

КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Химический институт им. А.М. Бутлерова

Д.А. Татаринов, А.В. Немтарев

ОНЛАЙН ПОИСКОВЫЕ СИСТЕМЫ НАУЧНОЙ ИНФОРМАЦИИ

Учебно-методическое пособие по курсу

Органическая химия

Казань – 2013

Печатается по решению учебно-методической комиссии
Химического института им. А.М. Бутлерова

Авторы-составители:

Канд. хим. наук Д.А. Татаринов

Канд. хим. наук А.В. Немтарев

Рецензент

Старший преподаватель, канд. хим. наук Маджидов Т.И.

Онлайн поисковые системы научной информации: Учебно-методическое пособие / Д.А. Татаринов, А.В. Немтарев. – Казань; Казанский университет, 2013. - 32 стр.

В учебно-методическом пособии описаны основные системы для поиска химической научной информации и методы работы в них. В пособии подробно описаны принципы работы с наиболее популярными коммерческими и некоммерческими поисковыми системами. Предназначено для студентов III курса химического факультета КФУ, выполняющих курсовую работу «Литературный синтез», а также для студентов IV и V курсов, выполняющих курсовые и дипломные работы, аспирантов, преподавателей и научных сотрудников.

Казанский университет, 2013

Введение

Экспоненциальный рост объема информации, созданной человечеством предъявляет высокие требования к системам сортировки и поиска новой информации.

Такие широко известные поисковые гиганты как Google, Яндекс и др. обладают высокоэффективными алгоритмами поиска информации и позволяют найти необходимую информацию буквально за несколько секунд.

При поиске научной информации такие неспециализированные поисковые системы не всегда удобны. В тоже время одно из требований, предъявляемых к современному ученому, является умение быстро найти необходимую информацию. Простой просмотр различной справочной литературы и реферативных изданий, таких как «Реферативный журнал химии», «Chemical abstracts» и др. в современных условиях является непозволительной тратой времени, сил и ресурсов и совершенно не подходит для исследователей настоящего времени.

Научное сообщество и ряд коммерческих организаций при участии крупнейших издательств научно-периодической литературы создали свои специализированные поисковые системы, позволяющие производить поиск по ключевым словам, фразам, и структурам химических соединений как в рамках периодических изданий отдельных издательств, так и по большинству журналов, патентных баз данных, монографий и других изданий, выпускаемых в мире.

Владение навыками быстрого и эффективного поиска научной информации является необходимой профессиональной компетенцией современного специалиста-химика, ученого, студента.

Все научные поисковые системы условно можно разделить на общедоступные, т.е. доступ к которым бесплатен, и на коммерческие, доступ к которым возможен за плату и, как правило, имеется в учреждениях и организациях, оплативший его.

1. Формулировка запроса - Как искать?

Практически все описываемые далее системы поиска научной информации имеют англоязычный интерфейс и потому формулировка запросов и выдача информации происходит только на английском языке, либо на языке химических формул, если такая возможность заложена в функционал поисковой системы.

1.1 Запрос по ключевым словам или названию соединения. Если вам известно название соединения на русском языке, то для получения его названия на английском языке необходимо воспользоваться словарем или переводчиком. Если название относительно простое, например ванилин, винная кислота, фенол и т.д., то, для этих целей подойдет переводчик Google (<http://translate.google.ru>), онлайн версия словаря abbyu lingvo (<http://www.lingvo-online.ru/ru>), переводчик Яндекс (<http://translate.yandex.ru>) или любые другие доступные электронные переводчики и словари, обладающие необходимым словарным запасом. Если же название более сложное, например 4,5-диметил-2,6-дихлороктан, то можно переводить название по частям, соблюдая правила систематической номенклатуры. В итоге получаем 2,6-dichloro-4,5-dimethyloctane.

Другой способ быстро получить название соединения – нарисовать его в одном из доступных по бесплатной академической или образовательной лицензии редакторов химических формул ChemSketch¹ или, MarvinSketch², в числе функций, которых есть перевод структурной формулы в систематическое название

В случае, когда необходимо найти литературу для класса или группы соединений, например, для написания обзора, запрос по ключевым словам также является достаточно удобным способом поиска информации. К примеру, вам требуется найти литературу по эпоксидам на основе терпенов. Ключевые слова для поиска терпен и эпоксид – terpene epoxides. Поиск по этим словам в любой поисковой системе даст ссылки на все найденные документы, в которых эти слова встречается вместе.

1.2. Поиск по структурной формуле – наиболее простое и интуитивно понятное средство поиска – нарисовал формулу, нажал поиск и получаешь результат.

Но и здесь есть свои нюансы. Допустим, стоит задача алкилирования фенольной группы, но в ароматическом кольце сложные заместители, и поиск по конкретной структуре ничего не дал. В таком случае необходимо произвести ретросинтетический анализ соединения и вычленив ту его часть, которая подвергается превращению - фенольный гидроксил, следовательно, берем

¹ <http://www.acdlabs.com/downloadhttp://www.acdlabs.com/download>

² <http://www.chemaxon.com/products/marvin/marvinsketch>

простейший представитель класса – сам фенол, точнее его эфир. При этом в результате поиска будут как сам фенол, так и различные его производные, в которых содержится подобный структурный фрагмент. Из полученных результатов поиска следует выбирать наиболее структурно близкие аналоги искомого соединения. Процесс упрощения структуры можно производить последовательно, убирая поочередно заместители, или изображая структурные изомеры искомого соединения.

2. Общедоступные поисковые системы

2.1. Chemspider – общедоступная поисковая система, принадлежащая [Royal Society of Chemistry](http://www.chemspider.com) и доступная по адресу <http://www.chemspider.com>. Основные возможности: поиск соединений по систематическому или тривиальному названию, поиск по структурной формуле или ее сокращенному строчному варианту SMILES (Simplified molecular-input line-entry system) или InChI (The IUPAC International Chemical Identifier)³, по торговому названию, если вы ищете коммерчески доступный продукт. Также доступно приложение для Android и IOS. Главное окно поисковой системы (рис. 1) содержит поисковую строку (simple search), под которой содержатся пояснения по возможным вариантам поисковых запросов и ссылки для переключения на поиск по структуре (structure search) и продвинутый поиск с введением дополнительных параметров (advanced search). Переключение на вкладку

Рис. 1

structure search (рис. 2) переводит в окно поиска по структуре, где можно: 1. Input structure - ввести структуру а) Upload a structure file - загрузить заранее нарисованную в одном из химических редакторов формулу, сохраненную

³ Маджидов Т.И. Введение в хемоинформатику: Компьютерное представление химических структур: учеб. пособие / Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, И.С. Антипин, А.А. Варнек. – Казань: Казан. ун-т, 2013. – 174 с.

прямо из редактора в подходящем формате, b) InChI or ChemSpider ID - перевести в структурную формулу название соединения, сокращение SMILES или InChI, либо c) перейти к пункту 2. Edit molecule - приступить к набору формулы по нажатию левой кнопки мыши на рисунке.

The screenshot shows a web-based chemical search interface. At the top, there is a 'Search' dropdown menu. Below it are three tabs: 'Simple', 'Structure' (which is selected), and 'Advanced'. A link for 'More searches...' is also present. The main area is divided into two sections:

1. Input your structure (choose a, b or c)

- a.** Upload a structure file (MOL, SDF, CDX) or image file (PNG, JPG, GIF). There is a 'Обзор...' button and the text 'Файл не выбран.'.
- b.** Convert to structure using a Name, SMILES, InChI or ChemSpider ID. There is an input field and a 'Convert' button.
- c.** Click the image to draw out the structure yourself.

2. Edit molecule

This section contains a chemical structure editor. On the left is a canvas showing the chemical structure of 3-methoxybenzaldehyde (SMILES: COc1cccc(C=O)c1O). On the right are search options:

- Exact
- Substructure
- Similarity

Below these are 'Search Options' with a dropdown arrow:

- Exact Match
- All Tautomers
- Same Skeleton (Including H)
- Same Skeleton (Excluding H)
- All Isomers

At the bottom left, there is an 'Options' link. At the bottom center, there are 'Search' and 'Clear form' buttons. At the bottom right, there is a 'Search Hits Limit: 100' dropdown menu.

Рис. 2

Наиболее удобно сразу перейти к редактированию структурной формулы – при нажатии появляется новое окно с редактором химических формул (рис. 3).

В окне редактора в верхней строке заготовки готовых циклических структур, снизу расположены кнопки выбора химических элементов, слева кнопки для включения функций выделения, стирания и рисования различных типов связей, знаков химических реакций, зарядов и т.д.

Под окном редактора расположены кнопки “Clean Molecule” – выравнивание длин связей и валентных углов, “Ассерт” – подтверждение набранной структуры для поиска и “Cancel” для отмены. После нажатия кнопки “Ассерт” в главном поисковом окне появляется нарисованная формула (см. рис. 2) и можно приступать к поиску. При этом можно дополнительно ограничить или расширить поиск, поставив точки у соответствующих надписей (рис. 2). Exact – поиск по точному соответствию. Substructure – за основу взята нарисованная структура, но она может содержать также дополнительные заместители, или входить в состав более сложной молекулы. Similarity – поиск похожих структур – максимально широкий и наименее точный. Search option –

поисковые опции. Exact match – полное совпадение. All Tautomers – все таутомеры соединения (если возможны). Same skeleton – соединения со сходным углеродным скелетом. All Isomers – все изомеры нарисованного соединения.

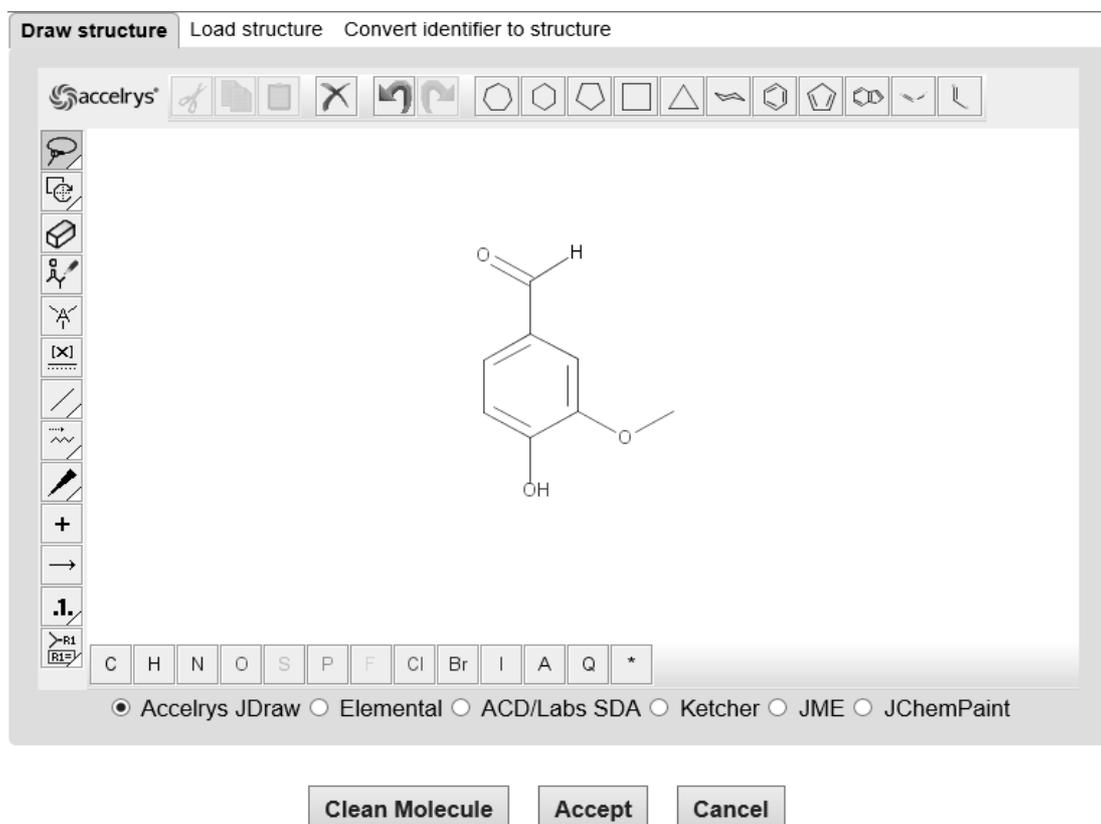


Рис. 3

После нажатия кнопки Search (рис. 2) выводятся результаты поиска, где представлены все обнаруженные соединения, среди которых можно выбрать наиболее подходящую (рис. 4).

Grid
 Tile
 Table
 Names/Structures
 Names

ID	Structure	Molecular Formula	Molecular Weight	# of Data Sources	# of References	# of PubMed	# of RSC
11629		C ₈ H ₈ O ₂	152.14732	103	181	49	156
124		C ₈ H ₈ O ₂	152.14732	100	376	222	47
1253		C ₈ H ₈ O ₂	152.14732	98	669	1339	1355

Рис. 4

При выборе искомой структуры и нажатии на ней левой кнопкой мыши появляется окно с основными сведениями о соединении (рис. 5)

Search term: Structure Search - Exact

Vanillin

ChemSpider ID: 13860434
Molecular Formula: C₈H₈O₃
Average mass: 152.147293 Da
Monoisotopic mass: 152.047348 Da

▼ Systematic name
4-Hydroxy-3-methoxybenzaldehyde

► SMILES and InChIs
► Cite this record

2D 3D Save Zoom

► Names and Identifiers
► ChemSpider Searches
► Properties
► Spectra
► CIFs
► Articles
► Chemical Vendors
► Data Sources
► Wikipedia Article(s)
► Patents
► RSC Databases
► Description
► Pharmacological Links

Featured data source
The Merck Index Online has more data on this compound

Want to comment on this record?
Leave Feedback

Рис. 5

Если необходимы методики синтеза, очистки или выделения искомого соединения, то необходимо открыть ссылку Articles и открыть соответствующие ссылки на статьи. При этом с домашнего компьютера, скорее всего большинство статей будет недоступно.

Можно сохранить ссылки на статьи в отдельном файле, чтобы затем скачать их полный текст с компьютеров учебного заведения, либо выписать данные статьи (название журнала, год, том, страницу и авторов) и взять печатную версию в библиотеке.

2.2. Chemspider SyntheticPages – база данных методик получения различных соединения. В целом повторяет функции chemspider, но дает ссылки на конкретные синтетические методики, доступные всем. Находится по адресу <http://cssp.chemspider.com/>

2.3. Pubchem - база данных химических соединений и смесей, являющаяся общественным достоянием. Обслуживается Национальным центром биотехнологической информации США (NCBI), подразделением Национальной медицинской библиотеки США, которая в свою очередь является подразделением Национальных Институтов Здоровья США (NIH). Более 80

различных баз данных вносят свой вклад в рост базы данных PubChem.⁴

Доступна по адресу <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

Обсуждаемая база данных содержит самые разнообразные сведения о химических соединениях и смесях, главным образом о биологических свойствах, но также и химических свойствах, способах получения и модификации соединений. На главной странице (рис. 6) представлена строка для базового текстового поиска с тремя вкладками: BioAssay – поиск данных о биологических испытаниях соединений по названиям этих испытаний, например “cancer cell line”. Вкладка Compound – поиск по названиям химических соединений. Выводит на экран доступную информацию о биологической активности чистых и охарактеризованных соединений из баз данных pubchem и ссылки на сторонние источники. Substance - поиск по названиям химических веществ, но выводит на экран



Рис.6

не только информацию о чистых веществах, но также о смесях, экстрактах, комплексах и неохарактеризованных соединениях.

Под строкой поиска ссылки structure search – ссылка на страницу поиска по структуре (рис. 7). Страница содержит несколько вкладок: Name/Text – поиск по ключевым словам; Identify/Similarity – поиск идентичных/сходных структур.

Позволяет искать структуры, похожие на исходную с заданной степенью «похожести», что достигается применением различных параметров поиска. Кнопка Launch запускает редактор химических формул.

Substructure/Superstructure – поиск субструктур и суперструктур (отличающихся порядком связей).

⁴. <http://ru.wikipedia.org/wiki/PubChem>

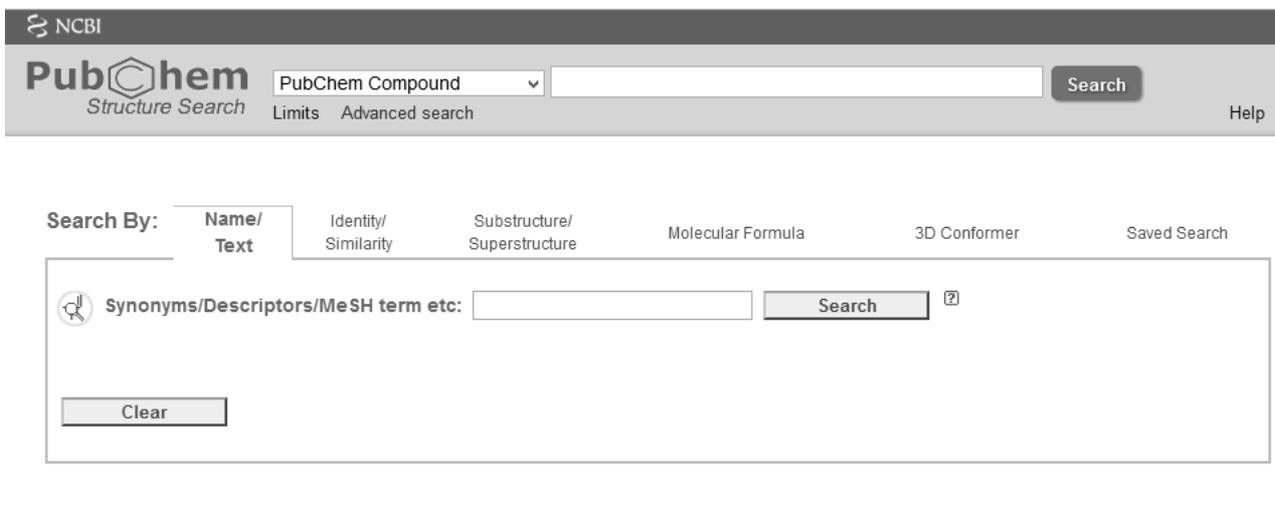


Рис. 7

2.4. E-molecules –поисковик различных химических соединений (лекарственные субстанции, реактивы и.т.д.), имеющих в продаже у различных производителей. Доступен по адресу: www.emolecules.com. Позволяет быстро найти необходимые соединения, имеющиеся в продаже а также узнать их физические характеристики или проверить, впервые ли синтезировано соединение. Стартовая страница (рис. 8) содержит редактор химических формул и поисковую строку для поиска по названию, каталожному номеру, номеру CAS или сокращению SMILES.

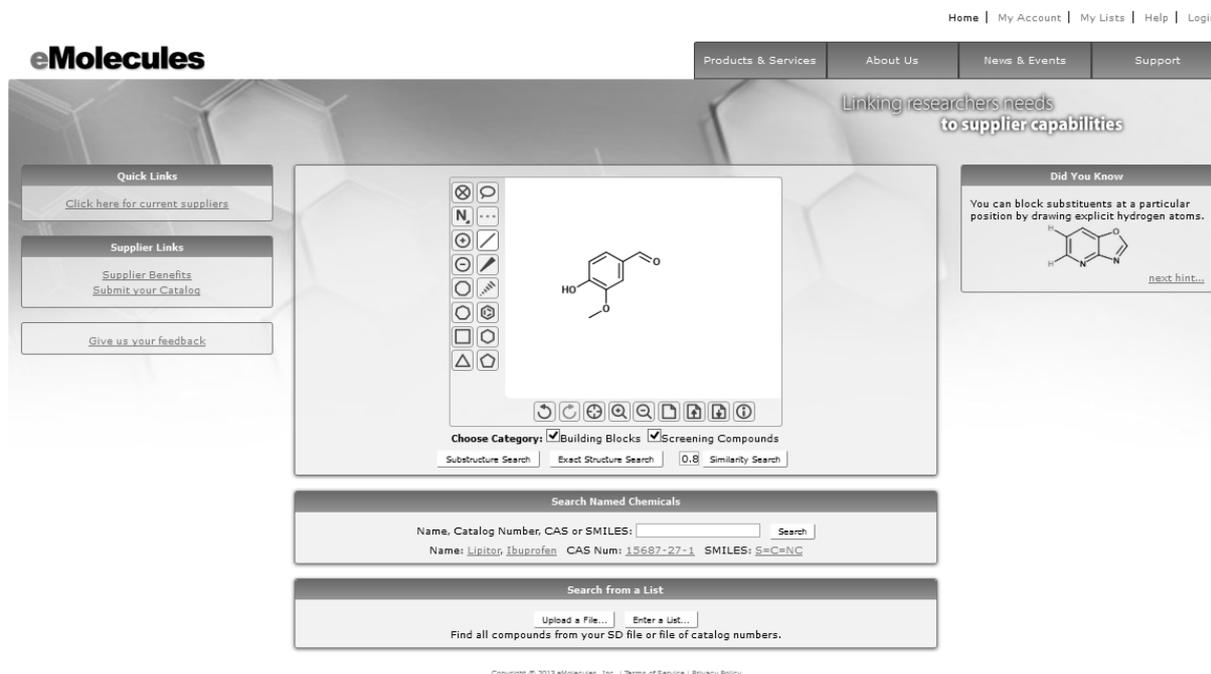


Рис. 8

2.5. Chemicalize – общедоступный поисковый сервис, позволяющий найти химическую информацию в сети интернет как на специализированных химических ресурсах, так и на обычных, неспециализированных. Доступен по

адресу chemicalize.org. Поиск содержит несколько поисковых режимов. Для каждого поискового режима предусмотрен обучающий видеоролик и примеры использования, которые расположены ниже поисковой строки (рис. 9).

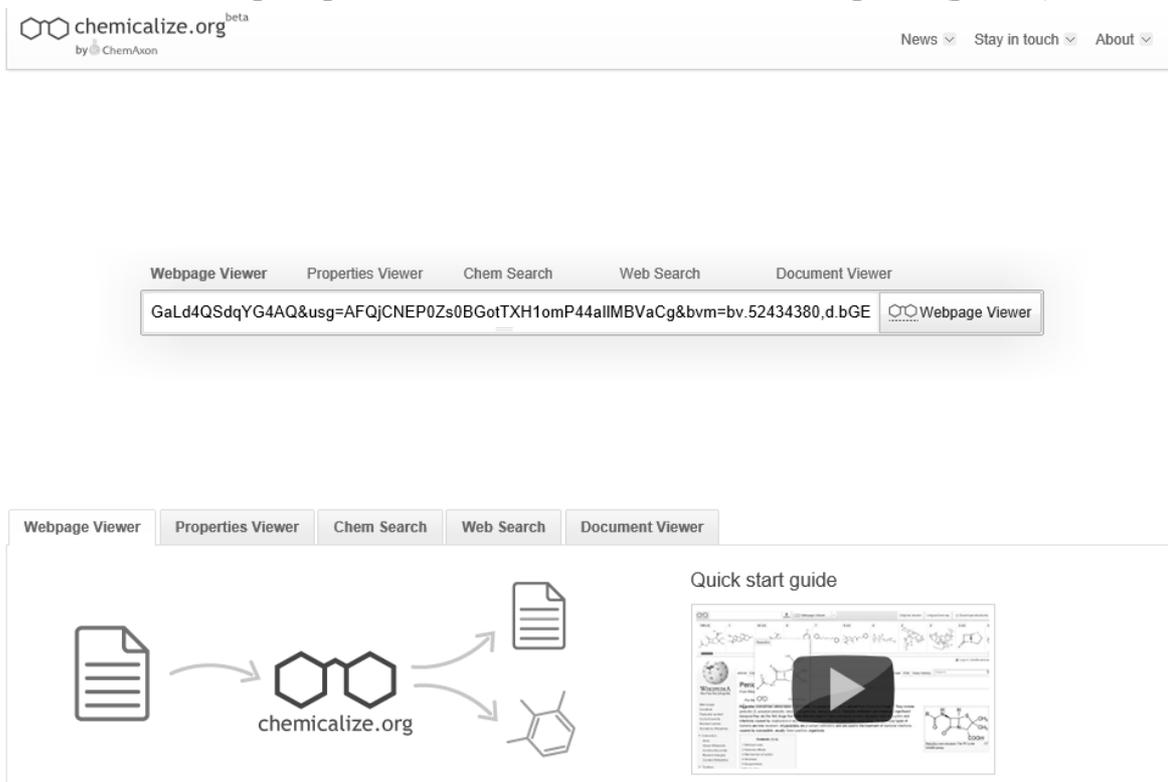


Рис. 9

Webpage Viewer – позволяет просматривать интернет страницы в особом режиме, когда все химические названия и аббревиатуры переведены в формулы

Рис. 10

и при наведении курсора на название всплывает окошко со структурной формулой (рис. 10). Для этого необходимо скопировать ссылку на интересующую страницу и вставить в поисковую строку в режиме Webpage Viewer. При этом появляется страница, на которой выведены химические формулы всех соединений, названия которых встречаются на странице. Фактически это переводчик с языка химических названий на язык формул.

Properties viewer – позволяет находить информацию о различных

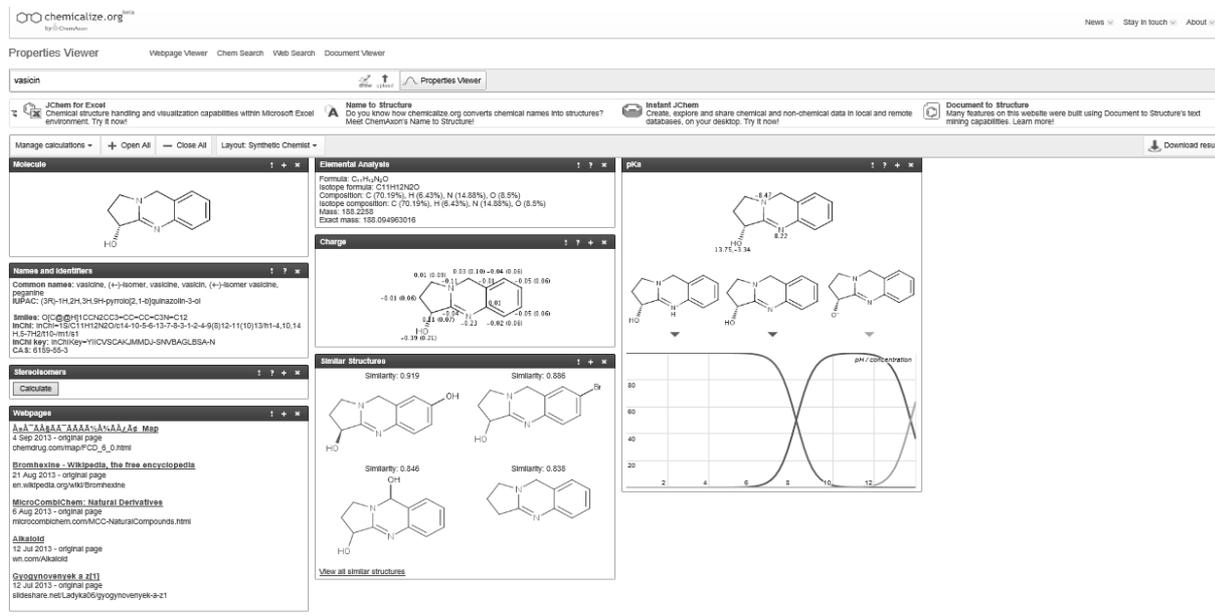


Рис. 11

физических свойствах молекулы, причем не только экспериментально полученную, но и рассчитанную (рис. 11).

Поиск соединений доступен по названию, номеру CAS, InChi, SMILES, по нарисованной во встроенном редакторе структурной формуле, или загруженной из файла, созданного в химическом редакторе на вашем компьютере.

Результаты поиска содержат разнообразную информацию о соединении и возможно произвести простейшие расчеты таких параметров как LogP, поляризуемость и т.д., получая более богатый набор характеристик. Для этого необходимо нажать кнопку manage calculations.

Chem Search – поиск соединений по названию, формуле и т.д. Позволяет искать по базе данных chemicalize и также по сети интернет. Выводит также ссылки на различные ресурсы, содержащие сведения об искомом соединении.

Web Search – поиск информации о соединении в сети интернет по его названию, формуле ...Химический Google.

Document viewer – позволяет просматривать документы в режиме, сходном с режимом Webpage Viewer. Для этого нужно загрузить документ PDF или ввести адрес, по которому он размещен.

Все вышеперечисленные поисковые системы поддерживают также поиск по структурной формуле прямо из химических редакторов. Для этого

достаточно загрузить и установить один из химических редакторов ChemSketch (рис. 12) (<http://www.acdlabs.com/download>)

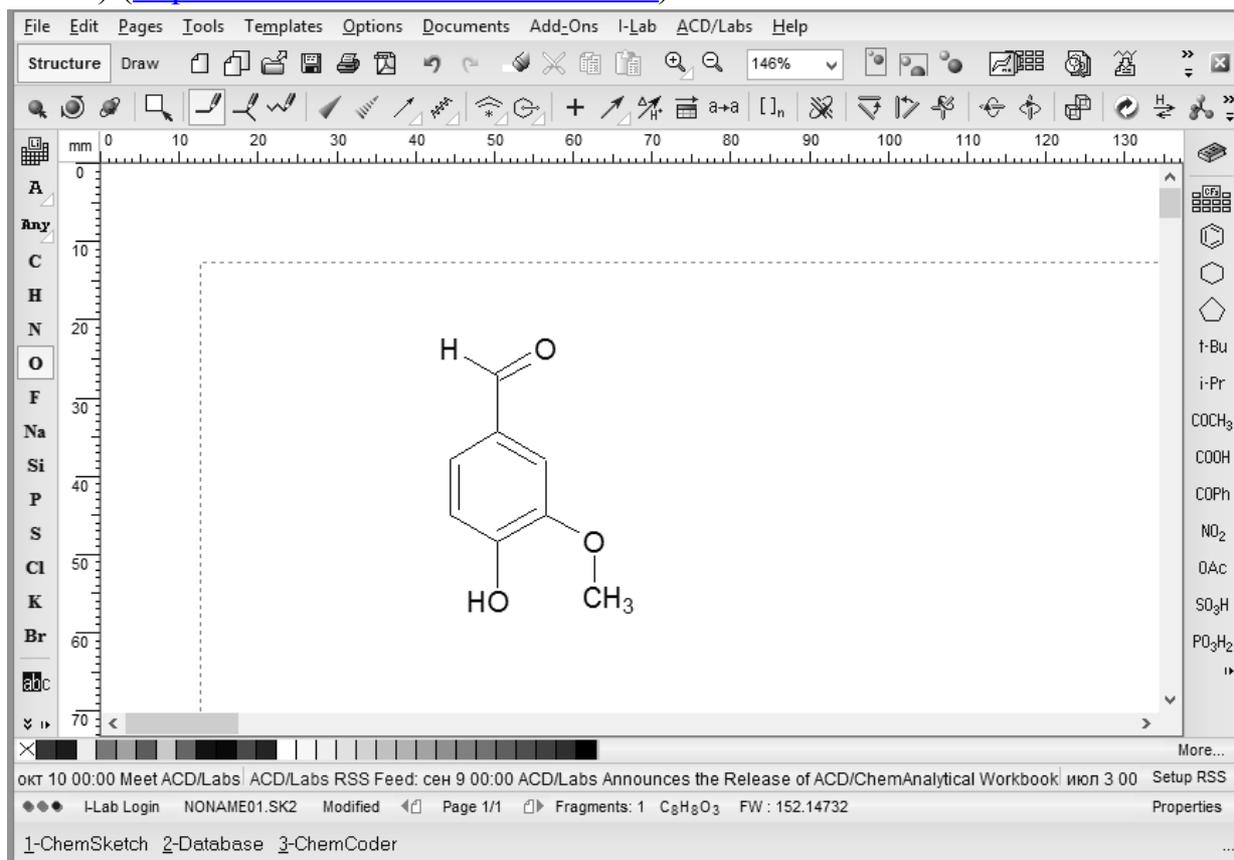


Рис.12

или MarvinSketch (рис.13) (<http://www.chemaxon.com>). Оба редактора доступны

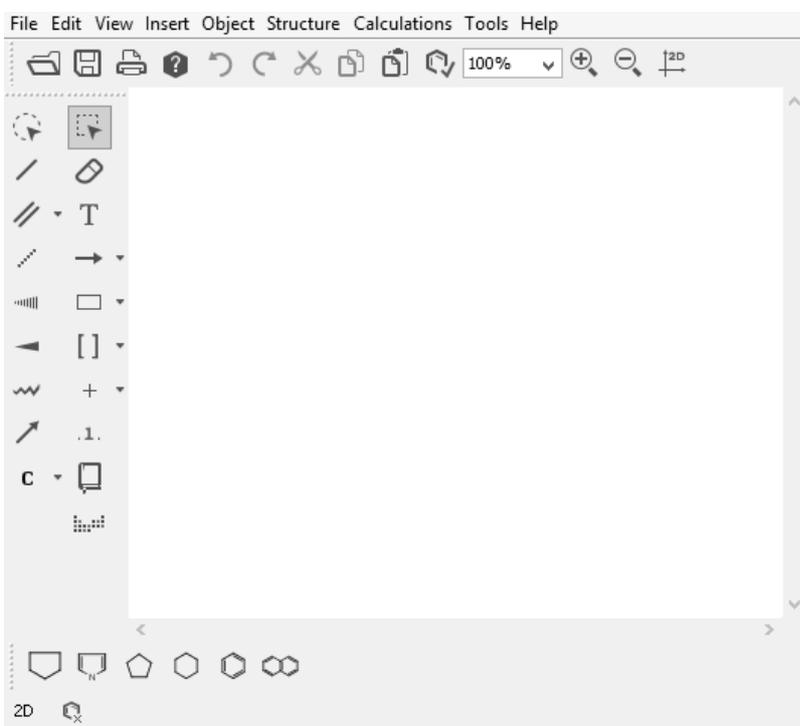


Рис.13

абсолютно бесплатно для образовательных целей и загрузка возможна после процедуры регистрации. После загрузки и установки программ на компьютер необходимо лишь нарисовать структурную формулу соединения и нажать одну из кнопок (ChemSpider, eMolecules, PubChem) приложения ChemSketch (рис. 12) или меню File>Find structure online в программе MarvinSketch.

2.6. Organic Syntheses – общедоступный поисковый химический интернет-ресурс, являющийся электронной версией известного печатного издания Organic Syntheses, имеющего издание на русском языке под названием «Синтезы органическиз препаратов». Доступен по адресу <http://orgsyn.org>.

Поисковая система снабжена поиском по ключевым словам и по структурным формулам. Издается с 1921 года и на сегодняшний день содержит более 35000 методик, которые тщательно проверены на воспроизводимость редакторской коллегией и постоянно пополняются. Для начала поиска достаточно нажать ссылку *search* (рис. 14) для переключения в основной поисковый интерфейс структурного и вербального поиска (рис. 15) и в появившемся окне ввести ключевые слова в поисковую строку либо нажать ссылку «Click here to draw a structure» и перейти к редактированию формулы.

The image shows the homepage of the Organic Syntheses website. At the top left is the logo for Organic Syntheses, described as "A Publication of Reliable Methods for the Preparation of Organic Compounds". A search box is in the top right. The main content area has a navigation bar and several sections: "Featured Articles" with a highlighted article on the air oxidation of primary alcohols, "Current Volume" with two article previews, and a "Board of Editors" section on the right. A "QUICK NAVIGATION" sidebar on the right includes dropdown menus for selecting annual and collection volumes, a "QUICK SEARCH" section with radio buttons for "Display References" and "Display Compounds", and a "Click to draw a structure" button.

Рис. 14

Можно также загрузить заранее нарисованную в одном из химических редакторов формулу и затем сохраненную в формате cdx (ссылка “Upload ChemDraw® CDX File”).

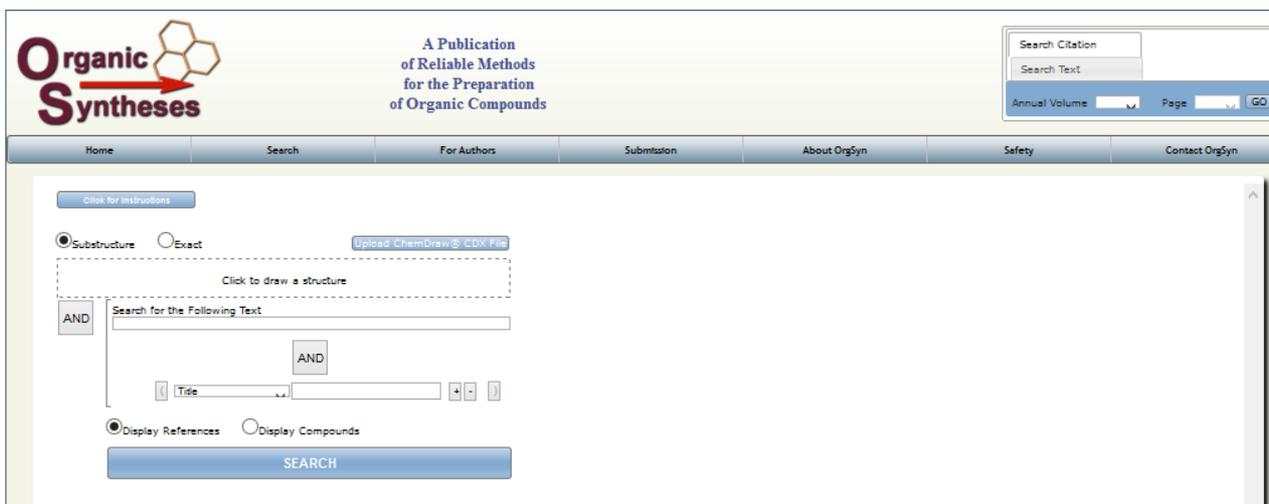


Рис. 15

Окно для структурного поиска содержит панель с основными инструментами для редактирования формул и соответствующее поле для редактирования (рис. 16).

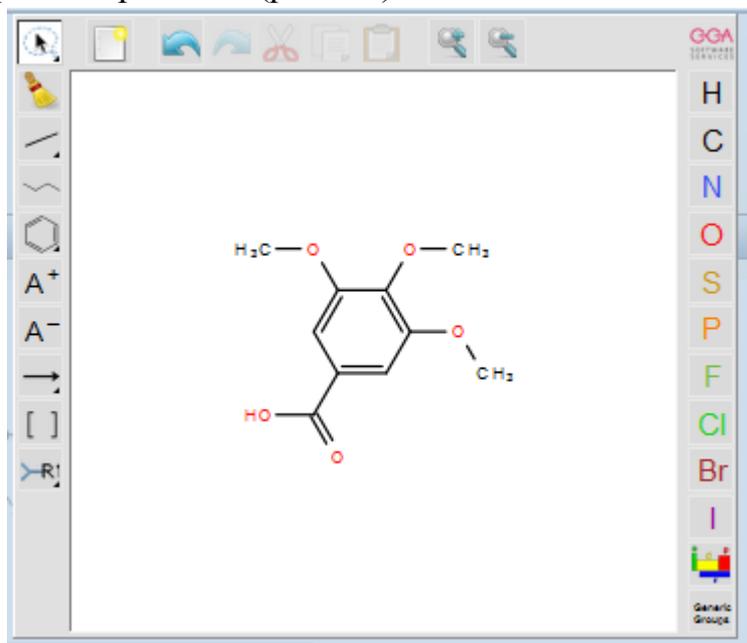


Рис. 16

После нажатия кнопки Search на экран будут выведены результаты поиска в виде прямоугольных областей, содержащих схемы реакций, название статьи и авторов, аналогичные представленным на начальной странице (рис. 15). Чтобы найти только продукт, необходимо перед структурой нарисовать реакцию стрелку, в то время как для поиска начального вещества

(веществ) стрелка должна быть после формул.

Чтобы найти только продукт, необходимо перед структурой нарисовать реакцию стрелку, в то время как для поиска начального вещества (веществ) стрелка должна быть после формул.

2.7. eLIBRARY.RU (<http://elibrary.ru/defaultx.asp>) — Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU - это крупнейший российский информационный портал в области науки, технологии, медицины и образования, содержащий рефераты и полные тексты более 18 млн научных статей и публикаций. На платформе eLIBRARY.RU доступны электронные версии более 3200 российских научно-технических журналов, в том числе более 2000 журналов в

открытом доступе. Позволяет вести поиск по ключевым словам, в том числе и на Русском языке (только в русскоязычных публикациях) рис. 17. В полном объеме ресурсы

НАУЧНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ БИБЛИОТЕКА eLIBRARY.RU

ДЛЯ ЧИТАТЕЛЕЙ | ДЛЯ ОРГАНИЗАЦИЙ | ДЛЯ ИЗДАТЕЛЕЙ | ДЛЯ АВТОРОВ | ПОДПИСКА

Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU - это крупнейший российский информационный портал в области науки, технологии, медицины и образования, содержащий рефераты и полные тексты более 18 млн научных статей и публикаций. На платформе eLIBRARY.RU доступны электронные версии более 3200 российских научно-технических журналов, в том числе более 2000 журналов в открытом доступе.

ПОИСК В БИБЛИОТЕКЕ

Поиск

Расширенный поиск

НАВИГАТОР

- Персональная карточка
- Общая статистика
- Поисковые запросы
- Тематический рубрикатор
- Каталог журналов
- Подборки публикаций
- Подборки журналов
- Авторский указатель
- Ключевые слова
- Новые поступления
- Новости библиотеки
- Настройка

ПЕРСОНАЛЬНЫЙ ПРОФИЛЬ

Ваш личный кабинет в библиотеке - работа с персональными подборками журналов, статей, история Ваших поисковых запросов, настройка панели навигатора, настройка извещений по электронной почте, внесение изменений в персональную карточку и т.д.

КАТАЛОГ ЖУРНАЛОВ

Поиск журналов в каталоге научной периодики, содержащем более 37 тысяч наименований журналов, в том числе более 7700 российских. Просмотр списка доступных выпусков этих журналов и их оглавлений

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Поиск научных публикаций с помощью авторского указателя, содержащего более 4,8 миллионов авторов, в том числе более 590 тысяч российских

ПОЛНОТЕКСТОВЫЙ ПОИСК

Основная поисковая форма с возможностью поиска по различным параметрам в базе данных eLIBRARY.RU, содержащей более 18 миллионов научных публикаций с аннотациями, в том числе по полному тексту более 7 миллионов

ОСНОВНЫЕ ПРОЕКТЫ

- Российский индекс научного цитирования
- Научные журналы открытого доступа
- Книжная коллекция
- Информационные ресурсы в области нанотехнологий
- Подписка на российские научные журналы
- Международная конференция Science Online

НОВОСТИ И ОБЪЯВЛЕНИЯ

16.09 Началась подписка на 2014 год. Обращайтесь в отдел продаж

13.06 Опубликованы презентации докладов конференции SCIENCE ONLINE XVII

22.05 Опубликована программа конференции SCIENCE ONLINE XVII

29.04 Опубликован список участников конференции SCIENCE ONLINE XVII

Другие новости

ТЕКУЩЕЕ СОСТОЯНИЕ

Число наименований журналов: 37210

Рис. 17

eLIBRARY.RU открыты только подписчикам. После регистрации есть возможность получить доступ к полным текстам статей (но немногих) и доступна библиографическая информация по всей имеющейся базе данных. Интерфейс достаточно прост и интуитивно понятен, полностью на русском языке. Возможности поиска простейшие. Кроме этого есть возможность просмотреть цитирование своих статей другими авторами и рассчитать индекс цитируемости РИНЦ.

2.8. Researchgate – социальная сеть для ученых. Доступна по адресу: <https://www.researchgate.net>. По структуре похожа на Facebook (рис. 18), но естественно для научного общения. Позволяет производить поиск по публикациям участников, обсуждение научных проблем, обмен публикациями. В **Researchgate** имеется семантический поиск, позволяющий анализировать аннотации статей целиком, а не отдельные ключевые слова, что позволяет получать более точные результаты. При этом проиндексированная база данных

очень велика и включает не только внутренние ресурсы пользователей, но и многие общедоступные базы данных. Большим преимуществом данной социальной сети является

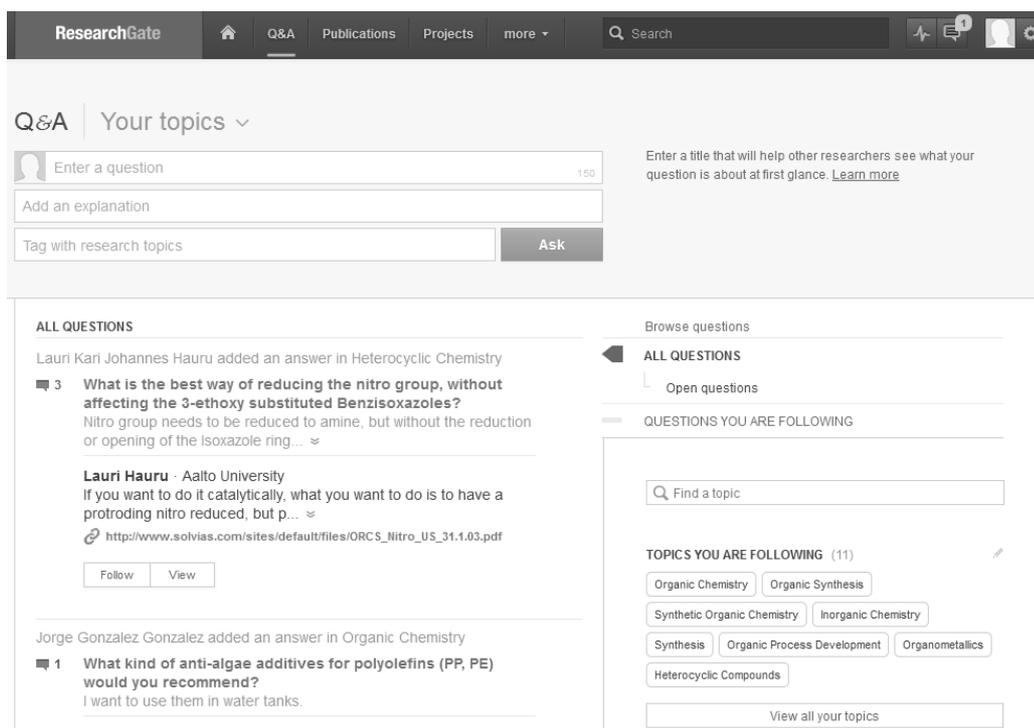


Рис. 18

возможность обсудить со многими специалистами какую-либо научную проблему и получить квалифицированный ответ. Кроме того существует возможность напрямую обратиться к автору статьи с просьбой выслать копию.

2.9 Крупнейшие издательства научно-периодической литературы.

Практически все издательства научно-периодической литературы обладают поисковой системой по ключевым словам в статьях, опубликованных издательством. Среди них крупнейшие: “American chemical society”, “Royal chemical society”, “Elsevier”, “Taylor and Francis”, “Wiley”, “Springer” и др.

3. Коммерческие поисковые системы

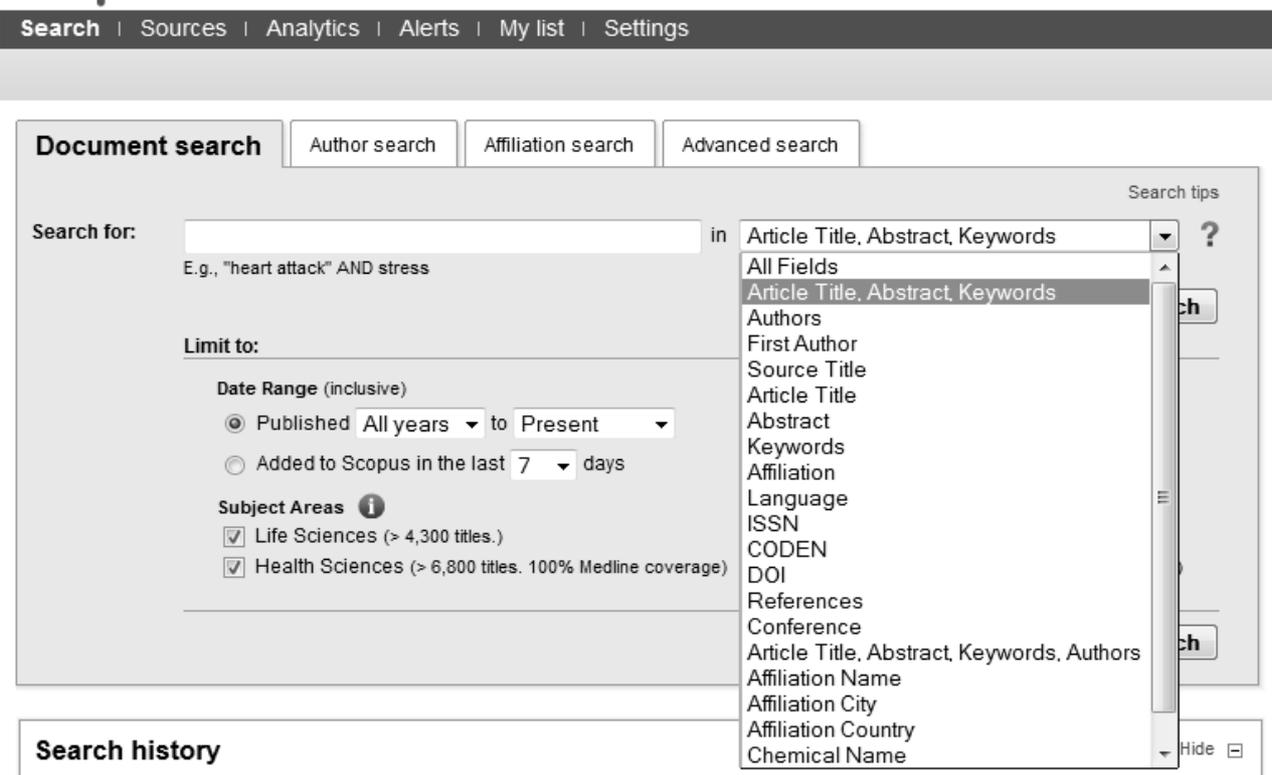
Коммерческие поисковые системы являются мощными инструментами поиска научной информации. Главной особенностью является широчайшая база данных таких поисковых систем. Естественно, что для такой работы необходим огромный штат сотрудников, офисы, серьезные капиталовложения. Это и приводит к тому, что доступ к таким поисковым системам оказывается возможным только по специальной платной подписке и возможен только с компьютеров учреждений, купивших подписку.

3.1. Scopus – библиографическая и реферативная база данных и инструмент для отслеживания цитируемости статей, опубликованных в научных изданиях. Индексирует 18 тыс. названий научных изданий по

техническим, медицинским и гуманитарным наукам 5 тыс. издателей.⁵ Главным инструментом поиска являются словарные запросы.

Основное окно поиска в системе Scopus содержит поисковую строку “Document Search”, где вводятся текстовые запросы и следующая строка, где можно вы брать дополнительные параметры поиска, такие как поиск публикаций по автору, названию статьи, книги, патента, по ключевым словам статьи, по словам содержащимся в абстракте статьи, языку статьи, химическому названию соединения и т.д. (рис. 19)

Scopus



The screenshot displays the Scopus search interface. At the top, there is a navigation bar with links: Search | Sources | Analytics | Alerts | My list | Settings. Below this, the 'Document search' tab is active, with other tabs for 'Author search', 'Affiliation search', and 'Advanced search'. The main search area includes a 'Search for:' input field with the example text 'E.g., "heart attack" AND stress'. To the right of the input field is a dropdown menu for search fields, currently showing 'Article Title, Abstract, Keywords'. A list of other search fields is visible, including 'All Fields', 'Authors', 'First Author', 'Source Title', 'Article Title', 'Abstract', 'Keywords', 'Affiliation', 'Language', 'ISSN', 'CODEN', 'DOI', 'References', 'Conference', 'Article Title, Abstract, Keywords, Authors', 'Affiliation Name', 'Affiliation City', 'Affiliation Country', and 'Chemical Name'. Below the search input, there are 'Limit to:' options for 'Date Range (inclusive)' (with radio buttons for 'Published' and 'Added to Scopus in the last 7 days') and 'Subject Areas' (with checkboxes for 'Life Sciences (> 4,300 titles.)' and 'Health Sciences (> 6,800 titles. 100% Medline coverage)'). A 'Search history' section is visible at the bottom left of the search area.

Рис. 19

Рядом со вкладкой “Document Search” находятся вкладки “Author search” – поиск публикаций определенного автора, “Affiliation search” – поиск публикаций авторов из определенного научного учреждения и вкладка “Advanced Search”, позволяющая производить поиск с расширенными возможностями. Ниже расположены кнопки, позволяющие задать временной интервал поиска и также области знаний, в которых следует искать. Опция “Document Type” (рис. 20) позволяет выбрать тип документа (Article – статья; Review – обзорная статья....) Подобный набор параметров поиска (т.е. где и что искать) позволяет получать результаты поиска, максимально соответствующие запросу.

Итак, знакомство с интерфейсом закончено, перейдем к поиску. Допустим, необходимо найти информацию по окисям пиридина. На

⁵ <http://ru.wikipedia.org/wiki/Scopus>

Рис. 20

английском языке - pyridine oxide, но если мы ведем поиск по двум словам, то поисковая система найдет все публикации, где эти слова встречаются в любых сочетаниях. Результат -1213 публикаций.

Для того чтобы поисковая система «поняла», что нужно искать словосочетание, необходимо ввести дополнительный оператор поиска – оператор «близости» (proximity operator). Таким оператором для словосочетаний является сочетание w/n (“within”/n) где n = числу слов между словами. Вводим pyridine w/0 oxide, ищем только в названиях статей (опция Article Title). Получаем 24 публикации, в названиях которых присутствует искомое словосочетание. Выбираем поиск в названии статьи, абстракте и ключевых словах статьи (article title, abstract, keywords) и получаем более обширный список публикаций, содержащих в соответствующих частях искомой словосочетание (697 публикаций).

Если нужно вникнуть в суть проблемы, то наиболее быстрый способ сделать это – прочесть обзорные статьи по данной тематике – выбираем “Document Type” = Review. В результатах поиска получаем уже только 20 публикаций - обзоров, где авторы обобщили основной материал по заданной тематике.

После того, как поиск произведен, результаты можно сортировать, убирая лишнее и сужая, таким образом, область поиска. Для этого в левой части экрана расположена поисковая строка для поиска в полученных результатах (search within results) и под ней в виде колонки расположены выпадающие списки (Year, Author name, subject area, document type ...), где поставив галочку у соответствующего значения можно выбрать соответствующие результаты (год выпуска статьи, публикации автора, типы статей ...) или наоборот, исключить их, нажав соответственно на кнопки “limit to” или “Exlude”.

Document title	Author(s)	Date	Source title	Cited by
1 Degradation of methyl tert-butyl ether by catalytic wet air oxidation over Rh/TiO ₂ -CeO ₂ catalysts	Cervantes, A., Del Angel, G., Torres, G., Lafaye, G., Barbier Jr., J., Beltramini, J.N., Cabañas-Moreno, J.G., Espinosa De Los Monteros, A.	2013	Catalysis Today 212, pp. 2-9	0
2 Effects of ammonization on the surface physico-chemical properties of sludge-based activated carbon	Zhai, Y., Pang, D., Chen, H., Xiang, B., Chen, J., Li, C., Zeng, G., Qiu, L.	2013	Applied Surface Science 280, pp. 590-597	0
3 Hydrothermal synthesis and acidity characterization of TiO ₂ polymorphs	Li, H., Vrinat, M., Derhaut, G., Li, D., Nie, H., Afanasiev, P.	2013	Materials Research Bulletin 48 (9), pp. 3374-3382	0
4 Characterization of selective oxidation catalysts from polyoxometalate precursors using ammonia adsorption microcalorimetry and methanol oxidation studies	Bommineni, S., Skoglund, M.D., Morris, A.R., Doskocil, E.J., Hollis, J.H.	2013	Applied Catalysis A: General 467, pp. 202-210	0
5 Enantioselective Mukaiyama-Michael with 2-enoyl pyridine N-oxides catalyzed by PYBOX-DIPH-Zn(II)-complexes at ambient temperature	Rout, S., Ray, S.K., Singh, V.K.	2013	Organic and Biomolecular Chemistry 11 (27), pp. 4537-4545	0
6 Synthesis and properties of new (Phosphinoylmethyl)pyridine N-oxides	Pailloux, S.L., Rosario-Amorin, D., Chakravarty, M., Camus, J.-M., Smith, K.A., Duesler, E.N., Dickie, D.A., (...), Delmau, L.H.	2013	Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie 639 (7), pp. 1101-1116	0

Рис. 21

Другим оператором «близости» является сочетание PRE/n – Preceeds by. Используется, когда первый термин (слово) в поиске должно предшествовать второму (т.е. стоять перед ним) на определенное число слов - n. Вводим pyridine PRE/1 oxide и получаем 11 ссылок в результатах поиска, в которых слова pyridine и oxide разделены одним словом, которым в некоторых случаях оказывается одна буква – N, т.е. pyridine N-oxide. С операторами «близости» нужно быть осторожными, поскольку в ряде случаев они сужают результаты поиска настолько, что некоторые нужные публикации бывают пропущены.

Логические операторы (Boolean operators).

Оператор **And = И** – позволяет находить только те документы, в которых встречаются оба заданных термина (возможно и более). Оператор **Or = или** – используется, когда, по крайней мере, одно из двух заданных слов (терминов) должно присутствовать в найденных публикациях. **AND NOT = и не** – исключает из результатов поиска те публикации, в которых встречается слово, находящееся после оператора поиска. Более подробно о дополнительных возможностях поисковой системы **Scopus** можно узнать, перейдя по ссылке **Search tips** рядом с поисковой строкой.

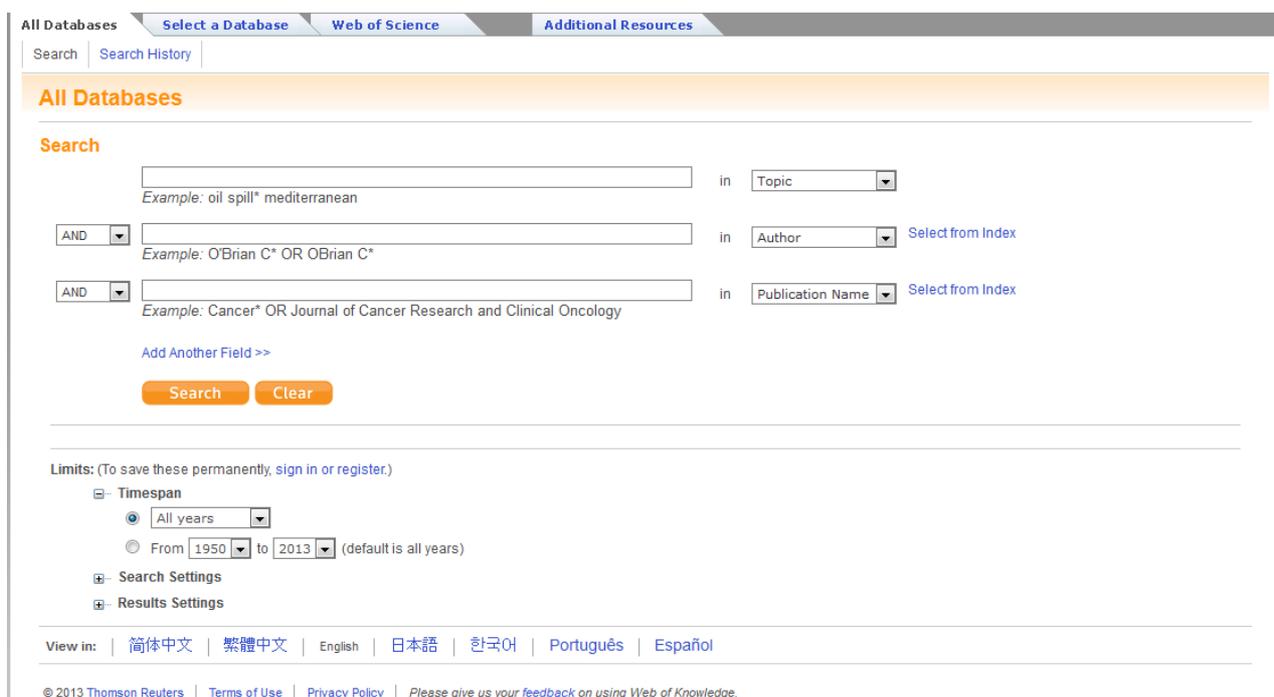
3.2. Web of Science - самая авторитетная в мире аналитическая и цитатная база данных журнальных статей, объединяющая 3 базы: Science/Social Sciences/Arts&Humanities Citation Index. Принадлежит компании “Thomson Reuters”. По возможностям приблизительно одинакова со Scopus. Доступна только по платной подписке по адресу <http://www.isiknowledge.com/>.

Включает в себя собственно поисковую систему “Web of Knowledge”,

“Researcher ID” – ваш «научный профиль» и “EndNote” - ресурс для организации и выгрузки библиографических данных.

Также есть русскоязычный сайт, содержащий обучающие материалы по всем возможностям “Web of Science” (<http://wokinfo.com/russian>).

Главная страница содержит поисковую строку с тремя полями для ввода информации и также другие опции, в целом похожие на те, что есть в Scopus (рис. 22)



The screenshot displays the Web of Science search interface. At the top, there are tabs for "All Databases", "Select a Database", "Web of Science", and "Additional Resources". Below the tabs, there are links for "Search" and "Search History". The main section is titled "All Databases" and contains a "Search" section with three input fields and dropdown menus for "Topic", "Author", and "Publication Name". Below the search bar are buttons for "Search" and "Clear". There are also sections for "Limits" (Timespan, Search Settings, Results Settings) and a language selection menu at the bottom.

Рис. 22

3.3. Реферативный журнал «Химия» - русскоязычный библиографический сервис, издаваемый с 1952 года. Публикует рефераты, аннотации, библиографические описания книг и статей из журналов и сборников, материалов научных конференций, депонированных научных работ и других научно-технических изданий по основным вопросам химии и химической технологии. Основан на реферативной базе данных ВИНТИ и доступен по адресу http://www2.viniti.ru/index.php?option=com_content&task=view&id=236&xf=s&Itemid=101. Поисковые возможности включают поиск по автору, заголовку (ключевым словам), годам выпуска и т.д. (рис. 23)

www.viniti.ru Всероссийский И

База данных ВИНТИ РАН On-line

Простой поиск Поиск Эксперт Словарь Помощь

Выберите тематику БД

Введите термины для поиска

Автор

Заглавие

Источник

Выберите значения
 Ретроспектива БД с по год Год издания

Язык

[Настройки поиска](#) [Условия вывода](#)

Рис. 23

3.4. Reaxys – коммерческая поисковая система, разработанная и поддерживаемая издательством Elsevier. Одна из крупнейших баз данных. Ранее была известна как поисковая система Beilstein, основа которой была заложена справочником Бельштейна – печатным изданием, созданным и впервые изданным русским химиком Бельштейном, которое содержит описание синтезированных и выделенных в относительно чистом виде химических соединений. Поисковый интерфейс системы содержит вкладки Standard и Advanced (рис. 24).

REAXYS®

Workflow of the Week #4
 I would like to explore the relationship between the density and refractive index of inorganic substances

Anonymous user
 (178.213.240.2)

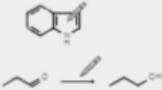
Query Results Synthesis Plans History Report My Alerts My Settings Help Register Login ▾

Standard Advanced Query: Import Save

Sources: Reaxys, PubChem, eMolecules.

Start search with:

Structures & Reactions



Names & Formulas



Literature



Reaction Data Physical Spectra Bio Activity Natural Product

Рис. 24

Вкладка Standard содержит три больших пиктограммы: Structures & Reactions, Names & Formulas и Literature, позволяющие проводить поиск с использованием дополнительных опций.

При нажатии на пиктограмму Structures & Reactions появляется поисковый интерфейс, абсолютно идентичный вкладке Advanced (рис. 25). Для создания и редактирования структурных формул используется редактор Marvin Sketch.

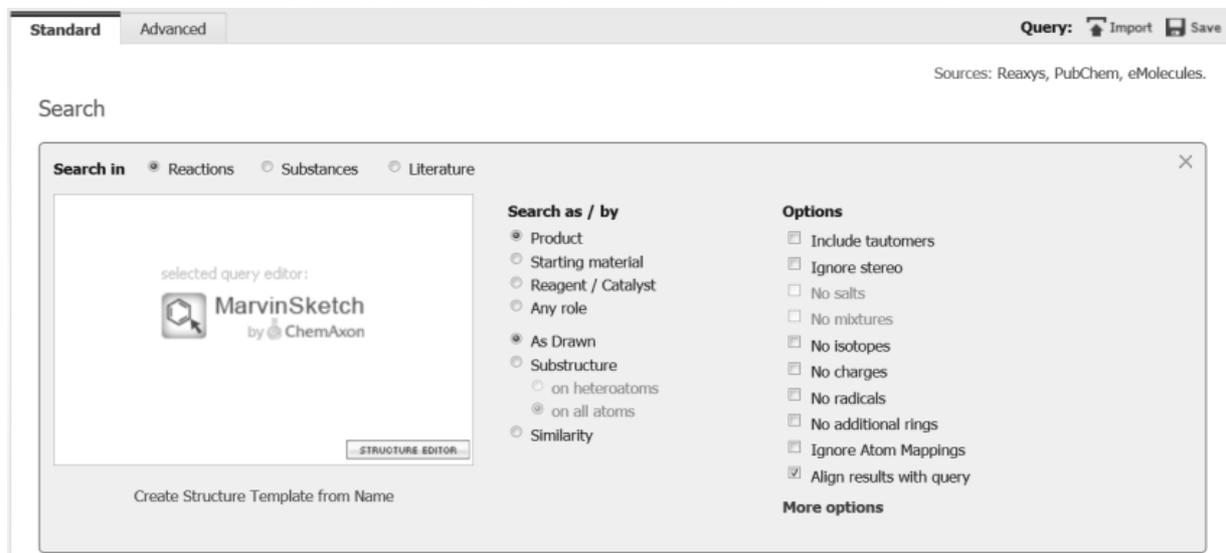


Рис.25

Поиск можно проводить по реакциям, т.е. поиск методик получения или данных о реакционной способности соединения (выбираем Reactions). Для выбора контекста поиска (Search as / by) можно задать поиск соединения как продукта реакции (Product) и тогда заданная структура будет в результатах поиска только если встречается в правой части схемы реакции. Можно также сразу задать широту поиска, выбрав пункт As Drawn (поиск структуры, полностью идентичной заданной); Substructure – поиск «субструктуры», в которой могут варьироваться заместители при гетероатомах (on heteroatoms - отличные от углерода), или по всем атомам (on all atoms – по всему углеродному скелету).

Раздел Options позволяет дополнительно задать такие параметры поиска Include tautomers(включая таутомеры), Ignore stereo– игнорировать стереоизомеры и т.д. и в большинстве случаев отмечать какой-либо из пунктов нет необходимости.

Поиск по реакциям. При нажатии левой кнопкой мыши в основном окне появляется дополнительное окно структурного редактора Marvin sketch (рис. 26).

После того, как структура нарисована, необходимо нажать кнопку Transfer Query и заданная структура появится в главном окне. В ряде случаев набора элементов в выпадающем списке на панели инструментов слева в редакторе формул не хватает. Для таких случаев предусмотрена кнопка вызова периодической системы элементов (находится между стёркой и значком выбора

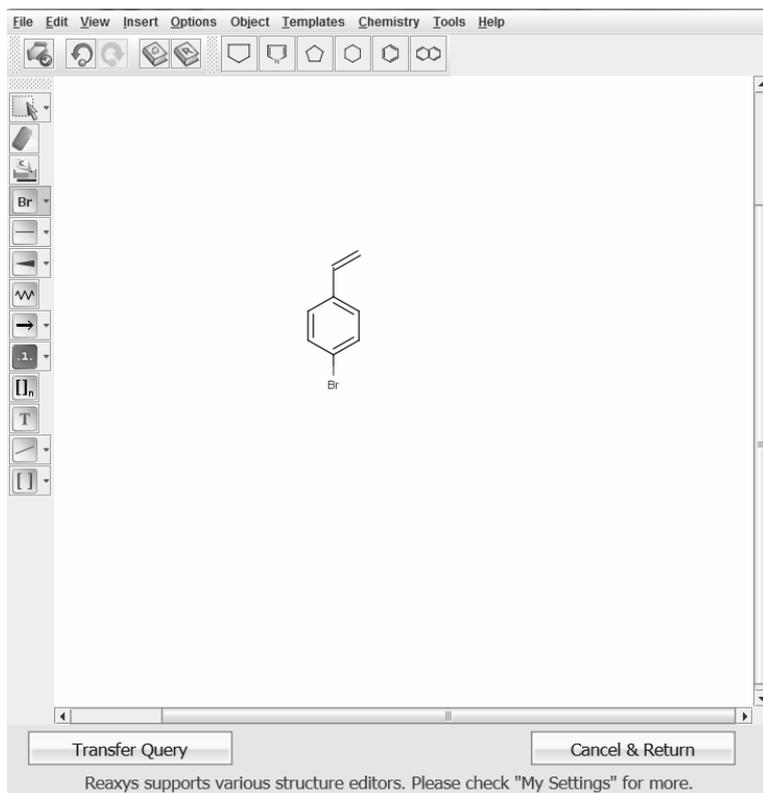


Рис. 26

Элементов рис. 26). Также во многих случаях бывает необходимо найти информацию обо всех производных данного соединения, содержащих например различной длины углеводородные заместители, или все галогены. Для этого предусмотрены структуры Маркуша (Markush structure), которые представляют собой формулу, в которой включены один или несколько заместителей. Структура Маркуша не указывает ни на какое конкретное соединение, ей

может соответствовать большое количество соединений, вплоть до бесконечности.⁶

Переключение на вкладку Advanced (рис. 28) приводит к появлению окна со специальными символами, обозначающими различные функциональные группы и заместители для создания структур Маркуша. Например, выбор символа X и подстановка его вместо атома брома в искомой молекуле

Рис. 27

Рис. 28

4-бромстирола предпишет искать Reaxys все упоминания о 4-галогенстиролах.

⁶ Lucille J. Brown The Markush Challenge J Chem. Inform. Comput. Sci. 1991. 31, 1. p. 2-4;

Замена на символ **R** задаст поиск всех 4-замещенных стиролов. Можно также самому задать значение символа **R**. Для этого в пункте Custom property в строке Value нужно вписать число атомов, составляющих заместитель **R**. После нажатия кнопки Search появляются результаты поиска (рис. 29), которые затем можно отфильтровать по различным параметрам (колонка Filter by). При этом для некоторых соединений доступны описания экспериментальных методик. Результаты поиска могут быть представлены в виде схем реакций со ссылкой на статью, либо в виде краткого библиографического описания. Ссылка Full text направляет на страницу издательства, где размещена конкретная статья.

The screenshot displays a search results page for chemical reactions. At the top, it indicates '68 reactions out of 75 citations'. A 'Filter by:' sidebar on the left lists various criteria such as Sub-structure, Yield, Record Type, Reagent/Catalyst, Solvent, Reaction Type, No. of Steps, Product Availability, Reactant Availability, and Availability in other DBs. The main area shows two reaction schemes, labeled 1 and 2. Reaction 1 shows the synthesis of a 4-bromostyrene derivative from a corresponding boronic acid derivative. Reaction 2 shows the synthesis of a similar 4-bromostyrene derivative from a different starting material. Each reaction includes a 'Synthesize' button and a 'References' section. The reference for reaction 1 is: Zhang, Guangyou; Lv, Guanglei; Li, Liping; Chen, Fan; Cheng, Jiang. Tetrahedron Letters, 2011, vol. 52, # 16 p. 1993 - 1995. The reference for reaction 2 is: Rx-ID: 4816178. The interface also includes a toolbar with options like Limit to, Exclude, Output, Print, Zoom in, Zoom out, and Hide, and a 'Sort by' dropdown set to 'Reaxys-Ranking'.

Рис. 29

Под схемами реакций для каждого соединения есть ссылки Synthesize, которые запускают дополнительный сервис, который составляет план синтеза соединения на основе имеющихся в литературе данных (рис. 30).

Уже выданный Reaxys план синтеза можно далее модифицировать в случае, если используемые реактивы недоступны, или методики сложны.

План синтеза составляется на основании различных источников (статей, патентов). Если реагента, предложенного для синтеза у вас нет, но необходимо узнать, как его синтезировать, нажатие на ссылку Synthesize внесет в план синтеза изменения с указанием сначала синтеза исходных соединений из более простых соединений, т.е. схема синтеза получится более разветвленной.

Создать план синтеза с самого начала можно нажав также ссылку Synthesis plans в верхней строке поискового интерфейса и затем задав схему планируемой реакции или целевой продукт.

Query Results Synthesis Plans History My Settings Help Logout

Synthesis 1

Undo Open Save Copy plan to new page Output Synthesis representation Left to Right Hide Hints

1
92.6 %
Modify

Synthesize

Synthesize

Hide selected details Hide all details Show all details

Step	Yield	Conditions	References
1	<input type="checkbox"/>	in water 3587155; Heating / reflux; Show Experimental Procedure	PFIZER LIMITED; PFIZER INC. Patent: WO2004/72079 , 2004 Title/Abstract Full Text
	<input type="checkbox"/> 92.6%	in acetone T=20 - 50°C; 3 - 4 h; 635680; Heating / reflux; Product distribution / selectivity; Show Experimental Procedure	TEVA PHARMACEUTICAL INDUSTRIES LTD.; TEVA PHARMACEUTICALS USA, INC. Patent: WO2005/67936 , 2005 Title/Abstract Full Text
	<input type="checkbox"/> 85.5%	in ethyl acetate 1 h; 506104; Heating / reflux; Product distribution / selectivity; Show Experimental Procedure	TEVA PHARMACEUTICAL INDUSTRIES LTD.; TEVA PHARMACEUTICALS USA, INC. Patent: WO2005/67936 , 2005 Title/Abstract Full Text

Рис. 30

Когда необходимые сведения найдены, то можно сохранить результаты поиска, нажав кнопку Output, после чего будет сгенерирован файл pdf или rtf, содержащий результаты поиска в том же виде, что в окне браузера, и, что более важно, с активными ссылками на публикации.

3.5. Scifinder - наиболее полная и совершенная поисковая система научной информации. Включает в себя базы данных Chemical Abstract (CAS) Medline. Представляет собой очень гибкий и настраиваемый инструмент поиска. Является платной поисковой системой, доступной только по подписке по адресу <https://scifinder.cas.org/>.

Главное окно системы, доступное после введения логина и пароля, содержит различные режимы поиска, такие как References, Substances и Reaction structure (рис. 31). Режим References словарные поисковые запросы, такие как тема исследования (Research topic), имя автора (Author name) и др., расположенные в виде колонки слева. При этом можно ограничить область поиска, выбрав дополнительные параметры поиска, такие как год (годы) публикаций, тип документа, язык документа и т.д. При выборе темы исследования запрос можно вводить на естественном языке (напр. Fluoroquinolone antibiotic activity). Режим Substances позволяет проводить поиск соединений по структурной формуле и включает поиск по химической

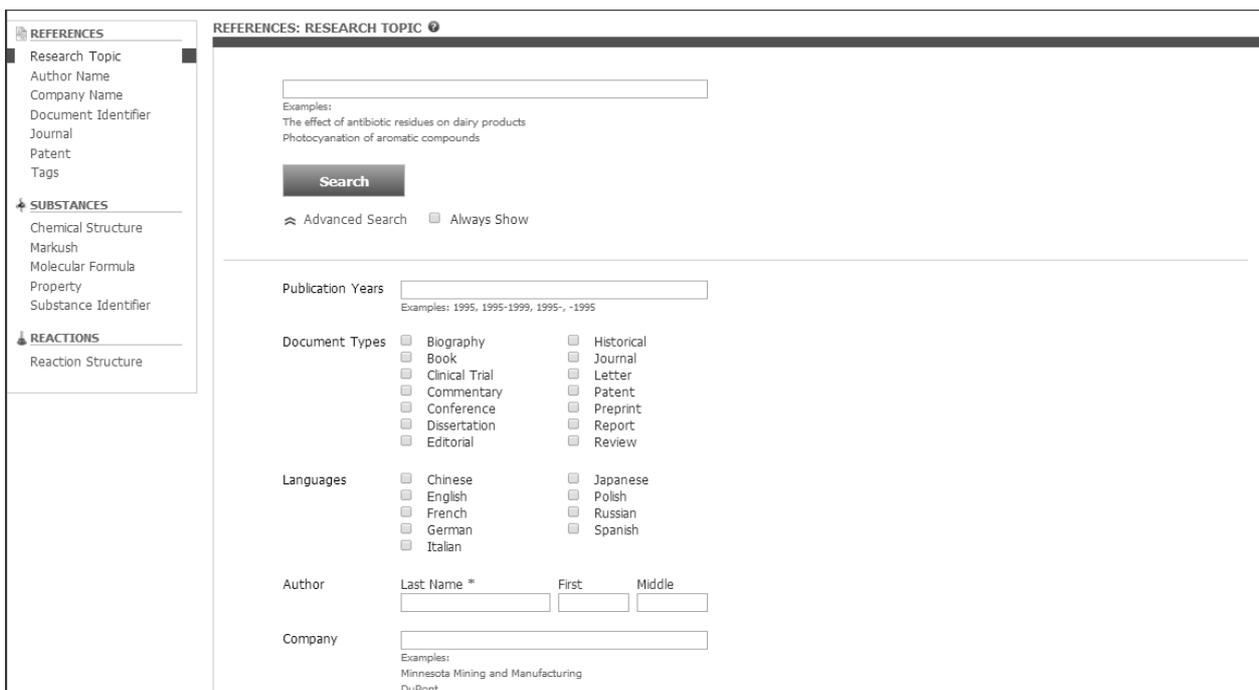


Рис.31

структуре, структуре Маркуша, молекулярной формуле и т.д. Режим Reaction structure позволяет проводить поиск по схеме реакции, когда указано начальное соединение, реакционная стрелка и конечный продукт. Проведенные поиски можно сохранить, чтобы вернуться к работе с ними позднее, для чего предусмотрена кнопка Saved search. При переходе в режим поиска Substances

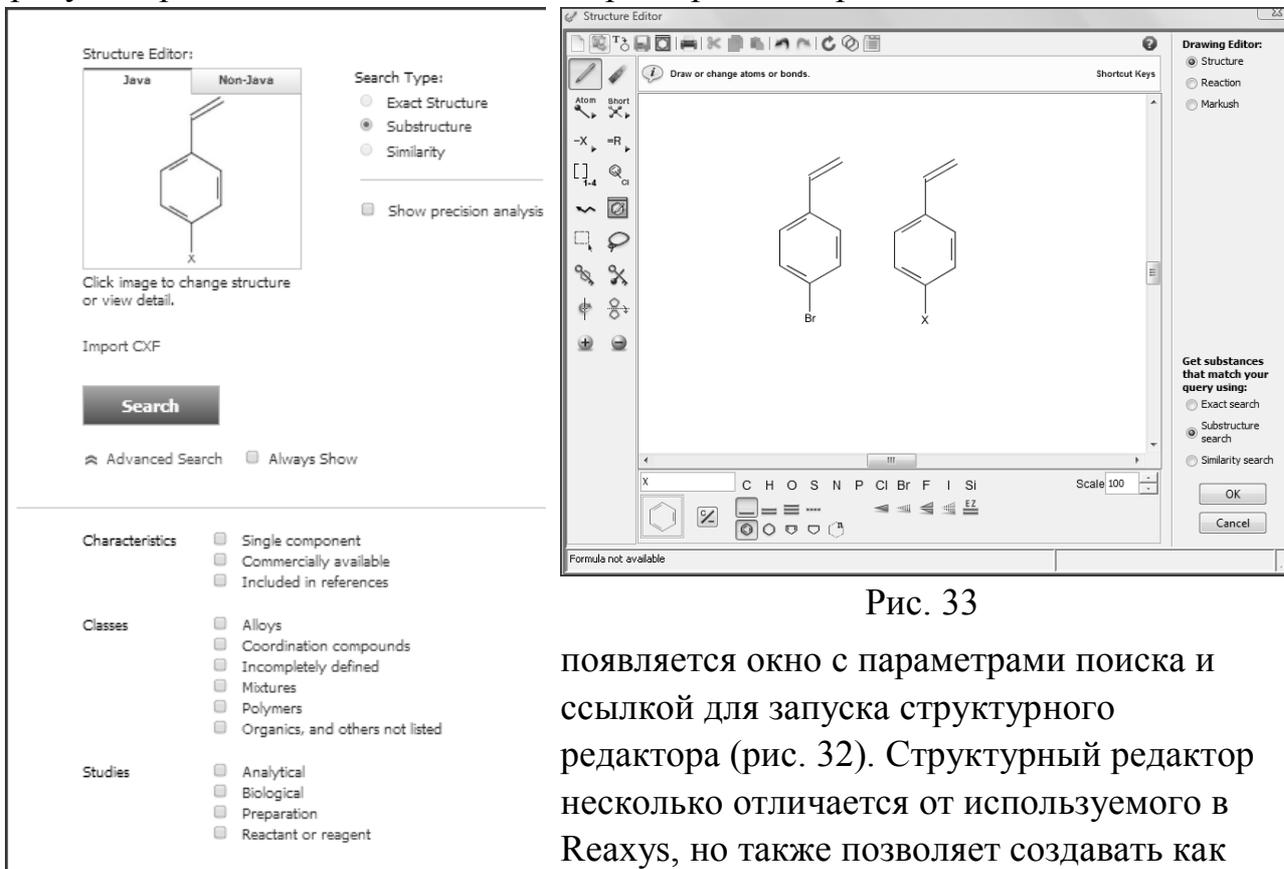


Рис. 33

появляется окно с параметрами поиска и ссылкой для запуска структурного редактора (рис. 32). Структурный редактор несколько отличается от используемого в Reaxus, но также позволяет создавать как обычные структуры, так и структуры

Рис. 32

Маркуша (рис. 33).

Также отметив соответствующий пункт можно выбрать параметры поиска соединения как продукта реакции, или его биологические, аналитические исследования и др.

Также можно задать точность поиска - полное соответствие (Exact Structure), структурный аналог или субструктура (Substructure) и похожая структура (Similar structure).

После того, как структура задана, можно приступить к поиску соединений.

После нажатия кнопки Search появляется окно, где отображены результаты поиска в виде формул (рис. 34), отметив из которых наиболее подходящую можно приступить к получению ссылок (Get references), просмотру реакций (Get reactions) или коммерчески доступных соединений для покупки (Get commercial sources).

The screenshot shows a search results page for 'Benzene, 1-bromo-4-ethenyl-'. The left sidebar contains various filters such as 'Substance Role', 'Preparation', 'Properties', 'Uses', 'Reactant or Reagent', 'Process', 'Biological Study', 'Analytical Study', 'Formation', 'Nonpreparative', and 'Prophetic in Patents'. The main area displays six substance detail cards, each with a chemical structure and associated identifiers like '2039-82-9' and 'C8 H7 Br'. The cards are arranged in a grid, and the interface includes navigation and sorting options at the top.

Рис.34

При нажатии кнопки Get references появится окно сортировки результатов (рис. 35), где можно выбрать какие результаты должны быть включены в результаты поиска. Аналогично при нажатии Get reactions в появляющемся окне (рис. 36) можно

The 'Get References' dialog box has a title bar and a close button. It contains three main sections: 'Retrieve references for:' with radio buttons for 'All substances' and 'Selected substances'; 'Limit results to:' with a list of checkboxes for various categories like 'Adverse Effect, including toxicity', 'Biological Study', 'Prophetic in Patents', etc.; and 'For each sequence, retrieve:' with a checkbox for 'Additional related references, e.g., activity studies, disease studies.'. 'Get' and 'Cancel' buttons are at the bottom right.

Рис. 35

The 'Get Reactions' dialog box has a title bar and a close button. It contains two main sections: 'Retrieve reactions for:' with radio buttons for 'All substances' and 'Selected substances'; and 'Limit results by reaction role:' with a list of checkboxes for roles like 'Product', 'Reactant', 'Catalyst', 'Solvent', and 'Any role'. 'Get' and 'Cancel' buttons are at the bottom right.

Рис. 36

выбрать роль соединения в реакции (реагент, продукт, катализатор или

растворитель). После нажатия в вышеупомянутых окнах кнопки Get появляется окно результатов, представленных в виде ссылок или реакций соответственно (рис. 37).

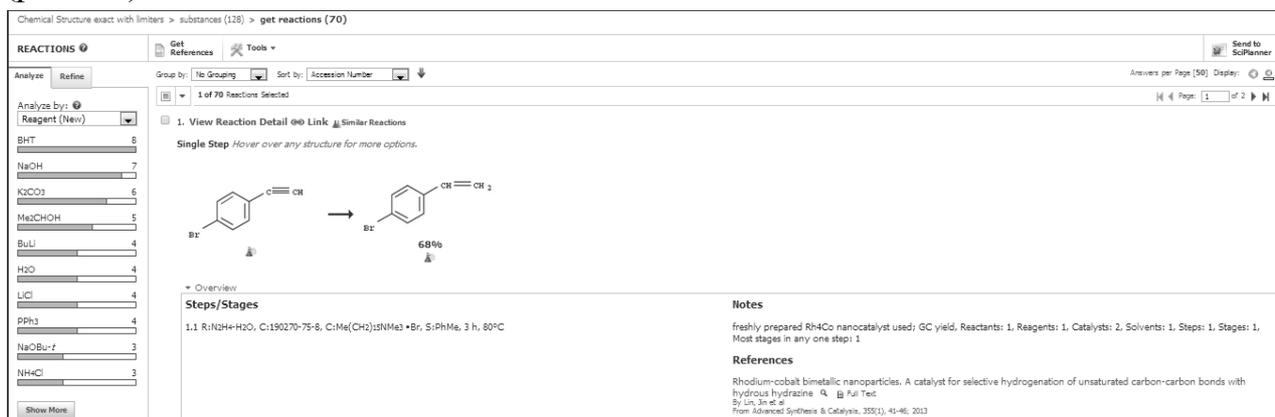


Рис.37

После этого можно выбрать соответствующие ссылки, отметив их галочкой и затем сохранить в поисковой системе (будет доступно в следующий раз при нажатии кнопки Saved search), распечатать или сохранить на компьютер в файл adobe pdf или Microsoft office (кнопки в верхнем правом углу: save, print и export соответственно). В Scifinder есть также система планирования научного исследования Sciplanner, позволяющая спланировать синтез целевого соединения. При нажатии кнопки Send to Sciplanner, выбранная структура или схема реакции добавляется в Sciplanner. В целом работа Sciplanner похожа с Synthesis plan в Reaxus, но несколько сложнее и функциональнее.

Поиск в режиме Reaction Structure позволяет искать в публикациях схемы

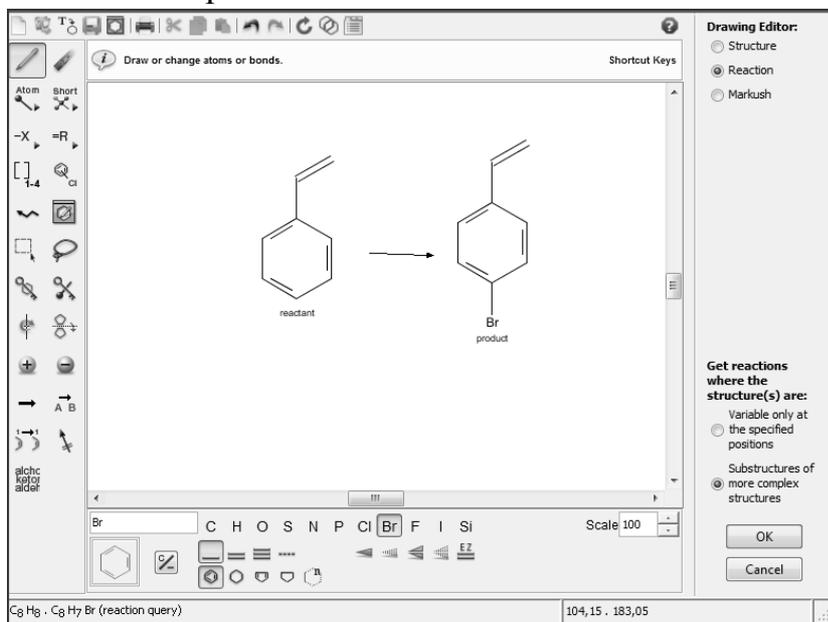


Рис. 38

реакций, что во многих случаях делает поисковый запрос более конкретным (рис. 38). Формулы, разделенные реакционной стрелкой, поисковая система распознают соответственно как реагент и продукт. Более подробно поисковые возможности Scifinder можно изучить по наглядным пособиям по

адресу: https://scifinder.cas.org/help/scifinder/R20/video_scifinder_quick_tour.htm

Рекомендованная Литература

1. Ефимов М.В. Литературный синтез. Поиск методики синтеза органического соединения в литературе: Учебно-методическое пособие / М.В. Ефимов, А.Р. Курбангалеева, И.С. Антипин. – Казань; Казанский университет, 2013. -56 с. + Прил. (21-37 стр.).
2. Дудникова, О. В. Методика поиска в базе данных Scopus: Учебно - методическое пособие для слушателей программы ДПО «Информационные ресурсы для науки и образования». - В.2 - х ч.; Ч.2 / О. В, Дудникова, С. А. Бондаренко. – Ростов н/д: ЗНБ ЮФУ, 2011. – 29 с.
3. Рагойша, А. А. Текстовый поиск научной химической информации в Интернете [Электронный ресурс] : практикум по курсу "Информационные технологии в химии" для студентов спец. 1-31 05 01 Химия (по направлениям) / А. А. Рагойша. — Минск: БГУ, 2012. — 64 с.