赞誉，已逐步成为在个人 PC 机上最优秀的三维动画制作软件。它功能强大，对硬件系统的要求相对较低，操作简单，容易上手，和其他相关软件配合流畅，且效果逼真。

12.5.2　3DS Max 使用实例

这里介绍利用 3DS Max 的建模、灯光、渲染几个部分功能实现茶几的绘制过程：①在新建窗口中建立一个圆柱体，如图 12-19 所示。②在见面页的顶视图中建螺旋线，参数如图 12-20(a) 所示，并且在顶视图中创建两个倒角柱体，如图 12-20(b)、(c) 所示。③选择“mentel ray”渲染器，单击“确定”，然后打开材质编辑器，选择一个材质球，单击“标准”按钮，选择“glass”，如图 12-21 所示。④再选一个材质球，各项参数大致如图 12-21 所示。选择其他部件，把材质赋予它们，如图 12-22 所示。⑤最后建一个方体作为地面，材

质随意，再建两个泛光灯，参数自己试着调，渲染，完成，如图 12-23 所示。

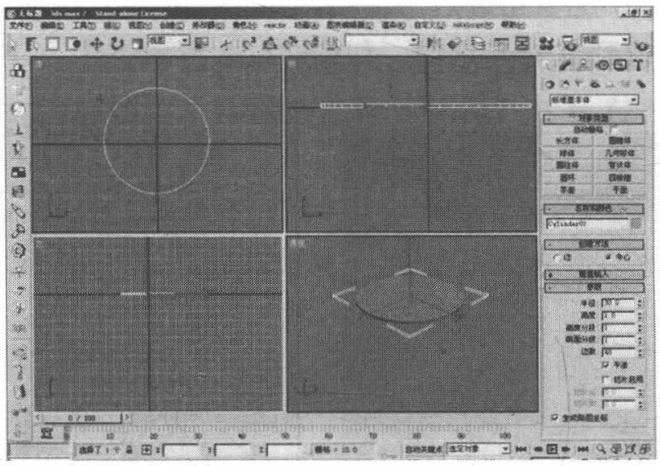
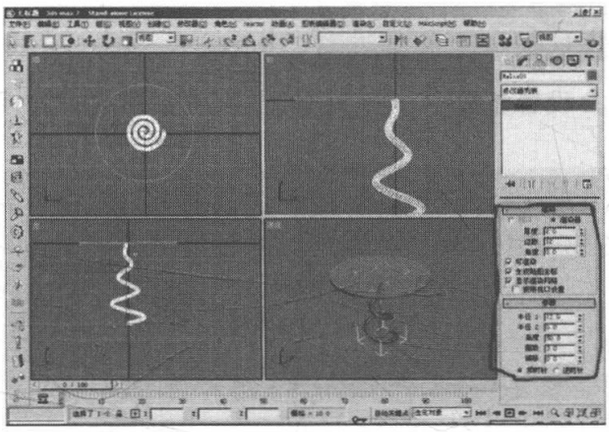
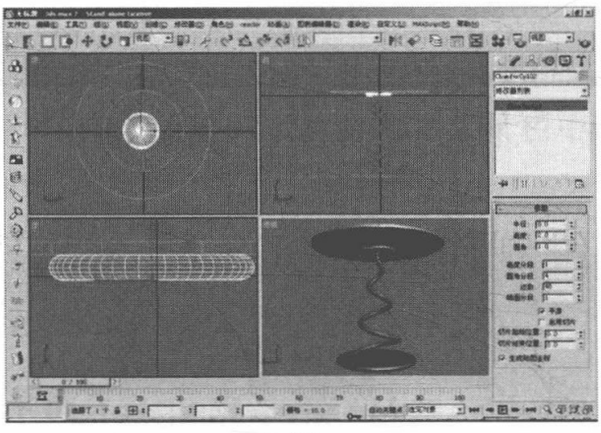


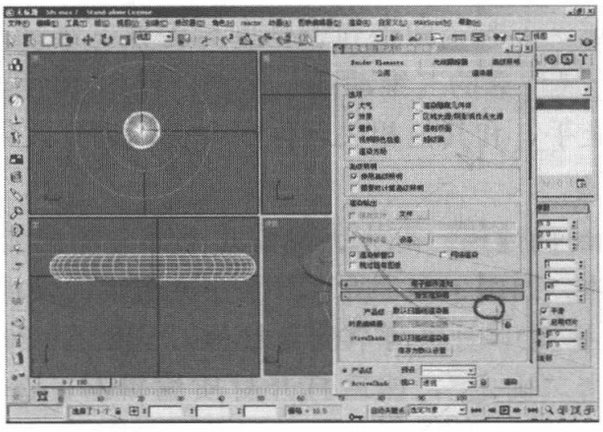
图 12-19 用 3DS Max 绘制茶几的步骤①



(a)



(b)



(c)

图 12-20 用 3DS Max 绘制茶几的步骤②

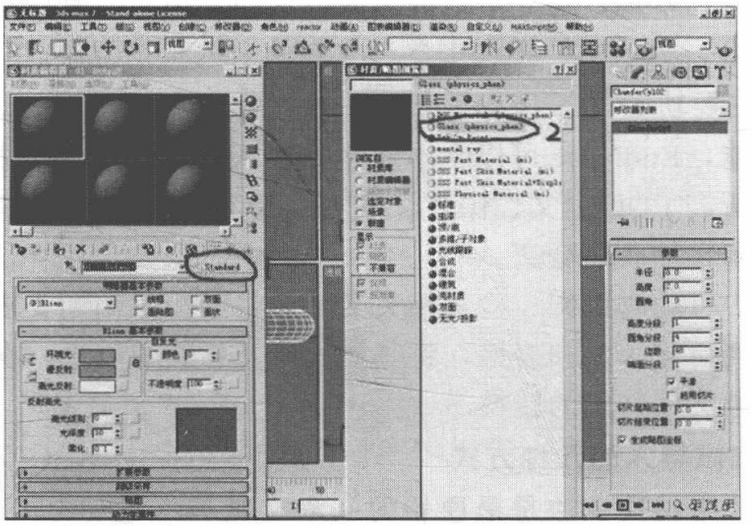


图 12-21　用 3DS Max 绘制茶几的步骤③

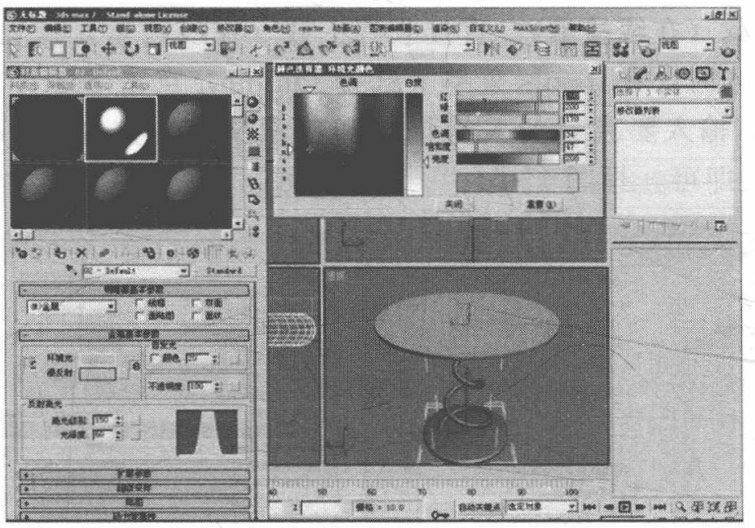
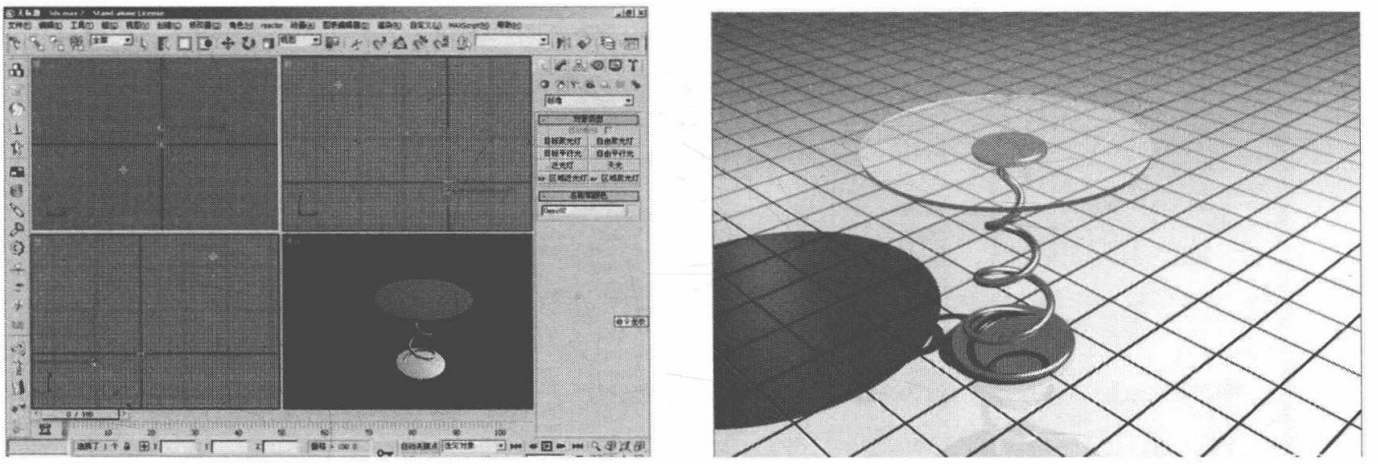


图 12-22　用 3DS Max 绘制茶几的步骤④



(a)　　(b)

图 12-23　用 3DS Max 绘制茶几的步骤⑤

12.6　文献管理软件 EndNote 及其使用

EndNote 是 Thomson 公司的产品，一款很受欢迎的文献管理软件，EndNote 通过将不

同来源的文献信息下载到本地，建立本地数据库，从而实现对文献信息的管理和使用；并与 Microsoft Word 相嵌合，为论文、报告中参考文献的引入提供方便。

12.6.1 EndNote 的主要功能

（1）管理文献功能，EndNote 可以在本地建立个人数据库，随时检索收集的文献记录，通过检索结果，调阅所需 PDF 全文、图片、表格、影音，并将数据库与他人共享，对文献进行分组，查重对比和自动获取全文。

（2）论文撰写时，可随时调阅、检索相关文献，将其按照期刊要求格式插入文后的参考文献，并可以迅速找到所需图片和表格，将其插入论文相应的位置，在转投其他期刊时，也可迅速完成论文及参考文献格式的转换。

12.6.2 EndNote 的文献导入的几种方式

（1）手动输入法　手动输入法是最原始的一种文献导入 EndNote 的方式，导入时，在菜单中点击 Reference，然后点击 New Reference（或直接按快捷键 Ctrl＋N），选择要导入的文献即可完成。

（2）直接联网下载（在线检索）　直接联网下载（在线检索）是利用互联网将文献导入 EndNote 的方式，导入时，在 Tools 菜单下选择 Online，点击 Search 打开数据库，或点击“more”打开数据库，输入要查找的关键词（和检索文献方法类似，检索文献方法见第 3 章），找到文献并导入即可，见图 12-24。

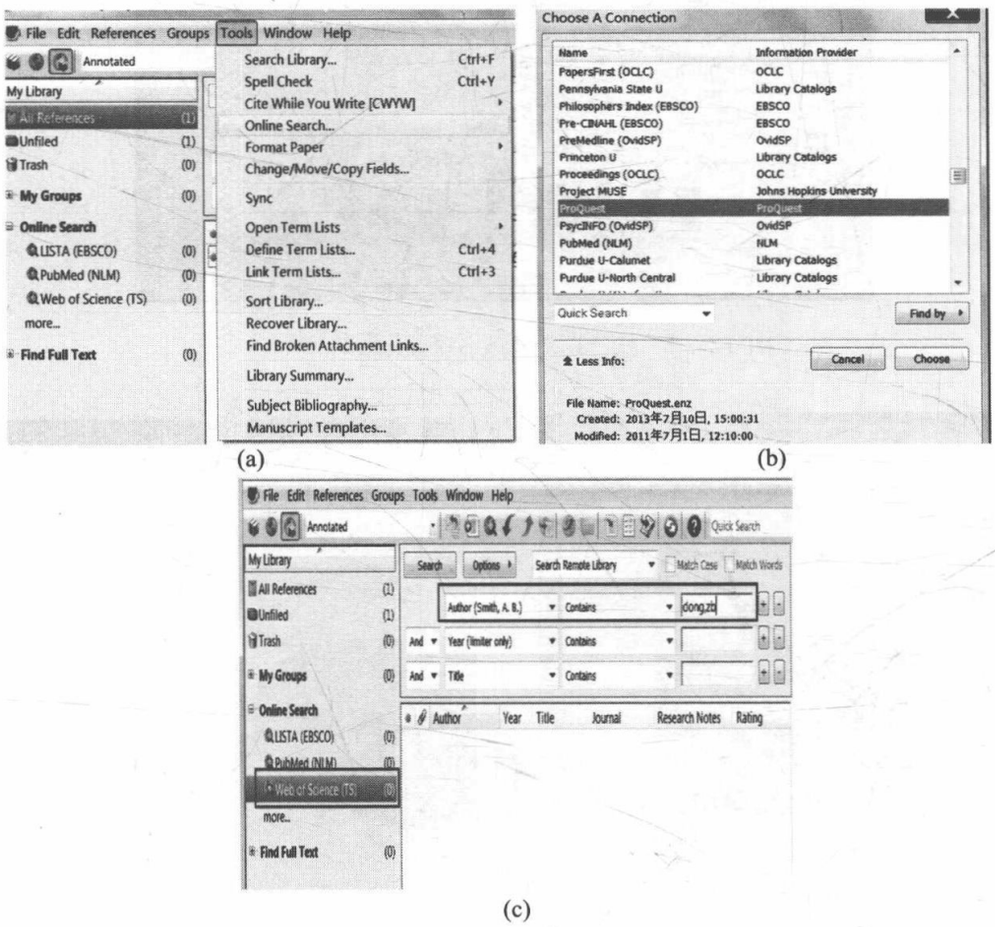


图 12-24　EndNote 直接联网下载步骤

（3）网站输出（数据库检索导入）　网站输出（数据库检索导入）是利用专业数据库查找文献并将文献导入 EndNote 的方式，不同的数据库导入菜单不同，如 Web of Knowledge 中选择文献后，点击 EndNote；EI 数据库中选择文献后，点击 Download 等，各数据库导入方式如图 12-25 中方框所示。

图 12-25　EndNote 网站输出方式

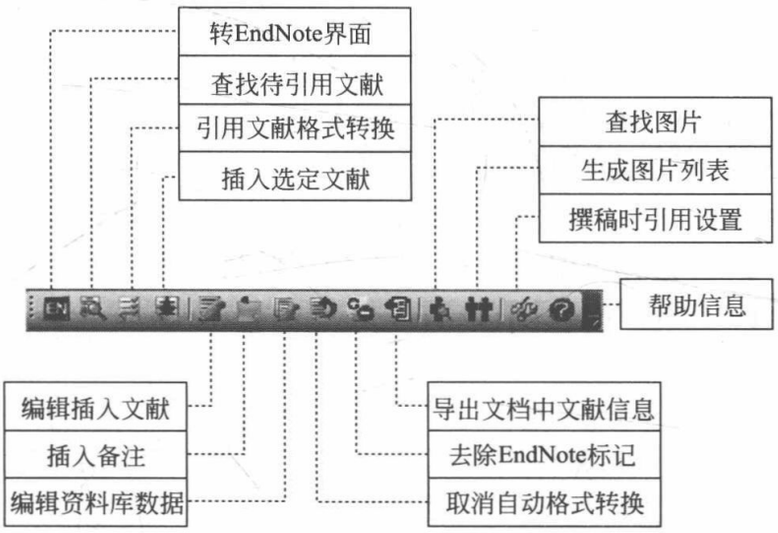


图 12-26　EndNote 软件工具条详解图

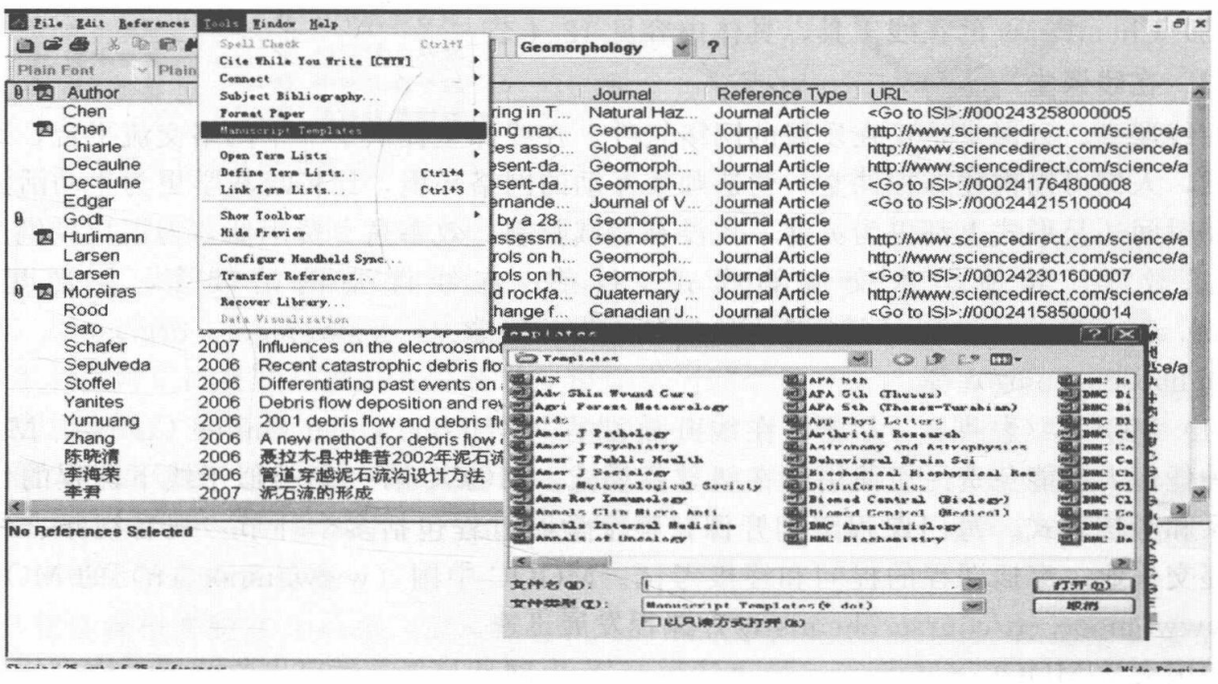


图 12-27　用 EndNote 选择不同期刊的模板

12.6.3 EndNote 的文献编排

在撰写论文或学术活动时，需要对已知文献进行编排、引用，EndNote 在文献编排方面给各类研究人员带来了很大的便利，图 12-26 为 EndNote 软件工具条详解图。

在进行文献编排时只需按照菜单选项操作即可，如插入参考文献点击 Insert selected citations；格式选择点击 Format bibliography；插入图片点击 Find figure（s）。

在撰写论文时还可以利用 EndNote 模板撰写，在 Tools 菜单下，选择 Manuscript Templates，会显示不同期刊的模板，如图 12-27 所示。

12.7 在线教学软件与在线课堂

12.7.1 在线化学软件简介

通过结构式检索数据库时需要首先绘制化学结构，普通浏览器无此功能。因此需要安装在线化学软件。

（1）ChemFinder（chemfinder.cambridgesoft.com/） 化学信息搜寻整合系统，可以建立化学数据库、存储及搜索，或搭配 ChemDraw、Chem3D 使用，也可以使用现成的化学数据库。ChemFinder 是一个智能型的快速化学搜寻引擎，所提供的 ChemInfo 是目前世界上最丰富的数据库之一。该软件免费注册后就可以使用。ChemFinder 数据管理系统具有很强的模糊识别和纠错能力，可将多种标准加入查询提问式，全面检索化合物结构、亚结构、立体化学特性、分子式、物化性质、生物活性等特征文本。反应物、生成物、转移的功能基团均可作为提问式检索化学反应信息数据库，并以原子映射的方式搜寻相关反应数据，下拉式菜单允许同时浏览多个检出记录。目前该软件更名为 ChemBioFinder，隶属于 PerkinElmer 公司。

（2）KnowItAll（www.knowitall.com） Bio-Rad 公司的 KnowItAll® 化学信息情报处理软件，提供了一套用于多种光谱技术和综合分析技术的解决方案。集成和综合了多种光谱技术，如核磁共振、红外、质谱、拉曼和近红外等，提供独特的光谱数据。通过该平台对化合物的结构、亚结构、化学性质、谱图、峰值等进行搜索的时间从以前的几分钟缩短到几秒，大大提高了搜索速度。

（3）ChemDraw 的在线工具，具体内容见 12.4 节。

12.7.2 在线课堂

在线课堂、云课堂是正在发展的网络软件。在线课堂提供了一个网络交流平台，通过在线课堂，人们可以构建虚拟课堂，营造师生互动的网络环境，比传统教学更为生动活泼，不管是在时间还是形式上都更为灵活，且没有地域限制、效率高、费用低，为用户提供了远程互动式教学、异地学术交流等模式。目前，在线课堂网站较多，如超星课堂（openv.chaoxing.com/）、云课堂、慕课课堂（www.moocs.org.cn/）、微课（video.haosou.com/）等。

（1）MOOC（慕课） 大规模在线开放课程（Massive Open Online Course，MOOC）是一种任何人都能免费注册使用的在线教育模式。MOOC 有一套类似于线下课程的作业评估体系和考核方式。每门课程定期开课，整个学习过程包括多个环节：观看视频、参与讨论、提交作业，穿插课程的提问和终极考试。MOOC 中国（www.mooc.cn）的 MOOC 化学（www.mooc.cn/course/chemistry）课程发展迅速。

中国大学 MOOC（www.icourse163.org/）由网易与高等教育出版社携手推出的在线教育平台，承接教育部国家精品开发课程任务，向大众提供中国知名高校的 MOOC 课程。

2014 年北京大学推出了慕课《中级有机化学》（www. coursera. org/course/orgchem），西安交通大学也建立了《有机化学 1》课程（www. icourse163. org/course/xjtu-46017＃/info），大连理工大学建立了《化学与社会》的 MOOC 课程（www. icourse163. org/course/dlut-73001＃/info），武汉大学建立了《物理化学》课程（www. icourse163. org/course/whu-216009＃/info），同时复旦大学、浙江大学、南开大学等 42 所高校也相继建立了一些 MOOC 课程。Chemistry-Building Blocks of the World（Chemistry）（www. open2study. com/courses/chemistry）。

（2）中学在线　在线课堂发展快速，也引起了中学教育的巨大变革，其所带来的变化是信息技术诞生以来的重大变革之一，将深刻影响未来的高等教育。未来在线课堂将会朝着规模将进一步扩大、走向独立、教师教育理念与方法将产生巨变、学生的学习方法将大为改观、网络技术将推动教育的巨大变革、现行教育体制将深受冲击等趋势发展，也必将引起整个教育系统的变革。

目前中学在线网上资源较多，较常见的有：中学在线（www. vko. cn）、学生网（www. xuesheng. com/）、新学网（www. newxue. com/），以及各中学自己建立的在线学习网，这里不一一列举。

（3）微课　随着“互联网＋”时代的到来，互联网也进入“微”时代，如微信、微博、微小说、微电影等，如图 12-28 所示。而教育界也开始了微课时代，微课是以阐释某一个知识点或解决某一个问题为目标，以短小的视频为表现形式，以学习或教学应用为基本目的的一种支持多终端的数字化资源，如图 12-29 所示。微课是在特定的课堂教学环境中制作完成，用于虚拟环境的教学或学习，能够支持多平台多终端。将学习目标聚焦在某一个环节上，利用最短时间阐述某一种现象或精讲某一个知识点、教学重点、难点、疑点、考点、作业题、典型例题等。

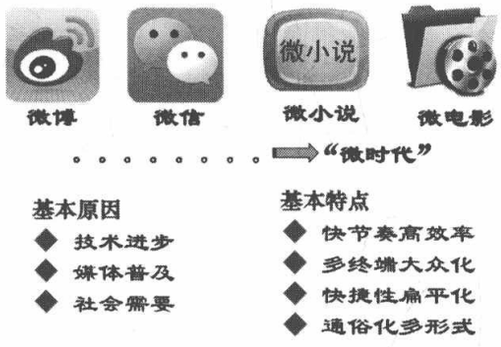


图 12-28　微课特色

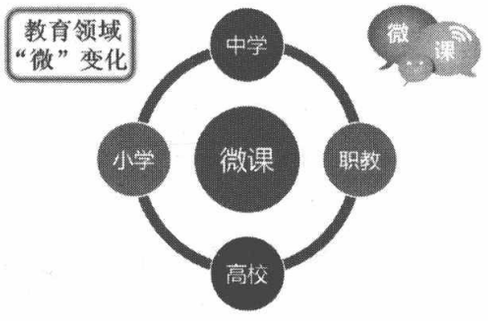


图 12-29　微课教育模式

微课的特点是微内容、微活动、微过程，做到一事一议，一事一课。将知识碎片化、情景化、可视化。如中学微课网站（video. haosou. com/v? q＝中学在线）。

（4）虚拟课堂　虚拟课堂可以从教师和教学环境上改变传统教授和学习的方式。虚拟课堂使学生和教师之间更具有亲近感，使学生更愿意主动学习。而在教学资料方面，虚拟课堂让教学更加有趣，并节约成本，让人们可以体验到课本中的场景，让教学不再是照本宣科。美国哈佛大学商学院已经开设了虚拟课堂，它的最新教室没有课桌椅，取而代之的是教授对着延伸好几面墙的数字屏幕教学，上面有从自己计算机登入多达 60 名学生的同步联机画面。

12.7.3　NB 化学虚拟实验室

NB 化学虚拟实验室（www. nobook. com. cn/huaxue）是由 NOBOOK 虚拟实验室研发的一款化学仿真实验软件。通过虚拟仿真、3D 效果、自由交互等方式，呈现出初高中阶段近 200 个经典实验。想自由操作化学实验，尽在 NB 化学虚拟实验室。

虚拟化学实验室的优点是：不受实验室条件限制且覆盖了中学主流教材中大部分化学实验，实现了传统实验室无法完成的高危险性、易燃易爆、有毒性、辐射性实验。因此，安全性能高。

总的来说，化学虚拟实验室有诸多优点，然而，化学虚拟实验室无法设定所有可能的环境与实验条件。这是因为化学实验结果不但受到原料纯度、实验条件的影响，而且受到温度、湿度、气压等自然环境的影响，实验结果与实验现象（性状、颜色、气味）就会千差万别。因此，要培养创新型人才，真实的实验操作必不可少。

无论如何，计算机及网络技术的发展，正在改变着我们的培养模式，缩短与发达国家与地区的教育技术差距，使欠发达国家与地区也能够享受高端教育资源。

练 习 题

1. 与化学化工相关的软件有哪些类型？
2. 在“中国科学软件网”上与化学化工相关的软件有哪些类型？
3. 举例说明文献管理软件的特点和使用方法。
4. 列举两个化学实验软件及各自的特色。
5. 软件 ChemOffice 有哪些功能？
6. 简述 MOOC（慕课）在化学、化工行业的使用情况。

实践练习题

1. 任选一组数据，利用 Excel 绘制一张曲线图。
2. 从网上查找四大波谱（UV-Vis、IR、NMR、MS）处理软件。
3. 下载并安装 ChemOffice 绘图软件：
(1) 画出 3,5-二叔丁基水杨醛的分子结构；
(2) 进一步转换为 3D 结构；
(3) 预测该化合物的 HNMR 谱图。
4. 以肉桂酸为例，说明利用 ChemWindow 绘制结构式的一般过程。
5. 从网上查找 3DS Max 软件的使用教程，并绘制 3D 结构。

综合练习题

1. 化学信息有哪些载体？

2. 如何较完整地摘录化学信息？

3. 通过工具书或网络检索，回答下列问题：

（1）闪点（Flash Point）是什么意思？

（2）喹啉（Quinoline）分别在水、乙醇、乙醚中的溶解度有多大？

（3）食用香兰素（Vanillin）的规格是什么？

（4）雷氏盐（Rochelle Salt）的化学成分是什么？

（5）聚四氟乙烯的 T_g 和 T_m 是多少（提示：《Polymer Handbook》）？

（6）丙烯腈-甲基丙烯腈的单体竞聚率是多少（提示：《Polymer Handbook》）？

（7）KI 和 NaI 在丙酮中的溶解度是多少（提示：《Handbook of Chemistry and Physics》）？

4. 列出有机化学、无机及分析化学、物理化学、高分子学科常用的英文期刊的名称、缩写及其网址（各列出 5 个）。

5. 写出下列五种中文期刊的 CA 刊用名称及其网址：《中国科学》、《化学学报》、《高等学校化学学报》、《化学通报》、《有机化学》。

6. 查下列有关资料，并注明资料来源。

（1）精制蓖麻油的规格及分析方法；

（2）注射用葡萄糖的质量指标及检验方法；

（3）H 酸单钠盐的含量测定；

（4）EPA（脑黄金的主要成分）的化学结构；

（5）植物生长调节剂的主要种类及简介。

7. 在 Internet 上查询是否有《CRC 化学物理手册》网络版？另外在 Internet 上查询介绍该印刷型工具书的教程，通过教程学习了解该工具书的内容，学习使用方法。

8. Internet 上有许多可以免费检索物理常数的网站，例如 NIST 的基本常数检索（physics. nist. gov/cuu/Constants）等。请查询玻尔兹曼常数（Boltzmann Constant）、法拉第常数（Faraday Constant）、光速、理想气体的摩尔体积、^{12}C 的摩尔质量等常数。

9. 由 Organic Synthesis 查重氮甲烷的合成方法、性能和主要用途（写出有关反应式和主要操作步骤）。

10. 根据 CA 文摘回答下列问题：

（1）“666”对人的毒性如何？

（2）醇对环己烷的氧化有何影响？

（3）“612”对家蝇（Housefly）和蚊子（Mosquito）有何作用？如何使用？

11. 找出日本 Umitika Itd. 公司于 1976～1978 年间生产的不含溴的耐火的确良（Fire Resistane Dacron）的方法有几种（注明论文摘要在 CA 中的卷号和文摘号）。

12. 用 CA 作者索引查出下列作者近两年发表的学术论文两篇：①Teruyuki Komatsu；②李子臣。

13. 试讨论化学化工文献检索在化学教学与科研中的作用和意义。

综合实践练习题

从下列专题中选取一个或数个或自行选取与化学化工相关的课题进行文献查阅、整理，然后撰写相关综述性论文或知识介绍性论文（2000～8000字）。

建议选题范围：

（1）化妆品配方（Cosmetic，Formulation）；

（2）化妆品中汞含量的测定方法；

（3）树脂眼镜（Resin glasses）；

（4）智能高分子（Intelligent/Smart Polymer，Materials/System）；

（5）智能涂料（Smart Coatings）；

（6）树形、超支化聚合物的研究进展（Dendrimers and Hyperbranched Polymers）；

（7）星形聚合物（Star-shaped Polymers）；

（8）纤维素产品（Cellulose）；

（9）淀粉改性（Starch，Modified）与可降解塑料；

（10）壳聚糖研究新进展（Chitosan）；

（11）高分子金属卟啉络合物合成与应用（Polymer Porphyrin，Metal Complex，Synthesis/ Preparation，Application）；

（12）金属卟啉（Metalloporphyrin）合成与应用；

（13）绿色化学（Green Chemistry）新技术；

（14）环境友好技术（Environmentally Friendly/Begnin Technology / Clean Technology）；

（15）汽车涂料（Automobile，Coatings）；

（16）生物碱活性（Alkaloids，Activity）；

（17）植物激素（Plant Hormones）；

（18）洗涤剂（Detergent）；

（19）香水（Perfumes）；

（20）止汗剂（Antiperspirants）；

（21）除臭剂（Deodorants）；

（22）牙膏（Dentifrices）；

（23）漱口水（Mouth Washes）；

（24）防晒黑与遮光剂（Suntanning and Sunscreen）；

（25）活性自由基聚合（Living Free Radical Polymerization）；

（26）超分子自组装（Supramolecular Self-assembly）；

（27）聚合物纳米管或孔材料（Polymer Nanotube or Pores）；

（28）聚合物纳米线（Polymer Nanowire）；

（29）纳米结构材料（Nanostructural Materials）；

（30）富勒烯（Fullerenes）研究新进展；

（31）纳米结构高分子材料（Nanostructural Polymer Materials）；

（32）纳米线与管（Nanowire and Nanotubes）；

(33) 光导电高分子材料 (Photoconductive Polymers);
(34) 液晶 (Liquid Crystals) 材料;
(35) 光子晶体 (Photonic Crystals);
(36) 尼龙 66 的制备与应用 (Nylon-66, preparation, application);
(37) 组合化学 (Combinatorial chemistry);
(38) 杯芳烃 (Calixarene);
(39) 微波辐射 (Microwave irradiation);
(40) 离子液体 (Ionic liquid);
(41) 离子液体 (Ionic liquid) 功能化高分子材料;
(42) 相转移催化 (Phase transfer catalysis);
(43) 不对称合成 (Asymmetric synthesis);
(44) 新型烯烃聚合催化剂 (Olefin, polymerization, catalyst);
(45) 碳酸二甲酯 (Dimethyl carbonate);
(46) 超临界 CO_2 介质中的化学反应 (Supercritical carbon dioxide, reaction medium);
(47) 分子电子器件 (Molecular electronic device);
(48) 金属复分解反应 (Metathesis);
(49) 原子经济反应 (Atom economical reaction);
(50) 生物质 (Biomass);
(51) 催化抗体 (Catalytic antibody);
(52) 一瓶多步串联反应 (One-pot multistep tandem reaction);
(53) 纳米二氧化钛 (Nano Titanium dioxide) 的制备与功能;
(54) 聚甲基丙烯酸甲酯的制备与应用 (PMMA, preparation, application);
(55) 隐形材料 (Stealth material; Latent material);
(56) 超疏水表面材料 (Superhydrophobic surface materitial)。

要求 1: 论文框架 (形式) 包括:

标题 (中文、英文)	引言/前言
作者 (中文、英文)	正文部分
单位 (中文、英文)	结束语部分
摘要 (Abstract)	致谢
关键词 (Keywords)	参考文献
注释 (作者简介、致谢)	

要求 2: 参考文献不能少于 5 篇, 其中英文文献不少于 1 篇。①印刷版参考文献按照本书“文献著录格式”要求著录。②对于只查到文摘的信息, 如 CA 文摘, 要记录的内容包括 CA 卷、期及文摘号、题目、刊名及卷、期、页码、文种等。如果原文献是评论 (review) 的要注明。③通过网络检索的内容要注明网站名称、详细网址及下载时间。

提示: 请参阅 10.6 化学化工信息的检索与利用实例。

附　录

附录 1　希腊字母

大写	小写	字母名称	化学含义	大写	小写	字母名称	化学含义
A	α	alpha	解离度；线膨胀或体膨胀系数	N	ν	nu	
B	β	beta		Ξ	ξ	xi	
Γ	γ	gamma	表面张力；牛顿引力常数	O	o	omicron	
Δ	δ	delta	扩散系数；双键	Π	π	pi	
E	ε	epsilon	介电常数	P	ρ	rho	
Z	ξ	zeta		Σ	σ 或 ξ	sigma	表面张力
H	η	eta	黏度	T	τ	tau	
Θ	θ	theta		Υ	υ	upsilon	
I	ι	iota		Φ	ϕ 或 φ	phi	
K	κ	kappa	电导率	X	χ	chi	
Λ	λ	lambda	波长	Ψ	ψ	psi	
M	μ	mu	微米	Ω	ω	omega	

附录 2　罗马数字表

罗马数字	Ⅰ	Ⅱ	Ⅲ	Ⅳ	Ⅴ	Ⅵ	Ⅶ	Ⅷ	Ⅸ	Ⅹ
阿拉伯数字	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
罗马数字	XX	XXX	XL	L	LX	LXX	LXXX	XC	IC	C
阿拉伯数字	20	30	40	50	60	70	80	90	99	100
罗马数字	CC	CCC	CD	D	DC	DCC	DCCC	CM	XM	M
阿拉伯数字	200	300	400	500	600	700	800	900	990	1000

附录 3　国际单位制中米制采用的字首

因　数	字　首	符号	中文(举例)	因　数	字　首	符号	中文(举例)
10^{-18}	atto	a	渺，阿[托]，微微微	10^{-1}	deci	d	分，十分之一
10^{-15}	femto	f	毫微微，Femtosecoond，飞[母托]	10	deca	da	十
10^{-12}	pico	p	微微，皮[可]	10^{2}	hecto	h	百
10^{-9}	nano	n	毫微，纳[诺]	10^{3}	kilo	k	千
10^{-6}	micro	μ	微	10^{6}	mega	M	兆，百万
10^{-3}	milli	m	毫	10^{9}	giga	G	吉[咖]，千兆，十亿
10^{-2}	centi	c	厘，百分之一	10^{12}	tera	T	太[拉]，兆兆，垓

附录4　化学名称常用数字字首

数字	字　首	数字	字　首	数字	字　首	数字	字首	数字	字　首
$\frac{1}{2}$	hemi-	$1\frac{1}{2}$	sesqui-	$2\frac{1}{2}$	hemipenta-				
		10	deca-	20	eicosa-	30	triaconta-	100	hecta-
1	mono-	11	hendeca-, undeca-	21	heneicosa-	40	tetraconta-	101	henhecta-
2	di-, bi-	12	dodeca-	22	docosa-	50	pentaconta-	102	dohecta-
3	tri-	13	trideca-	23	tricosa-	60	hexaconta-	110	decahecta-
4	tetra-	14	tetradeca-	24	tetracosa-	70	heptaconta-	120	eicosahecta-
5	penta-	15	pentadeca-	25	pentacosa-	80	octaconta-	200	dicta-
6	hexa-	16	hexadeca-	26	hexacosa-	90	nonaconta-		
7	hepta-	17	heptadeca-	27	heptacosa-				
8	octa-	18	octadeca-	28	octacosa-				
9	ennea-, nona	19	nonadeca-	29	nonacosa-				

附录5　系统命名中常见基团的词头、词尾名称对照表

类别	基团	词头名称	词尾名称
甲基 乙基	$-CH_3$ $-CH_2CH_3$	Methyl- Ethyl-	Methane Ethane
正离子		-onio, -onia	-onium
羧酸	—COOH —(C)OOH	Carboxy- —	-carboxylic acid -oic acid
磺酸	$-SO_3H$	Sulfo	-sulfonic acid
盐类	—COOM —(C)OOM	— —	metal carboxylate meta…oate
酯	—COOR —(C)OOR	R-oxycarbonyl —	R-carboxylate R…oate
酰卤	—CO—X —(C)O—X	halo formyl —	-carbonyl halide -oyl halide
酰胺	$-CONH_2$ $-(C)ONH_2$	Carbamoyl —	-carboxamide -amide
脒	$-C(=NH)-NH_2$ $-(C)(=NH)-NH_2$	Amidino —	-carboxamidine -amidine
腈	—CN —(C)N	Cyano —	-carbonitrile -nitrole
醛	—CHO —(C)HO	Formyl oxo	-carbaldehyde -al
烷基 芳基	R— Ar—	Alkyl- Aryl-	Alkane Arene
酮	$\diagdown C=O \diagup$	oxo	-one

续表

类别	基团	词头名称	词尾名称
醇	—OH	Hydroxy	-ol
酚	—OH	Hydroxy	-ol
硫醇	—SH	Mercapto	-thiol
氢过氧化物	—O—OH	Hydroperoxy	
胺	$—NH_2$	Amino	-amine
亚胺	═NH	Imino	-imine
醚	—OR	R-oxy	
硫醚	—SR	R-thio	
过氧化物	—O—OR	R-dioxy	

注：“（C）”表示用这种命名法对碳原子编号时，此碳原子计入。

附录 6　CA 常用字符

附录 6-1　黑本式（Hepburn）罗马字母（作者姓名、刊名）转译日文字母（片假名）对照表

a（ア）	i（イ）	u（ウ）	e（ュ）	o（ォ）	ra（ラ）	ri（リ）	ru（ル）	re（レ）	ro（ロ）
ka（カ）	ki（キ）	ku（ク）	ke（ヶ）	ko（コ）	wa（ワ）	i（ヰ）	u（ウ）	e（ヱ）	o（ヲ）
sa（サ）	shi（シ）	su（ス）	se（セ）	so（ソ）	n（ン）				
ta（タ）	chi（チ）	tsu（ツ）	te（テ）	to（ト）	ga（ガ）	gi（ギ）	gu（グ）	ge（ゲ）	go（ゴ）
na（ナ）	ni（ニ）	nu（ヌ）	ne（ネ）	no（ノ）	za（ザ）	ji（ジ）	zu（ズ）	ze（ゼ）	zo（ゾ）
ha（ハ）	hi（ヒ）	fu（フ）	he（ヘ）	ho（ホ）	da（ダ）	ji（ヂ）	zu（ヅ）	de（デ）	do（ド）
ma（マ）	mi（ミ）	mu（ム）	me（メ）	mo（モ）	ba（パ）	bi（ピ）	bu（プ）	be（ペ）	bo（ポ）
ya（ヤ）	i（イ）	yu（ュ）	e（ユ）	yo（ヨ）	pa（バ）	pi（ビ）	pu（ブ）	pe（ベ）	po（ボ）

kya（キヤ）	kyu（キュ）	kyo（キヨ）	rya（リヤ）	ryu（リュ）	ryo（リヨ）
sha（シヤ）	shu（シュ）	sho（シヨ）	gya（ギヤ）	hyu（ギュ）	gyo（ギヨ）
cha（チヤ）	chu（チュ）	cho（チヨ）	ja（ジヤ）	ju（ジュ）	jo（ジヨ）
nya（ニヤ）	nyu（ニュ）	nyo（ニヨ）	ja（ヂヤ）	ju（ヂュ）	jo（ヂヨ）
hya（ヒヤ）	hyu（ヒュ）	hyo（ヒヨ）	bya（ピヤ）	byu（ピュ）	byl（ピヨ）
mya（ミヤ）	myu（ミュ）	myo（ミヨ）	pya（ビヤ）	pyu（ビュ）	pyo（ビヨ）

附录 6-2　英文字母转译俄文字母对照表

英文(俄文)	英文(俄文)	英文(俄文)	英文(俄文)	英文(俄文)
A（А）	B（Б）	V（В）	G（Г）	D（Д）
E（Е）	E（Ё）	ZH（ж）	Z（З）	I（И）
I（Й）	K（К）	L（Л）	M（М）	N（Н）
O（О）	P（П）	R（Р）	S（С）	T（Т）
U（У）	F（Ф）	KH（Х）	TS（Ц）	CH（Ч）
Sh（Ш）	SHCH（Щ）	（ь）①	Y（Ы）	（Ъ）①
E（Э）	YU（Ю）	YA（Я）		

① 在语尾时可省略。

附录 6-3　语种的缩写与全称对照表

缩　写	全　称	缩　写	全　称
Bulg	Bulgarian(保加利亚文)	Neth.	Netherlandish(荷兰文)
Ch	Chinese(中文)	Norweg	Norwegian(挪威文)
Croat	Croatian(克罗地亚文)	Pol	Polish(波兰文)
Dan	Danish(丹麦文)	Port	Portuguese(葡萄牙文)
Eng	English(英文)	Rom	Romania(罗马尼亚文)
Fr	French(法文)	Russ	Russian(俄文)
Ger	German(德文)	Slo	Slovak(斯洛伐克文)
Hung	Hungarian(匈牙利文)	Span	Spanish(西班牙文)
Ital	Italian(意大利文)	Swed	Swedish(瑞典文)
Japan	Japanese(日文)	Ukrain	Ukrainian(乌克兰文)

附录 6-4　科技文献术语简写

Acc(Accounts)报告	Lett(Letters)快报、通信
Acta(Acta Journal)学报	N(Note)札记
Ann(Annual)年鉴	Proc(Proceeding)会刊、院报
Bull(Bulletin)通报	Progr(Progress)进展
J(Journal)杂志、期刊	T. M. (Technical Memorandum)技术备忘录

附录 6-5　CA 索引文摘号前常用的缩写和符号

缩写	全　称	中　文
B	for Book and audio-visual materials	图书及音像材料
R	for Review	综述
P	for Patent	专利
pr-	This designation signifies the presence of *preparative* information pertaining to the Chemical Substance Index heading in the source document	制备信息
rct-	This designation signifies the presence of *reaction* information pertaining to the Chemical Substance Index heading in the source document (12. 3)	反应信息
cat-	This designation signifies the presence of *catalytic* information pertaining to the Chemical Substance Index heading in the source document	催化信息

附录 6-6　CA 出版物中常用缩写和符号

缩写	全称　中文
A	atto-(10^{-18}),渺;毫尘;微微微;10^{-18}米
A	ampere,安培
A	angstrom unit,埃;10^{-10}米
abs.	absolute,绝对的
abstr.	abstract,抽象的;文摘
a. c.	alternating current,交流电
addn.	addition,添加
addnl.	additional(ly),另外的(地)

续表

缩写	全称 中文
alc.	alcohol, alcoholic,酒精,乙醇的
aliph.	aliphatic,脂肪族的
alk.	alkaline (not alkali),碱性的(不是碱)
alky.	alkalinity*,碱度
a. m.	ante meridiem,午前、上午
amt.	amount,总量
amu.	Atomic mass unit,原子质量单位
anal.	analysis*、analytical(ly),分析、分析的
anhyd.	anhydrous,无水的
AO	atomic orbital,原子轨道函数
app.	apparatus,仪器、装置
approx.	Approximately(ly),近似的(地)
approxn.	approximation,近似法、近似值
aq.	aqueous,水的、含水的
arom.	aromatic,芳香的、芳香族的
assoc	associate,缔合、缔合物
assocd.	associated,缔合了的
assocg.	associating,缔合、缔合作用
assocn.	association,缔合作用
asym.	asymmetric(al)(ly),不对称的(地)
at.	atomic (not atom),原子的(不是原子)
atm	atmosphere (the unit),大气压(单位)
atm.	atmosphere, atmospheric,大气的
av.	average,平均
b.	(followed by a figure denoting temperature) boils at, boiling at (similarly b_{13}, at 13mm pressure),后面跟一数字表示在该压力下的沸点
bbl	barrel,桶(石油容积单位等于 158. 99 升)
bcc.	Body centered cubic,体心立方
BeV or GeV	billion electron volts,十亿电子伏
BOD	Biochemical oxygen demand,生化需氧量
μB	Bohr magneton,波尔磁子
b. p.	Boiling point,沸点
Bq	becquerel,贝克勒耳(放射性强度单位, 1Bq=1 秒$^{-1}$=2. 703×10^{-11}居里)
Btu	British thermal unit,英制热单位
bu	bushel,蒲式耳(容量单位)
Bu	butyl(normal),丁基 $CH_3(CH_2)_2CH_2$—
c-	centi-(10^{-2}),厘;百分之一
C	coulomb,库仑

续表

缩写	全称　中文
℃	degree Celsius (centigrade)，摄氏度
Cal.	calorie，卡(热量单位)
calc.	calculate，计算
calcd.	calculated，算清了的、设计负载
calcg.	calculating，计算的
calcn.	calculation，计算
CD	circular dichroism，圆二色性
c. d.	current density，电流密度
cf.	compare(in bibliographic references only)，比较、参看(仅用于文献参考上)
cfm.	cubic feet per minute，立方英尺/分
chem.	chemical(ly)，chemistry，化学的、化学
Ci	curie，居里(放射性强度单位：$3.7\times10^{10}\ s^{-1}$)
clin	clinical(ly)，临床的
CoA	coenzyme A，辅酶 A
COD	Chemical oxygen demand，化学需氧量
coeff.	coefficient，系数
com.	commerical(ly)，商业的(地)
compd.	compound，化合物、混合物、复合物
compn.	composition，配方、成分、组成
conc.	concentrate，浓缩、提浓物
Concd.	concentrated，浓的
concg.	concentrating，浓缩
concn.	concentration，浓度、浓缩
cond.	conductivity*，导电率、传导率
const.	constant，常数、恒量
contg.	containing，容量
cor.	corrected，合格的、校正的
CP	chemically pure，化学纯
crit.	critical(ly)，临界的
cryst.	crystalline(notcrystallize)，结晶的
crystd.	crystallized，结晶的
crystg.	crystallizing，结晶
crystn.	crystallization，结晶(作用)
cwt	hundredweight，二十分之一吨(=112 英磅)
d-	deci-(10^{-1})，(拉丁字头)分、十分之一
d.	Density，密度、强度、浓度
D	debye unit，德拜单位(电偶极矩单位、等于 10^{-18}静电单位厘米、或 3.336^{-30}库仑米)

续表

缩写	全称 中文
da-	deka-(10^1),(构词成分)=deca
d. c.	direct current,直流电
decomp.	decompose,分解
decompd.	decomposed,分解的
decompg	decomposing,分解的、分解作用
decompn	decomposition,分解、裂解
degrdn	degradation,降解、老化
deriv	derivative,衍生物、导(函)数
det	determine,测定
detd	determined,测定的
detg	determining,测定的
detn	determination,测定
diam	diameter,直径
dil	dilute,稀释、淡的
dild	diluted,稀释的
dilg	diluting,稀释的
diln	dilution,稀释、稀释度
dissoc	dissociate,离解
dissocd	dissociated,解离的
dissocg	dissociating,离解的、离解作用
dissocn	dissociation,离解作用、溶解
distd.	distilled,蒸馏过的、馏出的
distg	distilling,蒸馏的、蒸馏作用
distn	distillation,蒸馏作用
d. p.	Degree of polymerization,聚合度
dpm	disintegrations per minute,每分钟裂变数
E-	exa-(10^{18}),词头,指 10^{18}
ECG	electrocardiogram,心电图
ED	effective dose,有效剂量
EEG	electroencephalogram,脑电流示波器
elec	electric, electrical(ly),电的
emf	Electromotive,force,电动势
emu	electromagnetic unit,电磁单位
en	ethylenediamine(used in Werner complexes only),1, 2-乙二胺(仅用于韦尔纳络合物)
equil	equilibrium(s),平衡
equiv	equivalent(the unit),当量(单位)
equiv.	equivalent,当量的、相当的

续表

缩写	全称　中文
esp	especially，特别、尤其、主要
est	estimate，估计量
estd	estimated，估计的、测定的
estg	estimating，评价、计算
estn	estimation，估定、测定
esu	Electrostatic unit，静电单位
Et	ethyl，乙基、CH_3CH_2—
Et al	And others，等等(指人)
etc	Et cetera，等等(指事物)
eV	Electron volt，电子伏特
evap	evaporate，蒸发
evapd	evaporated，蒸发的
evapg	evaporating，蒸发、汽化
evapn	evaporation，蒸发作用
examd	examined，检验、检定试验
examg	examining，检验的
examn	examination，检验(法)
expt	experiment，试验、实验
exptl	experimental(ly)，实验的
ext	extract，提取、萃取、提取液
extd	extracted，提取出的
extg	extracting，(植鞣革)滚浓鞣液
extn	extraction，提取(法)、萃取(法)
F	farad，法拉(电容单位)
°F	Degree Fahrenheit，华氏温度
f-	Femto-(10^{-15})，词头，指 10^{-15}
fcc	Face centered cubic，面心立方
fermn	fermentation，发酵
f. p.	Freezing point，凝固点、冰点
ft	foot，脚、英尺
ft-lb	foot-pound，英尺-磅
g	gram，克
g	Gravitational constant，万有引力常数
(g)	gas，Only as in $H_2O(s)$，气体[像 $H_2O(g)$这样用表示气体]
G	gauss，高斯(磁感应强度单位)
G-	giga-(10^9)，词头，指 10^9
gal	gallon，加仑

续表

缩写	全称 中文
Gy	gray(absorbed radiation dose),戈瑞(吸收辐射剂量)
h	hour,小时
h-	Hecto-(10^2),词头,指 10^2
H	henry,亨利(电感单位)
ha	hectare,公顷(等于 100 公亩或 2.471 英亩,合 15 市亩)
Hb	hemoglobin,血红蛋白
hcp	hexagonal close-packed,六方密排
Hz	hertz(cycles/sec),赫兹(周/秒)
ID	inhibitory dose,抑制剂量
Ig	immunoglobulin,免疫球蛋白
i. m.	Intramuscular(ly),肌肉内的
in.	inch,英寸
inorg	inorganic,无机的
insol	insoluble,不溶(解)的
i. p.	Intraperitoneal(ly),内腹膜的
IR	infrared,红外(线)的
irradn	irradiation,光渗、照射、用紫外线照射
IU	international,unit,国际单位
i. v.	intravenous(ly),静脉内的
J	joule,焦耳(能量单位)
k-	kilo-(10^3),词头,指 10^3
K	kelvin,开尔文
L	liter,升(Liter)
(l)	liquid, only as in NH_3(l),液体[像 NH_3(l)这样用表示液体]
lab	laboratory,实验室
lb	pound,磅
LCAO	linear combination of atomic orbitals,原子轨道函数的线性组合(法)
LD	lethal dose,致死(剂)量
LH	luteinizing hormone,促黄体(生成)激素
liq.	liquid,液体、液态的
lm	lumen,流明(发光度单位)
lx	lux,勒克斯(照度单位)
m	meter,米、公尺、计、表
m	molal,(重量)摩尔的、摩尔的、(重量)摩尔(浓度)的
m-	milli-(10^{-3}),词头,指 10^{-3}
m.	melts at, melting at,熔化
M	molar,(体积)摩尔的、摩尔的、(体积)摩尔(浓度)的

续表

缩写	全称　中文
M-	mega-(10^6)，词头，指 10^6
manuf,	manufacture，制造、制造品、制造厂
manufd	manufactured，制造的
manufg	manufactring，制造的
math	mathematical(ly)，数学的
max	maximum(s)，最大值
Me	methyl(not metal)，甲基 CH_3—(不是金属)
mech	mechanical(ly)(not mechanism)，机械的、力学的(不是机理)
metab	metabolism，新陈代谢
mi	mile，英里
min	minute(time)，分(时间)
min	minimum(s)，最小值
misc	miscellaneous，混杂的、多种的
mixt	mixture，混合物
MO	molecular orbital，分子轨道
mo	month，月
mol	mole(the unit)，摩尔(单位)
mol.	molecule, molecular，分子
m. p.	melting point，熔点
mph	miles per hour，英里/小时
μ-	micro-(10^{-6})，词头，指 10^{-6}
Mx	maxwell，麦克斯韦(物理学磁量单位)
n	Refractive index(n_D^{20} for 20°and sodium D light)，折射率(n 表示在 20℃和钠 D 光下的折射率)
n-	Nano-(10^{-9})，词头，指 10^{-9}
neg	negative(ly)，阴电性的、负性的、负数、照相底片、反面、电负性的
no	number，数目、数值、数字、计数、号码
obsd	observed，观察的
Oe	oersted，奥斯忒(磁场强度单位 0)
Ω	ohm，欧姆(电阻单位)
org	organic，有机的
oxidn	oxidation，氧化作用
oz	ounce，盎司、英两
P-	Pico-(10^{-12})，词头，指 10^{-12}
P	poise，泊(黏度单位)
P-	Peta-(10^{15})，词头，指 10^{15}
Pa	pascal，帕斯卡
p. d.	Potential difference，势差、位差、电位差
Ph	phenyl，苯基 C_6H_5—
Phys	physical(ly)，物理的、物质的、身体的、物理学的

续表

缩写	全称 中文
p. m.	post meridiem,下午
polymd	polymerized,聚合的
polymg	polymerizing,聚合
polymn	polymerization,聚合作用
pos	positive(ly),正的、阳电性的、照相正片、肯定的,正面的
powd	powdered,磨成粉状的
ppb	parts per,billion,十亿分之一
ppm	parts per,million,百万分之一
ppt	precipitate,沉淀物、沉淀出、使沉淀
pptd	precipitated,沉淀的、沉淀出的
pptg	precipitating,沉淀的
pptn	precipitation,沉淀作用、析出
Pr	propyl(normal),丙基 $CH_3CH_2CH_2$—
prep	prepare,制备、精制
prepd	prepared,精制的
prepg	preparing,制备、准备
prepn	preparation,准备、制剂、预备
prodn	production,生产、制造
psi	pounds per square inch,磅/平方英寸
psia	pounds per square inch absolute,磅/平方英寸、绝对压力
psig	pounds per square inch gage,磅/平方英寸、表压
pt	pint,品脱(容量单位)
purifn	purification,提纯、净化、纯化、精制
py	pyridine(used in Werner complexes only),吡啶 C_5H_5N
Qt	quart,夸脱(干量或液量单位)
qual	qualitative(ly),定量的、数量上的
quant	quantitative(ly),定性的、描述的、质的
R	roentgen,伦琴(射线)
redn	reduction,还原、简化、减少
ref.	reference,参考、参考文献
rem	roentgen equivalent man,人体伦琴当量
rep	roentgen equivalent physical,物理伦琴当量
reprodn	reproduction,繁殖、生殖、复制、仿造
resoln	resolution,分辨、解析、拆开、溶解
resp	respective(ly),各自的、分别的(地)
rpm	revolutions per minute,每分钟转速
RQ	respiratory quotient,呼吸商

续表

缩写	全称　中文
s	second (time unit only)，秒(仅用于时间单位)
(s)	solid, only as in AgCl(s)，固体，仅用于如 AgCl(s)
S	siemens，西门子
sapon	saponification，皂化作用
sapond	saponified，皂化了的
sapong	saponifying，皂化
sat	saturate，使饱和
satg	saturating，使饱和
satn	saturation，饱和、饱和度
s. c.	subcutaneous(ly)，皮下的
SCE	Saturated calomel electrode，饱和甘汞电极
SCF	Self-consistent field，自洽场
sec	secondary(with alkyl groups only)，第二的(仅用于烷基原子团)
sep	separate(ly)，分离、脱离、插入
sepd	separated，分离的
sepg	separating，分开的
sepn	separation，分离、离析、分开
sol	soluble，可溶的、可解释的
soln	solution，溶液、溶解、数学解法
soly	solubility，溶解度、溶解性、可溶性
sp	specific(used only to qualify physical constant)，比值的(仅用于限定物理常数)
sp. gr	specific gravity，密度
sr	steradian，球面度(物理)
St	stokes，托(运动黏度单位)
std	standard，标准、标准物、标准的
sym	symmrtric(al)(ly)，对称的
T	tesla，特斯拉(磁通量单位)
T-	tera-(10^{12})、词头，指 10^{12}
tbs	tablespoon，大汤匙
tech	technical(ly)，技术的、工艺的、专业的
temp	temperature，温度
tert	tertiary(with alkyl groups only)，叔、第三的(仅用于烷基原子团)
theor	theoretical(ly)，理论的
thermodn	thermodynamic(s)，热力学
titrn	titration，滴定法
tsp	teaspoon，茶匙
USP	United States Pharmacopeia，美国药典

续表

缩写	全称　中文
UV	ultraviolet，紫外线、紫外线的
V	volt，伏特(电压单位)
VS	versus，与…相对
vol	volume(no，volatile)，体积(非挥发性的)
W	watt，瓦特(功率单位)
Wb	weber，韦伯(磁通量单位：10^8 麦克斯韦)
wk	week，星期
wt	weight，重量
yd	yard，码(长度单位：3 英尺)
yr	year，年

参 考 文 献

[1] 王荣民，杜正银主编. 化学化工信息及网络资源的检索与利用. 第三版. 北京：化学工业出版社，2012.

[2] 化学学科信息门户（ChIN）（http：//chin. csdl. ac. cn/）；国家科技图书文献中心（国家科技数字图书馆）（www. nstl. gov. cn）；中科院文献情报中心（国家科学图书馆）（www. las. ac. cn）；中国国家图书馆（中国国家数字图书馆）（www. nlc. gov. cn）.

[3] 百度（www. baidu. com）；Google 学术搜索（scholar. google. com）；各国专利网站；Elsevier、ACS、Wiley 等国际科学类出版社；Pubmed（www. ncbi. nlm. nih. gov/pmc）.

[4] 余向春编著．化学文献及查阅方法．北京：科学出版社，2003.

[5] 潘家祯主编．科技文献检索手册．北京：化学工业出版社，2001.

编者简介

《化学化工信息及网络资源的检索与利用》一书的作者为从事化学、化工、材料、生物、医学领域的科研人员（包括教授、副教授、博士）。具有长期检索与利用化学化工相关信息的丰富经历，了解如何快速准确地获得信息的方法；部分作者讲授本科生、研究生的化学化工信息检索课程。

主编王荣民：西北师范大学二级教授、博士生导师；中国科学院兰州化学物理研究所理学博士；日本 Waseda University（早稻田大学）客座教授；澳大利亚 RMIT 大学高级访问学者；甘肃省青年科技奖获得者；入选教育部“新世纪优秀人才支持计划”。长期从事化学、生物、材料相关的科学研究与应用开发工作。主持承担了 10 余项国家自然科学基金项目和省部级重点科研项目。在“J. Am. Chem. Soc.”“Angew. Chem.”“J. Contr. Rel.”等国际、国内核心刊物与会议发表科研论文 200 余篇；申请国家发明专利 50 余件。获省（部）级科技进步奖 3 项；应用成果转让后已经取得数千万元经济效益。详见“百度百科”中有关“王荣民”的介绍，以及个人主页（http：//www. nwnu. edu. cn/aarticle. do? id＝14075）的介绍。

Document generated by Anna’s Archive around 2023-2024 as part of the DuXiu collection (https://annas-blog.org/duxiu-exclusive.html).

Images have been losslessly embedded. Information about the original file can be found in PDF attachments. Some stats (more in the PDF attachments):

{
  "filename": "MTQwNzA4MzUuemlw",
  "filename_decoded": "14070835.zip",
  "filesize": 145675670,
  "md5": "2373bb0a8f315275fd1abf4af0a20d28",
  "header_md5": "d02e359d69eccf15b63aedbc3817abb0",
  "sha1": "fde836d42c87ac6767dc03a5b04477764902048b",
  "sha256": "7aa9950111c0f9e3d8368eba737d97c33935a3dfd6f1e3b4b11224ef4e1d669a",
  "crc32": 3268653867,
  "zip_password": "52gv",
  "uncompressed_size": 157082081,
  "pdg_dir_name":
"\u5316\u5b66\u5316\u5de5\u4fe1\u606f\u53ca\u7f51\u7edc\u8d44\u6e90\u7684\u68c0\u7d22\u4e0e\u5229\u7528
\u7b2c4\u7248=INFORMATION RETRIEVAL AND UTILIZATION IN CHEMISTRY AND RELATED FIELDS_14070835",
  "pdg_main_pages_found": 250,
  "pdg_main_pages_max": 250,
  "total_pages": 266,
  "total_pixels": 1566778752,
  "pdf_generation_missing_pages": false
}