

DEThERM

DEThERM は、化学産業における種々の工程設計上重要な熱物性データを収録する物性データベースです。純物質と組成既知の混合物に関する、500 種以上の物性値を収録しています。技術的に最も重要な化学物質、化学物質クラス、同族列クラスを含む、無機および有機物質を約 12,000 件収録しています。ほとんどの化学物質には CAS 登録番号が付与されています。

データベースは英語で、データ表のようなファクト・レコードと文献レコードの二つのタイプの情報単位で構成されています。複数のデータ表が一つの文献レコードに由来する場合があります。

DEThERM は次のファイルを集合したものです。BDBT (Berliner Datenbank Thermodynamik), COALDATA (COAL Physical Property Database), DDB (Dortmunder Datenbank), DECHEMA (DECHEMA Thermophysical Property Database), EL DAR (Elektrolyt Datenbank Regensburg)

DEThERM には Oldenburg 大学の共沸混合物のデータや、純物質の基礎的なデータ集である、旧東ドイツの Saechsische Olefin Werke Bohlen b. Leipzig (ファイルセグメント SOW) と Zentrales Informationsverarbeitung Chemie (INFOTHERM) が収録されています。

このデータベースに収録されている物性値の定義については NUMERIGUIDE ファイルによって、オンライン上で調べることができます。

DEThERM では化学物質名称 (/CN) フィールドでオンラインシソーラスが利用できます。

収録内容

化学物質同定情報
熱力学的物性
多成分系物性
電気的物性
輸送物性

表面特性
電気化学的物性
物性関連情報
データタイプ情報
系の状態情報
書誌情報

収録源

雑誌
会議予稿集
ハンドブック類

製造業者のデータ
学位論文
レポート
規格

ファイル内容

1819 年から現在まで
データ表のレコードは約 759,700 件 (2011 年 7 月現在)
書誌的情報のレコードは約 84,000 件 (2011 年 7 月現在)

更新は年 2 回 (不定期)
アラート (自動 SDI 検索) は利用できません。

検索補助資料

DEThRM データベースデスクリプション
オンライン・ヘルプ (HELP DIRECTORY で利用できるすべてのヘルプメッセージが表示されます)

STNGUIDE
NUMERIGUIDE

データベース製作者

DECMA e. V.
Theodor-Heuss-Allee 25
D-60486 Frankfurt am Main
Germany
Phone: (+49) 69/7564-245
Telefax: (+49) 69/7564-201
著作権所有者

データベース提供者

Fachinformationszentrum Chemie GmbH
Postfach 126050
D-10593 Berlin
Germany
Phone: (+49) 30/399-77-111
Telefax: (+49) 30/399-77-134
e-mail: info@fiz-chemie.de

ヨーロッパ

STN カールスルーエ

FIZ Karlsruhe
P.O. Box 2465
76012 Karlsruhe
Germany
Phone: +49-7247-808-555
Fax: +49-7247-808-259
E-mail: helpdesk@fiz-karlsruhe.de
Internet: www.stn-international.de

日本

STN 東京

一般社団法人 化学情報協会
〒113-0021 東京都文京区本駒込6-25-4 中居ビル
Phone: 0120-003-462 (Help Desk)
: 0120-151-462 (上記以外)
Fax: 03-5978-4090
E-mail: support@jaici.or.jp (Help Desk)
customer@jaici.or.jp (上記以外)
Internet: www.jaici.or.jp

北アメリカ

STN コロンバス

CAS
P.O. Box 3012
Columbus, Ohio 43210-0012 U.S.A
CAS Customer Care:
Phone: 800-753-4227 (North America)
614-447-3700 (worldwide)
Fax: 614-447-3751
E-mail: help@cas.org
Internet: www.cas.org

DECHEMA代理店

株式会社アスペンテックジャパン
〒102 東京都千代田区一番町5番地
アトラスビル
電話 03-3269-1710
FAX 03-3264-5425

Fachinformationszentrum Chemie GmbH代理店

(社)化学情報協会
〒113 東京都文京区本駒込6-25-4
中居ビル
電話 03-5978-3601
FAX 03-5978-3600

SEARCH および DISPLAY フィールド

DEThERM ファイルには、書誌情報レコードと表データレコードが存在します。物質同定情報またはデータ情報フィールドで検索した場合、相当する書誌情報レコードは、定型形式の BIB で表示できます。書誌情報のみのレコードを見るためには、矢印 (=>) プロンプトで SELECT BIBLIO と入力します。データに関連した書誌情報レコードを検索するためには、得られた E 番号で検索します。

書誌フィールドで検索した後は書誌フィールドだけ表示されます。収録されている物質同定情報およびデータ情報フィールドのテーブルを見るためには、矢印 (=>) プロンプトで SELECT TABLE と入力します。書誌情報に関連したすべてのテーブルを検索するために、得られた E 番号で検索します。このファイルには、後方一致が使用できるフィールドはありません。

書誌情報フィールド

フィールド	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
ベーシックインデックス ¹⁾ タイトル (TI) 抄録 (AB) (以上からの切出し語) CAS 登録番号	なし または/BI	S STEREO? S 5673-09-6 S BIVALENT TRANSITION METAL#	TI, AB, RN
レコード番号 著者名 分類コード (コードおよび分類項目名) 資料種類 ファイル・セグメント ²⁾ 国際標準 (資料) 番号 雑誌名 言語 発行年 ³⁾ 収録源 ¹⁾ (CODEN、巻、号、ページおよび 雑誌からの切出し語) タイトル ¹⁾	/AN /AU /CC /DT または/TC /FS /ISN /JT /LA /PY /SO /TI	S 1-120/AN S GMEHLING, J/AU S LLE/CC S LIQUID/CC S DISSERTATION/DT S ELDAR/FS S ACAPCT/ISN S ADVAN CHEM SER/JT S SPANISH/LA S 1985 < PY < 1991 S AJCHAS/SO S J CHEM SOC FARADAY/SO S (FARADAY AND 82 AND 5)/SO S SURFACTANT/TI S MASS ACTION MODEL/TI S L3 AND UP>=19960600	AN AU CC DT FS ISN JT LA PY SO TI
更新日 ³⁾ (入力日)	/UP または/ED		UP

- 1) このフィールドでは、(W) 演算子はスペースで代用できます。
- 2) 検索を一つのファイル・セグメント内に限定することができます。オンラインでヘルプメッセージを見るときには、矢印プロンプト (=>) の後で、HELP RANGE と入力してください。
- 3) 数値演算子あるいは範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。

化合物同定情報

フィールド	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
レコード番号	/AN	S 2-1004/AN	AN
原子数 ¹⁾	/ATC	S 2/ATC	MF
化学物質名 ²⁾	/CN	S FERROCENE/CN	CN
化学物質名称セグメント ³⁾	/CNS	S IRON/CNS	CN
元素数 (トータル) ¹⁾	/ELC	S 1/ELC	MF
元素数 ¹⁾	/元素記号	S 4/CL	MF
元素記号	/ELS	S CU/ELS	MF
フィールドの存在	/FA	S COLUMN?/FA S L1 AND RN/FA	FA
分子式	/MF	S CHCL3/MF	MF
成分数 ¹⁾	/NC	S 1/NC	IDE
周期律グループ	/PG	S LNTH/PG	MF
CAS 登録番号	/RN	S 271-89-6/RN	RN
物質ディスクリプタ	/SDC	S "RUHRGEBIET/REGION"/SDC	SDC
系の記述 ⁴⁾	/SYST	S I40/SYST	SYST

- 1) 数値演算子あるいは範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。
- 2) CA 索引名および同義名が索引されています。
擬化合物に対しては擬化合物名称が索引されています。
石炭および石油に対しては系統的な名称が索引されています。
- 3) /CNS フィールドは同義名からの名称セグメントは含みません。
- 4) コードまたは複合語が検索語として利用できます。以下のコードが利用できます。

1桁目のコード	複 合 語	2桁目のコード	複 合 語	3桁目のコード	複 合 語
O	有機	1	純物質	0	無反応
I	無機	2	二成分系	A	会合
M	有機金属	3	三成分系	C	化学反応
X	有機-無機の混合	4	四成分系	D	解離
A	有機-有機金属	5	五成分系	T	相転移
B	無機-有機金属	6	六成分系	E	電解
C	無機-有機-有機金属	7	七成分系		
E	電解質	8	八成分系		
		9	九成分系		
		0	十成分系		

データ情報

フィールド	デフォルト の単位	SEARCH コード	SEARCH 例	DISPLAY コード
データ種類 ¹⁾ 密度 ^{2), 3)}	— kg/m**3	/DATA /DEN	S MOLAR PROPERTY/DATA S 27/DEN S L1 AND DEN/PROP	DATA PROP
状態の記述 ¹⁾ (クラス、種別、関係、状態) 熱容量 ^{2), 3), 4)}	— J/mol*K	/STATE /HCP	S EUTECTIC/STATE S 44<HCP<50 S L3 AND HCP/PROP	STATE PROP
液体濃度 ^{2), 3), 5)}	mol/m**3	/XL	S .2/XL S L7 AND XL/PROP	PROP
圧力 ^{2), 3)}	Pa	/PRES	S 2.5E+05/PRES S PRES/PROP	PROP

(続く)

- 1) 正しい検索語を確認するには、EXPAND コマンドを利用してください。
- 2) 単位を指定してもなくても検索できます。単位をつけない場合は、デフォルトの単位が使われます。ご利用できない単位が使われた場合は、正しい単位を示すエラーメッセージが表示されます。
- 3) 数値演算子あるいは範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。
- 4) このフィールドでは、J/kg*K も単位として利用できます。
- 5) このフィールドでは、volfrac, wgfrac, mol/kg, molfrac も単位として利用できます。
- 6) 収録されている物性のリストを見るときには、EXPAND コマンドを利用します。物性名やコードを指定して検索できます。

データ情報

フィールド	デフォルトの単位	SEARCHコード	SEARCH例	DISPLAYコード
物性 ⁶⁾ (優先物性名)	—	/PROP または/PPN	S HCP/PROP S HEAT CAPACITY/PROP	PROP
物性関連 ¹⁾	—	/PROPR	S VISCOSITY/PPN S L2(S)PARTIAL EXCESS PROPERTY COMPOUND 1/PROPR	PROPR
行数 ³⁾ (表の行数)	—	/ROW	S L7 AND ROW>10	ROW
温度 ^{2), 3)}	K	/TEMP	S L6 AND TEMP>=600 S L5 AND TEMP/PROP	PROP
熱伝導率 ^{2), 3)}	W/m*K	/TCND	S TCND<=.06 S TCND/PROP	PROP
粘度 ^{2), 3), 7)}	Pa*s	/VS	S VS>5 M**2/S S TEMP/PROP AND VS/PROP	PROP

- 正しい検索語を確認するには、EXPAND コマンドを利用してください。
- 単位を指定してもしなくても検索できます。単位をつけない場合は、デフォルトの単位が使われます。ご利用できない単位が使われた場合は、正しい単位を示すエラーメッセージが表示されます。
- 数値演算子あるいは範囲指定による検索が可能な数値検索フィールドです。
- このフィールドでは、J/kg*K も単位として利用できます。
- このフィールドでは、volfrac, wgtfrac, mol/kg, molfrac も単位として利用できます。
- 収録されている物性のリストを見る際には、EXPAND コマンドを利用します。物性名やコードを指定して検索できます。
- このフィールドでは、m**2/s も単位として利用できます。

DISPLAY および PRINT 形式

検索結果は、個々の表示フィールド、定型表示形式、またはこれらを組み合わせて表示することができます。複数のコードは、カンマまたはスペースで区切ってください。フィールドは、指定した順に表示またはプリントされます。

DETERM ファイルには、書誌情報レコードと表データレコードが存在します。物質同定情報またはデータ情報フィールドで検索した場合、相当する書誌情報レコードは、定形式の BIB で表示できます。書誌情報のみのレコードを見るためには、矢印 (=>) プロンプトで SELECT BIBLIO と入力します。データに関連した書誌情報レコードを検索するためには、得られた E 番号で検索します。

書誌フィールドで検索した後は書誌フィールドだけ表示されます。収録されている物質同定情報およびデータ情報フィールドのテーブルを見るためには、矢印 (=>) プロンプトで SELECT TABLE と入力します。書誌情報に関連したすべてのテーブルを検索するために、得られた E 番号で検索します。

DETERM のデフォルト表示形式である QRD (Query Related Data: 質問式関連データ) は、検索語が出現する HIT と関連した情報が表示されます。ヒットターム・ハイライトは AN、RACC、および UP を除くすべての表示フィールドで利用できます。HIT および QRD 形式を使うためには、検索時にハイライトが ON であることが必要です。

形式	英語名	内容	入力例
	<u>Bibliographic Information</u>	<u>書誌情報</u>	
AB	Abstract	抄録	D AB
AN	Accession Number	レコード番号	D AN
AU	Author	著者名	D AU
CC	Classification Code	分類コード	D CC
DT	Document Type	資料種類	D DT
FS	File Segment	ファイル・セグメント	D FS
ISN	International Standard (Document) Number (CODEN)	国際標準 (資料) 番号 (CODEN)	D ISN
JT	Journal Title	雑誌名	D JT
LA	Language	言語	D LA
PY	Publication Year	発行年	D PY
RACC	Related Accession Number	関連レコード番号	D RACC
SO	Source	収録源	D SO
TI	Title	標題	D TI
UP ¹⁾	Update Date	更新日	D UP

1) カスタム形式のみ

DISPLAY および PRINT 形式

形式	英語名	内容	入力例
CN MF RN SYST	<u>Identification of Substance</u> Chemical Name Molecular Formula CAS Registry Number System Description	物質同定情報 化学物質名 分子式 CAS 登録番号 系の記述	D CN D MF D RN D SYST
ROW	<u>Data Information</u> Row Counter (Table Lines)	データ情報 行数 (テーブル行数)	D ROW

形式	内容	入力例
ALL	すべてのデータ (BIB, IDE, COL, TBL)	D L1 ALL
ALLO	すべてのデータ (BIB, IDE, COL, TBLO)	D L1 ALLO
BIB	書誌情報 (AB, AN, AU, CC, CT, DT, FS, LA, PY, RACC, SO, TI)	D BIB
COL	カラム概要 (PROP, PROPRL, DATA, STATE)	D L2 COL
IDE	物質同定情報	D L2 IDE
QRD ^{1), 2)}	質問式関連データ (HIT および関連情報) (デフォルト)	D QRD L1
TBL	カラム概要およびデータ表 (SI 単位)	D L5
TBLO	カラム概要およびデータ表 (オリジナル単位)	D L2 TBLO
TRIAL	AN, CN, PROP, ROW; 温度、圧力、濃度のような系パラメータ ; ヒットした表の行数	D L2 TBLO D TRIAL
HIT	検索語が出現するフィールド	D HIT

1) QRD に対する BIB は AB, AU, CC, CT, DT, FS, LA, PY, TI, RACC.

2) 検索したフィールドと、QRD 表示形式での表示フィールドの関係 (QRD 表示形式の表示フィールドは検索したフィールドによります。)

検索フィールド	QRD の表示フィールド
AN, RACC	AN
AU, BI, CC, CT, DT, LA, PY, TI	AN, BIB
FS	AN, FS, RACC
ISN, JT, または SO	AN, BIB*, SO
ROW	FA
ATC, CN, CNS, ELC, 元素記号, ELS, MF, NC, PG, RN, SDC, または SYST	AN, IDE
PROP, PROPR, DATA, STATE	AN, COL
数値検索	AN, IDE, TBL

シソーラスフィールド

すべての関係コードが検索フィールド(/CN)で、SEARCH または EXPAND コマンドとともに利用できます。

フィールド	関係コード	内容	入力例
/CN	ALL PFT UF USE ¹⁾	すべての関係語 (MF, SELF, RN, USE, UF) 被優先語 優先語	E BORON TRIHYDROXIDE+ALL/CN E CESIUM BROMATE+PFT/CN E BROMIC ACID CESIUM SALT+UF/CN E MAGNESIUM BROMIDE+USE/CN

1) デフォルトでは SET RELATION OFF になっています。SET REL ON を指定した場合は、関係コードを付けずに EXPAND した結果は関連コード USE を指定した結果と同じものになります。

シソーラスの説明

表示コード	意味
--->	入力語
MF	分子式
RN	CAS 登録番号
UF	被優先語
USE	優先語

SELECT および SORT フィールド

SELECT コマンドは、回答セットの指定したフィールドから抽出した語句に E 番号または L 番号を付与します。

SORT コマンドは、検索結果を指定したフィールドについてアルファベット順または数値順に再配列するために使用します。

また、DISPLAY または PRINT でテーブル形式を使うとき、TBL および TBLO のテーブル情報をソートできます。

TBL では、

=> D TBL TSORT = (DATSI, Cx, sort order)

TBLO では、

=> D TBLO TSORT = (DATOR, Cx, sort order)

ここで、x は、ソートされるカラム数で sort order は、A (昇順) または D (降順) です。もし、sort order を指定しなければ A と認識されます。

フィールド	フィールドコード	SELECT ¹⁾	SORT
抄録	AB	Y ²⁾	N
著者名	AU	Y	Y
CAS 登録番号	RN	Y (デフォルト)	N
化学物質名	CN	Y	N
分類コード	CC	Y	Y
データ種別	DATA	Y	N
資料種類	DT	Y	Y
ファイル・セグメント	FS	Y	N
国際標準 (資料) 番号	ISN	Y ³⁾	N
雑誌名	JT	Y ⁴⁾	N
言語	LA	Y	Y
分子式	MF	Y	N
物性情報	PROP	Y	N
物性関連情報	PROPRL	Y	N
発行年	PY	Y	Y
行数	ROW	Y	N
状態の記述	STATE	Y	N
系の記述	SYST	Y	N
標題	TI	Y	Y

1) ヒットタームだけを抽出させるには、HIT を使います。例: SEL HIT TI

2) /BI になります。

3) CODEN が SELECT され、/ISN になります。

4) /SO になります

サンプルレコード

ALL 形式での表示

Bibliography for Table Number: 2-21602 DECHEMA
 Accession Number (AN): 1-4666 DETHERM
 Related Acc. No. (RACC): Tables: 2-21574 - 2-21609
 Title (TI): ENTHALPY OF MIXING OF SOME
 HYDROCARBON-ALCOHOL AND HYDROCARBON-
 NITROALKANE MIXTURES AT 25 C.
 Author (AU): HSU, K. Y.; CLEVER, H. L.
 Source (SO): J. Chem. Eng. Data, (1975), 20, 3, 268-271
 CODEN: JCEAAX
 Document Type (DT): Article
 Language (LA): English
 Abstract (AB): THE ENTHALPY OF MIXING OF 1-HEXANOL WITH
 BENZENE, 2-METHYL- 2-BUTANOL WITH BENZENE,
 TOLUENE, AND 1,3,5-TRIMETHYLBENZENE, AND OF
 NITROMETHANE AND 2-NITROPROPANE WITH
 N-HEXANE, CYCLOHEXANE, METHYLCYCLOHEXANE,
 AND 2,2,4-TRIMETHYLPENTANE HAS BEEN
 MEASURED AT A TEMPERATURE OF 25 C. THE DATA
 WERE FITTED TO THE EXCESS PROPERTIES
 EQUATION. THE MIXTURE HEXANE/NITROETHANE
 FORMED PARTIALLY MISCIBLE LIQUID-LIQUID
 MIXTURES BETWEEN THE MOLE FRACTIONS 0.3230
 TO 0.7168. FOR THE MOLE FRACTIONS
 X(NITROETHANE) 0.323, 0.4008, 0.4837,
 0.5675, 0.6468, AND 0.7186 THE ENTHALPY
 VALUES WERE 341., 343., 342., 340., AND
 334. CAL/MOL. THE MIXTURE
 2,2,4-TRIMETHYLPENTANE/NITROETHANE FORMED
 PARTIALLY MISCIBLE LIQUID-LIQUID MIXTURES
 BETWEEN THE FRACTIONS (NITROETHANE) 0.376
 TO 0.7632. FOR THE MOLE FRACTIONS X
 (NITROETHANE) 0.376, 0.4578, 0.5418,
 0.6235, 0.698, AND 0.7632 THE ENTHALPY
 VALUES WERE 355., 350., 343., 322., AND
 316. CAL/MOL.
 Classification Code (CC): HMX: Enthalpies of mixing
 Controlled Term (CT): ENTHALPY OF MIXING; ISOBAR; ISOTHERM;
 EXCESS PROPERTIES; CALCULATION; EXCESS
 ENTHALPY

Identification of System
 System Description (SYST): 020 organic, binary system
 Substance (1) of (2):
 Chemical Name (CN): HEXANE
 Synonyms: N-HEXANE; HEXAN
 Molecular Formula (MF): C6 H14
 CAS Reg. Number (RN): 110-54-3

Substance (2) of (2):
 Chemical Name (CN): NITROETHANE
 Synonyms: NITROETHAN; ETHYL NITRITE
 Molecular Formula (MF): C2 H5 N O2
 CAS Reg. Number (RN): 79-24-3

---->

ALL形式での表示 (続き)

Data Information

Property (1) of (3):

Property (PROP): TEMP temperature (TSY)
 Original Unit: C
 SI Unit : K
 Data Type (DATA): experimental value
 Desc. of State (STATE): liquid state

Property (2) of (3):

Property (PROP): XL liquid concentration (XSY,
 concentration)
 Original Unit: mole fraction
 SI Unit : mole fraction
 Prop. Relation (PROPR): related to compound 2
 Data Type (DATA): experimental value
 Desc. of State (STATE): liquid state

Property (3) of (3):

Property (PROP): HMX excess enthalpy of mixing (HMX,
 heat of mixing, excess enthalpy, excess
 heat)
 Original Unit: cal/mol
 SI Unit : J/mol
 Prop. Relation (PROPR): excess property
 Data Type (DATA): experimental value
 Desc. of State (STATE): liquid state

SI UNIT VALUES

1: TEMP (K)	ERROR TEMP (K)	2: XL (mole fraction)	3: HMX (J/mol)	ERROR HMX (J/mol)
298.15	0.02	0.111	935.88	8.71
298.15	0.02	0.1952	1312.4	8.71
298.15	0.02	0.2540	1412.8	8.71
298.15	0.02	0.7815	1285.4	8.71
298.15	0.02	0.8342	1104.2	8.71
298.15	0.02	0.8758	874.66	8.71
298.15	0.02	0.9079	672.15	8.71
298.15	0.02	0.9507	384.9	8.71

Billing Class: 2

化学物質名シソーラスでの EXPAND

=> E FLUORANTHENE+ALL/CN

E1 MF C16 H10/CN
 E2 130 --> Fluoranthene/CN
 E3 RN 206-44-O/CN
 UF 1,2-Benzacenaphthene
 UF Idryl
 ***** END *****