



计算机化学化工丛书

Computer, Chemistry and Chemical Engineering Series

Internet 上的化学化工资源

李晓霞 郭 力 编著

科学出版社

358

G252.7
135

计算机化学化工丛书

Internet 上的化学化工资源

李晓霞 郭 力 编著



A0946400

科学出版社

2000

内 容 简 介

本书为《计算机化学化工丛书》之一。

由于 Internet 化学化工资源具有分布广、数量巨大、高度动态的特点,如何充分有效地利用 Internet 化学化工资源依然是一项具有挑战性的工作。本书面向对 Internet 化学化工资源感兴趣的广大读者,重点介绍了获取 Internet 化学化工资源的主要工具和方法,以及不同类型资源的基本特点与概貌。除介绍获取 Internet 资源的通用方法搜索引擎,重点介绍专门帮助获取 Internet 化学化工资源的资源导航系统以及近来出现的集中提供综合性化学化工信息服务的虚拟社区。作为本书的主要内容,系统介绍了 Internet 上与化学化工有关的数据库、软件、期刊、图书、会议信息、讨论组和新闻组、新闻、专利、公司及网上贸易、学会及组织、教育等资源。

本书可作为科研、教育、工业等部门对 Internet 上的化学化工资源感兴趣的广大读者的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

Internet 上的化学化工资源/李晓霞、郭力编著. -北京:科学出版社, 2000

(计算机化学化工丛书/许志宏主编)

ISBN 7-03-008584-1

I. I… II. ①李… ②郭… III. 因特网-化学工业-情报检索
IV. O252.7

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2000) 第 62682 号

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号
邮政编码: 100717

源海印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2000 年 8 月第 一 版 开本: 850×1168 1/32

2000 年 8 月第一次印刷 印张: 17 5/8

印数: 1—3 000 字数: 458 000

定价: 35.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换(北燕))

《计算机化学化工丛书》

编 委 会

主 编 许志宏

副主编 杨小震

编 委 (以姓氏笔画为序)

马沛生	王淀佐	王夔	许禄
李科	来鲁华	陈丙珍	陈冀胜
陈凯先	陈念貽	陈敏伯	陈维明
杨友麒	严新建	林少凡	郑崇直
周家驹	胡鑫尧	俞汝勤	郭传杰
郭力	袁身刚	麻德贤	惠永正
潘忠孝			

《计算机化学化工丛书》序

化学化工是信息量特别大的一门学科。到 2000 年 4 月底，在 CAS 登录的化学物质约 2400 万种，它们的各种性质，加上多元体系的性质，可以说是一个无边无际的数据海洋。于是，化学数据库的建设就成为 20 世纪后 20 年国际上的一件大事。中国科学院从 1979 年开始建设化学数据库，迄今已经整整 20 年。其间，多次得到国家和中国科学院的奖励。

长期以来，人们不仅希望能定性地掌握而且希望能定量地了解化学化工学科的规律，而计算机的能力及相关技术高速发展，正在帮助人们一步一步地实现着这个愿望。从理论化学的计算、谱图解析、化学计量学、化工过程模拟、热力学的复杂计算，都在计算机的帮助下得到了很大的发展。

上述基础工作为化学化工领域的工作者增加了很大的自由度：可以用计算机帮助对化合物的谱图解析，帮助选择合成路线，帮助进行药物分子设计，可以进行新过程、新技术的开发，可以进行大型工业装置的设计，可以对工厂的生产过程进行优化，……等等。

在改革开放的 20 年里，我们的计算机化学从无到有，形成了一支生机勃勃的研究队伍，也形成了一个很大的用户和读者群体。到 21 世纪，这个群体更需要有能力利用计算机帮助自己的工作，所以本套丛书中也包含一些计算机化学化工的教材，以利于化学化工本科生和研究生的培养和工程人员自学。

所以，我们希望通过本套丛书介绍一些解决问题的方法，帮助读者在遇到问题时，知道如何去解决问题。为此，要求作者在自己的著作中，要给出软件、数据的出处、网络地址或光盘。时代发展得很快，仅做到这一点显然还是不够的。我们特别注意到

近年来, Internet 网络的高速发展已经给我们的时代带来了巨大变化。到 1999 年 7 月, Internet 已经是一个连接 5600 多万个节点的一个网络系统, 它上面的文本信息已经超过 600 亿字节。这些信息一个最大的长处是时间的滞后最小, 易于通过计算机获取。

如果能将科学数据库在网上的功能, 由数据的存取扩大到运算、绘图、模拟等多方面, 必将极大地推动科学数据库工作的发展和广泛使用。在 21 世纪, 人们将逐步可以做到在用户端将数据从库中取出, 在服务器端程序系统上计算, 结果以图形或多媒体方式输出到用户端。据了解, 我们有些作者在自己的工作中已经能够在网上实现数据查询、计算、绘图、三维图形显示等。

进入 21 世纪, Internet 网络系统的应用将更加普及, Internet 网络的客户/服务器的应用将进入千家万户, 进入教室和办公室的各个角落。所以, 如果能将科学数据库和计算程序库在网络服务器上实现, 那么它的普及应用, 将会随着计算机网络的推广而推广。

如果有的丛书作者, 目前仅能给出单机版本的软件, 也欢迎他们能再作一点工作, 很快能达到上网服务的目的。相信进入 21 世纪不久, 在用户端上人们就有可能逐步享受到多种媒体的全方位的科学信息的服务。

这套丛书是我国多位化学化工学科的专家、教授、学者多年辛勤劳动的成果, 也是科学出版社、国家自然科学基金委员会优秀研究成果专著出版基金和中国科学院科学出版基金大力支持的产物, 希望它的出版能促进我国 21 世纪计算机化学化工学科的发展, 并有助于相关学科发展。

《计算机化学化工丛书》编委会

2000 年 5 月

前 言

Internet 诞生于 20 世纪 60 年代末, 90 年代以后进入快速发展期。特别是在 90 年代中期随着 World - Wide Web (WWW) 技术的发展, 为通过 Internet 提供和获取信息提供了非常方便的平台, 使得 Internet 正在成为各类信息的主要载体。

自然地, Internet 正在成为化学化工信息的主要载体。通过 Internet 已经可以很方便地查阅各种与化学化工有关的信息, 如了解世界各地的会议、最新的学术著作介绍、检索各种收费或免费的数据库、参与商业软件的测试和下载免费软件、通过讨论组与国际同行讨论专业问题等。Internet 也已成为了解化学化工领域研究前沿和热点问题的重要途径。

要利用分布在 Internet 上的化学化工资源, 必须回答两个基本问题: (1) 所需要的资源是否存在于 Internet 上? (2) 如果存在, 那么在 Internet 的哪个节点上? 解决这两个问题的基本思路是建立 Internet 上的资源与资源地址的索引, 然后利用索引定位到具体的资源。目前主要有两种建立索引的方法, 一种是利用程序自动地搜集资源并建立索引的搜索引擎 (Search Engine) 如 AltaVista, 另一种是针对某个领域或主题、用人工的方法建立的 Internet 资源导航系统, 有些搜索引擎的 Web 目录 (Directory) 也属于这种方法。对于化学与化工工作者而言, 目前已经可以借助于搜索引擎和 Internet 化学化工资源导航系统来获取 Internet 上的化学化工资源。但是由于 Internet 资源仍以令人难以置信的速度增长, 上面的两个基本问题只是部分地得到了解决。

近几年已经有一些关于 Internet 科技资源或其他大众性资源的书籍出版, 但多数仅按照一定分类列出资源地址, 对资源的介绍常常是一句话。作者认为这样的书籍其作用相当于 Internet 资

源导航系统, 如果考虑到书籍无法像 Internet 资源导航系统那样可以动态维护以满足 Internet 资源不断增长和更新的需要, 其作用进一步受到限制。

由于 Internet 化学化工资源具有分布广、数量巨大、高度动态的特点, 对于化学化工工作者而言, 如何充分有效地利用 Internet 化学化工资源依然是一项具有挑战性的工作。作者认为了解 Internet 化学化工资源的基本特点和发展现状、掌握获取资源的基本工具是迎接这一挑战的基础, 这正是写作本书的主要指导思想。

本书的内容可分为三部分, 第一部分即第一章, 主要介绍 Internet 的基本服务和基本知识, 并通过摘编 Hobbes 的 Internet 大事记回顾了 Internet 的主要发展历程。这部分内容不仅对那些不太熟悉 Internet 的读者有所帮助, 而且对广大化学化工工作者而言, 了解 Internet 的发展史有助于深刻认识 Internet 对化学化工领域所产生的广泛影响。

本书的第二部分包括两章, 介绍获得 Internet 化学化工资源的主要工具和方法。第二章介绍获取 Internet 资源的通用方法, 即搜索引擎。除简要介绍搜索引擎的基本知识和关于搜索引擎的相关资源外, 重点介绍了几种各具特色的著名搜索引擎, 包括 Yahoo、AltaVista、FAST、Hotbot、Google 等, 特别指出了哪些搜索引擎适合于科研人员使用; 对国内的中文搜索引擎也作了介绍。第三章介绍专门帮助获取 Internet 化学化工资源的工具, 即 Internet 化学化工资源导航系统以及近来出现的集中提供综合性化学化工信息服务的虚拟社区。这一章的篇幅较长, 约占全书的五分之一。第一节系统地介绍了目前最著名的几个综合性化学资源导航系统如美国印地安纳大学的 CHEMINFO、英国谢菲尔德大学的 ChemDex、英国利物浦大学的“Links for Chemists”的主要内容、资源的分类方法以及系统的特点, 也介绍了作者所建立和维护的化学化工导航系统 ChIN 的主要特色。对 Internet 化学资源导航系统的发展趋势进行了讨论。第二节系统介绍了目前最

有影响的化学虚拟社区站点 ChemWeb. com、美国化学会的 ChemCenter、英国皇家化学会的 ChemSoc 和工程信息的虚拟社区站点 Engineering Information Village。如果考虑到内容的完整性,本章还应该有一节介绍化学各分支学科领域如分析化学、生物化学等方面的资源导航系统,但是考虑到目前这类系统的规模比较小,也由于写作时间的限制,本书没有包括这部分内容。

本书的第三部分包括第四章至第十四章,分别介绍各种类型的化学化工资源,它们分别为与化学化工有关的数据库、软件、期刊、图书、会议信息、讨论组和新闻组、新闻、专利、公司及网上贸易、学会及组织、教育资源。在介绍每一类资源时,作者都力求通过选择性地介绍一些典型的化学资源实例,从不同侧面大致描绘出不同类型资源的特点和概貌,同时也加入了作者对 Internet 化学资源研究的一些心得与看法。由于写作时间的限制,本书的这一部分未能包括更多的内容如关于科研机构、化学工业等方面的内容。

为了读者阅读方便,本书给出了尽可能多的参考文献,并且在正文中合适的地方进行引用。本书的主要参考资料都来自 Internet,因此参考文献的出处多为资源的网络地址 URL。本书的写作本身可以看作是利用 Internet 获取化学化工资源的实例。

写作本书的一个难点是如何保持书中内容的时效性。本书的写作过程大约为 1 年。由于 Internet 化学化工资源及其相关应用正处于快速发展的时期,资源的动态性不仅表现在内容的更新,有些资源的表现形式也在不断改进。因此在定稿时对书中的一些内容不得不作了一些调整,即便如此,读者今后可能还会发现书中的一些内容与其从 Internet 上所得到的有一些差异。如果读者比较熟悉 Internet 动态性的特点,对此应不难理解。作者认为从根本上讲每一种书籍实际上也存在时效性问题,不过由于 Internet 可随时被读者访问,Internet 上的化学化工资源可随时更新,时效性的问题就显得非常突出。作者也颇为烦恼,尚没有想出一个万全之策。如果书中涉及到的资源内容、表现形式或地址发

生变动,请读者通过作者维护的 ChIN 网页查询更新情况。这里还须说明一下,ChIN 网页本身也在发展之中,正在建设中的第二版与目前运行的 ChIN 网页在结构上也有一些变化,因此作者在本书中引用 ChIN 网页时只给出了主页的地址,如果读者有什么疑问请直接与作者联系。

由于经济及各方面条件的限制,国内的化学信息服务与发达国家相比仍有较大的差距。但是 Internet 使得至少在公开可获得的信息方面使国内的读者与国外一样处于同样的位置,作者认为 Internet 对于中国具有更为重要的意义。希望本书在帮助读者通过 Internet 获取化学化工信息、了解国外的发展动态、了解国外同类机构的日常活动与运行方式、开阔眼界、加速与世界的接轨等方面发挥作用。

作者衷心感谢许志宏先生对本书写作的关怀与鼓励。感谢中国科学院化工冶金研究所计算机化学实验室(LCC)的杨章远研究员、周家驹研究员、温浩研究员对本书写作的热情支持。感谢 LCC 全体人员对本书的关注以及与作者进行的有益讨论。感谢美国斯坦福大学 Swan 化学与化工图书馆馆长 Gvace Baysinger 的帮助。作者衷心感谢本书的责任编辑刘俊来的帮助。

特别感谢国家自然科学基金委员会对 Internet 化学资源研究项目的支持,本书是该项目的主要研究成果之一。衷心感谢国家自然科学基金委张慧心教授对作者的理解与支持。

由于本书涉及的内容较广,难免有错误或疏漏,恳请广大读者批评指正。欢迎通过 e-mail 与作者联系,作者的 e-mail 地址是:

xxia@lcc.icm.ac.cn

lguo@lcc.icm.ac.cn

作 者

2000 年 5 月

目 录

《计算机化学化工丛书》序	(iii)
前 言	(v)
第一章 Internet 概论	(1)
1.1 Internet 服务简介.....	(2)
1.1.1 电子邮件	(2)
1.1.2 远程登录	(2)
1.1.3 文件传输	(3)
1.1.4 通信讨论组	(3)
1.1.5 Archie	(4)
1.1.6 网络新闻	(4)
1.1.7 WWW	(4)
1.2 Internet 的基础知识	(5)
1.2.1 计算机网络和 TCP/IP 协议	(5)
1.2.2 IP 地址、DNS 和电子邮件地址	(6)
1.2.3 URL	(9)
1.3 Internet 大事记	(12)
参考文献	(37)
第二章 Internet 资源搜索引擎	(38)
2.1 Internet 资源搜索引擎	(39)
2.2 部分 Internet 资源搜索引擎简介	(41)
2.2.1 Yahoo	(41)
2.2.2 AltaVista	(43)
2.2.3 FAST Search	(44)
2.2.4 HotBot	(46)
2.2.5 Google	(47)
2.2.6 ChemGuide	(48)

2.2.7 其他搜索引擎	(49)
2.3 国内 Internet 资源搜索引擎简介	(49)
参考文献	(50)
第三章 Internet 化学化工资源指南	(51)
3.1 Internet 综合性化学资源导航系统	(51)
3.1.1 印地安纳大学的 CHEMINFO	(52)
3.1.2 英国谢菲尔德大学的 ChemDex	(57)
3.1.3 英国利物浦大学的“Links for Chemists”	(61)
3.1.4 NIU Chemistry 站点	(64)
3.1.5 ChIN 网页:重要 Internet 化学化工资源导航	(65)
3.1.6 关于 Internet 化学资源导航系统的评论	(85)
3.2 化学化工虚拟社区	(87)
3.2.1 ChemWeb. com	(90)
3.2.2 美国化学会的 ChemCenter	(126)
3.2.3 英国皇家化学会的 ChemSoc	(141)
3.2.4 工程信息村 Engineering Information Village	(159)
参考文献	(179)
第四章 Internet 化学数据库	(184)
4.1 Internet 上的免费化学数据库	(184)
4.1.1 PubMed:免费的基于 Web 的 MEDLINE	(185)
4.1.2 NIST 的 Chemistry WebBook	(188)
4.1.3 分布式化学数据库统一查询接口 CS ChemFinder	(192)
4.1.4 Internet 上的其他免费化学数据库	(194)
4.2 Internet 上其他的化学数据库信息	(199)
4.3 Internet 对化学数据库的影响	(202)
参考文献	(204)
第五章 Internet 上的化学化工软件	(206)
5.1 Internet 上的免费化学化工软件	(206)
5.1.1 与 Internet 免费软件有关的术语	(206)
5.1.2 一些计算化学免费软件	(207)
5.1.3 其他化学化工免费软件	(213)

5.2 Internet 化学化工商业软件资源	(217)
5.2.1 化学化工软件公司的 Web 站点	(217)
5.2.2 检索化学化工商业软件目录	(223)
5.2.3 获取化学化工商业软件的技术信息	(238)
5.3 其他化学化工软件资源的站点	(245)
5.4 Internet 对化学化工软件的影响	(248)
参考文献	(249)
第六章 Internet 上的化学化工期刊	(252)
6.1 化学化工期刊的 Internet 电子版	(252)
6.2 Internet 化学化工期刊免费资源	(258)
6.3 Internet 化学化工期刊目录推送	(264)
参考文献	(267)
第七章 Internet 上的化学化工图书	(269)
7.1 Internet 上的图书出版商	(269)
7.2 Internet 上的网上书店	(275)
7.3 Internet 上的图书馆馆藏图书目录	(280)
参考文献	(285)
第八章 Internet 上的化学化工会议信息	(286)
8.1 Internet 上的化学化工会议信息	(286)
8.1.1 美国化学会 ChemCenter 的 Meeting Locator	(286)
8.1.2 ChemSoc 的化学会议信息	(289)
8.1.3 ChemWeb 的 Conference Diary	(292)
8.1.4 Reed Chemical 的化学工业会议信息	(294)
8.1.5 会议主办者 Web 站点的特点	(295)
8.1.6 其他	(298)
8.2 Internet 上的化学电子会议	(298)
参考文献	(302)
第九章 Internet 上的化学化工讨论组和新闻组	(304)
9.1 Internet 上的化学化工讨论组	(304)
9.1.1 查询 Internet 化学化工讨论组地址	(305)
9.1.2 Internet 化学化工讨论组内容的存档	(316)

9.2	Internet 上的化学化工新闻组	(318)
9.3	其他	(324)
	参考文献	(325)
第十章	Internet 上的化学化工新闻	(326)
10.1	与工商业有关的化学新闻	(326)
10.2	与研究有关的化学新闻	(330)
10.3	科技新闻中与化学有关的新闻	(333)
	参考文献	(334)
第十一章	Internet 专利信息资源	(335)
11.1	免费查询 Internet 上的美国专利	(335)
11.1.1	IBM 知识产权网 IPN	(335)
11.1.2	美国专利商标局的 Web 专利数据库	(342)
11.1.3	其它	(349)
11.2	免费查询 Internet 上的欧洲专利及世界各国 专利	(350)
11.2.1	欧洲专利局的 esp@cenet	(350)
11.2.2	加拿大专利数据库	(363)
11.2.3	中国专利摘要数据库	(367)
11.3	Internet 上的其他专利信息	(370)
	参考文献	(371)
第十二章	Internet 上的化学公司及网上贸易	(373)
12.1	Internet 上的化学公司	(373)
12.2	Internet 上与化学有关的产品在线目录	(378)
12.2.1	美国化学会的 Chemcyclopedia 和 LabGuide	(379)
12.2.2	ChemExper Chemical Directory(OCD)	(380)
12.2.3	Chemical Online 的产品中心	(384)
12.2.4	Sigma-Aldrich 集团的产品目录	(388)
12.2.5	Fisher Scientific Acros Organics 的产品目录	(391)
12.2.6	中国化工网	(395)
12.2.7	其他	(396)
12.3	Internet 上与化学化工有关的网上贸易	(396)

参考文献	(400)
第十三章 Internet 上的化学化工组织	(401)
13.1 几个有影响的学术组织及其网站	(401)
13.1.1 国际纯化学与应用化学联盟 IUPAC	(401)
13.1.2 美国化学会 ACS	(405)
13.1.3 英国皇家化学会 RSC	(407)
13.1.4 美国化学工程师协会 AIChE	(407)
13.2 专业性学术组织	(409)
13.3 基金组织	(411)
13.4 其他	(412)
参考文献	(412)
第十四章 Internet 上的化学化工教育资源	(413)
14.1 与化学化工有关的院系网站	(413)
14.1.1 化学化工院系 Web 站点	(413)
14.1.2 化学化工院系 Web 站点目录	(419)
14.2 与化学化工有关的教学资源	(421)
14.2.1 与化学化工有关的网上教学资源实例	(422)
14.2.2 如何查找与化学化工有关的网上教学资源	(426)
14.2.3 网上教学资源对教育的影响	(428)
14.3 大学化学化工图书馆的网站	(429)
参考文献	(432)
附录	(435)
I Ei Connexion 所包括的在线数据库目录	(435)
II ChemPort 所链接的与化学有关的学会组织和 出版商的全文上网的期刊目录	(441)
III Patrick van der Valk 收集的可利用的网上化学 期刊目录	(511)
IV UnCover 期刊数据库中 与化学有关的期刊目录	(529)

第一章 Internet 概论

20 世纪最伟大的发明之一是电子计算机，而 Internet 的出现与发展是人类历史上另外一个里程碑。

当前，一股 Internet 热浪席卷世界和中国，“Internet”、“电子邮件”、“网页”等成为各种媒体上出现频率很高的名词，越来越多的人正在进入 Internet 这个奇妙的天地，利用 Internet 进行通信、查阅资料、下载软件和数据、收听广播、收看电视、阅读报纸和杂志、购买商品等等。Internet 正逐步地渗透到人们生活、学习和工作中，成为一个不可缺少的工具。

Internet 最初是为实验“包交换”网络构型而开始建立的，经过近 30 年的建设和发展，已经成为世界上最庞大的计算机网络。据“Hobbes' Internet Timeline”^[1,2]统计，到 1999 年 7 月为止，Internet 上已经连接了 5621 万个主机，其中有 707 万个主机提供 WWW 服务，接入 Internet 的国家和地区达到 171 个。Internet 拥有世界上最大的信息资源库，它已经从最初的一个单纯的通信工具和硬件共享的工具变成了人人都可以找到自己感兴趣的信息的资源宝藏。

自从 1987 年 9 月 20 日，钱天白教授从北京向德国卡尔斯鲁厄大学发出了第一封电子邮件开始，Internet 正式在中国大陆地区登陆^[3]，经过 12 年的发展，取得了世人瞩目的进展。据 1999 年 7 月中国互联网络信息中心发表的“中国 Internet 发展状况统计报告”^[4]，截止到 1999 年 6 月 30 日，我国大陆地区上网计算机数为 146 万台，其中专线上网计算机为 25 万台，拨号上网计算机为 121 万台；上网用户人数为 400 万，其中专线上网的用户人数约为 76 万，拨号上网的用户人数约为 256 万，两者兼用的用户人数为 68 万；在“cn”下注册的域名有 29 045 个；WWW