

データ集室

Business, Science and Technology Room

科学技術・経済情報室内のデータ集室には、化学物質の性質、合成方法などを掲載した次のような資料があります。

*【】内は当館請求記号です。記載のないものは版によって請求記号が異なります。国立国会図書館オンラインでご確認ください。

**タイトルの右に記載の丸数字はデータ集室内の置き場所を示しています。裏面配置図をご覧ください。

1. Beilstein

『Beilstein』（Springer-Verlag）配置図⑤

有機化合物の製法や物理・化学的性質などのデータを収録した便覧集です。主編（Hauptwerk）とI～Vの増補編（Ergänzungswerk）から成ります。各編は有機化合物の構造に基づいて下記の4分類に大別して編成され、構造式の種類、更に化合物配列の順序によって細分類されています。

1. 鎖式炭化水素化合物（1～4巻）
2. 環状炭化水素化合物（5～16巻）
3. 複素環式化合物（17～27巻）
4. 天然物（30～31巻）

主編の28巻は物質名索引（Sacheregister）、29巻は分子式索引（Formelregister）です。

索引は、「Beilsteins Handbuch der organischen Chemie」【PA1-B2】（主編～第IV増補編までの総索引）と第V増補編の累積索引があります。なお、現在は後継のデータベースである「Reaxys」が利用できます。

2. Gmelin

『Gmelin』（Springer-Verlag）配置図⑥

元素、無機化合物、有機金属化合物の製法や物理的性質などのデータを収録するほか、物質の発見の歴史などについて述べた便覧集です。

初版は1817年に Leopold Gmelin によって刊行され、冊子体は1997年で刊行を終えています。

当館データ集室では元素記号のアルファベット順に排架しています。索引は、「General Formula Index」（分子式索引）があります。なお、現在は後継のデータベースである「Reaxys」が利用できます。

『Reaxys』

（Elsevier Life Sciences IP Limited：契約データベース）

化学物質名、CAS番号、化学構造式などから、物質の化学反応、合成ルート、物性値などを調べることができます。Reaxys には Beilstein および Gmelin に収録されたすべての物質が収録されています。

3. Sadtler Spectra

『Sadtler Spectra』

（Sadtler Research Laboratories）配置図④

様々な試料（化学物質）のスペクトルチャートを収録したデータ集です。Sadtler Research Laboratories 社からルーズリーフ形態で刊行されていましたが、1996年で紙媒体の刊行は終了しています。

純粋化合物を収録した「Standard Spectra」と市販化成品を収録した「Commercial Spectra」に分かれています。Standard Spectra には、1980年までの累積索引があり、それ以降のものには、分析法の種類ごとに1981-1995年の累積索引と1996年の索引があります。Commercial Spectra には1977年までの全編の累積索引があり、それ以降は各編ごとの索引があります。Sadtler Spectra の詳しい使い方については、下記の

文献をご参照ください。

小林 一春, 有住 玲子「Sadtler Spectra の紹介」『科学技術文献サービス』（通号 119）1999.10 pp.1～7 【Z14-376】*

*国立国会図書館デジタルコレクションで本文を閲覧できます。

（<http://dl.ndl.go.jp/info:ndljp/pid/2290248/2>）

国立国会図書館内、国立国会図書館デジタルコレクション図書館向けデジタル化資料送信サービス参加館内限定

4. Landolt-Börnstein

『Landolt-Börnstein』（Springer）配置図⑧

化学、物理学、天文学および工学と科学技術の広範囲にわたる測定・観測数値（物性値）を収録したデータ集です。現行のものは第6版と新編（New Series；第6版を補遺する内容）から成り、それぞれ以下のような編成となっています。索引は、主題索引と分子式索引があります。

○第6版

Vol. I	Atomic and Molecular Physics.
Vol. II	Properties of Matter in its Aggregated States.
Vol. III	Astronomy and Geophysics.
Vol. IV	Technology.

○新編

Group I	Elementary Particles, Nuclei and Atoms
Group II	Molecules and Radicals
Group III	Condensed Matter
Group IV	Physical Chemistry
Group V	Geophysics
Group VI	Astronomy and Astrophysics
Group VII	Biophysics
Group VIII	Advanced Materials and Technologies

また、下記のインターネット情報源（ハンブルク大学ホームページ内）から調べたい化学物質の収載巻を調べることができます。

Landolt-Börnstein Substance/Property Index
(<https://lb.chemie.uni-hamburg.de/>)

『Springer Materials』

(Springer Nature : 契約データベース)

Landolt-Börnstein などのデータを収録した物性情報データベースです。物質名や構造式などから、物性値や状態図などを調べることができます。

5. Science of Synthesis

『Science of Synthesis』

([5th.ed] Thieme) 配置図④

『Methoden der organischen Chemie』【PA312-12】（配置図③）の続編で、1800年代以降の有機化合物および有機金属化合物の合成法（化学反応式、合成条件、合成手順、収率など）を解説しています。48巻（2009）で完結し、2010年以降は補遺版が刊行されています。

1～48巻は対象物質を分子構造が類似するもので分類した6カテゴリ構成となっており、各カテゴリはさらに細分類され、細分類ごとに巻にまとめられています。各巻の巻末に全巻のシリーズ構成が示されており、調べたい物質がどの細分類に入るかを類推し、収載巻を特定できます。

1～48巻の全体索引としてカテゴリごとの累積索引（Cumulative Index）（分子式、キーワード（物質名）、著者）があるほか、各巻の巻末にキーワード索引と著者索引が付されています。

補遺版には、各巻の巻末にキーワード索引と著者索引が付されているものと、著者索引のみ付されているものがあります。1～48巻と補遺版では、同じ分

類の物質には同じ目次番号を振っているため、その物質（または似た物質）の目次番号を1～48巻で確認すれば、補遺版で同じ目次番号のページを探せます。

6. Powder Diffraction File

『Powder Diffraction File』 配置図⑦

有機化合物、無機化合物の粉末試料のX線回折パターンのデータ集です。36巻までは有機化合物と無機化合物に分けて刊行されていましたが、37巻以降（【Z63-B188】）はシリーズが統一されました。なお、索引は以下の3部で構成されています。

- ・有機化合物を物質名称、回折ピーク、分子式などから調べる索引（【Z63-B194】）
- ・無機化合物を主に物質名称から調べる索引（【Z63-B193】、Alphabetical）
- ・無機化合物を回折ピークから調べる索引（【Z63-B193】、Hanawalt）

7. 無料で使えるデータベース

『有機化合物のスペクトルデータベース SDBS』（産業技術総合研究所）

(https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi)

有機化合物のさまざまなスペクトルが掲載されています。化合物名やCAS番号、元素数などから検索できます。

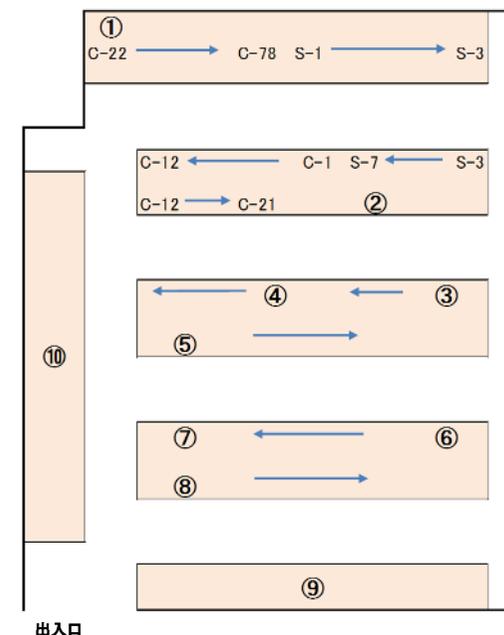
『MatNavi NIMS 物質・材料データベース』

(物質・材料研究機構)

(<https://mits.nims.go.jp/index.html>)

同機構が提供する物質・材料関連のデータベースをまとめています。利用は無料ですが、ユーザ登録が必要です。

[データ集室の配置図]



- | | |
|----------------------------------|--------------------------|
| ①Sadtler Spectra | ⑤Beilstein |
| ②その他スペクトルデータ集、合金状態図など | ⑥Gmelin |
| ③Methoden der organischen Chemie | ⑦Powder Diffraction File |
| ④Science of Synthesis | ⑧Landolt Börnstein |
| | ⑨特許索引類 |
| | ⑩抄録・索引誌 |

国立国会図書館 科学技術・経済情報室

令和3年8月改訂

さらに詳しい調べ方の案内が、リサーチ・ナビ「科学技術・医学」に掲載されています。

(<https://rnavi.ndl.go.jp/stm/index.php>)