

高等教育“十三五”规划教材

计算机在

Jisuanji Zai
Cailiao Kexue Zhong De Yingyong

材料科学中的应用

第二版

主编 展晓元 张如良

主审 崔洪芝

中国矿业大学出版社

China University of Mining and Technology Press

计划教材

计算机在材料科学中的应用

(第二版)

主 编 展晓元 张如良
主 审 崔洪芝



中国矿业大学出版社

内 容 简 介

本书根据目前材料科学与工程学科的发展特点,以及开展科学研究的需求,系统介绍了计算机软件在材料科学中的应用情况。全书共分5章,其中第1章主要介绍科技文献检索及科技论文写作;第2章主要介绍正交实验设计与实验结果分析;第3章主要介绍 Origin Pro 8.0 科技作图;第4章主要介绍 X 射线衍射分析方法;第5章主要介绍化学结构的可视化。

本书作为材料科学与工程专业本科生及研究生的专业基础课程教材,也可供从事材料科学研究的科研人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

计算机在材料科学中的应用/展晓元,张如良主编.—2版.—徐州:
中国矿业大学出版社,2018.10
ISBN 978-7-5646-4172-6

I. ①计… II. ①展… ②张… III. ①计算机应用—材料科学
IV. ①TB3—39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 230638 号

书 名 计算机在材料科学中的应用
主 编 展晓元 张如良
责任编辑 杨 洋
出版发行 中国矿业大学出版社有限责任公司
(江苏省徐州市解放南路 邮编 221008)
营销热线 (0516)83885307 83884995
出版服务 (0516)83885767 83884920
网 址 <http://www.cumtp.com> E-mail: cumtpvip@cumtp.com
印 刷 江苏淮阴新华印刷厂
开 本 787×1092 1/16 印张 18.25 字数 456 千字
版次印次 2018年10月第2版 2018年10月第1次印刷
定 价 32.00 元

(图书出现印装质量问题,本社负责调换)

前 言

在材料科学的研究工作中,从查找文献、设计实验、实验结果分析,到数据处理、形成科学报告或论文,都与计算机密不可分。本书立足于材料科学与工程一级学科,按照材料科学研究工作开展的一般规律和材料类本科生、研究生对计算机教学内容的基本要求,对计算机在材料科学中应用领域的知识点进行有侧重的介绍,在必要的理论描述与分析的基础上,突出了材料科学研究工作中最常用的软件及应用情况。

本书主要特色:

(1) 内容系统,重点突出。按照材料科学研究的一般规律,把每一个环节所需要的计算机软件和应用知识全面、系统地介绍给读者,同时对材料科学中的常用计算机软件进行重点介绍。

(2) 结构严谨,知识新颖。内容循序渐进,由浅入深,各章节之间相互独立又紧密联系;相关知识紧密结合国内外计算机软件的新版本,既不盲目追求最新,又能突出材料科学领域所需要的计算机软件应用的新方法、新技术。

(3) 理论描述和实际应用相结合。理论知识介绍简明易懂,并在一定的理论描述基础上,介绍计算机在材料科学研究过程的应用实例,激发学生的学习兴趣。

(4) 求同存异,适应面广。既考虑了材料科学与工程学科各个研究方向的共性,又兼顾了材料科学研究领域的广泛性和各学科之间的相互渗透给计算机在材料科学中的应用所带来的复杂性和特殊性。

本书由山东科技大学展晓元和张如良主编。其中,第2章、第4章由山东科技大学展晓元、丁建旭编写;第1章、第5章由山东科技大学张如良、刘蕾、孙海清编写;第3章由山东科技大学韩野、济宁学院卢志华编写;山东大学王艳东参与了第1章第2、3节的编写;全书由山东科技大学崔洪芝主审。

本书主要结合编者在材料科学研究过程中的教学、科研实践和对计算机软件的理解,并参考文献资料编写而成。书中大部分内容已经过多年的教学使用,书的最后列出了主要参考文献,由于条件限制,可能未将所有参考文献一一

列出,在此对所有参考文献的作者表示衷心的感谢!在本书编写过程中,得到了山东科技大学的大力支持,研究生王杰参加了部分资料的整理和绘图工作,在此一并表示感谢!

由于计算机在材料科学研究领域的应用非常广泛,且计算机技术的发展日新月异,软件版本更新速度很快,计算机在材料科学应用中的新方法、新应用不断出现,加之编者学识所限,书中难免有不当之处,敬请读者批评指正。

编者

2015年11月

目 录

第 1 章 文献检索及科技论文写作	1
1.1 文献检索基础知识	1
1.2 国外三大检索系统	7
1.3 国外主要数据库	22
1.4 中文全文数据库	34
1.5 其他常用的数据库资源	46
1.6 科技文献的管理与传递	55
1.7 科技论文写作	61
第 2 章 正交实验设计与实验结果分析	71
2.1 实验设计的基本方法	71
2.2 正交表及表头设计	73
2.3 正交实验结果分析方法	79
2.4 正交设计助手	87
第 3 章 OriginPro 8.0 科技作图	92
3.1 OriginPro 8.0 基础	92
3.2 电子表格与数据管理	101
3.3 图形绘制	109
3.4 多层图形	126
3.5 图形的输出和利用	150
3.6 数据分析	153
3.7 数学运算	160
第 4 章 X 射线衍射分析方法	169
4.1 PDF 粉末衍射卡片组	169
4.2 PCPDFWIN 在 PDF 卡片检索中的应用	171

4.3 MDI Jade 6 在材料物相分析中的应用	181
第 5 章 化学结构的可视化	220
5.1 化学结构的表示	220
5.2 ISIS/Draw2.5 的使用	223
5.3 Chemwindow 的使用	233
5.4 ChemOffice 的使用	242
附录	262
I. 正交表	262
II. F 分布表($P\{F(n_1, n_2) > F_\alpha(n_1, n_2)\} = \alpha$)	272
III. OriginPro 8.0 常用函数	282
参考文献	284

第1章 文献检索及科技论文写作

每一门学科都包含着大量的概念,这些概念构成了学科知识的基本单元。它们是人们用来理解和认识该学科的工具,是进一步展开深入研究的基础。随着信息时代的到来,信息、知识及文献等成为高频率使用的词汇,弄清这些概念,不仅有利于我们更好地理解文献检索的含义,更有助于我们建立一个完整的概念体系。

信息是一个意义极为广泛的概念,不同的学科从不同的角度对这个概念有着不同的理解,普遍认可的定义为:信息是指应用文字、数据或信号等形式通过一定的传递和处理,来表现各种相互关系的客观事物在运动中所具有的特征性内容的总称。信息并非物质本身,而是物质发出的、体现它存在和运动状态的信号。人类认识世界的过程,就是不断从外界取得信息和加工信息的过程。

知识是信息的一部分。它是人脑意识的产物,是人类通过信息对自然界、生物界和人类社会存在形式和运动规律的多次反复思考形成的认识,它是被人们理解和认识并经过大脑重新组合而形成的系列化的信息。这个信息已经不是原来意义上的信息,而是经过人脑思维加工后的产物。

文献是指记录知识的一切载体。凡是人类用文字、图形、符号、声频及视频等作为记录手段,将知识记录在任何物质之上,使之具有存储和传播知识功能的一切载体都统称为文献。文献有三个基本要素:一是含有知识信息;二是要有记录知识的物质载体;三是记录知识信息的符号和技术。这三个要素缺一不可,一摞白纸,再厚也不是文献;口述的知识,不经记录,再多也不是文献;存在于人脑的知识也不能称之为文献。

文献在科学和社会发展中起着至关重要的作用,它是科学研究和技术研究结果的最终表现形式,是在空间、时间上传播情报的最佳手段,是确认研究人员对某一发现或发明优先权的基本手段,是衡量研究人员创造性劳动效率的重要指标,是研究人员自我表现和确认自己在科学中地位的手段,是促进研究人员进行研究活动的重要激励因素,是人类知识宝库的组成部分,是人类共同财富。

1.1 文献检索基础知识

1.1.1 文献的分类

(1) 按文献载体分类

文献根据载体的不同分为印刷型、缩微型、机读型和声像型。

① 印刷型——文献的最基本方式,包括铅印、油印、胶印、石印等各种资料。优点是可直接、方便地阅读。

② 缩微型——以感光材料为载体的文献,又可分为缩微胶卷和缩微平片,优点是体积

小,便于保存、转移和传递,但阅读时须用阅读器。

③ 计算机阅读型——主要通过编码和程序设计,把文献变成符号和机器语言,输入计算机,存储在磁盘上,阅读时再由计算机输出。它能存储大量文献,可按任何形式组织这些文献,并能以极快的速度从中取出所需的文献。

④ 声像型——又称直感型或视听型,是以声音和图像形式记录在载体上的文献,如唱片、录音带、录像带、科技电影、幻灯片等。

(2) 按出版形式及内容分类

根据不同出版形式及内容可以分为图书、连续性出版物、特种文献。

① 图书——凡篇幅达到 48 页以上并构成一个书目单元的文献称为图书。

② 连续性出版物——包含期刊、报纸、年度出版物。

③ 特种文献——专利文献、标准文献、学位论文、科技报告、会议文献、政府出版物、档案资料、产品资料等。

(3) 按内容性质和加工情况分类

根据文献内容、性质和加工情况可将文献区分为零次文献、一次文献、二次文献、三次文献。

① 零次文献——未经加工出版的手稿、数据、原始记录等文件。

② 一次文献——以作者本人的研究成果为依据而创作的文献,如期刊论文、研究报告、专利说明书、会议论文等。

③ 二次文献——对一次文献进行加工整理后产生的一类文献,如书目、题录、简介、文摘等检索工具。

④ 三次文献——在一、二次文献的基础上,经过综合分析而编写出来的文献,人们常将这类文献称为“文献研究”的成果,如综述、专题评述、学科年度总结、进展报告、数据手册等。

1.1.2 文献的检索语言

文献的检索语言是指用于各种检索工具的编制和使用,并为检索系统提供一种统一的、作为基准的、用于信息交流的符号化或语词化的专用语言。检索语言因其使用的场合不同,具有不同的名称,例如在存储文献的过程中用来标引文献,称为标引语言;用于索引文献则称为索引语言;用于检索文献过程中的则称为检索语言。检索语言按原理可分为 4 大类:

① 分类语言——将表达文献信息内容和检索课题的大量概念,按其所属的学科性质进行分类和排列,成为基本反映通常科学知识分类体系的逻辑系统,并用号码(分类号)来表示概念及其在系统中的位置,甚至还表示概念与概念之间关系的检索语言。国内一般采用的是中图分类号。

② 主题语言——经过控制的,表达文献信息内容的语词。主题词需规范,主题词表是主题词语言的体现,主题词表中的词可作为文献内容的标识和查找文献的依据。

③ 关键词语言——从文献内容中抽出来的关键的词,这些词作为文献内容的标识和查找目录索引的依据。国内对于关键词尚未制定相应的规范,国外期刊已经在投稿要求或者作者须知里面进行了明确规范。

④ 其他语言——或称为自然语言,指文献中出现的任意词。

1.1.3 文献的检索途径

(1) 著者途径

许多检索系统备有著者索引、机构(机构著者或著者所在机构)索引,专利文献检索系统有专利权人索引,利用这些索引从著者、编者、译者、专利权人的姓名或机关团体名称字顺进行检索的途径统称为著者途径。

(2) 题名途径

一些检索系统中提供按题名字顺检索的途径,如书名目录和刊名目录。

(3) 分类途径

按学科分类体系来检索文献。这一途径是以知识体系为中心分类排检的,因此,比较能体现学科系统性,反映学科与事物的隶属、派生与平行的关系,便于我们从学科所属范围来查找文献资料,并且可以起到“触类旁通”的作用。从分类途经检索文献资料,主要是利用分类目录和分类索引。

(4) 主题途径

通过反映文献资料内容的主题词来检索文献。由于主题词能集中反映一个主题的各方面文献资料,因而便于读者对某一问题、某一事物和对象作全面系统的专题性研究。通过主题目录或索引,即可查到同一主题的各方面文献资料。

(5) 引文途径

文献所附参考文献或引用文献,是文献的外表特征之一。利用这种引文而编制的索引系统,称为引文索引系统,它提供从被引论文去检索引用论文的一种途径,称为引文途径。

(6) 序号途径

有些文献有特定的序号,如专利号、报告号、合同号、标准号、国际标准书号和刊号等。文献序号对于识别一定的文献,具有明确、简短、唯一性的特点,依此编成的各种序号索引可以提供按序号自身顺序检索文献信息的途径。

(7) 代码途径

利用事物某种代码编成的索引,如分子式索引、环系索引等,按特定代码顺序进行检索。

(8) 专门项目途径

按文献信息所包含的或有关的名词术语、地名、人名、机构名、商品名、生物属名、年代等的特定顺序进行检索,可以解决某些特别的问题。

1.1.4 文献的检索方法

目前常用的检索方法包含普查法、追溯法、分段法(或循环法)、跟踪法。

(1) 普查法

普查法包含顺查法、倒查法和抽查法。

① 顺查法——以课题的起始年代为起点,按照时间的顺序由远到近地查找文献。例如,已知某课题的起始年代,现在需要了解其发展的全过程,就可以用顺查法从最初的年代开始,逐渐向近期查找。能够比较系统、全面地反映某一项课题研究的发展过程,不易漏检,但是其工作量大、效率低。

② 倒查法——一种由近及远,从新到旧逆时间顺序查找文献的方法。此方法一般用于近期的研究课题,可以最快地获得最新资料。但是容易漏检,可以通过查综述的方法进行完善。

③ 抽查法——针对学科或课题发展的特点,选择有关该课题的文献信息最可能出现或最多出现的时间段(发展较快、研究热门、发表论文较多),利用检索工具进行检索的方法。可以在较少的检索时间内就能获得较多的文献。

(2) 追溯法

追溯法是指依据文献间的引用关系,获得检索结果,包含引用追溯法和被引用追溯法。

① 引用追溯法——利用文献后面所列的参考文献,逐一追查原文(被引用文献),然后再从这些原文后所列的参考文献目录逐一扩大文献信息范围,一环扣一环地追查下去的方法。这种方法较切主题,但较片面性、漏检率高、文献较陈旧。

② 被引用追溯法——通过追踪该文章被引用的情况,来获取该领域的研究现状和发展趋势。这种方法较切主题,知识较新,但同时也存在着片面性、漏检率高的缺点。

(3) 分段法

分段法指交替使用普查法和追溯法的一种方法,能够取长补短,相互配合,获得更好的检索结果,又称为综合法、循环法或交替法。

(4) 跟踪法

经过一定检索实践后,用户可获得相当有用的检索结果,可收集到该研究领域上发表论文数量多且质量高的作者姓名,再使用作者姓名继续检索该专家的所有文献,从中挑选需要的部分,并定期跟踪该专家的最新研究成果。

1.1.5 文献的检索技术

(1) 逻辑检索

利用布尔逻辑算符进行检索词或代码的逻辑组合,是现代信息检索系统中最常用的一种技术。常用的布尔逻辑算符有三种,逻辑或“OR”、逻辑与“AND”、逻辑非“NOT”。

① 逻辑与“AND”,检索结果中必然出来所有的检索词。例如,查找纤维和碳纳米管的信息,检索结果中必须同时包含检索词纤维和碳纳米管(图 1-1)。

② 逻辑或“OR”,检索结果中必须出现任一检索词,当检索词有多重同义词或者拼法时,运用逻辑或“OR”检索。例如查找纤维和碳纳米管的信息,检索结果中可以包含检索词纤维,也可以包含碳纳米管(图 1-2)。

③ 逻辑非“NOT”,检索结果中不应该出现包含某一检索词。例如,运用检索符号逻辑非“NOT”查找纤维和碳纳米管的信息,检索结果中只可以包含检索词纤维,不可以包含碳纳米管(图 1-3)。

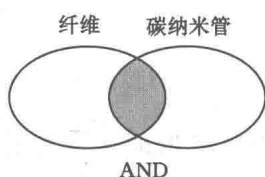


图 1-1 逻辑与

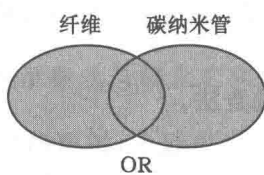


图 1-2 逻辑或

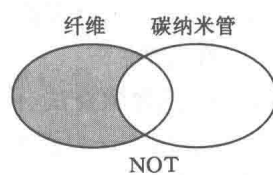


图 1-3 逻辑非

(2) 截词检索

截词检索是计算机检索系统中应用非常普遍的一种技术。由于西文的构词特性,在检索中经常会遇到名词的单复数形式不一致;同一个意思的词,英美拼法不一致;词干加上不同性质的前缀和后缀就可以派生出许多意义相近的词等,这时就要用到截词检索。截词有多种用途:

- ① 词尾截断可得到该单词所提及的所有词语(单数和复数)。
- ② 词间切断或通配符:可找到该单词的所有变化形式或不同拼法。
- ③ 一个字符, * =0 个、1 个或多个字符,例如表 1-1。

表 1-1 截词检索示例

词间截断(通配符)		右端截断	
Lap * roscop *	Laparoscopic	Diseas *	Disease
	Laprosopic		Diseases
	Laparoscopy		Diseased

(3) 限定检索

字段限定检索是指限定检索词在数据库记录中的一个或几个字段范围内查找的一种检索方法。在检索系统中,数据库设置的可供检索的字段通常有两种:表达文献主题内容特征的基本字段和表达文献外部特征的辅助字段。常用的限定字段见表 1-2。

表 1-2 常用的限定字段

基本检索字段	辅助检索字段
题名(TI)	作者(AU)
文摘(AB)	出版年代(PY)
主题词(DE)	期刊名称(JN)
标识词(ID)等	文献类型(DT)等

(4) 位置检索

位置检索也叫全文检索、邻近检索。全文检索就是指利用记录中的自然语言进行检索,词与词之间的逻辑关系用位置算符组配,对检索词之间的相对位置进行限制的技术方法。按照两个检索词出现的顺序和距离,可以有多种位置算符。而且对同一位置算符,检索系统不同,规定的位置算符也不同。

相比而言,布尔逻辑运算符有时难以表达某些检索课题确切的提问要求;字段限制检索虽能使检索结果在一定程度上进一步满足提问要求,但无法对检索词之间的相对位置进行限制;位置检索可以不依赖主题词表而直接使用自由词进行检索:

以美国 DIALOG 检索系统使用的位置算符为例,介绍如下。

①“(W)”算符——“W”含义为“with”,这个算符表示其两侧的检索词必须紧密相连,除空格和标点符号外,不得插入其他词或字母,两词的词序不可以颠倒。“(W)”算符还可以使用其简略形式“()”。例如,检索式为“fiber (W) resin”时,系统只检索含有“fiber resin”词组的记录。

②“(nw)”算符——“(nw)”中的“w”的含义为“nWord”,表示此算符两侧的检索词必须按此前后邻接的顺序排列,顺序不可颠倒,而且检索词之间不允许有其他的词或字母,但允许有空格或连字符号。例如:laster (1W) print 检索出包含“laser printer”、“laser and printer”的记录。

③“(N)”算符——“(N)”中的“N”的含义为“near”，这个算符表示其两侧的检索词必须紧密相连，除空格和标点符号外不得插入其他词或字母，两词的词序可以颠倒。

④“(nN)”算符——“(nN)”表示允许两词间插入最多为 n 个其他词，包括实词和系统禁用词。

⑤“(F)”算符——“(F)”中的“F”的含义为“field”。这个算符表示其两侧的检索词必须在同一字段(例如同在题目字段或文摘字段)中出现，词序不限，中间可插任意检索词项。

⑥“(S)”算符——“(S)”中的“S”算符是“Sub-field/sentence”的缩写，表示在此运算符两侧的检索词只要出现在记录的同一个子字段内(例如，在文摘中的一个句子就是一个子字段)，此信息即被命中。要求被连接的检索词必须同时出现在记录的同一句子(同一子字段)中，不限制它们在此子字段中的相对次序，中间插入词的数量也不限。例如“fiber(W)composite(S)resin”表示只要在同一句子中检索出含有“fiber composite 和 resin”形式的均为命中记录。

(5) 加权检索

加权检索是某些检索系统中提供的一种定量检索技术。加权检索同布尔检索、截词检索等一样，也是文献检索的一个基本检索手段，但与它们不同的是，加权检索的侧重点不在于判定检索词或字符串是不是在数据库中存在、与别的检索词或字符串是什么关系，而是在于判定检索词或字符串在满足检索逻辑后对文献命中与否的影响程度。

(6) 聚类检索

聚类是把没有分类的事物，在不知道应分几类的情况下，根据事物彼此不同的内在属性，将属性相似的信息划分到同一类下面。

1.1.6 文献的检索手段、步骤和效果评价

(1) 检索手段

目前，文献检索采用的手段主要包含：

① 手工检索——利用印刷型检索书刊检索信息的过程。这种方法回溯性好，没有时间限制，不收费，但费时，效率低。

② 光盘检索——利用光盘存储媒介，进行检索信息的过程。这种方法运行速度快、成本低、检索效果好、下载方便、安全性能高；但使用范围有限、更新周期长、需要不断换盘等。

③ 网络信息检索——即网络信息搜索，是指互联网用户在网络终端通过特定的网络搜索工具或是通过浏览的方式，查找并获取信息的行为。

④ 联机检索——借助通讯线路，通过终端设备同检索系统联机所进行文献与数据检索。

这种计算机系统一般设有较多的数据库，而一个数据库可以包括几十万、几百万条文献的书目、款目或科技数据。每检索一个课题只需数十秒钟，检索到的题录、文摘或数据还可立即在终端上显示和打印出来。联机检索的实现，对于图书馆传统的收集、查找与提供资料的方式来说，是一次革命。世界上已投入运行的联机情报系统很多，国际上较大的检索系统有 100 多个，数据库有 3 000 多个。

(2) 文献的检索步骤

文献的检索是一项实践性很强的活动，需要经常性的实践，逐步掌握信息检索的规律，从而迅速、准确地获得所需文献。一般来说，文献检索可分为以下步骤：① 明确查找目的与

要求;② 选择检索工具;③ 确定检索途径和方法;④ 根据文献线索,查阅原始文献。

(3) 文献的检索效果评价

目前,对于检索效果的评价主要通过查全率和查准率来评价。

- ① 查全率——检索出的相关信息量与该系统信息库中存储的相关信息量的比率。
- ② 查准率——检出的相关信息量与检出信息总量的比率。

1.2 国外三大检索系统

SCI(科学引文索引, Science Citation Index)、Ei(工程索引, The Engineering Index)、ISTP(科学技术会议录索引, Index to Scientific & Technical Proceedings), ISR(科技评论索引, Index to Scientific Reviews)是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科学评价的主要检索工具,其中以 SCI 最为重要,国内科研人员和信息工作者常利用的是前三种。

近年来,我国被三大索引收录的论文数量逐年增长,三大索引因其收录文献广泛、学术参考价值高、检索途径多、查找方便和创刊历史悠久而备受科研人员及科研管理部门的青睐,科研管理部门及高等院校逐渐将科员的学术成果是否被三大索引检索作为评价部门或个人科研成果和学术水平的重要依据。

1.2.1 科学引文索引

SCI是由美国科学信息研究所(Institute for Scientific Information)1961年创办出版的引文数据库,运用科学的引文数据分析和同行评估相结合的方法,综合评估期刊的学术价值,覆盖了数理化、生命科学、环境、材料、农、林、医、天文、地理等自然科学各学科的核心期刊。SCI现在发行的互联网上 Web 版数据库平台为 Web of Science(图 1-4),由汤森路透公

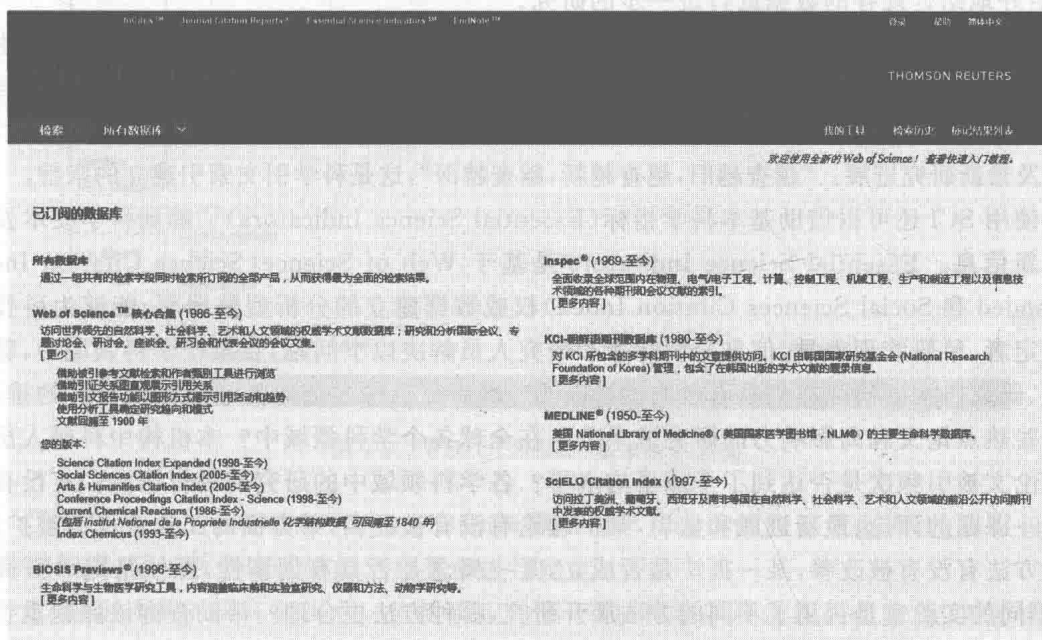


图 1-4 Web of Science 平台

司出版。Web of Science 是一个基于 Web 而构建的整合的数字研究环境,通过强大的检索技术和基于内容的连接能力,将高质量的信息资源、独特的信息分析工具和专业的信息管理软件天衣无缝地整合在一起,兼具知识的检索、提取、分析、评价、管理与发表等多项功能,从而大大扩展和加深了信息检索的广度与深度,加速科学发现与创新的进程。

Web of Science 以 Web of Science 核心合集(著名的三大引文索引 Science Citation Index Expanded, Social Sciences Citation Index, Arts & Humanities Citation Index)为核心,凭借独特的引文检索机制和强大的交叉检索功能,有效地整合了学术期刊(Web of Science 核心合集, Current Contents Connect)、发明专利(Derwent Innovations Index)、化学反应(Current Chemical Reactions, Index Chemicus)、学术专著(Book Citation Index)、学术分析与评价工具(Journal Citation Reports, Essential Science Indicators)、学术社区(Science Watch. com)及其他多个重要的学术信息资源(BIOSIS Previews, INSPEC, FSTA, Medline 等),提供了自然科学、工程技术、生物医学、社会科学、艺术与人文等多个领域中高质量、可信赖的学术信息。

在功能上,Web of Science 提供了强大的知识发现与管理工具,包括跨库跨平台的 Cross Search、独特的引文检索、主题检索、化学结构检索、基于内容与引文的跨库交叉浏览、检索结果的信息分析、定题跟踪 Alerting 服务、检索结果的信息管理等,帮助研究人员迅速深入地发现自己所需要的信息,把握研究发展的趋势与方向。

(1) SCI 的特点

① 独特的检索体系

SCI 是一种强大的文献检索工具。它不同于按主题或分类途径检索文献的常规做法,而是设置了独特的“引文索引”,索引功能帮助了世界各地的科技人员获取最需要的文献信息,方便各地的科技工作者掌握本领域或即将探索领域的研究数据,从而减轻了不必要的劳动,更好地结合现存的数据进行进一步的研究。

引文索引提供了一种全新的文献检索手段,即将一篇文献作为检索词,通过收录其所引用的参考文献和跟踪其发表后被引用的情况来掌握该研究课题的来龙去脉,从而迅速发现与其相关的研究文献。通过文献间的引用和被引用关系,了解某一学术问题或观点的起源、发展、修正及最新研究进展。“越查越旧,越查越新,越查越深”,这是科学引文索引建立的宗旨。

使用 SCI 还可以借助基本科学指标(Essential Science Indicators)了解到科学技术发展的最新信息。Essential Science Indicators 是基于 Web of Science (Science Citation Index Expanded 和 Social Sciences Citation Index)权威数据建立的分析型数据库,能够为科技政策制定者、科研管理人员、信息分析专家和研究人员解决以下问题:在某个学科领域中,哪些国家、研究机构的研究成果具有较高的影响力?本研究机构在全球各个学科领域中的排名?有哪些热点论文和高影响力的研究成果分布在全球各个学科领域中?本机构中科研人员发表的论文被引频次是否达到了全球平均水平?各学科领域中的研究前沿有哪些?有没有关于某一课题的评论、最新进展和认识,某一理论有没有被证实,某方面的工作有没有被扩展,某一方法有没有被改善,某一提法是否成立,某一概念是否具有创新性,即使是同一研究领域,不同的实验室是否用了不同的方法展开研究,哪种方法更合理?帮助查询该课题重要文献的全文,该研究领域中高影响力学者的信息,文献中实验相关的事实性数据,研究成果如何向某种学术期刊投稿发表等。

② 学术水平的评价标准

SCI有助于评价科学著作的价值和生命力、科学工作者的能力及其研究工作所产生的社会效果。世界上大部分国家和地区的学术界将其收录的科技论文数量,看作一个国家的基础科学研究水平及其科技实力指标之一。科研机构被SCI收录的论文总量,反映整个机构的科研,尤其是基础研究的水平;每年一次的SCI论文排名成为判断一个学校科研水平的一个十分重要的标准。个人的论文被SCI收录的数量及被引用次数,反映他的研究能力与学术水平。SCI目前已成为衡量国内大学、科研机构和科学工作者学术水平的最重要的甚至是唯一标准。

期刊引证报告(Journal Citation Reports,简称JCR)是一个综合性、多学科期刊分析与评价报告。它客观地统计Web of Science收录期刊所刊载论文的数量、论文参考文献的数量、论文的被引用次数等原始数据,再应用文献计量学的原理,计算出各期刊的影响因子、立即影响指数、被引半衰期等反应期刊质量和影响的定量指标。JCR提供了以下两种版本:JCR Science Edition:涵盖来自83个国家或地区,约2000家出版机构的8500多本期刊,覆盖176个学科领域。JCR Social Science Edition:涵盖来自52个国家或地区713家出版机构3000多本期刊,覆盖56个学科领域。

(2) Web of Science 检索

Web of Science的基本检索界面比较简单,如图1-5所示。此外,Web of Science还有“高级检索”和“被引参考文献检索”,如图1-6和图1-7所示。利用Web of Science检索文献的步骤如下:

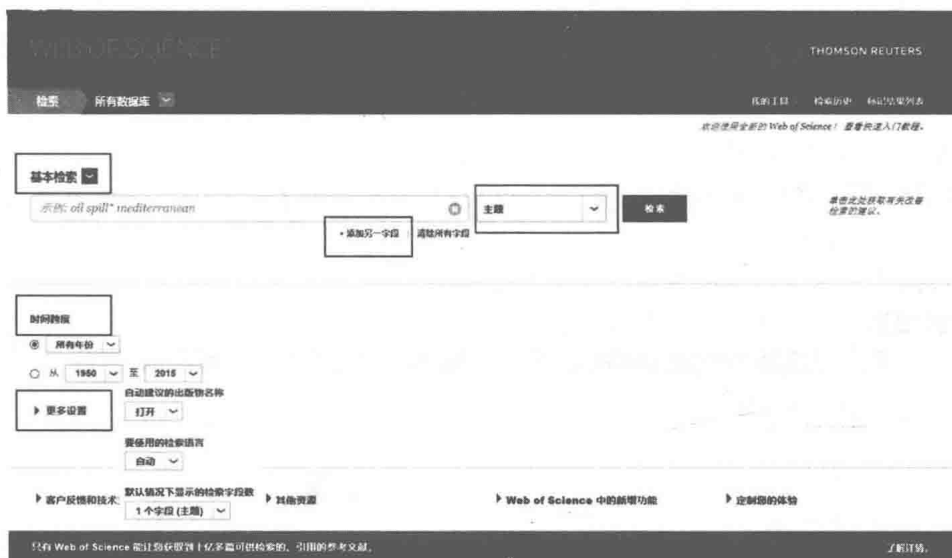


图 1-5 Web Of Science 基本检索界面

① 确定检索的数据库。Web of Science 默认检索其包含的所有数据库,也可以设定检索的数据库,通过数据库选择的下拉菜单进行确定。

② 确定检索的语言和技术。包括确定检索字段,检索字段出现的位置,如果检索的课题比较复杂,还可以添加另一字段,并选择检索字段之间的逻辑关系。

③ 确定检索的限制条件。比如时间跨度、出版物、检索语言等。

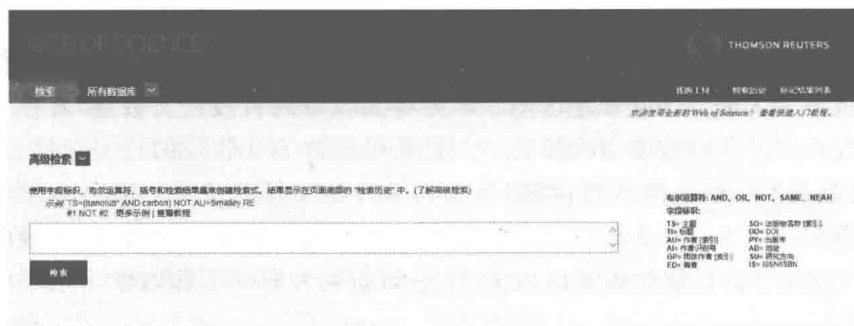


图 1-6 Web Of Science 高级检索界面



图 1-7 Web Of Science 被引参考文献检索界面

(3) 检索示例

① 根据检索的主题进行文献检索

我们要查询石墨烯(Graphene)的制备方法(Preparation method)。在检索字段里面输入“Graphene”，然后创建另一个字段，并输入“Preparation method”，两字段的关系为“AND”，选择“主题”模式，其他限定条件为数据库默认(图 1-8)，然后点击“检索”，得到图 1-9 的检索结果。在图 1-9 的检索结果中，我们得到 7 344 条记录，记录以每屏 10 条记录按



图 1-8 主题检索