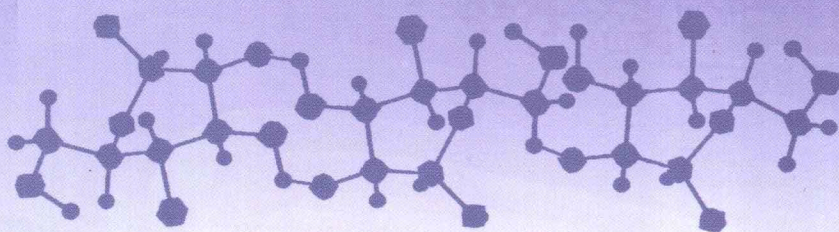


JISUANJI HUAXUESHIJIAN
JICHU JIAOCHENG

计算机化学实践 基础教程

胡建平 © 主编



科学出版社

计算机化学实践基础教程

Training Course for Computer Chemistry

胡建平 主编



科学出版社
北京

内 容 简 介

计算机化学是以计算机为技术手段,建立化学化工信息资源化和智能化处理的一套理论和方法。本书针对学生在计算机化学学习及研究过程中可能会遇到的各种问题,以直观的图文注解方式进行讲解,并穿插操作技巧和方法。本书包括化学信息库、化学分子结构绘制、Linux基础知识、计算机化学模拟、数据处理及作图、Perl程序编写等内容。每一章均自成体系,可单独阅读。本书最后给出一个计算机化学科学研究实例,总结了各个章节在该实例中的应用。

本书可作为高等院校的化学信息学、生物物理学及其他相关专业教材,也可作为相关领域研究人员的入门教材,对信息处理人员也有一定的参考作用。

图书在版编目 (CIP) 数据

计算机化学实践基础教程/胡建平主编.—北京:科学出版社,2013.3

ISBN 978-7-03-037133-1

I. ①计… II. ①胡… III. ①计算机应用—化学—教材 IV. ①O6—39

中国版本图书馆CIP数据核字 (2013) 第049152号

责任编辑:杨 岭 郑述方/责任校对:贺江艳

责任印制:邱志强/封面设计:四川盛翔

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

成都创新包装印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2013年3月第 一 版 开本:787×1092 1/16

2013年3月第一次印刷 印张:17 1/2 插页:4

字数:430千字

定价:42.00元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

《计算机化学实践基础教程》

编 委 会

主 编：

胡建平(乐山师范学院化学学院,教授)

副主编(按姓名拼音排序)：

常 珊(华南农业大学信息学院,副教授)

唐典勇(乐山师范学院化学学院,教授)

王存新(北京工业大学生命科学与生物工程学院,教授)

张元勤(乐山师范学院化学学院,教授)

委 员(按姓名拼音顺序)：

陈慰祖(北京工业大学生命科学与生物工程学院,教授)

高雪峰(吉林大学生命科学学院,副教授)

龚新奇(清华大学生命科学学院,副教授)

苟小军(成都大学生物产业学院,教授)

何红秋(重庆市科学技术研究院重庆生物医药与器械研究中心,讲师)

焦 雄(太原理工大学应用力学与生物医学工程研究所,副教授)

李春华(北京工业大学生命科学与生物工程学院,教授)

刘 明(中国医学科学院药物研究所,助理研究员)

孙国峰(乐山师范学院化学学院,副教授)

谭建军(北京工业大学生命科学与生物工程学院,副教授)

向清祥(乐山师范学院化学学院,教授)

熊俊如(乐山师范学院化学学院,教授)

张小轶(北京工业大学生命科学与生物工程学院,副教授)

前 言

一直以来,化学作为一门基础学科,其研究方式主要是以实验为主。但是,随着计算机科学的发展,化学与计算机的结合已成趋势,计算机化学学科应运而生。

计算机化学主要是通过计算机用数学的方法去研究一些化学问题。近年来,计算机化学呈现出很好的发展势头,发展速度快,知识更新迅速。但是,直到目前,计算机化学教材的内容编排尚没有找到很好的解决途径。目前,高校计算机化学课程的内容重心各异,有的重点立足于化学信息学,内容包括化学文献检索、分子模拟及化工仿真等;有的重点为计算机在化学中的应用,内容包括分子绘图、化学信息库、程序编写等;还有的侧重于与数学相关的数值计算方法等。总之,课程安排的覆盖面和重点均不统一,而且缺乏全局设计和规划。计算机化学教学必须与当前的科研现状相结合。

本书编委会抓住本科院校计算机化学教学的关键,以科学研究促进教材编写,实现科学研究和教学的相互促进。本书以软件学习和任务驱动为主线,力图用最直观的方式使初学者在最短的时间内了解计算机化学软件的基本功能。

本书主要是为本科院校化学及相关专业高年级本科生和研究生编写的,按照从事计算机化学科学研究所需理论以及技术知识顺序而编排。本书由既相互关联又相互独立的四个部分共十章内容组成。第一部分是计算机化学方面的专业知识,包括第一、第二、第四和第九章,主要是围绕化学数据库、化学分子结构绘制、分子模拟以及计算化学的 Perl 编程知识展开;第二部分是适用于自然科学(包括计算机化学)研究的常用软件,由第三、第五和第六章组成,详细介绍了承载科学计算的 Linux 操作平台、跨平台远程控制、数据分析与绘图方面的知识;第三部分是科学工作者必备的几种计算机基础内容,主要是第七章的图像处理,以及第八章的文本、流程图和演示文稿制作等,已具有较好计算机技术基础的读者可以直接跳过这一部分;第四部分是计算机化学科学研究实例,仔细分析各个章节在该科研实例中的应用。总之,本书内容丰富、语言简练、结构新颖,每个章节可单独学习,同时章节上下皆有联系;本书图文并茂,还配以完整的练习作业和参考文献,读者可以按照图例练习典型操作,具有实用性、可操作性、指导性等特点。

本书由 18 位编者共同完成。向清祥和熊俊如编写了第一章;苟小军和何红秋编写了第二章;刘明和孙国峰编写了第三章;唐典勇编写了第四章;张小轶和谭建军编写了第五章;龚新奇和李春华编写了第六章;焦雄和高雪峰编写了第八章;常珊编写了第九章;胡建平编写了第七章和第十章;王存新、陈慰祖和张元勤一起组织和完成了全书的审校工作。本书的编者都是科研第一线从事计算机化学或与计算机化学相关研究的人员,对于他们在百忙之中完成这一写作任务并促成本书的出版表示深切的感谢。在本书的编写中,编者参考了一些互联网资源及相关书籍,在此谨对为本书提供帮助的网站和作者一并表示衷心的感谢。

本书的出版得到了国家自然科学基金(11147175、11247018)、教育部科学计算研究重点项目(211159)、四川省重点科技项目(2011JYZ007)、四川省教育厅重点项目(12ZA066)、四川省中医药管理局科技专项课题(201003)、乐山市科技局重点科技计划项目(2011SZD109)、四川省“高等教育质量工程”教材建设、乐山师范学院教材建设及教学改革项目(JG11-YB20)和华南农业大学教学改革项目(INFJG1009)的大力支持,在此表示感谢。

计算机化学发展迅速,新的理论、知识、软件及网络资源不断出现,而我们的知识水平有限,而且时间紧迫,本书存在纰漏在所难免,请读者谅解。如果您有什么意见或建议,请您发邮件至 hujianping@lsc.edu.cn。

胡建平

2013年1月于乐山师范学院

目 录

前言	i
第一章 化学信息学网络资源	1
第一节 化学信息学数据库	1
第二节 电子图书阅读工具——Adobe Acrobat	9
第三节 蛋白质结构数据库	16
第四节 文献数据库——Web of Science	20
参考文献	29
第二章 分子结构绘制及显示	30
第一节 小分子结构绘制及创建——ChemDraw	30
第二节 小分子结构显示——Chem3D	36
第三节 生物大分子结构显示——VMD	44
第四节 生物大分子结构显示——Spdbv	53
参考文献	65
第三章 Linux 基础	66
第一节 Linux 简介	66
第二节 文件操作命令	68
第三节 目录操作及联机帮助命令	71
第四节 进程及其管理	74
第五节 文本编辑	78
参考文献	80
第四章 分子模拟	81
第一节 分子对接——AutoDock	81
第二节 分子动力学模拟——AMBER	92
第三节 量子化学计算——Gaussian	103
参考文献	114

第五章 数据传输	115
第一节 常规下载——FlashGet	115
第二节 数据上传——CuteFTP	122
第三节 远程连接——Xmanager	126
参考文献	133
第六章 数据分析与绘图	134
第一节 数据分析——Excel	134
第二节 数据绘图——Origin	146
第三节 统计软件——SPSS	161
参考文献	171
第七章 图像处理	172
第一节 简单绘图——画图附件	172
第二节 图像编辑——Photoshop	179
第三节 图像绘制——CorelDraw	191
参考文献	203
第八章 计算机应用基础	204
第一节 文本编辑——Word	204
第二节 文本列操作——UltraEdit	214
第三节 流程图绘制——Visio	219
第四节 演示文稿制作——PowerPoint	228
参考文献	236
第九章 Perl 语言初步	237
第一节 Perl 安装及启动	237
第二节 Perl 的基本语法	238
第三节 Perl 的使用实例	248
参考文献	259
第十章 HIV-1 整合酶与 L708, 906 抑制剂结合模式及运动性的研究	260
第一节 计算方法	261
第二节 结果与讨论	262
第三节 与《计算机化学实践基础教程》的关联	268
参考文献	269

附录

第一章 化学信息学网络资源

第一节 化学信息学数据库

随着计算机网络技术的迅速发展,利用万维网浏览和获取化学信息已成为了解化学机构、文献及分子结构最重要的方法之一。在化学工作者中普及万维网查阅各类化学信息和获取化学资源的方法是非常重要的。本章简要叙述用万维网获取化学信息和化学资源的方法,并给出部分互联网化学资源。

一、化学机构

(一) 中国化学会

中国化学会 (Chinese Chemical Society, CCS) (<http://www.ccs.ac.cn/>) 是从事化学或与化学相关专业的科技、教育工作者自愿组成并依法注册登记的学术性、公益性法人社会团体,是中国科学技术协会的组成部分,是我国发展化学科学技术的重要社会力量 (图 1-1)。中国化学会于 1932 年在南京成立。1959 年,中国化学会曾与中国化工学会筹委会合并成立中国化学化工学会,1963 年又分为化学、化工两个学会。中国化学会是国际纯粹与应用化学联合会 (IUPAC)、亚洲化学学会联合会 (FACS) 等 5 个国际组织的成员。中国化学会和国外许多化学学会及与化学有关的单位建立了良好的关系。中国化学会有会员 5 万多人,团体会员 60 余个。中国化学会的宗旨是,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,提高社会成员的科学素养,促进人才的成长,发挥化学在促进国民经济可持续发展和高新技术创新中的作用,为使我国化学科学跻身国际先进行列而不懈努力。



图 1-1 中国化学会首页

(二) 美国化学会

美国化学会 (American Chemical Society, ACS) (<http://www.acs.org>) 是一个化学领域的专业组织, 成立于 1876 年, 现有 16.3 万来自化学界各个分支的会员。美国化学会每年举行两次涵盖化学各方向的年会, 并有许多规模稍小的专业研讨会。美国化学会拥有许多期刊, 其中《美国化学会志》已有 128 年历史。

(三) 英国皇家化学会

英国皇家化学学会 (Royal Society of Chemistry, RSC) (<http://www.rsc.org>), 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。该协会成立于 1841 年, 由约 4.5 万名化学研究人员、教师、工业家组成的专业学术团体, 出版的期刊及数据库一向是化学领域的核心期刊和权威性的数据库。RSC 期刊大部分被《科学引文索引》(Science Citation Index, SCI) 收录, 并且是被引用次数最多的化学期刊。

(四) 德国化学会

德国化学会 (Gesellschaft Deutscher Chemiker, GDCh) (<http://www.gdch.de>), 是全球最大的化学学会在欧洲大陆, 成员来自学术界、工业界和其他领域。值得一提的是, 德国化学会出版的《应用化学》(*Angewandte Chemie*) 是一本涵盖化学所有方面的同行评审科学期刊, 每周出版一期。2011 年, 该刊的影响因子为 13.455, 是发表原创研究的化学期刊中影响因子最高的。

(五) 国际纯粹与应用化学联合会

国际纯粹与应用化学联合会 (International Union of Pure and Applied Chemistry, IUPAC) (<http://www.iupac.org>) 又译国际理论 (化学) 与应用化学联合会, 是一个致力于促进化学相关的非政府组织, 也是各国化学会的一个联合组织, 以公认的化学命名权威著称。其命名及符号分支委员会每年都会修改 IUPAC 命名法, 以力求提供化合物命名的准确规则。另外, IUPAC 也是国际科学理事会的会员之一。

二、化学数据库

(一) 剑桥结构数据库

剑桥结构数据库 (Cambridge Structural Database, CSD) (<http://www.ccdc.cam.ac.uk>) 是剑桥晶体结构数据中心 (Cambridge Crystallographic Date Centre, CCDC) 建立的有机物和金属有机物结构数据库 (图 1-2)。CSD 目前拥有的有机物和金属有机物晶体结构信息已经超过 23 万条。所有这些晶体结构数据都是通过 X 射线和中子衍射技术分析得到的。CSD 存储的信息有为特定检索而设立的文献材料, 以及为检索晶体结构而设的结构和试验信息。文献和数字信息包括作者信息、完整的参考文献, 以及晶胞的尺寸和空间排列方式, 还有

分子的常规化学示图和生成分子的 3D 图像等。

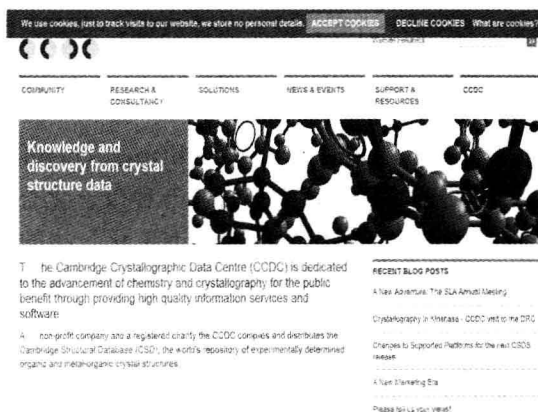


图 1-2 剑桥结构数据库首页

(二) Gmelin 数据库

Gmelin 数据库 (<http://www.cas.org/ONLINE/DBSS/gmelinss.html>) 包含涉及无机物、配合物和金属有机化合物的信息。Gmelin 数据库是无机、金属有机化学方面综合性最强,唯一能够使用电子手段查找结构和性质信息的大型数据库。它包含信息量之庞大,没有其他数据库可与之匹敌,包括了 Gmelin 手册上无机化学、金属有机化学的所有数据资料(1772~1975 年),以及 1975 年以来所有知名无机化学、金属有机化学和材料科学刊物上的数据资料。Gmelin 目前包含 140 万种化合物(配合物、合金、玻璃、陶瓷、聚合物、矿物等),以及 800 多种不同物理性质(包括光学性质、电学性质、磁性、机械性能等)和化学性质(包括材料组成和结构数据、制备和反应详细说明热力学及相变数据、溶液的溶解性和定量化学计算等)。

(三) Beilstein 数据库

自 1771 年建立以来,Beilstein 数据库 (<http://www.beilstein.com>) 一直享有盛誉。截至 2006 年,Beilstein 数据库包含了 800 多万种有机化合物的数据和结构资料,500 多万个化学反应和 3500 万条以上的相关化学性质,包括 150 万 IR 数据,230 万 NMR 数据,50 万个吸收光谱,380 万个熔点,620 万有机物制备反应;同时它还包括 1980 年至今从主要有机化学文献上摘到的 75 万多篇摘要和标题索引,Beilstein 已经成为高质量有机化学数据的代名词。

(四) SpecInfo 数据库

SpecInfo 数据库 (<http://www.chemicalconcepts.com/products.htm>) 是由德国 Chemical Concepts GmbH 所出版的。SpecInfo 是数值和结构数据库,定期更新,其内容为光谱数据信息。作为一个实用光谱数据库,它收集了 660 多万个光谱数据,是全世界最大、最完整的光谱数据库。Specinfo 数据库功能包括:绘制结构图,搜索精确结构和次级

结构,用化学命名、分子式或质量搜索,用 ^{13}C 、 ^{19}F 、 ^{31}P 和 $^1\text{H}^2$ NMR 核磁共振数据预测 NMR 变化,显示物理数据、CAS 注册号,读取试验数据,搜索类似光谱等。

(五) 化合物基本性质数据库

化合物基本性质数据库 (CS ChemFinder) (<http://chemfinder.camsoft.com>) 是 Cambridge Soft 公司推出的网络服务平台,它包含 5 万种以上化合物的数据库,可以通过化合物的分子式、英文名、CA 登记号和化学结构查询该化合物的基本性质,包括分子结构、相对分子质量、熔点、沸点、密度、溶解度等,它还可以提供该化合物的生产厂家、包装说明、购买方式等。

(六) 元素周期表数据库

元素周期表数据库 (<http://www.shef.ac.uk/chemistry/web2elements>) 是英国 Sheffield 大学化学系 Mark Winter 博士制作的,点击元素周期表上的任何一个元素,就可以得到该元素的相关资料,包括背景、原子参数(电子构型、离解焓、电负性、有效核电荷、原子半径)等。

(七) 物理化学数据库

物理化学数据库 (<http://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html>) 是一部网上物理化学数据手册,化学工作者可以利用它来查阅一些常用物理化学数据。另外,该数据库还提供国际单位制的有关知识及单位换算的内容。

三、期刊

万维网上的网络电子杂志一般局限于较小的学科领域范围,内容和普通杂志基本相同,主要发表学术论文。

(一) 《美国化学会期刊集》

《美国化学会期刊集》(<http://pubs.acs.org/about.html>) 提供了美国化学会出版和发行的期刊的最新信息,可查到最新一期杂志的目录内容,作者索引等有用资料;也可以在线阅读一些期刊,同时也可通过 E-mail 与期刊主编取得联系。其共有 31 种杂志,如 *Chemical Review*, *JACS* (*Journal of American Chemical Society*) 等。

(二) 《化学评论》

《化学评论》(*Chemical Review*) (<http://pubs.acs.org/journals/chreay/index.html>) 是化学类影响因子最高的期刊,很多著名的科学家发表了关于纳米化学、纳米材料、纳米材料的制备、纳米材料的应用、纳米材料研究、纳米材料性质等相关的综述类文章。《化学评论》为 I 区刊物,2005 年的影响因子为 20.869,在化学领域中排名第 1。美国化学会

所有期刊已从第一卷第一期开始全部上网。

(三)《中国科学 B 辑:化学》

《中国科学》(中文版)和 *Science in China* (英文版)是中国科学院主管、中国科学院和国家自然科学基金委员会共同主办的自然科学综合性学术刊物,主要刊载自然科学各领域基础研究和应用研究方面具有创新性的、高水平的、有重要意义的研究成果,由中国科学杂志社出版。《中国科学》中文版创刊于 1950 年 8 月,刊期为季刊,次年 12 月停刊。1952 年 10 月《中国科学》英文版创刊,刊期为季刊,至 1966 年 9 月停刊。1973 年 1 月,《中国科学》复刊,以中、英文两个版本出版,为季刊;1974 年改为双月刊;1979 年 1 月改为月刊。1982 年《中国科学》中、英文版同时分成 A、B 两辑出版,A 辑为数学、物理学、天文学、技术科学;B 辑为化学、生物学、农学、医学、地球科学,均为月刊。1996 年《中国科学》中、英文版同时分为 A、B、C、D、E 这 5 辑出版,A 辑为数学、物理学、天文学;B 辑为化学;C 辑为生命科学,含生物、农学、医学;D 辑为地球科学;E 辑为技术科学。上述 5 辑除 A 辑为月刊外,其余均为双月刊。根据学科发展的需要,在 2001 年创办了《中国科学 F 辑:信息科学》英文版,为双月刊;同年,《中国科学: D 辑》中、英文版均由双月刊改为月刊出版。在 2003 年将《中国科学》的 A 辑分为 A 和 G 两辑,A 辑为数学,G 辑为物理学、力学、天文学,均为双月刊。2005 年 A 辑中、英文版均由双月刊改为月刊出版。

《中国科学 B 辑:化学》(中文版)(<http://zh.scichina.com>)和 *Science in China Series B: Chemistry* (英文版)主要报道化学基础研究及应用研究方面具重要意义的创新性研究成果(图 1-3)。涉及的学科主要包括理论化学、物理化学、无机化学、有机化学、高分子化学、生物化学、环境化学、化学工程等。中、英文版是两个相对独立的刊物。



图 1-3 中国科学 B 辑:化学期刊首页

(四)《中国化学》

《中国化学》(*Chinese Journal of Chemistry*)(http://sioc-journal.cn/zghx/cn/gywm_zzjs.asp)系中国科协主管、中国化学会、中国科学院上海有机化学研究所主办,向国内外公开发行的英文版、学术类、单月刊化学刊物。本刊创刊于 1983 年,自 1989 年起,

其内容不再与《化学学报》中文版重复,并改为双月刊。1990年起开始改用现刊名 *Chinese Journal of Chemistry*。1999年进入SCI,刊载物理化学、无机化学、有机化学和分析化学等各学科领域基础研究和应用基础研究的原始性研究成果。特色栏目 Account 由学科带头人撰写,对作者自己某一领域的研究进行总结和展望。2001年起改为单月刊。2000年获得首届国家期刊奖;2001年荣获中国科学院特等奖;2001年入围中国科技期刊双高期刊。该刊被定为中国化学会及中国科协的核心期刊,是中国化学会最重要的英文期刊之一。

(五)《化学学报》

《化学学报》(http://sioc-journal.cn/hxxb/cn/gywm_zzjs.asp)创刊于1933年,原名《中国化学会会志》(*Journal of the Chinese Chemical Society*),是我国创刊最早的化学学术期刊,1952年更名为《化学学报》,并从外文版改成中文版。《化学学报》刊载化学各学科领域基础研究和应用基础研究的原始性、首创性成果,涉及物理化学、无机化学、有机化学、分析化学和高分子化学等。目前设以下4个栏目:①研究专题:报道学科带头人或著名化学家的系列研究成果,系统介绍其本人及其课题组开展的工作和取得的学术成就,并对所研究领域的未来做出展望;②研究通讯,迅速报道学术价值显著的重要研究工作的最新成果;③研究论文,报道学术价值显著、实验数据完整、具有原始性和创新性的研究成果;④研究简报,报道具有原始性和创新性的阶段性成果。《化学学报》在国内外读者中享有较高的声誉,1998年在国内化学类期刊中率先被美国SCI收录,并长期被国内外多种著名检索刊物和文献数据库摘引和收录,包括美国《化学文摘》(CA)、日本《科技文献速报》(JICST)、俄罗斯《文摘杂志》(AJ)等。2000年荣获首届国家期刊奖,2001年获得中国科学院期刊特别奖并入选国家新闻出版总署中国期刊方阵——双高期刊。2004年在国内化学学术期刊中率先改为半月刊。

(六)《高等学校化学学报》

《高等学校化学学报》(<http://59.72.0.32/hxxb/CN/volumn/current.shtml>)是中华人民共和国教育部主管并委托吉林大学和南开大学主办的、我国化学及其相关学科领域的综合性学术刊物,其前身为《高等学校自然科学学报》(化学化工版),1964年创刊,1966年停刊,1980年复刊并更名为《高等学校化学学报》,为季刊,1983年改为双月刊,1985年改为月刊至今,国内刊号CN22-1131/O6,国际刊号ISSN 0251-0790,16(A4)开本,208页,是中国载文量最大的科技期刊之一。《高等学校化学学报》聘请了81位学术造诣精深的国内外知名化学家组成学术阵容强大的编委会,由国际著名的理论化学家唐敖庆教授任名誉主编、著名的高分子化学家周其凤院士任主编。

《高等学校化学学报》于1994年被《中国科学文献数据库》、《中国化学化工文摘数据库》、《中国化学化工文摘》、《中国学术期刊文摘》,美国SCI、CA、EI Page One,俄罗斯AJ,以及日本JICST等20多个国内外权威数据库和著名文摘刊物收录。

(七)《高等学校化学研究》

《高等学校化学研究》(<http://59.72.0.32/hxyj/EN/volumn/current.shtml>)是中华人民共和国教育部委托吉林大学、南开大学主办的化学学科综合性学术刊物,以研究论文、研究快报、研究简报和综合评述等栏目集中报道,我国高校和中科院研究所在化学学科及其交叉学科、新兴学科、边缘学科等领域所开展的基础研究,应用研究和重大开发研究所取得的最新成果。

(八)《物理化学学报》

《物理化学学报》(<http://www.whxb.pku.edu.cn/CN/volumn/current.shtml>)已被美国 SCI 收录,每篇文章均被 SCI 网络版 (ISI Web of Science) 收录。《物理化学学报》还被中国科技部万方数据网络中心主办的《中国科技论文与引文数据库 (CSTPCD)》、《中国学术期刊文摘》、中国科学院文献情报中心主办的《中国科学引文数据库》、《中国学术期刊综合评价数据库》、《中国化学化工文摘》、《中国生物学文摘》,美国 CA、俄罗斯 AJ、日本 JICST 等收录。从 2000 年起,国家科技部的 SCI 收录论文统计检索刊源改用 SCIE,《物理化学学报》所载文章均属被统计之列。

四、万维网上的图书馆

万维网上的图书馆是获取图书、杂志资料的重要途径之一。它分为两部分,一是图书馆的主页,上面有相关图书、杂志的检索和查询工具。例如,剑桥大学化学图书馆 (<http://www.ch.cam.ac.uk/ChemJournals.html>),这是一个著名网站,它可链接到众多化学杂志和化学资料,读者可以在网上获得完整的原始文献,同时它提供的友情链接也可以让你进一步浏览其他著名化学站点,如美国化学会、美国化学文摘等。二是网上虚拟图书馆,即人们将互联网上的信息资源进行组织分类,建立某一学科各种资源的链接,方便用户查询。此类万维网服务器被称为虚拟图书馆 (virtual library)。虚拟图书馆中的信息非常丰富,如科技资料、专利文献、会议信息、市场信息等。下面提供三个化学虚拟图书馆网址:

(1) <http://www.vlib.org>。它提供了有关化学的各类虚拟图书馆链接,内容应有尽有,非常全面,可谓各类虚拟化学图书馆之入口。

(2) <http://www.iv.ac.uk/Chemistry/Links/links.html>。该网站位于美国加州大学洛杉矶分校的化学和生化系。它提供了与化学有关的 Gopher 服务器、FTP 服务器和新闻讨论组以及各类化学资源分支的链接。

(3) <http://www.chemport.org>。该主页的内容主要由三部分组成,即出版商信息、杂志信息和与 STN 系统的链接。每一项中所包含的信息量都非常大,如在杂志信息中包括了与各出版社、化学组织的数百种杂志的链接。

五、专利信息

专利信息是化学信息中非常重要的一类。随着互联网的发展,可通过万维网检索的专利数据库及有关的各种信息越来越多。专利服务一般是收费服务,但也有一些服务项目是免费的。通过万维网的专利信息服务,可以方便地检索和索取专利信息。以下为7个专利服务网站的URL。

- (1) 英国 Derwent 专利服务: <http://www.derwent.com>。
- (2) 美国专利和商标局 (US Patent and Trademark Office): <http://www.uspto.gov>。
- (3) 美国专利 QPTA2US: <http://www.qpat.com>。
- (4) 欧洲专利局 (The European Patent Office): <http://ep.espacenet.com>。
- (5) 中国专利信息网 (China Patent Searching Information): <http://www.patent.com.cn>。
- (6) 中国国家知识产权局专利检索: <http://www.sipo.gov.cn/sipo/zljs/default.htm>。
- (7) 日本专利局 (Japan Patent Office): <http://www.jpo.go.jp>。

六、化学会议信息

(一) 化学会议信息

从化学会议信息网站 (<http://www.chemsoc.org/events/conhome.htm>) 可以浏览到近期将要举行的各类化学学术会议信息,还可以查阅各类化学会议记录的数据库资料。

(二) 中国学术会议在线

中国学术会议在线 (<http://www.meeting.edu.cn/>) 是经教育部批准,由教育部科技发展中心主办,面向广大科技人员的科学研究与学术交流信息服务平台(图1-4)。中国学术会议在线本着优化科研创新环境、优化创新人才培养环境的宗旨,针对当前我国学术会议资源分散、信息封闭、交流面窄的现状,通过实现学术会议资源的网络共享,为高校广大师生创造良好的学术交流环境,以利于开阔视野,拓宽学术交流渠道,促进跨学科融合,为国家培养创新型、高层次专业学术人才,创建世界一流大学做出积极贡献。中国学术会议在线利用现代信息技术手段,将分阶段实施学术会议网上预报及在线服务、学术会议交互式直播/多路广播和会议资料点播三大功能。为用户提供学术会议信息预报、会议分类搜索、会议在线报名、会议论文征集、会议资料发布、会议视频点播、会议同步直播等服务。中国学术会议在线还组织高校定期开办名家大师学术系列讲座,并利用网络及视频等条件,组织高校师生与知名学者进行在线交流。



图 1-4 中国学术会议在线主页

七、小结

万维网上的化学信息资源极其丰富，而且随时都在更新和发展，我们对它的介绍只能算是冰山一角。为此，我们特别选择了万维网上制作较精良、内容较全面、知名度较高的网站加以推介，希望能够帮助广大化学工作者抓住机遇，与时俱进，充分利用网上资源，快速、高效地获取专业文献信息，掌握全球科技发展最新动态提供一条捷径。

练习作业

- (1) 简要描述网上有哪些化学信息资源。
- (2) 尝试在化学学报上注册一个账号，并尝试学术论文投稿。
- (3) 网上下载一个有关 HIV 整合酶的格式为 PDF 的最新学术文献。

第二节 电子图书阅读工具——Adobe Acrobat

在当今的计算机世界里，两种文档方式，即 Microsoft Word 的 DOC 格式和 Adobe Acrobat 的 PDF 格式文件使用率最高。而中国知网、万方数据和维普资讯三大网络资源系统均以 PDF 文件为主流格式存储信息。PDF 文件格式是 Adobe 公司开发的电子文件格式，这种文件格式与操作系统平台无关，在不同地区的人们都能够看到 PDF 文件，而且不出现乱码，这一特点使它成为在互联网上进行电子文档发行和数字化信息传播的理想文档格式。随着教育技术的发展，越来越多的教师把互联网资源引入到教学中，无穷尽的网上资源给教学带来了极大的便利。

一、PDF 文件格式的优势

为了拥有许多其他电子文档格式无法相比的优点，Adobe 公司将 PDF 文件格式的文