

Химия (фармацевтическая деятельность)

# **Информационные технологии в химии**

А. А. Рагойша

Лекция 3

# Текстовые онлайн- научные ресурсы

# Нестабильность URL публикации

Возможные причины нестабильности:

- Смена **владельца** журнала
- Смена **провайдера**
- Реорганизация **сайта**
- Закономерное **перемещение** страницы  
*Например: текущий выпуск → архив*
- **Динамические адреса** – особенно многовариантны.

*Пример адреса **одной и той же** публикации,  
извлеченной **двумя разными способами**:*

[http://\[REDACTED\].com?\\_ob=ArticleURL&\\_udi=\[REDACTED\]&\\_user=\[REDACTED\]&\\_coverDate=\[REDACTED\]&\\_srch=doc-info\(\[REDACTED\]\)&\\_cdi=\[REDACTED\]&\\_sort=d&\\_ct=18&\\_acct=\[REDACTED\]&\\_userid=\[REDACTED\]&md5=\[REDACTED\]](http://[REDACTED].com?_ob=ArticleURL&_udi=[REDACTED]&_user=[REDACTED]&_coverDate=[REDACTED]&_srch=doc-info([REDACTED])&_cdi=[REDACTED]&_sort=d&_ct=18&_acct=[REDACTED]&_userid=[REDACTED]&md5=[REDACTED])

[http://\[REDACTED\].com/retrieve/pii/S0003267009010204](http://[REDACTED].com/retrieve/pii/S0003267009010204)

# DOI

- **Digital Object Identifier = Цифровой идентификатор объекта** — сформированный по определенным правилам набор символов, который служит для регистрации и идентификации любого целостного онлайн-объекта интеллектуальной собственности.

*Пример кода DOI:*

10.1016/j.asa.2009.07.064

Код  
издательства

Код объекта,  
присвоенный издательством

# DOI

DOI сохраняется:

- при смене владельца; при реорганизации сайта;
- при смене статуса публикации  
(препринт  $\Rightarrow$  онлайн-овая статья  $\Rightarrow$  печатная статья).

*Примеры  
упоминания  
в **печатном**  
журнале*

## **Diamond standard in diagnostics:**

Amanda S. Barnard\*

*First published as an Advance Article on the web 2nd July 2009*

DOI: 10.1039/b908532g

Fluorescent defects in non-cytotoxic diamond nanoparticles

# CrossRef

[International DOI Foundation](#) - общее руководство системой.

[CrossRef](#) - регистрационное агентство в области науки.

CrossRef – добровольное сообщество издательств.

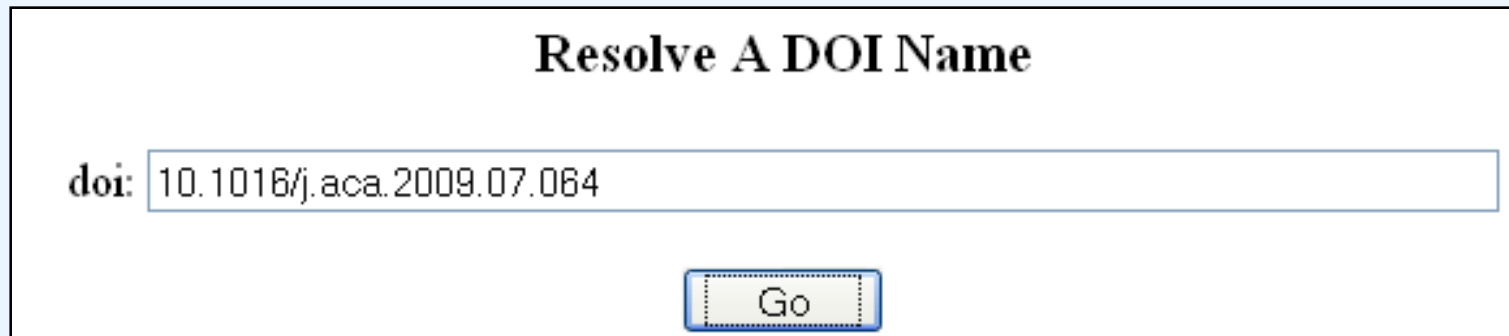
В базе данных CrossRef хранятся **коды DOI, URL** и (не обязательно) библиографические описания статей.

Издательства немедленно **сообщают обо всех изменениях URL**.

URL – адрес такой страницы, на которой находится либо сама **статья** (доступная бесплатно), либо реферат и **ссылка на полный текст** (доступный за плату).

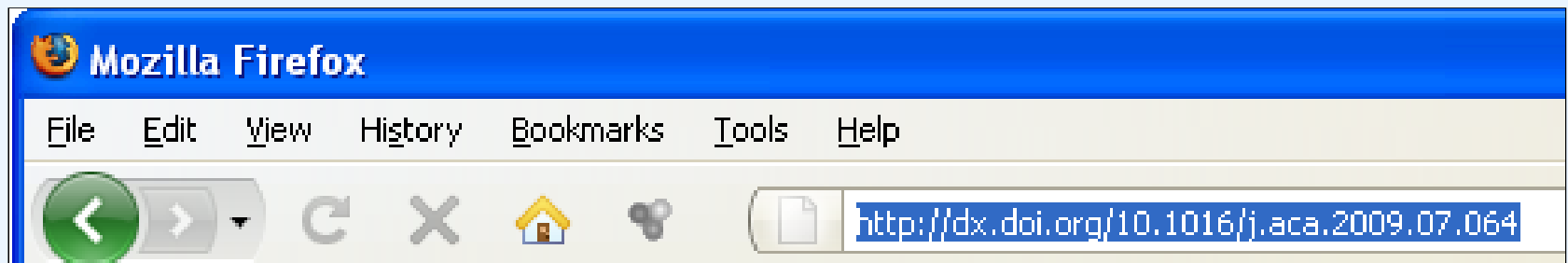
# Извлечение публикации по коду DOI

- В бланке на сайте <http://dx.doi.org/> указать код DOI

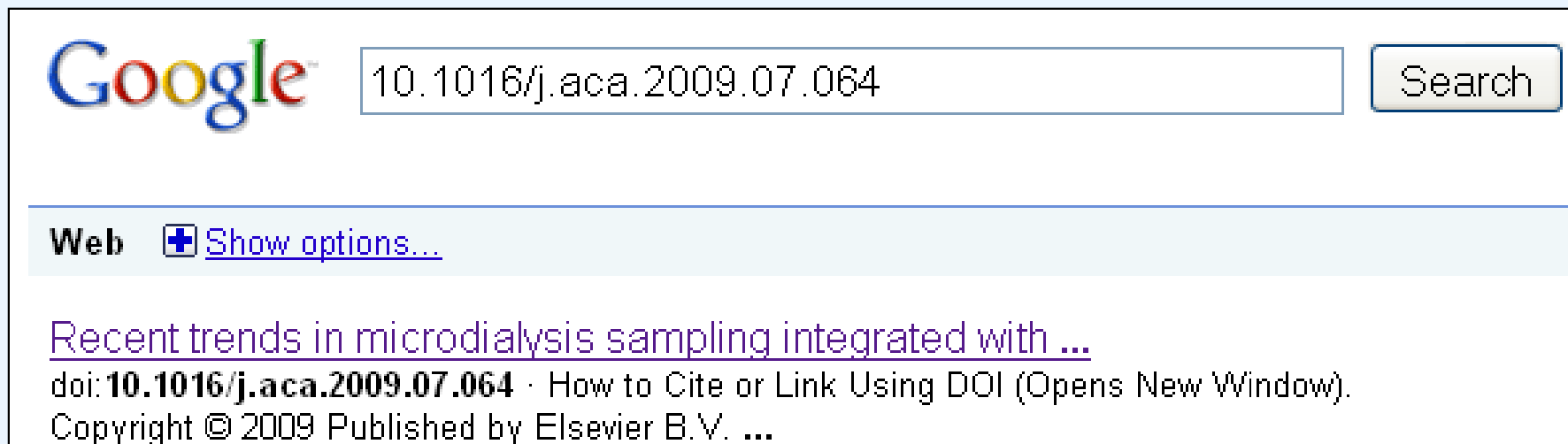


The image shows a web form titled "Resolve A DOI Name". It features a text input field with the label "doi:" and the value "10.1016/j.aca.2009.07.064". Below the input field is a "Go" button.

- В адресном поле браузера записать URL в формате:  
[http://dx.doi.org/код\\_DOI](http://dx.doi.org/код_DOI)

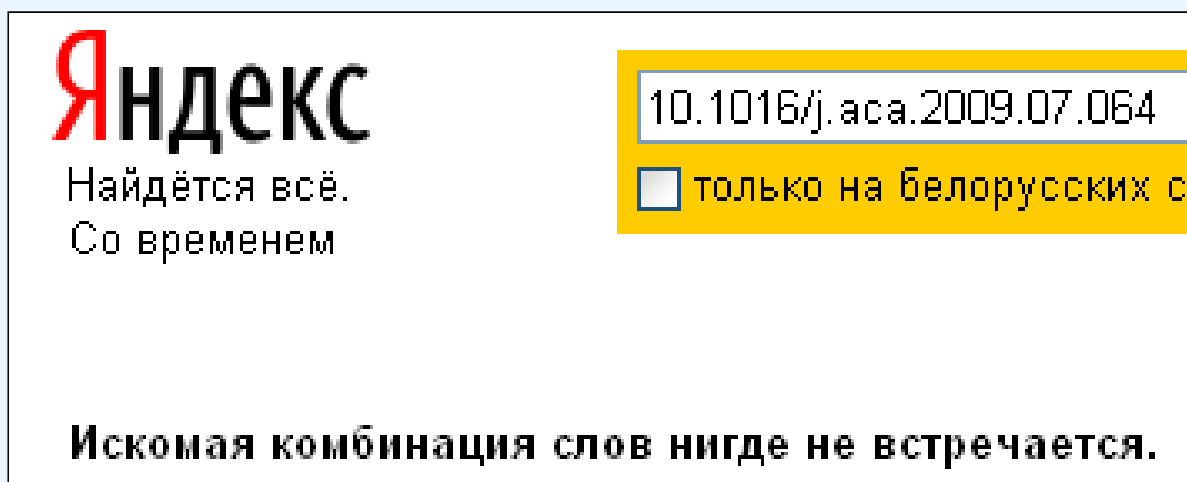


# Запрос DOI в поисковых системах



The screenshot shows a Google search interface. The search bar contains the DOI "10.1016/j.aca.2009.07.064" and a "Search" button. Below the search bar, there is a "Web" tab and a link to "Show options...". The search results display a link to "Recent trends in microdialysis sampling integrated with ..." with the DOI "doi:10.1016/j.aca.2009.07.064" and a link to "How to Cite or Link Using DOI (Opens New Window)". The copyright notice "Copyright © 2009 Published by Elsevier B.V. ..." is also visible.

- Яндекс,  
Yahoo!,  
Bing



The screenshot shows a Yandex search interface. The search bar contains the DOI "10.1016/j.aca.2009.07.064" and a checkbox for "только на белорусских с". Below the search bar, the Yandex logo is displayed, along with the slogan "Найдётся всё. Со временем". The search results display the message "Искомая комбинация слов нигде не встречается."

# Формы ссылок в веб-документах

- DOI в **явной** форме:

**A new approach for measuring the redox state and redox capacity in milk**

Tomer Noyhouzer, Ron Kohen and Daniel Mandler, *Anal. Methods*, 2009

DOI: 10.1039/b9ay00078j

- Функционально то же самое, но обозначено иначе, как ссылка **на базу данных** CrossRef:

1. Noble, M. E.; Endicott, J. A.; Johnson, L. N. Protein kinase inhibitors: Insights into drug design from structure *Science* **2004** 303 1800 1805 [[CrossRef](#)], [[PubMed](#)], [[ChemPort](#)]

# Агрегатор

**Агрегатор** - информационный центр, содержащий периодические издания **нескольких** издательств.

*Примеры.*

Национальные и международные междисциплинарные:

**J-STAGE** (Япония)

**Scielo** (Латинская Америка)

Тематические

**PubMed Central** (био-, медицина, США)

Коммерческие междисциплинарные

**EBSCOhost**

(доступен в сети БГУ)

# Агрегатор EBSCOhost

- **Разные** издатели – поиск из **одной** точки.
- **Объем** материала, степень его **доступности** – либо больше, либо меньше, чем на сайте издательства.

## [Analytical & Bioanalytical Chemistry](#)

*Библиографические записи:* 01/01/2003 to present; *Полный текст:* 01/01/2003 to present (with a 12 Month delay)

\*Full text delay due to publisher restrictions ("embargo")

 Полнотекстовый PDF

Springer

## [Analytical Chemistry](#)

*Библиографические записи:* 07/01/1993 to present

ACS

## [Annual Review of Physical Chemistry](#)

*Библиографические записи:* 05/01/1996 to present; *Полный текст:* 05/01/1996 to 05/30/2005

 Полнотекстовый PDF

Annual Reviews

# Бесплатная информация – почему?

- **Коммерческие** издательства - как часть **рекламной** стратегии.  
moving wall, embargo period
- Некоммерческие организации, **финансируемые государством и фондами**, - уже все оплачено.
- **Частные** лица – в порядке собственной инициативы, как хобби или для саморекламы.
- Проявление результатов инициативы **Open Access**:  
чтение, копирование – **без ограничений при условии** четкой ссылки на первоисточник.
  - весь журнал *или* отдельные статьи
  - платит автор *или* его организация (фонд)

# Терминология: ...print

**Препринт (preprint)** – документ, имеющий структуру научной статьи, но не прошедший рецензирование.

- Одна из **стадий** статьи перед опубликованием *или*
- Документ с **неясной** перспективой публикации

**Постпринт (postprint)** – научный документ, прошедший рецензирование.

**Репринт (reprint)** – повторно опубликованный документ.

**e-print, eprint** – электронная форма научного или учебного документа (препринт и постпринт; статья, тезис доклада, презентация, отчет, диссертация и т.д.).

# Репозиторий

Репозиторий (Repository) –

хранилище, архив электронных документов.

Репозиторий учреждения (IR – Institutional Repository) –

онлайновый архив, как правило открытый для всех, в котором накапливаются результаты деятельности данного учреждения.

В *университетском репозитории*: e-prints, учебные материалы, административные документы.

---

Самоархивирование в репозиториях – новая тенденция.


# Материалы конференций

Конференция: информация + оценка качества работы

- Тезисы доклада Abstract
- Расширенные тезисы доклада Extended Abstract
- Презентация. Текст доклада
- Материалы конференции Proceedings

где?

– Сайт конференции (существует недолго)

как найти? по названию конференции  Google  
метасайты конференций

– Репозитории

– (и еще: Платные базы данных)

## Диссертации

- Ph. D. Dissertation, Doctoral Thesis. Master's Thesis.
- Автореферат диссертации.  
*где?* Репозитории. Архивы диссертаций.

## Научные отчеты

- (Research) Report  
*где?* Репозитории. (Архивы отчетов).

## Книги

Проблема копирайта (охраны авторских прав).  
*где?* Архивы и библиотеки (копирайт *нарушен?*);  
Google Books (доступность ограниченная).

## И еще...

Периодическое издание: научный журнал.

Продолжающееся издание: "Сборник", "Труды",  
"Ученые записки", "Бюллетень"

Депонированная рукопись.

Grey (Gray) Literature –

научная, техническая, учебная информация,  
распространяемая не через каналы традиционных  
коммерческих издательств.

*Традиционно:* литература временного пользования.

*Теперь:* в репозиториях.

# Импакт-фактор журнала

Импакт-фактор – мера авторитетности журнала.

$$IF = \frac{\text{Число ссылок за год на статьи двух предыдущих лет}}{\text{Число статей двух предыдущих лет}}$$

*Пример. Рассчитать IF журнала в 2008 году.*

В 2006-07 гг. в журнале X было опубликовано 200 статей.

В 2008 г. появилось 300 ссылок на статьи,  
опубликованные в журнале X в 2006-07 гг.

Импакт-фактор журнала X в 2008 г. равен:  $IF = 300/200 = 1,5$ .

*Примеры:*

	IF
Nature	31,434
Chemical Society Reviews	17,419
Журнал органической химии	0,557

# Индекс цитирования

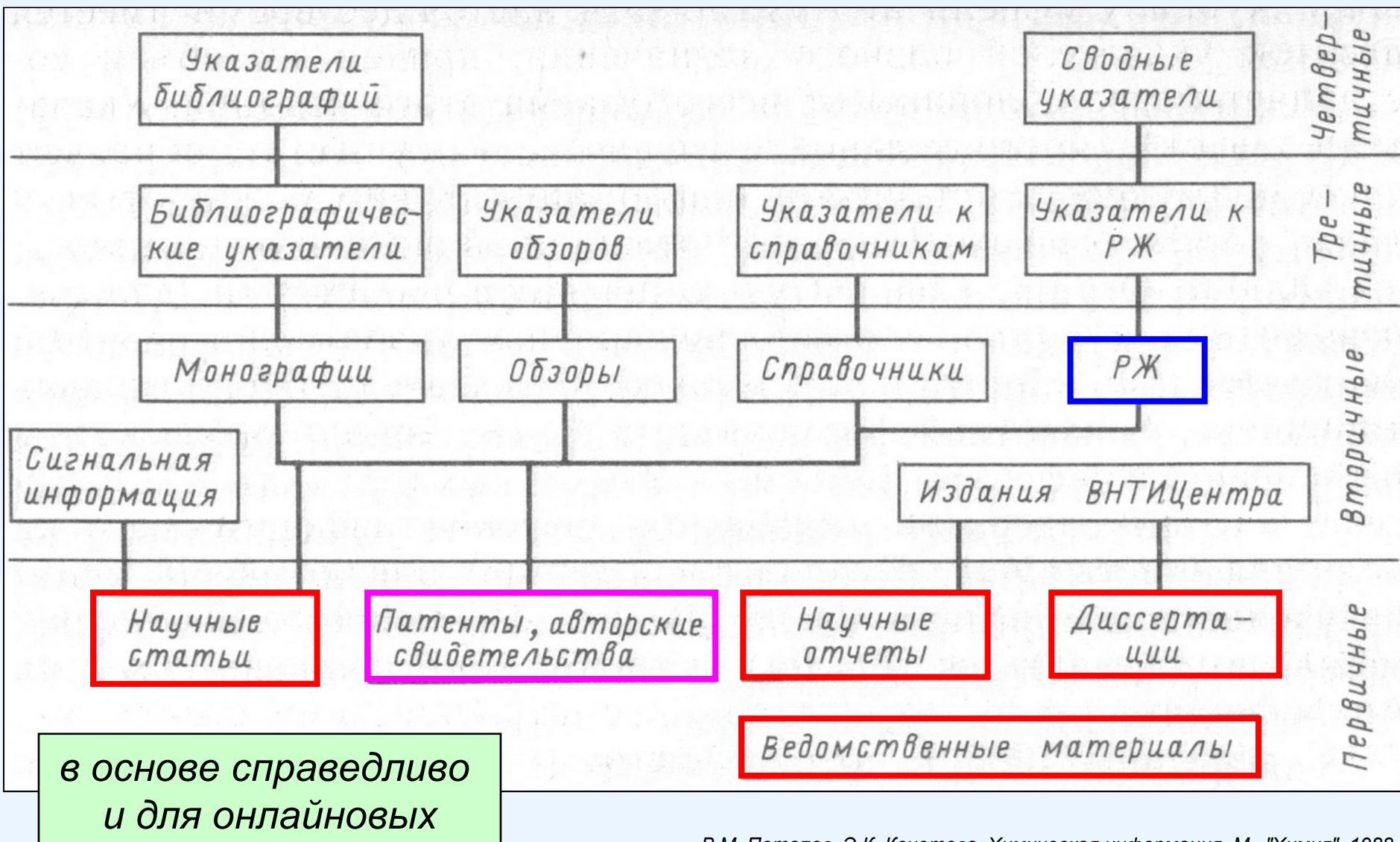
- **Индекс цитирования** – указатель, информирующий о ссылках одних публикаций на другие (более ранние).
- *В простейшей форме:* список работ, в которых имеется ссылка на данную статью.
- Более сложная форма: + количественные параметры.
- **Science Citation Index:**  
библиография + реферат + список литературы.
- *для чего?*
- Количественная оценка важности работы.
- Извлечение тематически связанных статей.

*Пример  
из веба:*

[Thiol-capping of CdTe](#)  
... , DV Talapin, AL Rogach,  
In the framework of the colloic  
of different II-VI and III-V sem  
The two existent general strat  
[Cited by 376 - Related article:](#)

*Google Scholar*

# Классификация печатных источников (РФ)



# Реферативный журнал

**Вторичный** информационный источник:  
упорядоченный набор сведений о первоисточниках  
(библиографическое описание + реферат).

**04.05-19Б2.243. Функционализация углеродных нанотрубок без использования растворителя. Solvent-free functionalization of carbon nanotubes. Duke Christopher A., Tour James M. J. Amer. Chem. Soc. 2003. 125, № 5, с. 1156-1157. Англ.**

Методами спектроскопии КР, термогравиметрического анализа, спектроскопического анализа в УФ-, видимой, ближней ИК-области и атомно-силовой микроскопии изучены строение и степень функционализации однослойных и многослойных углеродных нанотрубок, функционализированных 4-замещенными производными анилина в инертной среде без использования растворителя в присутствии изоамилнитрита при 60°С и интенсивном перемешивании. Показано, что степень функционализации достигает 34% для однослойных нанотрубок и 8% для многослойных, а процесс заканчивается в течение 1 ч.

С. Н. Блинов

# Реферативные базы данных - 1

## Общехимические:

- Реферативный журнал "Химия" (РЖ "Химия") – РФ.  
В вебе доступен с 2004 г.
- **Chemical Abstracts** (CA) – США.  
Печатная версия в библиотеке. В вебе платный;  
отдельные рефераты доступны косвенным путем.

## Тематические, например: Analytical Abstracts.

Как правило, платные. *Примеры бесплатных:*

- **Medline** (биомедицина; есть органическая химия);
- **ERIC** (образование - англоязычные ресурсы).

# Реферативные базы данных - 2

Общенаучные, с функцией расчета **индекса цитирования**:

- Scopus
- Science Citation Index.

В вебе - платные; бесплатно - из библиотеки НАНБ.

Базы данных **агрегаторов** и отдельных **издательств** функционально подобны обычным реферативным базам данных, но имеют более узкий или более специфический охват.

- EBSCOhost (доступ через сеть БГУ)
- eLIBRARY.RU.

# Патенты и патентные базы данных

# Патент

- **Патент** – юридический документ, который в течение определенного времени гарантирует изобретателю право на единоличное использование им его изобретения.

В обмен на юридическую защиту его прав изобретатель **обязан сообщить** обществу суть своего изобретения.

Патентный документ **большой** по объему и содержит в себе **детализированное** описание технологических тонкостей.

По оценкам: **70–95 %** научной и технологической информации, содержащейся в патентах, **не публикуется в иной** научной литературе.

# Титульная страница (РФ)

## (12) ОПИСАНИЕ ИЗОБРЕТЕНИЯ К ПАТЕНТУ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕ

(21), (22) Заявка: 2001108866/12, 03.04.2001

(24) Дата начала действия патента: 03.04.2001

(46) Дата публикации: 10.10.2002

(56) Ссылки: БЕЛЕНЬКИЙ Е.Ф. и др. Химия и технология пигментов. Издательство "Химия", Ленинградское отделение, 1974, с.447-449. SU 391997 А, 27.07.1973. SU 304231 А, 25.05.1971. US 3443977 А, 13.05.1969.

(98) Адрес для переписки:  
394000, г.Воронеж, пр-т Революции, 19,  
Воронежская государственная технологическая академия, отдел СМП

(71) Заявитель:  
Воронежская государственная технологическая академия

(72) Изобретатель: Плотникова Р.Н.,  
Зарцына С.С., Попова Н.В.

(73) Патентообладатель:  
Воронежская государственная технологическая академия

## (54) СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ ПИГМЕНТА, СОДЕРЖАЩЕГО ФОСФАТ ХРОМА

(57) Реферат:  
Изобретение относится к способам получения пигментов, содержащих фосфат

фосфаты хрома 2,5-3,5, бисульфаты хрома 15,0-16,0, серная кислота 1,5-2,0. Сточная вода имеет рН 3-3,5 и температуру 40-50°C.

# Титульная страница (США)

(19) **United States**

(12) **Patent Application Publication**  
**Sambasivan et al.**

(10) **Pub. No.: US 2004/0206267 A1**  
(43) **Pub. Date: Oct. 21, 2004**

(54) **ALUMINUM PHOSPHATE COATINGS**

## Related U.S. Application Data

(76) Inventors: **Sankar Sambasivan**, Chicago, IL (US);  
**Kimberly A. Steiner**, Chicago, IL  
(US); **Krishnaswamy K. Rangan**,  
Evanston, IL (US)

(60) Provisional application No. 60/436,063, filed on Dec. 23, 2002. Provisional application No. 60/436,066, filed on Dec. 23, 2002.

## Publication Classification

Correspondence Address:  
**REINHART BOERNER VAN DEUREN S.C.**  
**ATTN: LINDA GABRIEL, DOCKET**  
**COORDINATOR**  
**1000 NORTH WATER STREET**  
**SUITE 2100**  
**MILWAUKEE, WI 53202 (US)**

(51) **Int. Cl.<sup>7</sup>** ..... **B05D 3/12; B32B 9/00**  
(52) **U.S. Cl.** ..... **106/15.05; 106/18.31; 106/18.36;**  
**106/286.2; 106/287.1; 106/287.17;**  
**106/287.24; 106/287.29; 427/226;**  
**427/240; 428/704**

(21) Appl. No.: **10/745,955**

(22) Filed: **Dec. 23, 2003**

## (57) **ABSTRACT**

Aluminophosphate compounds and compositions as can be used for substrate or composite films and coating to provide or enhance, without limitation, planarization, anti-biofouling and/or anti-microbial properties.

# Описание изобретения

Пример 1. К 100 мл сточной воды с температурой 40°C, содержащей, мас.% Cr<sup>+6</sup> в пересчете на Na<sub>2</sub>Cr<sub>2</sub>O<sub>7</sub> - 0,8  
Фосфаты хрома - 3,5  
Бисульфаты хрома - 15,0  
Серная кислота - 1,5-2,0  
и имеющей pH 3-3,5, добавляют 12,4 мл фосфорной кислоты с концентрацией 85 мас.% и 6 г сульфита натрия (Na<sub>2</sub>SO<sub>3</sub>•7H<sub>2</sub>O). Реакцию ведут в течение 20 мин с последующим выдержкой при температуре 85-95°C в течение 30 мин. Осадок фильтруют, промывают и сушат. Масса полученного пигмента 10,3 г.

Description

Подробные методики, варианты выполнения операций

Пример 3. По примеру 1, но в качестве восстановителя используют тиосульфат натрия в количестве 2 г. Масса полученного пигмента 11,5 г.

# Формула изобретения

## Формула изобретения:

1. Способ превращения фитата в продукте в неорганический фосфат, предусматривающий стадии приготовления суспензии, содержащей фитазу, фитатсодержащий продукт и жидкость, механического перемешивания суспензии и сушки продукта, отличающийся тем, что готовят суспензию с pH 2,0-8,0, в которой на 100 вес.ч. фитатсодержащего продукта приходится 60-1000 вес.ч. жидкости, в качестве которой используют смесь,

Claims

Что именно  
защищает патент

11. Способ по любому предшествующему пункту, в котором стадию смешивания (i) осуществляют в смесителе в течение периода от 5 мин до 2 ч при температуре 10-70°C и при pH 2,0-8,0.

12. Способ по любому предшествующему пункту, в котором органическим растворителем является пентан, гексан или гептан.

# Терминология

- Патент Patent
- Патентная заявка Patent Application
- Номер (регистрационный) Patent Number
  
- Изобретатель Inventor
- Заявитель Applicant
- Патентообладатель Assignee
  
- Титульная страница Front (First, Title) Page
- Описание Description
- Патентная формула Claims

# Международная патентная классификация

• Раздел C - ХИМИЯ; МЕТАЛЛУРГИЯ

Раздел

C01 Неорганическая химия

Класс

C01B Неметаллические элементы; их соединения

Подкласс

## Галогены; их соединения

C01B Галогены; галогеноводородные кислоты (кислородные кислоты 7/00 11/00)

Группа 7/

C01B 7/01

.хлор; хлористый водород [2]

C01B 7/03

..получение из хлоридов [2,3]

C01B 7/04

...получение хлора из хлористого водорода [3]

C01B 7/05

...получение из хлористого аммония [2,3]

C01B 7/07

..очистка [2,3]

C01B 7/075

...жидкого хлора [2,3]

C01B 7/09

.бром; бромистый водород [2]

C01B 7/13

.йод; йодистый водород [2]

C01B 7/14

..йод [2]

C01B 7/16

...получение из морских водорослей [2]

Подгруппы  
(рубрики)

Другие источники

# Нормативные документы

М Е Ж Г О С У Д А Р С Т В Е Н Н Ы Й    С Т А Н Д А Р Т

---

ВОДА ПИТЬЕВАЯ

Методы измерения массовой концентрации общего железа

ГОСТ

4011—72

Подробная и отработанная методика анализа, *например*:

## 2.4. Проведение анализа

При массовой концентрации общего железа не более  $2,00 \text{ мг/дм}^3$  отбирают  $50 \text{ см}^3$  исследуемой воды (при большей массовой концентрации железа пробу разбавляют дистиллированной водой) и помещают в коническую колбу вместимостью  $100 \text{ см}^3$ . Если пробу при отборе не консервировали кислотой, то к  $50 \text{ см}^3$  добавляют  $0,20 \text{ см}^3$  соляной кислоты плотностью  $1,19 \text{ г/см}^3$ . Пробу воды нагревают до кипения и упаривают до объема  $35\text{--}40 \text{ см}^3$ . Раствор охлаждают до комнатной температуры, переносят в мерную колбу вместимостью  $50 \text{ см}^3$ , ополаскивают 2—3 раза по  $1 \text{ см}^3$  дистиллированной водой, сливая эти порции в ту же мерную колбу. Затем к полученному раствору

где?

"Национальные стандарты" (РФ);

Неофициальные базы данных

# Сертификаты безопасности материала

## MSDS – Material Safety Data Sheet

Физические свойства; химическая активность; токсичность; первая помощь; обезвреживание; условия хранения, ...

где? Сайты химических компаний; базы данных.

Google: **msds phenol**

---

Европейская комиссия, Joint Research Center.

*Пример:* о **фосфорной кислоте** – подробно, на 70 с.

International Programme on Chemical Safety (ООН, ЕС, ...)

"Международные карты химической безопасности" о ней же:

### ХИМИЧЕСКАЯ ОПАСНОСТЬ:

Вещество бурно полимеризуется под влиянием азотных соединений, эпоксидов и других полимеризуемых соединений. При сгорании образует токсичные дымы (оксиды фосфора). Вещество разлагается при контакте с металлами, спиртами, альдегидами, цианидами, кетонами, фенолами, эфирами, сульфидами.

увы

# Сайты химических компаний

Пример:



Image  
**AgBr**  
1 of 1

**Useful Links & Tools**

[MSDS](#)  
Certificate of Analysis

Enter Lot No.

[FT-IR Raman](#)  
[Bulk Quote](#)  
[Similar Products](#)

**10448 Silver bromide**  
Riedel-de Haën  $\geq 99\%$


**Price and Availability**

Product Number	Your Price EUR	Available to Ship
10448-25G	147.20	28.09.2009 <a href="#">details...</a>
10448-6X25G	709.40	28.09.2009 <a href="#">details...</a>

**CAS Number:** 7785-23-1  
**Linear Formula:** AgBr  
**Molecular Weight:** 187.77

**Web Toolbox**

- ✓ Calculators
- ✓ Selectors
- ✓ Explorers

  
**TOOLBOX**

*And Other Helpful Resources!*

**Quick Links:**

-  [Login](#)
-  [Register](#)
-  [Request Literature](#)
-  [Newsletter Subscription](#)
-  [Join our Life Science Community](#)

## Materials Science, Chemical Synthesis and Lab Equipment

Name	Description
<a href="#">Aldrichimica Acta</a>	Articles, written by chemists from around the world, cover a variety of topics usually based on a synthetic theme involving organic, organometallic, bio-organic or inorganic chemistry.
<a href="#">Aldrich Technical Bulletins</a>	Technical information bulletins for some of our common used products and equipment.
<a href="#">Asymmetric Synthesis</a>	Journal Articles covering topics in asymmetric synthesis.

# Порталы



- новости
- новости бизнеса
- компании и предприятия
- нефтехимические компании
- работа для химиков
- химические выставки
- торговый центр
- продукция
- лабораторное оборудование
- химические реактивы
- тендеры** / аналитика
- chill-out
- расширенный поиск
- каталог
- электронный справочник
- авторефераты
- книжный магазин
- форум химиков**

**Портал** - информационный центр  
с широким набором услуг



Site Search

>>

any  all words

**IGCW**  
2009 Industrial  
Green Chemistry  
Workshop 2009



**Organic Chemistry Portal**

[Organic Reactions](#)

[Org. Chem. Highlights](#)

[Abstracts](#)

[Chemicals](#)

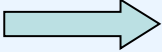
[Chemistry Tools](#)

[Chemistry Books](#)

[Job Market](#)

[Resources & Suppliers](#)

# Википедия

Авторы, корректоры, рецензенты – все веб-сообщество;  
контент динамичен.  Web 2.0

+ +

Тематическая разносторонность в пределах статьи.

У каждого фрагмента статьи есть свой эксперт.

Борьба мнений ведет к объективности.

Актуальность поддерживается постоянно.

Охват увеличивается.

- -

Вмешиваются дилетанты и недоучки, непризнанные гении, вандалы и т. п.