

化学情报、文献工作

化学工业部科学技术情报研究所

一九八一年十一月

前 言

《化学情报、文献工作》包括两篇资料，一是《化学情报工作》，二是《化学文献工作》。比较系统地介绍了化学情报和文献工作的内容、工作范围和工作方法。尤其是对情报文献检索系统的形成，资料文档和数据库的组织，手工检索、机械检索和电子计算机检索等手段的应用也作了比较具体的阐述。这两篇资料对情报工作者，资料文献工作者和图书馆工作者都是很好的参考学习材料。

这两篇材料是两个世界著名的西德化工公司（鲁尔化学公司和拜耳化学公司）内部学习材料。1980年由原作者 Mullen 博士和 Ahrenholz 博士赠送给我所赴西德访问的同志。原文为德文，由黄金凤同志译出。

化学工业部科技情报研究所

1981.11.

内 容

一、化学情报工作.....	(1)
二、化学文献工作.....	(31)

化学情报工作

(第一部分)

1. 引言

当前对中学和各种学校课程的要求越来越高,制定教学计划的领导人不得不亲自跑大图书馆,或者是让学生们去完成利用图书馆的任务。

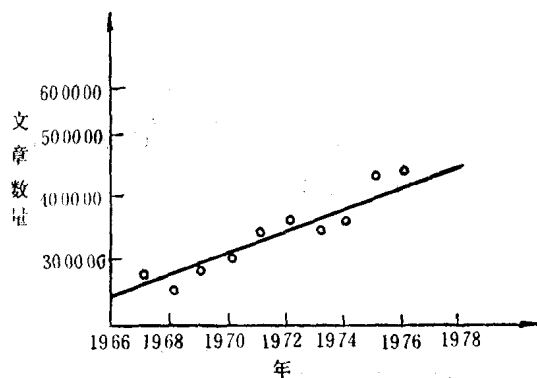


图1 化学文摘(C.A.)
每年摘录的文章数量

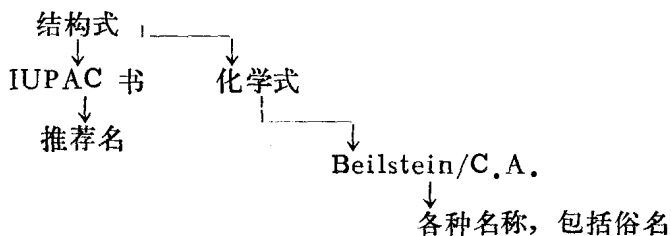
科学家从事的工作就是储存和检索的已发表的文献和专利。

本组文章的目的是,首先介绍这方面的辅助手段的概况,主要是大型的大学图书馆中收藏的典型著作和文献杂志,其次是对当今化学领域中情报科学进一步的发展趋势作较为详细的介绍。图1清楚地反映了近十年中发表的科技文献的“文献流”状况,我们可以很容易地看出主要问题是什么。

估计在2000年,发表的化学文献总数将达到1700万篇(目前约为700万篇)。化学文献增加得如此急剧,于是产生了一种新的专业,即“情报科学”。化学情报

2. 命名

对化合物给予准确的命名是一项重要的情报工作。国际上通用的有效原则不时有细节上的变化,所以要求在着手进行化学文献工作之前,先要得到各种名称,包括俗名。国际理论化学与应用化学联合会(IUPAC)公布了多卷无机化学和有机化学的命名规则^[2]。目前正在搞德译本^[3]。为了找出化合物尽可能有的各种名称,最简便、最可靠的办法是查找拜尔斯坦(Beilstein)有机化学手册(3.1.1.)的分子式索引(IE)和《C.A.》的分子式索引。

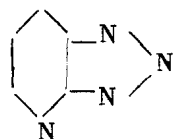


借助于结构式，能够比较容易地从分子式索引中查到正确的化学名称。若遇到了困难，建议仔细通读有关部分，因为一般来说都能够据此画出结构式。知道了一种化合物的各种关系，才能更加有的放矢地进行检索。

2. 1. 《环索引》(The Ring Index)

该书^[3a]涉及到14,000个环系。按照下边的示意图能很容易地找到所希望的环的标记。

例如：



- 环数 II
- 环大 5, 6
- 化学式 $C_2N_3-C_5N$

据此即可给出命名和文献出处。近来《母体化合物手册》(Parent Compound Handbook')接替了《环索引》。该书也是按照类似的示意图编成的。

3. 手 册

这一类书的任务是阐述每一种化合物或每一类化合物的性质或合成方法。这类书中，有从各种不同来源整理综合的数据，为非行家里手提供详细的全貌。现将各化学部门的手册介绍如下：

3. 1. 有机化学

3.1.1. 拜尔斯坦 (Beilstein) 有机化学手册

这套手册^[4]阐述了化合物及其衍生物的合成方法，其物理性质、化学性质。化学文献在纳入该手册之前，都先经过极严格的评价。所以，它处理过的文献才刚刚到1960年。这套手册每卷价值约1000马克。

全部有机化学共27卷。每一种化合物，每一个化合物等级都有一个系统号，在补编本中也保持同样的号（补编本也采用相同的编排）。虽然第三个补编本尚未结束，第四个补编本已着手进行了。

3.1.1.1. 拜尔斯坦有机化学手册的使用方法

查找某一物质的最简单的方法，是使用最新的总分子式索引（第二补编本 IIE），它包括了以前所有各卷的分子式。借助于卷号和系统号，可以在第三和第四补编本（没有总索引）中查到该物质。

- 分子式索引

第二补编本 (IIE)

- 主卷 (H) 中的资料

第一、第二补编本 (IE和IIE)

- 卷号和系统号

- 第三、第四补编本资料 (IIE和IVE)

各卷的划分情况如下:

卷 号	系统号	骨 架
1—4	1—449	无环的
5—16	450—2358	碳环的
17—27	2359—4720	杂环的

在各种介绍拜尔斯坦有机化学手册的书中^[5], 对此有详细的阐述。

3.1.2. 《有机化学方法》(又叫霍本—韦尔手册)(Methoden der Organischen Chemie)

这部有机化学手册^[6]涉及的具体的单个化合物较少, 主要是讲有关大类物质的生产。这套手册的重点是有机化学制备。它阐述了在每一类物质中, 某些反应的一切细节。但它并未忽略理论。从下述划分情况可以看出有机化学制备占有多么大的比重:

第1卷: 一般实验室实践

第2卷: 分析方法

第3卷: 物理方法

第4卷: 一般化学方法

第5卷: 烃

第5/3和5/4卷: 卤族化合物

第6~8卷: 氧化物

第9卷: 硫、硒、碲化合物

第10、11卷: 氮化物

第12卷: 磷化物

第13卷: 有机金属化合物

第14卷: 高分子材料

第15卷: 肽

第16卷: 总索引(正在筹备中)

3.1.2.1. 霍本—韦尔手册的使用方法

在总索引出版之前, 必须通读各卷。借助于上边列的表就不太难了。

3.1.3 《化学方法》(Methodicum Chemicum)

该书^[7]的重点是有机制备化学(从一九七三年开始)。它与霍本—韦尔手册不

同,不详细介绍试验方法,而是集中介绍有关合成各种类别化合物的文章和有关理论,因此,可借助于它很快地了解各种合成方法的全貌。

可惜这套手册尚未出全,但它比霍本—韦尔手册要新得多。例如,霍本—韦尔手册中有关醛的一卷(7/1)是一九五四年出的,而详细讨论醛的《化学方法》第4卷则是一九七五年出的。它的一个突出优点是叙述简炼,同霍本—韦尔手册相比,能够更快地掌握。

第1卷:分析

第4卷:碳—骨架的合成

第5卷:羧基化合物

第6卷:氰基化合物

第7卷:主族元素及其化合物

第8卷:过渡元素及其化合物

3.1.4.《有机合成试剂》(Reagents for Organic Synthesis)

这本汇编^[8]按字母顺序列出了所有的试剂及生产方法、性质和应用。这套书差不多可说具有最新的水平。它对于每一个想熟悉一个新领域的人来说都是很有用的。

3.1.5.《碳化合物化学》(Chemistry of the Carbon Compounds)

这部有机化学手册^[9]分如下几卷:

第1卷:脂肪族化合物(7册)

第2卷:脂环族化合物(5册)

第3卷:芳香族化合物(7册)

第4卷:杂环化合物(10册)

第5卷:总索引

这套手册中没有制备工艺的细节,但是却给出了各类化合物最主要的合成方法的全貌。在1963年,对1951~52年版本作了补充。

3.1.6.《有机化学合成方法》(Synthetic Methods of Organic Chemistry)

这套书每年出版一卷,以论文形式论述有机化学的重要合成反应。每类化合物都有一卷来专述。每5卷(逢5、10、15、20等)有一总索引。

3.1.7.《有机合成》(Organic Syntheses)

对每种有机化合物都选出一些制造方法加以阐述^[11]合成方法在载入该书之前,均由独立的科学家进行过验证。凡收录的合成方法均有详细的引证。

3.1.8.《有机反应》(Organic Reaction)

这套书综述了特殊有机化学反应、反应机理以及应用。有总索引。

3.2. 无机化学

3.2.1. 格梅林无机化学手册 (Gmelins Handbuch der Organischen Chemie)

这套书^[13]囊括了全部无机化学。按格梅林系统逐一给出了每一种元素及其化合物。可以索取有关格梅林研究所的一种小册子^[14]。

这套书按下表给出系统号。

元 素	符 号	系统号	元 素	符 号	系统号
铜	Ac	40	钠	Na	21
铝	Al	35	镍	Ni	57
铵	NH ₄	23	有机镍化合物	Erg.-Werk	
锑	Sb	18	铌	Nb	49
砷	As	17	钨	Os	66
钡	Ba	30	钯	Pd	65
铍	Be	26	过氟卤族有	Erg.-Werk	
铋	Bi	19	机 化 合 物		
铅	Pb	47	磷	P	16
硼	B	13	铂	Pt	68
硼化物	Erg.-Werk		钋	Po	12
溴	Br	7	镤	Pa	51
镉	Cd	33	汞	Hg	34
铯	Cs	25	镭	Ra	31
钙	Ca	28	铼	Re	70
氯	Cl	6	铈	Rh	64
铬	Cr	52	铷	Rb	24
有机铬化合物	Erg.-Werk		钌	Ru	63
钴	Co	58	氧	O	3
有机钴化合物	Erg.-Werk		硫	S	9
稀有气体		1	硒	Se	10
稀有气体化合物	Erg.-Werk		稀土元素	G	39
铁	Fe	59	银	Ag	61
有机铁化合物	Erg.-Werk		硅	Si	15
氟	F	5	氮	N	4
钫	Fr	—	锶	Sr	29
镓	Ga	36	钽	Ta	50

元 素	符 号	系统号	元 素	符 号	系统号
锗	Ge	45	铼	Tc	69
金	Au	62	碲	Te	11
铪	Hf	43	铊	Tl	38
有机铪化合物	Erg.-Werk		钍	Th	44
铟	In	37	钛	Ti	41
铱	Ir	67	超铀元素	Erg.-Werk	
碘	I	8	铀	U	55
钾	K	22	钒	V	48
碳	C	14	有机钒化合物	Erg.-Werk	
铜	Cu	60	氢	H	2
锂	Li	20	钨	W	54
镁	Mg	27	锌	Zn	32
锰	Mn	56	锡	Sn	46
海水脱盐	—	3	锆	Zr	42
钼	Mo	53	有机锆化合物	Erg.-Werk	

3.2.2. 无机化学制备手册 (Handbuch der Präparativen Anorganischen Chemie)

分三卷^[15]讲无机化工产品最重要的制备方法。本手册是有关无机制备化学最重要的德语词汇来源之一。

3. 3. 工业化学

3.3.1. 化工技术大全 (Encyclopedia of Chemical

Technology) (柯克—奥斯默)

美国这套书^[16]的第二版(一九六三~七〇)从A至Z分25卷,包括全部工业化学,有总索引。一九七一年出了补编(A—Z),一九七八年出了第三版。

3.3.2. 乌尔曼工业化学大全 (Ullmanns Encyklopädie der technischen Chemie)

这套书^[17]共20卷,包括全部工业化学,与柯克—奥斯默的化工技术大全相比,更多地照顾到了欧洲的发展情况,也有总索引。第三版(自一九五一年出版)到一九七〇年已出齐;第四版(一九七二年开始出版)已出了许多卷。

3.3.3. 化学工艺 (Chemische Technologie)

这套手册^[18]的划分情况如下:

第 1、2 卷——无机工艺

第 3~5 卷——有机工艺

第 6 卷——冶金

第 7 卷——总论

这套书清楚地阐述了化工技术在一九七一年到一九七五年期间的水平。

3. 4. 物理化学

3.4.1. 物理学、化学、天文学、地球物理学和技术的数值与函数

(Zahlenwert und Funktionen aus Physik, Chemie, Astronomie, Geophysik und Technik)

这套书^[19]总括了世界上的物理学数据。原来的版本划分为:

第 1 卷——原子物理和分子物理

第 2 卷——物质在聚集状态下的性质

第 3 卷——天文学与地球物理

第 4 卷——技术

新版本的划分情况如下:

第 1 组——核物理与技术

第 2 组——原子物理和分子物理

第 3 组——晶体物理与固体物理

第 4 组——材料的宏观性质和技术特性

第 5 组——天文学与天体物理

4. 词典类

4. 1. 化学词典 (Lexikon der Chemie) (Römp)

这套词典^[20]很全,有 6 卷。有许多文献出处。在使用一次文献之前先查一查这种词典常常是很有好处的。它是世界上最全的化学词典,虽然有语言障碍,在国外也享有很高的声誉。当前正准备出新版本。

4. 2. 简明化学词典 (Condensed Chemical Dictionary) (Hawley)

这本词典^[21]只有一卷,用英语写成。词典中讲解了许多商标。在最近的版本中列

出了一些毒理学数据。重点是工业化学,诸如危险性、容器的种类、使用、运输规则等等。

4. 3. 化学家与物理学家手册 (Taschenbuch für Chemiker und Physiker) (D' Aus-Lax)

为德文的化学与物理学表格手册^[22]。

4. 4. 化学和物理手册 (Handbook of Chemistry and Physics) (Chemical Rubber Co)

该表格式手册^[23] 内容很广,包括数学、化学和物理学数据。

4. 5. 默克索引 (Merck Index) (Merck & Co)

这部字典^[24] 本来是按字母顺序排列的默克公司经营的各种产品的名单。不仅有化学数据、物理数据,而且还有生理学数据。对生产方法也作了较深入的阐述。

4. 6. 有机化学评论索引 (Index of Reviews in Organic Chemistry) (Lewis)

这部书^[25]刊登了有机化学(物质及反应)方面所有重要的综述文章,对1960~1976年期间的文章基本都进行过处理加工。

5. 文摘性刊物

这类工具书不包括原文文献,而是从各种杂志和其他来源的文章中作的文摘和节录的概要。

5. 1. 化学文摘 (Chemical Abstracts) (CAS)

美国化学文摘服务社出版的这个文摘^[26],充分利用了全世界所有重要的化学杂志。目前每年收录50万篇以上。文摘印刷本与索引的编纂工作由电子计算机承担。它有详细的年度索引和总索引,由下列各部分组成:

- a) 化学物质索引
- b) 主题索引
- c) 分子式索引
- d) 作者索引
- e) 索引指南

索引指南很有用,在检索之前先查检索指南可节省许多时间和费用。

询问有关化合物的复杂问题时，最好先利用分子式索引，以便使用 C.A. 命名法。

- 索引指南式分子式索引



- 化学物质索引



- 文摘式情报来源

5. 2. 化学情报 (Chem, Inform)

(拜耳公司及德国化学家协会编)

这套资料^[27] 没有年度索引和总索引。它能很迅速地向化学家们介绍他那一领域中的最新发展情况(使用很多分子式)。它只在特殊情况下用于检索，因此它没有索引。

5. 3. 德国化学文摘 (Chemisches Zentralblatt)

这套资料^[28] 的任务与美国化学文摘相似，于一九六九年停刊。它出版年度索引，但总索引很少。它是一个重要的情报来源，对于来自东方集团各国的文献资料来源尤为如此。

5. 4. 技术: VtB-工艺技术报告 (拜耳公司编) (Technik,

VtB-Verfahrenstechnische Berichte)

这个刊物^[29] 包括杂志文章的摘要和有关工艺技术及相关领域的报告。

6. 毒理学

近来，环保与毒理学几乎成了日常的话题。这里也不能忽略化学在这两个重要方面的关系。许多设计工作都要同这些课题打交道。下边介绍的只是最重要的毒理学情报来源。

6. 1. 工业材料的危险性质 (Dangerous properties of Industrial Materials) (Sax)

本书^[30] 的重点是环保，有1000多页，简略讲述了对所有化学物质危险性的防范措施。

6.2 . 毒品名录 (Giftliste) (Roth)

本书^[31]用表格列出了可能接触到的化学品在工作场所的最高允许浓度值、各种辅助措施。

6. 3. 反应化学事故手册 (Handbook of Reactive Chemical Hazards) (Bretherwick)

本手册^[32]列出了众多的无机和有机物质名单,并附有关于化学物质危险性的各种参考文献。有一部分文献列得很详细。

6. 4. 工业卫生与毒理学 (Industrial Hygiene and Toxicology) (Patty)

该书^[33]比前几种书涉及到的化学物质少一些,但却阐述得很详细。大部分篇幅为有机部分。

6. 5. 化学物质毒性效应名录 (Registry of Toxic Effects of Chemical Substances) (NIOSH)

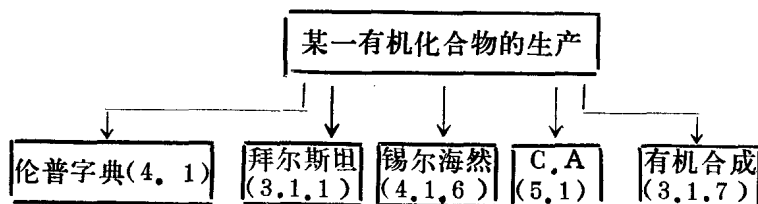
是这个领域中最详尽的一部书^[34]。收录的每一种物质都包括 12 个数据,诸如俗名、CA登记号、按字顺排列的各种毒理学数据等等。

7 . 检 索

7. 1. 检索过程

对于提出的一般问题,比如关于醇类的问题,最简便的着手方法是使用伦普^[20]编的化学词典(见4,1),充分利用那里给出的文献。如果这本字典列出的材料不够用,最好利用前边介绍的各种手册(见第3节)进行检索。

下边的简图反映了最重要的情报源:



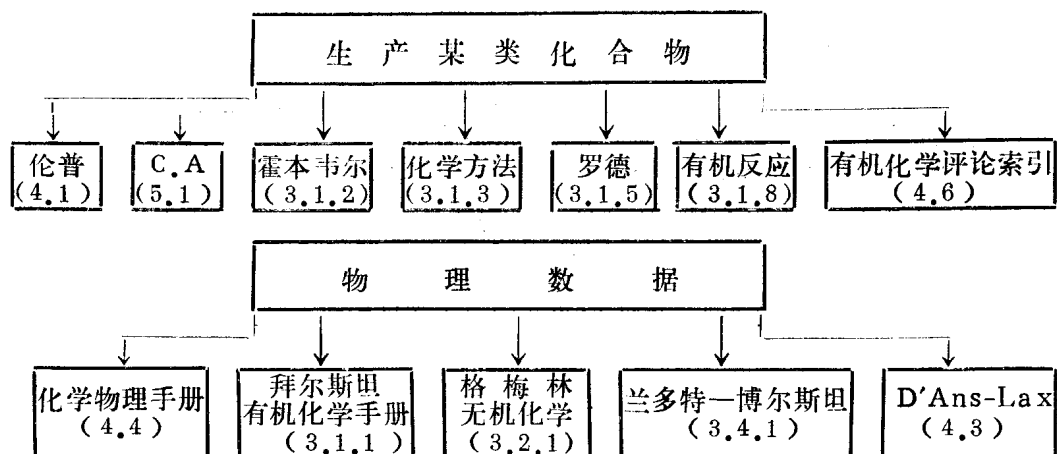


图2 最重要的情报源示意图

为了做到不漏检，建议采用表1所示的格式。

表1 检索格式

检 索			
提问人			
问 题			
时 期			
关键词 (以后检查、提示用)			
来 源:			
☐ Römpf	☐ ☐ Methodicum Chemicum	☐ ☐ Gmelin	☐
☐ IC/Index	☐ ☐ Org. Reactions	☐ ☐ Ullmann	☐
☐ Ring Index	☐ ☐ Syn. Methods	☐ ☐ Winnacker-Küchler	☐
☐ Rodd	☐ ☐ Reagents for Org. Syn.	☐ ☐ Kirk-Othmer	☐
☐ Houben-Weyl	☐ ☐ C.A	☐ ☐ Monographien	☐
☐ Beilstein	☐ ☐ Chemisches Zentralblatt	☐ ☐	☐
☐	☐	☐ ☐	☐
☐ ↑ 给出来源		☐ ↑ 处理后 打“√”处	

7. 2. 如何出结果

建议首先通读所有综述性文章，深究提出的问题。选择出来的情报资料尽可能无水份很重要，因为在给至涌来的文献流中，只能把那些最重要的提炼出来。如果手头没有某些杂志上的文章，可用现款订购。[35]

7. 3. 有关教学法的考虑

在检索的过程中,化学的社会性关系表现得很清楚,如果让中学生或者大学生按上述方式作检索工作,他对于发明及其应用的多样性就会有所了解。同化学文献打交道获得的知识,对于以后的自学大有用处,例如,今天准备当教师的人,有多少人能列举出五种手册呢?对于未来的化学家来说,化学文献手册的广博知识是不可少的。只有研究发表的文献,才能积累文献上得到的专业知识,也才不至于去重复别人已经做过的试验研究。

8. 结尾的提示

在化学文献工作中,使用电子数据处理装置,为化学家们提供了掌握现在和将来的情报源的唯一可能的手段。本组文章的第二部分将阐述化学情报科学的这一最新发展趋势。

参 考 文 献

1. Chemical Abstracts Service, Chem. Eng. News, S. 53—4, 4, April 1977
2. IUPAC, Nomenclature of Organic Chemistry, [Section A, B and C]
Pergamon Press, Oxford IUPAC, Nomenclature of Inorganic Chemistry Butterworth, London 1970
3. Deutscher Zentrallausschluss fuer Chemie, Nomenklatur der organischen Chemie Bd. 1,
Nomenklatur der anorganischen Chemie, Bd. 2. Verlag Chemie, Weinheim
- 3a. A. M. Patterson et al., Ring Index (4 Baende), 2. Aufl., (1960—65).
American Chemical Society, New York
- 3b. Chemical Abstracts Service, Parent Compound Handbook. Verlag Chemie, Weinheim 1977
4. Beilsteins Handbuch der organischen Chemie. Beilstein Institut, Frankfurt
5. GDCh, Kurze Anleitung zur Orientierung in Beilsteins Handbuch der organischen Chemie, Springer Verlag, Berlin-Heidelberg-New York 1936; Kennen Sie Beilstein? Beilstein Institut, Springer Verlag (Kostenlos)

6. Houben-Weyl, Methoden der organischen Chemie, 4. Aufl., ab 1952.
G. Thieme Verlag, Stuttgart
7. F. Korte, Methodicum Chemicum, ab 1973. G. Thieme Verlag, Stuttgart
8. M. Fieser und L. F. Fieser, Reagents for Organic Synthesis Bd. 1-6.
Wiley Interscience, New York
9. E. H. Rodd, Chemistry of Carbon Compounds. Elsevier, Amsterdam
(1962—Erg.)
10. W. Theilheimer, Synthetic Methods of Organic Chemistry. Verlag
Karger, Basel
11. Organic Synthesis, New York
12. W. G. Dauben, Organic Reactions, Wiley Interscience, New York
13. Gmelin Institut, Gmelins Handbuch der organischen Chemie, Springer
Verlag, Berlin-Heidelberg-New York
14. Gmelin Institut, Carl Bosch Haus, Varrentrappstr. 40/42, 6 Frankfurt/M
15. G. Bauer, Handbuch der präparativen anorganischen Chemie, 3.
Aufl., Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart 1975
16. Kirk-Othmer, Encyclopedia of Technology, 2. Aufl. 1963—1970.
Wiley Interscience, New York
17. Ullmanns Encyklopedie der technischen Chemie, 3. Aufl. (1951—1970)
4. Aufl. seit 1972. Urban & Schwarzenberg, München
18. Winnacker-Kuecher, Chemische Technologie, 3. Aufl. (1970—1975).
C. Hanser Verlag, München
19. Landolt-Boenstein, Zahlenwerte und Funktionen aus Physik,
Chemie, Astronomie, Geophysik und Technik, Springer Verlag,
Berlin-Heidelberg-New York
20. O. -A. Neumueller, Roempps Chemie Lexikon, 7. Aufl. (1972—1977).
Frankische Verlagshandlung Stuttgart

21. G.G.Hawley, Condensed Chemical Dictionary, 9. Aufl. Van Nostrand Reinhold Company, New York 1977
22. D'Ans-Lax, Taschenbuch fuer Chemiker und Physiker, 3. Aufl. Springer Verlag, Berlin-Heidelberg-New York 1970
23. R.C.Weast, Handbook of Chemistry and Physics, 53rd. Ed. Chemical Rubber Company, Cleveland 1972—73
24. Merck Index, 9th Ed. Merck & Co., Rahway 1976
25. D.A.Lewis, Index of reviews in organic chemistry. The Chemical Society, London 1976
26. Chemical Abstracts, Chemical Abstracts Services. Columbus, Ohio/USA
27. Chem. Inform. Verlag Chemie, Weinheim
28. Chemisches Zentralblatt. Akademie Verlag, Berlin
29. Verfahrenstechnische Berichte (VtB) .Bayer AG Leverkusen
30. N.I. Sax, Dangerous properties of industrial materials, Reinhold Book Corporation, New York-Amsterdam-London 1968
31. L.Roth, Giftliste. Verlag moderne Industrie, Muenchen 1976
32. L.Bretherrick, Handbook of Chemical Hazards. Butterworth, London 1975
33. F.A.Patty, Industrial Hygiene and Toxicology, 2nd. Ed. Interscience Publishers, London 1963
34. H.E.Christensen et al., Registry of Toxic Effects of Chemical Substances. US-Department of Health, Rockville, Maryland 1976
35. Universitaetbibliothek und TIB (Technische Informations-Bibliothek) Welfengarten 1 B, 3000 Hannover 1 Dokumentationstelle, GDCh, Carl Bosch Haus, Varrentrappstr. 40/42, 6000 Frankfurt/Main