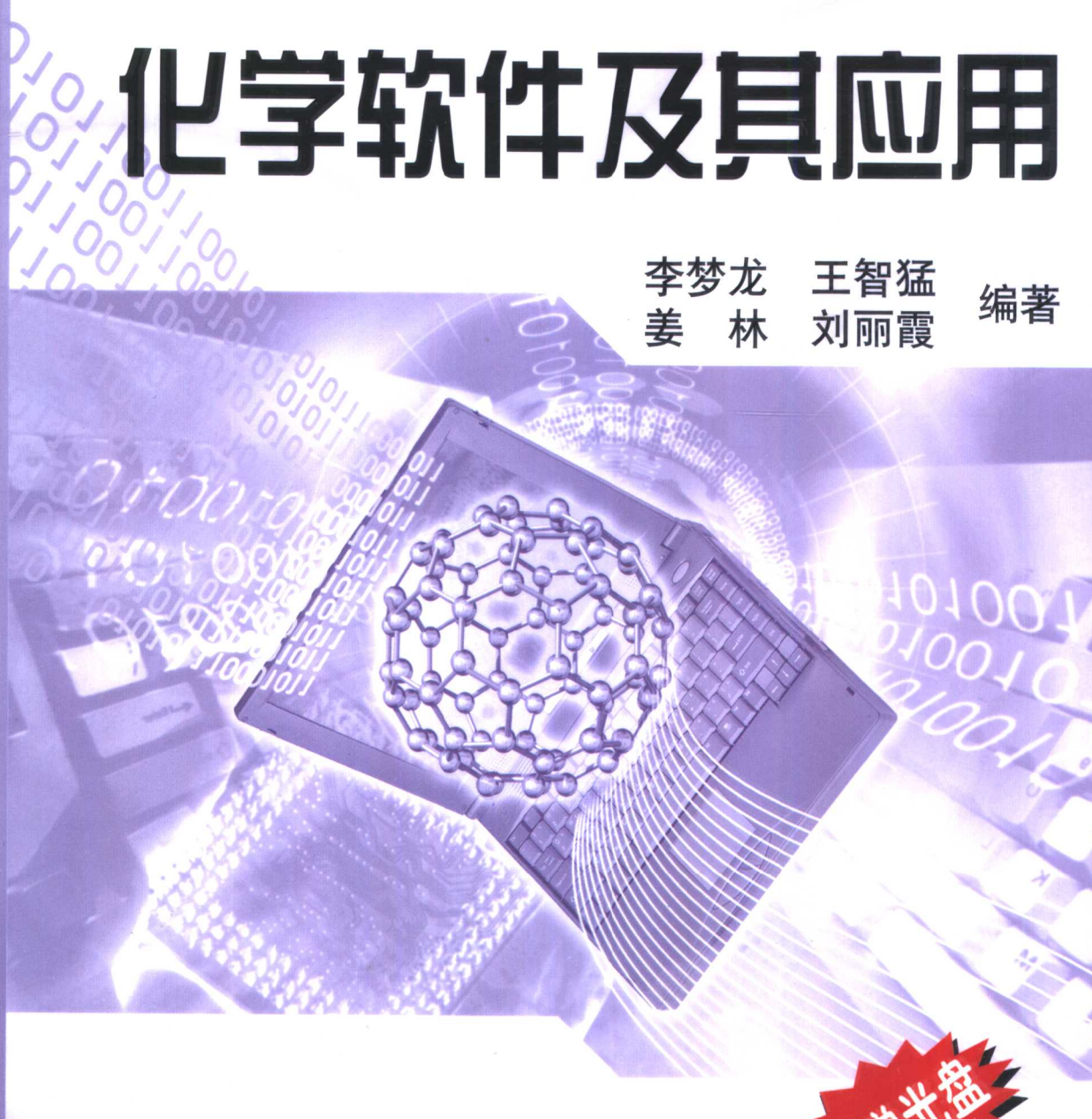


化学化工中计算机应用技术丛书

化学软件及其应用

李梦龙 王智猛 编著
姜 林 刘丽霞



附赠光盘



化学工业出版社

化学与应用化学出版中心

化学化工中计算机应用技术丛书

化学软件及其应用

李梦龙 王智猛 姜 林 刘丽霞 编著

化学工业出版社

化学与应用化学出版中心

·北 京·

(京)新登字 039 号

图书在版编目(CIP)数据

化学软件及其应用 / 李梦龙等编著. —北京: 化学
工业出版社, 2004.8
(化学化工中计算机应用技术丛书)
ISBN 7-5025-5998-1

I. 化… II. 李… III. ①化学-应用软件②化学
工业-应用软件 IV. ①06-39②TQ-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 074372 号

化学化工中计算机应用技术丛书

化学软件及其应用

李梦龙 王智猛 姜 林 刘丽霞 编著

责任编辑: 杜进祥

责任校对: 凌亚男

封面设计: 潘 峰

*

化学工业出版社

化学与应用化学出版中心 出版发行

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

发行电话: (010) 64982530

[http:// www.cip.com.cn](http://www.cip.com.cn)

*

新华书店北京发行所经销

大厂聚鑫印刷有限责任公司印刷

三河市延风装订厂装订

开本 787mm×1092mm 1/16 印张 21³/₄ 字数 536 千字

2004 年 10 月第 1 版 2004 年 10 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-5998-1/TP · 347

定 价: 48.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

出版者的话

随着以计算机、网络技术、通讯技术为代表的信息技术的迅猛发展，计算机和互联网在化学化工中得到了广泛应用。由于化学所研究的主要对象——化合物的种类繁多，已超过 2×10^7 个，使得化学的知识（信息）量也远远超过其他科学，唯有通过计算机才有可能对浩如烟海的化学知识进行有效地处理。今天，计算机技术已深入到化学化工领域的各个方面，成为化学化工科技工作者必不可少的工具。

为了让更多的人了解化学化工领域中计算机技术的发展动向和最新科技成果，我们邀请了全国部分高校、科研院所的专家、学者编写了《化学化工中计算机应用技术丛书》，力求反映当今化学化工领域计算机技术应用的发展方向和科技成果。本套丛书第一批有《化学多媒体素材制作和应用》，《化学软件及其应用》，《Excel 与化学化工试验数据处理》，《化学数据速查手册》，《化学品电子手册》，《网络探究与化学教学》，《有机化学反应速查手册》，《元素化学反应速查手册》，《化学中的计算机数值方法》等9个分册。我们希望这套丛书的出版能进一步推动计算机技术在化学化工领域的应用，为化学化工领域的科技人员及院校师生了解现代计算机技术提供有益的参考。今后，我们将根据化学化工中计算机技术的发展，继续组织编写新的分册，以满足读者的需求。恳切希望使用本套丛书的读者随时向我们提出宝贵的意见和建议，以便再版时使之臻于完善。

化学工业出版社
2003 年 10 月

前 言

软件对于人类而言是一个全新的东西，其发展历史不过四五十年。人们对软件的认识经历了一个由浅到深的过程。

在计算机系统发展的初期，硬件通常用来执行一个单一的程序，而这个程序又是为一个特定的目的而编制的。早期当硬件已实现普遍通用之时，软件的通用性却是很有限制的。大多数软件是由使用该软件的个人或机构研制的，往往带有强烈的个人色彩。早期的软件开发也没有什么系统的方法可以遵循，软件设计是在某个人的头脑中完成的一个隐藏的过程。而且，除了源代码往往没有软件说明书等文档。

从 20 世纪 60 年代中期到 70 年代中期是计算机系统发展的第二个时期，在这一时期软件开始作为一种商业化产品，出现了专职应别人的需求开发软件的“软件作坊”。这一软件开发的方法基本上仍然沿用早期的个体化软件开发方式，但由于软件的数量急剧膨胀，软件需求日趋复杂，维护的难度越来越大，开发成本令人吃惊地高，而失败的软件开发项目却屡见不鲜。

随着计算机硬件的迅速扩展和性能的提高，对软件的要求也越来越高。通过对软件及其特性更深一步的探索，人们逐渐改变了以前对软件的不正确认识。早期那些被认为是优秀的程序常常很难被别人看懂，通篇充满了程序技巧。而现在，人们普遍认为优秀的程序除了功能正确、性能优良之外，还应该容易看懂、容易使用、容易修改和扩充。因此，基于软件工程的软件开发成了大小软件项目必须遵守的一个规范，这其中包括软件需求调查和分析、软件系统设计（软件界面和数据库设计）、软件测试（开发的各个阶段）、程序编写、文档编写、软件发布和后续升级等几个主要过程。

当代计算机已经能快速地进行大量复杂、繁琐的数学计算，加之近十年来计算机技术不断地向智能化、网络化方向发展，使得应用计算机技术所能解决的化学问题越来越多，对物质的化学结构进行解析、表征，到分子的模拟与设计，这是前所未有的。所以，相关的化学软件（化学排版软件、仪器接口软件、化学数据处理软件和量子化学计算软件等）已成为化学工作者日常工作中提高科研效率的必不可少的基本工具，化学软件的相关信息也成为需要关注的内容，有必要加以整理分类。

另一方面，未来计算机能为我们干什么，在很大程度上取决于我们对软件提出的设计要求。然而，这样的应用软件开发仅仅由计算机专业程序员是无法完成的，计算机技术与化学之间的相互渗透已成为化学和计算机科学工作者的研究热点，要想将计算机技术深入应用到化学中就必须解决化学与计算机的结合问题，得从化学工作者的角度应用和设计计算机软件甚至硬件，以满足化学工作者处理化学信息的要求。该领域的研究包括计算机与化学仪器的接口、化学类应用软件程序包的开发、化学物质结构数据库的开发和查询。

世界是多姿多彩的，人的感知也是多方面的，新一代的化学软件将力求使计算机全方位为人类服务。软件是人与计算机交流的语言，通过它，人们希望把一些以前不能完成或完成起来很困难、繁琐的工作交给计算机去完成。我们有理由相信化学这一古老学科在信息时代能够以前所未有的速度发展。

本书的构思和写作在很大程度上也遵循了软件开发的基本思路，先对化学类软件进行了全面、系统的调查，但在进行软件分类时还是感觉太过复杂和牵强：首先，软件的功能越来越全面、完善，另外基于 Web 的查询系统，仪器接口软件和化学相关的管理系统以及基于计算的各类化学软件，纵横交错，互为关联；其次，化学及其相关类软件和系统（数据库）数千个，且和当今的软件产业一样，生存周期长短不一，难于去伪存真、正确取舍；最后，因为化学软件过多，不可能对每个软件都进行调试（事实上也没有这个条件，受渠道、版权、设备限制），只是对部分有代表性的软件进行研究和应用，通过互联网检索相关软件资源，通过和软件商家的联络以及综合和整理使用过这些软件的化学工作者的评价来探讨化学软件及其应用的方方面面。

读者可以发现，我们在化学排版类软件方面用了较多的篇幅，特别是 ChemOffice，约占用了全书 1/4 的版面，这一点我想读者通过阅读后是可以理解的。相对而言，该软件是化学领域功能最为强大的集成式软件，多个功能模块相互依存又相对独立，这是普通化学软件所不能及的，我们全体编写人员希望通过对 ChemOffice 功能的系统分析和应用说明，能为读者使用、设计乃至以后开发化学软件提供帮助。另外，为了让读者了解更多的化学软件，我们介绍了 MATLAB、分析仪器数据处理、量子化学与分子模拟等计算软件。但是，由于这些软件涵盖内容颇多，在本书中没能将其精华完全囊括，为此，我们列出其部分门户网站和软件体系的网络查询方法，有兴趣的读者可以通过这些站点去查询相关具体内容。

在编写和成书过程中，得到书中所列许多软件公司的许可和协助，在此不一一列举，我谨代表本书所有参编人员向他们表示真挚的谢意；有些软件公司因故没有取得联系，书中对软件的表述和评价不妥之处，敬请谅解，并欢迎和我们联络，以便在该书今后的改版中做得更好。特别要感谢华南师范大学袁中直先生，在该书的编写和初稿至定稿过程中，提出了许多宝贵的建议；另外，作者也向书中引用到的网站网络资源的作者表示诚挚的谢意。

该书得以完稿，和我们实验室研究人员的辛勤劳动密不可分。编写小组人员包括王智猛、姜林、王鹏（协助全书统筹），王鹏（ChemOffice）、刘丽霞（ChemSketch）、谢微、刘军红、谭福元（Labview）、姜林、何雪鹃（LIMS）、孙李娜、杨晓明、汪秋琪、姜薇、李益洲；吴曦、文志宁、陆敏春、黎金明、王克龙等不同程度地参与了本书内容的组织和核定；光盘内容组织除上述人员外，设计人员还包括李功斌、曹智坤、姜林、王鹏、何雪鹃、梁彬等。

李梦龙

2004 年 8 月于四川大学

内 容 提 要

本书是《化学化工中计算机应用技术丛书》之一。

化学软件是当前化学化工工作者日常工作的基本工具。本书在对化学类软件进行全面系统介绍的基础上,重点介绍了化学化工科技工作者使用较多的 Chem Office、ChemSketch、化学实验模拟软件 ChemLab、化学金排、超级化学助手、化学品电子手册、虚拟仪器开发工具 LabVIEW6.1、实验室信息管理系统 LIMS、基于算法的化学计算软件 MATLAB 和 ChemWAVE 等软件的功能、特点及使用技巧。此外,书中还结合实例介绍了化学教学软件以及化学信息与网络数据库的设计思路与制作方法。

附赠光盘中除包括书中介绍的各种软件素材和相关站点资源外,还收集了作者多年来开发的化学软件和整理的大量化学化工信息资源。专门开发的搜索引擎软件采用全模糊检索技术,方便对光盘内容进行检索。

本书可作为大中专院校化学化工专业师生的教学参考书,也可供化学化工科技工作者学习参考。

第一章 化学软件概论

第一节 软件概述

现在关于软件的概念有很多，被普遍认同的有如下观点。

软件（software）是计算机系统中与硬件（hardware）相互依存的另一部分，它包括程序（program）、相关数据（data）及其说明文档（document）。其中程序是按照事先设计的功能和性能要求执行的指令序列，数据是程序能正常操纵信息的数据结构，文档是与程序开发维护和使用有关的各种图文资料。程序的设计常常通过各类算法来实现，而算法是在有限步骤内求解某一问题所使用的一组定义明确的规则。通俗点说，就是计算机解题的过程。在这个过程中，无论是形成解题思路还是编写程序，都是在实施某种算法。前者是推理实现的算法，后者是操作实现的算法。

一个算法应该具有以下 5 个重要的特征。

- ① 有穷性 一个算法必须保证执行有限步之后结束。
- ② 确切性 算法的每一步骤必须有确切的定义。
- ③ 输入 一个算法有 0 个或多个输入，以刻画运算对象的初始情况，所谓 0 个输入是指算法本身定义了初始条件。
- ④ 输出 一个算法有一个或多个输出，以反映对输入数据加工后的结果。没有输出的算法是毫无意义的。

⑤ 可行性 算法原则上能够精确地运行，而且人们用笔和纸做有限次运算后即可完成。软件同传统的工业产品相比，有其独特的特性：

① 软件是一种逻辑实体，具有抽象性。这个特点使它与其他工程对象有着明显的差异。人们可以把它记录在纸上、内存、磁盘、光盘上，但却无法看到软件本身的形态，必须通过观察、分析、思考、判断，才能了解它的功能、性能等特性。

② 软件没有明显的制造过程。一旦研制开发成功，就可以大量拷贝同一内容的副本。所以对软件的质量控制，必须着重在软件开发方面下工夫。

③ 软件在使用过程中，没有磨损、老化的问题。软件在生存周期后期不会因为磨损而老化，但会为了适应硬件、环境以及需求的变化而进行修改，而这些修改有不可避免的引入错误，导致软件失效率升高，从而使软件退化。当修改的成本变得难以接受时，软件就被抛弃。

④ 软件对硬件和环境有着不同程度的依赖性，这导致了软件移植的问题。软件的开发至今尚未完全摆脱手工作坊式的开发方式，生产效率低。软件的成本相当昂贵，软件开发需要投入大量、高强度的脑力劳动，成本非常高，风险也大。现在软件的开销已大大超过了硬件的开销。

⑤ 软件是复杂的，而且以后会更加复杂。软件是人类有史以来生产的复杂度最高的工业产品。软件涉及人类社会的各行各业、方方面面，软件开发常常涉及其他领域的专门知识，这对软件工程师提出了很高的要求。

⑥ 软件工作牵涉到很多社会因素。许多软件的开发和运行涉及机构、体制和管理方式等问题，还会涉及人们的观念和心理。这些人的因素，常常成为软件开发的困难所在，直接影响到项目的成败。

⑦ 专业软件的研发需要具有专门知识的行业专家参与需求调查和分析，并进行系统分析和设计，并对开发的软件进行不同阶段的测试。高质量的软件对上述过程通常采用循环迭代模式。

软件包括的范畴分为 3 大类：

① 系统软件。

② 应用软件 包括事物软件、实时软件、工程和科学软件、嵌入式软件、个人计算机软件、人工智能软件。

③ 工具软件。

其中应用软件是为解决特定领域应用开发的软件，化学类软件当然属于应用软件的范畴。

毋庸置疑，化学软件和计算机的发展紧密相关，特别是随着网络技术的成熟，各类化学软件通过网络、光盘等载体迅速向广大化学和计算机爱好者传播。更值得欣慰的是由于网络的共享与互动性，国内外软件开发人员能及时根据用户的要求，开发出更具实用性的软件并实时更新。同时由于互联网的方便快捷和使用的广泛性，理所当然的成了可供试用和下载软件的极为重要的来源。几乎所有大的站点，都提供一些有用的软件供用户下载。关于软件方面的站点其内容一般有对软件进行的评述，同时也提供软件下载和更新。一些专门收集软件包的站点还有软件搜索引擎，方便读者快速找到所要的软件。

第二节 化学软件的分类

将化学软件进行分类的目的是为了更好地了解、使用化学软件，从而促进化学及相关科学的发展。

化学软件是当前化学工作者日常工作的基本工具，关于化学软件的各种信息是大家极为关注的内容。互联网上的许多化学信息资源导航系统均把化学软件作为重要的收集对象。国外计算机信息产业之所以发达，其中很重要的一个原因就是软件非常规范和丰富，特别是专业应用软件，计算机只有做到“有用”，才真正的体现它作为工具的价值。

中国版权的化学软件在前些年还非常少见，即使有一些，也往往由于功能不强，交流不够，或者由于界面不友好而难以流行，当然发挥的作用也就极为有限了。但随着国内近些年对软件产业的高度重视和扶持，特别是高校和科研机构、大中型软件公司在软件开发上的进步和成熟，这方面的研发已经有了长足的进步，不少化学及相关方面的软件相继问世。虽然初期版本功能较为缺乏、单一，bug 测试和包装方面有待提高，但毕竟是我国自己的软件产品。本书介绍的软件大部分来自国外，同时也对国内一些软件（虽然更多的是数据库系统和程序）进行了较为详细的介绍，希望通过努力，能够在这方面做出一些工作，抛砖引玉，促进国人了解国内外化学软件的发展方向，也希望同行能够加入到这一行列中来，开发中国人自己的化学软件。

由于计算机技术在化学科学上的应用毕竟时间不长，计算机软、硬件技术本身的飞速发展，软件已不再是为完成单一任务而编写的简单程序，试图用对传统化学科学的分类方法来对化学软件进行分类，是一件困难的事情。国内外一些化学站点将化学软件分为无机化学软件、有机化学软件、分析化学软件、物理化学软件、生物化学软件、化学教育软件、其他化

学软件等类别。中国化学软件网 (<http://www.echemsoft.com>) 按功能和学科等几种类型对化学软件进行的分类如图 1-1。

[软件专题]	ChemWin	ChemOffice	ChemCad	Alchemy	Gauss	Origin	
[教育软件]	教学课件	电子书籍	趣味化学	化学原理	化学实验	中学化学	软件教程
[功能分类]	化学编排	控制设计	模拟计算	趣味教学	仪器分析	化学工具	谱图谱库
[学科分类]	无机化学	物理化学	分析化学	生物化学	结构化学	高分子化学	综合各科

图 1-1 中国化学软件网对化学软件的分类

综观各类化学软件网站及相关专著教材, 感觉现有分类方法难于有效地统一起来, 多少有些无奈, 因为很多软件并不是非此即彼的, 随着化学软件的发展, 单一功能的软件将会更少, 要将所有化学软件分得很明确, 已经没有多大意义。表 1-1 列出了化学软件常见分类方法。本书的分类只是为了有助于较快的找到你所需要的东西, 然而分类不当很可能将你“引入歧途”, 反而找不到需要的东西。

表 1-1 化学软件常见分类方法

常见分类方法一	常见分类方法二	常见分类方法三	
无机化学软件	仪器分析软件	生物信息学	
有机化学软件	化学计算软件	化学信息学	
分析化学软件	化学编排软件	实验室信息管理系统	
物理化学软件	分子模拟软件	结构化学	晶体学
			红外光谱
			质谱
			核磁共振谱
生物化学软件	化学学习软件	分子模拟	生物大分子模拟
			计算机辅助药物/分子设计
			构象搜索
化学教育软件	画图作图软件	量化计算	分子力学与分子动力学
			量子化学
其他化学软件	谱库图库软件	通用软件工具	公用编程工具
			数据分析
			图形化工具
	其他化学软件	其他化学软件	

第三节 基于互联网的化学软件

国外在化学软件方面起步较早, 而较早开发的软件多是为完成某单一任务而写的程序。比如单纯为了在文档中书写化学表达式, 或为完成某一课题而编写的程序。那么一些不可避免的问题就出现了: 不同软件间很可能因为文件格式不同而无法交换数据, 由此还会产生更坏的后果, 如大量的重复劳动而引起的资源浪费。大多数的软件开发时并未考虑到网络传输, 因此数据在网上直接传输就出现了问题。随着 web 技术的日渐普及, 不仅使这种人力物力资源的浪费得以避免, 极大地提高现有信息的利用效率, 而且由于同行间交流的方便与快捷, 更快地促进各专业的发展, 了解当前本学科的前沿。化学软件是加快化学工作者出成果的工具, 互联网在加快其他学科发展的同时, 也加快了化学软件的不断完善, 因为社会是因交流而发展, 而互联网使这种交流变得更及时、更直接、更频繁、更简单、更广泛、成本更低。

一、化学软件标准

因特网目前使用的格式多种多样。例如, 图表图像能以 GIF、JPEG、PostScript、TIFF 和 PNG 等格式保存。因此首要任务就是正确区别出各种格式的文件, 防止发生混乱, 实现这一可能的前提就是制定一个统一的行业标准, 这个标准应该包括软件间的数据交换和数据在网络上传输形式等方面。

目前与化学软件相关的标准正在形成。1994 年第一届 WWW 国际会议上, 由 Leeds 大学和英国帝国理工大学发起, Borenstein 和 Freed 为电子邮件设计了一种识别机制叫做多用途因特网邮件扩展 (MIME) 标准。MIME 在每个数据文档的开端加上内容标题, 为邮件处理软件处理随后的内容提供信息。MIME 内容标题是分层的, 即具有“类型/子类型”的形式。“类型”主要用于为处理软件提供如何对文件进行处理的信息, “子类型”是更为具体的文件类型。例如, JPEG 图形文件的 MIME 内容标题是 image/jpeg, 微软 Word 文档被标记为 application/msword, PostScript 文档则被标记为 application/postscript, HTML 文档使用 text/html 表示, 而 QuickTime 电影文件的 MIME 内容标题为 video/QuickTime。

最初 MIME 识别机制只用于电子邮件, 处理电子邮件的附件, 现已扩展到万维网和 GOPHER 等网络应用。当用户在 HTML 文档中点击了一个超链接时, 浏览器向网络服务器发送一个请求。服务器接收到用户的请求后, 查出所需文档, 按照正确的 MIME 类型标题将该文档送到客户端。当浏览器接收到文档后, 会读出 MIME 类型标题并决定该如何处理。如果浏览器不能处理 MIME 标题指示的内容, 它能自动找到能处理该文档的应用软件并将其打开运行。例如, 如果用户需要的是一个微软 Word 文档, 服务器会传送给用户浏览器一个标有 application/msword 的 MIME 类型文档, 浏览器将启动 Word 并打开所需文档, 用户可在 Word 窗口下移动文件并进行编辑。

MIME 同化学有多大联系呢? 化学工作者常常采用专业绘图软件绘制化学分子结构, 如 ChemDraw 或 Isis Draw。这些软件为了作进一步的处理, 将图形以 X-Y 坐标的形式保存下来。如果制定了一套与化学相关的 MIME 标准, 并将其集成到客户端浏览器以及 WWW 或 GOPHER 服务器中, 它的优点将是很明显的。比如把 MIME 类型是 chemical/x-pdb 的以 pdb 格式保存的晶体结构文件放在互联网上, 一旦用户通过一个客户端浏览器、电子邮件程序或其他某种方式接收到该文档, 该文件就可以被自动用相应的软件打开。简言之, MIME 的作用就是把特定文件和对应的软件联系起来。而化学 MIME 的应用可以使化学工作者与同行们一起更为方便地使用和处理最新出版的各种化学信息, 用不着像过去一样绞尽脑汁地去寻找不同的处理软件。

到目前为止, 人们提出了很多不同的化学 MIME, 可以将其分成 4 大类: ① 分子坐标、连通性及分子序列格式; ② 分子建模格式; ③ 光谱学格式; ④ 普通自定义现代格式。

在互连网上, 化学 MIME 的出现是化学出版业发展过程中的第一条分水岭。它使互联网对所有化学数据开放, 而数据在这里可以被传送给合适的操作软件, 使大家能直接操作和使用它。这相对于传统出版业来说是一个巨大的进步。这一标准用简单的分子描述符——化学 MIME 标准替代图形方式来表达化学信息, 这样至少有 3 个好处:

① 描述分子的数据文件的空间开销远远小于图形文件, 所以大大降低了化学信息从服务器下载到客户端所需的网络流量。

② 由于化学 MIME 标准采用原子间坐标描述分子结构, 所以用户可以通过改变原子坐标来达到在浏览器上操作分子的目的, 如旋转分子、改变分子的显示方式或从不同的角度观

察分子等。

③ 极大地减小了同行间交流的困难。

另一方面,在互联网上,为了让化学信息能被搜索引擎检索,应该有化学的 metadata 标准(元数据标准),metadata 是定义存储在数据库中数据的形式的数据,可认为是关于数据的数,比如你用“chemistry”作为关键词,在互联网上查到的资源远比实际的要少,这是因为文章的题目或关键词中不一定出现“chemistry”,而是出现一些与“chemistry”相关或相近的词,这就有必要制定一个关于关键词的标准,检索机在检索文本之前,先检索“metadata”中的元素,使查全率得以提高。

为解决以前格式的不统一的资源利用问题,一个办法是开发格式转换程序,但在格式转换过程中不可避免地会造成一些信息的丢失;另一个办法是统一标准,这对未来或正在开发的软件是很好的,但对过去积累的数据来说,这一工程的工作量十分巨大。在统一格式的进程中,用同一种或同一类适合化学软件开发的语言,是大家的共识。目前,标记和描述语言是处理大量化学信息时人们最为接受的方式。最有代表性的三种语言是 CML (Chemical Markup Language)、VRML (Virtual Reality Modeling Language) 和 JAVA。

二、开发化学软件相关的 Web 技术和语言

互联网网页是用 HTML (Hypertext Markup Language, 超文本链接标记语言) 和新近建立的 XML (eXtensible Markup Language, 扩展标记语言) 制作出来的,而 HTML 只能显示标准格式的页面如段落、标题、下标,以及一些图形、纯文本和超链接等。大多数化学工作者编制的网页用的就是这种简单的 HTML 语言,这样一来,除了超链接之外,网页和书面文章基本上没有什么区别。但不要忘记,互联网带来了全新的技术,它不仅仅可以传送 HTML、纯文本或以 GIF、JPEG 格式为代表的静态网页图形文件,还可以利用它显示、操作(旋转或放大部分区域)三维立体蛋白质等大小分子的结构图形。XML 是由万维网协会(W3C)设计,特别为 Web 应用服务的 SGML (Standard General Markup Language) 的一个重要分支。而 XML 提供了一种独立的运行程序的方法来共享数据,它是用来自动描述信息的一种新的标准语言,能使计算机通信把互联网的功能由信息传递扩大到人类其他多种多样的活动中去。XML 由若干规则组成,这些规则可用于创建标记语言,并能用一种被称作分析程序的简明程序处理所有新创建的标记语言,正如 HTML 为第一个计算机用户阅读互联网文档提供一种显示方式一样,XML 也创建了一种任何人都能读出和写入的世界语。XML 解决了 HTML 不能解决的两个 Web 问题,即互联网发展速度快而接入速度慢的问题,以及可利用的信息多,但难以找到自己需要的那部分信息的问题。XML 能增加结构和语义信息,可使计算机和服务器等即时处理多种形式的信息。因此,运用 XML 的扩展功能不仅能从 Web 服务器下载大量的信息,还能大大减少网络业务量。

另外,传统的书面文章中出现的光谱多为简化的图形或者是一些光谱数据,通过 WEB 技术,可以在网页中嵌入整幅谱图,用户还可以放大其中的一部分区域并进行一些交互式操作。动画也是信息交流的一个重要组成部分,通过它能够将一些复杂的化学过程直观地表述出来,有谁在书面形式的化学期刊杂志中见过这些动画呢?当你在做一个课题研究时,你是否想过不用挤公共汽车花一天或数天的时间到图书馆,就能得到你所需要一些数据呢?使用 WEB 技术,这些都可以比较容易地实现。

化学工作者要开发互联网的全部潜在功能,就必须要对常用的 WEB 技术有一定程度的了解。对化学工作者有直接影响的四种 WEB 技术是 MIME (Multipurpose 互联网 Mail

Extensions, 多用途因特网邮件扩展)、VRML (Virtual Reality Markup Language) 虚拟现实标记语言)、JAVA、CML (Chemical Markup Language, 化学标记语言)。

关于 MIME, 已经在前面把它作为一个标准介绍给大家了。这里需要介绍的是, 处理化学信息、开发化学软件中最具代表性的三种语言 VRML, JAVA 和 CML。

1. VRML 虚拟现实建模语言 尽管网页页面信息丰富, 图形美观, 它总给人带来一种平面化的感觉。1995 年, VRML 虚拟现实建模语言的引入改变了互联网的这种状况, 它使互联网从二维世界发展到了三维世界。如果说 HTML 是一种用于描述二维世界的语言, 那么 VRML 可以对一系列的三维物体例如球体、柱体和其他简单立体图形进行描述。VRML 可在浏览器虚拟的三维空间中显示这些物体, 用户还可以随意移动它们。可以充分利用 VRML 强大的 3D 功能创建各种复杂的三维分子模型和构象, 另外, 用 VRML 编写的文件支持超链接。因此用 VRML 描述的分子能通过超链接连接到不同原子, 或者是在 HTML 文件和 VRML 编码文件之间实现信息交流。现在 VRML 已成为 Web 上发布三维图形的标准。长久以来, 困扰化学工作者的一个难题是对微观世界难以直接观察, 而分子的可视化技术逐渐把微观世界以更加直观的形式展现在人们面前, 为人们认识和研究物质世界的本质提供了一个极为重要的工具。

2. Java 语言 使用 VRML 虽然能在三维分子对象和其他文件之间建立起复杂的相互作用, 但 VRML 自身不带有描述分子的一些基本参数, 不能生成细微的分子运动。在现有的 VRML 版本下, 由于 VRML 中键向量和原子球体之间没有联系, 因此不可能使分子图像实现从网架模型到空间填充模型的动态转换。为达到这个目的, 要使用一种称作 Java 的编程环境把分子的数据、运动和超链接关联起来。

Java 是一种基于 C++ 的面向对象语言。这种语言由 Sun Microsystems 公司开发, 目的是实现“一次编制, 多处执行”的目标。因为传统的高级语言如 C、C++、Pascal、Fortran 等编译出来的可执行文件具有很强的平台相关性, PC 机 Windows 平台上的应用程序不能迁移到 RISC 计算机的 Unix 平台上。而 Java 可以克服这个缺点, 只用编译一次, 就可以方便地不同平台上运行。使用 Java 编制的应用软件可以通过 URL 地址利用网上的全部开放资源。当一个 HTML 超链接被激活后, 用户可将 Java 应用程序 (Applet) 下载到计算机上。Applet 程序自身可合并到 HTML 文件的主体中去以便使数据在页面中显示出来。因为 Java 对象库是分布式的, 所以 Applet 能从网上不同计算机“拖入 (pull-in)”程序中所需的任何数据。通过这种途径, 本地应用程序不需要读取和显示数据类型, 这使用户更易操作。

Java 能使用四散分布在整个网上的 Java 对象库组件, 这意味着在调用 Applet 下载可执行代码时, 存在感染计算机病毒的可能性, 这是一个潜在的安全问题。然而用 Java 语言编制的代码不会进入不属于它们的数据结构中, 另一个重要因素是互联网不是单一的, 而是由很多不同的硬件平台和操作系统组成, 这样由 Java 编制的 Applet 安全性较高。

3. CML 化学构造语言 由于化学科学庞大的分支和技术的复杂、多样, 而且每个人对化学键、化合价、分子式等有自己的不同的看法, 所以在不同类型的分子数据文档之间进行信息交流很难也就不奇怪了。如前所述, 解决这一问题的最好办法是使用标记语言。构造语言在文件中增加亚信息, 让计算机了解更多有关该文件的内容。例如, 尽管人们“知道”标题来源于文件的起始部分, 但计算机不知道, 它需要以下格式才能严格地对文件进行搜寻、检索、整理并显示出来。

〈标题〉化学键的特性 〈/标题〉

〈作者〉作者名 〈/作者〉

标记性语言较多, 其中 CML 是在 SGML (Standard Generalized Markup Language) 的基础上对 CSML (Chemical Structure Markup Language) 进行完善而发展形成的, 每个 SGML 文档都由 SGML 定义、文档类型定义和文档本身三部分组成, 因此可灵活地定义文档的结构和数据类型。HTML、XML (Extensible Markup Language, 扩展标记语言) 都属于 SGML。CML 将 SGML 的规则扩展到了含有数字和分子结构的文档, 它将语法从语义中分离出来, 使得化学文档具有索引和为检索而建立的逻辑结构, 并可以与其他文档建立链接。CML 由 HTML、支持 STM (Scientific, Technical and Medical) 域中一般数据的 XML、表达分子结构数据类型的 DTD (Document Type Definition) 组成, 它可处理大部分化学 MIME 类型, 并可将其嵌入 Java Applet。

当前电子化学信息很大一部分是用 CML 编码的。由于 CML 文件结构非常灵活, 已被运用于精确描述仪器输出的数据结果、程序输出、数据库入口和出版业。CML 还具有可扩展性, 可以通过创建新文件结构和增加术语表中的术语来拓宽它的范围。

总之, CML 的出现使化学工作者组织、获取信息资料的方式发生了巨大变化。由于 CML 的语言结构和化学工作者思考的方式相一致, 在许多情况下采用 CML 能更好地组织数据。

第四节 化学软件的网络资源

随着近年来互联网的飞跃性发展, 有关化学软件的专业性网站越来越多, 特别是一改以前大型机构在政府支持下设置网站的局面, 现在不单是一些学术小组或者个人参与了这类网站的开发, 而且资源、更新和效果也都相当不错, 这是一个可喜的发展趋势, 值得称道。限于篇幅, 书中将不一一列举化学软件的网络资源, 只介绍两个著名搜索引擎给出的化学软件部分结果, 有兴趣的读者可以自行设计、检索, 得出想要的结果。更多的化学软件网站和软件分类及说明请通过书中的配套光盘查看。

下面是通过百度搜索引擎 (<http://www.baidu.com/>) 查找的关键词“化学软件”得出的部分结果。

化学软件 (Chemistry&Software)

...V2003 综合各科 ==首页友情链接== 旧版化学软件 (ChemSoft.yeah.net) 化学村
(www.ChemiVillage....www.ChemDoor.com) 化学走廊 (Chemistry Channel) 量子化学软件
(QuantumChemSoft) Copyright 2001.03 ...
www.truechemsoft.com/ 17K 2004-4-4 - 百度快照

量子化学软件中文网

●量子化学软件中文网●●量子化学软件中文网●相关链接 ●量子化学软件中文网● 最近更新
2004 年 3 月 28 日 加入以下内容: 1. 免费软件加入 AIM98PC, CNS, DIRCCR12-OS, LUCIA,R-matrix。
更新了 PC-GAMESS...
zorkov.nease.net/ 10K 2004-3-31 - 百度快照

www.echemsoft.com/

...&文章资料区 + (4) 分类专业区 | 化学教育软件区 | 仪器软件和谱库数据
库 | 材料化学软件论坛 | 数理...我们 联系我们 Copyright (C) 2001 eChemSoft.com, All Rights
Reserved 中国化学软件网版权所有 ...

www.echemsoft.com/38K 2004-5-3 - [百度快照](#)

[www.echemsoft.com](#) 上的更多结果

化学软件

化学软件 从这里你可以下载一些作为一名化学工作者经常用得着的软件, 安装在自己的计算机里慢慢使用, 但是由于主页空间有限, 所以也只能上传这些常用的。如果大家需要什么也可以联系我, 有什么好介绍也...

www.bsdfx.net/chem2003/ruanjian.htm 9K 2003-10-27 - [百度快照](#)

[www.bsdfx.net](#) 上的更多结果

ChIN 目录页:化学软件

... 化工过程相关软件 化合物的结构处理、命名 化学软件目录及网上商店化学软件相关新闻 化学相关软件在中国的代理商 教学软件 其他 日常工具

软件评论 数据处理 信息管理工具 主要化学软件产品 访问...

www.chinweb.com.cn/ListPageC/Software... 12K 2004-4-8 - [百度快照](#)

[www.chinweb.com.cn](#) 上的更多结果

化学软件 (trueChemSoft) --软件下载

呵护我们的绿色家园 返回上页 回到主页 化学之门 化学村 化学软件 化学教育 信息检索 联系我们 软件类别>> 综合各科 • 易画学科工具 V3.0 出版日期 null 运行平台 WIN9X 文件大小 3000 KB 授权形式 ...

www.chemonline.net/truechemsoft/downso... 8K 2004-3-29 - [百度快照](#)

[www.chemonline.net](#) 上的更多结果

免费生物化学软件天地

...数据库 化学绘图 化学应用 游戏与屏保 生物软件论坛 化学软件论坛 相关中文网站 请您留言 我是谁...化学应用软件下载天地 总目录 特别告示:开通生物软件论坛与化学软件论坛, 专门讨论生物软件与化学软件...

biosoft.im.ac.cn/ 16K 2004-5-3 - [百度快照](#)

[biosoft.im.ac.cn](#) 上的更多结果

常用化学软件下载

... 简氏新浪 263 中华网 网大 版权所有:wangpei EMail:wangwudi@elong.com 显示文件大小区分大小写只显示目录完全匹配 物理有机实验室 <<返回 常用化学软件下载 教育教学类软件 易画学科工具 2002 运行...

mail.ustc.edu.cn/~elite/download8.htm 42K 2002-6-15 - [百度快照](#)

[mail.ustc.edu.cn](#) 上的更多结果

生物软件网

目录 现货原版图书软件 AMAZON 礼品券代购 PayPal 美元兑换 自 1999.7.4 标题 生物软件网 生物软件网... Activex Control 4.0 更新为 5.0 版本, 同时更新原始网站链接, JAVA 语言编写的化学分子 2 维与 3 维显示程序...

biosoft.yeah.net/ 37K 2004-5-2 - [百度快照](#)

事实上, 上述百度搜索得出了当前化学软件的大多数主力站点, 有兴趣的读者可以自行验证。表 1-2 给出了生物软件网二级栏目中化学应用类的部分内容。

表 1-2 生物软件网二级栏目中化学应用类的部分内容

化学应用类	软件说明
mmcalc.exe	35K 分子量计算器, 小巧而方便, 只要输入分子式, 鼠标单击, 便可计算出分子量或者各元素百分比。轻轻松松, 一切搞定。感谢金日昇, 制作了汉化版
hxfc.zip	48K DOS 软件。这是江苏 苏州高中的两个高中生写的化学方程式配平软件, 内附 PASCAL 源程序, 对高中学生和老师大有帮助。我试了一下, 挺不错, 但操作较麻烦
Chemical Calculator 6.0	12 兆 化学计算器。在化学实验室工作久了, 一定厌倦了为了配制各种化学试剂溶液而计算化学试剂用量的工作了吧? 应用化学计算器, 只需输入最终浓度 (摩尔浓度或百分浓度)、起始浓度以及需配制的体积, 便给出配制用量, 非常方便。chemclhp.zip 2K 化学计算器 1.0 的中文使用说明, 文本文件格式。注册费 60 美元
alkne.exe	38K 有机化学命名练习程序, 程序随机给出不同长度碳链及侧链的碳氢化合物, 由你按照 IUPAC (国际理论化学和应用化学联合会) 的命名规则给出标准英文命名。适合科技英语专业课的课堂练习
ChemBalance Wizard 1.0	736K Win95 下的免费化学方程式配平程序, 界面采用精灵方式, 非常友好, 化学方程式快速配平轻而易举, 试试吧。chemblhp.zip 2K 化学方程式配平程序的中文使用说明, 文本文件格式。
periodic.zip	76K 小巧的元素周期表, 简单地在各个元素上单击, 将显示元素名称、元素符号、周期表中的序号、原子量和密度。点击“Report”按钮就可以把信息拷贝到一个文本文件中, 这样你能够剪切或者粘贴到任何的文档了。备一个元素周期表在计算机中, 平常使用非常方便
高级元素周期表	1.8 兆 高级元素周期表, 功能非常多, 包含了元素的各种信息, 甚至连发现者信息也包含在内, 并有各种选项
CFT 1.3	870K, The Chemical Formula Tutor 的缩写, 共享软件, 化学式教师, 用来学习化合物化学式的书写。使用十分方便, 支持鼠标拖动释放。
元素屋 3.6	2.5M, 《元素屋》是一款专门为中国人设计的化学软件, 它的对象是化学爱好者及所有喜爱化学的朋友。《元素屋》的主要功能就是查询 112 种元素的各个信息, 所以功能强大的搜索引擎就是软件的最大特点。无论您要查询什么元素、什么性质、在什么范围, 相信《元素屋》都能帮您办到, 使您的工作事半功倍。免费注册, 注册码: 2ECBF (2002-8-27 到 2002-9-25)。
化学反应方程式编辑器 1.0	185KB 制作化学反应方程式、离子方程式、分子式、离子式等, 可以插入到 Word、WPS 等。提供源代码。
CRS 1.3	260K, 化学反应方程式配平器。
Model ChemLab v2.3	2.8M。极佳的一个化学实验教育软件, 在体验版中仅有 6 个试验是模板化的, 药品与设备也不多, 而且实验向导创建的自定义实验模板无法保存, 但非常好用直观。若条件许可, 请到原公司注册, 并可免费更新与下载相关软件。Gnat 汉化的 ChemLab v2.0 汉化版, 1.2M。注册费 29.99 美元
化学品电子手册 3.0	13M。共享软件, 有时间限制。广西大学林桂汕提供。是一个综合性的化学品手册。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、胶粘剂、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。本软件采用全模糊检索技术, 检索简便
Molecular Weight Calculator 6.32	3.1M, 免费的分子量计算器。

大家从这些软件的作者可以看出现在网络上参与软件开发的人员早已不局限在计算机专业人员了, 而且, 对软件的介绍出现了人性化的一面, 不再是以前那种干巴巴的官方语言了, 虽然难免受制作人员水平、情绪的影响而偶尔有失偏颇, 但相信读者会通过网络的交流、甄别, 找出对自己有用的信息。

对国外资源的检索, 作者乐意推荐用于科技信息检索的 www.scirus.com, 该搜索引擎把检索结果分成期刊杂志和 web 资源两大类, 滤除掉了极大多数的垃圾网站, 并可根据需要进行排序, 特别地, 网页右边根据检索的词组自动包含了可以缩小检索范围的关键词提示, 联合使用起来相当方便。图 1-2 是“Chemical software”的检索结果。

chemical software

☒ All journal sources ☒ All Web sources ☐ Exact phrase

Searched for: All of the words **chemical software**

Found: **505,714 total** | **64,607 journal results** | **441,107 Web results**

Sort by: **relevance** | **date**

1. **Chemical Safety Software**
Oct 2002
[<http://www.chemicalsafety.com/>]
[similar results](#)
2. **Software Corner**
Jan 2004
...TRADE PUBLICATIONS **SOFTWARE CORNER Chemical Engineering Software** Check out the **chemical engineering software** library here at the...included. Commercial **Software Discounts** Available only to visitors of The **Chemical Engineers' Resource**...
[more hits from](http://www.cheresources.com/sheetszz.shtml) [<http://www.cheresources.com/sheetszz.shtml>]
[similar results](#)
3. **Chemical Education Software Publishers**
Dec 2003
Chemical Education Software Publishers The diversity of...734-483-4768 e-mail: bert@**chemicalc.com** CrystalMaker **Software** CrystalMaker and CrystalDiffract...acquired by MDLI Journal of **Chemical Education: Software** Offers a large and diverse...
[more hits from](http://www.umsl.edu/~chemist/books/softpubs.html) [<http://www.umsl.edu/~chemist/books/softpubs.html>]
[similar results](#)
4. **The Chronicle: Daily news: 12/10/2002 -- 01**

Refine your search using these keywords found in the results:

[abstract machine](#)
[american chemical society](#)
[chemical engineers](#)
[chemical model](#)
[chemists](#)
[chromatography](#)
[computational chemistry](#)
[computational science](#)
[crystallography](#)
[formal specification](#)
[inventory system](#)
[reconfiguration](#)
[safety data](#)
[software architecture](#)
[software engineering](#)

图 1-2 “Chemical software” 的检索结果

这时检索得到的期刊杂志包括 64607 条，web 资源更多。如果希望缩小范围，比如在化学软件中包括化学模型，则选中右边的 Chemical model 项，得出的结果如图 1-3。

(chemical AND software) AND ("chemical model")

☒ All journal sources ☒ All Web sources ☐ Exact phrase

Searched for: All of the words **(chemical AND software) AND ("chemical model")**

Found: **1,035 total** | **208 journal results** | **827 Web results**

Sort by: **relevance** | **date**

1. **Towards a Chemical Model for Software Architecture Reconfiguration - Wermelinger (ResearchIndex)**
Nov 2002
Towards a **Chemical Model for Software Architecture Reconfiguration**...sentence level): 39.7% Towards a **Chemical Model for Software Architecture Reconfiguration**...M. Wermelinger. Towards a **chemical model for software architecture reconfiguration**...
[more hits from](http://citeseer.nj.nec.com/463382.html) [<http://citeseer.nj.nec.com/463382.html>]
[similar results](#)
2. **Towards a Chemical Model for Software**
Dec 1998
Towards a **Chemical Model for Software Architecture**...Abstract The **Chemical** Abstract...programming **model**. Among other...behaviour of **software architectures**...3]. The **chemical reaction model** views computation...and analyse **software architec**...
[<http://choices.cs.uiuc.edu/2k/papers/Internal/htdocs/1...>]
[similar results](#)
3. **Spatial Analysis and Decision Assistance (SADA) Software Home Page**
Dec 2003
...Assistance (SADA) is free **software** that incorporates tools...create a user friendly **software** package for environmental...assessors with a unified **software** package that links practical...multiple pathway, multiple **chemical model** that integrates human...
[<http://www.tiem.utk.edu/~sada/>]
[similar results](#)

Refine your search using these keywords found in the results:

[abstract machine](#)
[chemical equation](#)
[computational chemistry](#)
[computer based](#)
[concurrency](#)
[data assimilation](#)
[decision making](#)
[distributed system](#)
[dynamic change](#)
[dynamic reconfiguration](#)
[gas phase](#)
[power plant process](#)
[project set](#)
[reactive systems](#)
[rewriting](#)

Or refine using:

All of the words

图 1-3 缩小范围后的检索结果