

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

***Методические указания к выполнению
практических работ по дисциплине
«Методы поиска научной информации
(по химии)»***

Направление подготовки 04.04.01 - химия
Направленность (профиль) «Аналитическая химия и химическая экспертиза»

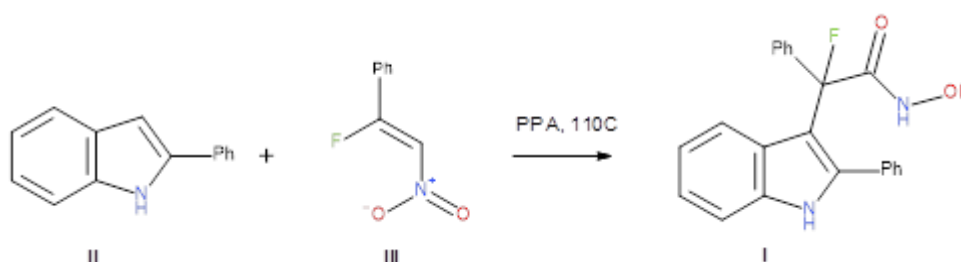
Ставрополь 2026

ВВЕДЕНИЕ

Владение навыками быстрого и эффективного поиска научной информации является одной из важных профессиональных составляющих современного ученого. В то время как, зачастую, подобное исследование может быть проведено с использованием неспециализированных поисковых систем (Google, Яндекс и др.), значительный объем и специфика представления научной информации таковы, что, в большинстве случаев, данный подход является, как минимум, неоптимальным и/или поверхностным. На сегодняшний день усилиями научного и бизнес сообщества при участии ряда крупнейших издательств научной литературы созданы свои специализированные поисковые системы и электронные базы данных, позволяющие производить поиск по ключевым словам, фразам, и структурам химических соединений, их физическим, химическим, спектральным и другим свойствам. Умения и навыки грамотно формулировать такие запросы, свободно ориентироваться в их синтаксисе приходит через постоянное, регулярное решение практических задач естественным образом, возникающих в процессе выполнения студентами научно-исследовательской деятельности.

Примерные варианты практических заданий для выполнения в рамках изучения дисциплины «Методы поиска научной информации (в химии)»

Задание 1. Для проведения исследований на биологическую активность требуется синтезировать фторзамещенную индолгидроксамовую кислоту I. Исходя из накопленного в лаборатории опыта, была предложена следующая синтетическая схема ее получения.



Проведите литературный поиск и предложите схему синтеза реагента III из доступных исходных соединений. Обратите внимание, что в предложенной вами синтетической последовательности, для каждого из промежуточных соединений, по возможности, должны быть указаны/описаны способы его получения и основные физико-химические и спектральные данные.

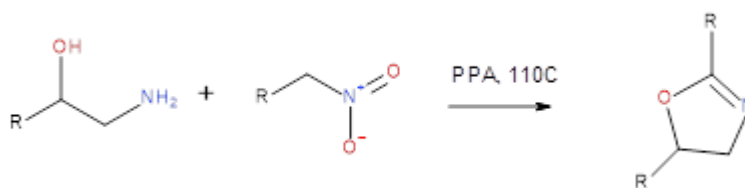
Задание 2. Полифосфорная кислота (ПФК), будучи, в целом, доступным и удобным лабораторным реагентом, обладает одним существенным недостатком – высокой вязкостью и низкой растворимостью в большинстве распространенных органических растворителей. Эти два обстоятельства делают ее применение в промышленном и полупромышленном синтезе весьма затруднительным. Предположительно, выходом из данной ситуации могло бы стать приготовление микроэмульсий РРА в неполярных органических растворителях (толуол, ксилол и тд). Проведите литературный поиск на предмет возможности получения и применения микроэмульсий полифосфорной кислоты в органическом синтезе.

Задание 3. Использование в лаборатории безводного HF связано со значительными трудностями и требует специального оборудования.

Проведите литературный поиск и найдите реакции/синтетические схемы, где бы безводный фтороводород как реагент получали бы *in situ*, т.е. непосредственно во время проведения реакции.

Задание 4. Хотя «классической» кислотой/средой для проведения реакции Риттера является концентрированная серная, случаи использования полифосфорной кислоты также известны. Опираясь на литературные источники, изучите достоинства/недостатки способа проведения реакции Риттера в полифосфорной кислоте.

Задание 5. Исходя из предыдущих работ лаборатории в этой области, студенту была поставлена задача изучить возможность получения оксазолинов реакцией между 1,2-аминоспиртами и алифатическими нитросоединениями. Проведите литературный поиск на предмет того, какие еще способы получения оксазолинов из соответствующих 1,2-аминоспиртов описаны в литературе.



ЛИТЕРАТУРА

а) Основная литература:

1. Рагойша, А.А. Текстовый поиск научной химической информации в Интернете: руководство к практикуму: учеб. пособие по курсу "Информационные технологии в химии" для студентов хим. фак. спец. [электронный ресурс] – Минск, БГУ, 2011. Режим доступа: http://www.abc.chemistry.bsu.by/lit/Rahoisha_2011.pdf
2. Рагойша, А.А. Поиск химической информации в Интернете: Научные публикации. [электронный ресурс] - Минск, БГУ, 2007. Режим доступа: http://www.abc.chemistry.bsu.by/lit/Rahoisha_2007.pdf
3. Рагойша, А.А. Поиск химической информации в Интернете. Поисковые системы и тематические каталоги. [электронный ресурс] - Минск, БГУ, 2003. Режим доступа: http://www.abc.chemistry.bsu.by/lit/Rahoisha_2003.pdf
4. Рагойша, А.А. Интернет для начинающих и не только... [электронный ресурс] - Минск, БГУ, 2004. Режим доступа: http://www.abc.chemistry.bsu.by/lit/Rahoisha_2004.pdf

б) Дополнительная литература:

1. Татаринов, Д.А., Немтарев А.В. Онлайн поисковые системы научной информации. Учебное пособие. Казань, КФУ, 2013, 30 с.

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

***Методические указания к
самостоятельной работе по дисциплине
«Методы поиска научной информации
(по химии)»***

Направление подготовки 04.04.01 - химия
Направленность (профиль) «Аналитическая химия и химическая экспертиза»

Ставрополь 2025

ВВЕДЕНИЕ

Курс «Методы поиска научной информации (по химии)» предназначен для студентов химических специальностей с целью познакомить их с основами эффективного и продуктивного поиска химической информации. Излагаемый материал, условно, представлен тремя большими блоками, посвященными 1) особенностям представления химической информации в научной литературе; 2) приемам работы с первичными и вторичными литературными источниками и 3) алгоритмам поиска специализированной информации, так или иначе связанной с химией. Мы надеемся, что подобное строение курса даст студентам ясное представление о базовых принципах хемоинформатики с тем, чтобы в дальнейшем они могли осознанно использовать полученные знания и навыки в своей профессиональной деятельности.

Вместе с тем, мы хотели бы особо подчеркнуть, что не существует универсальных способов или приемов, гарантирующих успешность проведения литературного поиска, и постоянная практика, «метод проб и ошибок» являются здесь наилучшим способом достичь эффективности. По этой причине самостоятельная контролируемая работа студентов, позволяющая им углублять и совершенствовать знания и навыки, полученные на лекционных и практических занятиях, является, по нашему мнению, пожалуй, самым важным компонентом данного курса.

Список вопросов для самостоятельного изучения
по дисциплине «Методы поиска научной информации (в химии)»

1. Общая характеристика онлайн-информационных источников. Изолированный документ; группа веб-страниц; база данных. Информация текстовая, числовая, графическая, мультимедийная; химическая структура как информационный пакет. Интерактивные элементы веб-страниц. Проблема анонимности и авторства онлайн-документов.
2. Проблема достоверности материалов. Первоисточник и интерпретация. Стандартные приемы формальной оценки степени достоверности онлайн-информационного источника
3. Текстовые базы данных. Классификация баз данных по типу хранящейся информации: текстовые, числовые, содержащие структурные формулы веществ, содержащие сведения о химических реакциях, спектральные, кристаллографические; архивы программ. Классификация по способу доступа: офлайновые и онлайн-овые. Метабазы данных. Литературные базы данных: библиографические, реферативные, полнотекстовые. Структура текстовой базы данных: запись, поле, вспомогательные указатели (индексы).
4. Принципиальная схема поиска и извлечения информации. Поисковый процесс как посимвольное сравнение текста задания с текстами, хранящимися в базе данных. Запрос (поисковое задание). Синтаксис запроса. Логические (булевы операторы). Оператор по умолчанию. Операторы расстояния. Использование шаблона для отображения словоформ; для отображения варьируемых фрагментов термина. Режим stemming как способ учета словоформ поисковых терминов. Регистр букв. Стоп-слова. Формулирование запроса на естественном языке. Поле как элемент поискового задания. Поисковые бланки: простейшие и усложненные. Список результатов поиска. Ранжирование списка результатов по степени соответствия поисковому заданию — релевантности.
5. Научные публикации. Типы печатных научных изданий. Первичные и вторичные источники научной информации. Рецензируемые и нерецензируемые источники информации.
6. Научный журнал как архив научных знаний и как инструмент оценки качества результатов научной деятельности. Структура журнала. Типы публикаций в научном журнале (статья, краткое сообщение, письмо в редакцию, обзор). Рецензируемые и нерецензируемые части журнала. Научная статья. Структура статьи (название, авторы, реферат или аннотация, основной текст, ссылки и список использованной литературы, вспомогательные элементы статьи). Препринт, постпринт.
7. Материалы конференции. Тезисы докладов, расширенные тезисы, презентации, труды конференции. Диссертация. Автореферат диссертации.

Научный отчет. Депонированная рукопись. Продолжающееся издание. Книга: монография, сборник статей, учебное пособие.

8. Реферативный журнал. Структура журнала. Структура отдельной записи в реферативном журнале. Универсальные и специализированные реферативные журналы. Библиографический указатель. Библиографическое описание научной публикации: краткое и полное. Импакт-факторы научных журналов. Индексы цитирования.

9. Онлайн-научные журналы. Общая характеристика онлайн-периодических и продолжающихся научных изданий. Преимущества онлайн-изданий по сравнению с печатными. Платные и бесплатные ресурсы. Причины размещения бесплатной информации в Интернете. Инициатива Open Access. Приемы визуального определения общедоступности полного текста публикации. Постоянно доступные ресурсы и временно доступные ресурсы.

10. Виды открытого доступа к отдельным частям тома научного журнала или его выпуска. Период эмбарго и движущаяся граница доступности. Форматы онлайн-публикаций. Организация информационного массива онлайн-журнала как комплекса PDF- и HTML-документов. Информационные ресурсы издательства в открытом и скрытом Интернете.

11. Текстовые поисковые программы. Инструменты для поиска по открытому и для поиска по закрытому Интернету. Навигационные элементы на страницах сайта. Структура поисковых бланков Quick, Basic, Advanced Search. Области применения каждого из типов бланков. Особенности работы с бланком Quick Search. Общие правила формулирования текстового запроса для поисковой программы.

12. Методика поиска информации по сведениям об авторе публикации. Особенности поиска по фамилии с диакритическими знаками. Транслитерация кириллических фамилий.

13. Методика проведения тематического поиска. Отбор поисковых терминов для запроса. Тематический поиск по полям записей в базе данных. Возможности поиска по брутто-формулам химических веществ.

14. Принципы работы CrossRef - агентства, регистрирующего онлайн-научные объекты. Цифровой идентификатор объекта DOI. Структура кода DOI. Использование DOI в онлайн-и печатной литературе в целях однозначного описания местонахождения публикации в Интернете.

15. Патентная литература. Патент, патентная заявка, авторское свидетельство. Патент как юридический документ и как источник научной информации. Структура патентного документа: страница библиографического описания, формула изобретения, описание изобретения. Понятие о патентном семействе. Национальные, международные и региональные патентные бюро. Общие сведения о процедуре регистрации

изобретения. Патентная классификация. Основные онлайн-патентные базы данных.

16. Регистрационные номера химических веществ, используемые в больших базах данных. CAS Registry Number: алгоритм нумерации химических объектов, формат записи. Проблема соотнесения кода и вещества. Онлайн- и офлайн-источники сведений о CAS RN. Возможность использования CAS RN в информационном поиске. Отображение состава и структуры химического вещества в форме линейной записи (линейной нотации).

17. Номенклатура ИЮПАК. Офлайн- и онлайн-средства генерирования систематических названий веществ. Проблемы, возникающие при использовании систематического названия химического вещества в качестве компонента поискового задания. Особенности ведения информационного поиска по названию вещества в индексе универсальной поисковой системы и в специализированной справочной базе данных.

18. Линейные нотации SMILES. Причины, обусловившие потребность в подобной форме отображения состава и структуры вещества. Основные правила формулирования кода SMILES (кодирование линейных, разветвленных, циклических, ароматических молекулярных структур, ионных соединений, стереоизомеров, схем химических реакций). 19. Офлайн- и онлайн-средства генерирования кодов SMILES. Достоинства и недостатки SMILES в сфере кодирования химических структур. Онлайн-базы данных, содержащие SMILES. Использование SMILES в информационном поиске.

20. Международный химический идентификатор InChI. Причины, обусловившие потребность в разработке InChI. Общее представление о формате кода InChI (слоевая структура, набор слоев в текущей версии спецификации, подслои главного слоя). Понятие об InChIKey. Офлайн- и онлайн-средства генерирования кодов InChI. Использование InChI и InChIKey в информационном поиске.

21. Справочные базы данных, содержащие сведения о физических и химических свойствах химических веществ, смесей, материалов. Базы данных, содержащие информацию о структуре вещества.

22. Приемы формулирования запросов разных типов: текстового, числового, структурного — для целенаправленного поиска справочной информации. Сайты ведущих компаний, производящих химические товары. Каталоги химических реактивов. Методика поиска сведений о реактиве и о фирме-изготовителе. Критерии определения оптимальной цены реактива. Структурный поиск. Сертификаты безопасности материала (MSDS).. Онлайн-базы данных, содержащие MSDS; метасайты.

23. Базы данных NIST. Chemistry WebBook как источник достоверных сведений в области химии. Справочник по термодинамическим и термодинамическим свойствам веществ и ионов NIST Standard Reference Database. Главная страница базы данных; назначение гиперссылок; поисковые бланки. Методика извлечения информации о веществе. Текстовый поиск. Поиск по структуре.

24. Графическое отображение ЯМР-, ИК-, масс-спектров. Файловый стандарт обмена спектральными данными JCAMP-DX. Апплет как инструмент отображения интерактивного спектра. Онлайн-репозитории спектральных данных. Информационный поиск в спектральных базах данных и анализ результатов. Спектры веществ в NIST Chemistry WebBook.

25. Комплекс баз данных RIO-DB Национального института современной индустриальной науки и технологии (Япония) как источник достоверных сведений о строении и свойствах химических веществ и материалов. Спектроскопические ресурсы RIO-DB. Методика извлечения спектральной информации (ЯМР-, масс-, ИК-спектров) из базы данных SDBS.

26. ChemSpider как онлайн-центр структурной информации. Принципы формирования и редактирования базы данных; границы достоверности сведений, содержащихся в ChemSpider. Методика извлечения спектральной информации. Онлайн-источники информации о методиках органического синтеза. Приемы извлечения и анализа сведений из баз данных ChemSynthesis, ChemSpider SyntheticPages, Organic Syntheses.

27. Репозитории химических структур. Принципы формирования базы данных и коррекции ее содержания. Границы достоверности извлекаемой информации. Метасайты, содержащие адреса, описания и рекомендации по использованию бесплатных справочных баз данных.

ЛИТЕРАТУРА

а) Основная литература:

1. Рагойша, А.А. Текстовый поиск научной химической информации в Интернете: руководство к практикуму: учеб. пособие по курсу "Информационные технологии в химии" для студентов хим. фак. спец. [электронный ресурс] – Минск, БГУ, 2011. Режим доступа: http://www.abc.chemistry.bsu.by/lit/Rahoisha_2011.pdf
2. Рагойша, А.А. Поиск химической информации в Интернете: Научные публикации. [электронный ресурс] - Минск, БГУ, 2007. Режим доступа: http://www.abc.chemistry.bsu.by/lit/Rahoisha_2007.pdf
3. Рагойша, А.А. Поиск химической информации в Интернете. Поисковые системы и тематические каталоги. [электронный ресурс] - Минск, БГУ, 2003. Режим доступа: http://www.abc.chemistry.bsu.by/lit/Rahoisha_2003.pdf
4. Рагойша, А.А. Интернет для начинающих и не только... [электронный ресурс] - Минск, БГУ, 2004. Режим доступа: http://www.abc.chemistry.bsu.by/lit/Rahoisha_2004.pdf

б) Дополнительная литература:

1. Currano, J., Roth, D. Chemical Information for Chemists: A Primer. Cambridge, RS Publishing, 2014, 322 p
2. Калугина, О.Б., Люцарев, В.С. Работа с текстовой информацией. Microsoft Office Word 2003. Москва, МГУ, 2005, 152 с.
3. Тереньтев, А., Яновская, Л. Химическая литература и пользование ею. Москва, Химия, 1967, 306 с.