

Kemijske informacije danas

Tibor Toth

*Pliva dd
Istraživanje i razvoj
Istraživački informacijski centar*



Slide 1 of 39

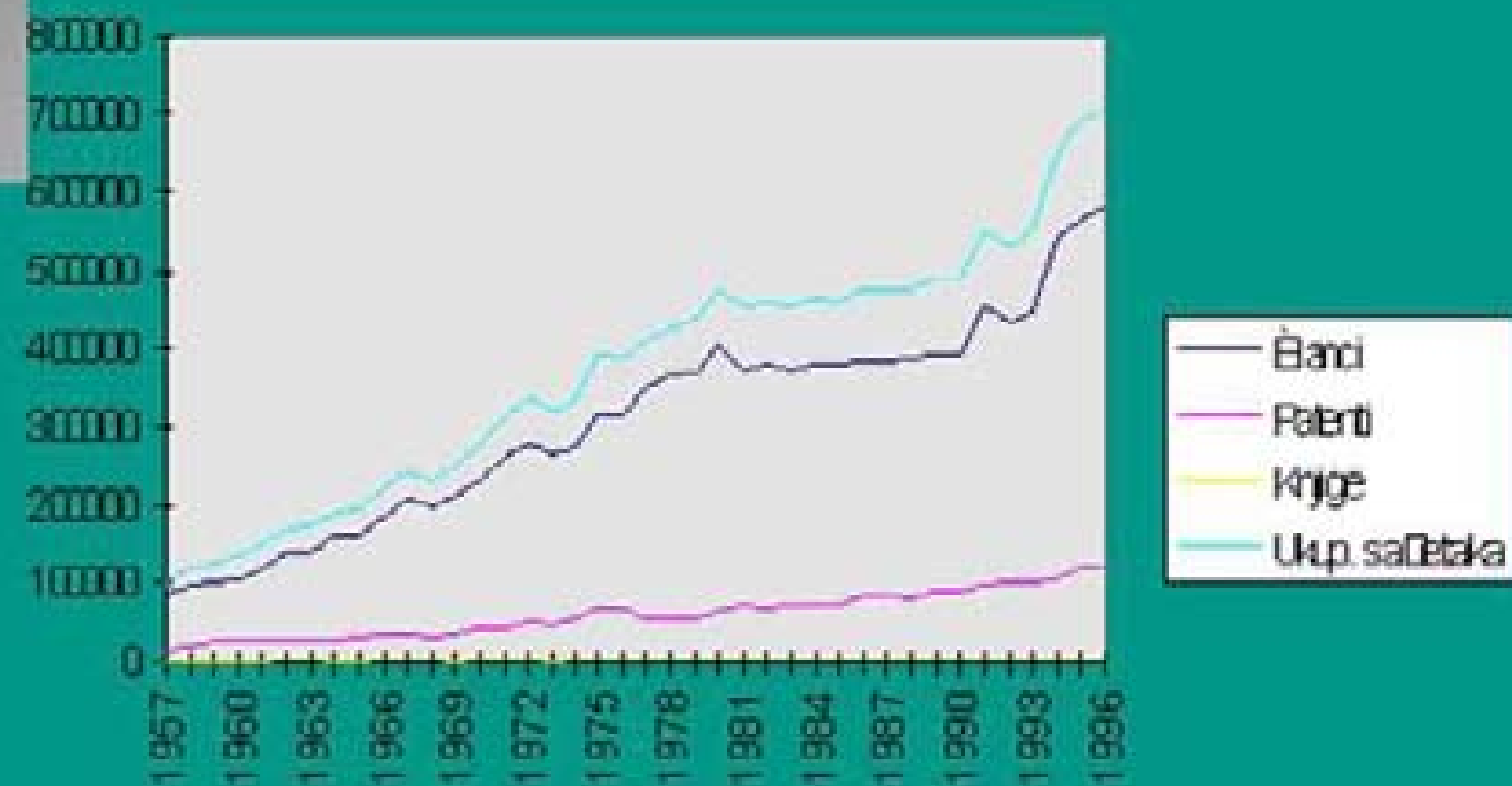
Samo papirnati medij do 1960-tih

- *prim. lit. : čas., zbornici, knjige, patenti*
- *sekundarna literatura: CA, Ref. Zh.*
- *tercijarna literatura: Beilstein Handbuch, Gmelin, priručnici, enciklopedije*
- *dopisivanje pismima (pošta), sastanak sa kolegama na skupovima*
- ◆ *korisnik - bibliotekar - bibliotečna građa*



Brojke samo rastu: CA porast

Porast broja saĉetaka u CA povrsti dokumenata



Proces kompjuterizacije info djelatnosti 1964-1990

- *sekundarna i tercijarna literatura u obliku bp (trake, diskete, CD, itd.)*
- *pojava velikih hostova (supermarket bp)*
- *pojava online centara (oprema, komunikacije, info. specijalisti, itd.)*
- *plaćanje con. time-a i svake informacije*
- ★ *korisnik informacija - info. specijalist - host (baze podataka)*



Internet era 1990-

- *razvoj info tehnologije*
- *komunikacija jeftina na svakom radnom stolu*
- *pretraživanja jednostavna na desktop-u*
- *stvaranje e-zajednica*
- *hostovi pokazuju web lice*
- *proizvođači baza podataka direktno nude informacije (butici)*



Internet era 1990-

- *digitalizacija časopisa,*
- *web kataloška prodaja knjiga, itd.*
- *integracija primarnih, sekundarnih i tercijarnih izvora*
- *pojava web village (zajednica)*
- ★ *korisnik - baze podataka, baza informacija, baza znanja*



Internet era 1990 -

- *Globalizacija info tržišta, npr.:*
- *MDL kupuje Beilstein, Elsevier kupuje MDL*
- *mali MAID (visok profit, kotira na burzi) kupuje DIALOG host (velik promet mali profit)*
- *Thompson kupuje ISI, Derwent, itd.*
- *Tržišni udio države i znanstvenih asocijacija pada, komercijalnog sektora raste*



CD-ROM baze podataka

- *mnoštvo bp i na CD-mediju i za kemičare*
- *CA-on CD, ANAB, CHEMSources, ChemSCI, reakcijske bp, itd.*
- *arhivski medij: pretočiti na server za inhouse korištenje*
- *za male i stabilne baze podataka (enciklopedije, priručnike i sl.)*
- *lokalno korištenje*
- *CA on CD se ne preporuča*



STN (CAS, FIZ Karlsruhe, JICST) najkemičniji host

- *Klasičan host - još superioran*
- *CAPlus, BIOSIS, ANAB, SCI, Patenti,*
- *CAS Registry, reakcijske baze podataka
(CASReacts, Chemreacts, itd.)*
- *Beilstein i drugi faktografski izvori
(svojstva)*
- **info specijalist, komandni jezik, plaćanje
vremena i informacija*



STN Easy

- *Web verzija za krajnje korisnike*
- *potreban ugovor/ lozinka*
- *lako za korištenje (krajnji korisnik)*
- *pretraživanje jeftino (2-3 DEM)
informacije skuplje*
- *još zaostaje za klasičnim načinom*



STN Easy - izbor bp



STN Easy - formular

The screenshot shows a Netscape browser window titled "Metscape: STN Easy: Advanced Search: Chemistry References". The address bar contains the URL "http://www.stn.com/". The main content area is titled "2. Enter your search question." and features several search criteria:

- Search:** A dropdown menu set to "WOC(1)" with an adjacent text input field.
- AND:** A dropdown menu set to "UNION(1) AND" with an adjacent text input field.
- AND:** A dropdown menu set to "OR(1) AND" with an adjacent text input field.
- AND:** A dropdown menu set to "AND(1) AND" with an adjacent text input field.

Below these are several checkboxes and dropdown menus for refining the search:

- Detailed information
- AND:** Information type: dropdown set to "AB"
- AND:** Full text only: dropdown set to "OR(1) AND"
- AND:** Language: dropdown set to "AB"

At the bottom of the form is a red "Search" button. On the right side of the form, there are four blue "Browse Index" buttons, each corresponding to one of the "AND" criteria.



STN Easy - browse

The screenshot shows a Netscape browser window displaying the STN Easy interface. The browser title is "Netscape: STN Easy: Online Search: Chemistry References". The address bar shows a URL starting with "http://www.stn.com". The interface includes a menu bar with options like "File", "Edit", "View", and "Go". Below the menu bar is a toolbar with icons for various functions. The main content area features several search filters: "AHC" with dropdown menus for "Chemical Bond" and "Organisms", and "ANT" with a dropdown for "Antis". A large text area on the right displays a list of search results under the heading "CLASSIC", including entries like "ALUMINUM DIFLUORIDE" and "ALUMINUM FLUORIDE". At the bottom of the browser window, the status bar indicates "Page 1 of 1", "2 100%", and "L 0.5 x 11 in".



STN Easy - browse

File Edit View Go

Netscape: STN Easy: Ordered Search: Chemistry References

Search: [input field] [TV] [AS] [Reset]

AHC: [dropdown: Chemical Abstracts] [input field] [Search] [Reset]

AHC: [dropdown: Organics] [input field] [Search] [Reset]

AHC: [dropdown: Amino] [input field] [Search] [Reset]

CLASSIC

ALUMINUM DOPED J
 GLYCOXYLA X
 GLASS LIGNIN
 GLASS H L
 GLASS JONAS A
 GLASS JONAS APTOP
 GLASSING ALEXANDER CALLED LEX
 GLA-100 L
 GLA-100 LAX
 GLA-100 R
 GLA-100 LXC

AFC: Excesses of Type [dropdown: AS]

AFC: LITHIUM 2 W [dropdown: ENCH] [dropdown: CHOM]

Page 1 of 1 | 100% | L: 0.8 x 11.0



STN Easy - resultat 1

The screenshot shows a Netscape browser window with the title "Netscape: STN Easy: Search Results: Chemistry References". The address bar contains a URL starting with "http://www.stn.com/". The main content area displays a search result for "Chemistry References". A yellow highlight is placed over a line of text that reads: "... the first search result is shown in this view. If the first search result is shown in this view, it will be available for ...". Below this, there are instructions on how to display answers in one of two ways:

- Check the "Display" checkbox for [Title] [URL] [Description] [Abstract] [Full Text] [PDF]
- Check the boxes next to the desired answers on one page or several pages. Choose your display options from the pull-down menus, and then click the Display button.

Below the instructions, there are two search results listed:

- [Title from CASplus in Most Recent Order - List Search Order](#)
- [Full Text - CASplus in Most Recent Order - List Search Order](#)

Page 1
Answers from CASplus

Which answer? [Default: 1st page] Which format? [Default: HTML] Which style? [List]

The browser's status bar at the bottom shows "Page 1 of 1", "100%", and "8,5 x 11 in".



SciFinder

- *Za krajnje korisnike - istraživače*
- *internet pristup (poseban klijent softver)*
- *CAPlus, CAS Registry, CASReacts, dobavljači kemikalija, puni tekst članaka (link na redakciju ili narudžba preko DDS - posebno plaćanje) plus MEDLINE*



SciFinder nast.

- *integracija: supstanca/struktura - reference (sažetak) - puni tekst (ne uvijek, još!) - narudžba članaka*
- *integracija: supstanca/struktura - dobavljač*
- *statistička analiza rezultata (reference: po autorima, tipu izvora, KW, godine, itd.)*
- *Tematska pretraživanja, Strukturna i podstrukturna pretraživanja, Reakcijska strukturna pretraživanja.*



SciFinder nast.

- *Naplaćivanje taskova (pretraživanja) po fiksnoj cijeni*
- *Task oko 20 USD Minimum: otkup 300 taskova - potrošiti u 12 mjeseci*

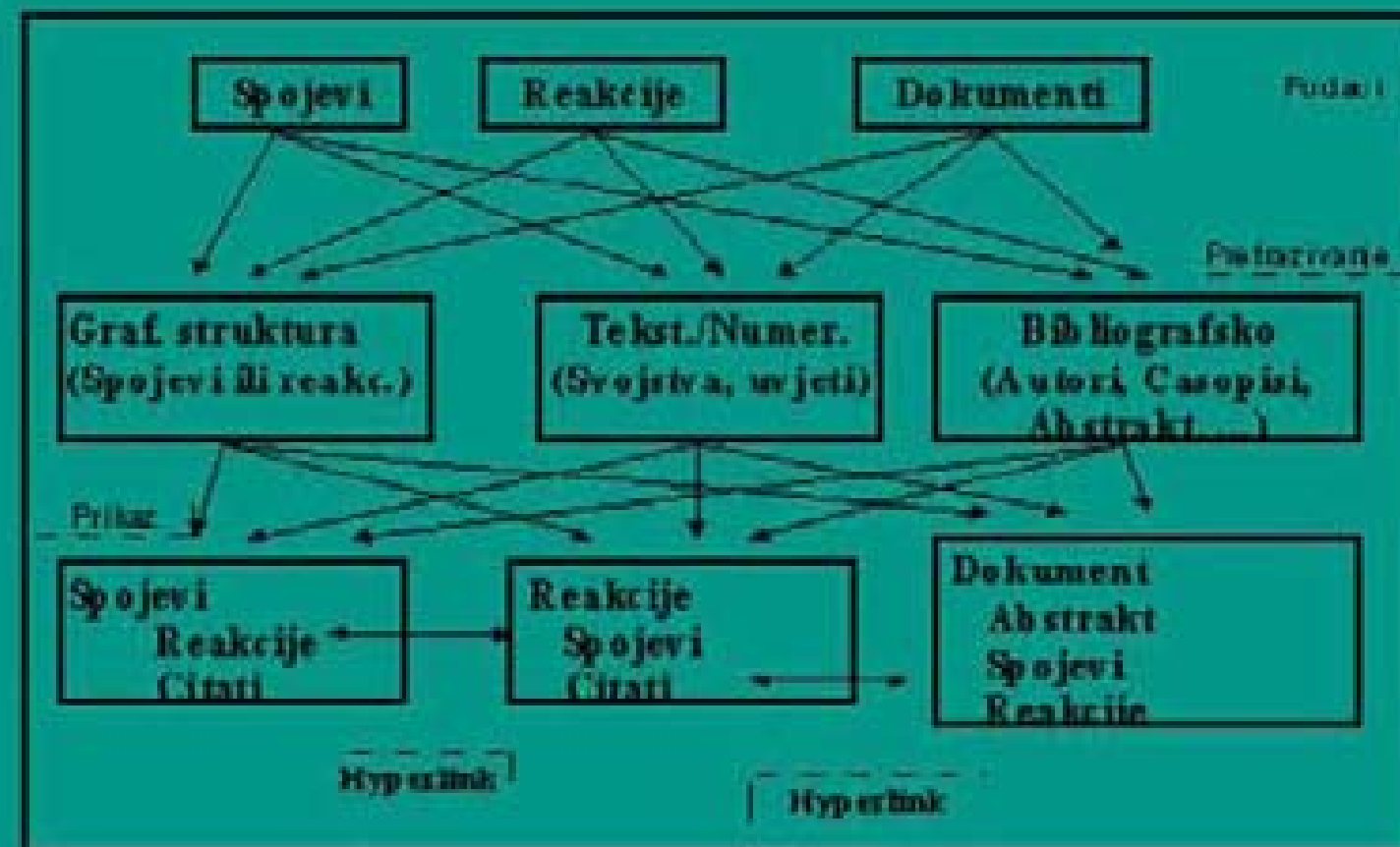


Beilstein CrossFire

- *Inhouse baza podataka - oko 32 GB*
- *web filozofija (linkanja naziva, opisa, svojstava, struktura, reakcija, referenci, sažetaka,*
- *podaci od 1780-, 7,5 milijuna spojeva - struktura, 10 milijuna reakcijskih referenci (strukturno i podstrukturno pretraživanje), 20 milijuna svojstava, 600 000 sažetaka (od 1980-) 170 časopisa uključujući i CCA i 50 milijuna hyperlinkova*



Beilstein CrossFire shema



Beilstein CrossFire

- *poseban novi dodatak EcoPharm (ekološki, fiziološki ekotoksikološki podaci, svojstva,*
- *novi EXCEL client, rezultati tabelarno*
- *konzorcij za nabavu i korištenje,*
- *informacije*
<http://www.beilstein.com/products>



Strukturne baze podataka

- *u sve više kemijskih i farma bp se dodaje kemijska struktura i str. pretražljivost*
- *CAS Registry najkompletniji*
 - *od 1950-tih oko 20 M godišnje preko 1 M novih (uračunato i sekvenčne zapise)*
- *Beilstein*
 - *od 1780-tih godina oko 7 M*
 - *oko 5 M se prekriva sa CAS Registry*
- *MARPAT Markush strukture iz патената*
 - *100.000 патената, 350.000 Markush struktura (x 250 hipot. str. = 87 M struktura)*



Reakcijske baze podataka

- *Velik broj od različitih proizvođača*
- *CD-ROM, in-house, web, host varijante*
- *ni jedan kompletan,*
- *samo iz časopisa (neki i patente)*
- *veliko prekrivanje među njima*
- *seleksijski kriterij: kvalitetni časopisi*
- *seleksijski kriterij: nove sintetske metode*



Reakcijske baze podataka - nast.

- *SPRESI (VINITIZIC) 4 milijuna struktura i 3 milijuna reakcija i 3 milijuna referenci (1975-1995)*
<http://www.infoChem.de> ili <http://chemweb.com>
- *ISI Chemistry Server (Reaction Center - nove sintetske metode) 1986 - <http://www.isinet.com/ics/>*
- *ISI: Current Chemical Reactions (1985 -) preko 400.000 reakcija. Godišnje novih 42.000 (inhouse baza podataka)*
- *ISI: Reaction Citation Index (1985 -) preko 400.000 reakcija i 2 M ref. 42.000 reakcija i 100.000 ref/god.. Curr. Chem. React. + SCI (podskup) (inhouse bp).*
- *CHEMINFORM (1991-) 77.000 radova 440.000 s.st. 250.000 multi step*



Reakcijske baze podataka

<i>Izvor</i>	<i>Beilstein</i>	<i>Casreact</i>	<i>VINITI</i>	<i>Comp. Heter. Chem.</i>	<i>Curr. Synth. Meth.</i>	<i>Derw. J. Synth. Meth.</i>	<i>MDL React. Library</i>
<i>Radova</i>	<i>10 M</i>	<i>200.000</i>	<i>3 M</i>				
<i>Single step</i>		<i>1,25 M</i>	<i>3 M</i>	<i>42.000</i>	<i>40.000</i>	<i>50.000</i>	<i>600.000</i>
<i>Multi step</i>		<i>2,1 M</i>					
<i>Godina</i>	<i>1780-</i>	<i>1985-</i>	<i>1975-95</i>	<i>1883-1983</i>	<i>1992-</i>	<i>1975-</i>	<i>1883-</i>



Kemijski softveri

- *iz strukture IUPAC nomenklaturu*
- *za vizualizaciju pod. i struktura (3D + vrtnja)*
- *za crtanje i pretraž. struktura i podstruktura*
- *za predviđanje spektara*
- *za molekul. modeliranje i predviđ. svojstava*
- *za LIMS*
- *za elektronski laboratorijski dnevnik*



ChemWeb.com

- *web sastajalište kemijske zajednice (vrijeme + volja)*
- *novi tip robne kuće kemijskih informacija*
- *dio besplatan, za dio treba plaćati*
- *vrlo dobar skup linkova na druge kemijske site-ove*
- *vlasnik MDL (Elsevier)*



Web izvori:

- *ChemFinder.com, također web sastajalište kemijske zajednice. Mnogštvo besplatnih kvalitetnih informacija*
- *nvl.nist.gov/welcome.htm NIST Virt. Lib., posebno webbook.nist.gov/chemistry*
- *Integrated Spectral Data Base for Org. Comp. www.aist.go.jp/RIODB/menu-e.html*
- *Chemicats www.chem.com/map.html*
- *NCI Database vermeer.organik.uni-erlangen.de/ncidb*
- *Rolf Claessen's Chemistry Index www.claessen.net/chemistry/base_en.html*



Patentne informacije

- *Besplatne sirove informacije*
 - *na serverima patentnih ureda*
 - *IBM patent server (US, EPO, PCT)*
 - *<http://patent.womplex.ibm.com>*
- *Baze podataka s “aded value” se i dalje plaćaju*
 - *objedinjuju patentne familije, donose i crteže, kem strukture, citirane patente i druge radove, legal status, itd.*



Besplatno danas

- časopisi (e-mail primanje TOC-a, pretraživanje arhiva TOC-a, ponekad i sažeci uz TOC, poneki članak full text)
– vlastiti CC e-mailom
- knjige i priručnici (opis, recenzije, naručivanje)
- patenti (pretraživanje, citiranje, download)
- skupovi (registracija za prisutvovanje, program, sažeci, smještaj, turizam)



Virtualna knjižnica integrira:

■ **INTRANET** uključuje:

- *in-house* klasičnu knjižnicu
- *in-house* vlastite baze podataka
- *in-house* kupljene - licencirane baze podataka (npr. pod OVID-om)

■ **INTERNET** linkovi na:

- *selektirane* evaluirane besplatne izvore
- *relevantne* komercijalne izvore.



Budućnost

- *U prirodnim znanostima sve veći stupanj digitalizacije*
- *CD i DVD arhivski medij*
- *Inteligentni search engines (prirodni jezik upita, text & data mining)*
- *Korisnik želi informaciju a ne samo referencu - tko to ne bude shvatio - propada!*



U BUDUĆNOSTI

- *daljnji porast broja informacija*
- *daljnji integracijski procesi (linkanja)*
- *iz baza pod. sve više baza inf. na putu do BAZA ZNANJA*
- *daljnja globalizacija tržišta*
- *informaciju će netko uvijek plaćati (porezni obveznici, krajnji korisnik, marketing, ?)*



Snovi

- *Jedinstvena baza kemijskog znanja*
- *npr. Chemische Zentralblatt (CZ) integrira sa CA (=CA-full)*
- *Na svaki zapis iz CA-full linka fulltext rad*
- *Beilstein se spoji sa Gmellin i proširi obuhvat podataka o svojstvima iz svih kemijskih radova iz CA-full (=Beilstein-full)*
- *podaci za Beilstein-full se evaluiraju*
- *Beilstein-full podaci se vizualiziraju*



Snovi

- *svaki podatak iz Beilsteina-full se linka na CA-full ref.*
- *CA-full dodaje citirane reference (SCI) koje se linkaju na CA-full apstrakte*
- *imena autora se linkaju na njihove biografije*
- *ustanove autora se linkaju na home page tih institucija*
- *sve to se linka sa medicinskim, biološkim, farmaceutskim, itd. informacijama*



Stvarnost

- *Beilstein uz živi CAS piše sažetke i linka se na Elsevier časopise*
- *CAS razmišlja o dodavanju citata*
- *Web of Science (ISI) se linka sa Derwent Patent Citation Index*
- *mnogi rade svoje reakcijske baze podataka*
- *svatko viši razvoj unutar svog dvorišta*
- *PROFIT diktira razvoj*



I na kraju

- *ne mora se biti informacijski specijalist, besplatno se može vidjeti što se nudi na info tržištu (vrijeme+dobra volja)*
- *nude besplatan "trial period" - probajte*
- *treba se izboriti za relevantne info proizvode i servise u vlastitoj sredini*
- *"Information at your fingertips" - virtualnu knjižnicu mi moramo napraviti - ali vi trebate reći šta želite unutar toga!*



Hvala

- *slijedi još SciFinder Demo!*



Slide 39 of 39