 普通高等教育“十二五”规划教材

仪器分析实验

YIQI FENXI
SHIYAN

王元兰 主 编
张君枝 黄自知 副主编



化学工业出版社

普通高等教育“十二五”规划教材

仪器分析实验

王元兰 主 编
张君枝 黄自知 副主编



化学工业出版社

· 北京 ·

本书是根据教学改革实践和实验教学发展需要,结合多年的教学实践而编写的实验教材。

全书共分4章,内容包括仪器分析实验的基本要求;化学信息资源,提供了国内外一些常用的化学信息资源及化学文献的查阅方法,并附有常用的化学期刊网址及翻译网站;实验部分,共51个实验,有电化学分析实验7个,色谱分析实验19个,光谱分析实验22个,核磁共振波谱实验2个及热分析实验1个,每个实验包括有实验目的、实验原理、仪器与试剂、实验步骤、数据处理、注意事项及思考题;常规仪器的简介,介绍了仪器分析实验中常用的13种仪器的使用方法,有利于实验的顺利开设。

本教材内容既有较广的适用性,又注重体现新技术、新方法,可作为农学、林学、水产、食品、动医、动科、生物、资源与环境、材料、生化等专业的教材或参考书,也可供相关专业的科技人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

仪器分析实验/王元兰主编. —北京:化学工业出版社, 2014.1

普通高等教育“十二五”规划教材

ISBN 978-7-122-19072-7



I. ①仪… II. ①王… III. ①仪器分析-实验-高等学校-教材 IV. ①O657-33

中国版本图书馆CIP数据核字(2013)第278286号

责任编辑:旷英姿
责任校对:王素芹

文字编辑:向东
装帧设计:王晓宇

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011)

印装:大厂聚鑫印刷有限责任公司

787mm×1092mm 1/16 印张9 1/4 字数206千字 2014年2月北京第1版第1次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价: 21.00 元

版权所有 违者必究

编写人员

主 编 王元兰

副 主 编 张君枝 黄自知

编 委 (按姓氏笔画为序)

王元兰 (中南林业科技大学)

纪永升 (河南中医学院)

张君枝 (北京建筑工程学院)

郭 鑫 (中南林业科技大学)

黄自知 (中南林业科技大学)

谭 平 (湖南工业大学)

前 言

仪器分析是以物质的物理和物理化学性质为基础建立起来的一种分析方法，测定时，常常需要使用比较特殊或复杂的仪器。仪器分析作为现代的分析测试手段，日益广泛地为许多领域内的科研和生产提供大量的物质组成和结构等方面的信息，因而仪器分析成为高等学校中许多专业的重要课程之一。

对于一般学生来说，将来并不从事分析仪器制造或者仪器分析研究，而是将仪器分析作为一种科学实验的手段，利用它来获取所需要的信息。仪器分析是一门实验技术性很强的课程，没有严格的实验训练，就不可能有效地利用这一手段来获得所需要的信息。我们旨在通过《仪器分析实验》教学，使学生正确掌握基础分析化学的基本操作和基本技能，掌握各类分析的测定方法和测定原理，了解并熟悉一些大型分析仪器的使用方法，培养学生严谨的科学态度，提高他们的动手能力及对实验数据的正确分析能力，使其初步具备分析问题、解决问题的能力，为学生后续专业课程的学习及完成学位论文和走上工作岗位后参加科研、生产奠定必需的理论和实践基础。

《仪器分析实验》是 21 世纪高等院校教材，是编者根据教学改革实践和教学发展需要，结合多年的教学实践而编写的。全书分 4 章共 51 个实验，内容包括：仪器分析实验的基本要求、化学信息资源、仪器分析实验部分及常规仪器的简介，其中实验部分包括电化学分析实验 7 个，色谱分析实验 19 个，光谱分析实验 22 个，核磁共振波谱实验 2 个及热分析实验 1 个。每个实验包括有实验目的、实验原理、仪器与试剂、实验步骤、数据处理、注意事项及思考题。教材内容既有较广的适用性，又注重体现新技术、新方法，以培养和提高学生的创新精神和实践能力，使学生既能掌握经典的方法，又具备设计实验的能力。

本教材具有如下特点：

1. 实验内容涉及化学、生命、环境、食品、材料、能源、医药、农学、林学等学科领域，综合程度高，具有较广的适用性和实用性。
2. 教材中很多实验来源于教师的科研积累和成果，紧跟研究前沿，把握研究热点，具有一定的先进性和创新性。
3. 部分实验内容贴近日常生活，增加了教材的实用性，有利于提高学生的学习兴趣和自主性。

本书由王元兰主编，并负责全书的策划、编排和审订及最后的统稿、复核工作，张君枝、黄自知任副主编。参加本教材编写的有中南林业科技大学的王元兰（第 1 章，第 2 章，实验六、八、十一、十二、十三、十六、十九、二十二、二十五、二十八、三十一、三十二、三十四、三十五、三十七、三十八、三十九、四十三）、黄自知（实验一、十五、二十、二十七、二十九、三十三、四十一及第 4 章）、郭鑫（实验四十五、四十六、四十八、四十九、五十、五十一），湖南工业大学的谭平（实验二、七、十八、二十一、

三十六、四十二、四十七)，北京建筑工程学院的张君枝（实验三、四、十七、二十三、二十六、三十、四十），河南中医学院的纪永升（实验五、九、十、十四、二十四、四十四）。

本书在编写过程中得到了中南林业科技大学、北京建筑工程学院、湖南工业大学和河南中医学院化学教研室同仁的支持，特别是中南林业科技大学教务处在 2013 年对本教材给予的立项支持以及中南林业科技大学化学教研室的陈学泽教授、胡云楚教授和赵芳副教授提供了不少素材和修改建议，在此谨向他们致以诚挚的谢意！

本书可作为农学、林学、水产、食品、动医、动科、生物、资源与环境、材料、生化等专业的教材或参考书，也可供相关专业的科技人员参考。

由于编者水平有限，书中不妥之处在所难免，恳请读者不吝指正。

编者
2013 年 8 月

目 录

1 仪器分析实验的基本要求	1
1.1 仪器分析实验的基本要求	1
1.2 实验数据处理和结果的表达	1
1.2.1 列表法	1
1.2.2 图形表示法	2
1.2.3 数值表示法	3
1.2.4 有效数字和数字修约规则	4
1.2.5 Microcal Qorigin 6.0 的使用	4
2 化学信息资源	6
2.1 利用搜索引擎	6
2.2 利用网络数据库	7
2.3 Internet 化学化工信息资源导航类网站	7
2.4 免费的化学化工物性数据库	9
2.5 免费的化学化工期刊及期刊文献信息	10
2.6 免费的化学化工专利信息	12
2.7 常用的翻译网站	13
3 实验部分	15
3.1 电化学分析实验	15
实验一 离子选择性电极法测定水样中的微量氟	15
实验二 水中 I^- 和 Cl^- 的连续测定 (电位滴定法)	17
实验三 水中 Ca^{2+} 、 Mg^{2+} 的连续滴定——电位滴定法	20
实验四 酸碱滴定——自动电位滴定法	22
实验五 库仑滴定法测定微量砷	23
实验六 单扫描示波极谱法测定铅和镉	25
实验七 循环伏安法判断电极过程	26
3.2 色谱分析实验	29
实验八 薄层色谱分离鉴定有机化合物	29
实验九 黄连药材的薄层色谱法鉴别	31
实验十 纸色谱分离氨基酸	32
实验十一 气相色谱仪气路系统的连接、检漏及载气流速的测量与校正	32
实验十二 气相色谱填充柱的柱效测定	35
实验十三 乙酸甲酯、环己烷、甲醇等混合样品的色谱测定	37

实验十四	气相色谱法测定藿香正气水中乙醇含量	39
实验十五	气相色谱法测定白酒中乙醇含量	40
实验十六	气相色谱法测定乙醇中乙酸乙酯的含量	42
实验十七	气相色谱法定量分析乙醇中水含量	43
实验十八	利用保留值定性及归一法定量测定乙醇、丙酮及水混合溶液中各组分的 含量	44
实验十九	程序升温法测定工业二环己胺中微量杂质	46
实验二十	液相色谱柱效能的测定	48
实验二十一	果汁(苹果汁)中有机酸的分析	49
实验二十二	液相色谱法测定污染水样中的苯和甲苯	52
实验二十三	气相色谱-质谱联用仪对农药的定性定量分析	53
实验二十四	高效液相色谱法测定双黄连口服液中黄芩苷的含量	55
实验二十五	高效液相色谱法测定饮料中的咖啡因	56
实验二十六	离子色谱法测定水中 F^- 、 Cl^- 、 NO_3^- 、 PO_4^{3-}	57
3.3	光谱分析实验	59
实验二十七	火焰光度法测定样品中的钾、钠	59
实验二十八	电感耦合等离子体发射光谱法(ICP-AES)测定废水中镉、铬含量	60
实验二十九	紫外分光光度法测定饮料中的防腐剂——苯甲酸	62
实验三十	紫外分光光度法测定维生素C片剂的维生素C含量	63
实验三十一	紫外分光光度法鉴定未知芳香化合物及萘的测定	64
实验三十二	紫外差值光谱法测定废水中的微量酚	66
实验三十三	原子吸收分光光度法测定自来水中镁的含量	67
实验三十四	原子吸收分光光度法测定土壤中铜和锌的含量	68
实验三十五	原子吸收分光光度法测定水样中的铜	70
实验三十六	火焰原子吸收分光光度法测定自来水中钠的含量	72
实验三十七	原子吸收分光光度法测定豆乳粉中的铁、铜	74
实验三十八	原子吸收分光光度法测定钢中的铜	75
实验三十九	原子吸收分光光度法测定茶水中的钙	77
实验四十	原子吸收分光光度法测定土壤样品中镍、镉、铅的含量	78
实验四十一	荧光光度分析法测定维生素 B_2	80
实验四十二	荧光光度法测定多维葡萄糖粉中维生素 B_2 的含量	82
实验四十三	荧光分析法测定邻羟基苯甲酸和间羟基苯甲酸	83
实验四十四	KBr 压片法红外光谱练习	84
实验四十五	红外吸收光谱定性分析	85
实验四十六	红外吸收光谱的测定及结构分析	87
实验四十七	苯甲酸红外光谱的测绘	89
实验四十八	苯甲酸和水杨酸的红外吸收光谱的定性分析	91
3.4	核磁共振波谱实验	92
实验四十九	核磁共振(NMR)演示实验	92

实验五十 核磁共振氢谱实验	95
3.5 热分析实验	101
实验五十一 CuSO ₄ · 5H ₂ O 的差热分析	101
4 常规仪器简介	104
4.1 722N 型分光光度计的使用	104
4.2 KLT-1 库仑仪	106
4.3 色谱分析仪	108
4.4 火焰光度计	110
4.5 发射光谱分析仪	112
4.6 紫外-可见分光光度计	115
4.7 原子吸收分光光度计	116
4.8 荧光光度计	125
4.9 化学发光分析仪	127
4.10 红外光谱仪	130
4.11 核磁共振波谱仪	132
4.12 质谱仪	134
4.13 高效毛细管电泳仪	137
参考文献	139

1 仪器分析实验的基本要求

1.1 仪器分析实验的基本要求

仪器分析实验是仪器分析课程的重要内容。其目的是让学生在教师指导下，以分析仪器为工具亲自动手获得所需物质化学组成、含量和结构等信息。它是一种特殊形式的科学实践活动。通过仪器分析实验，使学生加深对有关仪器分析方法基本原理的理解，掌握仪器分析实验的基本知识和技能；学会仪器的正确使用方法；掌握实验条件优化的方法；正确地处理实验数据和表达实验结果；培养学生严谨求实的科学态度、进行实验的技能技巧和独立工作的能力。要达到仪器分析实验教学的目的，须对仪器分析实验课提出以下基本要求。

(1) 实验之前做好预习工作。仔细阅读实验教材，对实验原理、方法和操作步骤以及注意事项做到心中有数。

(2) 学会正确使用仪器。应在教师指导下熟悉和掌握仪器的正确使用方法，详细了解仪器的性能，防止损坏仪器或发生安全事故。

(3) 实验过程中，要细心观察和详细记录实验中的各种现象，认真记录实验条件和分析测试的原始数据；认真学习有关分析方法的基本技能。

(4) 认真写好实验报告。撰写实验报告是仪器分析实验的延续和提高。实验报告应做到简明扼要、图表清晰。其内容应包括实验名称、完成日期、实验原理、仪器名称及其型号、所用试剂、主要仪器的工作参数、实验步骤、实验数据及图表、实验现象、数据分析和结果处理、问题讨论等。写好实验报告是提高仪器分析实验教学质量的一个非常重要的环节。

(5) 爱护仪器设备和实验室的环境。实验过程中应始终保持实验室的整洁与安静；实验结束后，应将所用仪器复原，并认真填写仪器使用记录本；清洗干净所用器皿，整理好实验室，经教师查验、签字后方可离开。

1.2 实验数据处理和结果的表达

分析数据的表示方式，视数据的特点和用途而定，不管采用什么方式表示数据，其基本要求是准确、明晰和便于应用。常用的数据表示方式有列表法、图形表示法、数值表示法。这三种方法各有各的应用场合，在撰写实验和研究报告时，可以因地制宜，几种方法并用。

1.2.1 列表法

列表法是以表格形式表示数据。其优点是列入的数据是原始数据，可以清晰地看出数

据的过程，亦便于日后对计算结果进行检查和复核；可以同时列出多个参数的设置，便于同时考察多个变量之间的关系。当数据很多时，列表占用篇幅过大，显得累赘，用列表法表示数据时，需要注意规范化。

(1) 选择适合的表格形式。在现在的科技文献中，通常采用三线制表格，而不采用网格式表。

(2) 简明准确地标注表名。表名标注于表的上方，当表名不足以充分说明表中数据含义时，可以在表的下方加标注。

(3) 表的第一行为表头，表头要清楚标明表内数据的名称和单位，名称尽量用符号表示。同一列数据单位相同时，将单位标注于该列数据的表头，各数据后不再加写单位。单位的写法采用斜线制。

(4) 在列数据时，特别是数据很多时，每隔一定量的数据留一空行。上下数据的相应位数要对齐，各数据要按照一定的顺序排列。

(5) 表中的某个或某些数据需要特殊说明时，可在数据上作一标记，再在表的下方加注说明。

1.2.2 图形表示法

图形表示法的优点是简明、直观，可以将多条曲线同时描绘在同一图上，便于比较。随着计算机技术的发展，可以在三维空间描绘图形。

(1) 曲线拟合 在仪器分析中，绝大多数情况下都是相对测量，需用校正曲线进行定量。建立校正曲线，就是基于使偏差平方和达到极小的最小二乘法原理，对若干个对应的数据 (x_1, y_1) , (x_2, y_2) , (x_n, y_n) ，用函数进行拟合。从作图的角度来说，就是根据平面上一组离散点，选择适当的连续曲线近似地拟合这一组离散点，以尽可能完善到表示仪器响应值和被测定量之间的关系。这种基于最小二乘法原理研究因变量与自变量之间的相关关系的方法，称为回归分析。用回归分析建立仪器分析校正曲线，因变量是仪器响应值，是具有概率分布的随机变量，自变量是被测定量（浓度），为无概率分布的固定变量。所建立的校正曲线，描述了因变量与自变量之间的相关关系，并可根据各自变量的取值对因变量进行预报和控制。

用最小二乘法原理拟合回归方程，其斜率和截距分别为：

$$b = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

$$a = \bar{y} - b\bar{x}$$

所拟合的回归方程及建立的曲线在统计上是否有意义，可用相关系数进行检验。相关系数 r 是表征变量之间相关程度的一个参数，若 r 大于相关系数表中的临界值 $r_{0.05, f}$ ，表示所建立的回归方程和回归线是有意义的；反之， r 若小于 $r_{0.05, f}$ ，则表示所建立的回归方程和回归线没有意义。 r 的绝对值在 $0 \sim 1$ 的范围内变动， r 值越大，表示变量之间相关的程度越密切。当 y 随 x 增大而增大，称为 y 与 x 为正相关，为正值；当 y 随 x 增大而减小，称 y 与 x 为负相关， r 为负值。

$$r = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2 \sum (y_i - \bar{y})^2}} = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{\sqrt{[n \sum y_i^2 - (\sum y_i)^2][n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2]}}$$

相关系数表临界值 $r_{0.05,f}$ 如表 1-1 所示。

表 1-1 相关系数表临界值 $r_{0.05,f}$

$f=n-2$	$r_{0.05,f}$	$f=n-2$	$r_{0.05,f}$	$f=n-2$	$r_{0.05,f}$	$f=n-2$	$r_{0.05,f}$
1	0.997	6	0.704	11	0.553	16	0.468
2	0.950	7	0.666	12	0.532	17	0.456
3	0.878	8	0.632	13	0.514	18	0.444
4	0.811	9	0.602	14	0.497	19	0.433
5	0.754	10	0.576	15	0.482	20	0.423

(2) 置信范围的界定 回归线(回归方程)的精度用标准差 S 表示,通常用 $\pm 2S$ 作为它的置信区间。回归线的标准差是各实验点相对于回归线求出。

$$S_y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - Y_i)^2}{n-2}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n y_i^2 - \frac{1}{n}(\sum y_i)^2}{n-2}}$$

由实验点绘制的校正曲线是 $y=f(x)$, 而从校正曲线反求被测样品的浓度或含量值时, 浓度或含量的精密度按下式计算。

$$S_x = \frac{S_y}{b} \sqrt{\frac{1}{p} + \frac{1}{n} + \frac{(y_0 - \bar{y})^2}{b^2 \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}}$$

不确定度按下式计算: $\Delta = t_{a,f} S_x$

式中, b 是校正曲线的斜率; n 是实验点的数目; p 是被测样品的重复测定次数。由此可见, 如果只给出一条回归线, 不给出精密度或置信区间, 就无法知道测定结果的精密度, 因此是不合适的, 知道了回归线的置信区间, 也可以根据它来判定异常的实验点, 当实验点落在置信区间之外, 就可以判为异常点, 异常点不能参与回归计算。

(3) 图形的绘制和标注 在绘图时, 应做到规范化。

① 用 x 轴代表可严格控制的或实验误差较小的自变量, y 轴代表因变量。坐标轴应标明名称和单位, 名称尽量用符号表示, 单位的写法采用斜线制。

② 坐标轴分度应与使用的测量工具和仪器的精度相一致, 标记分度的有效数字位数应与原始数据的位数相同。在直角坐标纸上, 每格所代表的变量值以 1、2、4、5 等量为宜, 应避免采用 3、6、7、9 等量。应使整个图形占满全部坐标纸, 大小也应适当。

③ 对于标准曲线, 它一定会经过 (\bar{x}, \bar{y}) 和 $(0, a)$ 点, 所以绘制标准曲线时, 应先画出这两点, 通过它们画出直线, 再将其他点描在图上。

④ 图中有多条曲线时, 应分别用不同的符号标注。

⑤ 若变量之间的关系是非线性的, 则应尽量通过数学处理将其转变为线性关系。

⑥ 图的下方应标明图的名称和必要的注释。

1.2.3 数值表示法

用数值表示分析测定结果的优点是简练, 大量的测定数据可以用很少量的特征量值来表征。

1.2.4 有效数字和数字修约规则

(1) 有效数字及其确定方法 实验中记录分析测试数据时，记录的数据与表示结果的数值所具有的精确度应与所使用的测量仪器和工具的精确度一致。一般可估计到测量仪器和工具最小刻度的十分位，所记录的数除最后一位数字具有不确定性外，其余各位数字应是准确的。对于所记录的没有小数位且以若干个零结尾的数值，从非零数字最左一位向右数得到的位数减去无效零（仅为定位用的零）的个数，对于其他的十进位数，从非零数字最左一位向右数得到的位数，就是有效数字。

(2) 数字修约规则 根据测定仪器和方法的误差与对测定数据精确度的要求，根据修约规则，需对实际测定数据的位数进行取舍，采用“四舍六入五成双”的修约准则。所拟舍弃数字位两位以上数字时，不得连续进行多次修约，应根据所拟舍弃数字中左边第一个数字的大小按修约规则一次修约得出结果。此修约准则的优点是保持了进舍项数平衡性与进舍误差的平衡性。在报告测定结果的误差时，对误差值数字的修约，只进不舍。

1.2.5 Microcal Origin 6.0 的使用

Origin 6.0 是美国 Microcal 公司推出的一个在 Windows 操作平台下用于数据分析和绘图的工具软件，它使用简便、功能强大，应用非常广泛。

如图 1-1 所示，Microcal Origin 6.0 是一个多文档界面的软件。

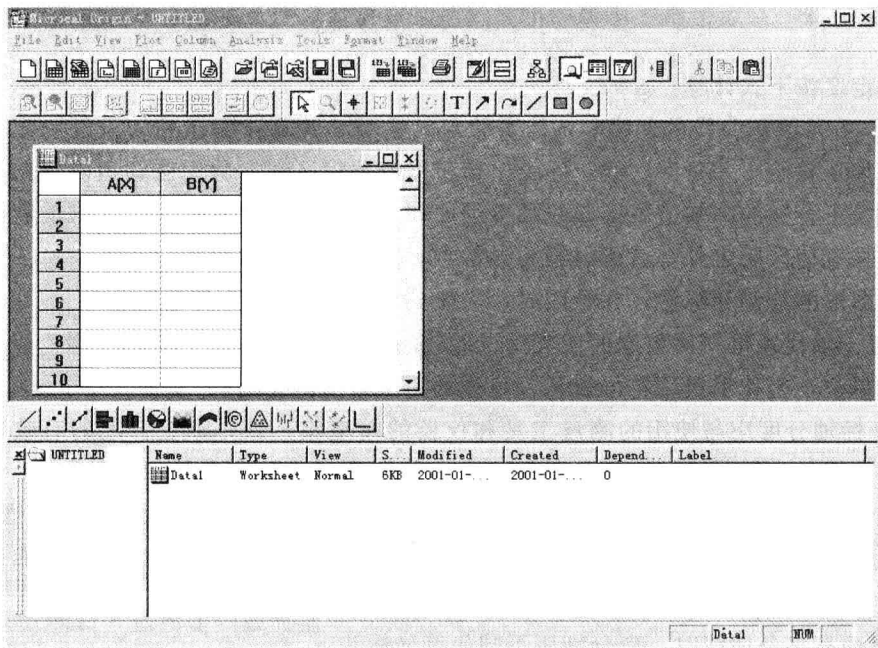


图 1-1 Microcal Origin 6.0 界面

(1) 工作表 (WorkSheet) 窗口 当 Microcal Origin 6.0 启动或建一个新文件时，默认设置是一个工作表窗口，该窗口缺省为 A (X)、B (Y) 两列，分别代表自变量和因变量。A 和 B 是列的名字，双击列的顶部可对其进行更改。可在工作窗口中用光标或鼠标移

动插入点直接输入数据，也可点中“文件→(File)”、“导入(Import)”从外部文件导入数据。

(2) 绘图功能 在工作表窗口中选定用来作图的数据，点击“绘图(Plot)”菜单，将显示 Microcal Origin 6.0 可绘制的各种图形，包括直线图、描点图、向量图、柱状图、饼图、区域图、极坐标图以及各种 3D 图表、统计用图表等。也可从下方的工具栏中直接选取图形，然后在“工具(Tools)”菜单下选择所需的曲线拟合工具。例如，对数据进行线性拟合，可在“线性拟合(Linear Fit)”工具箱上设置好各项，然后点击“拟合(Fit)”键，会弹出一个绘图窗口，给出拟合出来的曲线，同时在弹出的“脚本(Script)”窗口中给出拟合参数，如回归系数、直线的斜率和截距等。此时，原激活窗口为工作表窗口中的“绘图(Plot)”菜单变成了“图形(Graph)”，“柱(Colum)”变成了“数据(Data)”。

在“编辑(Edit)”菜单下选“复制页面(Copy Page)”，就可将当前“图形(Graph)”窗口中绘制的整个图形拷贝至 Windows 系统的剪贴板，这样就可以在其他应用程序如 Word 中进行粘贴等操作。选择“图形(Graph)”菜单下的“添加图层(Add Plot to Layer)”，就可在当前层中加入新的一组数据点，这个命令用于将几组数据绘于同一个图上。

(3) 数据分析功能 选择“分析工具(Analysis)”→“按列统计(Statistics on Columns)”，将弹出一个新的工作表窗口，其中给出了选定各列数据的各项统计参数，包括有平均值(Mean)、标准偏差(Standard Deviation, 即 SD)、标准误差(Standard Error, 即 SE)、总和(Sum)及数据组数(N)。若原始工作表中的数据改动以后，点击工作表窗口上方的“重新计算(Recalculate)”钮，就可以重新计算，得到更新的统计数据。类似的，可选择“分析工具(Analysis)”→“按行统计(Statistics on Rows)”则可以对行进行统计，不过不再新建窗口，统计结果直接附在原工作表的右边。选择“分析工具(Analysis)”→“t 检验(t-test)”可以对数据进行 t 检验，判断所选数据在给置信度下是否存在显著性差异，结果会在弹出的 Script Windows 中显示。还可以在“分析工具(Analysis)”菜单下进行数据排列(Sort)、快速傅里叶变换(FFT)、多元回归(Multiple Regression)等。

2 化学信息资源

当今时代是一个信息时代。信息对于经济和社会发展、科技文化的进步都起着重要的作用。Internet 上有着丰富的化学化工信息资源,高速发展的网络为全球性的合作、信息交流和资源共享带来前所未有的机会。充分利用国内外的学术、教育、研究、商业资源,通过互联网开展文献检索和资料查询,进行远程登录和文件传送,进行学术资源交流和学术合作已成为当前化学化工文献新趋势。下面介绍几种网上化学化工信息资源的检索途径与检索技巧,希望能为大家提供参考。

2.1 利用搜索引擎

读者要在 Web 网页上查找化学化工专题的内容,最有效快捷的方法是利用搜索引擎。搜索引擎可以说是一个庞大的网址数据库,不同的搜索引擎一般具有不同的功能。同一检索问题使用不同的搜索引擎通常得到不同的结果。Internet 上较有影响的中英文搜索引擎介绍如下。

(1) 常用综合性搜索引擎 Google (<http://www.google.com>)、百度 (<http://www.baidu.com>)、搜狐 (<http://www.sohu.com>)、Alta vista (<http://www.altavista.com>)、Infoseek(<http://www.infoseek.com>)、Tonghua(<http://www.tonghua.com.cn>) 等,适合化学化工信息的广泛搜索。

(2) 专业搜索引擎 通用搜索引擎通常是面向大众的,面向科学技术的相对少,使检索结果精确度不高,要想快速、准确地检索专业信息,必须掌握专业性搜索引擎的使用方法。目前,大型的化学化工专业搜索引擎主要有以下几种。

① 美国化工网 (<http://www.chemindustry.com/>) 该网站收集了几千万个 Web 站点和全文数据,利用该网可以搜索到全球范围内化学化工领域中各方面的信息。其检索界面有中文、法文、英文、德文 4 种语种版本,检索时无论使用哪种版本,都必须用英文方式进行提问或组配,检索结果全部显示为英文。该网站可提供关键词、分类和过滤器限定法三种检索方法,另外利用化学词典同义词功能,可检索出化合物名称、分子式、CA 登记号等信息。

② 化学之门 (<http://www.chemonline.net/ChemEngine/>) 化学之门是华南师范大学化学系计算机与网络化学教研室维护运作的一个免费为教育科研提供服务的网站,它收录和组织了 4500 多个化学化工专业网站,可利用关键词和高级检索进行查寻。收录的资源大部分是化学化工类的英文网站,并设置了“翻译”的功能,网站会把所有的链接信息自动进行翻译,可读性较强。

③ 中国化工搜索 (<http://chemdoc.chem.cn/>) 中国化工搜索由中国化工信息中心、北京金华夏网络技术有限公司开发,于 2004 年 7 月 8 日正式开通。这是目前国内化

工行业中最大的搜索引擎,据称其所拥有的客户群(企业数、产品数)超过竞争对手客户数的60%。中国化工搜索可按照产品或产品分类、网页、文献进行搜索。

(3) 基本搜索技巧

① 各种搜索引擎大都设置逻辑查询功能。常用的逻辑算符有 and、or、not,分别表示逻辑与、或、非。这一功能允许用户输入多个关键词进行逻辑查询,以提高查全率和查准率。如要查找“纳米材料在石油工业中应用”的课题,可选择“纳米材料”、“石油工业”作关键词,布尔逻辑检索表达式为:“纳米材料 and 石油工业”。要查“柠檬酸的提取和利用”的文献,布尔逻辑检索表达式为:“柠檬酸 and (提取 or 利用)”。

很多搜索引擎也支持用加(+)减(-)号限定要检索的词。也有用空格来默认两个检索词逻辑和状态。不同的搜索引擎会使用自己规定的符号及算符,用户在检索时应特别注意了解不同搜索引擎的帮助或说明。

② 要查找细微具体信息,应使用更具体特定、专指度高的词作检索词。如:查找有关“表面活性剂”的资料,最好是以具体表面活性剂的名称为检索词,如:“阳离子表面活性剂”、“Gemini 表面活性剂”、“AES 表面活性剂”等。

2.2 利用网络数据库

网络数据库具有信息量大、更新快、品种齐全、内容丰富、数据标引深度高、检索功能完善等特点,是查找化学化工文献的重要信息源。常用中外文的网络数据库有:CNKI 中国知识基础设施工程网(<http://www.cnki.net>)、万方数据资源系统(<http://www.wanfangdata.com.cn>)、国家科技图书文献中心(<http://www.macrochina.com.cn>)、Academic Search Premier(学术期刊集或全文数据库)(<http://search.ebscohost.com>)、springer 期刊数据库(<http://springer.metapress.com>)等。数据库除包括期刊全文数据库外,还有学位论文、会议论文、专利文献、标准文献等多种文献类型的全文数据库。各数据库均提供初级检索、高级检索和期刊导航功能。可通过分类、关键词、作者、题目、刊名、机构、导师名称、学科专业、专利名称、标准名称等多种检索途径查询有关中外文化化学化工专业的相关文献;利用期刊导航功能可了解数据库所收录的各学科核心期刊、专业期刊及综合性期刊的期刊范围,并可查询刊物的出版单位信息,便于科研人员投稿和与编辑部联系。此外,各数据库均提供网上原文传递服务,便于读者获取原文。

2.3 Internet 化学化工信息资源导航类网站

Internet 化学化工信息资源导航系统与化学化工专业搜索引擎一样,是查询网上化学化工信息的一条捷径。化学化工信息资源导航类网站的主要任务是将 Internet 上大量的化学资源进行深度搜索、细分和整合,呈现给用户一个清晰、有效、便捷的网址列表以方便用户的查询,通过这些网站可以找到许多有用的免费资源。目前国内外在 Internet 上存在的较优秀的化学化工信息资源导航系统介绍如下。

(1) Cheminfo (http://en.wikibooks.org/wiki/Chemical_Information_Sources) 这是美国印第安纳大学化学信息综合网站。该站点把传统的主要化学化工信息资源与相关的 Internet 化学信息资源有机地组织在一起, 收录的内容全面且权威, 是目前化学化工类信息资源中最详尽的一个网络导航指南。

(2) Links for Chemists (<http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/links.html>) 该网站由英国利物浦大学化学系于 1995 年创办, 所链接的化学站点非常广泛, 有德语和法语的版本。

(3) Chemdex (<http://www.chemdex.org/>) 这是英国 Sheffield 大学的 Mark Winter 在 1993 年建立和维护的资源导航系统。该网站连接德国、拉丁美洲、墨西哥、意大利、法国、非洲和澳大利亚等国的化学网站, 资源非常丰富。

(4) Chemweb (<http://chemweb.com/>) 该站点是 Internet 上功能最强大、服务种类最齐全的化学虚拟社区站点, 具有浏览、检索、查询、在线购物及站点导航等服务功能。网站可免费注册, 注册后进入该站点可得到每天的化学化工新闻。导航内容部分非常详细, 提供化学化工方面的杂志、数据库和其他服务。

(5) 英国皇家化学会网站 (<http://www.rsc.org/chemsoc/>) 该资源导航系统包括书籍、环境、数据库、期刊、职业、商业、软件、应用化学、纯化学、生物及医药化学、协会组织、会议、分析化学、在线课程、教育组织、教育教学资源等。所提供的 Web Links 是一个较优秀的化学资源导航系统。

(6) Chin (<http://www.chinweb.com/index.shtml>) 这是国内最完善的化学资源导航系统, 由中科院化工冶金研究所计算机化学开放实验室建立和维护的化学资源导航系统, 始建于 1996 年。通过该网站, 可以查询化学化工方面的有关新闻、会议信息、化学学会及组织机构、化学实验室和研究小组、期刊及图书等文献、化学数据库、专利及教学软件等资源。

(7) Two thousand of the best chemistry sites (C2K) (<http://www-jmg.ch.cam.ac.uk/data/c2k/>) 由剑桥大学化学系 Goodman 研究组建立, 收录全球 140 余个国家的化学化工信息, 每月检查更新链接, 分为化学院系, 化学相关期刊、数据, 化学家及化学的学/协会。

(8) 欧洲纳米技术门户 (<http://www.nanoforum.org/>) 提供欧洲纳米技术研究的各种资源, 包括报告、论文、项目、组织等形式, 英语界面, 部分全文。

其他一些化学化工信息资源的导航系统有:

美国化学会网站 <http://portal.acs.org/portal/acs/corg/content>;

Chemie.de 搜索引擎 <http://www.chemie.de/search/?language=e>;

美国化工网 <http://www.chemindustry.com/>;

Google 化学资源目录 <http://directory.google.com/Top/Science/Chemistry/>;

Open Directory 的化学资源目录 <http://www.dmoz.org/Science/Chemistry/>;

中国化工信息网 <http://www.cheminfo.gov.cn>;

中国精细化工网 <http://www.chemfindecom/>或 <http://www.finechem.com.cn>;

化学视窗 <http://www.chemwindow.net/index.asp>;