中图分类号:学校代码:10055UDC:密级:公开

有阁大 字 博士学位论文

现代绿色化学中的物理有机问题
——酵母菌催化反应机理和咪唑类离子液体酸度的研究
Physical Organic Concerns in Green Chemistry: Mechanistic
Aspects of Baker's Yeast Mediated Reduction and Measurements
of Acidity of Imidazolium Ionic Liquids

论文作者	指导教师
申请学位	培养单位
学科专业	研究方向
答辩委员会主席	评 阅 人

南开大学研究生院

二〇一三年三月

南开大学学位论文使用授权书

根据《南开大学关于研究生学位论文收藏和利用管理办法》,我校的博士、硕士学位获得者均须向南开大学提交本人的学位论文纸质本及相应电子版。

本人完全了解南开大学有关研究生学位论文收藏和利用的管理规定。南开大学拥有在《著作权法》规定范围内的学位论文使用权,即: (1) 学位获得者必须按规定提交学位论文(包括纸质印刷本及电子版),学校可以采用影印、缩印或其他复制手段保存研究生学位论文,并编入《南开大学博硕士学位论文全文数据库》; (2) 为教学和科研目的,学校可以将公开的学位论文作为资料在图书馆等场所提供校内师生阅读,在校园网上提供论文目录检索、文摘以及论文全文浏览、下载等免费信息服务; (3) 根据教育部有关规定,南开大学向教育部指定单位提交公开的学位论文; (4) 学位论文作者授权学校向中国科技信息研究所和中国学术期刊(光盘)电子出版社提交规定范围的学位论文及其电子版并收入相应学位论文数据库,通过其相关网站对外进行信息服务。同时本人保留在其他媒体发表论文的权利。

非公开学位论文,保密期限内不向外提交和提供服务,解密后提交和服务同公开论文。 论文电子版提交至校图书馆网站: http://202.113.20.161:8001/index.htm。

本人承诺:本人的学位论文是在南开大学学习期间创作完成的作品,并已通过论文答辩;提交的学位论文电子版与纸质本论文的内容一致,如因不同造成不良后果由本人自负。本人同意遵守上述规定。本授权书签署一式两份,由研究生院和图书馆留存。

作者暨授权人签字	:			_
	20	年	月	日

南开大学研究生学位论文作者信息

论文题目	现代绿色化学中的物理有机问题							
姓 名		学号					答辩日期	
论文类别	博士■	学历硕:	± 0	硕士	专业学	⋭位□	」 高校教师 [」 同等学力硕士 🗆
院/系/所				专	业			
联系电话				En	nail			
通讯地址(邮	编):							
备注:								

注:本授权书适用我校授予的所有博士、硕士的学位论文。由作者填写 (一式两份) 签字后交校图书馆,非公开学位论文须附《南开大学研究生申请非公开学位论文审批表》。

南开大学学位论文原创性声明

本人郑重声明: 所呈交的学位论文,是本人在导师指导下进行研究工作所取得的研究成果。除文中已经注明引用的内容外,本学位论文的研究成果不包含任何他人创作的、已公开发表或者没有公开发表的作品的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体,均已在文中以明确方式标明。本学位论文原创性声明的法律责任由本人承担。

学位论文作者签名: _	 年	月	日

非公开学位论文标注说明

根据南开大学有关规定,非公开学位论文须经指导教师同意、作者本人申请和相关部门批准方能标注。未经批准的均为公开学位论文,公开学位论文本说明为空白。

论文题目								
申请密级	□限制(≤2年)		秘密 (≤10 年)	□机智	蔤 (≤20	年)	
保密期限	20	年	月	日至 20	年	月	日	
审批表编号				批准日期	20	年	月	日

南开大学学位办公室盖章 (有效)

限制 □ 2年(最长2年,可少于2年)

秘密□10年(最长5年,可少于5年)

机密 □20 年 (最长10年,可少于10年)

中文摘要

这里输入中文摘要。

中文摘要 ABF

关键词: 毕业论文; 模板

Abstract

This is the abstract.

Key Words: Thesis; template

目录

中文摘要		I
Abstract	II	Ι
第一章 南	可开大学学位论文格式宏包 NKThesis 使用说明	1
第一节	系统要求	1
第二节	NKThesis 使用说明	1
第三节	中英文间隔	1
第四节	NKThesis 预调用的宏包	2
第五节	图表	2
第六节	字体	2
第七节	参考文献	2
第八节	一些建议	3
第九节	T _E X 简介	7
第二章 说	色明 12	3
第三章 T	he Tikz Package · · · · · · 1	5
参考文献		7
致谢		9
个人简历		1

第一章 南开大学学位论文格式宏包 NKThesis 使用说明

第一节 系统要求

CTEX 2.9 或者 TeX Live 2011 及以后版本.

第二节 NKThesis 使用说明

本模板可以使用以下两种方式编译:

- 1. PDFLATEX
- 2. X元ATeX[推荐]

例如,

pdflatex main

biber main % 处理参考文献

pdflatex main % 连续编译两遍,

pdflatex main %以生成正确的文献引用。

本模板用到宋体、楷体、仿宋、黑体四种字体. 若需重新配置字体, 请修改 NKTfonts.cfg. 对于 Linux/Mac 下的 TeX Live 2009, 可能需要设置环境变量 OSFONTDIR, 具体内容请参考 texmf.cnf.

我们建议您使用 X-LETEX 编译。与前两种方法相比,X-LETEX 编译长文档的速度更快,编译一篇一百多页的论文只需几秒的时间 (SL9400 @ 1.86GHz)。

在改变编译方式前应先删除 *.toc 和 *.aux 文件,因为不同编译方式产生的辅助文件格式可能并不相同。

注意: 使用 X_HAT_EX 编译时, X_HT_EX 的版本应不低于 0.9995.0(MiKTeX 2.8 或者 TeXLive 2009)。

第三节 中英文间隔

使用 X-LATEX 编译时,会自动在中英文转换时添加必要的空格。使用 [PDF]LATEX 编译时仅忽略中文之间的空格,而中英文之间的空格予以保留。因

此,不管何种编译方式,您都不需要在中英文间添加~以获得额外的空格。例如,

这是 English 中文 x = y 测试

这是 English 中文 x = y 测试

可以看出,以上两行用 XTIATEX 编译的结果是相同的。

第四节 NKThesis 预调用的宏包

NKThesis 已经调用以下宏包,您无须重新调用。

表 1.1 NKThesis 预调用的宏包

编译方式	调用的宏包
XALATEX	xeCJK, CJKnumb, graphicx, mathptmx
[PDF]LATEX	CJK, CJKnumb, uniGBK, graphicx, mathptmx

第五节 图表

插图的例子:

有副大學

图 1.1 南开大学

第六节 字体

一般情况下, 您不需要显式地设置字体. 如果确实需要, 请使用以下命令

宋体: \rmfamily\upshape 或 \songti

黑体: \bfseries 或 \heiti 楷体: \itshape 或 \kaiti

仿宋: \ttfamily 或 \fangsong

加粗: \jiacu

第七节 参考文献

参考文献引用: [1-3] [4-6][7-11] [4, Theorem 2.1]

1.7.1 录入参考文献

本模板采用 biblatex 宏包管理参考文献。如果你对此不熟悉,可以

- 1. 参考宏包使用说明,或者
- 2. 手工排版参考文献, 然后参考 nkthesis-gbk.bib 最后 3 条的格式录入。

第八节 一些建议

1.8.1 关于分数的写法

LATEX 提供宏命令\frac,用以打印分数.为使得版面整齐,该命令的使用应遵循以下原则:

- 1. 仅在分行表达式中使用,
- 2. 不嵌套使用,
- 3. 不在上下标中使用.

也就是说, 行内表达式和上下标中出现分数时一律用 a/b 表示, 如 $(x + 2)/((3x^2 + 4)(7 + y))$. 下面是居中表达式:

$$x^2 = y^{1/2} + 3.$$

多行表达式: 尽量在加、减、乘、等号前换行. 在乘号前换行时, 下一行首用 \times:

$$|(W_{\psi_{1}}f)(a,b) - (W_{\psi_{1}}f)(a_{j},b_{j,k})|^{2}$$

$$= \frac{1}{C_{\varphi}^{2}} \left| \iint_{\mathcal{G}} (W_{\varphi}f)(s,t) \right|^{2}$$

$$\times \left((W_{\psi_{1}}\varphi) \left(\frac{a}{s}, \frac{b-t}{s} \right) - (W_{\psi_{1}}\varphi) \left(\frac{a_{j}}{s}, \frac{b_{j,k}-t}{s} \right) \right) \frac{dsdt}{s^{d+1}} \right|^{2}$$

$$\leq \frac{1}{C_{\varphi}^{2}} \iint_{\mathcal{G}} |(W_{\varphi}f)(s,t)|^{2}$$

$$\times \left| (W_{\psi_{1}}\varphi) \left(\frac{a}{s}, \frac{b-t}{s} \right) - (W_{\psi_{1}}\varphi) \left(\frac{a_{j}}{s}, \frac{b_{j,k}-t}{s} \right) \right| \frac{dsdt}{s^{d+1}}$$

$$\times \iint_{\mathcal{G}} \left| (W_{\psi_{1}}\varphi) \left(\frac{a}{s}, \frac{b-t}{s} \right) - (W_{\psi_{1}}\varphi) \left(\frac{a_{j}}{s}, \frac{b_{j,k}-t}{s} \right) \right| \frac{dsdt}{s^{d+1}}$$

$$= \frac{1}{C_{\varphi}^{2}} \dots$$

$$(1.1)$$

1.8.2 标点

科技文献中一般用半角标点,请参考《中国科学》发表的论文. 如果使用全角标点,可以使用

\punctstyle{<style>}

选择标点样式,有效值为

quanjiao (所有标点符号占一个汉字宽度,

相邻两个标点占一个半汉字宽度)

banjiao (所有标点符号占半个汉字宽度)

hangmobanjiao (所有标点符号占一个汉字宽度, 行末行首半角)

kaiming (句号、叹号、问号占一个汉字宽度,其他标点占半个汉字宽度) 缺省为全角式。注意:不论选择哪种样式,都提供行末对齐 (margin kerning)功能。

定理 1.1 ETFX 的输出是最完美的.

先证明一个引理

引理1.2 TFX 文件在不同操作系统下的排版结果完全一致.

单个带编号的表达式

$$x = y + z \tag{1.2}$$

单个不带编号的表达式

$$y = x - z$$
.

不带编号的多行表达式

$$x = y + z$$

 $= z - s$
 $< 3.$
一些注释

带编号的多行表达式

$$x = y - z, (1.3)$$

$$y = x + z,$$

$$z = y - x.$$
(1.4)

引用: 定理1.1的推论是什么呢? 方程式编号: 由 (1.2)(1.4) 式.

1.8.3 列举环境: enumerate

环境 enumerate 已经被改写,增加了一个可选参数 [字符串],用以控制所进。例如,

\begin{enumerate}

\item This is an example.

\item This is an example.

\begin{enumerate}

\item This is an example.

\item This is an example.

\end{enumerate}

\end{enumerate}

\begin{enumerate}[Mn]%字符串"Mn"的宽度为增加的缩进。

% 缺省值为 [M]

\item This is an example.

\item This is an example.

\begin{enumerate}[Mnn]%字符串"Mnn"的宽度为增加的缩进。

\item This is an example.

\item This is an example.

\end{enumerate}

\end{enumerate}

的输出为

- 1. This is an example.
- 2. This is an example.
 - (a) This is an example.
 - (b) This is an example.
 - 1. This is an example.
 - 2. This is an example.

- (a) This is an example.
- (b) This is an example.

第九节 TeX 简介

以下内容是 milksea@bbs.ctex.org 撰写的关于 T_EX 的简单介绍。注意这不是一个入门教程,不讲 T_EX 系统的配置安装,也不讲具体的 LAT_EX 代码。这里仅仅试图以一些只言片语来解释:进入这个门槛之前新手应该知道的注意事项,以及遇到问题以后该去如何解决问题。

1.9.1 什么是 $T_E X/I \Delta T_E X$, 我是否应该选择它

T_EX 是最早由高德纳(Donald Knuth)教授创建的一门标记式宏语言,用来排版科技文章,尤其擅长处理复杂的数学公式。T_EX 同时也是处理这一语言的排版软件。I^ET_EX 是 Leslie Lamport 在 T_EX 基础上按内容/格式分离和模块化等思想建立的一集 T_EX 上的格式。

 T_EX 本身的领域是专业排版(即方正书版、InDesign 的领域),但现在 T_EX/LaT_EX 也被广泛用于生成电子文档甚至幻灯片等, T_EX 语言的数学部分偶 尔也在其他一些地方使用。但注意 T_EX 并不适用于文书处理(MS Office 的领域,以前和现在都不是)。

选择使用 TeX/LATeX 的理由包括:

- 免费软件;
- 专业的排版效果:
- 是事实上的专业数学排版标准;
- 广泛的西文期刊接收甚或只接收 LaTeX 格式的投稿;

• • • • • •

不选择使用 TFX/LYTFX 的理由包括:

- 需要相当精力学习;
- 图文混合排版能力弱;
- 仅流行于数学、物理、计算机等领域;
- 中文期刊的支持较差;

•••••

请尽量清醒看待网上经常见到的关于 T_EX 与其他软件的优劣比较和口水战。 在选择使用或离开之前,请先考虑 T_EX 的应用领域,想想它是否适合你的需要。

1.9.2 我该用什么编辑器?

编辑器功能有简有繁,特色不一,从简单的纯文本编辑器到繁复的 Emacs,因人而易。基本功能有语法高亮、方便编译预览就很好了,扩充功能和定制有无限的可能。初学者可以使用功能简单、使用方便的专用编辑器,如 TeXWorks、Kile、WinEdt 等,或者类似所见即所得功能的 LyX; 熟悉的人可以使用定制性更强的 Notepad++、SciTE、Vim、Emacs 等。这方面的介绍很多,一开始不妨多试几种,找到最适合自己的才是最好的。

另外提醒一句,编辑器只是工作的助力,不必把它看得太重。一些编辑器有极为繁杂的功能,一些编辑器常常会引来黑客们的论战(如 Emacs 与 Vim)。为工作,别为这些浪费太多精力,适用即可。

1.9.3 我该去哪里寻找答案?

- 0、绝对的新手,先读完一本入门读物,了解基本的知识。
- 1、无论如何, 先读文档! 绝大部分问题都是文档可以解决的。
- 2、再利用 Google 搜索,利用 (bbs.ctex.org) 版面搜索。
- 3、清楚、聪明地提出你的问题。

1.9.4 我应该看什么 LAT_EX 读物?

这不是一个容易回答的问题,因为有许多选择,也同样有许多不合适的选择。这里只是选出一个比较好的答案。更多更详细的介绍可以在版面和网上寻找(注意时效)。

近两年 T_EX 的中文处理发展很快,目前没有哪本书在中文处理方面给出一个最新进展的合适综述,因而下面的介绍也不主要考虑中文处理。

- 1. 我可以阅读英文
 - (a) 我要迅速入门: ltxprimer.pdf (LaTeX Tutorials: A Primer, India TUG)
 - (b) 我要系统学习: A Guide to LaTeX, 4th Edition, Addison-Wesley 有机械工业出版社的影印版(《LaTeX 实用教程》)
 - (c) 我要深入学习:要读许多书和文档,TeXbook 是必读的
 - (d) 还有呢? 去读你使用的每一个宏包的说明文档
 - (e) 还有许多专题文档,如讲数学公式、图形、表格、字体等
- 2. 我更愿意阅读中文

- (a) 我要迅速入门: Inotes.pdf (LaTeX Notes, 1.20, Alpha Huang)
- (b) 我要系统学习:《LaTeX2ε 科技排版指南》,邓建松(电子版)如果不 好找,看《LaTeX 入门与提高》第二版,陈志杰等
- (c) 我要深入学习: TeXbook0.pdf(特可爱原本, TeXbook的中译, xianxian)
- (d) 还有呢? 英语,绝大多数 TeX 资料还是英文的

1.9.5 什么知识会过时?什么不会?

T_EX 是排版语言,也是广泛使用的软件,并且不断在发展中;因此,总有一些东西会很快过时。作为学习 T_EX 的人,免不了要看各种各样的书籍、电子文档和网络论坛上的只言片语,因此了解什么知识会迅速过时,什么知识不会是十分重要的。

最稳定的是关于 Primitive T_EX 和 Plain T_EX 的知识,也就是 Knuth 在他的《The TeXbook》中介绍的内容。因为 T_EX 系统开发的初衷就是稳定性,要求今天的文档到很久以后仍可以得到完全相同的结果,因此 Knuth 限定了他的 T_EX 语言和相关实现的命令、语法。这些内容许多年来就没有多少变化,在未来的一些年里也不会有什么变化。Primitive T_EX 和 Plain T_EX 的知识主要包括 T_EX 排版的基本算法和原理,盒子的原理,底层的 T_EX 命令等。其中技巧性的东西大多在宏包设计中,初学者一般不会接触到很多;而基本原理则是常常被提到的,譬如,T_EX 把一切排版内容作为盒子(box)处理。

相对稳定的是关于基本 LATEX 2_{ε} 的知识,也包括围绕 LATEX 2_{ε} 的一些核心宏包的知识。LATEX 2_{ε} 是自 1993 年以来的一个稳定的 LATEX 版本,直到最近的一次修订(2005 年)都没有大的变动。LATEX 的下一个计划中的版本 LATEX 3 遥遥无期,在可预见的将来,LATEX 2_{ε} 不会过时。LATEX 2_{ε} 的知识是目前大部分 LATEX 书籍的主体内容。关于 LATEX 的标准文档类(article、report、book、letter、slide等),关于基本数学公式的输入,文档的章节层次,表格和矩阵,图表浮动体,LR 盒子与段落盒子······这些 LATEX 的核心内容都是最常用的,相对稳定的。与LATEX 2_{ε} 相匹配的核心宏包,如 graphics(x)、ifthen、fontenc、doc 等,也同样是相对稳定的。还有一些被非常广泛应用的宏包,如 amsmath 系列,也可以看作是相对稳定的。

简单地说,关于基本 T_EX/L^AT_EX 的语言,都是比较稳定的。与之对应,实现或者支持 T_EX/L^AT_EX 语言的软件,包括在 T_EX/L^AT_EX 基础上建立的新的宏,都不大稳定。

容易过时的是关于第三方 LATEX 宏包的知识、第三方 TEX 工具的知识,以及新兴 TEX 相关软件的知识等。TEX 和 LATEX 语言是追求稳定的;但无论是宏包还是工具,作为不断更新软件,它们是不稳定的。容易过时的技术很多,而且现在广泛地出现在几乎所有 LATEX 文档之中,因此需要特别引起注意:宏包的过时的原因可能是宏包本身的升级换代带来了新功能或不兼容,也可能是同一功能的更新更好的宏包代替了旧的宏包。前者的典型例子比如绘图宏包 PGF/TikZ,现在的 2.00 版功能十分强大,和旧的 1.1x 版相差很大,和更旧的 0.x 版本则几乎完全不同;后者的典型例子比如 caption 宏包先是被更新的 caption2 宏包代替,后来 caption 宏包更新又使得 caption2 宏包完全过时。——安装更新的发行版可以避免使用过旧的宏包;认真阅读宏包自带的文档而不是搜索得到的陈旧片断可以避免采用过时的代码。

工具过时的主要原因也是升级换代和被其他工具替换。前者的典型例子是编辑器 WinEdt 在 5.5 以后的版本支持 UTF-8 编码,而旧版本不支持;后者的典型例子是中文字体安装工具从 GBKFonts 到 xGBKFonts 到 FontsGen 不断被取代。图形插入是一个在 TEX 实现、宏包与外围工具方面都更新很快的东西。在过去,最常用的输出格式是 PS(PostScript)格式,因此插入的图像以 EPS 为主流。使用 Dvips 为主要输出工具,外围工具有 GhostScript、bmeps 等等,相关宏包有 graphics 等,相关文档如《LaTeX2e 插图指南》。

但凡提及"ETEX 只支持 EPS 图形"的,就是这个过时的时代的产物。事实上 TEX/ETEX 并不限定任何图形格式,只不过是当时的输出格式(PS)和工具(Dvips)对 EPS 情有独钟而已。后来 PDF 格式成为主流,pdfTeX、DVIPDFM、DVIPDFMx、XeTeX 等工具则主要支持 PDF、PNG、JPG 格式的图形,涉及一系列工具如 ImageMagick、ebb 等。

值得特别提出注意的就是,中文处理也一起是更新迅速、容易过时的部分。而且因为中文处理一直没有一个"官方"的"标准"做法,软件、工具、文档以及网上纷繁的笔记也就显得相当混乱。从八十年代开始的 CCT 系统、天元系统,到后来的 CJK 方式,到近来的 X云TEX、LuaTeX 方式,中文处理的原理、软件、宏包、配置方式等都在不断变化中。

1.9.6 插图格式

前面提到,LATEX 主要支持 EPS 格式的插图文件,而 PDFLATEX 则更喜欢 PDF、PNG、JPG 格式的图形。为解决兼容性,最新版的 PDFLATEX 会自动把 EPS

文件转换为 PDF 文件。因此,使用 EPS 格式的插图可能具有最广泛的通用性。

1.9.7 LATEX 作图

目前已经有很多优秀的 LATEX 作图宏包,如 pgf/Tikz 和 pstricks,两者都具有强大的作图能力。

第二章 说明

本模板参照南开大学学位论文写作规范编写,仅仅提供了论文的基本格式,包括章节标题和正文字体、字号等等的设置。

您自愿使用这个模板。提供本模板的目的是为了给您的论文写作带来方便, 然而,作者不保证这个模板完全符合学校的要求,也不对由此产生的任何后果 负责。如果您不同意这些条款,请不要使用这个模板。

参考文献的录入请参考第七节。

第三章 The Tikz Package

The PDF package, where ``PDF" is supposed to mean ``portable graphics format" (or ``pretty, good, functional" if you prefer...), is a package for creating graphics in an ``inline" manner. It defines a number of TEX commands that draw graphics. For example, the code \tikz \draw (Opt,Opt) -- (20pt,6pt); yields the line and the code \tikz \fill[orange] (1ex,1ex) circle (1ex); yields .

In a sense, when you use PDF you ``program" your graphics, just as you ``program" your document when you use TEX. You get all the advantages of the ``TEX-approach to typesetting" for your graphics: quick creation of simple graphics, precise positioning, the use of macros, often superior typography. You also inherit all the disadvantages: steep learning curve, no wysiwyg, small changes require a long recompilation time, and the code does not really ``show" how things will look like.

参考文献

- [1] 陈建军,车建文,陈勇. 具有频率和振型概率约束的工程结构动力优化设计. 计算力学学报,2001,18(1):74~80.
- [2] Nadkarni M. A., Nair C. K. K., Pandey V. N., et al. Characterization of alphagalactosidase from corynebacterium murisepticum and mechanism of its induction. J Gen App Microbiol, 1992, 38: 223 ~ 234.
- [3] 华罗庚, 王元. 论一致分布与近似分析: 数论方法 (I). 中国科学, 1973, (4): 339~357.
- [4] 竺可桢. 物候学. 北京: 科学出版社, 1973.
- [5] 霍夫斯塔主编; 胡祥壁译. 禽病学: 下册. 第7版. 北京: 农业出版社, 1981: 798~799.
- [6] Nadkarni M A, Nair C K K, Pandey V N, et al. Characterization of alpha-galactosidase from corynebacterium murisepticum and mechanism of its induction. J Gen App Microbiol, 1992, 38: 223 ~ 234
- [7] 姜锡洲.一种温热外敷药制备方案.中国:88105607.3.July 26, 1989.
- [8] Timoshenko S. P. Theory of plate and shells. 2nd ed. New York: McGraw-Hill, 1959: $17 \sim 36$.
- [9] 张全福,王里青."百家争鸣"与理工科学报编辑工作.见:郑福寿.学报编辑论丛:第2集.南京:河海大学出版社,1991:1~4.
- [10] 丁光莹. 钢筋混凝土框架结构非线性反应分析的随机模拟分析: [博士学位论文]. 上海: 同济大学, 2001
- [11] 全国文献工作标准化技术委员会第六分委员会. GB 6447-86 文摘编写规则. 北京:中国标准出版社,1986

致谢

感谢您使用本模板。

个人简历