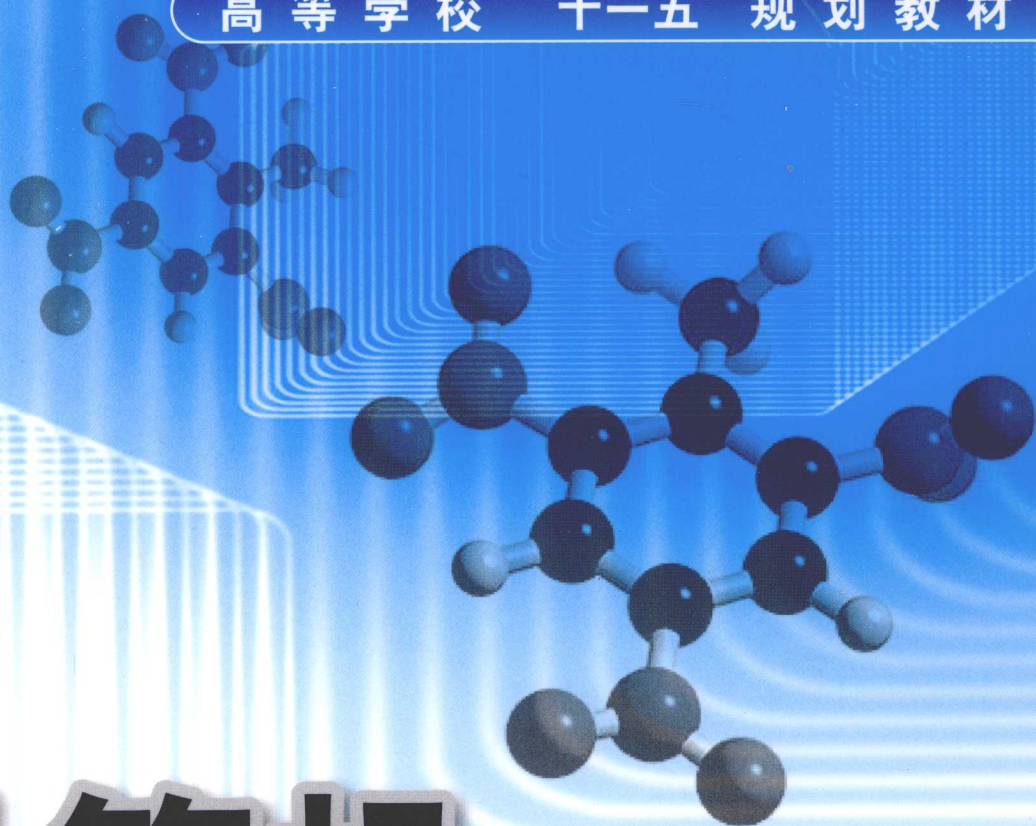


高等学校“十一五”规划教材



计算机

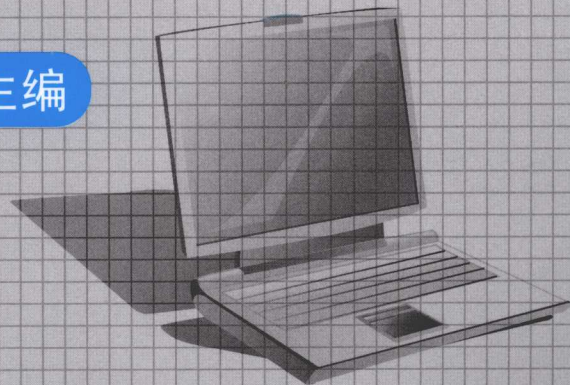
在化学化工中的应用

JISUANJI ZAI HUAXUE HUAGONG ZHONG
DE YINGYONG

李谦 毛立群 房晓敏 主编



化学工业出版社



高等学校“十一五”规划教材

计算机在化学化工中的应用

李谦 毛立群 房晓敏 主编



化学工业出版社

·北京·

本书主要介绍应用计算机解决化学、化工领域一些常见问题的基本理论、方法、软件和应用。全书分为文献检索与管理、实验设计与数据处理、化学化工图形与图像处理、化学化工计算、论文撰写与演示五个相对独立的部分。具体内容包括：计算机文献检索，计算机文献管理，正交试验设计，化学编辑排版，实验数据的图形化处理，使用 Visio 2007 绘制化学化工图形，Matlab 与化学化工计算，Excel 与化工最优化问题，化工过程模拟，计算机在科技论文撰写及演讲中的应用，附录部分介绍了 Matlab 应用基础及学术论文撰写规范示例。

本书可供高等及高职高专院校化学、化学工程及相关专业师生使用，也可供计算机技术爱好者参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

计算机在化学化工中的应用 / 李谦, 毛立群, 房晓敏主编. —北京: 化学工业出版社, 2010.5
高等学校“十一五”规划教材
ISBN 978-7-122-07923-7

I. 计… II. ①李… ②毛… ③房… III. ①计算机应用-化学-高等学校-教材②计算机应用-化学工业-高等学校-教材 IV. ①06-39②TQ015.9

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2010) 第 040620 号

责任编辑: 陈有华
责任校对: 洪雅姝

文字编辑: 颜克俭
装帧设计: 刘丽华

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 装: 三河市延风印装厂
787mm×1092mm 1/16 印张 15¼ 字数 376 千字 2010 年 6 月北京第 1 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: 28.00 元

版权所有 违者必究

前 言

随着计算机科学与技术的高速发展及其与传统化学、化工学科的不断交叉、渗透与整合,现代计算机技术正在化学、化工专业的科研、生产、教学中起到日益重要的作用。计算机在化学、化工专业的应用已不仅局限于传统的办公、图形处理等范围。在化学品开发、反应机理研究、设备设计、过程控制、工艺优化、辅助教学等领域,计算化学和计算化学工程的重要作用日益凸显。对于化学、化工专业的学生和科研人员,熟练应用计算机解决学习、科研、工作中面临的各种问题已成为必备的基本技能。

本书主要介绍应用计算机解决化学、化工领域一些常见问题的基本理论、方法、软件和应用。在全书的编排组织上,根据化学化工专业科研问题的一般研究思路和常用方法,全书分为文献检索与管理、实验设计与数据处理、化学化工图形与图像处理、化学化工计算、论文撰写与演示五个相对独立的部分。第1、2章主要介绍化学化工相关文献、专利、文摘等的检索及文献的管理与应用;第3章介绍正交实验设计方法、实验结果的分析处理方法及计算机实现;第4~6章介绍化学、化工常用图形的编辑制作,包括化学分子式、实验设备图形的绘制,实验数据的图形化以及工艺流程图和设备图的绘制;第7~9章主要介绍化学化工常见计算问题,包括 Matlab 在插值、方程求根、方程组求解等方面的应用,最优化问题的模型、算法及计算机求解,以及过程模拟技术。第10章主要介绍学术论文的撰写思路、结构、格式要求,相关排版技术及演示文稿的制作。

本书由李谦、毛立群、房晓敏任主编,郭泉辉、李润明、徐元清任副主编。全书由李谦统稿。唐少峰、李静茹、孙伟娜、王虹、朱琳等参加了本书部分章节的编校工作。

由于编者水平所限,不妥之处在所难免,敬请广大读者和专家批评指正。

编 者

2010年1月

目 录

1 计算机文献检索	1	2.4.2 EndNote 样式 (Style)	35
1.1 Internet 上的化学化工信息资源	1	2.4.3 利用论文模板撰写论文	35
1.2 通过 Internet 搜索引擎查找化学化工信息	1	习题	37
1.2.1 谷歌	1	3 正交试验设计	38
1.2.2 百度	3	3.1 正交试验的基本概念	38
1.3 化学化工文献数据库的检索	5	3.1.1 正交表	38
1.3.1 中国期刊全文数据库 (中国知网)	5	3.1.2 交互作用表	39
1.3.2 工程索引 EI	9	3.1.3 混合型正交表	40
1.3.3 科学引文索引 SCI	10	3.2 正交试验设计	40
1.3.4 Elsevier 数据库	13	3.3 正交试验的数据处理	42
1.3.5 Wiley InterScience 数据库	15	3.3.1 正交试验数据的直观分析	43
1.3.6 美国化学会 (ACS) 期刊数据库	15	3.3.2 正交试验数据的方差分析	46
1.3.7 其他文献数据库	15	3.4 Excel 在正交试验数据处理中的应用	48
1.4 专利检索	17	3.4.1 Excel 的基本操作	48
1.4.1 专利、专利文献与专利说明书	17	3.4.2 Excel 在正交试验数据处理中的应用	49
1.4.2 德温特世界专利创新索引	18	习题	52
1.4.3 中国专利检索	18	4 化学编辑排版	53
1.4.4 美国专利检索	18	4.1 化学结构绘制软件 ACD/ChemSketch 简介	53
1.5 Internet 上的物性数据库	21	4.1.1 ACD/ChemSketch 简介	53
1.5.1 美国国家标准与技术研究院 (NIST) 的物性数据库	21	4.1.2 结构模式和绘图模式	53
1.5.2 分布式化学数据库统一查询接口 CS ChemFinder	21	4.2 分子结构绘制	55
1.5.3 溶剂数据库 SOLV-DB	21	4.2.1 简单分子结构的绘制	55
1.5.4 国际化学试剂供应商 Aldrich 的网站	21	4.2.2 复杂分子结构的绘制	59
1.6 网上化学化工标准	22	4.2.3 化学反应式的绘制	62
1.6.1 中国标准服务网	22	4.3 图形的绘制	62
1.6.2 世界标准服务网	22	4.4 使用 ChemSketch 预测化合物的宏观性质	64
1.6.3 标准文献的导航站点	22	4.5 其他重要化学绘图软件简介	65
2 计算机文献管理	23	4.5.1 ChemOffice 和 ChemBioOffice	65
2.1 EndNote 简介	23	4.5.2 ChemWindow	66
2.2 建立 EndNote 数据库	23	4.5.3 ISIS Draw	67
2.3 录入文献	24	习题	67
2.3.1 手工录入	24	5 实验数据的图形化处理	69
2.3.2 联网直接检索	25	5.1 Origin 基础知识	69
2.3.3 从网络数据库下载导入	26	5.1.1 Origin 主界面	69
2.4 EndNote 的使用	33	5.1.2 Origin 项目文件	69
2.4.1 在 Word 中插入并编排参考文献	33	5.1.3 Origin 子窗口	70
		5.2 数据录入	71

5.2.1 手动输入	71	7.4 非线性方程(组)的求解	124
5.2.2 通过剪贴板传送	71	7.4.1 非线性方程(组)的数值求解	124
5.2.3 由数据文件导入	71	7.4.2 使用 Matlab 求解非线性方程(组)	125
5.3 绘图	72	7.5 常微分方程(组)的数值解	128
5.3.1 单层二维图形	72	7.5.1 化工中的常微分方程(组)	128
5.3.2 多层二维图形	73	7.5.2 常微分方程(组)的数值解法	128
5.3.3 图形定制	74	7.5.3 使用 Matlab 求解常微分方程(组)	132
5.3.4 三维图形	77	习题	136
5.4 图形输出	79	8 Excel 与化工最优化问题	137
5.4.1 通过剪贴板输出	79	8.1 化工最优化问题	137
5.4.2 输出图形文件	79	8.1.1 化工最优化问题的提出	137
5.5 数据拟合	80	8.1.2 化工最优化问题的几个概念	138
5.5.1 线性拟合	80	8.1.3 化工最优化问题的分类	138
5.5.2 多项式拟合	81	8.2 线性规划	139
5.5.3 其他非线性拟合	81	8.2.1 线性规划的基本理论	139
5.5.4 自定义函数拟合	82	8.2.2 线性规划问题的常用求解方法	141
习题	85	8.2.3 Excel 的规划求解工具	142
6 使用 Visio 2007 绘制化学化工图形	86	8.2.4 使用 Excel 规划求解工具求解 线性规划问题	143
6.1.1 Visio 2007 简介	86	8.3 非线性规划	149
6.1.2 图形绘制基础	86	8.3.1 解析法求解非线性规划问题	150
6.1.3 文本的创建和编辑	94	8.3.2 非线性规划问题的数值求解	152
6.1.4 图层的应用	94	8.3.3 使用 Excel 求解非线性规划问题	152
6.2 化工工艺流程图的绘制	95	习题	153
6.2.1 应用工艺流程图模板建立新图形	95	9 化工过程模拟	155
6.2.2 添加设备、管道与阀门	95	9.1 化工过程模拟技术	155
6.2.3 添加仪表与批注	97	9.1.1 化工过程模拟技术简介	155
6.2.4 工艺流程图的绘制	97	9.1.2 稳态模拟与动态模拟	155
6.3 化工设备图的绘制	105	9.2 Aspen Plus 的基本操作	156
6.3.1 确定图幅与比例	105	9.2.1 Aspen Plus 软件介绍	156
6.3.2 图面安排	105	9.2.2 Aspen Plus 的用户界面	157
6.3.3 绘制各视图	106	9.2.3 使用 Aspen Plus 进行过程模拟 的一般步骤	158
6.3.4 添加标注、明细栏、技术要求	106	9.3 使用 Aspen Plus 进行过程模拟的应 用实例	159
习题	111	9.3.1 闪蒸单元模拟	159
7 Matlab 与化学化工计算	113	9.3.2 C2 组分精馏分离过程设计	164
7.1 Matlab 基础知识	113	9.3.3 复杂过程的模拟	174
7.1.1 Matlab 简介	113	9.4 计算流体力学	176
7.1.2 Matlab 的界面	113	9.4.1 CFD 简介	176
7.1.3 Matlab 的帮助功能	113	9.4.2 CFD 模拟的基本步骤	177
7.2 线性方程组的求解	115	9.4.3 商品化通用 CFD 软件	177
7.2.1 线性方程组的一般形式	116	习题	178
7.2.2 线性方程组解的判断	116	10 计算机在科技论文撰写及演讲中的应用	179
7.2.3 线性方程组的直接求解	117	10.1 科技论文	179
7.3 数据插值	119	10.1.1 科技论文简介	179
7.3.1 数据插值简介	119		
7.3.2 插值方法	120		
7.3.3 使用 Matlab 进行数据插值	121		

10.1.2	科技论文的基本结构	179	I.1.3	字符串及其运算	208
10.1.3	期刊发表的学术论文	180	I.1.4	矩阵及其运算	210
10.1.4	学位论文	180	I.2	变量和工作空间的管理	219
10.1.5	科技论文的内容与格式要求	180	I.2.1	变量的查找	219
10.2	Microsoft Word 在论文撰写中的应用	182	I.2.2	变量的保存和读取	219
10.2.1	Microsoft Word 2007 的用户界面	182	I.2.3	变量的清除	220
10.2.2	Microsoft Word 的基本操作	183	I.3	Matlab 的常用图形处理功能	221
10.2.3	使用 Microsoft Word 撰写论文	198	I.3.1	图形窗口与子图的操作命令	221
10.3	PowerPoint 在制作幻灯片中的应用	199	I.3.2	二维图形绘制命令	222
10.3.1	PowerPoint 的用户界面	199	I.3.3	三维图形绘制命令	224
10.3.2	PowerPoint 的基本操作	199	附录 II	学术论文撰写规范示例	229
附录 I	Matlab 应用基础	207	II.1	某期刊投稿简则	229
I.1	Matlab 的数据类型与计算功能	207	II.2	某研究所研究生学位论文撰写规则	230
I.1.1	变量和常量	207	参考文献		236
I.1.2	数字、变量的运算与格式	207			

1 计算机文献检索

1.1 Internet 上的化学化工信息资源

Internet 是当今世界上最大的信息传播媒介,为化学化工信息检索提供了十分重要而便捷的途径,Internet 上的化学化工信息主要有如下类型。

- ① 化学化工新闻。
- ② 化学化工电子期刊与杂志。
- ③ 化学化工图书。
- ④ 化学会议信息。
- ⑤ Internet 上召开的化学类电子会议。
- ⑥ 专利信息。
- ⑦ 化学数据库。
- ⑧ 化学相关的学会、组织、机构、实验室及小组信息。
- ⑨ 化学产品目录、电子商务及相关公司。
- ⑩ 化学相关的教学资源、化学软件。
- ⑪ 化学化工文献选读。
- ⑫ 在线服务、在线讨论、论坛等。

也可按学科把 Internet 上的化学化工信息分为无机化学、有机化学、物理化学、分析化学、生物化学、高分子化学、化学工程、化学教育及其他类型(如环境化学、材料化学、应用化学、立体化学、医药化学等)。与印刷版文献相比,网络化学信息容量大、检索速度快、便于管理使用。此外,Internet 还提供如期刊与杂志电子版、电子会议、化学化工软件、在线服务、在线讨论等多种功能。中国科学院过程工程研究所计算机化学实验室主办的《重要化学化工信息资源导航网站》提供了很多化学化工信息检索途径,其网址为 <http://www.chinweb.com.cn>。本章主要介绍各种化学化工信息的常用检索方法。

1.2 通过 Internet 搜索引擎查找化学化工信息

1.2.1 谷歌

谷歌(Google)是全世界最大也是最受欢迎的搜索引擎,中文版网址为 <http://www.google.cn>,其首页如图 1-1 所示。

1.2.1.1 常规搜索

可直接在搜索框内输入关键词,如“纳米材料”,然后单击“Google 搜索”按钮(或直接回车)进行搜索。当要求搜索两个或两个以上的关键词时,可以使用逻辑运算符进行搜索。谷歌使用空格表示逻辑“与”操作,如“纳米材料 制备”表示搜索结果须同时含有“纳米材

料”和“制备”这两个关键词；减号“-”表示逻辑“非”操作，如“纳米材料-制备”，表示搜索含有“纳米材料”且不含“制备”关键词的结果；大写的“OR”表示逻辑“或”操作，如输入“纳米材料 OR 制备”，则返回所有含有关键词“纳米材料”或“制备”的搜索结果。上述逻辑算符可混合使用，搜索引擎将按照从左向右的顺序进行读取。

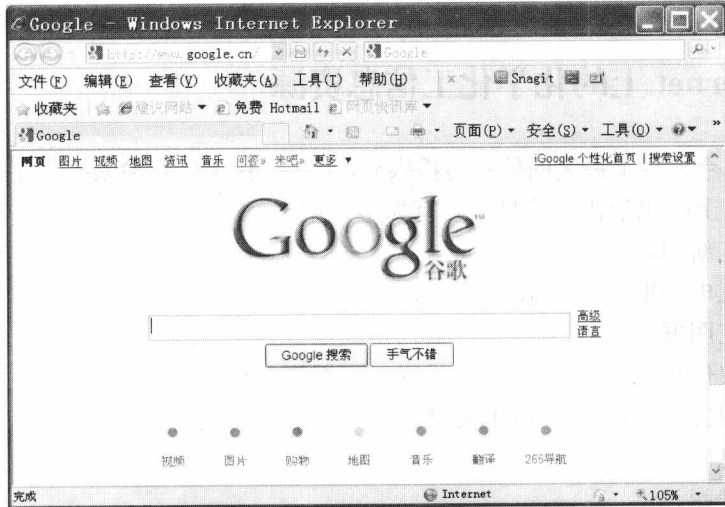


图 1-1 Google 搜索首页

1.2.1.2 文档和学术搜索

谷歌支持对特定格式二进制文件的检索，例如微软的 Office 文档(如.xls、.ppt、.doc、.rtf)，WordPerfect 文档，Lotus1-2-3 文档，Adobe 的.pdf 文档，ShockWave 的.swf 文档（Flash 动画）等。限定所搜索文档的格式需使用“filetype”命令，语法为：关键词 filetype:文件扩展名。例如在搜索框中输入“表面活性剂 filetype:pdf”，将获得所有包含关键词“表面活性剂”的 pdf 格式的文档，如图 1-2 所示。

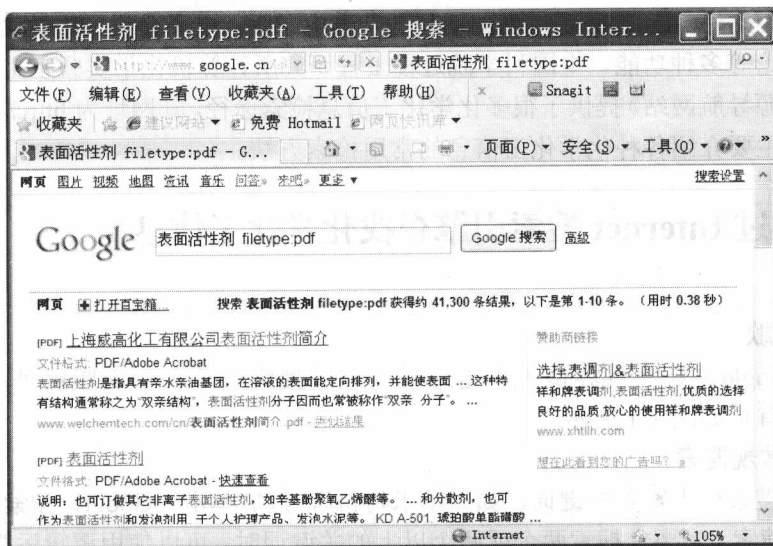


图 1-2 Google 文档搜索结果

为了方便广大科技工作者，Google 还提供了专用的学术搜索工具 Google Scholar，其首页如图 1-3 所示。用户可以同时检索众多学科和资料来源，如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发表的论文、图书和摘要等。可使用网址 <http://scholar.google.cn> 登录 Google 学术搜索进行检索。例如，使用 Google 学术搜索检索关键词“手性合成”获得的检索结果如图 1-4 所示。

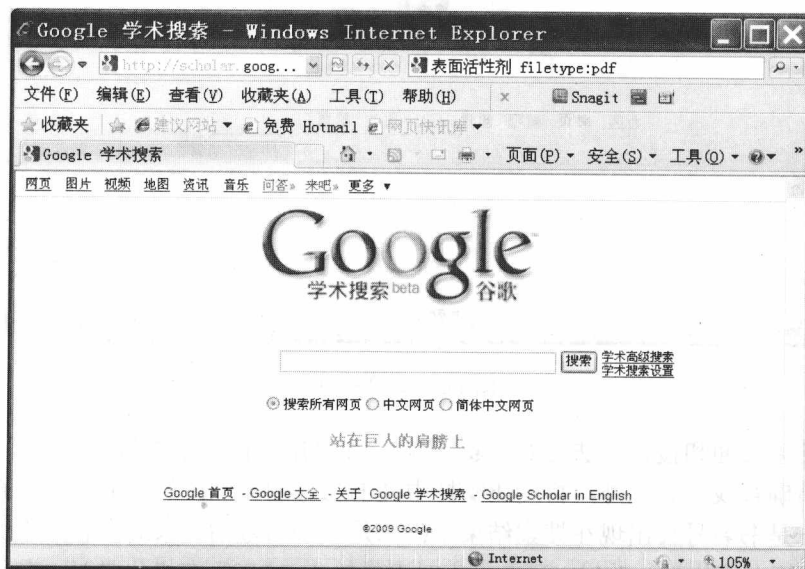


图 1-3 Google 学术搜索首页

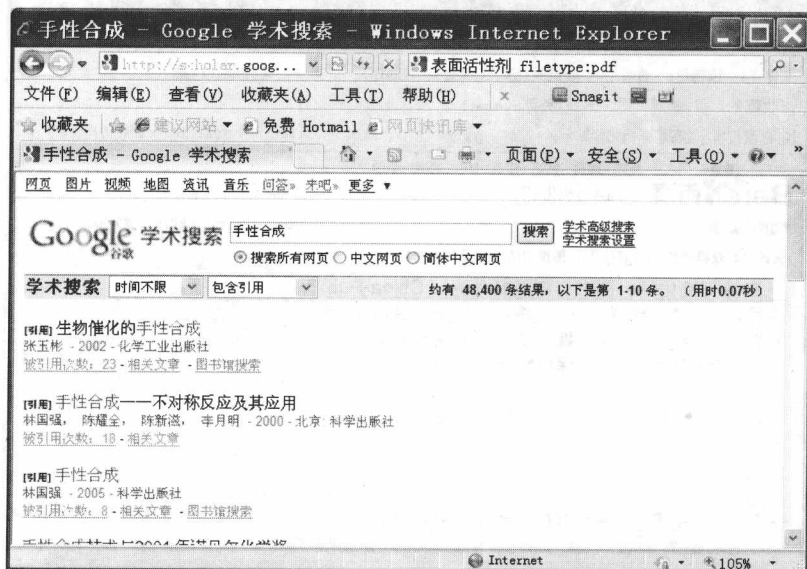


图 1-4 Google 学术搜索结果

1.2.2 百度

百度 (<http://www.baidu.com>) 是全球最大的中文搜索引擎，其首页如图 1-5 所示。

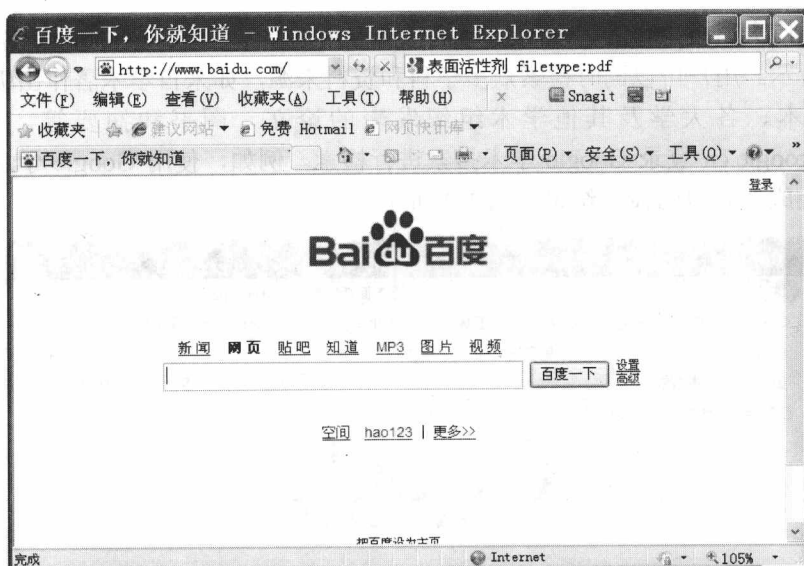


图 1-5 百度首页

百度的搜索页面和搜索方法与 Google 相似，如采用空格表示“与”、“-”表示“非”、双引号表示精确查找等。此外，百度还支持中文书名号的查询。加上书名号的查询词有两个特殊功能，一是书名号会出现在搜索结果中；二是被书名号括起来的内容，不会被拆分。例如，搜索《高等有机化学》教材，可在检索时直接输入“《高等有机化学》”，获得的搜索结果如图 1-6 所示。



图 1-6 百度搜索结果

与谷歌类似，百度也支持“filetype”命令，可对 Office 文档（Word、Excel、Powerpoint）、Adobe pdf 文档、rtf 文档进行全文搜索。“filetype:”后可以跟以下文件格式：doc, xls, ppt, pdf, rtf, all。其中 all 表示搜索所有这些文件类型。例如，查找有关碳纳米管制备方面的文

献时,可以在百度搜索栏中输入“碳纳米管 制备 filetype:all”,获得包含上述关键词的全部 Office、pdf 和 rtf 文档,如图 1-7 所示。

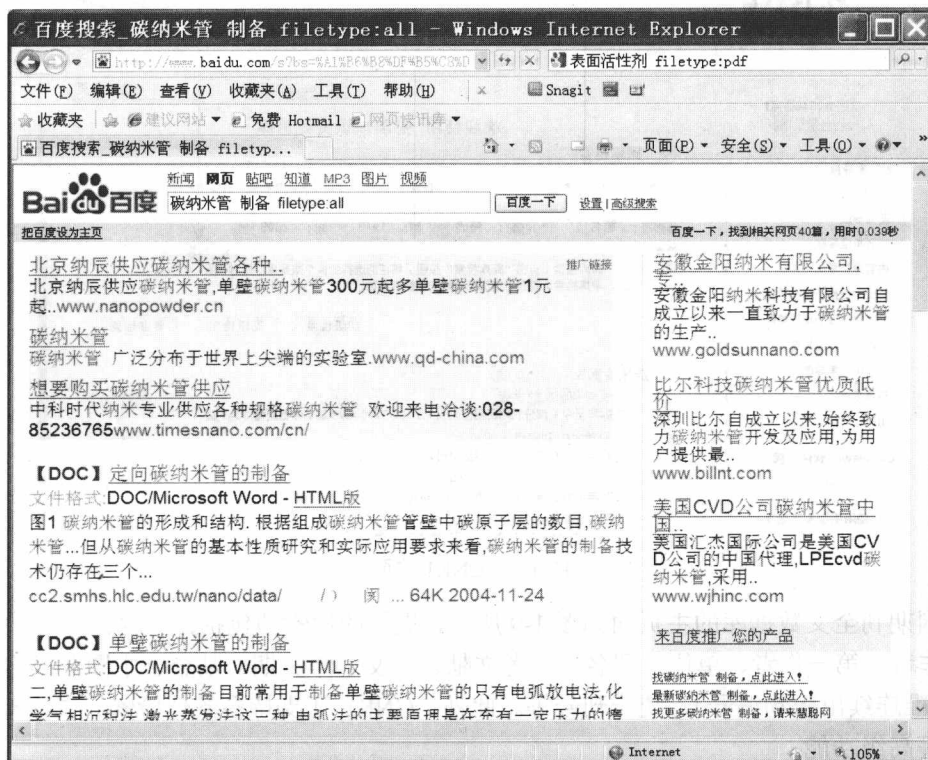


图 1-7 百度的文档搜索结果

可直接进入百度文档搜索页面 (<http://file.baidu.com>) 来查询特定格式的文档。或在百度主页中单击“更多”,然后在“百度产品大全”中选择“文档搜索”进入文档搜索页面。

1.3 化学化工文献数据库的检索

1.3.1 中国期刊全文数据库 (中国知网)

CNKI (<http://www.cnki.net/>), 全称国家知识基础设施 (National Knowledge Infrastructure, CNKI), 由清华大学、同方知网公司 1999 年发起, 目前已建成世界上全文信息量最大的“CNKI 数字图书馆”。常用的 CNKI 子数据库有: 期刊全文数据库、学位论文数据库、会议论文数据库、中国引文数据库等。本书主要介绍中国期刊全文数据库的检索。

登录 CNKI 主页 (<http://www.cnki.net/>), 首页如图 1-8 所示。点选“中国期刊全文数据库”即可进入该数据库的检索页面 (图 1-9)。中国期刊全文数据库按照学科门类将检索范围划分为理工 A、理工 B、理工 C、农业、医药卫生等 (图 1-9 左下部), 其中化学化工文献属于理工 B 类。为了缩小检索范围, 在检索化学化工文献时, 可选中“理工 B”前的选择框, 并清除其他类别前的选择框后再开始检索。可在 CNKI 首页 (图 1-8) 上对多个数据库同时进行跨库检索。



图 1-8 CNKI 首页

中国期刊全文数据库的主页面如图 1-9 所示，提供的检索项包括：主题、篇名、关键词、摘要、作者、第一作者、单位、刊名、参考文献、全文、年、期、基金、中图分类号、ISSN（国际标准连续出版物编号）、统一刊号等。此外，CNKI 还支持多条件检索、二次检索和跨库检索等高级功能。

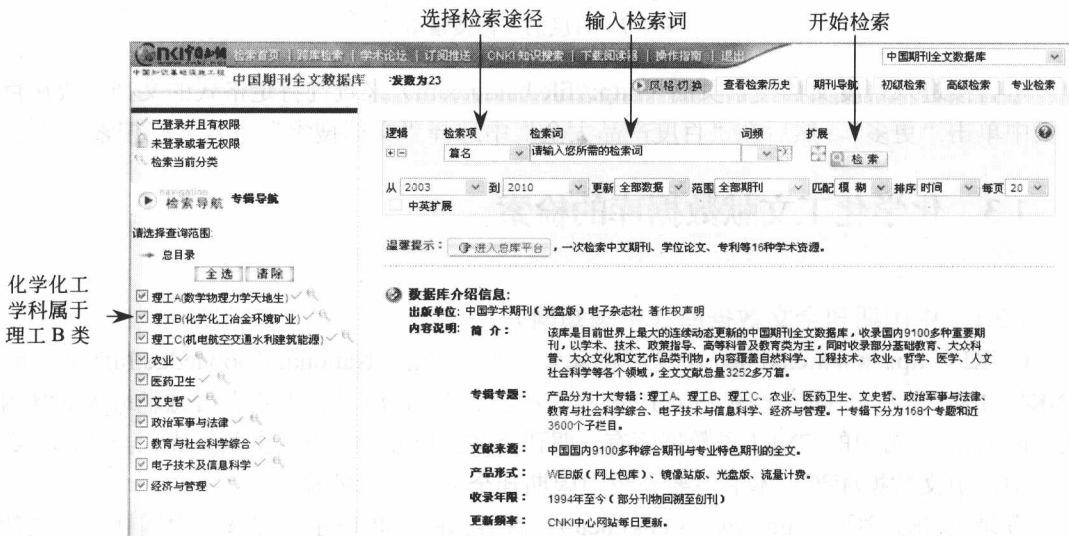


图 1-9 中国期刊全文数据库

1.3.1.1 主题、篇名、关键词、摘要和全文检索

主题检索是最为常用的检索方式，通过这种方式检索得到的结果较为全面且精确。选择“主题”项，可同时在“篇名、关键词、摘要”三个字段中检索用户输入的关键词。与单独使用“篇名”、“摘要”或“关键词”进行检索相比，选择“主题”项可获得更多的相关文献。

为了避免出现漏检,也可使用“全文检索”选项获得更多的检索结果,但这样会导致检索的精确度变差。

图 1-10 所示为在篇名中检索“碳纳米管”关键词的检索结果。除通过关键词进行检索外,还可以对时间跨度、期刊类别(全部期刊、EI 来源期刊、SCI 来源期刊、核心期刊)、匹配度(模糊、精确)等条件进行限定,也可指定检索结果的排序方式(时间、无、相关度)和每页显示数量。

The screenshot shows the CNKI search interface with the search term '碳纳米管' (Carbon Nanotubes) entered in the search box. The search criteria are set to '篇名' (Title) and '全部期刊' (All Journals). The search results table is displayed below the search box, showing 10 results. The table has columns for '序号' (Serial Number), '篇名' (Title), '作者' (Author), '刊名' (Journal Name), and '年/期' (Year/Issue).

序号	篇名	作者	刊名	年/期
1	含碳纳米管导电剂改善Li ₄ Ti ₅ O ₁₂ 电极电化性能	李星	功能材料	2009/11
2	碳纳米管对大鼠呼吸系统的氧化损伤	田雷	环境与健康杂志	2009/09
3	碳纳米管吸附去除工业废水中亚甲基蓝的研究	王环颖	光谱实验室	2009/06
4	氢气流量对定向碳纳米管生长的影响及其生长机理研究	耿梅艳	化工新型材料	2009/09
5	高导电碳纳米管可转换为半导体	逸云	技术与市场	2009/11
6	美用碳纳米管代替硅制造出高效太阳能电池		纳米科技	2009/05
7	高导电碳纳米管可转换为半导体		纳米科技	2009/05
8	碳纳米管力学性能分析的分子结构有限元模型	王和慧	纳米科技	2009/05
9	碳纳米管/聚丙烯共混超滤膜的制备与表征	潘学杰	膜科学与技术	2009/05
10	碳纳米管在环境治理中的应用研究进展	靳朝喜	环境工程	2009/S1

图 1-10 中国期刊全文数据库主题检索

1.3.1.2 作者、第一作者检索

选择“作者”项,可以检索自己感兴趣作者发表的文献,第一作者检索则只检索该作者以第一作者署名发表的文献。当匹配选项设定为“模糊”时,若输入作者名“张三”,系统将返回“张三”、“张三丰”等所有姓名中包含“张三”两个字的作者发表的论文。如只需检索张三发表的论文,可将匹配选项设定为“精确”[图 1-11 (b)]。也可通过增加其他检索条件如作者的学科专业或所在的机构来缩小检索范围。例如在图 1-11 (a) 中,采用“模糊”选项检索作者为“张三”可得到 1021 条文献,而使用“精确”选项仅有 20 条文献[图 1-11 (b)],大大提高了检索的精确性。

The screenshot shows the CNKI search interface with the search term '张三' (Zhang San) entered in the search box. The search criteria are set to '作者' (Author) and '全部期刊' (All Journals). The search results table is displayed below the search box, showing 2 results. The table has columns for '序号' (Serial Number), '篇名' (Title), '作者' (Author), '刊名' (Journal Name), and '年/期' (Year/Issue).

序号	篇名	作者	刊名	年/期
1	复杂系统理论在复杂网络系统可靠性分析上的应用	黄进永	质量与可靠性	2009/05
2	2-羟基-5-丁酰胺基苯甲酸的合成及药放学研究	石锐才	南方医科大学学报	2009/09

(a) 模糊检索

逻辑 检索项 检索词 词频 扩展

作者 张三

从 2003 到 2010 更新 全部数据 范围 全部期刊 匹配 精确 排序 时间 每页 20

中英扩展

已订购 未订购 未登录

共有记录 20 条 首页 上页 下页 末页 1 / 1 转页 全选 清除 存盘

序号	篇名	作者	刊名	年期
<input type="checkbox"/> 1	办公自动化条件下纸质文件的归档问题	张三	档案管理	2009/03
<input type="checkbox"/> 2	感谢遗孀	张三	读写算(中考版)	2009/06

(b) 精确检索

图 1-11 模糊检索与精确检索结果

1.3.1.3 多条件检索

多条件检索使用两个或多个检索条件同时进行查询,也可进行多次缩检,以更好地提高检索的准确性。单击检索页面左上角的“+”号增加检索条件,单击“-”号可减少检索条件。CNKI 最多同时支持 10 个检索条件。也可以单击页面右上角的“高级检索”、“专业检索”链接进入相应的检索页面。例如,欲检索有关在碳纳米管表面进行 ATRP 聚合的文献,可以同时 对篇名和摘要进行多条件检索,如图 1-12 所示。

单击“+”增加检索条件
单击“-”减少检索条件

逻辑关系 →

篇名 碳纳米管

摘要 atrp

从 2003 到 2010 更新 全部数据 范围 全部期刊 匹配 精确 排序 时间 每页 20

中英扩展

已订购 未订购 未登录

共有记录 11 条 首页 上页 下页 末页 1 / 1 转页 全选 清除 存盘

序号	篇名	作者	刊名	年期
<input type="checkbox"/> 1	自由基反应修饰碳纳米管	郭贵全	化学进展	2009/10
<input type="checkbox"/> 2	碳纳米管/聚丙烯复合材料的结晶形态与力学性能	王平华	高分子材料科学与工程	2009/10

检索结果 →

图 1-12 多条件检索

1.3.1.4 二次检索

二次检索(在结果中检索)可以看作是多条件检索的另一种形式,在第一次检索完成之后,可再次对所得的检索结果使用其他条件进行检索,以提高检索的准确性。如图 1-13 所示,可首先在篇名中检索关键词“碳纳米管”获得初步检索结果(2879 条),再在“摘要”检索项内检索关键词“ATRP”,并选中“在结果中检索”复选框,单击“检索”按钮进行二次检索,可得到 11 条文献。

1.3.1.5 检索结果页面的阅读和保存

单击检索结果中任一文献的篇名可进入检索结果阅读页面(图 1-14),除了可查阅该文献的基本信息如作者、作者单位、关键词等外,还可获得与该篇文献有密切联系的文献,这些相关文献也很可能是人们感兴趣的文献;此外,检索结果页面还提供参考文献、相似文献、相关研究机构、相关文献作者和文献分类导航等信息。若需下载论文全文,可单击文献题名下方的“下载阅读 CAJ 格式全文”或“下载阅读 PDF 格式全文”按钮。CAJ 格式文件可使用中国知网提供的 CAJViewer 软件进行阅读和处理,PDF 格式的文档则可使用 Adobe 公司的

Acrobat Reader 软件进行阅读和处理。

逻辑 检索项 检索词 词频 扩展

摘要 atrp 在结果中检索

从 2003 到 2010 更新 全部数据 范围 全部期刊 匹配 精确 排序 时间 每页 20

中英扩展

已订购 未订购 未登录

共有记录2879条 首页 上页 下页 末页 1 /144 转页 全选 清除 存盘

序号	篇名	作者	刊名	年/期
1	含碳纳米管导电剂改善Li ₄ Ti ₅ O ₁₂ 电极电化学性能	李星	功能材料	2009/11
2	碳纳米管对大鼠呼吸系统的氧化损伤	田雷	环境与健康杂志	2009/09

逻辑 检索项 检索词 词频 扩展

摘要 atrp 在结果中检索

从 2003 到 2010 更新 全部数据 范围 全部期刊 匹配 精确 排序 时间 每页 20

中英扩展

已订购 未订购 未登录

共有记录11条 首页 上页 下页 末页 1 /1 转页 全选 清除 存盘

序号	篇名	作者	刊名	年/期
1	自由基反应修饰碳纳米管	郭贲全	化学进展	2009/10
2	碳纳米管/聚丙烯复合材料的结晶形态与力学性能	王平华	高分子材料科学与工程	2009/10

图 1-13 二次检索

中国期刊全文数据库

查看检索历史 期刊导航 关闭

参考文献 相似文献 相关研究机构 相关文章作者 文献分类导航

含碳纳米管导电剂改善Li₄Ti₅O₁₂电极电化学性能

【英文篇名】 Carbon nanotubes containing conductive additives to improve the electrochemical performance of Li₄Ti₅O₁₂ anode

【作者中文名】 李星, 瞿美臻, 于作龙,

【作者英文名】 Li Xing¹, QU Mei-zhen¹, YU Zuo-long¹ (1.Chengdu Institute of Organic Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Chengdu 610041, China; 2.Graduate University of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China);

【作者单位】 中国科学院成都有机化学研究所, 中国科学院研究生院,

【文献出处】 功能材料, Journal of Functional Materials, 编辑部邮箱 2009年 11期
期刊荣誉: 中文核心期刊要目总览 ASPT来源刊 中国期刊方阵 CJFD收录刊

【关键词】 导电剂; 碳纳米管; Li₄Ti₅O₁₂; 锂离子电池;

【英文关键词】 conductive additive; carbon nanotube; Li₄Ti₅O₁₂; lithium ion battery;

【摘要】 采用一种较为实用的调浆方法,考察了碳纳米管与乙炔黑的复合物(CNTs/AB)导电剂、乙炔黑(AB)导电剂和碳纳米管(CNTs)导电剂对Li₄Ti₅O₁₂电极电化学性能的影响,并用恒流充放电、扫描电子显微镜(SEM)和交流阻抗(AC)对添加上述3种导电剂制备得到的电极片进行研究。结果表明,采用该调浆流程能够克服CNTs在使用时出现的团聚问题,CNTs/AB复合物在改善Li₄Ti₅O₁₂电极电化学性能尤其在容量发挥和倍率性能方面比单一AB和CNTs具有明显优势。CNTs/AB复合物中两者的质量百分比为1:2~1:1时,0.5C时Li₄Ti₅O₁₂电极的首次放电容量可高达157.0mAh/g,10.0C时,其放电容量可达到128.3mAh/g。与单一导电剂AB和CNTs相比,CNTs与AB复合使用时,由于CNTs的高长径比和良好导电性能使之能够起到“桥梁”作用把部分块状与活性物质充分接触的颗粒状导电剂AB与活性物质连接起来,因此两者的有机结合提高了CNTs/AB与活性材料的接触面积,使电极片能够形成有效的导电网络,有利于Li₄Ti₅O₁₂导电性能的提高。

【英文摘要】 A practical method of preparation of electrode paste mixture was adopted to evaluate the carbon nanotubes/acetylene black (CNTs/AB) composite, acetylene black (AB) and carbon nanotubes (CNTs) as conductive additives impacting on the electrochemical performance of Li₄Ti₅O₁₂ electrode. The obtained Li₄Ti₅O₁₂ electrodes were characterized by constant current charge and discharge tests, scanning electron microscopy (SEM) and AC impedance (AC). The results indicate that the adopted method of preparation of electrode...

图 1-14 检索结果的阅读页面

1.3.2 工程索引 EI

工程索引 (The Engineering Index, EI), 1884 年由美国工程信息公司 (Engineering Information Inc.) 创办, 是一个主要收录工程技术期刊文献和会议文献的大型国际权威检索系统, 与 SCI (科学引文索引)、ISTP (科技会议录索引)、Scopus 共称为世界著名的四大科技文献检索系统, 是国际公认的进行科学统计与评价的权威检索工具。1995 年 EI 公司开发了称为 “Village” 的系列产品, Engineering Village 2 是其中最主要的产品之一。该平台除

除了能检索 Compendex (EI 网络版) 外, 还能检索 INSPEC 和 NTIS 等数据库。

Compendex 是 Computerized Engineering Index 的缩写, 即计算机化工程索引, 为全记录式, 是目前全球最大的工程领域二次文献数据库。主要提供应用科学和工程领域的文摘索引信息, 涉及核技术、生物工程、交通运输、化学和工艺工程、照明和光学技术、农业工程和食品技术、计算机和数据处理、应用物理、电子和通信、控制工程、土木工程、机械工程、材料工程、石油、宇航、汽车工程等数十个领域及其子学科。其数据来源于 5100 种工程类期刊、会议论文集和技术报告, 含 700 多万条记录, 每年新增约 25 万条记录。EI 主站网址为 <http://www.ei.org.cn>, 其中国镜像站地址为 <http://www.engineeringvillage2.org.cn/>, 首页面如图 1-15 所示。



图 1-15 EI 首页

有检索权限的用户在页面右侧的登录区域输入用户名和密码登录后, 即可进入 EI 的检索页面 (图 1-16)。EI 的检索有 3 种方式: 简易检索 (Easy Search)、快速检索 (Quick Search) 和专家检索 (Expert Search), 网站默认检索方式为快速检索。

在快速检索模式下 (图 1-16), 用户可以在“选择数据库” (Select database) 栏选择 Compendex 或 INSPEC 数据库, 或两者均选 (All); 在搜索栏中, 用户可以输入搜索词, 选择搜索领域, 通过布尔逻辑算符 (AND、OR 及 NOT) 进行结果筛选; 还可通过“Limit by”进行“Document Type”、“Treatment Type”、“Language”及时间跨度等的限定; “Sort by”栏用于指定搜索结果的排序方式; 选项“Autostemming off”表示关闭关键词的派生, 网站默认值为“Autostemming on”。若 Autostemming 为 on, 当输入关键词“Controllers”时, 搜索引擎将同时搜索其派生词, 如 Control, Controllers, Controlling, Controlled, Controls 等。

1.3.3 科学引文索引 SCI

科学引文索引 (Science Citation Index, SCI) 是由美国科学信息研究所 (ISI) 1961 年创办出版的引文数据库, 也是世界著名的四大科技文献检索系统之首。目前 SCI 自然科学数据库有五千多种期刊, 其中生命科学辑收录 1350 种; 工程与计算机技术辑收录 1030 种; 临床医学辑收录 990 种; 农业、生物环境科学辑收录 950 种; 物理、化学和地球科学辑收录 900 种。