

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ**

Федеральное государственное образовательное учреждение высшего
профессионального образования "Московский государственный университет
имени М.В.Ломоносова"
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

« ___ » _____ 20__ г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Химическая информация и базы данных»**

НАПРАВЛЕНИЕ ПОДГОТОВКИ 020100 «ХИМИЯ»

**Специальность
«Химия»**

Квалификация (степень) выпускника
магистр

Форма обучения очная

Москва
2014

Составитель – кандидат химических наук Круковская Н.В.

ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Учебная программа дисциплины «Химическая информация и базы данных» составлена для специальности 020100 «ХИМИЯ» с учетом развития информационных технологий и перспективы их использования в системе химического образования и рекомендаций Методической секции Ученого совета. Реализация этой программы позволит выпускникам эффективно работать с современными информационными ресурсами, необходимыми как для научной, так и для производственной деятельности в области химии и химической технологии. Программа рассчитана на изучение курса в течение одного семестра.

Основной целью учебной дисциплины «Химическая информация и базы данных» является ознакомление с современными информационными технологиями.

Основными задачами дисциплины являются:

- ознакомление с основными принципами поиска научно-технической информации
- ознакомление с существующими наиболее важными информационно-поисковыми системами,
- отработка практических навыков поиска научно-технической информации в электронном виде.

1. ТРЕБОВАНИЯ К УРОВНЮ ОСВОЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ.

В результате изучения дисциплины «Химическая информация и базы данных» студент должен:

- иметь представление об основных информационно-поисковых системах и принципах их построения;
- знать и уметь использовать электронные базы данных;
- иметь представление о критериях качества информационных ресурсов;

Освоение дисциплины базируется на знаниях, полученных при изучении предшествующих курсов: «Информатика», «Информационные технологии сопровождения научной деятельности».

Дисциплина преподается в течение 1 семестра. Итоговый контроль – дифференцируемый зачет.

2. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Всего часов
Общая трудоемкость дисциплины	48
Лекции	24
Практические занятия (ПЗ)	21
Самостоятельная работа (зачетное задание – самостоятельный поиск информации по теме научной работы)	3
Вид итогового контроля (экзамен, диф. зачет, зачет)	Диф. зачет

3. СОДЕРЖАНИЕ КУРСА.

1. Введение

Научно-техническая информация (примеры НТИ), классификация источников НТИ — первичные (статьи, патенты, другие виды полнотекстовых публикаций) и вторичные (реферативные базы данных, реферативные журналы, справочники).

2. Что такое STN International. Библиографические базы данных

Общие сведения о базах данных (БД) в режиме online в БД STNInternational. Классификация БД. Основные команды языка Messenger. Логические операторы. Символы усечения и позиционные операторы. Критерии выбора релевантной БД. Алгоритм проведения поиска в библиографических БД. Понятие об индексах. Basic Index. Специальные индексы. Учебные БД — Learning Chemical Abstracts (LCA), Learning Registry (LReg), Learning CASReact — LCASReact.

3. Библиографическая БД Chemical Abstracts

Общие представления о библиографической БД Chemical Abstracts (CA). Печатное издание CA. Электронные БД CA on CD (offline), БД CA, HCA, ZCA, CAPlus, ZCAPlus, HCAPlus через STN (online). Возможность поиска по цитированию. Регистрационные номера CAS (CAS RNs). Ключевые слова и контролируемые термины. Роли и их применение.

4. Структурно-химические БД . БД Registry

Структурно-химической файл Registry. БД Registry как единый формульный указатель к БД CA Пример записи в БД Registry. Поиск по полному химическому названию. Особенности систематической номенклатуры Chemical Abstracts Service. Поиск по молекулярной формуле (порядок Хилла), фрагментам химического названия, Ring System.

5. Редактор STN Express для структурного поиска

Структурный поиск в БД STN. Графический интерфейс STN Express-8. Построение и проверка структурных запросов. Представление таутомеров. Основные виды поисков. Реакционная БД CASREACT (mapping, marking)

6. Патентная информация в STN International и иных источниках НТИ.

Патенты как первоисточники НТИ. Процедура патентования — заявка, публикация, патент. Время действия патента. Правовой статус патента. Международная классификация изобретений. Патентное семейство.

Доступ к полным текстам патентов (открытый доступ).

Европейское патентное ведомство. Патентное ведомство США. Патентное ведомство Японии. Патентное ведомство России – Роспатент.

Патентные ресурсы с лицензионным видом доступа:

Патентные БД в STN International.

Патентная БД Questel Orbit.

7. Информационно-поисковая система SciFinder, REAXYS, Web of Science

Понятие о популярных структурно-химических поисковых системах SciFinder, Reaxys – информационное наполнение, частота обновления, особенности интерфейса. База данных научного цитирования SciSearch (STN International), Web of Science (Web of Knowledge).

Импакт-факторы журналов, Хирш индекс (h index). Особенности поиска по цитированию в различных информационных ресурсах.

8. Заключение

Источники полнотекстовой информации для химиков и химиков-технологов.

Возможность полнотекстового поиска на сайтах издательств. Что такое ISSN журналов.

Каталоги БЕН РАН и ВИНТИ РАН в интернет. Поиск публикаций с использованием Google Scholar. Поиск статей из научных журналов с использованием системы CrossRef (DOI).

4.1. РАЗДЕЛЫ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ ЗАНЯТИЙ

№ п/п	Раздел дисциплины	Всего	Лекции	Практические занятия
Раздел 1. Библиографические базы данных				
Занятие 1	Введение	3	3	
Занятие 2	Что такое STN International. Библиографические базы данных	3	3	
Занятие 3	Библиографическая БД Chemical Abstracts	3	3	
Занятие 4	Поиск библиографической информации по автору в БД LCA	3		3
Занятие 5	Поиск библиографической информации по названию организации в БД LCA	3		3
Занятие 6	Тематический поиск информации в БД LCA	3		3

Раздел 2. Структурно-химические базы данных				
Занятие 7	Структурно-химические БД . БД Registry	3	3	
Занятие 8	Поиск веществ по молекулярной формуле в БД LReg	3		3
Занятие 9	Поиск веществ по названию и/или фрагментам названия в БД LReg	3		3
Занятие 10	Редактор STN Express для структурного поиска	3	3	
Занятие 11	Поиск веществ с использованием структурного редактора STN Express в БД LReg	3		3
Раздел 3. Информационно-поисковые системы и ресурсы открытого доступа				
Занятие 12	Патентная информация в STN International и иных источниках НТИ	3	3	
Занятие 13	Информационно-поисковая система Reaxys	3	1.5	1.5
Занятие 14	Информационно-поисковая система SciFinder, REAXYS, Web of Science	3	1.5	1.5
Занятие 15	Заключительное занятие – обзор пройденных тем	3		3.0
Занятие 16	Зачетное задание	3	3	
Итого		48	24	24

ВОПРОСЫ К ДИФФЕРЕНЦИРОВАННОМУ ЗАЧЕТУ:

На зачете студент должен ответить на 5 вопросов из разделов I -V (по одному вопросу из каждого раздела). На подготовку отводится не менее 20 минут. В случае спорной ситуации по оценке студент отвечает на один вопрос из раздела VI.

ТЕМА I. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА STN International

- 1) Что такое STN International?
- 2) С какого года возник проект STN International и по инициативе какой организации?
- 3) Классификация баз данных (БД) по научно-технической информации
- 4) Кластеры БД STN International. Принцип объединения в кластеры
- 5) Печатные предшественники библиографических БД
- 6) Печатные предшественники фактографических БД
- 7) Релевантная БД – критерии выбора
- 8) Содержание краткого описания БД (на каком сайте можно посмотреть)

ТЕМА II. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ БД, КОМАНДНЫЙ ЯЗЫК MESSENGER, СИМВОЛЫ
УСЕЧЕНИЯ (TRUNCATION, WILDCARDS), ЛОГИЧЕСКИЕ ОПЕРАТОРЫ (BOOLEAN),
КОНТЕКСТНЫЕ ОПЕРАТОРЫ (PROXIMITY)

- 1) Логические операторы
- 2) Символы усечения
- 3) Контекстные операторы
- 4) Основные команды языка Messenger
- 5) Цена проведения поиска в библиографических базах данных
- 6) Вывод информации в библиографических БД
- 7) Специальные индексы

ТЕМА III. БИБЛИОГРАФИЧЕСКАЯ БД CHEMICAL ABSTRACTS (CA):
РЕФЕРАТИВНЫЙ ЖУРНАЛ, КОМПАКТ-ДИСК, ONLINE

- 1) С какого года выпускается реферативный журнал CA?
- 2) Какой период времени охватывает версия CA online?
- 3) Чем различаются БД CA и CAPlus? Чем различаются БД HCA, ZCA и CA?
- 4) С какого года в CA используются регистрационные номера CAS?
- 5) Деление на секции CA
- 6) Индексирование по ролям
- 7) Контролируемая терминология

ТЕМА IV. СТРУКТУРНО-ХИМИЧЕСКИЕ БД STN

- 1) В каких БД STN возможен структурный поиск?
- 2) Отличие поиска в молекулярных и реакционных БД
- 3) Основные виды структурного поиска в STN
- 4) Зачем нужен пробный поиск?
- 5) Возможности структурного редактора STN Express
- 6) Достоинства и недостатки структурного поиска

ТЕМА V. ПОИСК ВЕЩЕСТВ В СТРУКТУРНО-ХИМИЧЕСКОЙ БД REGISTRY

- 1) Поиск по молекулярной формуле
- 2) Поиск по полному названию и фрагментам названия
- 3) Что является Basic Index в БД Registry?
- 4) Поля Chemical Name и Chemical Name Segment
- 5) Что является обязательным атрибутом для вещества в БД Registry?
- 6) Какие поля выводятся в формате SCAN в БД Registry?
- 7) Связь БД Registry и БД CA
- 8) Основные поля БД Registry

- 9) Есть ли библиографическая информация в БД Registry?
- 10) Является ли БД Registry фактографической?
- 11) Значение БД Registry в STN

ТЕМА VI. Иные источники научно-технической информации

- 1) БД научного цитирования (Web of Science)
- 2) SciFinder
- 3) REAXYS
- 4) Патенты как источник НТИ

Основная литература

1. Хуторецкий В.М. Общие представления о поиске научно-технической информации в режиме онлайн. Базы данных STN International в теледоступе. М: РХТУ, 2000. 42 с.
2. Круковская Н.В. Поиск информации о химических веществах, сплавах и полимерах с помощью базы данных Registry. М: РХТУ, 2001. 32 с.
3. Международная сеть научно-технической информации STN International: <http://www.stn-international.de> и <http://cas.org/products/stnfamily/index.html>
4. ИПС SciFinder: <http://www.cas.org/products/scifinder>
5. CAS Learning Solutions: <http://www.cas.org/training/scifinder/>
6. ИПС Reaxys: <http://www.reaxys.com>

Дополнительная литература

1. Ефременкова В.М., Круковская Н.В. 100-летний юбилей Chemical Abstracts Service: факты и цифры // Научно-техническая информация. Сер. 1. 2007. № 12. С. 24-29.
2. Зибарева И.В. Химические базы данных сети STN International // Известия АН. Сер. хим. 2012. № 3. С. 679-716.
3. Ridley D.D. Information Retrieval: SciFinder. Wiley, 2009. 214 pp.
4. Платформа Web of Knowledge: <http://wokinfo.com/russian/>
5. Легин Г.Я., Хуторецкий В.М. Патентный поиск в базах данных международной сети научно-технической информации STN International, Москва, 1996
6. Потапов В.М., Розенман М.И., Кочетова Э.К., Покровский Б.И. Поиск химической информации. Справочное руководство по использованию традиционных и компьютерных средств. М: Изд-во МГУ, 1990. 174 с