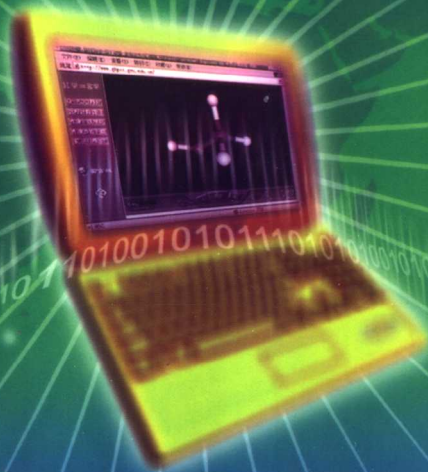


网络化学

史永刚 李子存 编著



中国石化出版社

网络化学

史永刚 李子存 编著

中国石化出版社

内 容 提 要

网络化学是化学与计算机网络的结合体,指的是利用国际互联网技术和计算机技术,实现对化学信息的组织、传播、分析、处理和模拟,促进化学知识的共享和创新,并研究化学的网络交流、研究和教育技术及形式。网络化学研究的主要内容包括:化学资源的检索和利用、化学信息的网上解析和相关信息的快速提取、网上化学计算与模拟和网上化学教育。

本书的读者对象是广大的化学工作者,以及从事化学信息研究的科技工作者,也可以作为相关高等学校对本科生和研究生进行化学信息和网络资源检索教学的教材或教学参考书。

图书在版编目(CIP)数据

网络化学/史永刚等编著.

—北京:中国石化出版社,2004

ISBN 7-80164-616-9

I. 网… II. 史… III. ①英特网-化学-情报检索
②英特网-应用-化学 IV. ①G252.7②G6-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 074776 号

中国石化出版社出版发行

地址:北京市东城区安定门外大街 58 号

邮编:100011 电话:(010)84271850

读者服务部电话:(010)84289974

<http://www.sinopec-press.com>

E-mail: press@sinopec.com.cn

北京精美实华图文制作中心排版

北京大地印刷厂印刷

新华书店北京发行所经销

*

850×1168 毫米 32 开本 8.5 印张 228 千字

2004 年 9 月第 1 版 2004 年 9 月第 1 次印刷

定价:20.00 元

前言

化学学科的实践性,使得信息的记载、组织与交流在化学学科中占有十分重要和特殊的地位,实践意义长远。计算机技术和互联网的发展,对记录和检索化学信息提出了更高的要求。为了化学知识的网上传播,化学工作者已经建立具有自身特点的信息表达、信息数据库系统,并逐步涉及化学研究的各个方面。

网络化学是化学与计算机网络的结合体,是近几年才发展起来的一个化学分支,指的是利用互联网技术和计算机技术,实现对化学信息的组织、传播、分析、处理和模拟,促进化学知识的共享和创新,并研究化学的网络交流、研究和教育技术及形式。网络化学研究的主要内容涉及化学资源的检索和利用、化学信息的网上解析和相关信息的快速提取、网上化学计算与模拟和网上化学教育。

科学技术的迅速发展已经能够使人们通过互联网平等地获取丰富的信息资源。对于化学工作者,如果掌握了快速获取自己相关领域的信息或知识的方法,自由地遨游于变化万千、丰富多彩的网上化学信息世界,那将受益匪浅。不懂得如何利用计算机网络进行化学研究,将难以跟随时代的潮流,得心应手地从事化学研究。

化学信息包括化学物质的化学信息和媒体形式的化学信息。化学物质的化学信息指的是利用科学原理和方法通过测量获得的

化学成分的相关信息；媒体形式的化学信息是指化学信息的记录形式，如图书、期刊、专利、数据库、研究成果、音像资料以及近年来发展起来的网上数据库等，通过信息的传播使化学家共享测量的原理、方法及结果。网上化学研究的内容之一就是化学信息的记载形式。它的兴起使得人们能够在更短的时间里获得相关的化学知识，也可以方便地通过互联网进行网上化学计算。

本书重点介绍：①网上的化学资源及其检索，包括化学专利、化学数据库、谱图(红外光谱、紫外光谱、质谱、核磁共振、X射线光电子能谱等)检索、化学知识等的检索与查询；②网上化学计算，即网上计算化学计算和网上化学计量学计算；③网上化学教学。

本书是一本应用性的书籍，强调内容的实用性，希望达到以下目标：①了解网上现有的、常见的化学资源及其查询技术；②能够利用网上的化学教学资源与软件进行化学知识的获取或进行教学；③学会利用网上化学计算资源提高工作的效率和水平。

本书共分五章。第一章计算机网络的概念；第二章网上化学资源(通用搜索引擎检索、联机文献检索、网上图书馆和期刊、化学专利、网上数据库资源、化学资源导航网站、网上化学机构和商业信息)；第三章网上化学计算(计算化学、化学计量学、谱图模拟)；第四章网上化学交流(网络化学会议、通信讨论组)；第五章网上化学教学。

计算机网络技术与化学结合的日益紧密，网上化学的内容将更加丰富、全面和具有前瞻性，网上化学也将成为化学工作者、高等院校师生从事化学研究和教学的良师益友，进而促进化学学科的发展。在本书编写过程中，编著者参考了大量的文献资料和

网络资源，不便一一列出，在此一并表示感谢，并对文献资料和网络资源的编著者所付出的艰辛劳苦表示深深的敬意。

在编著过程中，后勤工程学院科研部、油料应用与工程管理及油品测试评定中心在资金和工作上给予了极大的支持和鼓励，对此表示衷心的感谢。此外参加本书编写的还有宋世远、唐德刚和冯新沪同志，正是他们的参与使本书得以顺利完成。

作者才疏学浅，对网络化学的理解不尽全面、深入，在写作过程中错误或不妥在所难免，敬请广大读者批评指正。

史永刚



第一章 计算机网络及其在化学中的

应用..... (1)

1.1 计算机网络的概念 (1)

1.1.1 计算机网络的定义 (1)

1.1.2 网络的类型 (2)

1.1.3 网络的基本结构 (3)

1.1.4 通信协议(TCP/IP) (4)

1.1.5 网络操作系统 (4)

1.2 网络的功能 (4)

1.3 国际互联网的使用 (7)

1.3.1 接入互联网的方法 (7)

1.3.2 浏览器的安装 (9)

1.3.3 上网操作 (10)

1.3.4 互联网接入服务商 (10)

1.4 计算机网络促进化学

进步 (11)

1.4.1 互联网技术使人们获取化学信息的效率提高 (11)

1.4.2 网络计算资源提高了工作效率和水平 (12)

1.4.3 网络化学教育 (12)

1.4.4 网上化学交流 (13)

第二章 网上化学资源..... (14)

2.1 网上化学资源的类别 (14)

2.1.1 化学文献信息资源 (14)

2.1.2 化学数据信息资源 (15)

2.1.3	网上化学计算资源	(15)
2.1.4	化学软件信息资源	(16)
2.1.5	化学试剂、产品及相关材料的商业 信息	(16)
2.1.6	网上化学交流资源	(16)
2.1.7	网上教学资源	(16)
2.1.8	其它网上化学资源	(17)
2.2	网上化学信息检索	(17)
2.2.1	网络搜索引擎	(17)
2.2.2	网络化学资源检索	(27)
2.3	化学数据库检索	(51)
2.3.1	综合数据库	(51)
2.3.2	化学信息数据库	(58)
2.3.3	化学常数数据库	(82)
2.4	网上化学软件资源	(85)
2.4.1	化学软件的搜索	(86)
2.4.2	化学软件	(86)
2.4.3	化学软件资源站点	(93)
2.5	数字图书馆、书店及化学期刊	(93)
2.5.1	数字图书馆	(93)
2.5.2	网上书店	(103)
2.5.3	网络期刊	(103)
2.6	网上化学专利	(119)
2.6.1	专利检索步骤	(119)
2.6.2	美国专利商标局的 WWW 专利服务	(121)
2.6.3	QPAT-US 的专利摘要库	(123)
2.6.4	加拿大专利数据库	(127)
2.6.5	Derwent 的 WWW 专利服务	(128)

2.6.6 中国专利检索数据库	(129)
2.6.7 专利资源检索的其它途径	(130)
2.7 化学化工标准及其它文献	(132)
2.7.1 Internet 上的化学化工标准资源	(133)
2.7.2 政府报告资源及其检索	(137)
2.7.3 学位论文资源及其检索	(139)
2.7.4 会议文献资源及其检索	(140)
2.8 学术机构信息	(141)
2.9 化学综合性导航站点	(142)
第三章 网上化学计算	(148)
3.1 网上化学计量学计算	(148)
3.1.1 常用化学计量学方法	(148)
3.1.2 网上化学计量学计算	(182)
3.2 计算化学网上计算资源	(183)
3.2.1 美国北卡罗来纳大学超级计算中心	(183)
3.2.2 贵州大学高性能计算化学实验室	(187)
3.2.3 其它计算资源	(191)
3.3 网上红外吸收光谱模拟	(192)
3.3.1 TeleSpec 红外光谱模拟的基本原理	(192)
3.3.2 TeleSpec 红外光谱网上模拟	(193)
3.3.3 ComSpec 3D 拉曼/红外光谱模拟	(196)
3.4 Enhanced NCI Database Browser	(198)
3.5 物质结构可视化	(200)
3.5.1 化学信息的分类	(200)
3.5.2 化学信息的可视化	(201)
3.5.3 虚拟现实建模语言	(204)
3.5.4 其它结构模拟和可视化技术	(209)
3.6 SMILES 字符串	(210)

第四章 网上化学交流	(214)
4.1 化学虚拟社区	(214)
4.1.1 化学虚拟社区的概念	(215)
4.1.2 ChemWeb.com	(218)
4.1.3 美国化学会和 Chemistry.org	(220)
4.1.4 英国皇家化学会和 ChemSoc	(221)
4.1.5 Chemie.de	(224)
4.1.6 CS ChemClub	(226)
4.2 网络电子会议	(227)
第五章 网络化学教育	(229)
5.1 化学教育资源导航	(229)
5.1.1 ChemEd	(230)
5.1.2 加利福尼亚州立大学化学教育资源 - Chemistry Education	(231)
5.1.3 国外其它化学教育资源导航系统	(231)
5.1.4 国内化学教育资源网站	(234)
5.2 化学远程教育	(234)
5.2.1 链接型网络化学远程教育资源	(235)
5.2.2 交互型化学远程教育资源	(243)
5.2.3 其它化学远程教育资源	(257)
5.3 其它化学教育资源	(258)
5.3.1 教学研究资源	(258)
5.3.2 媒体与软件资源	(258)
参考文献	(260)
后 记	(261)

第一章 计算机网络及其在 化学中的应用

计算机互联网正在一步步深入人类生活的方方面面，并对人类的活动施加着越来越大的影响。它不仅影响人类的生活方式，而且也影响着人类的生活观念。它逐渐成为人类生活、学习、工作和娱乐的一部分，也将成为人类文明史上的一个重要的里程碑。人们可以通过计算机网络了解自己需要的知识，也让别人通过网络来了解自己。化学工作者也不例外地可以从互联网上获益。

1.1 计算机网络的概念

计算机网络是当代计算机体系结构发展的方向，它是现代计算机技术和现代通信技术结合的产物。

1.1.1 计算机网络的定义

计算机网络是指把分布在不同地点、具有独立功能的多个计算机和外围设备通过通讯设备和线路连接起来，在网络软件的控制下，以实现彼此之间的数据通讯和资源共享为目标的系统。这个定义说明(1)计算机网络是由两台或两台以上计算机构成的，目的在于资源共享(软件资源和硬件资源)、经济性扩展和网络通讯(电子邮件)；(2)处于不同地理位置的计算机是通过连接介质实现互联的，这个连接介质就是通讯系统，计算机间的信息交换就是通过它来实现的；(3)计算机间的通讯需要一定的规则和协

议, 这就是网络协议。这样构成的计算机网络具有通讯、远程登录、交换控制等多种功能。

1.1.2 网络的类型

计算机网络按照规模可以分为以下 5 种:

(1) 实验室网络。由有限的服务器、计算机和公用的外围设备构成, 目的在于实现硬件资源共享和软件资源共享。

(2) 局域网(Local Area Network, LAN)。通常位于一座或一组建筑群中, 分布范围从几百米到几公里, 由多个服务器、较大规模的计算机或实验室网络等组成。局域网通常是由光缆连接的计算机网络, 传输速率在 10 Mbits/s ~ 2G bits/s 之间。建立局域网的目的在于实现信息资源和计算能力共享、网上计算、网上教学、网上办公、网上信息发布、网上图书馆等功能。

(3) 城域网(Metropolitan Area Network, MAN)。城域网是特定区域中的网络, 设计目标是满足几十公里范围内的大量单位或部门的计算机联网要求, 实现大量用户、多种信息传输的综合信息网。它是由地域上相近的多个小型网络共同连接构成的, 相互间是通过光缆或通信线路连接的, 传输速率一般在 50 Kbits/s ~ 100 Mbits/s 之间。

(4) 专业网。这是一种跨地区但使用内容和性质相近、具有行业或专业性质的计算机网络。我国的教育科研网(CERNET)、科学技术网(CSTnet)、公用网(ChinaNet)和金桥网(China GBN), 美国的 ARPANET(Advanced Research Projects Agency and Defense Research Projects Agency), FARNET(Federation of American Research Network)和 NREN(National Research and Educational Network)等都是典型的专业网络。

(5) 广域网(Wide Area Netwrk, WAN)。这是一种跨地区、城市乃至国家的网络, 又称远程网。它是出于军事、国防、科研等

需要而建立起来的，上面提到的专业网就是广域网。

(6) 互联网(Internet)。互联网并不是一种具体的物理网络技术，而是将不同的物理网络技术按一定的协议统一起来的一种高层技术。它是建立在网络之上的网络。在互联网内包含局域网、城域网、广域网，从而形成局部处理和远程处理、有限范围资源共享与广大范围资源共享相结合的复合网络。它是由入网计算机、接口电路、路由器、节点等通过国际通讯线路连接起来构成的全球性网络。

1.1.3 网络的基本结构

计算机网络是一组互相连接起来的独立的计算机的集合。互联的目的在于信息交换。“互联”具有物理的和逻辑的意义。在网络结构的物理层，信息交换体现在两台互联的计算机间通过传输介质进行的无结构数据(比特流，bit stream)传输；而在物理层以上的各层，所交换的信息则具有一定的逻辑结构，并随层次的升高逻辑结构越复杂。信息的交换在网络的底层由硬件实现，高层则由软件实现。这说明计算机网络首先是一个通信网络，信息的交换是通过通信介质、通信设备实现的。这样计算机可以通过网络软件共享其它计算机上的硬件资源和软件资源。于是，为了使网络层次更加鲜明，便于分析和设计，人们将网络中实现通信功能和资源共享的设备和软件分开，称之为通信子网和资源子网。资源子网负责网络的数据处理，提供网络资源和网络服务等工作。通信子网因网络类型的不同而构成不尽相同。对于局域网，通信子网由传输介质和网络接口板构成，有些还有集线器和中继器等设备。在广域网中，除了上述设备外，还涉及一组转发设备。转发设备负责线路传输控制、差错检验与恢复、路径选择、流量控制和代码转换等工作，但本质上仍一台计算机。在分组交换网中，称之为分组交换节点，而在互联网术语中，则称为互联

网路由器或 IP 网关。

1.1.4 通信协议(TCP/IP)

TCP/IP 通信协议是为解决不同类型计算机网络之间的互联问题而开发的一组协议,是互联网络的基础协议,支持不同厂商、不同网络的互联通信。

TCP/IP 通信协议是一组协议的集合,其中两个主要的协议是网络协议和传输控制协议。网络协议(Internet Protocol, IP)制定了所有在网络上流通的数据包的标准,它规定了计算机在互联网上通信时所必须遵守的一些基本规则,以确保路由的正确选择和报文的正确传输。传输控制协议(Transmission Control Protocol, TCP)则是一个可靠的面向连接的协议,保障所有传输数据准确无误地到达目的计算机。

1.1.5 网络操作系统

网络操作系统是用户使用网络资源的桥梁,是依靠通信介质将独立的计算机连接起来的软件系统平台。对于局域网,几乎所有的网络功能都是由网络操作系统实现的。

网络操作系统应具有如下的功能和特点:多用户、多任务操作系统;协调和管理网络用户,进行资源的合理分配和调度;提供网络通信服务;可靠的操作安全性;完善的系统管理功能等。

当前,市场上主流产品有 Novell 公司的 NetWare、微软公司的 Windows NT、Unix 及 Linux 等操作系统,它们各有特色,广泛地应用于不同的网络环境中。

1.2 网络的功能

计算机网络是为最大限度地利用资源而建立的。随着计算机

网络的不断扩大,就形成了局域网,多个局域网相互联结就形成了国家网,国家网相互连接就形成了全球性的计算机网络,即互联网。这样,计算机的新的作用和功能被不断开发,涉及科学研究、生产、生活、文化教育等许多方面。当前,国际互联网具有下列主要功能:

1. 通讯功能

包括电子信件(e-mail)、网络电传、网络电话等;广义上,网上会议、新闻组、电子公告牌(BBS)也应属于该功能。网上通讯具有以下特点:①与常规的信函相比,速度更快,一般仅需要几秒钟就可以送达;②与电话、电传相比占用硬件资源更少、更经济,功能更强大;③不仅可以传输文字、图片,还可以传输声音、影像等多媒体信息,甚至还可以传输完整的分子结构模型、光谱数据和其它电子表格。

2. 数据和信息源功能

目前的计算机互联网对大多数人来说就是一个巨大的信息源,利用浏览器在网络上几乎可以收集到任何正规和非正规渠道的各种信息。信息提供者包括政府机构、大专院校、企业商家甚至个人或小团体,都可以在网上建立自己的主页或通过BBS发布自己的信息和见解。网上虚拟仿真图书馆为读者提供了在家里借阅图书的机会。当前多种大型数据库,如《美国化学文摘》、《贝尔斯坦有机化学手册》和各种光谱数据库都已经与计算机网络连接,科学工作者在计算机互联网上可以轻易收集到各种科学数据与科学信息。

3. 出版发行功能

借助计算机互联网的通讯功能,很多报纸、杂志、图书等出版发行商纷纷建立了网络版报纸、期刊杂志和网络图书。网上出版可以节约大量的人力和物力,降低成本,扩大发行范围;可以借助网络直接将订阅的报纸和杂志送到读者的电子信箱中。作为

最大的获益者,读者可以免费或低价阅读很多著名的一流杂志和报纸,发行速度也大大加快。国内外已有很多化学杂志发行网络版,如我国的《化学通报网络版》、《网上化学学报》,瑞士的《Molecules》等。

对于计算机软件开发商而言,可以利用网络发布和出售软件,并进行售后服务。

4. 大型计算机和超级计算机的远程登录功能

在网络内共享大型和超级计算机的计算能力是计算机网络的重要功能之一。虽然随着微型计算机和服务器技术的迅速发展,其计算能力大大提高,许多过去需要大型计算机完成的计算任务,现在使用微型机或服务器就可以完成,但是人们对提高复杂计算能力的追求是永无止境的,特别是量子化学家和计算数学家更是如此。对大多数其它领域的化学工作者来说,最感兴趣的是登录由某些大型计算机维护控制的各种化学数据库来获取重要的化学信息。

5. 远程教育功能

目前远程教育已经从广播教学、电视教学发展到互联网教学。互联网集远程通信、人机交互、多媒体等功能于一身,能够更好发挥现有教育资源的作用,提高教学效果。互联网图形化、模拟仿真、交互等功能对于提高教学效果的作用更加不容忽视,是下一代教学方式的代表。目前已经有许多含有化学课程和网上化学实验室的网络学校在运行,最典型的就是各高等学校建立的网络教室。

6. 商业和休闲娱乐功能

· 建立于网络上的电子商务是目前最热门的话题。在网络上可以进行的商业功能也越来越多,商家可以在网络上做广告、网上销售,生产企业可以在网络上进行金融结算、产品发布和售后服务等。人们也更多地用计算机网络欣赏美术、网上旅游、玩网上

游戏, 计算机网络已经成为人们业余时间的重要休闲领域; 利用计算机网络, 化学家可以方便地订购化学试剂和选购仪器设备。

1.3 国际互联网的使用

互联网上存在丰富的资源。要访问这些资源, 必须将计算机接入互联网才能自由地遨游于多彩的互联网世界。

1.3.1 接入互联网的方法

用户接入互联网的方法有:

1. 电话拨号上网

对于个人用户和小单位, 利用已有的电话线路, 通过 Modem (调制解调器), 采用拨号的方式将自己的计算机联入互联网是最简单方便的形式。目前, 调制解调器的最大速率为 56Kbits/s (个人用户)。上网时不能通话, 即独占一条电话线, 传输速率比较低, 费用也较低。

2. 专线上网

一些较大的机构常建有局域网, 这是接入互联网的最佳方式, 为使用专线。专线将局域网和互联网连接起来, 使局域网成为互联网的一个子网, 局域网中的每一台计算机都有单独的 IP 地址。目前, 可租用的专线有公用数字数据网 (DDN) 和综合业务网 (ISDN)。一般的联结方式为使用专线使两个网络的一对路由器经过调制解调器连接起来。

个人用户也可以通过专线联入互联网。当前电信部门开通的专线有 ISDN (一线通) 和 ADSL 两种。这两种方法均须购置专用的调制解调器, 通过电话线上网。前者的传输速率依用户申请而定, 一般在 256 Kbits/s, 上网时仍需缴纳通讯费; 后者带宽较大, 最大理论速率可达 8Mbits/s, 上网时不必缴纳通讯费。