

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

О. О. ГРИГОРЕНКО
О. В. ШАБЛИКІНА

ЛІТЕРАТУРНИЙ ПОШУК В ОРГАНІЧНІЙ ХІМІЇ

методичні рекомендації
для студентів хімічного факультету

Київ 2019

УДК 002.53:547

Рецензенти:

д-р хім. наук, проф. В. С. Броварець
(Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України ім. В. П. Кухаря),
д-р хім. наук, ст. наук. співр. О. Б. Роженко
(Інститут органічної хімії НАН України)

*Рекомендовано до друку вченою радою хімічного факультету
(протокол № 2 від 23 жовтня 2019 року)*

Григоренко О. О.

Літературний пошук в органічній хімії : метод. рекоменд.
для студентів хімічного факультету / О. О. Григоренко, О. В.
Шаблікіна. – Київ, 2019. – 28 с.

Викладено історію розвитку та сучасний стан систематизації та пошуку літературних даних в галузі органічної хімії. Роз'яснено структуру основних джерел хімічної інформації та надано рекомендації щодо користування електронними пошуковими базами.

Для студентів природничих факультетів закладів вищої освіти.

УДК 002.53:547

ВСТУП

В сучасному науковому прогресі не останню роль відіграє активний обмін інформацією між дослідниками. Можливість скористатися досвідом, набутим науковцями всього світу, значно підвищує ефективність наукової діяльності. Звісно, це все може відбутися за умови доступу наукової спільноти до більшості наявної наукової інформації. Із розвитком комп'ютерних технологій та інтернет-мережі оцифровані літературні дані стали значно доступнішими, ніж коли існували лише на паперових носіях. Але як же серед усього масиву фактів знайти саме ті, що посприяють розв'язку поставленої перед нами задачі? Вочевидь, інформація має бути систематизована, і має існувати спосіб (алгоритм) пошуку. Не менш важливим є коректне формулювання мети пошуку; адже тут працює простий життєвий принцип: щоб отримати правильні відповіді, потрібно вміти ставити правильні запитання.

Ці методичні рекомендації призначені ознайомити студентів з тим, як проблема пошуку інформації вирішується в рамках органічної хімії – галузі, що в силу об'єктивних причин вимушена оперувати величезними масивами фактичних даних. Відомості, отримані хіміками-органіками в ході експериментальних досліджень, тривалий час зберігають свою актуальність і практичну цінність. Якщо додати до цього той факт, що кількість можливих структур органічних сполук потенційно нескінченна, а кількість реакцій за їх участю – ще більша, стає зрозумілим, чому літературний пошук давно став невід'ємною складовою органічної хімії.

Зараз реєстрація, систематизація та пошук хімічних даних здійснюється через електронні бази, які постійно перебувають у динаміці – поповнюються, видозмінюються. У цій галузі, як і в багатьох інших, створюється нове програмне забезпечення, реорганізуються старі сайти або виникають нові. Тому не виключено, що деякі із наведених тут даних, які стосуються електронних баз пошуку, через кілька років перестануть бути актуальними. Тому перед користуванням будь-яким інтернет-

ресурсом варто ознайомитися із правилами роботи та можливостями пошукової системи на офіційних сайтах.

Потрібно уточнити, що ці методичні рекомендації стосуються передусім пошуку інформації про способи добування та властивості органічних сполук, хоча більшість даних носить загальний характер і може бути застосована до інших галузей хімії та суміжних дисциплін.

ТИПИ ДЖЕРЕЛ ХІМІЧНОЇ ІНФОРМАЦІЇ

Серед витоків хімічної інформації розрізняють *джерела первинної інформації* або *першоджерела* (*статті* у наукових виданнях та *патенти*) та різні типи літератури, в яких здійснено обробку та аналіз первинної інформації в тому чи іншому вигляді, залежно від призначення видання.

Стаття у науковому виданні

Переважає більшість первинної хімічної інформації про проведені дослідження та отримані в наслідок цього дані з'являється у вигляді *статті* в періодичному виданні – *журналі*. Уточнимо, що тут мається на увазі не лише друковані на паперових носіях видання. Фактично, всі активні на сьогодні наукові журнали мають офіційні веб-сайти, що є необхідною умовою їх включення до баз даних та надання їм статусу наукового видання; багато журналів публікуються лише в електронному вигляді. На сайті журналу розміщено всю необхідну для потенційних авторів інформацію стосовно видавничої політики журналу та підготовки статей до друку, а також архів опублікованих статей, інколи – з відкритим доступом до повнотекстових файлів.

Деякі журнали, переважно ті, що випускаються хімічними товариствами або національними академіями наук, публікують статті, що стосуються всіх галузей хімії. Таким, наприклад, є *Journal of the American Chemical Society* (*J. Am. Chem. Soc.*), одне із найстаріших (із 1879 р.) і найбільш масштабних видань ACS [15] – Американського Хімічного Товариства (англ. American Chemical Society). Інші журнали можуть бути присвячені вузькій

тематиці. Наприклад, *The Journal of Organic Chemistry (J. Org. Chem.)* – видання ACS, що публікує виключно повідомлення про оригінальні фундаментальні дослідження в області органічної та біоорганічної хімії.

Видавцями журналів можуть бути не лише великі професійні об'єднання, але й окремі організації: навчальні заклади, дослідницькі інститути тощо. Зокрема, журнал *Heterocycles* видається Японським інститутом гетероциклічної хімії (англ. The Japan Institute of Heterocyclic Chemistry), журнал *Химия гетероциклических соединений (ХГС)* публікується Латвійським інститутом органічного синтезу.

Надіслані до журналу статті розглядаються, як мінімум, редакційною колегією журналу на предмет відповідності профілю журналу, правильності оформлення, достовірності та оригінальності поданої інформації. Але формування високого рейтингу видання в науковому інформаційному просторі неможливо без запровадження журналом процедури *подвійного незалежного рецензування* (англ. – *peer review*). Для рецензування стаття надсилається незалежним фахівцям у відповідній галузі, і на основі їх рецензій вирішується подальша доля рукопису – друк, повернення на доопрацювання, відхилення. У суперечливих випадках право вирішального голосу залишається за редактором.

Із прийнятих до друку статей формуються окремі *випуски* або *номери* (англ. *issue* або *number*) журналу. Випуски об'єднуються в *том* (англ. *volume*). Найчастіше том – це серія випусків за рік (або за півроку чи квартал, залежно від обсягу видання), але строгих правил тут немає. Наприклад, журнал *Heteroatom Chemistry* почав видаватися Wiley із 1990 р. (том 1) по одному тому на рік, в межах одного тому було шість – сім випусків. Журнал *Synthesis* (видавництво Thieme Gruppe), який публікується із 1969 р., запровадив окрему нумерацію томів лише у 2012 р. (на той момент журнал виходив уже 44 роки, тому нумерація розпочалась із тому 44), до цього при посиланні на статтю вказувались лише рік, номер випуску та сторінки. У деяких журналах томом вважається лише один випуск.

Зараз практично у всіх журналах прийнята *наскрізна* в межах тому *нумерація сторінок*, таким чином, в більшості випадків для позначення статті достатньо вказати назву журналу, номер тому та сторінки.

Для ідентифікації періодичних видань їм присвоюється *ISSN* (англ. International Standard Serial Number) – унікальний номер, що використовується для кодування друкованого або електронного періодичного видання з метою полегшення взаємодії видавців та розповсюджувачів друкованої продукції у всьому світі. Якщо журнал існує у двох форматах: паперове друковане видання та on-line версія, – кожному з них присвоюється окремий ISSN.

Іще одним важливим ідентифікатором як для окремих статей, так і для журналів є *DOI* – цифровий (дискретний) ідентифікатор об'єкта (англ. digital object identifier). Призначення цього номеру – пошук об'єктів у цифровому форматі; управляє системою DOI [17] Міжнародний фонд DOI (англ. IDF – International DOI Foundation). Ці ідентифікатори почали присвоювати із 2000 р.; переважно, кожна стаття має власний DOI, але для деяких старих видань DOI було присвоєно усьому випуску. ISSN журналу часто є складовою частиною DOI його окремих статей. Так, однією із найбільш цитованих статей журналу *Tetrahedron* (ISSN 0040-4020) є публікація Грабса і Чанга, присвячена метатезису алкенів ([https://doi.org/10.1016/S0040-4020\(97\)10427-6](https://doi.org/10.1016/S0040-4020(97)10427-6)).

Не варто забувати, що з моменту свого заснування журнал може змінити назву, розділитися на кілька окремих видань або, навпаки, об'єднатися з іншими журналами, нарешті, припинити своє існування. Це не заважає пошуку інформації: в більшості інтернет-джерелах активними залишаються посилання на попередні версії або на журнали, що вже не видаються. Наприклад, не складе труднощів за стандартною процедурою знайти посилання на статті із журналу *Justus Liebigs Annalen der Chemie*, майбуть, найстарішого (із 1832 р.) європейського хімічного журналу, який, внаслідок реорганізації низки європейських періодичних видань із хімії, існує з 1998 р. як *European Journal of Organic Chemistry* (видавництво Wiley). Аналогічно, наступником

журналу *Chemische Berichte* вважається *European Journal of Inorganic Chemistry, Journal für Praktische Chemie – Advanced Synthesis & Catalysis*.

Потрібно ще згадати про практику видання перекладів (переважно – англійською) оригінальних журналів. Так, журнал *Chemistry of Natural Compounds* видавництва Springer US – переклад англійською узбецького журналу *Химия природных соединений (ХПС)*, більшість статей в якому надруковано російською мовою; *Russian Chemical Reviews* видавництва Turpion Ltd & Institute of Physics Publishing – переклад журналу Російської академії наук *Успехи химии*. Хоча початкове видання і його переклад містять ідентичну інформацію, вони функціонують як незалежні одиниці: нумерація томів і сторінок в більшості не співпадають, часто лише англомовна версія включена в міжнародні науково-метричні бази та має DOI статей.

При посиланні на журнал нормою є використання не повної його назви, а скороченої; прийняті аббревіатури вказуються на офіційних сайтах журналів, у довідниках, цифрових базах даних тощо.

Вимоги до формату та обсягу статей у журналах можуть сильно відрізнятись. Деякі періодичні видання публікують лише стислі, невеликі за обсягом статті, що відображається в назві видання: *Tetrahedron Letters* видавництва Elsevier, *Organic Letters (Org. Lett.)* ACS.

В основному тексті статті можуть не наводитися детальні експериментальні дані на зразок фізико-хімічних (спектральних) характеристик одержаних речовин, особливо, якщо дані типові, а перелік сполук – великий. Ця інформація подається окремим посиланням на сайті як *супровідна* (англ. – *Supporting Information*). Зараз такий формат є стандартним для більшості пблікацій; особливо це актуально для видань, орієнтованих на масштабні дослідження із залученням великої кількості речовин: *Molecular Diversity (Mol. Divers.)* видавництва Springer Science + Business Media, *ACS Combinatorial Science (ACS Comb. Sci.)* тощо.

Патенти та авторські свідоцтва

Первинна інформація міститься також і в *патентах* – документах, призначенням яких є не стільки повідомлення про створення нових речовин або методів, скільки захист цієї інформації як об'єкта інтелектуальної власності. Залежно від предмета, який патентують, розрізняють кілька видів патентів; найбільш популярними в хімії є *патенти на корисну модель*, що означає нову сполуку або тип сполук, нове перетворення тощо. У колишньому СРСР документом, що засвідчував юридичне право автора, було *авторське свідоцтво*; такий документ міг бути виданий на ім'я організації (підприємства) із зазначенням переліку авторів.

Представляють первинну інформацію у вигляді патенту, як правило, тоді, коли від її використання очікується фінансовий прибуток. Очевидно, що для уникнення порушення авторських прав та суперечок між патентовласниками подані заявки на патенти мають пройти тривалу та ретельну перевірку, що підтвердить їх оригінальність та корисність. Патенти надають їх авторам юридичні та майнові права на обмежений час та лише на території тієї країни, де патент було видано; тому нерідко патент отримують у кількох країнах.

Розглядаються заявки та надаються патенти, а також видається патентна інформація (на паперових або електронних носіях, на сайтах), офіційними державними організаціями. В Україні це – Державне підприємство "Український інститут інтелектуальної власності", скорочено *Укрпатент* [13].

Міжнародна патентна заявка дозволяє отримати патентний захист у багатьох країнах одночасно і може бути подана у рамках Договору про патентну кооперацію (англ. PCT – Patent Cooperation Treaty), ініційованого ВОІВ – Всесвітньою організацією інтелектуальної власності (англ. WIPO – World Intellectual Property Organization), одним із агентств ООН.

Оглядові статті

Оглядові статті або *огляди* публікуються з метою ознайомити читача із тією чи іншою більш-менш вузькою тематикою. Це – наслідок обробки і стислого представлення інформації із пер-

шоджерел. Часто журнали, основним профілем яких є статті про оригінальні дослідження, паралельно з цим друкують огляди. Зокрема, у вже згаданому журналі *XTC* традиційно кожний випуск починається із оглядової статті. Але є видання, які друкують виключно огляди; цей спосіб ознайомлення із хімічною інформацією настільки зручний і популярний, що багато з таких журналів мають високі рейтинги. Лідером тут є журнал *Chemical Reviews*, що видається ACS. Серед інших популярних оглядових журналів – *Chemical Society Reviews* Королівського хімічного товариства (англ. Royal Society of Chemistry, RSC), *Успехи химии* або *Russian Chemical Reviews*.

Монографії

Монографією називають видання у формі книги, що поглиблено висвітлює одну чи декілька пов'язаних між собою тематик. За стилем викладення та структурою багато з монографій нагадують оглядові статті, відрізняючись при цьому більшим обсягом. Разом із тим, монографія може містити власні дослідження авторів, експериментальні дані та їх інтерпретацію.

Видавництвами практикується публікація серії монографій. Гарним прикладом цього є велика серія книг *Chemistry of Heterocyclic Compounds* видавництва Wiley (не плутати із журналом *Chemistry of Heterocyclic Compounds* видавництва Springer). Видавництво цієї серії було розпочато у 1950 р. і зараз вона налічує понад 100 книг.

Препаративні збірки

Популярністю серед практикуючих хіміків користуються збірки препаративних методик синтезу певних речовин. Необхідність і актуальність таких видань постала на початку XX ст., оскільки не всі органічні сполуки, необхідні хімікам для експериментальних наукових досліджень, були комерційно доступними. Фактично, у великих масштабах хімічною промисловістю виробляється досить обмежена кількість органічних сполук. У наш час ця проблема не така гостра завдяки існуванню компаній, що постачають хімічні реагенти в невеликих кількостях та орієнтуються на наукову сферу: Merck KGaA, Enamine Ltd. та

багато інших [19]. Але навіть тепер певна речовина може не бути комерційно доступною, або ж мати занадто високу вартість, отже постає необхідність синтезувати сполуку самотужки; саме в такій ситуації корисними є препаративні збірки.

Методики, що наводяться в таких виданнях, у більшості своїй досить деталізовані (на відміну від лаконічно викладених методик у статтях), адже головна мета – успішне відтворення процедури.

Препаративні збірки можуть мати характер одиночних книг і позиціонуватися як монографія; але можуть існувати у форматі періодичного видання та мати статус журналу. Найбільш успішним прикладом останніх є *Organic Syntheses (Org. Synth.)* – журнал, що з 1921 р. публікує методики синтезу речовин. В основі публікації в *Organic Syntheses* – оригінальна методика зі статті, але в більшості випадків видозмінена та перевірена незалежними фахівцями. На офіційному сайті *Organic Syntheses* [7] є функція пошуку як за назвою сполуки чи терміном, так і за структурною формулою, а весь архів журналу знаходиться у вільному доступі.

Довідникова література

Інформація в *енциклопедіях, довідниках чи словниках* подається у вигляді коротких статей, систематизованих, як правило, за алфавітом. Як спосіб швидкого ознайомлення з певною тематикою або пошуку термінів цей вид хімічної літератури є найбільш зручним, хоча останнім часом, через більші можливості та зручність пошукових інтернет-системи, помітно втрачає свою популярність. Тим не менше, перевагою довідникових видань, що пройшли редакторську перевірку, є однорідність і достовірність інформації. Також актуальними та зручними в роботі є спеціалізовані довідники, що містять фізико-хімічні параметри речовин, таблиці, діаграми тощо.

Навчальна література

Є декілька типів навчальної літератури, що сильно відрізняються обсягом, формою подачі матеріалу та навчальною задачею. Розрізняють *підручник, навчальний* (у т.ч. навчально-

наочний та навчально-методичний) *посібник, методичні рекомендації, тексти лекцій, комп'ютерні програми* для навчання; до навчальної літератури відносять навіть робочі *програми дисциплін* [1]. Варто виокремити такий важливий для органічної хімії вид літератури, як *практикум* – видання, що містить інструкції до лабораторних і практичних робіт.

СПОСОБИ СИСТЕМАТИЗАЦІЇ ТА ПОШУКУ ХІМІЧНОЇ ІНФОРМАЦІЇ: ІСТОРІЯ РОЗВИТКУ

Сучасні комп'ютерні засоби зберігання, обробки та пошуку хімічної інформації багато в чому наслідують пошукові системи, що існували задовго до появи інформаційних технологій. Все ж не варто забувати, що масове оцифровування розпочалося приблизно через 100 років після створення хімічної періодичної літератури, дуже близької за структурою до сучасної.

Якщо колись і була висловлена думка, що хіміку-науковцю для його професійної діяльності потрібно знайомитися із усіма статтями, що публікуються в хімічних журналах, то неможливість цього стала очевидною ще задовго до настання ХХ ст. Саме тому ряд друкованих видань було створено виключно з метою пошуку потрібної інформації у першоджерелах. Тут буде лише коротко розглянуто принцип функціонування таких пошукових засобів, для детального ознайомлення із історією розвитку літературного пошуку можна звернутися до видань [2–5].

Довідник Бейльштейна

Найбільш очевидним рішенням проблеми систематизації інформації є формат довідника. Наскільки великим має бути довідник, що вміщає всі дані про органічні молекули та їх перетворення, продемонструвала понад 100 років тому фундаментальна праця *Handbuch der organischen Chemie* (видана німецькою мовою) російського вченого німецького походження Ф.Ф. Бейльштейна; найчастіше цей довідник називають за прізвищем його автора.

Довідник Бейльштейна містить інформацію про органічні речовини у вигляді окремих статей, де наводиться: формула, фізичні характеристики, методи одержання, хімічна поведінка; часто приводиться інформація про похідні цієї сполуки. В тексті статті даються посилання на першоджерела – статті у журналах. Для стислості назва журналу позначена коротким кодом, а розшифровка наводиться на початку довідника.

Для знаходження речовини у довіднику Бейльштейна [2] потрібно знайти у *формульному покажчику* її брутто-формулу, обрати серед перелічених нижче назв потрібну та звернутися до вказаного тому довідника. Уточнимо, що в формульному покажчику довідника Бейльштейна використовується *система Ріхтера*: спочатку вказується кількість атомів С, потім – Н, О, N, Cl, Br, I, F, S, P, і далі за німецьким алфавитом, після чого формули розташовуються в порядку зростання кількості атомів (зараз застосовується *система Хілла*: спочатку С, Н, а потім – усі інші елементи в алфавітному порядку). Також можна скористатися *предметним покажчиком*.

Перше видання довідника Бейльштейна датується 1871 р., тоді довідник складався із двох томів та вміщав близько 1500 сполук. Найбільш повним та завершеним було четверте видання 1909–1910 рр. (31 том) та два його перших доповнення – 1919 та 1929 р. На той момент довідник дійсно містив інформацію про всі (!) описані в першоджерелах органічні речовини. Але починаючи із 1930-х рр. доповнення до довідника Бейльштейна уже не могли охопити всю наявну в літературі інформацію, тому обмежувалися найбільш важливими класами органічних сполук.

Наприкінці 1980-х рр. довідник Бейльштейна став функціонувати on-line під назвою *CrossFire Beilstein database*; видання довідника у друкованій формі було припинено в 1998 р. Як повідомлялось у прес-релізі, розміщеному на сайті Elsevier, вже у вересні 2007 р. *CrossFire Beilstein database* містила дані про понад 10 млн. сполук. Із 2009 р. контент підтримується та розповсюджується компанією Elsevier під назвою *Reaxys* [9].

Реферативні журнали

Реферативним журналом називають періодичне видання, в якому зібрані реферати статей із оригінальної періодики. Спочатку такі журнали видавалися раз на рік; із середини XX ст. – два та більше томів щорічно. Через велику кількість першоджерел, в період активного розвитку цієї пошукової системи один том хімічного реферативного журналу міг складатися з кількох десятків випусків. Реферати статей у реферативному журналі згруповано за тематиками (загальна, неорганічна та органічна хімія, хімічна промисловість тощо) та пронумеровано.

Для пошуку інформації в реферативному журналі до кожного тому додаються *покажчики*, які відсилають до номеру реферату:

- *формульний* (англ. *formula index*), що містить, у порядку зростання кількості атомів, брутто-формули всіх згаданих у цьому томі реферативного журналу речовин;

- *предметний* (англ. *subject index*), де в алфавітному порядку наведено основні явища, типи реакцій, класи речовин, переважно із підпунктами, де вказуються різновиди основного предмету; класи речовин можуть бути виділені в окремий покажчик (англ. *substance index*);

- *авторський* (англ. *author index*), як це впливає із назви, наводить прізвища авторів в алфавітному порядку.

Таким чином, для знаходження інформації потрібно було проглянути покажчики до кожного (!) тому журналу. Ситуацію міг спростити довідник Бейльштейна, але в будь-якому випадку це було кілька десятків книг (не враховуючи того, що, керуючись покажчиком, потрібно було знайти реферат у основному томі журналу, після чого, за необхідності, звернутися до оригінальної публікації, на основі якої було написано реферат).

Зважаючи на велику тривалість пошуку за окремими покажчиками, в певний період реферативні журнали намагались видавати зведені покажчики за 5–10 років, але затрати на видання таких масштабів були невиправданими.

Першим хімічним реферативним журналом був *Chemisches Zentralblatt*. Цей журнал почали видавати як збірку рефератів досліджень із фармацевтичної хімії в 1830 р. в Лейпцигу під назвою *Pharmaceuticalisches Centralblatt*; у 1850 р. журнал було

перейменовано на *Chemisch-Pharmazeutisch Zentralblatt*; назву *Chemisches Zentralblatt* журнал отримав у 1856 р. У 1969 р. видавництво цього журналу припинилось (на той час це стало економічно недоцільним, особливо на фоні паралельного випуску американського реферативного журналу *Chemical abstracts*). Зараз база даних *Chemisches Zentralblatt* доступна як інтернет-ресурс [21].

Видавництво реферативного журналу *Chemical abstracts* (CA) було розпочато ACS у 1907 р. З часом цей журнал набув набагато більшої популярності, ніж *Chemisches Zentralblatt*, оскільки його мова видання – англійська – була доступна більшому колу читачів. Цікаво, що основою створення CA була волонтерська робота, і лише у 1994 р. від послуг волонтерів при написанні рефератів відмовились. CA охоплював дуже широке коло першоджерел, з кожним роком швидко збільшуючись за обсягом. На початку 2000-х рр. випускались уже чотири томи на рік, і кожен із показників був великоформатною книгою понад 1000 сторінок. У 2010 році друк CA на паперових носіях було припинено. Сучасним інтернет-аналогом CA є база рефератів *CAplus* [16], створена Chemical Abstracts Service (CAS) ACS. Продуктом, що розповсюджується CAS і надає доступ до *CAplus*, є електронна пошукова база *SciFinder* [10].

Реферативный журнал "Химия" (РЖХим) видається з 1952 р. Всесоюзним інститутом наукової і технічної інформації Академії наук СРСР, тепер – Всеросійський інститут наукової і технічної інформації Російської академії наук (рос. ВИНТИ РАН). Зараз видання доступно як у друкованій, так і в електронній формі. Можна сказати, що в часи друкованої періодики РЖХим дещо поступався аналогічним виданням за кількістю реферованих першоджерел, але визначався більш детальними рефератами.

Щотижневий журнал *ChemInform* видавництва Wiley в період 1972–2016 рр. публікував реферати окремих статей із хімічної періодики, керуючись у виборі актуальністю та оригінальністю дослідження. Із 2017 р. *ChemInform* не видається, хоча сайт журналу та пов'язані із ним пошукові бази [6] функціонують.

Аналогічний формат має журнал *Synfacts* [22], що належить до групи видань із органічної хімії (*Synthesis*, *Synlett*, *SynOpen* та ін.) видавництва Thieme. *Synfacts* виходить щомісяця із 2005 р. й орієнтується на передові досягнення в областях органо- та металокаталізу, хімії гетероциклів, тотального синтезу природних сполук, медичної та біохімії, пептидного та твердофазного синтезу, синтезу в проточних умовах.

Реферативні журнали залишаються актуальними в першу чергу, якщо справа стосується пошуку рідкісних, досі не оцифрованих періодичних видань.

СИСТЕМАТИЗАЦІЯ ТА ПОШУК ХІМІЧНОЇ ІНФОРМАЦІЇ В ЕЛЕКТРОННОМУ ФОРМАТІ

Пошук та обмін інформацією зараз здійснюється в електронному вигляді. Багато даних в текстовому форматі доступні користувачу просто через пошукову систему Google; хоча для наукової інформації більш доцільно користуватися системою *Google Академія* (англ. *Google Scholar*). Але це ніякою мірою не може замінити спеціально створених хімічних електронних пошукових систем. Основною ознакою і безсумнівною перевагою останніх є можливість *пошуку за структурною формулою* – надійним та однозначним ідентифікатором. Це в першу чергу позбавляє проблем, пов'язаних із термінологією, адже не завжди зміни назв речовин та термінів могли бути відображені у пошукових базах. Не менш важливою є функція пошуку аналогів заданої структури: порівнюючи методи синтезу та властивості речовин, що відрізняються за будовою в цілому, але містять схожі структурні фрагменти, легко знайти джерело натхнення для створення нових молекул та перетворень.

Науково-метричні бази даних та рейтинг видань

Перед тим як звернутися до основних хімічних баз даних та їх пошукових систем, не можна не сказати кілька слів про чинники, що складають рейтинг журналів. Важко точно підрахувати, скільки у світі є періодичних видань, де друкуються статті хімічної тематики (приблизна оцінка шляхом порівняння різних

баз даних дає не менше 20 тис.). Не дивно, що бази даних рідко охоплюють всю світову періодику, як правило, індексуються статті із журналів, що відповідають певним вимогам. Зокрема, вище згадувався такий критерій як наявність у журналі процедури *подвійного незалежного рецензування* (англ. – *peer review*).

Для оцінювання рейтингу журналу найчастіше застосовується *коефіцієнт впливовості* або *імпакт-фактор* (англ. *impact-factor, IF*), при розрахунку якого оперують кількістю цитувань статей із журналу за попередні два або більше років. Для відстеження цитованості статей і були створені наукометричні бази даних, із яких найчастіше користуються базами *Scopus* та *Web of Science*.

Чинну науково-метричну систему не можна вважати ідеальною, але переваги від її використання суттєво більші, ніж недоліки; адже зусилля видавничих колективів, направлені на збільшення коефіцієнту впливовості видання, приводять, як правило, до підвищення рівня публікацій, отже, наукових досліджень в цілому.

Електронні бази даних хімічних сполук та реакцій

ChemSpider [17] – база даних хімічних сполук та реакцій, належить RSC, вільного доступу.

eMolecules [19] – база, в якій зібрано інформацію про понад 1,5 млн. комерційно доступних "building blocks" (невеликих функціоналізованих органічних молекул, призначених для побудови більш складних структур) від різних виробників.

PubChem [12] – база даних про хімічні сполуки та їх біологічну активність. Безкоштовна, вільного доступу. Підтримується національним центром біотехнологічної інформації США (англ. National Center for Biotechnology Information, NCBI) – складовою частиною національної медичної бібліотеки США, відділенням національного Інституту Здоров'я США (англ. National Institutes of Health, NIH).

Reaxys. Одна із найбільш популярних баз із добре розвинутою системою пошуку структур, реакцій, авторів, журналів, термінів, даних біологічних досліджень та зручними фільтрами пошукових результатів.

SciFinder [10] – база даних хімічної бібліографічної інформації, містить не лише дані із першоджерел, але й інші види хімічної літератури (книги). Створена та підтримується Chemical Abstracts Service ACS. Початкова версія бази призначалась для хімічних комерційних організацій; тепер є версія *SciFinder Scholar* для навчальних закладів.

Spectral Database for Organic Compounds (SDBS) [8] – база спектральних даних Національного інституту передової промислової науки та технології (англ. National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, AIST) в Японії. Надає вільний доступ до даних спектрів ^1H та ^{13}C ЯМР, ІЧ та КР, ЕІ-МС, ЕПР.

Звісно, наведений тут перелік далеко не повний, але більш ніж достатній для початкового ознайомлення із можливостями, що надають сучасні цифрові технології в сфері пошуку хімічної інформації.

Варто наголосити, що для успішності пошуку за допомогою електронних баз даних слід чітко сформулювати, що саме є метою (конкретна структура, ряд подібних структур, реакція, властивості) та ретельно ознайомитися з інструкціями, розміщеними на офіційних сайтах.

Електронні бази патентних даних

Усі перелічені у попередньому розділі ресурси індексують патентну інформацію. Існують окремі пошукові бази патентів, де також можна ознайомитися із повнотекстовими документами; зокрема, *Espacenet* [14] від ЄПО – Європейської патентної організації (англ. EPOrg – European Patent Organisation) та *PATENTSCOPE* [11] – нещодавно створена ВОІВ глобальна база патентних даних.

Пошук із використанням бази даних Reaxys

Як було вказано вище, широкі пошукові можливості роблять базу *Reaxys* даних однією із найбільш популярних у хіміків всього світу. Результат пошуку багато в чому залежить від уміння правильно скористатись пошуковими засобами бази. Тому настільки важливо ознайомитися із розміщеними на сайті інструкціями та підказками [9].

Дані у базі *Reaxys* можуть бути організовані за сполуками, реакціями, документами та біологічними мішеннями; доступні опції пошуку за усіма переліченими категоріями. Форма *Quick search* (рис. 1) дозволяє швидко сформулювати пошуковий запит як за ключовими словами, так і за структурою (опція *Draw*).

Рис. 1

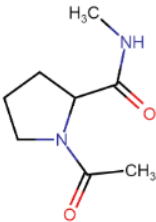
Більш традиційна форма *Query builder* (рис. 2) дозволяє тонке налаштування пошуку як за структурою, так і за додатковими полями (їх більше сотні). Побудова пошуку дозволяє комбінувати окремі запити за допомогою логічних операторів.

Рис. 2

Search in: [Reactions](#) > [Targets](#) > [Substances](#) > [Documents](#) >

Import
 Save
 Reset form
 Delete all
 Structure
 Molecular Formula
 CAS RN
 TI, AB & KW

◇ Structure



On all atoms

AND

◇ Interatomic Distances... ☒ Find any Show fields ▾ (Description) ✕

Find search fields and forms

Fields Forms History

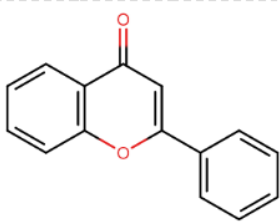
- ◇ Heat Capacity Cp0
- ◇ Heat Capacity Cv
- ◇ Henry Constant
- ◇ **Interatomic Distances and Angles**
- ◇ Ionization Potential
- ◇ Isoelectric Point pH
- ◇ Kinematic Viscosity
- ◇ Liquid Phase
- ◇ Liquid/Liquid Systems
- ◇ Liquid/Solid Systems

Puc. 3

Search in: [Reactions](#) > [Targets](#) > [Substances](#) > [Documents](#) >

Import
 Save
 Reset form
 Delete all
 Structure
 Molecular Formula
 CAS RN
 TI, AB & KW

◇ Structure



On all atoms

AND

◇ Isolated from Natural... ☐ Find any Show fields ▾ (Isolated from Nat...) ✕

Find search fields and forms

Fields Forms History

MedChem ▾

Other ^

- ◇ **Isolated from Natural Source**
- ◇ Use
- ◇ Exposure Assessment
- ◇ Concentration in the Environment
- ◇ Transport and Distribution
- ◇ Bioaccumulation, Biomagnification and Biomonitoring
- ◇ Biodegradation
- ◇ Abiotic Degradation, Hydrolysis

Puc. 4

Наприклад, можна знайти лише ті речовини з певною структурою (рис. 3), для яких наявні дані про міжатомні відстані та кути (*Physical Properties / Interatomic distances and angles*), або лише ті сполуки, що зустрічаються у природі (рис. 4, *Other / Isolated from natural source*).

Можна виявити сполуки, що проявляють певний рівень біологічної активності (зокрема, дієвість щонайменше у мікромолярному діапазоні) (рис. 5, *MedChem / Measurement pX*):

Рис. 5

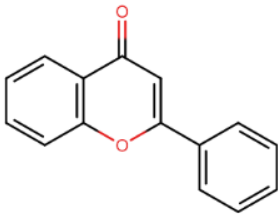
чи, наприклад, сполуки, для яких наявні дані ^{13}C ЯМР спектрів (рис. 6, *Spectra / NMR Spectroscopy / Show fields*):

Reaxys[®] Quick search Query builder Results Synthesis planner History Register > Sign in ?

Search in: Reactions > Targets > Substances > Documents >

Import Save Reset form Delete all Structure Molecular Formula CAS RN TI, AB & KW

◇ Structure



On all atoms

AND

◇ NMR Spectroscopy

☐ Find any

is	▼	Description (NMR Spectroscopy)	🔍
is	▼	¹³ C	🔍
is	▼	Coupling Nuclei	🔍
is	▼	Solvents (NMR Spectroscopy)	🔍
=	▼	Temperature (NMR Spectroscopy), °C	🔍
=	▼	Frequency (NMR Spectroscopy), MHz	🔍
is	▼	Original Text (NMR Spectroscopy)	🔍

Find search fields and forms 🔍

Fields Forms History

Reaxys ^

Topics and Keywords v

Identification v

Physical Properties v

Spectra ^

- ◇ NMR Spectroscopy
- ◇ IR Spectroscopy
- ◇ Mass Spectrometry
- ◇ UV/VIS Spectroscopy
- ◇ Raman Spectroscopy
- ◇ ESR Spectroscopy
- ◇ NQR Spectroscopy
- ◇ Rotational Spectroscopy
- ◇ Luminescence Spectroscopy
- ◇ Fluorescence Spectroscopy

Рис. 6

З обох форм *Quick search* та *Query builder* доступна форма *Draw* (або *Create Structure / Reaction Drawing*), призначена для створення структурного запиту. За замовчуванням пропонується використання структурного редактора *Marvin JS* компанії *ChemAxon* (рис. 7); доступна значна частина опцій для створення структурного запиту цього редактора (ці можливості постійно розширюються), тому рекомендується ознайомлення з його допоміжною документацією.

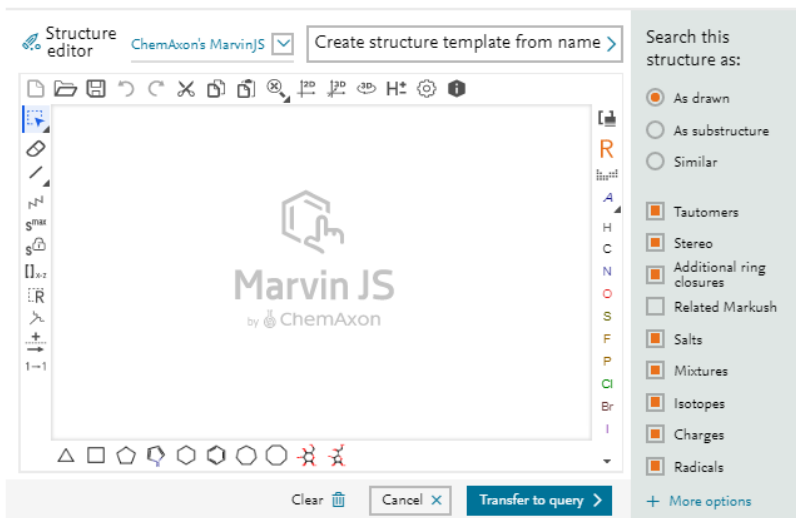


Рис. 7

Структурний пошук може бути реалізовано за конкретною структурою (*As drawn*), за підструктурою (*As substructure* – за гетероатомами та за будь-якими атомами) та за молекулярною подібністю (за Танімото, *Similar*). Доступні додаткові опції, як-от врахування таутомерів (*Tautomers*), стереохімічних особливостей (*Stereo*), наявності додаткових циклів, що замикаються за участі уже наявних (*Additional ring closures*) тощо.

Серед корисних функцій графічного редактора слід звернути увагу на можливість задати параметри зв'язку (рис. 8), що стають доступні при натисканні на ньому правою кнопкою миші, зокрема тип (одинарний, подвійний, ароматичний, будь-який тощо), топологію (не визначено, в циклі, в ланцюгу), а також реакційний центр, що може бути корисним для пошуку реакцій.

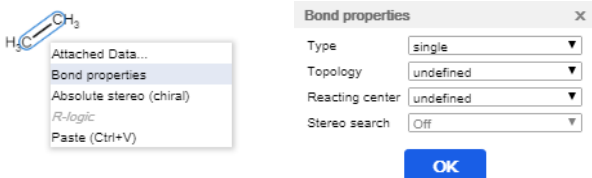


Рис. 8

Аналогічне діалогове вікно наявне для параметрів атома; окрім базового набору типу символу атома, заряду чи радикального центру (рис. 9), що також можуть бути задані безпосередньо з вікна графічного редактора інтуїтивно зрозумілим чином. Рекомендується звернути увагу на розширений список опцій, що дозволяє визначити кількість кілець, зв'язків, що входять до циклу, замісників тощо. Слід зазначити, що, на жаль, не всі з перелічених опцій у поточній версії бази працюють коректно.

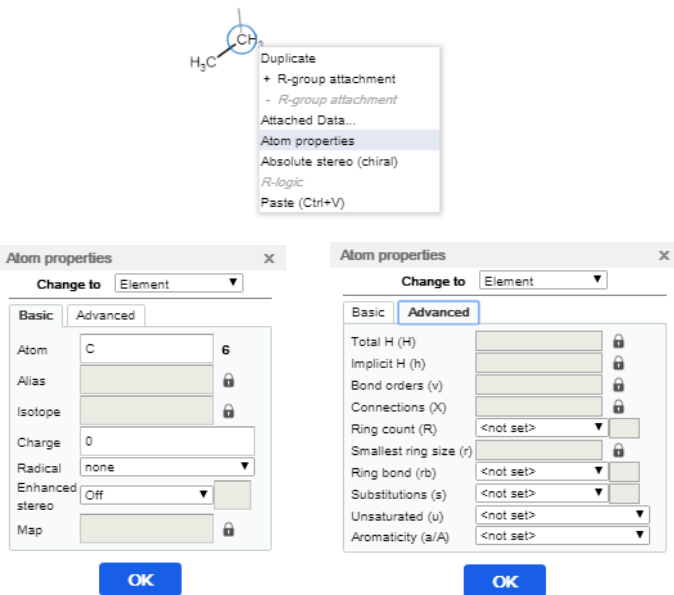


Рис. 9

Корисні опції пошуку відображено у лівій частині вікна; серед них слід відзначити можливість блокування додаткових замісників (рис. 10) та наведення ланки структури, що повторюється певну кількість разів (у тому числі діапазон значень). Додаткові можливості наявні для структурного пошуку серед реакцій (рис. 10), а саме: співставлення атомів у реагентах та продуктах (*Atom mapping* та *Manual atom map*). Треба зазначити, однак, що через дещо неповне індексування структурної інформації щодо реакцій (особливо для старих публікацій) даним варіантом пошуку слід користуватися з обережністю, оскільки знайдені таким чином результати можуть виявитися ілюстративними, але не вичерпними.

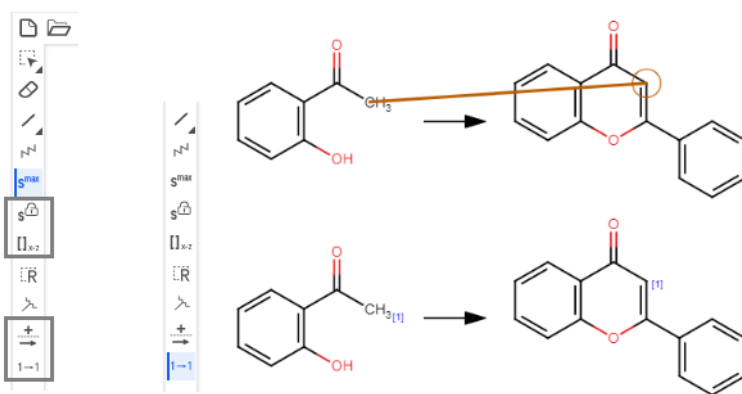


Рис. 11

Ряд корисних можливостей редактора відображено у правій частині вікна поруч з символами елементів (рис. 11). Так, значок періодичної таблиці дозволяє задати список атомів або виключити деякі з них; також доступними є «пошукові» атоми: А – будь-який атом окрім Гідрогену; Q – будь-який гетероатом; М – будь-який метал; Х – будь-який галоген; АН, QН, МН, ХН – ті ж опції, але з додаванням варіанту "або Гідроген". Слід пам'ятати про можливість наведення атомів Гідрогену в структурі для блокування заміщення за відповідним атомом при пошуку за підструктурою.

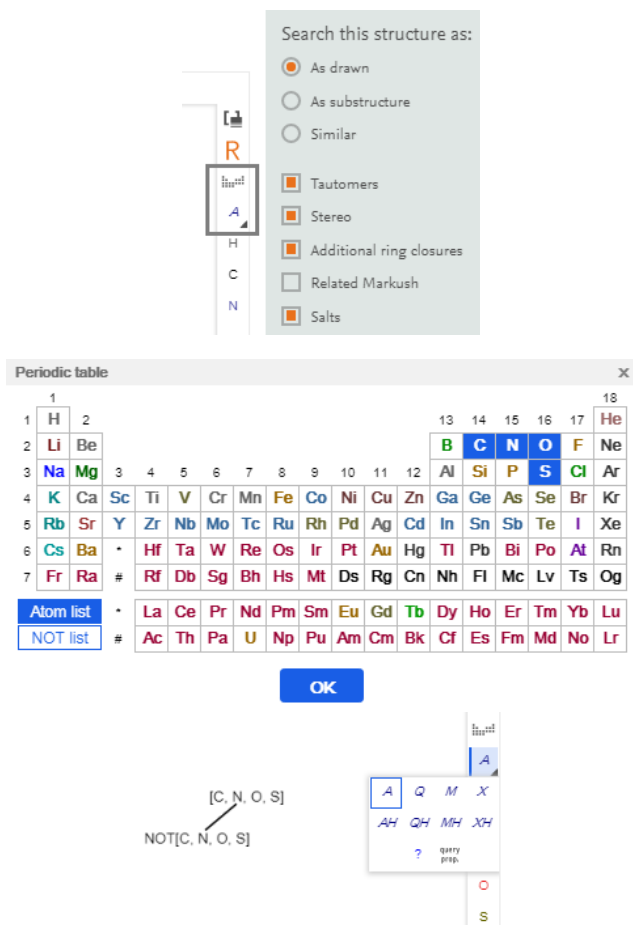


Рис. 11

Деякі додаткові опції для уточнення пошуку стають доступними вже після одержання його результатів (рис. 12). Перелік цих опцій залежить від типу обраного пошуку (серед структур, реакцій, документів чи біологічних мішеней), хоча доступною є можливість перемикавання між згаданими представленнями результатів (згори над результатами пошуку).

39,661 Substances out of 45,739 Documents, containing 85,381 Reactions, 3,200 Targets

☐ 0 selected

Limit To

Exclude

Export

Preparations

структури

Filters

Limit to >
Exclude >

- By Structure ▾
- Measurement pX ▾
- Highest Clinical Phases ▾
- Targets ▾
- Parameters ▾
- Substance Classes ▾
- Molecular Weight ▾
- Number of Fragments ▾
- Availability ▾
- Availability in other databases ▾
- Available Data ▾
- Document Type ▾
- Publication Year ▾
- Patent Assignee ▾
- LogP ▾

реакції

Filters

Limit to >
Exclude >

- By Structure ▾
- Yield ▾
- Reagent/Catalyst ▾
- Solvent ▾
- Catalyst Classes ▾
- Solvent Classes ▾
- Product Availability ▾
- Reactant Availability ▾
- Reaction Classes ▾
- Document Type ▾
- Publication Year ▾
- ☐ Single step reactions only
- ☐ Experimental procedure only

документи

Filters

Limit to >
Exclude >

- Index Terms (List) ▾
- Index Terms (ReaxysTree) ▾
- Publication Year ▾
- Document Type ▾
- Authors ▾
- Patent Assignee ▾
- Journal Title ▾
- Substance Classes ▾
- Reaction Classes ▾

Рис. 12

Усі ці фільтри можуть бути обрані для включення чи, навпаки, виключення певних типів результатів. Серед фільтрів, що доступні для представлення результатів у вигляді структур чи реакцій, особливо корисними є структурні фільтри, що можуть бути використанні як для виокремлення, так і для відкидання певних підструктур. Наприклад, для пошуку 2-гетарилхромонів (рис. 13) можна спочатку здійснити пошук за підструктурою зліва (тип зв'язку між атомами А – ароматичний), а потім серед результатів відкинути сполуки, що відповідають підструктурі справа. Важливо, що даний фільтр може бути використано декілька разів поспіль із різними підструктурами, що дозволяє формувати дуже складні пошуки.

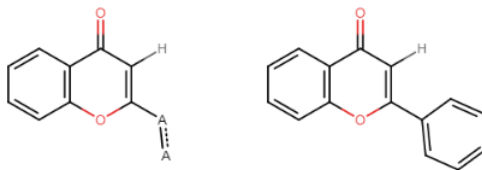


Рис. 13

Слід відзначити також фільтри за типом документа (*Document Type*), що, зокрема, дозволяють відкинути результати, опубліковані у патентах, та роком публікації (*Publication Year*). Вони доступні для будь-якого представлення результатів пошуку.

Export documents Reaxys ×

Choose a format: **PDF/Print** ▼ ⓘ

Range: **All results - 145** ▼ ⓘ

Export:
☐ All available data ⓘ
☒ Hit data only ⓘ

Additional options:
☒ Include structures
☒ Include abstracts
☐ Include reactions
☐ Include Front page information
☐ Include a description in the document

Export >

Рис. 14

Корисною є можливість експортувати результати в різних форматах (кнопка *Export*, згори над результатами пошуку). Наприклад, після виконання пошуку серед структур (чи реакцій) можна перемкнути представлення результатів у вигляді списку документів та експортувати лише дані пошуку (*Hit data only*, *Include structures* чи *Include reactions*) – тоді знайдені структури (реакції) буде відсортовано у відповідності з документами, де вони згадуються (рис. 14). Документи до того ж можуть бути попередньо відсортовані, наприклад, за роком публікації.

РЕКОМЕНДОВАНІ ДЖЕРЕЛА

1. Інформація та документація. Видання. Основні види. Терміни та визначення понять : ДСТУ 3017:2015. – Введ. в дію 01.07.2016. – К. : ДНУ "Книжкова палата". – 42 с.
2. Корнілов М. Ю. Німецько-російсько-український словник: Посібник для користування хімічними довідниками "Бейльштейн" і "Гмелін" / М. Ю. Корнілов, К. Д. Сич. – К. : РВЦ "Київський університет", 1993. – 36 с.
3. Потапов В. М. Химическая информация. Что, где и как искать химику в литературе / В. М. Потапов, Э. К. Кочетова. – М. : Химия, 1978. – 304 с.
4. Терентьев А. П. Химическая литература и пользование ею / А. П. Терентьев, Л. А. Яновская. – 2-е изд. – М. : Химия, 1967. – 327 с.
5. Чуйгук В. О. Літературний синтез в органічній хімії / В. О. Чуйгук. – К., 1979. – 24 с.
6. <http://www.cheminform.com/>
7. <http://www.orgsyn.org/>
8. https://sdb.sdb.aist.go.jp/sdb/cgi-bin/cre_index.cgi
9. https://service.elsevier.com/app/answers/detail/a_id/14526/c/10545/supporthub/reaxys/
10. <https://sso.cas.org/as/XMLj5/resume/as/authorization.ping>
11. <https://patentscope.wipo.int/search/en/search.jsf>
12. <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
13. <https://ukrpatent.org/uk>
14. <https://worldwide.espacenet.com>
15. <https://www.acs.org/content/acs/en.html>
16. <https://www.cas.org/support/documentation/references>
17. <http://www.chemspider.com/>
18. <https://www.doi.org/>
19. <https://www.emolecules.com/>
20. <https://www.epo.org/index.html>
21. <https://www.infochem.de/products/databases/czb.shtml>
22. <https://www.thieme.de/de/synfacts/journal-information-55968.htm>