

美国《化学文摘》

电子计算机情报检索 用户手册

化学工业部科学技术情报研究所

目 录

一、概论

1. 电子计算机情报检索的意义
2. 电子计算机情报检索服务方式
3. 电子计算机情报检索的特点

二、CA磁带介绍

1. CA Search
 - 1.1 CA Search 主题范畴及分类
 - 1.2 CA Search 数据项
 - 1.3 CA Search 题录段数据项
 - 1.4 CA Search 索引方针
 - 1.5 CA Search 关键词段数据项
 - 1.6 CA Search 普通主题索引段数据项
 - 1.7 CA Search 化学物质索引段数据项
 - 1.8 CA Search 索引语言
2. CBAC, POST
3. CIN

三、系统检索功能

1. 检索处理过程
2. 检索项
3. 逻辑算符
4. 截词符号

四、提问检索式的编制

1. 对提问式的要求
2. 编制提问式的内容
3. 检索策略实例讨论
4. 检索效率问题

附 件

CA数据库常用缩写表
原文语种代码对照表
希腊字母在磁带中的转译形式
特殊符号在磁带中的转译形式
CAS出版物中的计量单位缩写

一、概论

1. 电子计算机情报检索的意义

所谓情报检索，就是要在浩如烟海的大量科技文献资料中，迅速从中查出针对性强，有参考价值的文献资料。科技工作者都深知文献资料的重要性。进行任何科研工作时，首先即需查找大量文献，了解与课题有关的前人成果；在整个过程中更需随时广泛收集有关情报资料，以掌握“已知”与“未知”的界限。目前每年发表的科技文献以百万篇计，数量大、类型多、来源广、更新快。以美国化学文摘（CA）为例，年摘录报道量已达40万—50万篇，收录范围涉及150个国家地区、56种文字、14000多种期刊、会议录、科学报告、学位论文、图书以及26个国家的专利说明书。所收录的文献量约占世界化学化工文献的98%。自1907年创刊至1980年摘录文献累积总数已达925万篇。显然这些文献资料是大量研究开发的成果，需要有效利用。有效利用的实质问题是如何从大量资料中迅速准确找出所需的情报。即使是浏览一下一年内发表的化学文献，化学家每周用40小时也要阅读48年！另外科学技术的发展，各学科相互渗透，人工查找已不能适应要求。解决问题的途径是建立情报检索系统，利用电子计算机处理大量情报资料。

情报检索系统通过电子计算机存贮大量情报建立数据库；运用逻辑检索功能，对所拥有的数据库进行高速度的情报检索。情报检索系统借助电子计算机进行检索服务，可以在几小时内为成百上千个研究课题，查找出世界各国上万种期刊中有关文献资料。这样就大大节省了成百上千名科研人员查阅资料的时间。假如每名科研人员因之节省了10%的时间，按1万名科研人员计算，就相当增加了一千名科研人员！从有助于缩短科研周期角度来看，与采用现代化的科学技术开发自然资源具有同等重要意义。

2. 电子计算机情报检索的服务方式

使用电子计算机开展情报检索服务的方式有定题情报检索和追溯检索两种。

定题情报检索（Selective Dissemination of Information）简称SDI。相当于代查现刊情报资料。是根据用户所预定的检索内容，定期从新到的文献资料中检出有关情报，连续主动向用户提供有关检索内容的最新情报。此项服务适用于在研究进程中追踪同类专题的动态和进展。

追溯检索（Retrospective Search）简称RS。相当于普查过刊情报资料。是根据用户的要求从需求情报时起，追溯到过去某个时间止，进行一次性检索提供若干年内的有关情报资料。此项服务适用于开始新课题时，全面系统了解有关课题的文献线索。

电子计算机进行情报检索有两种处理方式：一种是批式处理，用户不直接使用计算机，而是由检索系统人员将用户提问积累成批进行检索，再分别向用户提供检索结果。一种是联机检索。用户直接使用终端与计算机的主机相联系，通过人机对话进行检索，立即获得情报资料。但需要设置终端设备和专用传输线路。

3. 电子计算机检索的特点

人工检索二次文献多是在有关课题所属的主题范畴分类中, 逐篇翻阅通过思维判断选择所需文献。或借助于索引查到相应文摘号, 再去查阅文摘。比如利用 CA 普通主题索引查找有关“蜂窝型催化剂”的资料。首先查出代表主题的索引标题“Catalysts and Catalysis”, 再在排列其下的说明语中查出“Honeycomb”。如图 1 所示。根据相应的文摘号 179986s, 25670m 去查阅文摘。检索结果表明此两篇文摘的索引中, 都同时包含有“Catalysts and Catalysis”及“Honeycomb”二者是符合要求的。

→	Catalysts and Catalysis
	⋮
	for ammonias synthesis
	R 535065, R 91028v
	iron-cobalt promoted by magnesium P 215275v
	⋮
	heteropoly acids R 18152a
	⋮
→	<u>honeycomb</u>
	for exhaust gases, alumium and Cr diffusian alloy for, P 179986s
	for nitrogen oxide removal from waste gases, spacing of, P 25670m

图 1 CAV94普通主题索引

用电子计算机检索的方法与人工借助索引查找的方法基本相似。不过计算机不识文字, 必需把书本文献的文字转换成计算机能识别的编码, 转录在磁性介质上。存贮在磁带(盘)上的情报信息就是计算机可阅读的文。自二次文献磁性存贮的数据库中查找情报, 提问也要转换成计算机可识别的逻辑式。检索时磁带(盘)上的情报信息和逻辑式比较, 一致时即为命中。

逻辑式用相当于刊物索引的检索项和逻辑算符组成。比如向情报检索系统查找有关“聚酰胺纤维或聚乙烯纤维的染色”的资料。可用下列逻辑式表达检索要求:

(Polyamide fibers + Polyethylene fibers) *dyeing 意即查找“既包含聚酰胺纤维或聚乙烯纤维检索项, 也包含染色检索项”的文献。这种使用逻辑式进行检索叫做逻辑检索。逻辑检索是情报检索系统的基本功能。

计算机检索迅速、准确。但也有可能出现误漏。计算机只能在预先严格规定的程序范围内自动运转, 不具有思维能力。如果输入程序有错。输出结果必定会有错。计算机的准确就在于忠实地按程序规定如实办理。计算机进行逻辑检索时的程序: 如在什么范围内、按什么顺序、依什么条件、比较那些词等: 都是通过提问逻辑式事先规定的。所以编制提问逻辑式的精确性就成为影响检索效果的关键。提问逻辑式的精确性取决于

- 是否准确表达检索要求的主题内容。
- 是否正确适应数据库的特点和索引体系。
- 是否有效利用系统的检索功能。

因之为了进行有效检索, 在检索前详细了解所使用的数据库的结构、特点和索引用法是非常必要的。

二、CA 磁带介绍

美国化学文摘服务社 (CAS) 在60年代初期即实现了编印过程自动化, 在使用计算机编制文摘索引过程中产生了CA磁带。1967年开始发行相应CA期刊的CAcon磁带。至1979年CAS发行磁带达到14种。1980年以后有所变更。1983年发行有8种:

- Chemical Titles (CT)
- CA Search
- Chemical-Biological Activities (CBAC)
- Polymer Science and Technology (POST)
- Chemical Industry Notes (CIN)
- CA Index Guide
- CAS Source Index (CASSI)
- Registry Nomenclature-structure Service

用于情报检索的磁带主要是CA Search、CBAC、POST及CIN。此四种磁带本系统均已引进。

1. CA Search

CA Search 是美国化学文摘服务社在1979年将CAcon (CA Condensats) 及CSIA (CA Subject Index Alert) 二种磁带合并而发行的, 是目前化学领域中主要的文献数据库。CA Search 与印刷本CA收录的内容相同、发行周期也相同。每年两卷、每卷26期。

1.1 CA Search 主题范畴及分类

面向化学是CA收录文献的主要基准。只有直接涉及化学化工并有新的重大意义的文献才是收录的对象。化学方面包括基本粒子、元素、化合物及其他化学物质的存在、组成、合成、结构、性质、反应和状态变化的研究; 以及与之有关的分析、检测方法和所需的装置。化学工程方面包括单元操作、单元工程、设备的设计以及有关机理。

有关讨论非化学目的的化学工程, 物质的物性试验、机械设备设计、临床医学的文献; 以及有关化工产品价格、市场数据、成本核算等经济信息CA均不收录。

CA收录的主题范畴几乎涉及理论化学和应用化学的各个方面。按化学主题分为五个部份, 80个类目。

- | | |
|----------------|--------|
| • 生物化学部份: | 1—20类 |
| • 有机化学部份: | 21—34类 |
| • 高分子化学部份: | 35—46类 |
| • 应用化学与化学工程部份: | 47—64类 |
| • 物理化学与分析化学部份: | 65—80类 |

80个主题范畴分类的内容1976年以来基本稳定较少变化。1982年进入第11次累积索引期间, CAS自97卷开始在维持原分类数目仍为80类情况下, 对各类包含的主题内容有所调整, 具体编排目次见表1。

表 1 CA 80 类目主题内容编排目录

生物化学

1. 药理学 (Pharmacology)
2. 哺乳动物激素 (Mammalian Hormones)
3. 生化遗传学 (Biochemical Genetics)
4. 毒物学 (Toxicology)
5. 农业化学的生物调节剂 (Agrochemical Bioregulators)
6. 普通生物化学 (General Biochemistry)
7. 酶 (Enzymes)
8. 辐射生物化学 (Radiation Biochemistry)
9. 生化方法 (Biochemical Methods)
10. 微生物生物化学 (microbial Biochemistry)
11. 植物生物化学 (Plant Biochemistry)
12. 非哺乳动物生物化学 (Nonmammalian Biochemistry)
13. 哺乳动物生物化学 (Mammalian Biochemistry)
14. 哺乳动物病理生物化学 (Mammalian Pathological Biochemistry)
15. 免疫化学 (Immunochemistry)
16. 发酵及生物工业化学 (Fermentation and Bioindustrial Chemistry)
17. 食品与饲料化学 (Food and Feed Chemistry)
18. 动物营养 (Animal Nutrition)
19. 肥料、土壤及植物营养 (Fertilizers, Soils, and plant Nutrition)
20. 化学、历史、教育及文献编纂 (History, Education and Documentation)

有机化学

21. 普通有机化学 (General Organic Chemistry)
22. 物理有机化学 (Physical Organic Chemistry)
23. 脂肪族化合物 (Aliphatic Compounds)
24. 脂环化合物 (Alicyclic Compounds)
25. 苯及其衍生物与稠环化合物 (Benzene, Its Derivatives, and Condensed Benzenoid Compounds)
26. 活性分子及其合成类似物 (Biomolecules and Their Synthetic Analogs)
27. 单杂原子杂环化合物 (Heterocyclic Compounds (one Hetero Atom))
28. 多杂原子杂环化合物 (Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom))
29. 有机金属与有机准金属化合物 (Organometallic and Organometalloidal Compounds)
30. 萜烯 (Terpenes and Terpenoids)
31. 生物碱 (Alkaloids)
32. 甾族化合物 (Steroids)
33. 碳水化合物 (Carbohydrates)
34. 氨基酸、肽及蛋白质 (Amino Acids, Peptides, and proteins)

高分子化学

35. 合成高分子化学 (Chemistry of Synthetic High Polymers)
36. 合成高分子物理性能 (Physical Properties of Synthetic High Polymers)
37. 塑料制造与加工 (Plastics Manufacture and Processing)
38. 塑料制品及其应用 (Plastics Fabrication and Uses)

39. 合成弹性体及天然橡胶 (Synthetic Elastomers and Natural Rubber)
40. 织物 (Textiles)
41. 染料、荧光增白剂及光敏剂 (Dyes, Fluorescent Brighteners, and Photographic Sensitizers)
42. 涂料、油墨及有关产品 (Coating, Inks and Related Products)
43. 纤维素、木质素、纸及其他木制品 (Cellulose, Lignin, Paper, and Other Wood Products)
44. 工业碳水化合物 (Industrial Carbohydrates)
45. 工业有机化学品、皮革、脂肪及蜡 (Industrial Organic Chemicals, Leather, Fats, and Waxes)
46. 表面活性剂、去垢剂 (Surface-Active Agents and Detergents)

应用化学与化学工程

47. 装置及工厂设备 (Apparatus and plant Equipment)
48. 单元操作及过程 (Unit Operations and Processes)
49. 工业无机化学品 (Industrial Inorganic Chemicals)
50. 推进剂及炸药 (Propellants and Explosives)
51. 矿物燃料、衍生物及有关产品 (Fossil Fuels, Derivatives, and Related Products)
52. 电化学、辐射、及热能技术 (Electrochemical, Radiational, and Thermal Energy Technology)
53. 矿物及地质化学 (Mineralogical and Geological Chemistry)
54. 提炼冶金学 (Extractive Metallurgy)
55. 黑色金属及合金 (Ferrous Metals and Alloys)
56. 有色金属及合金 (Nonferrous Metals and Alloys)
57. 陶瓷 (Ceramics)
58. 水泥、混凝土及有关建筑料材 (Cement, Concrete, and Related Building Materials)
59. 空气污染和工业卫生 (Air Pollution and Industrial Hygiene)
60. 废物的处理和清除 (Waste Treatment and Disposal)
61. 水 (Water)
62. 精油及化妆品 (Essential Oils and Cosmetics)
63. 药物 (Pharmaceuticals)
64. 药物分析 (Pharmaceutical Analysis)

物理化学与分析化学

65. 普通物理化学 (General Physical Chemistry)
66. 表面化学及胶体 (Surface Chemistry and Colloids)
67. 催化、反应动力学及无机反应机理 (Catalysis, Reaction Kinetics, and Inorganic Reaction Mechanisms)
68. 相平衡、化学平衡及溶液 (Phase Equilibriums, Chemical Equilibriums, and Solutions)
69. 热力学、热化学及热性能 (Thermodynamics, Thermochemistry, and Thermal Properties)
70. 核现象 (Nuclear Phenomena)
71. 核技术 (Nuclear Technology)
72. 电化学 (Electrochemistry)
73. 光、电能谱和质谱及其他有关性能 (Optical, Electron, and Mass Spectroscopy and Other Related Properties)

74. 辐射化学、光化学及摄影 和其他复象过程 (Radiation Chemistry, Photochemistry, and Photographic and Reprographic Processes)
 75. 结晶学及液晶 (Crystallography and liquid Crystals)
 76. 电现象 (Electric Phenomena)
 77. 磁现象 (Magnetic Phenomena)
 78. 无机化学品及反应 (Inorganic Chemicals and Reactions)
 79. 无机分析化学 (Inorganic Analytical Chemistry)
 80. 有机分析化学 (Organic Analytical Chemistry)
-

1.2 CA Search 数据项

CA Search 的主题范畴和分类与印刷本 CA 相同,但在收录的项目和编排的格式上都有所不同。未收录文摘项、而收录有印刷本期刊所未收录的卷索引项。编排格式是以一篇文献为单位,按 CA 编号顺序排列。每篇文献由若干记录段组成。记录段数由几个到几百不等。每篇文献的组成:

一个控制段:信息内容为文摘号、类目号、参见类目号。

一个题录段:信息内容相当印刷本题录部份。

若干关键词段:信息内容为本文的关键词索引,多可达40条,每一条目为一记录段。

若干化学物质段:信息内容为本文的化学物质索引,最多可达500条,每一条目为一记录段。

若干普通主题段:信息内容为本文的普通主题索引,最多可达15条,每一条目为一记录段。

每一记录段由若干数据项组成,数据项是最小情报信息单元。就如同用化学元素表示化学物质一样,文献的同类情报信息由一个或几个数据项表示。各记录段的数据项因所包含的情报信息的不同而不同。

CA Search 各记录段的主要数据项:

控制段

- 文摘号
- 分类号
- 参见类目号

题录段

- 原文献标题
- 作者姓名(专利发明人),所属机构(名称、部门、城市、国别)
- 原文出版物缩写,卷、期、页数、出版日期、出版者名
- 专利号、专利公布日期、专利申请号、专利申请日期
- 原文语种

关键词索引段

- 关键词

化学物质索引段

- CAS登记号
- 分子式

- 标题母体、取代基、名称修饰、立体化学标志
- 说明语

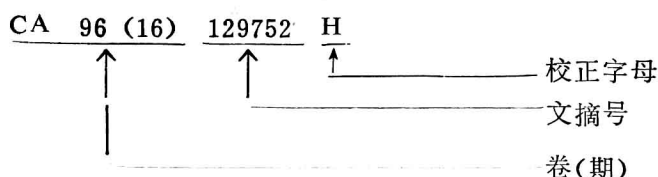
普通主题索引段

- 主标题
- 说明语

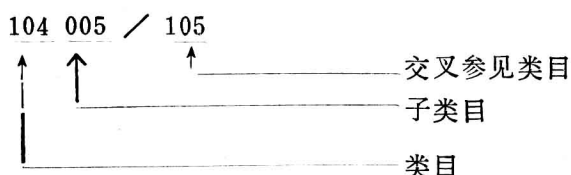
1.3 CA Search 控制段、题录段数据项

控制段数据项：文摘号、分类号、参照类目号三项。

CA文摘号 与同卷期的印刷本CA文摘号相应。每卷文摘号自第一期开始至卷末26期，通卷连号升序排列。在文摘号前冠以卷（期）号。如CA96(16)即相应印刷本CA96卷16期。数字后面的字母为供计算机核对文摘号用的校正字母。



CA分类号 与印刷本CA的主题范畴分类相应。但不同的是在每类下又细分有10个左右子类。每一篇文摘对应一个分类号。分类号包括类目子类目以六位数字表示。第一位在11次累积索引期间（1982—1986）定为1，依次第二、三位为类目，后三位为子类。如104005即代表第四类（毒物学）的第5子类（农药的毒性）。有些文献涉及两个以上分类时，只收录于一个类目中，其他均作为参见类目。参见类目号附于分类号之后以/分隔。参见类目无子类目。如



题录段数据项：包括文献标题、作者、原文出版物类型代码……等多种数据项。（见表2）。题录段因原文类型（期刊、会议录、技术报告、学位论文、图书、专利说明书）的不同，所包含的数据项不同，具有六种不同的编排格式如图2所示。图中的编号相应于表2中数据项的编号。

图2 CA各类型出版物文摘题录格式

1. 期刊论文文摘题录格式

① 92. ② 42907f Total angular momentum determinations from The (t_{pol} d) ③ reaction on nickel-58 and 64. Flynn ER; Brown, Ronald E; Correll, F. D; ④ Hanson, D. L; Hardekopf, R. A. (Los Alamos Sci Lab, Univ California,

Los Alamos, NM87545 USA). Phys. Rev. Lett. 1979. 42(10), 626-9 (Eng).

2. 会议录和资料汇编文摘题录格式

92. 142639p Pressure effects in inorganic solution chemistry. Swaddle, T. W. (Univ. Calgary, Calgary, ABCan). High-Pressure Sci. Technol., AIRAPT Conf., 6th 1977 (Pub. 1979). 1,631-6 (Eng). Edited by Timmerhaus, Klaus D.; Barber, M. S. Plenum, New York, N. Y.

3. 技术报告文摘题录格式

92. 42471j Chromate-free Method of preparing aluminum surfaces for adhesive bonding. An etchant composition of low Toxicity. Russell, William J.; Garnis, Elizabeth A. (Large Caliber Weapon Syst Lab Armament Res Der Command Dover NJUSA) Report 1978 ARLCD TR 78001, AD-E400160; Order No. AD-A056241, 25pp (Eng) Avail NTIS

4. 学位论文文摘题录格式

92. 142486m Polymer bonded silica; new chromatographic Packings for GC and HPLC. Monrabal, Benjamin Bas (Virginia Polytech. Inst. and State Univ., Blacksburg, VA USA). 1978. 251pp (Eng). Avail. Univ. Microfilms Into., Order No 7904154, From Diss. Abstr. Int. B 1979, 39(8), 3800

5. 图书文摘题录格式

92. 157535a Colloidal Chemistry Course. Voyutskii, S. S. (Mir, Moscow, USSR). 1978 560pp rub 3.86 Translated from Russ.

6. 专利文摘题录格式

92. 152018z α -Benzylidenecycloalkane derivatives. Vallet, Francois (UNICLERS, A.) Ger. Offen. 2,833,880 (Cl. C07D317/54), 22 Feb 1979, Fr. Appl. 77/24,062,04 Aug 1977; 23pp

表 2 CA-Search 题录段数据项

编号	数 据 项	说 明
1	CA文摘号	
2	文献标题	
3	作者/专利发明人	最多10个作者, 超过者只取前9个, 余以etal表示, 姓名采用倒置形、姓在前
4	作者所属单位 部位 名称 城市 国别	全部置于括弧内
5	刊物名称/技术报告单位	
6	出版日期/会议时间/专利公布日期	
7	原刊物集号/卷号 原刊物期号/报告号/分册号	置于括弧内
8	页码	
9	原文献语种代码	置于括弧内
10	资料汇编人	前加Edited by
11	出版社名、地址和国别	
12	复制文摘出处	
13	原稿来源	
14	转载刊物名、出版年分、卷期、页数	前加以From
15	价格	
16	专利发明人	
17	专利权受让者姓名	置于括弧内
18	专利号	其前为所属国别缩写
19	专利分类号	置于括弧内, 美专利为 美专 / 国际 利号 / 分类号
20	专利优先国	如无此项, 即专利优先权属所在国
21	专利申请号	前加以Appl
22	专利申请日期	
23	原出版物类型代码	以一个字母表示类型 J—期刊, C—会议录, T—技术报告 D—学术论文, B—图书, P—专利

1.4 CA Search 索引方针

CA Search 的索引段包括:

- 关键词索引段——相当印刷本期索引
- 普通主题索引段 \ 相当印刷本卷索引
- 化学物质索引段 /

CA Search 三种索引段实例:

CA 94 (01) 3491N

题目:

Oxidation Reaction of Carbon Monoxide and Ethylene on Zine oxide

关键词索引:

oxidn carbon monoxide catalyst

ESR oxidn zine oxide

ethylene oxidn zine oxide

化学物质索引:

Carbon monoxide CO [630-08-0], Reactions

* oxidn. of, with oxygen on zine oxide surface, mechanism of
Ethene C₂H₄ [74-85-1], Reactions

* Oxidn. of, with Oxygen on zine oxide surface, mechanism of
Zine oxide O₂Zn [1314-13-2], uses and miscellaneous

* Catalyst, for surface oxidn. of carbon monoxide and ethylene
with adsorbed oxygen

普通主题索引:

Adsorbed Substances

* Oxygen on zine oxide, ESR of

Adsorption

* of carbon monoxide, ethylene and oxygen on zine oxide,
oxidn. mechanism in relation to

Electron Spin Resonance

* of oxygen adsorbed on zine oxide, oxidn. mechanism in rela-
tion to

Oxidation Catalysts

* zine oxide, for carbon monoxide or ethylene, adsorption pro-
perties in relation to

Oxidation

* of carbon monoxide or ethylene on zine oxide, mechanism of

*后为说明语

关键词索引是从原文标题中、文摘中选出的具有关键意义的词组成的。

普通主题索引和化学物质索引是根据原文的主题内容,使用适当的规范化主题词或CA化学物质索引名,依照严格的索引原则进行设置的。

化学物质索引包括所有经国际理论与应用化学联合会(International Union of Pure and Applied Chemistry)确定的已知组成和结构的化学物质:

- 所有化学元素及化合物(包括衍生物)
- 特定金属的合金

- 特定的矿物
- 特定化合物的混合物和聚合物
- 特定的抗生素、酶、激素和多糖体
- 基本粒子
- 字母—数字名称和商品名

普通主题索引包括一切特定化学物质以外的所有索引标题：

- 化学物质的类属
- 不能充分定义的材料
- 分析
- 反应
- 物理和化学概念和现象
- 化学工程和化学工业设备及操作
- 生物化学和生物学
- 历史、教育和文献工作

两种索引设置条目的基准是新的化学物质或是新的主题概念；或是有关已知物（主题概念）的新情报如新的来源或制备方法，新的反应、反应机理研究、新的物理化学性能、新的分析方法、新的用途或生物效应。

索引条目的设置选择力求最高的专指性，如原文中讨论了溴化和氯化，选择设置 **Bromination** 和 **Chlorination** 两条索引，而不是设置 **Halogenation** 一条索引。原文讨论中涉及的特定化学物质均设置化学物质索引。仅在讨论涉及同类属三个以上化学物质或概念适用于整个类属时，才加设化学物质类属性普通主题索引。

对综述（**Review**）一般只设置关键词索引，仅在综述性文章中同时报导新的实验工作时才设置详尽的主题索引。

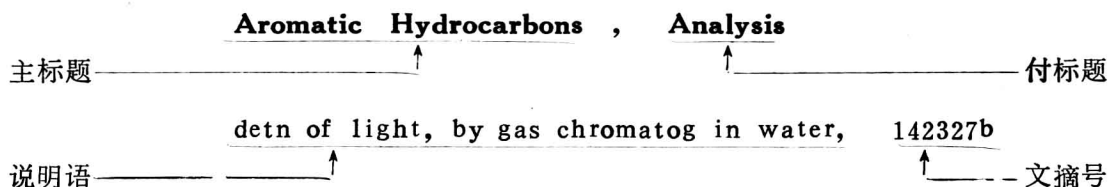
1.5 关键词段数据项

关键词段相应于印刷本 CA 期索引的关键词索引。每条索引仅由原文中抽出的几个关键词并列而组成。无语法关系也不表达完整概念。关键词段仅包含关键词组数据项一项。其特点是用词不规范：

- （1）使用原文所述的惯用名、商品名。不使用 CA 索引名。如前述实例中用 **ethylene** 而不用 **ethene**。
- （2）大量采用缩写词但略去缩写点如前述实例中 **Electron Spin resonance** 用 **ESR**，**oxidation** 用 **oxidn** 而不是 **oxidn**。除使用通用的缩写词外，还有 CAS 专用的缩写词。
- （3）所有概念词及物质名（特定物质名及物质类属名）都使用单数词形。
- （4）同类化学物质用其中最简单者作关键词。如 **phenol** 既可表示苯酚，也可用以表示酚类物质。但元素符号、分子式均不用为关键词。
- （5）复杂有机化合物一般以其母体结构名称作为关键词。定位标志及立体化学标志都省略，如 α -butanol 只用 **butanol**，**Cis-decalin** 只用 **decalin**。

1.6 普通主题索引段数据项

CA 普通主题索引是对一篇文献确定主题后, 针对主题内容的概念、范围和相互关系用主标题、付标题、说明语分为三级标引。在印刷本卷索引中表现为:



主标题、付标题是 CAS 经过选择有所规定的规范用词, 说明语部份是未经规范化的自由用词。磁带的普通主题索引段是用若干数据项来体现三级标引的。

(1) 概念标题 (Concept Heading)

此数据项体现普通主题索引的主标题, 包括概念性标题和化学物质类属性标题。用词规范化, 可以通过 CA Index Guide 的普通主题索引参照 (Cross-references for General Subjects) 查到 CA 选用的标准用词。概念标题所用的名词术语在单、复数词形有所规定, 实例见下表:

表 3 普通主题索引主标题实例

使用单数词形的标题:

- 非单一组成的化学物质: 如 Air, Peanut oil, Petroleum 等
- 动植物: 如 Amino acid, Cow, Insect, Oak, Turtle 等
- 抽象的概念: 力: 性质: 如 Density, Energy Level, Oxidation 等
- 集合名称多用单数词: 如 Coal, Rubber, Wood 等

使用复数词形的标题

- 化学物质类称: 如 Alcohols, Oxides, Enzymes, Copper ores 等
- 动植物以外的实体集合: 如 Coating materials, Reactors 等
- 拉丁复数术语: 如 Atomic, Data, Spectra, Nuclei 等

(2) 文意修饰 (Text Modification)

文意修饰项体现普通主题索引的说明语。文意修饰是对概念标题就原文主题的具体内容用短语加以说明, 是标题的补充, 和标题是倒置关系。如

Amines

dipole moment of,

意即 dipole moment of Amines。用词不规范。和关键词相似不用 CA 索引名, 而用惯用名。也大量使用缩写简称但保留缩写点。如

determination——detn.

polymerization——polymn.

(3) 限定 (Qualifier)

对一些信息量大的化学物质类属性标题需加以细分而设置限定付标题。限定数据项即体现限定付标题, 是依原文主题内容表明标题的研究范畴, 对细分化学物质类属标题的限定项规定有 7 个 (见表 4)。

Analysis
Biological studies
Occurrence
Preparation
Properties
Reactions
Uses and miscellaneous

表 4 用于化学物质标题的限定

Analysis	: 标题物质的检测、分析方法（包括生物检定）；分析目的分离；
Biological studies	: 动植物、细菌病毒的效应，营养、代谢和毒性的效应，除草、杀虫和医药上的应用；生物氧化和还原；生物体系内的存在；
Occurrence	: 生物体系以外的天然存在；
Preparation	: 合成、回收、精制、分离；
Properties	: 化学物理性质，原子和分子结晶结构的研究；非用于精制的结晶，溶解度和溶剂效应；
Reactions	: 化学键的形成和断裂；原子序数或质量的改变；腐蚀、中和、互变异构；
Uses and miscellaneous	: 物料的非生物应用、精制的分离，其他工业工艺；

对用于生理器官组织标题的限定项规定有 5 个（见表 5）。

Composition
Disease and Disorder
Metabolism
Neoplasm
Toxic chemical and physical damage

表 5 用于生理器官和组织标题的限定

Composition	: 分析方法、化学和物理效应，提取、组分的分离等研究；
Disease and disorder	: 由自身免疫、细菌或病毒感染所导致的炎性反应；寄生虫感染和营养失调导致病理变化；由细胞代谢引起的疾病和治疗；
Metabolism	: 细胞动力学的机制研究，包括组织成分的转换、吸收、吸回过滤、生成（生物合成，合成代谢）降解（分解代谢、生物氧化、酶分解）、分泌和排泄；
Neoplasm	: 肿瘤组织的生化性质及转移、寄主对恶性组织的反应，诱发（包括肿瘤形式前的组织变化），细胞学，组成及代谢（包括药物疗效及理疗效果）；
Toxic chemical and physical damage	: 物质和物理力（如辐射、冷、热）对细胞的伤害作用。

(4) 概念修饰 (Concept Modification)

普通主题索引中有近 200 个概念标题需要对标题细节进一步定义，使用了该标题专用的付标题。如对“Chains”标题需用 Chemical 或 Mechanical 进一步定义。

Chemical 和 Mechanical 即是“Chains”的专用付标题，以前叫特定 (ad hoc) 付标题。磁带中的概念修饰项即体现此种特定付标题。

同形异义释义是对内含概念不同而外形拼写相同的标题加以阐明。

表6 CA Search 普通主题索引数据项

摘自93卷普通主题索引的实例

(2) manuf. and uses of,

① Crystallization

② of alkanes, mechanism of, 85321y

① **Amides,** ③ **occurrence**

② in petroleum, and in relation to, ⑥ 75121v

① **Amides,** ③ **properties**

② mo calens of, conformation in relation to, ⑥ 101765d

① Mole ⑤ (gram molecular weight)

② mass of, nomenclature of, 237926q

① **Mole** ⑤ (neoplasm)

② removal of, platinum compds for, 225650g ⑥

① **Liver,** ③ **metabolism**

② potassium and Sodium transport by, 4622x

① **Liver,** ③ **Toxic chemical and physical damage**

② marbon disulfide toxicity to, ⑥ 144061p
 ① Chromatography, ④ gel
 ② for anal. of polymers, ⑥ 132822Z
 ① Chromatography, ④ colum and liquid
 ② of proteins of blood plasma, ⑥ 64927K

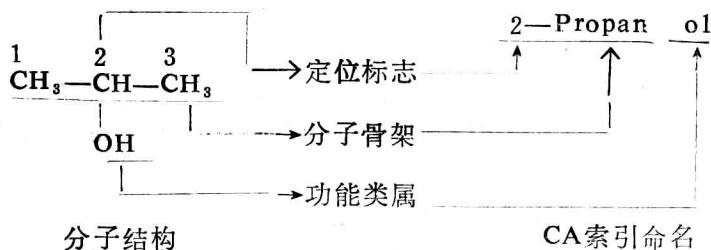
1.7 化学物质索引段数据项

化学物质索引是对文献中所涉及的特定化学物质作三级标引。以化学物质名称为主标题，加以细分的付标题和补充主题内容的说明语。化学物质名称使用 CAS 命名原则严格规定的 CA 索引名。CAS 命名原则是一个分子结构统一于一个单一的命名。尽量取消通用名，商品名等。CA Index Guide (CA 索引指南) 中详细介绍了化学物质索引名称选择原则。CA 磁带中 CA 索引名可由下列数据项组成：

- Heading Parent 标题母体
- Substituent 取代基
- Name Modification 名称修饰
- Stereochemistry 立体化学标志
- Line Formula 示性分子式
- Homograph Definition 同形异义释义

(1) 标题母体 (Heading Parent)

此数据项是索引名的核心部分。对单一的化学物质即为全名。对复杂的分子是分子结构中最大、最重要的部分。以分子骨架为基础加上表明类属的主要功能团及定位标志而组成。如：



(2) 取代基 (Substituent)

对多功能团化合物选择含最大功能团的骨架为标题母体。除标题母体所含的主功能团外，其他取代分子骨架上氢的原子或功能团都为取代基。主功能团的确定是依下列的化合物类属序列优先考虑：

无取代基的基团及化合物、离子型化合物、酸、酰卤、酰胺、腈、醛、酮、醇及酚、过氧化物、胺、亚胺。

化合物中有二个以上取代基时，按字母顺序排列取代基。

例：

