

高等学校“十二五”规划教材

李 谦 毛立群 房晓敏 主编

计算机

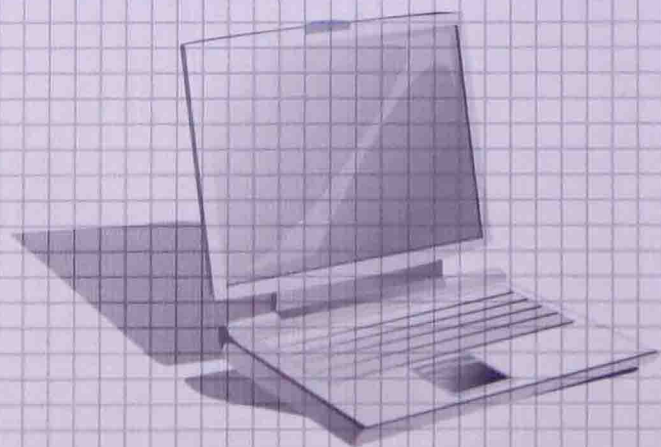
在化学化工中的应用

JISUANJI ZAI HUAXUE HUAGONG ZHONG
DE YINGYONG

第二版



化学工业出版社



高等学校“十二五”规划教材

计算机在化学化工中的应用

第二版

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、试验设计与数据处理、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 2010 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. —2 版. —北京: 化学工业出版社, 2014.7
高等学校“十二五”规划教材
ISBN 978-7-122-20681-7

I. ①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 (2014) 第 098514 号

责任编辑: 陈有华

文字编辑: 颜克俭

责任校对: 边 涛

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 16 字数 392 千字 2014 年 8 月北京第 2 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: 32.00 元

版权所有 违者必究

前 言

《计算机在化学化工中的应用》第一版自出版以来已过四载，承蒙广大读者的厚爱 and 化学工业出版社的努力，第一版的发行量大大超出编者预期，也使我们倍感责任重大。计算机辅助化学工程是一个快速发展的领域，相关的方法、软件、网站都在不断更新。把这一领域的最新成果及时介绍给读者，是促使我们对其进行修订的主要原因。

本次修订在保持本书整体结构的基础上，做了较大的改动。与本书第一版相比，部分网站和软件的界面、功能、操作都发生了较大的变化，为此编者改写、重写了部分章节（如第1章、第2章、第6章、第9章的部分或全部章节），规范了名词术语。根据编者近年来的教学实践，增加了部分例题和习题。为了便于读者的学习，制作了本书的电子教案以及大部分例题的教学视频。

第二版修订工作主要由李谦完成，闫梦甜参与了部分章节的修订工作；李闪闪、李秋为本书制作了电子教案和操作视频。

限于编者能力和水平，书中难免有疏漏和不妥之处，真诚地希望读者提出意见和建议。

编 者
2014 年 3 月

第一版前言

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章介绍正交试验设计方法、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	2.4.1 在 Word 中插入并编排参考文献	35
1.1 Internet 上的化学化工信息资源	1	2.4.2 EndNote 样式 (Style)	37
1.2 通过 Internet 搜索引擎查找化学 化工信息	1	2.4.3 利用论文模板撰写论文	38
1.2.1 谷歌	1	习题	39
1.2.2 百度	4	3 正交试验设计	40
1.3 化学化工文献数据库的检索	6	3.1 正交试验的基本概念	40
1.3.1 中国期刊全文数据库 (中国知网)	6	3.1.1 正交表	40
1.3.2 科学引文索引 (SCI)	11	3.1.2 交互作用表	41
1.3.3 工程索引 EI	13	3.1.3 混合型正交表	42
1.3.4 Elsevier 数据库	14	3.2 正交试验设计	42
1.3.5 Wiley InterScience 数据库	16	3.3 正交试验的数据处理	44
1.3.6 美国化学会 (ACS) 期刊数据库	17	3.3.1 正交试验数据的直观分析	45
1.3.7 其他文献数据库	17	3.3.2 正交试验数据的方差分析	48
1.4 专利检索	19	3.4 Excel 在正交试验数据处理中的应用	50
1.4.1 专利、专利文献与专利说明书	19	3.4.1 Excel 的基本操作	50
1.4.2 德温特世界专利创新索引	19	3.4.2 Excel 在正交试验数据处理中 的应用	51
1.4.3 中国专利检索	20	习题	54
1.4.4 美国专利检索	20	4 化学编辑排版	56
1.4.5 欧洲专利局的 espacenet 数据库	20	4.1 化学结构绘制软件 ACD/ChemSketch 简介	56
1.5 Internet 上的物性数据库	22	4.1.1 ACD/ChemSketch 简介	56
1.5.1 美国国家标准与技术研究院 (NIST) 的物性数据库	22	4.1.2 结构模式和绘图模式	56
1.5.2 分布式化学数据库统一查询接口 CS ChemFinder	23	4.2 分子结构绘制	58
1.5.3 溶剂数据库 SOLV-DB	23	4.2.1 简单分子结构的绘制	58
1.5.4 国际化学试剂供应商 Aldrich 的网站	23	4.2.2 复杂分子结构的绘制	62
1.6 网上化学化工标准	23	4.2.3 化学反应式的绘制	65
1.6.1 中国标准服务网	23	4.3 图形的绘制	65
1.6.2 标准文献的导航站点	23	4.4 使用 ChemSketch 预测 化合物的宏观性质	67
习题	23	4.5 其他重要化学绘图软件简介	68
2 计算机文献管理	24	4.5.1 ChemOffice 和 ChemBioOffice	68
2.1 EndNote 简介	24	4.5.2 ChemWindow	69
2.2 建立 EndNote 数据库	24	4.5.3 ISIS Draw	70
2.3 录入文献	25	习题	70
2.3.1 手工录入	25	5 实验数据的图形化处理	72
2.3.2 联网直接检索	26	5.1 Origin 基础知识	72
2.3.3 从网络数据库下载导入	27	5.1.1 Origin 主界面	72
2.4 EndNote 的使用	35	5.1.2 Origin 项目文件	72
		5.1.3 Origin 子窗口	73

5.2 数据录入	74	7.3.2 插值方法	128
5.2.1 手工输入	74	7.3.3 使用 Matlab 进行数据插值	129
5.2.2 通过剪贴板传送	74	7.4 非线性方程(组)的求解	132
5.2.3 由数据文件导入	74	7.4.1 非线性方程(组)的数值求解	132
5.3 绘图	75	7.4.2 使用 Matlab 求解非线性方程(组)	133
5.3.1 单层二维图形	75	7.5 常微分方程(组)的数值解	136
5.3.2 多层二维图形	76	7.5.1 化工中的常微分方程(组)	136
5.3.3 图形定制	77	7.5.2 常微分方程(组)的数值解法	136
5.3.4 三维图形	80	7.5.3 使用 Matlab 求解常微分方程(组)	140
5.4 图形输出	82	习题	144
5.4.1 通过剪贴板输出	82	8 Excel 与化工最优化问题	145
5.4.2 输出图形文件	82	8.1 化工最优化问题	145
5.5 数据拟合	83	8.1.1 化工最优化问题的提出	145
5.5.1 线性拟合	83	8.1.2 化工最优化问题的几个概念	146
5.5.2 多项式拟合	84	8.1.3 化工最优化问题的分类	146
5.5.3 其他非线性拟合	84	8.2 线性规划	147
5.5.4 自定义函数拟合	85	8.2.1 线性规划的基本理论	147
习题	88	8.2.2 线性规划问题的常用求解方法	149
6 使用 Visio 2010 绘制化学化工图形	89	8.2.3 Excel 的规划求解工具	150
6.1 Visio 2010 基本绘图	89	8.2.4 使用 Excel 规划求解工具求解线性规划问题	151
6.1.1 Visio 2010 简介	89	8.3 非线性规划	157
6.1.2 图形绘制基础	89	8.3.1 解析法求解非线性规划问题	158
6.1.3 文本的创建和编辑	100	8.3.2 非线性规划问题的数值求解	160
6.1.4 图层的使用	100	8.3.3 使用 Excel 求解非线性规划问题	160
6.2 化工工艺流程图的绘制	101	习题	161
6.2.1 应用工艺流程图模板建立新图形	101	9 化工过程模拟	163
6.2.2 添加设备、管道、阀门与仪表	102	9.1 化工过程模拟技术	163
6.2.3 形状数据与自动列表	103	9.1.1 化工过程模拟技术简介	163
6.2.4 工艺流程图的绘制	104	9.1.2 稳态模拟与动态模拟	163
6.3 化工设备图的绘制	112	9.2 Aspen Plus 的基本操作	164
6.3.1 确定图幅与比例	112	9.2.1 Aspen Plus 软件介绍	164
6.3.2 图面安排	112	9.2.2 Aspen Plus 的用户界面	165
6.3.3 绘制各视图	113	9.2.3 使用 Aspen Plus 进行过程模拟的一般步骤	166
6.3.4 添加标注、明细栏、技术要求	113	9.3 使用 Aspen Plus 进行过程模拟的应用实例	167
习题	118	9.3.1 闪蒸单元模拟	167
7 Matlab 与化学化工计算	121	9.3.2 C2 组分精馏分离过程设计	172
7.1 Matlab 基础知识	121	9.3.3 复杂过程的模拟	182
7.1.1 Matlab 简介	121	9.4 计算流体力学	184
7.1.2 Matlab 的界面	121	9.4.1 CFD 简介	184
7.1.3 Matlab 的帮助功能	121	9.4.2 CFD 模拟的基本步骤	185
7.2 线性方程组的求解	123		
7.2.1 线性方程组的一般形式	124		
7.2.2 线性方程组解的判断	124		
7.2.3 线性方程组的直接求解	125		
7.3 数据插值	127		
7.3.1 数据插值简介	127		

9.4.3 商用 CFD 软件	186
习题	187
10 计算机在科技论文撰写及演讲中的应用	188
10.1 科技论文	188
10.1.1 科技论文简介	188
10.1.2 科技论文的基本结构	188
10.1.3 期刊发表的学术论文	189
10.1.4 学位论文	189
10.1.5 科技论文的内容与格式要求	189
10.2 Microsoft Word 在论文撰写中的应用	191
10.2.1 Microsoft Word 2007 的用户界面	191
10.2.2 Microsoft Word 的基本操作	192
10.2.3 使用 Microsoft Word 撰写论文	207
10.3 PowerPoint 在制作幻灯片中的应用	208
10.3.1 PowerPoint 的用户界面	208
10.3.2 PowerPoint 的基本操作	208

附录 I Matlab 应用基础	216
I.1 Matlab 的数据类型与计算功能	216
I.1.1 变量和常量	216
I.1.2 数字、变量的运算与格式	216
I.1.3 字符串及其运算	217
I.1.4 矩阵及其运算	219
I.2 变量和工作空间的管理	228
I.2.1 变量的查找	228
I.2.2 变量的保存和读取	228
I.2.3 变量的清除	229
I.3 Matlab 的常用图形处理功能	230
I.3.1 图形窗口与子图的操作命令	230
I.3.2 二维图形绘制命令	231
I.3.3 三维图形绘制命令	233
附录 II 学术论文撰写规范示例	238
II.1 某期刊投稿简则	238
II.2 某研究所研究生学位论文撰写规则	239
参考文献	245

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、化学化工软件。
- 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《化学学科信息门户网站》提供了很多化学化工信息检索途径,其网址为 <http://www.chinweb.com.cn>,如图 1-1 所示,读者可自行浏览。

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,网址为 <http://www.google.com>,其首页如图 1-2 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。Google 还支持占位符*的使用。例如，输入“乙酸*醋”可返回含乙酸甲酯、乙酸乙酯、乙酸丙酯等关键词的结果。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 化学学科信息门户网站首页



图 1-2 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 .doc、.docx、.ppt、.ppti、.xls、.xlsx 等），Adobe 的 .pdf 文档，Adobe Flash 文档（.swf），HTML（.htm、.html）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 1-3 所示。

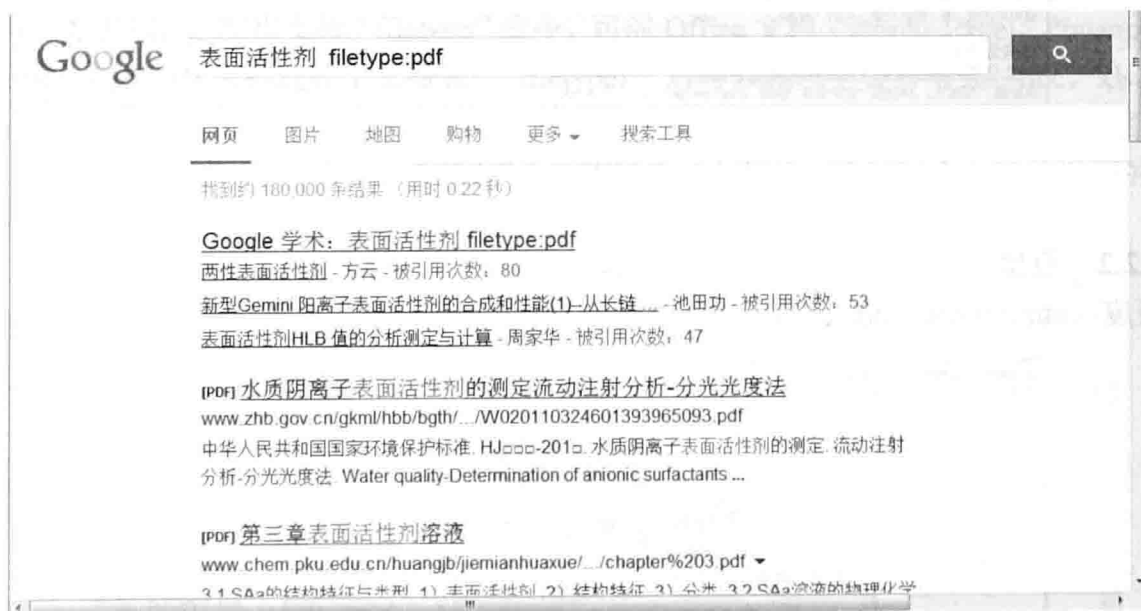


图 1-3 Google 文档搜索结果

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 1-4 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.com> 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 1-5 所示。



图 1-4 Google 学术搜索首页



图 1-5 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 1-6 所示。



图 1-6 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 1-7 所示。

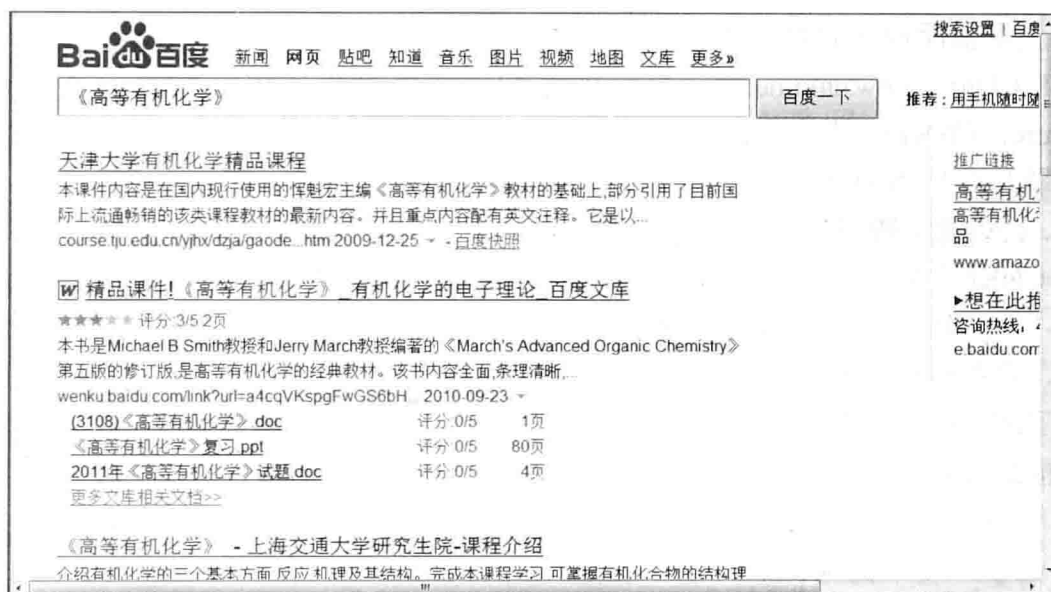


图 1-7 百度搜索结果

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 1-8 所示。



图 1-8 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。也可在百度主页中单击“更多”，然后选择“百度文库”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 (China National Knowledge Infrastructure, CNKI), 由清华大学、清华同方知网公司 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。

登陆 CNKI 主页, 首页如图 1-9 所示。点选“高级检索”即可进入数据库的高级检索页面 (图 1-10)。根据学科领域, 中国知网将检索范围划分为基础学科、工程科技 I 辑、工程科技 II 辑、农业科技、医药卫生科技、哲学与人文科学等, 其中化学化工文献属于工程科技 I 辑。为了缩小检索范围, 在检索时可选中“工程科技 I 辑”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 首页上对多个数据库同时进行跨库选择。

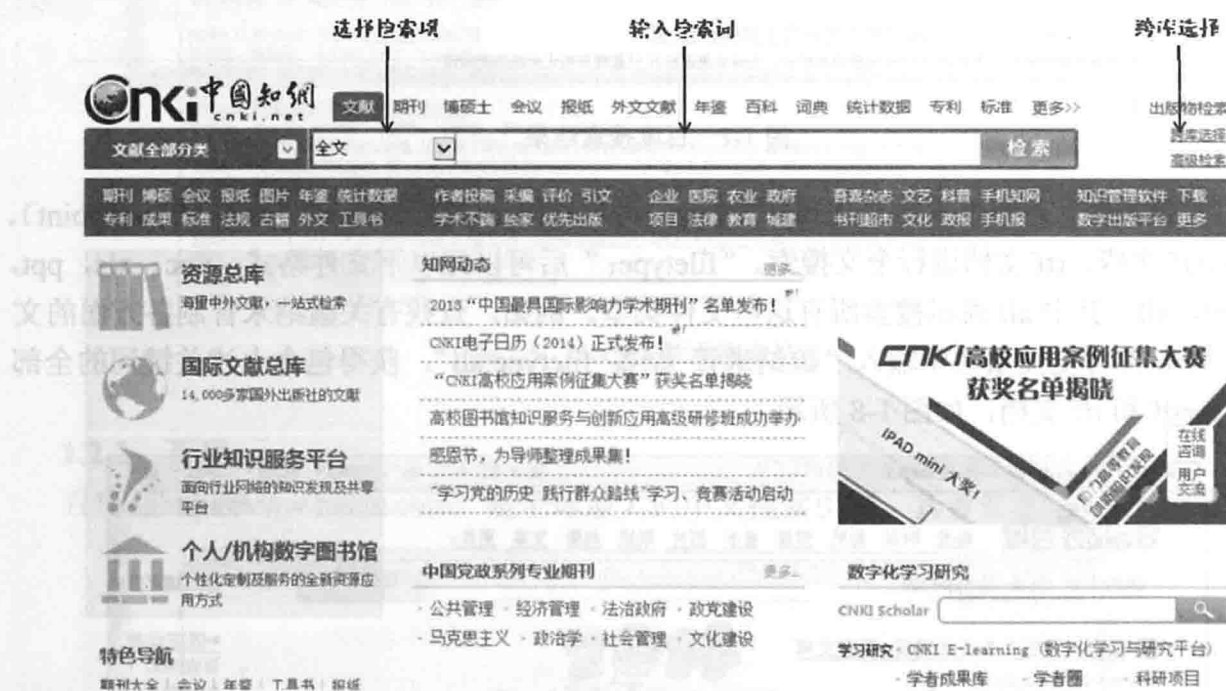


图 1-9 CNKI 首页

CNKI 高级检索界面如图 1-10 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。CNKI 还支持多条件检索、二次检索和跨库检索等高级功能。

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”检索项, 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 1-11 所示为在“篇名”项中检索“碳纳米管”关键词得到的检索结果。



图 1-10 CNKI 高级检索页面

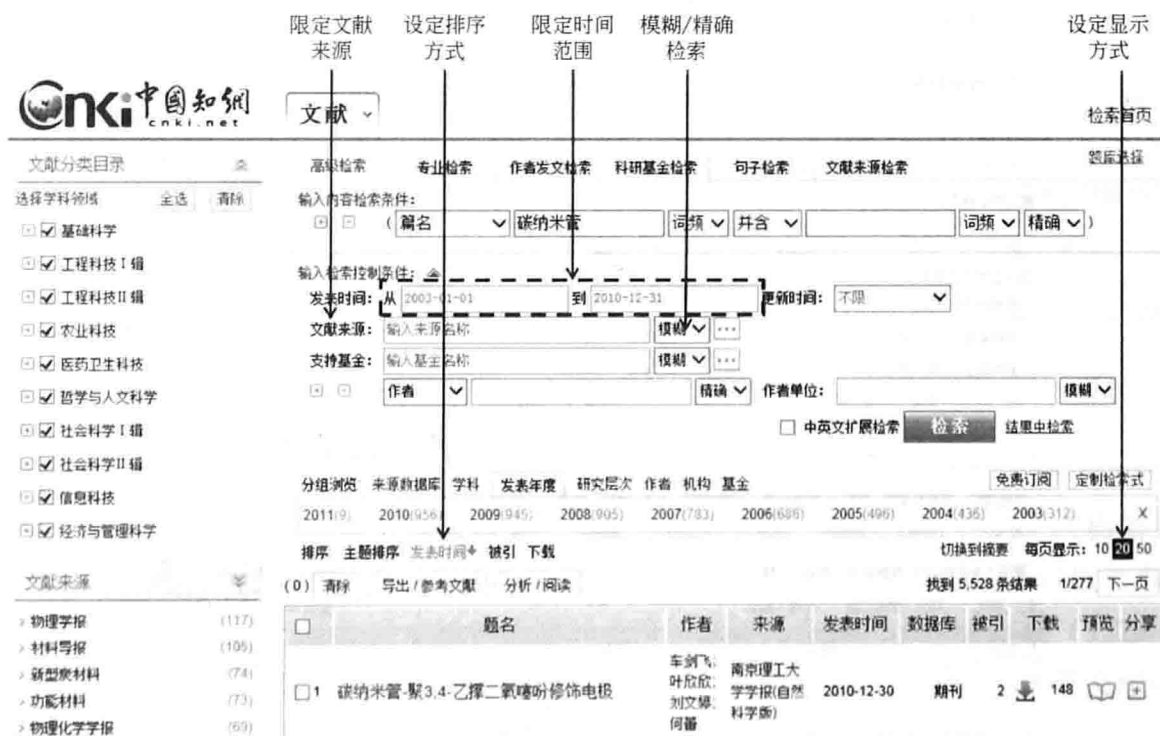


图 1-11 CNKI 检索结果

除通过关键词进行检索外,还可以对时间跨度、文献来源(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(主题、时间、被引频次、下载次数)和每页显示的条目数量。

1.3.1.2 作者、第一作者检索

选择检索控制条件中的“作者”项，可以检索自己感兴趣的作者发表的文献，“第一作者”检索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 [图 1-12 (a)]，若输入作者名“张三”，系统将返回包含“张三”两个字的所有作者发表的论文，如作者“张三友”、“张三法”等；如只需检索张三发表的论文，可将匹配选项设定为“精确” [图 1-12 (b)]。在图 1-12 中，采用“模糊”选项检索作者为“张三”可得到 1803 条文献，而使用“精确”选项仅有 44 条文献，大大提高了检索的精确性。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。

高级检索专业检索作者发文检索科研基金检索句子检索文献来源检索

输入内容检索条件:

主题

词频

并含

词频

精确

输入检索控制条件:

发表时间: 从 2003-01-01 到 2010-12-31 更新时间: 不限

文献来源: 输入来源名称 模糊

支持基金: 输入基金名称 模糊

作者

张三

模糊

作者单位: 模糊

☐ 中英文扩展检索 检索 结果中检索

分组浏览: 来源数据库 学科 发表年度 研究层次 作者 机构 基金

2010(270) 2009(252) 2008(324) 2007(248) 2006(240) 2005(166) 2004(165) 2003(138)

排序: 主题排序 发表时间 被引 下载 切换到摘要 每页显示: 10 20 50

(0) 清除 导出/参考文献 分析/阅读 找到 1,803 条结果 1/91 下一页

☐	题名	作者	来源	发表时间	数据库	被引	下载	预览	分享
☐	1 基于C#和MATLAB Server的数据挖掘Web教学演示系统	鞠训光; 宋农村; 张三友; 姜英姿	徐州工程学院学报(自然科学版)	2010-12-30	期刊	1	155		
☐	2 兵释“钱嫌”	张三法; 王雷	人民武警报	2010-12-30	报纸				

(a) 模糊检索

高级检索专业检索作者发文检索科研基金检索句子检索文献来源检索

输入内容检索条件:

主题

词频

并含

词频

精确

输入检索控制条件:

发表时间: 从 2003-01-01 到 2010-12-31 更新时间: 不限

文献来源: 输入来源名称 模糊

支持基金: 输入基金名称 模糊

作者

张三

精确

作者单位: 模糊

☐ 中英文扩展检索 检索 结果中检索

分组浏览: 来源数据库 学科 发表年度 研究层次 作者 机构 基金

2010(5) 2009(7) 2008(4) 2007(10) 2006(4) 2005(4) 2004(7) 2003(3)

排序: 主题排序 发表时间 被引 下载 切换到摘要 每页显示: 10 20 50

(0) 清除 导出/参考文献 分析/阅读 找到 44 条结果 1/3 下一页

☐	题名	作者	来源	发表时间	数据库	被引	下载	预览	分享
☐	1 手机电力支付方便千万家	张三	信息让生活更美好——江苏省通信行业信息化案例选编	2010-12-01	中国会议		21		
☐	2 GIS中空间信息多种地图显示模式的研究	江南; 夏丽华; 张三	中国地理信息系统协会第九周年会论文集	2005-10-01	中国会议		16		

(b) 精确检索

图 1-12 模糊检索与精确检索的结果

8

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“输入内容检索条件”和“输入检索控制条件”区域的“+”号可增加检索条件，单击“-”号可减少检索条件。CNKI 最多同时支持 7 个检索条件。也可以单击页面顶部的“专业检索”、“文献来源检索”等标签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，可以同时为篇名和摘要进行多条件检索。选中“篇名”检索项，输入关键词“碳纳米管”；单击“+”增加检索条件，选中“摘要”检索项，输入关键词“atrp”，单击“检索”按钮，结果如图 1-13 所示。

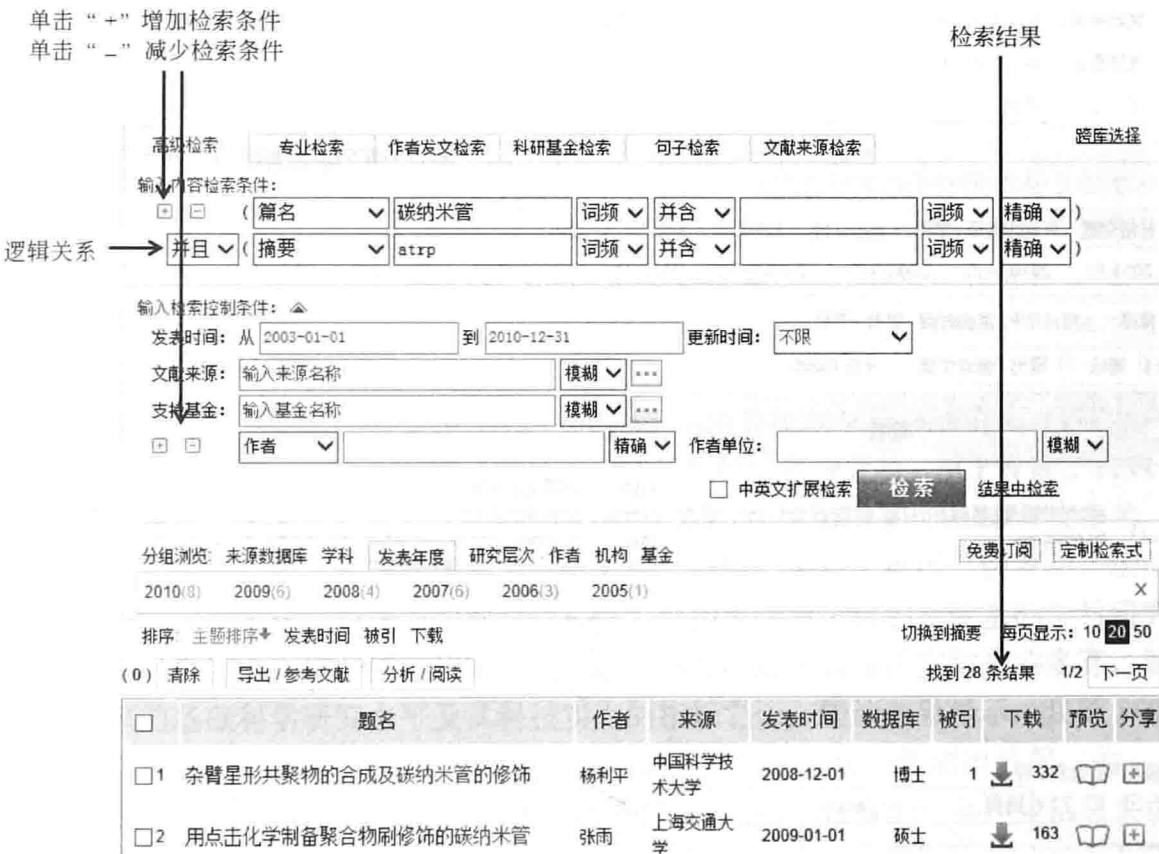


图 1-13 多条件检索

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，可以在所得的检索结果中使用其他条件进行检索，以进一步提高检索的针对性和准确性。例如，可首先在“篇名”检索项中检索关键词“碳纳米管”获得初步检索结果（5529 条），再在“摘要”检索项内检索关键词“atrp”，并单击“结果中检索”，可得到 28 条文献，如图 1-14 所示。所得结果与多条件检索相同。

1.3.1.5 检索结果的阅读和保存

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 1-15）。除了可查阅该文献的基本信息如作者、作者单位、关键词、摘要等外，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我们感兴趣的文献。此外，检索结果页面还提供参考文献、相