

本书系第二版,是编者根据多年来工作中查阅化学化工信息的经历和讲授化学化工文献信息课的经验而编写的。

本书试图为读者检索和利用化学化工传统文献信息和网络信息提供一种方便快捷的途径。全书的主要内容为传统化学化工文献资源、Internet 化学化工信息资源、美国《化学文摘》的介绍(中英文对照)、各类化学化工大型工具书与网上图书馆简介、国际国内核心期刊网址与论文检索工具使用指南、专利知识及免费专利文献查阅方法、生物药学相关资源等。此外,还介绍了化学论文的撰写方法与在线投稿指南,以及化学软件的下载与使用方法。为便于读者查阅并能迅速通过网络获得化学化工信息,在有关章节中还提供了大量相关网络资源地址。

本书适合作为高等院校化学、化工、生物医药及相关专业学生的教材,也适用于化学化工科技工作者及化学爱好者,同时,对从事生物医学领域研究的科技工作者也很有帮助。

图书在版编目(CIP)数据

化学化工信息及网络资源的检索与利用/王荣民主编. —2 版. —北京:化学工业出版社,2007.5
高等学校教材
ISBN 978-7-122-00177-1

I. 化… II. 王… III. ①化学-计算机网络-情报检索-高等学校-教材②化学工业-计算机网络-情报检索-高等学校-教材 IV. G354.4

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007)第 041889 号

责任编辑: 窦 臻

文字编辑: 李姿娇

责任校对: 宋 夏

装帧设计: 何玉凤 史利平

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 刷: 大厂聚鑫印刷有限责任公司

装 订: 三河市延风装订厂

787mm×1092mm 1/16 印张 18 $\frac{3}{4}$ 字数 483 千字 2007 年 5 月北京第 2 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: 30.00 元

版权所有 违者必究

第二版编写人员名单

主 编 王荣民

编写成员 何玉凤 冯华 孙丽萍 吴翠娇 宋鹏飞

第一版编写人员名单

主 编 王荣民

副 主 编 何玉凤 徐敏 王君玲

编写成员 陈汝芬 周建峰 刘 蒲 冯 华 王云普

第二版前言

在《化学化工信息及网络资源的检索与利用》第一版出版至今的数年时间里，互联网在我国迅速普及，网络资源极大丰富，几乎渗透到科学技术的方方面面。在化学化工的各个领域中，网络资源除了能够部分替代传统文献资源外，还出现了基于网络的许多新功能。目前，化学科技工作者不但可以通过网络获取文献资源，而且可以检索网络数据库、下载化学课件，也可以进行网络投稿与审稿、查询和订购试剂及仪器等。鉴于此，我们编写了《化学化工信息及网络资源的检索与利用》第二版。

本书第一版自出版后，受到了广大读者的普遍欢迎与好评，多次重印，被中国书刊发行业协会评为“2003 年度全国优秀畅销书（科技类）”并荣获第八届中国石油和化学工业优秀图书奖。第二版保持了第一版原有宗旨：兼顾传统化学文献知识和 Internet 网络资源，又有助于提高三种能力，即查阅文献能力、化学信息处理能力、论文写作能力。在编写中，力求突出以下主要特色：

（1）介绍了各类网络化学化工信息资源的检索途径与方法。其中网络资源绝大多数是免费资源，特别适合于普通上网用户。

（2）在各部分增加了一些专业网站的使用方法，介绍如何巧妙地利用免费网站查阅专业知识，如在第 3 章增加了“如何使用试剂仪器网站查询参数”。

（3）提供了在化学化工信息检索时必要的术语和工具，使本书可作为手册使用，如将一些专业术语以中英文对照的形式给出，为查阅英文资源提供便利，使初学者能够较快入门；提供了国际、国内核心刊物中英文名称和网址，以及各类化学化工大型工具书简介；介绍了专利基本知识及专利文献术语；介绍了化学论文撰写的要求与方法以及网络投稿等知识，并配有实例供参考。

（4）介绍了生物医学信息，为跨学科查阅文献的读者提供便捷途径。

（5）提供了化学软件的免费下载地址、完全版购买途径，并介绍了它们的使用方法，使初学者可以自己绘制分子结构图和进行数据处理。

（6）在各章节中提供了大量相关网络资源地址，以便读者迅速通过网络获得化学化工信息。

本书的编写分工为：何玉凤教授编写了第 2 章、第 7 章、第 9 章及第 4 章、第 5 章部分内容，孙丽萍博士编写了第 3 章、第 4 章、第 6 章部分内容，宋鹏飞博士编写了第 5 章、第 6 章部分内容，吴翠娇博士编写了第 8 章内容，冯华编写了第 3 章、第 10 章部分内容，王荣民编写了第 1 章并负责全书内容的策划与审定。另外，白林教授、王彦斌副教授提出了宝贵意见，李岩、毛娟娟、贾如琰、李芳蓉、唐丽华、赵明、郝二霞、王燕、张慧芳等同学参与了网址的校对。

由于当前 Internet 网还处于完善时期，有些网站地址也在发生变化，敬请读者注意。限于编者水平，书中不免有疏漏之处，恳请读者见谅。

编者

此为试读, 需要完整PDF请访问: www.ertongbook.com 2007 年 1 月

第一版前言

当今时代是一个信息时代，信息对于经济和社会的发展、科技文化的进步都起着重要的作用。谁掌握了最新信息，谁就掌握了主动性。

随着科学技术突飞猛进的发展，新的科技文献迅速增加。化学因与其他众多学科交叉，而成为中心科学，化学文献数量在 20 世纪后半叶得到迅猛增加，如美国《化学文摘》(CA) 当前每卷收录文摘已达到 37 万多条。要从如此巨大的化学化工信息源中获取所需信息，必须借助适当的工具才有可能实现。

计算机的普及，特别是自 20 世纪 90 年代以来，Internet 在我国的迅猛发展，使化学信息的查阅日趋方便、快捷。以往的化学文献教材已难以满足广大化学工作者对信息查阅的要求。但是，Internet 网所提供的信息主要集中在近十余年，因此，它并不能完全取代传统的检索手段。为此，编者在多年科研中查阅化学信息和讲授《化学文献》课的基础上，编撰本书。

本书既兼顾传统化学文献知识和 Internet 网络资源，又有助于加强三种能力——查阅文献能力、化学信息处理能力、论文写作能力的训练与提高。主要特色如下。

(1) 介绍各类网络化学信息资源的检索途径与方法。其中网络资源绝大多数是免费资源，特别适合于普通上网用户。

(2) 详细介绍美国“化学文摘”收录的主要内容与使用方法（包括“化学文摘”80 类分类的英、汉对照简介），使初学者能够较快入门。

(3) 提供了各类化学化工大型工具书及新书简介。介绍了专利知识及免费专利文献查阅方法。

(4) 介绍了论文撰写的要求与方法，并配有实例供参考。

(5) 提供化学软件的免费下载地址、完全版购买途径，介绍了使用方法。使读者可以自己绘制一些分子结构图和进行数据处理。

(6) 在各章节中提供了大量相关网络资源地址，以便读者迅速通过网络获得化学化工信息。将一些专业术语以中英文对照的形式给出，为查阅英文资源提供便利条件。

由于当前 Internet 网处于迅速发展和不断完善的时期，个别网站也在发生变化，因此本书中所介绍的有些网址可能会发生变动，读者如果发现网站无法登录，可以通过大型搜索引擎（如“google”、“百度”等）键入网站名称，查询新的网址，敬请读者注意。另外，书中不免有疏漏之处，恳请读者见谅。

全书共分 10 章，其中，何玉凤编写了第 2、第 7、第 9 章及第 4、第 5 章部分内容，徐敏编写了第 8 章，王君玲编写了第 4、第 6 章部分内容，陈汝芬编写了第 10 章，周建峰编写了第 6 章部分内容，刘蒲编写了第 3 章部分内容，冯华编写了第 3、第 5 章部分内容。何玉凤、徐敏、王君玲、王云普参与了本书的审定。王荣民编写了第 1 章并负责全书内容的策划与审定。

编者

2003 年 1 月

目 录

第 1 章 化学化工信息及网络基础知识	1
1.1 化学化工信息	1
1.1.1 基本概念	1
1.1.2 化学化工信息与化学化工文献	2
1.1.3 化学信息学简介	2
1.1.4 Internet 与化学化工信息	3
1.1.5 当代化学化工文献信息的特点	4
1.2 化学化工信息的分类	5
1.2.1 按加工层次分类	5
1.2.2 按出版形式分类	5
1.2.3 按载体分类	6
1.3 化学化工信息的检索与利用	6
1.3.1 信息检索工作的目的和意义	6
1.3.2 信息检索的概念与类型	6
1.3.3 文献检索的基本原理	7
1.3.4 化学信息的检索途径	7
1.3.5 化学信息的检索方法	8
1.3.6 化学信息的检索步骤	9
1.3.7 文献的搜集与积累	9
1.3.8 文献的鉴别与筛选	10
1.3.9 文献的加工与整理	10
1.4 查阅化学化工文献注意事项	10
1.4.1 记录要完全	10
1.4.2 充分利用现有条件	11
1.4.3 交叉补充	11
1.4.4 原文转换	11
1.4.5 阅读时重点突出	11
1.5 计算机网络基础知识	12
1.5.1 计算机网络的分类	12
1.5.2 Internet 网	12
1.5.3 Internet 地址	13
1.5.4 Internet 常用功能	13
1.6 电子邮箱 (E-mail) 的功能	15
第 2 章 传统化学化工文献资源与检索工具	16
2.1 手工检索工具	16
2.1.1 检索工具的基本结构	16
2.1.2 检索工具的类型	17
2.1.3 中文印刷版检索工具	17
2.2 国内外主要文摘	20
2.2.1 国内主要文摘	20
2.2.2 国外主要文摘	21
2.3 SCI、EI、ISTP 简介	23
2.3.1 美国《科学引文索引》(SCI)	23
2.3.2 美国《工程索引》(EI)	24
2.3.3 美国《科学技术会议录索引》 (ISTP)	27
2.4 中国科学引文数据库	28
2.5 科技图书、期刊、专利文献	29
2.5.1 科技图书	29
2.5.2 期刊	29
2.5.3 专利文献	29
2.6 学位论文	29
2.6.1 概述	29
2.6.2 学位论文检索系统	30
2.6.3 ProQuest 博士论文数据库	31
2.7 会议文献	31
2.7.1 概述	31
2.7.2 国外会议文献检索工具	32
2.7.3 中国学术会议文献检索	32
2.7.4 会议文献网络资源	33
2.7.5 会议文献的原文索取	34
2.8 科技报告	34
2.8.1 概述	34
2.8.2 美国四大科技报告	35
2.8.3 美国科技报告的检索	36
2.8.4 技术报告相关网站	36
2.8.5 科技报告的原文索取	38
2.9 标准文献	38

2.9.1 国际标准与其他常用国外标准 及其检索	38	2.9.4 标准文献的索取	41
2.9.2 国内技术标准	39	2.10 技术档案	41
2.9.3 标准文献网络或光盘检索	39	2.11 产品样本和说明书	42
		2.12 政府出版物及法律法规	42

第3章 Internet 化学化工资源 44

3.1 Internet 化学化工信息的类型	44	3.5 政府、科研、教育机构与组织	61
3.2 网络化学化工信息的查找方法	45	3.5.1 政府、科研、教育机构	61
3.2.1 通过综合网站或搜索引擎网站 查找	45	3.5.2 学会	62
3.2.2 利用网络实名、InternetExplore 搜索项直接查找	47	3.5.3 化学化工科研院所	63
3.2.3 通过化学化工专业搜索引擎查找	48	3.6 科普、教育信息	64
3.3 重要化学化工专用网站与搜索引擎	48	3.6.1 国内网站	64
3.3.1 国内网站与搜索引擎	48	3.6.2 国外网站	64
3.3.2 国外网站与搜索引擎	50	3.7 会议、讨论等信息	65
3.4 Internet 数据库	53	3.8 试剂、仪器及设备信息	66
3.4.1 怎样在 Internet 上查找有关化学 数据库资源	53	3.8.1 国内试剂厂商	66
3.4.2 Internet 化学化工数据库介绍	55	3.8.2 国际公司	67
3.4.3 利用网络查找化合物的物理参数	60	3.8.3 仪器设备	68
		3.8.4 综合	69
		3.8.5 如何使用试剂仪器网站查询 参数	70

第4章 美国《化学文摘》(CA) 72

4.1 概况	72	4.4.9 登记号索引	114
4.1.1 发展历史、卷期沿革	72	4.4.10 化学文摘社来源索引 (CASSI)	115
4.1.2 特点	72	4.4.11 索引指南	115
4.2 《化学文摘》的分类及简介	73	4.5 CA 检索途径及实例	115
4.2.1 CA 分类类别	73	4.5.1 CA 检索途径	115
4.2.2 《化学文摘》分类(80类)简介	75	4.5.2 检索实例	116
4.3 《化学文摘》著录格式	97	4.6 《化学文摘》常用字符	117
4.3.1 期刊论文	97	4.6.1 黑本式(Hepburn)罗马字母(作者 姓名、刊名)转译日文字母 (片假名)	117
4.3.2 会议录和汇编	98	4.6.2 英文字母转译俄文字母	118
4.3.3 技术报告	98	4.6.3 语种的缩写与全称对照	118
4.3.4 学位论文	99	4.6.4 《化学文摘》索引文摘号前常用 的缩写和符号	118
4.3.5 新书及视听资料	99	4.6.5 科技文献本身的术语简写	119
4.3.6 电子预印版	99	4.6.6 《化学文摘》出版物中常用的 缩写和符号	119
4.3.7 专利文献	99	4.7 网络检索《化学文摘》	123
4.3.8 交叉参考	100	4.7.1 通过化学文摘社(CAS)主页 直接检索	123
4.4 《化学文摘》索引及其使用	100	4.7.2 通过CA镜像站点检索	124
4.4.1 关键词索引	101	4.7.3 通过《化学文摘》光盘检索	124
4.4.2 作者索引	101		
4.4.3 主题索引	105		
4.4.4 普通主题索引	105		
4.4.5 化学物质索引	107		
4.4.6 分子式索引	110		
4.4.7 专利索引	112		
4.4.8 环系索引	114		

第5章 工具书与网上图书信息 126

5.1 概述	126	5.3 网上图书馆、在线图书手册使用	
5.1.1 科技图书	126	实例	138
5.1.2 图书分类	127	5.3.1 中国国家图书馆	138
5.1.3 化学化工类工具书	127	5.3.2 超星数字图书馆	139
5.1.4 化学化工类工具书与 CA	128	5.4 化学化工综合性工具书	141
5.2 网上图书馆、书店、在线图书手册	128	5.4.1 文摘、索引和书目	141
5.2.1 国内著名网上图书馆	129	5.4.2 专用词典	141
5.2.2 国外著名网上图书馆	130	5.4.3 百科全书	143
5.2.3 网上国外特色图书馆	131	5.4.4 手册	144
5.2.4 在线图书手册	131	5.5 无机化学、分析化学类工具书	145
5.2.5 图书、期刊出版社	133	5.6 有机化学、高分子化学类工具书	149
5.2.6 网上书店	134	5.7 物理化学、化学工程类工具书	152
5.2.7 NIST 网络化学手册	135	5.8 放射化学、生物化学、环境化学和	
5.2.8 Beilstein Information Systems	137	材料化学类工具书	155

第6章 期刊检索与全文下载 157

6.1 概述	157	6.4.4 限定检索结果	170
6.1.1 科技期刊的特点	157	6.4.5 作者检索	170
6.1.2 出版周期	157	6.4.6 注册个人用户名和密码	171
6.1.3 科技期刊的类型	157	6.5 ISI——国际核心期刊论文摘要与	
6.1.4 期刊的评价	158	全文下载	171
6.1.5 电子期刊与期刊网络版	158	6.5.1 Web of Science 数据库简介	171
6.1.6 电子期刊与期刊网络版的获取		6.5.2 SCI 的作用	171
途径	159	6.5.3 ISI 的免费网站	172
6.2 论文摘要与全文检索、下载方法	159	6.5.4 SCIE 数据库检索方法	172
6.2.1 通过出版社或编辑部公开的期刊		6.6 无数据库用户如何收集全文	175
网站下载	159	6.6.1 使用中科院国家数字图书馆	
6.2.2 通过期刊论文数据库网站下载	162	CSDL 全文传递服务系统	175
6.3 中国知网——中文期刊论文全文		6.6.2 中国科学院文献情报中心	176
下载	163	6.7 国际核心期刊 (SCI)	177
6.3.1 通过中国知网免费检索摘要	164	6.7.1 SCI 收录的中国期刊	177
6.3.2 通过中国期刊网下载全文	164	6.7.2 SCI 收录的化学化工类国外	
6.4 Scopus——国际期刊论文摘要与		期刊	179
全文下载	167	6.8 国内核心期刊	189
6.4.1 Scopus 首页	167	6.8.1 内地出版的核心期刊认定	189
6.4.2 查看检索结果	167	6.8.2 化学化工相关重要期刊	189
6.4.3 详细查看检索结果	168	6.8.3 化学教育类重要期刊	191

第7章 专利申请与在线检索 192

7.1 专利知识与相关网站	192	7.1.3 专利综合信息网站	194
7.1.1 基本概念	192	7.2 中国专利申请	195
7.1.2 专利制度的实施	193	7.2.1 专利具备的条件	195

7.2.2 专利类型及其特点	196	7.5.2 《世界专利索引》的特点	205
7.2.3 专利申请注意事项	196	7.5.3 德温特公司的 WPI 符号体系	206
7.2.4 专利申请程序	196	7.5.4 德温特公司的 WPI 索引体系	206
7.2.5 不给予专利的情况	197	7.5.5 《化学专利索引》(CPI)	207
7.2.6 中国专利实例——发明专利 申请公开说明书样张	197	7.5.6 联机版、光盘版及网络版德温特 《世界专利索引》体系	207
7.2.7 中国专利文献概况	200	7.6 专利文献的网络检索方法	208
7.2.8 中国人如何向国外申请专利	200	7.6.1 中国专利信息检索系统	208
7.3 专利文献及其查阅途径	201	7.6.2 美国专利	210
7.3.1 专利文献	201	7.6.3 欧洲专利	211
7.3.2 专利文献的查阅途径	202	7.6.4 日本专利	213
7.4 国际专利分类法	202	7.6.5 加拿大专利	213
7.4.1 概述	202	7.6.6 世界知识产权组织	213
7.4.2 专利说明书中的常见术语、著录 项目识别号码	203	7.6.7 其他重要的专利检索入口	213
7.5 《世界专利索引》	204	7.7 快速获取专利文献	213
7.5.1 德温特出版公司及其出版物 概况	204	7.7.1 专利下载软件	214
		7.7.2 阅读专利文献所用软件	214

第 8 章 Internet 生物医药信息资源——215

8.1 生物医药信息网站	215	8.3.2 著者检索	227
8.1.1 生物医学综合信息网站	215	8.3.3 刊名检索	227
8.1.2 重要的生物医药搜索引擎	219	8.3.4 日期或日期范围检索	227
8.2 Internet 生物医药数据库	220	8.4 PubChem 检索实例	228
8.2.1 国外重要数据库	220	8.5 Internet 生物医学期刊	231
8.2.2 国内数据库	223	8.5.1 出版社与图书馆	231
8.3 Pubmed 检索方法简介	225	8.5.2 与生物医药相关的著名期刊	232
8.3.1 主题词检索	225		

第 9 章 学术论文撰写及网上投稿——234

9.1 学术论文结构及撰写要求	235	9.2.2 述评性论文	245
9.1.1 论文标题	235	9.3 研究性论文	247
9.1.2 作者的署名	235	9.3.1 实验性研究论文	247
9.1.3 作者单位和地址	236	9.3.2 理论性研究论文	247
9.1.4 作者简历	236	9.4 教学论文	251
9.1.5 摘要	236	9.4.1 教学论文类型	251
9.1.6 关键词	238	9.4.2 教学技术研究论文	252
9.1.7 分类号	238	9.4.3 知识介绍论文	253
9.1.8 前言	239	9.5 学位论文与毕业设计说明书	254
9.1.9 正文部分	239	9.5.1 毕业设计说明书	254
9.1.10 结论	242	9.5.2 学位论文概述	255
9.1.11 致谢	242	9.5.3 研究生学位论文的基本内容和 规格	256
9.1.12 参考文献	243	9.6 网上投稿	257
9.1.13 附录	244	9.6.1 中文刊物在线投稿	257
9.2 综述性和述评性论文	244	9.6.2 国外刊物在线投稿	258
9.2.1 综述性论文	244		

9.7 校对符号	259
第 10 章 化学软件下载及使用方法	261
10.1 化学相关软件类型	261
10.1.1 通用型软件	261
10.1.2 结构绘制、构型观察软件	262
10.1.3 谱库图库软件	262
10.1.4 化学实验软件	262
10.1.5 化学工程软件	262
10.2 化学软件及相关网站	263
10.2.1 综合网站	263
10.2.2 软件厂商网站	263
10.2.3 专业网站	264
10.3 常用化学软件介绍	265
10.3.1 化学结构绘制软件	265
10.3.2 三维结构观察软件	266
10.3.3 化学计算软件	267
10.3.4 化学实验软件	268
10.3.5 其他化学软件	270
10.4 在线化学软件简介	271
10.5 利用 ChemWindow 绘制结构式	272
10.5.1 界面	273
10.5.2 菜单和工具栏	273
10.5.3 分子结构的绘制	274
10.6 利用 ChemSketch 绘制立体结构	275
10.6.1 安装与启动	275
10.6.2 菜单和工具栏	276
10.6.3 分子结构的绘制	277
10.6.4 简图的绘制	278
10.6.5 3D Viewer 的使用	279
10.7 量子化学计算程序	280
10.7.1 HyperChem 程序应用简介	280
10.7.2 用 HyperChem 程序进行水中质子的从头计算	280
10.7.3 用 HyperChem 程序进行氦振动态和转动态的从头计算	282
综合练习题	283
练习一	283
练习二	283
练习三	284
附录	286
附录 1 希腊字母	286
附录 2 罗马数字表	286
附录 3 国际单位制中米制采用的字首	286
附录 4 化学名称常用数字字首	287
附录 5 系统命名中常见基团的词头、词尾名称对照表	287
参考文献	288

第 1 章

化学化工信息及网络基础知识

1.1 化学化工信息

当今时代是一个信息时代，信息对于经济和社会的发展、科技文化的进步都起着重要的作用。在这个信息时代中，谁掌握了最新信息，谁就掌握了主动性。信息是日常生活中常见的现象，知识、情报和文献首先应当属于信息的范畴。

1.1.1 基本概念

(1) 信息 (Information) 从字面上理解，信即信号，息即消息，通过信号带来消息就是信息。信息具有差异和传递两要素。没有差异不是信息，如两端加相同电压的导线没有电流通过，即不产生信息；同样，即使有差异但不经过传递，也不形成信息。信息是物质存在的反映，不同的物质各自发出不同的信息。根据发生源的不同，信息一般可分为自然信息、生物信息、机器信息和人类信息四大类。本书中讲到的“信息”一词属于“人类信息”的范畴。信息本身是看不见、摸不着的，它必须依附于一定的物质形式，即载体，如文字、声波、电磁波等。

(2) 知识 (Knowledge) 知识是人们在社会实践中积累起来的经验，是对客观世界物质形态和运动规律的认识。人们在社会实践中不断接受客观事物发出的信号，经过人脑的思维加工，逐步认识客观事物的本质，这是一个由表及里、由浅入深、由感性到理性的认识过程。所以，知识的产生来源于信息，是通过信息传递并对信息进行加工的结果。由此可以看出，知识是信息的一部分。

(3) 文献 (Document) 文献是记录有用知识的一种载体。凡是用文字、图形、符号、声频、视频记录下来，具有存储和传递知识功能的一切载体都称为文献。

(4) 情报 (Information, Intelligence) 情报是被传递的知识，它是针对一定对象的需要传递的，并且是在生产实践和科学研究中起继承、借鉴或参考作用的知识。情报是知识的一部分，即被传递的部分。知识要转化为情报，必须经过传递并为使用者所接受才能发挥其使用价值。

西方学者习惯于把文献情报与自然信息等同，而把有关国家安全之类的情报叫做 Intelligence，但 Intelligence 最常用的却是智力、聪明的意思。中文的“情报”一词，则把文献信息与有关敌情的信息混淆，尽管同时存在着现成的“谍报”一词。其实“情报”的说法，正是我们的长处，可专门用来指文献信息。因此编者认为，大可不必一纸公文将所有的“情报”悉数改去。

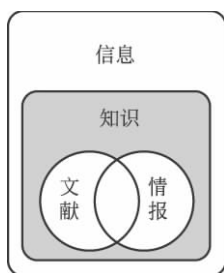


图 1-1 信息、知识、文献和情报之间的关系

信息、知识、文献和情报之间的关系可以用图形来表示，见图 1-1，从图形可以更直观地了解四者之间的关系。

近年来，随着信息技术的飞速发展，电子出版物大量涌现，使文献、情报、信息这三者之间趋向统一，逐渐淡化了三者概念上的差别，尤其在国际交往中情报与信息是同一概念，所以目前在国内科技界已倾向于用“信息”一词替代“情报”、“文献”。

1.1.2 化学化工信息与化学化工文献

狭义地看，化学化工信息即化学化工文献，是人们从事与化学化工有关的生产、科学实验及社会实践的记录，是科技信息的重要组成部分。它汇集了世代无数科技工作者的劳动结晶，积累了大量有用的事实、数据、理论、定义、方法、科学构思和假设，记载了成功的经验和失败的教训，是反映科学技术的进展和水平的重要标志。广义地看，化学化工信息除了传统化学化工文献所承载的信息外，还包括化学化工及其相关领域的商务信息、远程教学、远程会议与在线交流、网络上的其他信息等。

信息的传递主要靠口授、传抄或通讯联系来进行。17 世纪末科学协会相继成立，为了促进会员之间的学术交流、推广新的发明创造，开始创办科技期刊，其中 1665 年创刊的 *Philosophical Transaction of the Royal Society*（英国皇家学会哲学汇刊）是世界上最早出版的科技期刊。1778 年出版了第一种化学期刊 *Crell's Chemisches Journal*。17 世纪后半期和 18 世纪，各资本主义国家相继成立了专利局，审理创造发明，于是出现了专利文献。到 20 世纪 60 年代，科学技术高速发展，科技文献急剧增加，其中化学文献数量的递增速度在各门学科中始终占据着领先的地位。

1.1.3 化学信息学简介

现代科学的发展使得各学科所面对的化学物质体系变得越来越复杂，辨识研究的任务也越来越繁重，其中既有复杂成分定性定量分析问题，又有不确定性的化学模式识别问题；不但有大型数据库管理问题，还有数据规律的发现问题等。化学信息学（Chemoinformatics）就是为解决化学领域中大量数据处理和信息提取任务而结合其他相关学科所形成的一门新学科。这门新学科是在化学计量学（Chemometrics）和计算化学（Computational Chemistry）的基础上演化和发展起来的，吸收与融合了许多学科的精华。化学计量学的发展随着计算机技术的引进，使化学家获得大量的化学数据成为易事。例如，人们可以在对样品一无所知的情况下，从分析仪器的计算机数据采集系统获得诸如峰高、峰位、峰面积等一系列数据。然而，数据并非等同于信息，尤其是有价值的信息。因此，如何利用现代计算工具与信息处理方法快速地处理和解析化学量测数据，成为一个十分迫切的需求。在这种情况下，出现了将数学、统计学与计算机技术应用于化学的化学计量学。作为在 20 世纪 80 年代蓬勃兴起的新

技术,化学计量学运用数学、统计学、计算机技术等工具设计或选择化学量测的最优方法,处理与解析化学量测数据,试图最大限度地提取待测物质体系的化学相关信息。

迄今为止,化学信息学还没有统一的、被广泛接受的定义与内涵。目前,狭义的化学信息学研究工作主要包括如下内容。

(1) 化合物登记 (Compound Registration) 包括将每一个化合物的立体化学参数、相关光谱数据 (如 NMR)、纯度数据 (如 HPLC)、各种生物活性测定数据等各种相关数据动态组合在数据库中。

(2) 构效关系的研究工具和技术 包括应用各种软件建立各种构效关系模型,其中使用了多种化学计量学方法。

(3) 虚拟数据库组装技术 (Virtual Database Assembly) 通过计算化学方法组合各种基元化学分子结构和片段,虚拟合成大量的候选化合物,然后在这样一个虚拟化合物库中筛选目标药物分子。

(4) 数据库挖掘技术 (Database Mining) 主要是从大量的候选分子中寻找出所需要的药物分子,一般通过亚结构 (Substructure)、二维结构或三维结构相似性度量、分子形状 (Shape)、框架 (Framework)、药效团等来进行搜索,或者根据受体和配体之间的三维结构进行药物三维空间筛选。

(5) 统计方法和技术 统计方法和技术如主成分分析、因子分析等被广泛地用来进行分子描述因子 (Descriptor) 的减维,从而可以更加简单有效地表述分子信息并降低计算的复杂程度。

(6) 大型数据的可视化表达 在化学信息学的研究中需要对成千上万个分子的构效关系模型进行表达,若通过图表的方式用计算机程序自动进行数据的过滤和表达则有利于分析。

广义的化学信息学包括以下内容。

(1) 化学、化工文献学 传统方式的和电子与网络时代的文献信息检索与个人资料管理。

(2) 化学知识体系的计算机表示、管理与网络传输 化学结构、化学反应的计算机表示,化学数据库技术,化学信息的网际通讯语言。

(3) 化学图形学 化学信息可视化和虚拟技术、化工制图。

(4) 化学信息的解析与处理 化学实验设计、实验数据处理、图谱的分辨与解析、生物分子的信息解析、多元分析与数据挖掘技术。

(5) 化学知识的计算机推演 结构与性质关系、分子及其聚集体系的计算与模拟、分子与材料设计、化学反应的分析与设计、化工过程计算与仿真、专家系统。

(6) 化学教育与教学的现代技术与远程信息资源。

需要注意,“化学信息”与“化学信息学”两个概念的侧重点不同,化学信息中包含化学文献。本书其他部分使用“化学化工信息”这一术语,目的是突出化学信息学中的化工部分。

1.1.4 Internet 与化学化工信息

Internet 是当今世界上最大的信息传播媒介,它通过计算机把世界上各个单位与个人联系在一起,把学习者、教育者、研究人员联系在一起,共享各种信息资源,被称为信息高速公路。Internet 信息资源极其丰富,随着图书情报、出版界进入网络化、电子图书馆虚拟化的时代,化学化工信息的数量日趋增加,形式也呈现多样化。

Internet 极大地影响着化学化工信息的检索与交流,在线文献检索、在线数据库检索、在线交流、远程学习和远程计算都已经成为现实。因此,在信息时代,对化学化工文献、化

学化工数据仅仅以传统的方式处理和传递已不再适应实际需要，必须学习运用计算机处理化学化工信息，通过互联网传递化学化工信息。

Internet 上的化学化工资源具有数量大、更新快等特点，通过 Internet 检索各类化学化工资源已经成为一种十分重要的手段。但是，网络化学化工资源发展并不完善，有些信息源费用较高。因此，不能忽视传统的化学化工信息资源与检索方法。

1.1.5 当代化学化工文献信息的特点

(1) 数量庞大，增长迅速 目前世界各国的科技出版物在种类、数量、出版速度、出版形式等各方面都以飞跃的速度向前推进。尖端科学的文献增加速度更快。图 1-2 为美国《化学文摘》1907~2006 年收录文摘数量的数据。

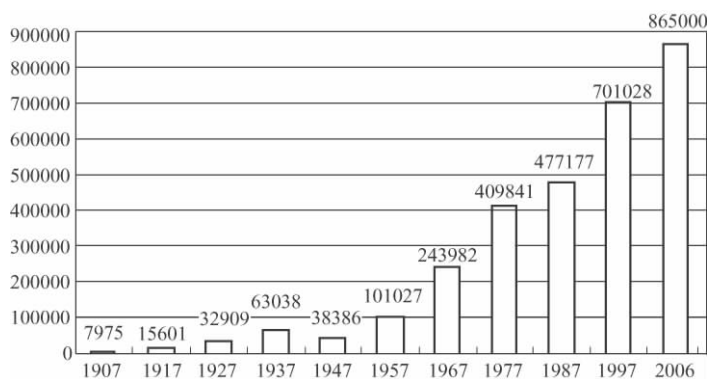


图 1-2 美国《化学文摘》1907~2006 年收录文摘数量

(2) 种类繁多 科技文献按内容分为图书、期刊、论文、科技报告、政府出版物、专利文献、技术标准、学位论文、产品样本和说明书以及网络信息等。按载体，除了传统的印刷品以外，还有直感资料（录音带、录像带、缩微出版品、磁带、科技电影、幻灯片、唱片等）。近年来，基于 Internet 的网络文献信息发展异常迅速，大有赶超印刷品之势。

(3) 语种扩大，译文增多 随着科学技术交流程度的不断加深，世界各国的科学技术得到普遍发展，科技文献的语种在扩大。为了克服语言障碍，便于科技文献的利用，世界各国进行了大量的翻译工作，全世界翻译书的种数占图书出版物种数的 10% 以上。大量的著作还拥有不同的译本。加拿大在专利说明书方面，与外国重复的有 87.2%，其中同美国重复的占 2/3 以上。科技文献的这种交叉重复的现象，给文献的检索与利用增添了纷繁的特点。

(4) 内容重复交叉、分布分散 同一文献往往由一种类型转为另一种类型。例如，各国科学技术报告中大部分内容都在期刊上发表。许多学位论文和学术会议文献，常以期刊论文或单行本出现。

由于传统的学科界限不断被打破，不同学科之间相互渗透，研究课题一方面不断专门化，因而对文献的要求不断深化；另一方面，涉及面越来越广，从而对文献要求也有日益广泛、全面的趋势。由于现代科学技术综合交错，彼此渗透，使文献的专业性质不十分固定，发表的文献也比较分散。

(5) 内容的新陈代谢、自然淘汰速度较快 现代科学技术的发展日新月异，随着时间的推移，旧的材料不断被新的材料所代替，不成熟的观点逐渐被成熟的观点所代替，不完善的方法逐渐被比较完善的方法所代替。因而科技文献也随之产生新旧更替、自然淘汰的现象，其中以技术标准最为典型。

1.2 化学化工信息的分类

1.2.1 按加工层次分类

确定一篇文献为几次文献，只是根据文献的加工层次，而不是根据其形式。如在科技期刊上发表的论文，有可能是三次文献。化学化工信息按加工层次的分类见表 1-1。

表 1-1 化学化工信息按加工层次的分类

零次文献	形成一次文献之前的文献。如原始实验数据、手稿等。零次文献是非常重要的文献，一般都是保密级的
一次文献	即原始文献，凡是以作者本人的研究成果为依据写作的，未经情报加工的论文称为一次文献。一般的期刊论文、研究报告、学位论文、会议资料及专利说明书都是一次文献。一次文献是文献的主体，是最基本的情报源，是文献检索最终查找的对象
二次文献	即所谓检索工具，是指将一次文献即分散的、无组织的原始资料经过加工整理，介绍文献特征，摘取内容要点，成为系统的文献，以便读者查找与利用，如书目、索引、文摘等。可以作为一次文献的线索
三次文献	是指通过二次文献，选用一次文献内容而编写出来的成果。如专题评述、动态综述、进展报告、数据手册、百科全书等。三次文献一般附有大量参考文献，也是查找一次文献的重要途径

从一次文献到二次、三次文献，是一个由分散到集中、由无组织到系统化的过程。对于文献检索来说，查找一次文献是主要目的；二次文献是检索一次文献的手段和工具；三次文献可以让人们对某个课题有一个广泛的、综合的了解。

一般来说，一次文献发表在前，二次文献发表在后。但由于文献越来越多，近来有些出版物首先以文摘形式予以报道，或者只刊登文摘，不刊登全文，因此一次文献与二次文献的关系也在发生变化。

1.2.2 按出版形式分类

以下 11 种文献（见表 1-2）基本上包括了主要的文献类型，是人们获得科技情报的主要来源。在传统的化学化工文献中，内容的介绍是按照这种方式排列的。

表 1-2 化学化工信息按出版形式的分类

科技图书	科技图书(Books)是对已发表的科研成果、生产技术或经验，或者某一知识领域系统地论述或概括
期 刊	期刊(Periodicals)又可称为杂志(Journal 或 Magazine)。一般是指具有固定题名、定期或不定期出版的连续出版物
科技报告	科技报告(Reports)是关于某项研究成果的正式报告，或者是对研究过程中每个阶段进展情况的实际记录
专利文献	专利文献(Patents)主要指专利说明书，它是专利申请人向政府递送的说明新发明创造的书面文件
学位论文	学位论文是指作者为取得专业资格的学位而撰写的介绍自己研究结果的文献。学位论文在美国称为 Dissertation(Diss.)，在英国称为 Thesis
会议文献	会议文献(Proceedings)也称会议资料，有学术会议的报告、记录、论文集及其他文献，包含了大量的一次文献
标准文献	标准文献(Standards)是指技术标准、技术规范和技术法规等
技术档案	技术档案(Technical Depositeds)是指具体工程建设及科学技术部门在技术活动中形成的技术文件、图纸、图片、原始技术记录等资料
政府出版物	政府出版物(Government Publications)是各国政府部门及其所属的专门机构发表、出版的文件
产品资料	产品资料通常指产品样本、产品目录(Catalogs)及产品说明书，其中产品说明书是对定型产品的性能、构造原理、用途、使用方法和操作规程、产品规格等所作的说明
数据库	数据库(Database)是以网络为基础的信息源，除包括上述十大情报源以外，还有化学物质的结构、图谱、性质等信息

各种类型的文献各有特点，各有所用。例如了解学科领域的背景资料，宜利用图书资料作为入门指导；进行科学研究则主要利用期刊杂志；探讨最新的研究领域，则多半参考科技报告；研究生做论文，可以参考国内外高等院校有关的学位论文；掌握科技动态，主要利用会议资料；开展技术革新，新产品试制，往往参考专利文献；定型产品的设计和检验，侧重于技术标准；购买仪器设备，需要参考产品资料。

1.2.3 按载体分类

随着电子技术的发展，出版物的形式已经“走出铅与火，走进光与电”，更多地采用声像型和数字存储型。化学化工信息按载体的分类见表 1-3。

表 1-3 化学化工信息按载体的分类

印刷型	包括铅印、油印、胶印等,有书本式、卡片式
缩微型	是以感光材料为存储介质,以缩微照相为记录手段的文献形式。主要包括缩微胶卷等高倍率的复制文献
声像型	运用录音、录像的技术,给人一种直观的感觉,主要包括唱片、录音带、录像带、电影片、幻灯片、多媒体光盘 VCD 等
机读型	现在的许多文献资料,已经由数字磁盘存储转向采用数字光盘的存储方式(CD-ROM 光盘),由于 CD-ROM 光盘存储量大(每片 650 兆字节)、寿命长(达 100 年)、携带方便,因此许多大型文献库都采用此方式存储
网络信息	有国际网络、局域网。信息量大,周期短,用户可以得到几分钟甚至几秒钟以前产生的所有信息,而且节省纸张和投递费用。电子出版物,是其中一小部分可以通过网络系统向入网的用户发行的一种刊物。这种方式发行的刊物,内容与印刷版不同,通过 Internet 网络可以阅读,如《化学通报》就有网络版

此外，按流通范围可分为公开发行、内部发行和秘密。

1.3 化学化工信息的检索与利用

1.3.1 信息检索工作的目的和意义

近代和现代科学史的大量事实证明，没有科学上的继承和借鉴，就没有提高；没有科学上的交流和综合，就没有发展。科学上的继承和借鉴、交流和综合，在当代的物质条件下，主要是通过文献检索来实现的。从许多实践经验看，科学研究中出现的各种问题，包括基础研究、应用开发研究，几乎有 95%~99%需要而且可以通过科技文献检索获得启发、帮助和解决，而完全靠自己的创造性劳动来解决的问题仅占 1%~5%。

查阅科技文献，进行调查研究，可以使人们减少重复劳动，避免或少走弯路，吸取别人的经验教训。现代科学技术不断向宏观和微观的深度和广度进军，人们越来越迫切地需要精确、及时、方便地获取各种有效的科技情报。面对着浩如烟海的文献资料，十分急需能打开这无限“宝库”的一把“钥匙”，即检索工具和检索方法。正如美国《化学文摘》的封面上写着的一句话，称其为“打开世界化学文献宝库的钥匙”。

在几十年前，化学工作者用于文献检索的时间比例最多达 61%，最少有 15%。现在，随着计算机和计算机网络的发展，用 Internet 检索可以节省大量的时间，检索的范围和检索的成功率也大大提高。

1.3.2 信息检索的概念与类型

信息检索（Information Retrieval）是指将信息（文献信息）按一定的方式组织、存储

起来,并针对用户的需要查找出所需信息的过程。因此从广义上讲,信息检索包含了信息的存储和检索两个不可分的部分。而通常所讲的信息检索,是指狭义概念的信息检索,即从检索工具和检索系统中查找出所需信息的过程。

信息检索根据其检索对象的不同,可分为文献检索、数据检索、事实检索。其中,文献检索是三者中最基本、最主要的方式。一般来说,文献检索是信息检索的基本检索,它要比数据检索和事实检索困难,主要通过检索工具达到检索目的;数据检索和事实检索是信息检索的派生检索,主要通过工具书来达到检索目的。

在实际工作中,往往把“信息检索”与“文献检索”混同使用,这主要是针对不同侧面而言的。当强调检索的目的时,所谓“信息检索”,即通过各种检索系统查找出所需的信息;当强调检索的手段时,所谓“文献检索”,即从文献型检索系统中查找出所需的文献型信息。信息检索包含了文献检索,文献检索是信息检索最重要的类型。

1.3.3 文献检索的基本原理

文献检索的基本原理就是利用检索标识与文献的存储标识相比,如果能够取得一致,就叫“匹配”,就可得到“命中文献”。图1-3提示了文献检索、检索工具及文献检索系统的一般构成和系统原理。

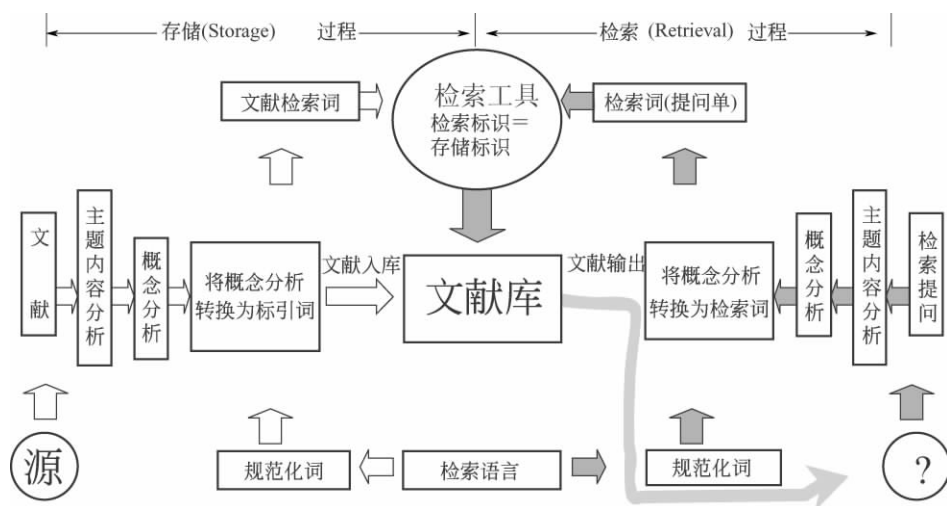


图 1-3 文献检索系统模型图

1.3.4 化学信息的检索途径

1.3.4.1 按检索设备分类

(1) 手工检索 即传统的利用卡片式或书本式的目录、文摘等检索工具检索情报。

(2) 计算机检索 将存储有大量文献信息的数据库软盘、磁带、磁盘机和光盘,通过计算机的检索软件系统进行检索。以个人计算机为终端的网络检索已经很普及。

(3) 缩微文献检索 即把缩微胶卷或缩微平片作为情报存储的载体,使用相应的光学阅读装置或电子技术设备进行检索。

1.3.4.2 按文献外表特征的检索途径分类

该途径在网络信息查阅中十分便捷。

(1) 文献名称途径 从书名、刊名、篇名等文献名称入手可以查到具体文献。

(2) 作者姓名途径 可以从作者目录或作者索引查寻。作者途径的特点是：专业科技人员一般是各有所专的，尤其是在某些专业领域里的知名学者、专家、权威，他们的文章一般都代表一定的水平和动向，通过作者线索，可以连续地发现和掌握他们研究的情况。在同一作者的姓名下，集中内容相近或内容间有逻辑关系的文献，可以查寻某作者最新的论著。因此在一定程度上，可以引导查到同类或相关的文献。这种途径的缺点是作者姓名受到国别、文种、风俗习惯的不同而变化多样，如姓就有单姓、复姓、婚姻改姓、父母姓连写等；名有单名、多名、教名、父名等；有的姓在前，有的名在前；还有用不同文字书写的姓名要有“转译”的问题（如英、俄对译，日语罗马字母化等）。

(3) 文献序号途径 许多文献有固定注册的编号，如专利说明书编有专利号，技术标准有标准号，科技报告有报告号，文献收藏单位有馆藏号、索取号、排架号等。需先借助其他途径，了解有关信息的号码。

1.3.4.3 按文献内容特征的查阅途径分类

(1) 分类途径 目前一般采用图书分类法。它是按照一定的观点和法则，以科学分类为基础运用概念划分的方法，将知识分门别类划分列表。每一大类又按一定标准分为若干类，每一类又划分为若干小类、子目、细目等，逐级以扇面式展开，构成一个许多概念项目在上下、左右、前后之间有一定逻辑联系的类属体系，用以组织文献检索系统。通过这种途径能把同一学科的文献信息集中在一起检索出来，但缺点是边缘学科、前沿学科在分类时往往难于处理，查找不便。

(2) 主题词、关键词途径 所谓主题词，是指表示文献内容主题旨意的、经过规范化的名词或词组。主题词不一定完全出现在论文的题目中，而是指文献内容的概括性的基本词。关键词是从文献的题目、正文或摘要中选出的，表征文献主题内容的具有实际意义的词汇。检索时，按字顺就可以找到主题词。

(3) 分子式途径 按化合物分子符号排列。这种途径对于具体的化合物检索速度较快。

1.3.5 化学信息的检索方法

化学信息的检索方法大体有以下几种类型。

1.3.5.1 直检法

即直接检索法，它是通过浏览查阅原始文献，直接获取所需文献的方法。

1.3.5.2 引文法

又叫追溯法。利用文献末尾所附的“参考文献”进行追溯查找，见图 1-4。在没有成套检索工具或检索工具很不齐全的条件下，用此方法，可以查得一批有关文献。其缺点是：原文引用的参考文献是很有限的，不可能列出全部有用文献，而且有的文献参考价值不大。

1.3.5.3 工具法

又称常用法，是查找文献的主要方法。它又可细分为以下三类。

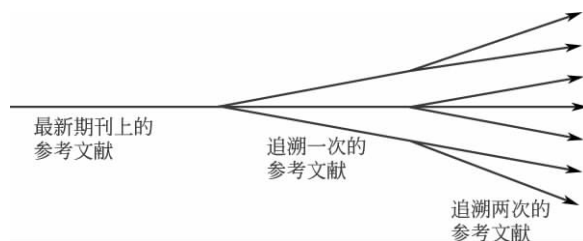


图 1-4 追溯法示意图