

# Информационно-поисковая система SciFinder

Учебно-методическое пособие

И.В. Зибарева

Научно-образовательный центр энергоэффективного катализа  
Новосибирский государственный университет

Новосибирск – 2015 г.

Настоящее пособие предназначено для обучения студентов и магистрантов работе с информационно-поисковой системой (ИПС) Scifinder – основным современным источником научно-технической информации по химии, химической технологии и ряду смежных дисциплин. Пособие состоит из трех основных разделов, посвященных базам данных (БД) различного типа – библиографическим (в том числе патентным), структурно-химическим и БД химических реакций. В каждом разделе с учетом специфики рассматриваемых БД описаны поиск целевой информации, возможности просмотра, анализа и уточнения найденных результатов, их сохранение для последующей работы.

Составитель:

канд. пед. наук И. В. Зибарева

Рецензент

к.х.н. А. А. Ведягин

Издание подготовлено в рамках программы развития Научно-образовательного центра энергоэффективного катализа Новосибирского государственного университета

©Новосибирский государственный  
университет, 2015

# Оглавление

ПРЕДИСЛОВИЕ .....	6
ВВЕДЕНИЕ .....	8
1. ПОИСК В БИБЛИОГРАФИЧЕСКИХ БД .....	14
Поиск библиографической информации .....	14
Опции поиска библиографической информации .....	14
Тематический поиск .....	15
Поиск по автору .....	17
Поиск по названию организации .....	18
Поиск по идентификаторам документов .....	18
Поиск по названию журнала .....	19
Поиск патентных документов .....	21
Поиск по меткам / тегам .....	23
Просмотр и анализ результатов библиографического поиска .....	23
Опции просмотра и анализа библиографических ссылок .....	23
Просмотр набора ответов .....	24
Быстрый просмотр информации из библиографической ссылки .....	25
Сортировка документов .....	26
Просмотр деталей документов .....	26
Анализ текущего набора ответов .....	27
Предварительный анализ .....	29
Категоризация документов .....	29
Возврат к предыдущему набору ответов .....	30
Уточнение набора ответов .....	30
Опции уточнения набора ответов .....	30
Удаление дублированных записей из БД Medline .....	30
Сохранение или удаление отмеченных документов .....	31
Уточнение набора ответов дополнительными критериями .....	31
Комбинирование результатов поиска .....	32
Извлечение дополнительных данных из найденных документов .....	33
Опции извлечения данных .....	33
Получение данных о веществах .....	33
Получение данных о реакциях .....	34
Получение данных о цитируемых публикациях .....	34
Получение данных о цитирующих публикациях .....	34
Получение полных текстов документов .....	35
Сохранение документов и обмен ими .....	35

Опции сохранения документов и обмена ими.....	35
Сохранение текущего набора ответов.....	36
Обмен записями.....	37
Экспорт записей.....	37
Импорт записей.....	38
Распечатка записей в формате PDF.....	39
Отправка записей в SciPlanner.....	39
Открытие сохраненного набора ответов.....	40
Редактирование информации о сохраненном наборе ответов.....	40
Удаление сохраненных наборов ответов.....	40
Комментирование и маркирование записей.....	40
Опции комментирования и маркирования записей.....	41
Добавление комментариев к записям.....	41
Добавление тегов к записям и их использование.....	42
Удаление тегов.....	43
Редактирование или удаление комментариев к записям.....	43
Доступ к патентам с помощью PatentPak.....	43
<b>2. ПОИСК ИНФОРМАЦИИ О ВЕЩЕСТВАХ.....</b>	<b>45</b>
Проведение поиска по веществам.....	45
Опции поиска по веществам.....	45
Поиск по точной структуре Exact Structure.....	46
Поиск по фрагменту структуры Substructure.....	47
Поиск структурно-подобных веществ Structure Similarity.....	48
Поиск патентов по структурам Маркуша.....	50
Поиск по молекулярной формуле.....	51
Поиск по физическим свойствам.....	52
Поиск по идентификатору вещества.....	59
Использование набора веществ для нового поиска.....	60
Просмотр, анализ и уточнение наборов веществ.....	61
Опции просмотра, анализа и вывода веществ.....	61
Просмотр / вывод веществ.....	62
Сортировка веществ.....	62
Вывод детальной информации о веществе.....	63
Анализ текущего набора ответов.....	63
Сохранение или удаление выбранных / маркированных веществ.....	65
Уточнение набора ответов с помощью дополнительных критериев.....	65
Уточнение результатов значением / величиной физических свойств.....	66

Уточнение набора ответов присоединением атомов .....	67
Возврат к предыдущему набору ответов .....	68
Комбинирование наборов веществ.....	68
Получение сопутствующих данных для веществ .....	69
Получение библиографических ссылок для вещества .....	70
Нахождение реакций, связанных с веществом.....	70
Поиск коммерческих источников веществ.....	71
Получение нормативной информации для веществ .....	71
Сохранение информации о веществах и обмен ею с коллегами.....	71
Сохранение текущего набора веществ.....	72
Обмен информацией по веществам.....	73
Экспорт веществ.....	73
Импорт веществ.....	75
Печать списка веществ .....	76
Отправка веществ в SciPlanner.....	76
Открытие сохраненного набора веществ .....	77
Редактирование информации о сохраненном наборе веществ .....	77
Удаление сохраненных наборов веществ.....	77
<b>3. ПОИСК ИНФОРМАЦИИ О РЕАКЦИЯХ .....</b>	<b>79</b>
Проведение поиска по реакциям.....	79
Основные опции поиска по химическим реакциям: .....	79
Поиск по структурам .....	80
Расширенные поисковые опции .....	82
Спецификация растворителей.....	84
Спецификация не участвующих функциональных групп .....	85
Нахождение подобных реакций.....	86
Нахождение дополнительных реакций .....	86
Просмотр, анализ и уточнение набора реакций.....	87
Просмотр набора реакций.....	88
Быстрый просмотр информации о публикации .....	89
Быстрый просмотр информации о веществе .....	89
Группировка реакций.....	89
Сортировка реакций.....	90
Просмотр экспериментальных методик.....	91
Сохранение или удаление выбранных реакций .....	92
Анализ текущего набора реакций.....	92
Уточнение набора реакций с помощью дополнительных критериев .....	93

Возвращение к предыдущему набору реакций.....	95
Комбинирование наборов реакций .....	95
Получение дополнительных данных .....	96
Получение библиографических ссылок.....	97
Получение полного текста библиографической ссылки.....	97
Получение информации о веществе .....	98
Нахождение коммерческих поставщиков веществ – участников реакции .....	100
Сохранение текущего набора реакций .....	101
Обмен наборами реакций.....	102
Экспорт реакций .....	102
Импорт реакций .....	103
Печать результатов поиска.....	103
Отправка реакций в SciPlanner .....	104
Открытие сохраненного набора реакций.....	104
Редактирование сохраняемого набора реакций.....	105
Удаление сохраненных наборов реакций .....	105
4. Нахождение коммерческих поставщиков .....	105
Опции нахождения коммерческих поставщиков.....	105
Поиск коммерческих поставщиков .....	106
Сортировка списка коммерческих поставщиков .....	107
Редактирование списка коммерческих поставщиков .....	107
Анализ коммерческих поставщиков.....	107
Просмотр дополнительных сведений о коммерческих поставщиках.....	109
Задание статуса коммерческих поставщиков .....	109
Печать списка коммерческих поставщиков.....	109
Экспорт данных о коммерческих поставщиках .....	110
ПРИЛОЖЕНИЕ .....	112

## ПРЕДИСЛОВИЕ

«Мы утратили мудрость ради знаний, знания потеряли в информации, а информацию в данных» – констатация, начатая Т.С. Элиотом еще в первой половине прошлого века и продолженная позже А. Кливлендом, как нельзя лучше отражает объективную ситуацию. Стремительный количественный рост научной информации (по одному из определений наука – это процесс производства и потребления информации, в котором ее объем на выходе превышает объем на входе) порождает серьезные проблемы, связанные с ее сбором, хранением, обработкой, систематизацией, адресным поиском и эффективным использованием. В настоящее время период удвоения количества научной информации составляет менее 10 лет (для всей хранимой в мире информации ~ 3 г.; по оценкам, в 2007 г. ее общий объем был ~295 миллиардов гигабайт).

В этих условиях владение современными информационными технологиями и умение эффективно работать с электронными информационными ресурсами – критически важный аспект профессиональной подготовки ученых-исследователей и преподавателей высшей школы. Для них все более актуальным становится получение информации об информации.

Особенно это касается химии, где информация очень быстро накапливается и медленно устаревает. По мысли В.А. Коптюга «для химика информация зачастую важнее реактивов». Помимо огромного объема – известно уже более 160 миллионов химических веществ (из них индивидуальных – органических и неорганических – более 95 млн.) – ситуация осложнена спецификой химической информации. В химии используются структурные формулы, реакционные схемы, систематические и тривиальные названия веществ, т.д. Быстро прогрессирует диверсификация источников, включая патенты, в которых аккумулируется все больше и больше новых химических данных. Поэтому не удивительно, что необходимость специального обучения поиску химической информации была ясно осознана еще в середине прошлого века – предмет слишком сложен для самообразования.

Настоящее пособие посвящено обучению работе с информационно-поисковой системой SciFinder, произведенной (1995 г.) и поддерживаемой Службой химических рефератов (Chemical Abstracts Service – CAS) Американского химического общества (American Chemical Society – ACS), США. Тематически

система предназначена для специалистов в области химии, химической технологии и материаловедения, биохимии и биомедицины, включая фармацевтику. Она также содержит смежную с этими дисциплинами информацию по физике, геологии, металлургии, медицине и т.д. Технологически система SciFinder ориентирована на т.н. «конечных пользователей»: научных сотрудников, преподавателей, аспирантов и студентов, самостоятельно проводящих в режиме онлайн поиск научно-технической информации, необходимой для их исследовательской или / и учебной работы.

В системе SciFinder на единой технологической платформе размещены 7 баз данных (БД): библиографические CAPlus (химия) и Medline (биомедицина); структурно-химические Registry (химические соединения), CASReact (химические реакции) и Marpat (структуры Маркуша в патентах); справочные ChemCats (объединенный каталог коммерчески доступных веществ) и ChemList (правовая информация по химическим соединениям). В ней возможны следующие виды информационного поиска: библиографический – по автору, организации, ключевым словам (CAPlus, Medline) – и по химическим реакциям (CASReact) и структурам соединений (Registry), включая структуры Маркуша (охватывающие соединения с общим структурным фрагментом и различными заместителями) в патентах (Marpat). В библиографических БД имеется опция, позволяющая найти цитирование публикаций начиная с 1997 г.

Работа с системой SciFinder, как и использование данного пособия, предполагает знание английского языка, включая научную терминологию, в университетском объеме.

При подготовке пособия использован собственный многолетний опыт работы с системой SciFinder, монография [1] и учебные материалы, размещенные на сайте CAS [2].

1. D.D. Ridley, *Information Retrieval: SciFinder*, 2nd Edition, Wiley, 2009.
2. *Scifinder*. URL: <https://scifinder.cas.org/help/scifinder/R33/index.htm>



## ВВЕДЕНИЕ

Для работы с системой SciFinder пользователю необходимы идентификатор и пароль, которые нужно ввести в соответствующие поля *Username* и *Password* бланка *Sign In*.

При входе в систему появляется начальный экран, обеспечивающий следующие возможности:

- поиск библиографической информации и информации о химических веществах и реакциях;
- работу с сохраненными наборами ответов и протоколами поиска;
- визуальную систематизацию найденной информации;
- быстрый доступ к сохраненным наборам ответов;
- быстрый доступ к результатам текущего оповещения;
- настройку предпочтений;
- помощь в работе.

На этом экране можно:

- выбрать тип поиска: библиографических ссылок, химических веществ и реакций;
- просматривать, редактировать, удалять, объединять сохраненные наборы ответов;
- просматривать, удалять, объединять результаты автоматического текущего оповещения о появлении новых результатов поиска;
- просматривать, распечатывать, экспортировать историю текущего или предыдущих поисков;
- визуально систематизировать результаты поиска: ссылки, вещества или реакции;
- получить: помощь в работе; доступ к обучающим материалам; информацию о новых возможностях и изменениях; возможность информирования провайдера о проблемах, отправки ему комментариев и вопросов.

Выбор типа поиска означает выбор соответствующих баз данных:

Explore References	Explore Substances	Explore Reactions
библиографический поиск	поиск веществ	поиск реакций
БД CAPlus и БД Medline	БД Registry, БД ChemCats и БД ChemList	БД CASReact

В системе SciFinder доступны БД CAPlus, Registry, CASReact, Marpat, Medline, ChemCats и ChemList, содержащие следующую информацию по научным публикациям (References), химическим веществам (Substances) и реакциям (Reactions):

Тип информации	Содержание и охват*	Поисковые термины
библиографические ссылки	> 41 млн. ссылок из патентов 63 патентных ведомств и > 10 тыс. научных журналов из БД CAPlus, > 24 млн. ссылок из БД Medline; ретроспектива до 1907 г., для некоторых статей и патентов глубже	тематика, автор, организация, источник
вещества	~95 млн. индивидуальных химических веществ и > 66 млн. биопоследовательностей; > 4.5 млн. (для 3 млн. веществ) экспериментальных и 3.7 млрд. (для 80.4 млн. веществ) расчетных свойств; > 1.4 млн. экспериментальных (для 983 тыс. веществ) и > 79.7 млн. расчетных спектров ЯМР $^1\text{H}$ и $^{13}\text{C}$ ; ретроспектива до 1800 г.; информация из > 980 каталогов (> 870 поставщиков) для > 100 млн. коммерчески доступных веществ (> 29 млн. регистрационных номеров веществ CAS); нормативная информация для > 343 тыс. веществ	химическое название, регистрационный номер вещества CAS, молекулярная (суммарная, брутто-) формула, химическая структура (включая структуры Маркуша в патентах)

реакции	> 63.3 млн. одно- и многостадийных реакций; >13.6 млн. препаративных синтезов; ретроспектива до 1840 г.	схемы реакций, превращения функциональных групп
---------	---	---

\* Количественные характеристики БД, информационное наполнение которых быстро увеличивается, приведены на апрель 2015 г. Текущая статистика доступна на сайте CAS (<http://www.cas.org/content/at-a-glance>). Более подробное описание БД содержится в Приложении и на сайте CAS.

### Характеристика баз данных ИПС SciFinder

По характеру информации БД системы SciFinder можно классифицировать как библиографические / реферативные (CAPlus и Medline), БД химических веществ (Registry, Marpat, ChemCats и ChemList) и БД химических реакций (CasReact).

Библиографические БД CAPlus и Medline предоставляют возможность поиска по библиографической информации, результатом которого являются ссылки на публикации и тексты их рефератов.

БД CAPlus охватывает химию, химическую технологию и ряд смежных дисциплин, включая физику, материаловедение, биохимию и химическую информатику. Она содержит записи для всех документов, учтенных CAS с 1907 г., а также ~180 тыс. записей для более ранних документов. Цитируемые ссылки регистрируются для журнальных публикаций, материалов конференций и основных (basic) патентов, изданных патентными службами США и ФРГ, а также Европейским патентным офисом (European Patent Office – EPO) и Всемирной организацией интеллектуальной собственности (World Intellectual Property Organization – WIPO), начиная с 1999 г.

В БД CAPlus каждый реферат помещается в тематическую рубрику, соответствующую основному содержанию публикации. Рубрики сгруппированы в 5 разделов: биохимия (BIO); органическая химия (ORG); химия высокомолекулярных соединений (MAC); прикладная химия (APP); и химическая технология; физическая, неорганическая и аналитическая химия (PIA).

Среди источников информации БД CAPlus ~380 российских изданий, ~80 из которых входят в список т.н. «ведущих» журналов (core journals), содержащий ~1600 наименований. До 1995 г. учитывались только оригинальные версии российских изданий, начиная с него селективно реферируются английские

переводы 95 журналов (<http://www.cas.org/products/print/ca/translate.html>). С октября 1994 г. в БД CASPlus реферируются не только все статьи из ~1600 ведущих химических журналов, но и документы (библиографии, рецензии книг, т.д.), не учитываемые в печатном реферативном журнале Chemical Abstracts (РЖ СА; издание прекращено в 2010 г.). Кроме того, БД CASPlus обеспечивает ранний доступ к библиографическим описаниям, рефератам и номерам веществ CAS для документов, находящихся в процессе индексирования. Наряду с этим БД CASPlus предоставляет доступ к информации 63 патентных организаций.

БД CASPlus содержит тезаурусы для записей с 1967 г. по настоящее время в полях контролируемых терминов (CA Lexicon), ролей веществ CAS и Международной патентной классификации (International Patent Classification – IPC). Тезаурус CA Lexicon облегчает поиск по классам соединений – как химическим (например, стероиды), так и функциональным (например, красители или антибиотики). Имеется также тезаурус рубрик СА для записей с 1907 г. по настоящее время.

Поиск в БД CASPlus возможен по библиографической информации, регистрационным номерам веществ CAS, индексированным терминам, ролям веществ CAS и Международной патентной классификации, и рефератам. Возможно сочетание поиска по рефератам СА с поиском в других полях, в том числе индексированной и контролируемой терминологии. Роли веществ CAS в химических реакциях (например, реагент), иных процессах и / или процедурах приписываются им при обработке первичной литературы. Эти роли полезны при поиске информации (например, такой непростой как каталитическая), в том числе в сочетании с контролируемыми терминами. Например, использование роли «реагент» и термина «получение» позволяет найти ссылки на реакции соединения, которые могут быть не охвачены в БД CASReact. В целом, использование широко определенных концептов позволяет повысить эффективность поиска.

БД Medline содержит информацию по всем областям медицины. Она соответствует печатным изданиям Index Medicus, Index to Dental Literature, International Nursing Index, OldMedline (с данными из Cumulated Index Medicus, 1960-1965 гг.) и Current List to Medical Literature (1958-1959 гг.) и имеет ряд тезаурусов.

В БД химических веществ Registry, Marpat, ChemCats и ChemList возможен поиск по структурным формулам соединений или их любым фрагментам, в том числе по структурам Маркуша; молекулярным формулам; тривиальным, торговым и химическим названиям. Из БД веществ можно получить фактографическую / числовую информацию по свойствам веществ – например, термодинамическим, спектральным и другим.

В БД Registry доступна информация о веществах, включающая их структуру и свойства. Она – уникальный интегрированный информационный ресурс, самый надежный и полный источник регистрационных номеров веществ CAS. БД содержит сведения обо всех химических веществах (в том числе о коммерческой доступности и релевантной международной нормативной документации), однозначно идентифицированных регистрационной системой CAS, включая координационные соединения, полимеры, биопоследовательности, сплавы, керамику, композиты и смеси, на основании их состава и строения. Система учитывает стереохимию, таутомерию, альтернирование химических связей и другие структурные особенности соединений. Для включения в БД Registry вещество должно быть описано в первичной литературе однозначными терминами и охарактеризовано физическими методами (в патентных документах – описано в примерах или формулах изобретений), а его графическая формула – соответствовать правилам валентности.

БД Marpat охватывает химические патенты. Для периода 1961-1987 гг. она содержит структуры Маркуша из патентов, учтенных Institute Nationale de la Propriete Industrielle (INPI, Франция), с 1988 г. (для российских патентов с 2000 г.) – из всех патентов, учтенных CAS, за исключением корейских. Доступная информация включает библиографические описания и рефераты патентов, а также структуры Маркуша органических и металлоорганических веществ, но не сплавов, оксидов металлов, неорганических солей, интерметаллических соединений и полимеров.

БД ChemCats содержит сведения о коммерчески доступных химических продуктах: названия каталогов, химические и торговые названия веществ, характеристики чистоты, цены, регистрационные номера веществ CAS, структуры, свойства, нормативные данные и меры предосторожности. Приведены названия и адреса компаний-поставщиков.

БД ChemList содержит информацию о химических соединениях, включенных в нормативный перечень Toxic Substances Control Act (TSCA, издан Environmental Protection Agency, США); перечни US Regulatory Lists и Highly Hazardous Chemicals List, изданные US Department of Transportation; аналогичные документы отдельных штатов; или подлежащих контролю в соответствии с TSCA и подобными актами Австралии, Европейского Союза, Израиля, Канады, Тайваня, Филиппин, Швейцарии, Ю. Кореи и Японии.

В системе SciFinder информация хорошо интегрирована. Начав, например, с поиска по ссылкам, затем можно легко найти соответствующую информацию по веществам или реакциям – и наоборот.

# 1. ПОИСК В БИБЛИОГРАФИЧЕСКИХ БД

Алгоритм поиска библиографической информации и, при необходимости, обмена его результатами с коллегами довольно прост:

---

<b>Действие</b>	<b>Возможности</b>
поиск библиографической информации	поиск по тематической области; имени автора; названию организации, идентификатору документа; журналу; поиск патентной информации
просмотр и анализ полученных ответов	для выявления наиболее релевантных ответов: сортировка набора ответов в соответствии с выбранными критериями, например, для выявления самых ранних публикаций или наиболее цитируемых работ; анализ ответов – фильтрация ссылок в соответствии с выбранными критериями, например, для определения авторов или организаций, наиболее часто публикующихся в определенной области исследований
уточнение набора ответов	можно сузить набор ответов, добавив к нему более конкретные поисковые критерии, например, тип документа или год публикации; или объединить несколько наборов ответов; можно сохранить или удалить избранные ответы из набора, или объединить несколько наборов ответов
получение дополнительных данных	можно получить информацию о веществах или реакциях, фигурирующих в ответах, и / или все релевантные цитирующие или цитируемые ссылки
сохранение информации и обмен с коллегами	можно сохранить ссылки для последующего использования или экспортировать их в файлы для прочтения другими программами; или отправить коллегам соответствующие гиперссылки
комментарии и маркирование ссылок для последующего использования	можно добавить к ссылкам собственные комментарии и / или пометить их собственными поисковыми терминами для облегчения дальнейших поисков

---

## Поиск библиографической информации

Опции поиска библиографической информации

Тип поиска	Опция	Требование
Тематический поиск	<i>Research Topic</i>	формулировка научной тематики на английском языке с помощью терминов / концептов, разделенных предложениями и / или другими частями речи
по имени автора	<i>Author Name</i>	как минимум, фамилия автора
по названию организации / компании	<i>Company Name</i>	полное или частичное название организации / компании
по идентификатору документа	<i>Document Identifier</i>	номер документа в БД, патентный номер, идентификатор в БД PubMed, цифровой идентификатор объекта DOI
по журналу	<i>Journal</i>	полное или частичное название журнала или / и публикации, фамилия автора
по патенту	<i>Patent*</i>	как минимум, номер патента или имя правообладателя / изобретателя
по тегам	<i>Tags</i>	ключевые слова пользователя для ранее найденных ссылок

\* Возможен патентный поиск по структурам Маркуша, представляющим в обобщенном виде вещества из формулы изобретения. Соответствующая опция *Markush* доступна в поиске по веществам (см. далее).

## Тематический поиск

Поиск по научной тематике позволяет собрать информацию по конкретной области исследований, в том числе найти относящиеся к ней публикации / ссылки. Поисковый запрос представляет собой фразу / текст на английском языке. Последовательность действий следующая:

1) выбор типа поиска *Research Topic* в разделе *References*;

2) ввод поискового запроса на английском языке с использованием предлогов и других частей речи для разделения тематических концептов / терминов.

Опция *Advanced Search* позволяет с самого начала уточнить поиск посредством ряда ограничителей – для года и языка публикации, ее типа, имени автора или названия организации / компании:



Ограничитель	Конкретизация
<i>Publication Year</i>	период времени
<i>Document Type</i>	тип документов
<i>Language</i>	язык публикаций
<i>Author Name</i>	автор публикации
<i>Company Name</i>	организация

Чтобы эти ограничители всегда были на экране, следует отметить бокс *Always Show*.

Если поисковые требования изначально нестрогие, поиск целесообразно проводить широко, не применяя ограничители с самого начала. При необходимости их (а также другие возможности уточнения набора ответов) можно использовать позже посредством функции уточнения *Refine*.

Поиск начинается по команде *Search*. При этом надо выбрать одну или несколько из предложенных опций (*Research Topic Candidates*). Поиск по выбранным опциям реализует команда *Get References*. Опции основаны на концептах / терминах, распознаваемых системой SciFinder в поисковом запросе, и состоят из документов, содержащих эти концепты в вариантах *as entered* (т.е. как введены в поисковой фразе); *closely associated* (т.е. тесно связанные – обычно содержащиеся в одном предложении документа или / и в его заглавии); или *anywhere* (т.е. находящиеся в любых местах документа – как бы широко они ни были разделены в его тексте):

Вариант	В найденных документах концепты / термины содержатся	
<i>As entered</i>	как введены	точно в той форме, как они введены в запросе
<i>Closely associated with one another</i>	тесно связаны	в одном предложении или / и в заголовке публикации
<i>Present anywhere within a reference</i>	присутствуют где-либо в документе	в названии, реферате или индексируемой терминологии, находясь, возможно далеко друг от друга

*Containing the concept*

содержат концепт в той форме, как они введены; и / или в виде синонимов или похожих / родственных терминов

---

Количество документов в каждой такой опции не должно быть критическим фактором при ее выборе – даже ответы с очень большим количеством документов можно легко оценить и уточнить, используя аналитические инструменты системы SciFinder. Более важно понять, корректно ли интерпретированы концепты. Если опции не устраивают, можно вернуться к запросу и модифицировать его. Дополнительные инструкции содержатся в Приложении.

## Поиск по автору

Для поиска публикаций какого-либо автора, изобретателя или редактора (например, монографии) используется поисковая опция *Author Name* в разделе *References*. Последовательность действий следующая:

- 1) выбор в закладке *Explore* типа поиска *Author Name*;
- 2) ввод имени автора, изобретателя или редактора с обязательным заполнением поля фамилия – *Last name*.

Для начала поиска используется команда *Search*. По этой команде будут выведены варианты написания имени автора на экране *Author Name Candidates*.

Если для поиска по автору использовалась опция *Look for alternative spellings of the last name*, могут быть найдены другие варианты написания фамилии. После выбора соответствующих документов посредством команды *Get References* полученный набор ответов можно уточнить тематикой исследований (*Research Topic*), названием организации (*Company Name*) или другими критериями, например, именами соавторов, если известны. Если поиск по альтернативным вариантам написания фамилии не нужен, то опцию *Look for alternative spellings of the last name* следует отключить.

### **Рекомендации:**

- вводить максимум известной информации;
- применять пробелы, дефисы и апострофы;

замещать специальные символы (например, умляути) их эквивалентами (например, ü → ue);

использовать опцию *Look for alternative spellings of the last name* для учета лингвистических вариаций и типографских различий;

для сложных имен проводить несколько поисков с их разными вариантами; если нет уверенности, имя это или фамилия – использовать обе возможности в любом порядке.

## Поиск по названию организации

Эта опция используется для поиска публикаций какой-либо организации – компании, университета, исследовательского института, правительственного агентства и т.д. Последовательность действий:

- 1) выбор в закладке *Explore* типа поиска *Company Name*;
- 2) ввод полного или частичного названия организации в бланк поискового запроса.

Для начала поиска используется команда *Search*.

Для рассмотрения вариантов названия можно использовать опцию *Company-Organization* вкладки *Analyze*. При поиске автоматически учитываются различные написания, акронимы, сокращения, родственные термины и их группы. Например, использование слова *Company* или его сокращения *Co.* даст одинаковый результат.

### **Рекомендации:**

в каждом поиске следует вводить название только одной организации; в общем случае – чем больше терминов включено в запрос, тем конкретнее будет поиск; поэтому для широкого поиска следует использовать меньше поисковых терминов, для сужения набора ответов – больше.

## Поиск по идентификаторам документов

Для поиска публикаций с помощью идентификаторов документов – таких, как, например, номера патентов или публикаций (DOI – digital object identifiers) – используется опция *Document Identifier* в разделе *References*. Последовательность действий:

- 1) выбор в закладке *Explore* типа поиска *Document Identifier*;
- 2) ввод идентификатора(ов) – до 25 сразу, каждый в отдельной строке; примеры идентификаторов приведены ниже:

Идентификатор	Примечание
номер доступа в БД	номер доступа – уникальный идентификатор, приписанный к каждой записи; в БД CAPlus номер доступа имеет формат уууу:n...n, ограниченный 10 знаками, например: 2009:624911; в БД Medline формат номеров доступа такой же, но без двоеточия
номер документа	в печатном РЖ СА каждый реферат имел номер CAN ( <i>CAS accession number</i> ) в формате том:номер, например, 148:276656
патентный номер	патентный номер, например, <i>JP 1992-502228</i> , идентифицирует патентный документ – патент, патентную или приоритетную заявку; он начинается с кода страны, за которым следует год в 4-х (как выше) или в 2-значном формате, например, 1992 или 92
PubMed ID	номер документа в БД Medline (National Library of Medicine), не содержащий никакой пунктуации, например, 12608445
DOI (Digital Object Identifier)	цифровой идентификатор, используемый для однозначной идентификации электронного документа на всем протяжении его существования; система DOI управляется фондом International DOI Foundation, идентификатор всегда начинается с цифры 10, например, 10.1021/nr050327; префикс перед косой чертой идентифицирует источник документа (например, издательство или журнал), суффикс после нее – сам документ; в системе SciFinder поиск по DOI производится в БД CAPlus

Поиск начинается по команде *Search*.

### Поиск по названию журнала

Этот тип поиска используется для нахождения публикаций в конкретных журналах или других не патентных изданиях – таких, как книги и труды конференций. Последовательность действий:

- 1) выбор в закладке *Explore* типа поиска *Journal Name*;

2) заполнение одного из полей бланка поискового запроса.

Поиск по названию журнала требует, как минимум, ввода данных в поле *Journal Name*. Дополнительно можно ввести номер тома в поле *Volume*, номер выпуска в поле *Issue*, и номер первой страницы публикации в поле *Starting Page*. Можно использовать имя автора, что требует, по меньшей мере, ввода его фамилии в поле *Author Last Name*. Дополнительные данные можно ввести в поля *First* (первое имя / инициал) и *Middle* (среднее имя / инициал). Использование в поиске года публикации требует, как минимум, ввода названия журнала в поле *Journal Name*, ввод слов из заглавия публикации в поле *Title Word(s)* или ввода фамилии автора в поле *Author Last Name*.

Таким образом, в поля бланка поискового запроса вводятся следующие данные:

<b>Поле</b>	<b>Вводимые данные</b>
<i>Journal Name</i>	полное или частичное название журнала, сокращение или (для многих, но не всех) стандартный акроним (например, JACS); максимум 30 символов; сокращения или акронимы не должны содержать пробелы или знаки препинания
<i>Volume</i>	номер тома в виде цифровой или буквенно-цифровой последовательности, например, 38 или 45a
<i>Issue</i>	номер или месяц выпуска, например, 16 или June
<i>Starting Page</i>	номер начальной страницы в виде цифровой, буквенно-цифровой или буквенной последовательности, например, 46 или m287 или iii
<i>Title Word(s)</i>	полное или частичное название публикации – одно или несколько слов
<i>Author Last Name</i>	фамилия автора, например, Cotton
<i>First</i>	первое имя автора или инициал, например, Frank или F
<i>Middle</i>	среднее имя автора или инициал, например, Albert или A
<i>Publication year(s)</i>	конкретный год или интервал (например, 1975-1995), в том числе открытый (например, 1975- для публикаций 1975 г. и более поздних; или -1995 – для публикаций 1995 г. и более ранних)

Поиск начинается командой *Search*.

### **Рекомендации:**

Для просмотра оглавления / содержания конкретного выпуска журнала, включая графику, следует ввести его название (*Journal Name*), номер тома (*Volume*), и номер выпуска (*Issue*). Удаление записей из БД Medline, являющихся дубликатами записей из БД CAPlus, осуществляется по команде *Remove Duplicates* в меню *Tools*, или с помощью автоматического удаления дубликатов меню *Preferences* (где следует отметить опцию *Automatically remove duplicate Medline answers*).

### **Поиск патентных документов**

Этот тип поиска используется для нахождения ссылок из патентных источников. Последовательность действий:

- 1) выбор в закладке *Explore* типа поиска *Patent*;
- 2) ввод информации, по крайней мере, в одно из полей бланка; при указании изобретателя достаточно ввести его фамилию (*Inventor Last Name*).

В целом в поисковые поля вводятся следующие данные:

<b>Поле</b>	<b>Вводимые данные</b>
<i>Patent Number</i>	любой номер, идентифицирующий патентный документ: номер патента, например, CA 2107100 или CA2107100; номер патентной заявки, например, JP 1992-502228; номер приоритетной заявки, например, IT 1998-BO661; форматы ввода: патентный номер, не более 200 символов; использование верхнего или нижнего регистров, пробелов и знаков препинания, включая дефисы; код страны, предшествующий в номере году публикации, например, US 2005-301370; год публикации в 2- или в 4-значном формате, например, 05 или 2005
<i>Assignee Name</i>	имя патентобладателя – компании / организации или личности: полное (например, Glaxo SmithKline Corporation) или краткое (например, Glaxo) название компании; имя изобретателя (например, George Wolf или Wolf, George); имя правообладателя (содержащее хотя бы 1 алфавитный символ и не превышающее 200 знаков)

*Inventor Last Name* фамилия изобретателя, например, Green

*First* первое имя или инициал, например, Neil или N

*Middle* среднее имя или инициал, например, Derek или D

---

Поиск можно ограничить временем публикации патента, задав конкретный год или интервал, например, 1975-1995, в том числе открытый, например, 1975- – для публикаций 1975 г. и более поздних, или -1995 – для публикаций 1995 г. и более ранних.

Проводя поиск, следует иметь в виду, что номера патентных документов могут иметь различный формат в зависимости от страны / патентного ведомства:

---

<b>Страна или патентное ведомство</b>	<b>Формат номера патентного документа</b>
США (U.S.), ЕПО (Европейский патентный офис – EP), Канада (CA), Австралия (AU), Германия (DE)	продолжающаяся нумерация
Бразилия (BR), Ю. Корея (KR), Нидерланды (NL), Ю. Африка (ZA), ВОИС (Всемирная организация интеллектуальной собственности – WO)	отдельная нумерация для каждого года

---

Японская (JP) нумерация патентных документов имеет особенности:

---

<b>Тип документа</b>	<b>Период времени</b>	<b>Формат номера патентного документа*</b>
Заявки без экспертизы (Kokai – код A)	до декабря 1999 г.	отдельная нумерация для каждого года японского / императорского календаря*
	начиная с 2000 г.	отдельная нумерация для каждого года грегорианского календаря**
Заявки, прошедшие	до мая 1996 г.	отдельная нумерация для

экспертизу (Kokai – код В)

каждого года японского / императорского календаря\*

начиная с мая 1996 г.

замещена Tогоку

Патенты, выданные по новому закону (Tогоку – код В)

начиная с мая 1996 г.

продолжающаяся нумерация

\* Формат патентных номеров с отдельной нумерацией для каждого года японского / императорского календаря – JPEENNNNNN, где: JP – код ISO Японии; EE – 2 последних знака года этого календаря; NNNNNN – 6-значный номер.

\*\* Соответствие грегорианского и японского / императорского календаря показано ниже:

Календарь	Переход между календарями
грегорианский	японский / императорский
1926-1989 гг.	01-64 гг.
1989-2000 гг.	01-12 гг.

Поиск патентных документов можно провести по структурам Маркуша, представляющим собой обобщенные, в том числе гипотетические, структуры соединений из формулы изобретения в патенте. Соответствующая опция Markush доступна в типе поиска по веществам Substances (см. далее).

Поиск начинается по команде *Search*.

## Поиск по меткам / тегам

Для поиска ранее найденных документов, отмеченных метками / тегами с собственными терминами, используется опция *Tags* в разделе *References*. Последовательность действий:

- 1) выбор в разделе *References* типа поиска *Tags*;
- 2) выбор нужного тега из их алфавитного списка.

## Просмотр и анализ результатов библиографического поиска

### Опции просмотра и анализа библиографических ссылок

Система SciFinder позволяет быстро оценить результаты поиска и выбрать наиболее релевантные из них:



Цель	Достижение цели
просмотр найденных библиографических ссылок	по завершении поиска ответы выводятся на экран; можно быстро просмотреть заглавия и рефераты найденных документов и перейти по гиперссылкам от заглавий к просмотру деталей (см. ниже); количество выводимых на страницу ответов и текстов рефератов можно контролировать
сортировка документов	найденные библиографические ссылки можно отсортировать в соответствии с выбранными критериями, направленными, например, на выявление самых ранних патентных документов или наиболее цитируемых публикаций
просмотр деталей	для просмотра деталей конкретного документа следует перейти к нему по гиперссылке заглавия; а экран будет выведен полный реферат, библиографическая информация и цитируемые ссылки, а также индексируемые термины, которые можно использовать в дальнейших поисках
анализ текущего набора ответов	анализ / сортировка текущего набора ответов возможен по ряду критериев, например, по авторам, наиболее активным в определенной области исследований; на основе проведенного анализа можно создать новый набор ответов или, очистив результаты анализа, вернуться к исходному набору
категоризация документов	опция <i>Categorize</i> позволяет быстро выявить интересующие документы с помощью сортировки по научным категориям и индексируемым терминам
возврат к предыдущему набору ответов	при создании нового набора ответов вверху экрана добавляется запись – т.н. «поисковый след», по которому можно перейти на документы из предыдущего ответа

## Просмотр набора ответов

Имеющиеся опции просмотра ответов включают:

1) изменение количества выводимых на экран ответов или рефератов с помощью опций *Display Options*; в появляющемся диалоговом окне нужно сделать выбор и подтвердить его с помощью кнопки ОК;

2) переход на другие страницы: первую, предыдущую, последующую или последнюю – с помощью стрелок; для перехода на нужную страницу следует ввести ее номер;

3) просмотр деталей документа с переходом по гиперссылке его заглавия на экране;

4) быстрый просмотр информации без ухода с текущего экрана посредством иконки *Quick View* рядом с заглавием документа;

5) Переход к полнотекстовому PDF файлу патентного документа или члена патентного семейства посредством иконки *PatentPak* рядом с заглавием и выбором патента из ниспадающего списка (необходима подписка на *PatentPak*).

## Быстрый просмотр информации из библиографической ссылки

Опция *Quick View* позволяет предварительно просмотреть содержание документа без ухода с текущего экрана – информация появляется в отдельном всплывающем окне. Если имеется рисунок, он будет выведен в закладке *Reference Images*. Можно увеличить изображение или скрыть рисунок с помощью планки слева.

В зависимости от доступных для ссылки опций можно использовать:

1) функцию *PatentPak* для просмотра полнотекстового PDF файла для патентной ссылки или члена патентного семейства (требуется подписка на *PatentPak*);

2) функцию *Other Sources* для перехода к полнотекстовым источникам вне SciFinder; полнотекстовые документы могут быть доступны в библиотеках по местонахождению пользователя, или он будет перенаправлен на нужный web-сайт – бесплатный или требующий подписки / оплаты.

Если в ссылке присутствуют структуры веществ, они будут выведены в закладке *Substance Images*. Первые 50 из них можно просмотреть в быстром / беглом режиме.

Номер страницы в нижнем правом углу (видимый только если имеется подписка на *PatentPak*) указывает положение вещества в PDF файле патента. Этот файл можно открыть, выбрав его в меню *PatentPak*, и, задав страницу,


перейти непосредственно на нее. Связанные номера страниц имеют, однако, не все вещества.

Просмотр детальной информации о веществе обеспечивается переходом по гиперссылке на его регистрационном номере CAS.

## Сортировка документов

На экране *References* ответы / найденные публикации можно отсортировать по номеру доступа в БД (*Accession Number*), фамилии автора (*Author Name*), цитирующим ссылкам (*Citing References*), году публикации (*Publication Year*) или заглавию (*Title*). Нужная опция выбирается в ниспадающем меню *Sort by*.

Опция	Пояснение*
<i>Accession Number</i>	сортировка публикаций по номеру доступа в БД – чем больше номер, тем новее ссылка
<i>Author Name</i>	сортировка публикаций в алфавитном порядке: по фамилии автора, затем по его первому имени / инициалу, затем по среднему имени / инициалу; при наличии у ссылки нескольких авторов сортировка осуществляется по первому из них
<i>Citing References</i>	сортировка публикаций по числу цитирующих их ссылок
<i>Publication Year</i>	сортировка публикаций в хронологическом порядке
<i>Title</i>	сортировка публикаций в алфавитном порядке по заглавиям

\* Сортировка в порядке уменьшения или повышения указывается направлением стрелки  вниз или вверх, соответственно.

## Просмотр деталей документов

Детальная информация для документа выводится на экране *Reference Detail*, переход на который происходит с экрана *References* по гиперссылке в ее заглавии. На экран выводится библиографическая информация и полный текст реферата, включая, если имеется, графику, а также информация, индексируемая производителем БД. Для возврата в набор ответов используется опция *Return*,

для просмотра деталей следующей или предыдущей ссылки – опции *Next* или *Previous*, соответственно.

## Анализ текущего набора ответов

После завершения поиска полученные ответы можно проанализировать по ряду критериев, например, по автору (*Author Name*) или типу документа (*Document Type*), просмотреть полученный результат, создать на основе проведенного анализа новые наборы ответов, или вернуться к исходному набору. Имеются системные ограничения: если набор превышает 20 тыс. ссылок, полный анализ не будет выполнен и в закладке *Analysis* будет показан только пример – *Sample Analysis* (см. дополнительную информацию в примере *Sample Analysis* ниже). В таком случае для проведения полного анализа нужно уточнить набор ответов. Для идентификации ссылок, наиболее релевантных запросу, к набору ответов можно применять различные опции закладки *Analysis*, налагающие дополнительные критерии. Исходный набор ответов при этом останется неизменным.

Последовательность действий:

- 1) на экране *References* в закладке *Analyze by* выбирается нужная опция анализа;
- 2) затем выбирается нужное подмножество ответов для просмотра связанных с ним ссылок;
- 3) команда *Show more* обеспечивает просмотр большего, чем 10 верхних, количества ответов.

Анализ позволяет получить связанные с публикациями упорядоченные списки авторов; регистрационных номеров веществ CAS; тематических рубрик CA; компаний / организаций; БД – источников ссылок; типов документов; терминов контролируемого словаря БД и ключевых слов, идентифицирующих главные тематические концепты документов в авторской терминологии; журналов, издавших работы; языков документов и годов их издания.

	Анализ	
критерий		результат
<i>Author Name</i>	имя автора	выявление ведущих исследователей /

		изобретателей в тематической области
<i>CAS Registry Number</i>	регистрационный номер вещества CAS	выявление веществ, релевантных тематической области
<i>CA Section Title</i>	тематическая рубрика CA	выявление приписанных к записям рубрик CA
<i>Company – Organization</i>	название компании / организации	выявление организаций, (наиболее) активных в тематической области
<i>Database</i>	база данных	выявление баз данных, содержащих искомую информацию, и ее распределение по ним
<i>Document Type</i>	тип документа	выявление видов документов, содержащих искомую информацию и ее распределение по ним
<i>Index Term</i>	индексируемый термин	отнесение записей к индексируемым терминам контролируемого словаря и их распределение по ним
<i>CA Concept Heading</i>	концепт / общая категория CA	отнесение записей к контролируемой терминологии БД и их распределение по ней
<i>Journal Name</i>	название журнала	выявление публикаций в конкретных журналах
<i>Language</i>	язык публикации	выявление публикаций на конкретном языке
<i>Publication Year</i>	год публикации	выявление публикаций, изданных в определенное время
<i>Supplementary Terms</i>	ключевые слова	выявление тематической принадлежности документов

При выборе команды *Show More* для сортировки документов в алфавитном порядке используется опция *Natural Order*; по количеству – опция *Frequency*; для экспорта списка избранных терминов в таблицу Excel или PDF файл – опция *Export*; для просмотра отмеченных подмножеств – команда *Apply*.

После просмотра результатов в отмеченных подмножествах можно использовать: опцию *Keep Analysis* – для создания нового набора ответов на

основе выводимых документов и опцию *Clear Analysis* – для удаления результатов анализа и возврата к полному набору ответов.

## Предварительный анализ

Для набора, содержащего более 20 тыс. ответов, проводится предварительный анализ 20 тыс. записей. Количество ответов в каждом анализируемом подмножестве показывается с помощью символа  $\geq$  (больше или равно / не менее чем). На вкладке *Analyze* будут выведены результаты пробного анализа (*Sample Analysis*) по авторам для 20 тыс. ответов.

Планки анализа наборов ответов интерактивны. Кликнув на планку интересующего подмножества, можно создать новый набор.

## Категоризация документов

По завершении поиска можно использовать закладку *Categorize* для быстрой оценки его результатов, отсортировав найденные документы по научным категориям и индексируемым терминам. Имеются системные ограничения: количество документов не должно превышать 15 тыс., в противном случае набор ответов перед использованием опции следует уточнить. Последовательность действий:

- 1) выбрать закладку *Categorize*;
- 2) в *Category Heading* выбрать нужную общую категорию;
- 3) из появившегося списка *Category* выбрать нужные частные категории, числа в скобках показывают количество индексируемых терминов в категориях;
- 4) из появившегося списка индексируемых терминов выбрать нужные; числа указывают, сколько ответов связано с каждым термином.

В колонке появится набор выбранных терминов. Для добавления других терминов следует повторить действия 2-4; для удаления набора терминов – нажать клавишу X; для вывода ссылок, связанных с каждым выбранным термином – клавишу ОК.

## Возврат к предыдущему набору ответов

При проведении поиска или уточнении его результатов, создающем новый набор ответов, в «поисковый след» вверху экрана добавляется запись, с помощью которой можно перейти к ссылкам из предыдущего набора ответов.

Для просмотра информации о наборе ответов следует поместить курсор на соответствующую запись в «поисковом следе». Для просмотра набора ответов следует выбрать соответствующую запись в «поисковом следе».

## Уточнение набора ответов

### Опции уточнения набора ответов

После оценки результатов поиска набор ответов можно уточнять далее:

Цель	Результат
удаление дублирующихся ссылок	удаление записей из БД Medline, дублирующих в наборе ответов записи из БД CAPlus
отбор отмеченных ссылок	набор отмеченных ссылок для последующей работы с ними или их удаления
уточнение набора ответов с помощью дополнительных критериев	наборы ответов, полученные с использованием опций закладки <i>Refine</i> : тематика, автор, организация, тип документа, год и язык публикации, база данных
комбинирование наборов ответов	новый набор ответов, созданный посредством комбинирования предыдущих с использованием логических / булевых операторов объединения, пересечения или исключения

## Удаление дублированных записей из БД Medline

Для удаления записей из БД Medline, дублирующих в наборе ответов записи из БД CAPlus, используется команда *Remove Duplicates* в меню *Tools*.

Для автоматического удаления дубликатов БД Medline в закладке *Preferences* в верхнем правом углу экрана следует отметить опцию *Automatically remove duplicate Medline answers* и нажать кнопку *OK*.

## Сохранение или удаление отмеченных документов

Текущий набор ответов можно модифицировать, выбрав документы вручную, и затем сохранить или удалить их. Для этого на экране нужно выбрать (маркировать) такие документы и применить команду *Keep Selected* для продолжения работы с ними, или команду *Remove Selected* – для их удаления.

## Уточнение набора ответов дополнительными критериями

Закладка *Refine* позволяет задать дополнительные критерии уточнения текущего набора ответов. Последовательность действий:

1. выбор закладки *Refine*;
2. выбор нужной опции *Refine by*;
3. ввод поискового критерия;
4. подтверждение – по команде *Refine*.

Уточнение	Опция	Нужно ввести
научная тематика	<i>Research Topic</i>	фразу на английском языке с предлогами или / и другими частями речи, разделяющими тематические концепты
автор	<i>Author Name</i>	фамилию автора
компания / организация	<i>Company Name</i>	полное или частичное название организации или компании
тип документа	<i>Document Type</i>	тип документа, например, Dissertation, Journal, или Patent
время публикации	<i>Publication Year</i>	конкретный год или конкретный или открытый интервал лет, например: 1975-1995; 1975- (т.е. 1975 г. и позже); -1995 (т.е. 1995 г. и раньше)
язык	<i>Language</i>	язык публикаций, например, Russian, English, Chinese, German, French, т.д.
база данных	<i>Database</i>	базу данных, например, CAPlus или Medline



## Комбинирование результатов поиска

Комбинируя полученные наборы ответов с помощью логических / булевых операторов объединения, пересечения или исключения, можно создать новый набор документов. Возможно комбинирование текущего набора ответов с ранее сохраненными наборами, как и сохраненных наборов друг с другом.

Для комбинирования текущего набора ответов с ранее сохраненными порядок действий следующий:

1. выбор команды *Combine Answer Sets* в меню *Tools*;
2. выбор из списка сохраненных наборов ответов одного или нескольких; если выбрано более одного набора, предлагаемые на следующем этапе возможности ограничены только опциями *Combine* и *Intersect*;
3. выбор нужной опции *Combine*, *Intersect* или *Exclude*;
4. применение команды *Combine Answer Sets*.

Комбинирование ранее сохраненных наборов осуществляется следующим образом:

1. в закладке *Saved Searches* выбирается опция *Saved Answer Sets*;
2. для просмотра сохраненных наборов ответов используется закладка *References*;
3. комбинируемые (два или более) наборы ответов маркируются; если выбрано более 2-х наборов, то возможности, предлагаемые на следующем этапе, будут ограничены только опциями *Combine* и *Intersect*;
4. выбирается нужная опция комбинирования наборов *Combine*, *Intersect* или *Exclude*:

---

<b>Опция</b>	<b>Результат</b>
<i>Combine</i>	включить все документы из обоих наборов ответов
<i>Intersect</i>	включить только те документы, которые появляются в обоих наборах ответов
<i>Exclude</i>	включить только ответы из 2-ого набора ответов, которых нет в 1-ом наборе
<i>Exclude</i>	Включить только ответы из 1-ого набора ответов, которых нет в 2-ом наборе

---

5. комбинирование ответов осуществляется по команде *Combine Answer Sets*.

## Извлечение дополнительных данных из найденных документов

### Опции извлечения данных

Для получения дополнительных данных, связанных с отдельным документом, избранными документами или всем набором ответов, выполняются следующие действия:

---

Целевые данные	Результат
вещества, присутствующие в документе(ах)	новый набор ответов, состоящий <b>из перечня веществ</b> , а не документов
реакции, присутствующие в документе(ах)	новый набор ответов, состоящий <b>из перечня реакций</b> , а не документов
статьи и патенты, процитированные в документе(ах)	новый набор ответов, состоящий <b>из перечня процитированных</b> в документе(ах) <b>статей и патентов</b>
статьи и патенты, цитирующие документ(ы)	новый набор ответов, состоящий из <b>перечня статей и патентов, цитирующих</b> документ(ы)
полный текст документа(ов)	<b>получение полнотекстовых PDF файлов</b> с использованием PatentPak или других источников – библиотек или / и web-сайтов

---

### Получение данных о веществах

Для получения данных о веществах, присутствующих в отдельном документе, нужно выбрать на экране *References* иконку, расположенную справа от заглавия документа, или на экране *Reference Detail* – опцию *Get Substances*.

Для получения данных о веществах, присутствующих в нескольких документах, надо отметить документы на экране *References* и выбрать опцию *Get Substances*.

Если документы не отмечены, то операция применяется ко всему набору ответов. С возможностью отмены можно отметить все документы, выбрав

соответствующую опцию из ниспадающего меню. В появляющемся диалоговом окне *Get Substances* имеется возможность выбора веществ для всех (*All references*) или только отмеченных (*Selected references*) документов. Можно дополнительно ограничить набор ролями веществ – например, ролью *Reactant or Reagent*. Новый набор ответов, состоящий из перечня веществ, создается по команде *Get*.

## Получение данных о реакциях

Для получения данных о реакциях, присутствующих в отдельном документе, нужно выбрать на экране *References* иконку с конической колбой, расположенную справа от заглавия ссылки, или на экране *Reference Detail* – опцию *Get Reactions*.

Для получения данных о реакциях, присутствующих в нескольких документах, на экране *References* надо отметить нужные документы и выбрать опцию *Get Reactions*. Если документы не отмечены, операция применяется ко всему набору ответов. С возможностью отмены можно отметить все ссылки, выбрав соответствующую опцию из ниспадающего меню.

Имеется системное ограничение: опция *Get Reactions* применима только к наборам ответов, не превышающих 1 тыс. ссылок.

## Получение данных о цитируемых публикациях

Для получения данных о публикациях (например, статьях и патентах), цитируемых в одном или нескольких документах из набора ответов, документы надо отметить и выбрать в меню *Get Related Citations* опцию *Get Cited*. Имеется системное ограничение: опция *Get Cited* применима только к наборам ответов, содержащим не более 500 ссылок. Для отдельного документа цитируемые публикации можно получить с помощью опции *Get Cited* на экране *Reference Detail*.

## Получение данных о цитирующих публикациях

Для получения данных о публикациях (например, статьях и патентах), цитирующих отдельный документ набора ответов, используется специальная иконка на экране *References*, находящаяся справа от заглавия документа; или

опция *Get Citing* на экране *Reference Detail*. Для получения данных о публикациях, цитирующих несколько / все документы текущего набора ответов, нужные документы надо отметить и выбрать опцию *Get Citing* в меню *Get Related Citations*.

## Получение полных текстов документов

Для получения полных текстов найденных документов можно использовать несколько возможностей:

*PatentPak* – для просмотра полнотекстовых PDF файлов патентных документов (необходима подписка на *PatentPak*);

*Other Sources* – для перехода к источникам, находящимся вне системы SciFinder: библиотекам и / или web-ресурсам, доступным бесплатно или платно / на основе подписки.

Для просмотра полнотекстового PDF файла патентного документа на экране *References* нужно выбрать опцию *PatentPak*, расположенную рядом с заглавием документа, а затем в ниспадающем списке – сам документ; файл будет на языке оригинального документа.

Для тех же целей можно использовать гиперссылку *PatentPak* при быстром просмотре документа *Quick View* или опцию *View with PatentPak* на экране *Reference Detail*.

Для перехода к другим полнотекстовым источникам на экране *References* нужно выбрать опцию *Other Sources* рядом с заглавием документа.

В тех же целях можно использовать гиперссылку *Other Sources* при быстром просмотре документа *Quick View* или опцию *Link to Other Sources* на экране *Reference Detail*.

## Сохранение документов и обмен ими

### Опции сохранения документов и обмена ими

Найденные документы можно сохранить для последующего использования и / или обмена с другими пользователями системы SciFinder:

Опция	Результат
сохранение текущего набора ответов	наборы ответов сохраняются на сервере SciFinder с возможностью использования в последующих поисках
обмен записями с коллегами	возможность поделиться гиперссылкой к отдельной записи из сохраненного набора ответов, или рассылки КМР другим пользователям системы SciFinder
экспорт записей	возможность экспорта записей в файлы определенных форматов, в том числе читаемых с помощью определенного специального программного обеспечения
импорт записей	возможность импорта записей, сохраненных в обменном формате akx (Answer Key eXchange), и их превращение в текущий набор ответов
печать записей	печать записей в формате PDF
отправка записей в SciPlanner	визуальная систематизация записей и других типов ответов в рабочем пространстве с сохранением и возможностью совместного использования с коллегами
открытие сохраненного набора ответов	найденные записи становятся текущим набором ответов и выводятся на экран <i>References</i>
редактирование маркеров набора ответов	изменение названия или описания сохраненного набора ответов
удаление сохраненных наборов ответов	необратимое удаление сохраненных наборов ответов с сервера SciFinder

## Сохранение текущего набора ответов

Полученный набор ответов сохраняется на сервере SciFinder, доступ к нему обеспечивается опцией *Saved Answer Sets* в закладке *Saved Searches*.  
Последовательность действий:

1. на экране *References* следует отметить нужные записи; для сохранения всего набора используется опция *Select All*, для отмены маркирования всего набора ответов – опция *Deselect All*;
2. сохранить отмеченные записи, применив команду *Save*;
3. в появившемся диалоговом окне выбрать установку сохранения всех ответов *All answers*, или только отмеченных – *Only selected answers*;

4. в нем же обязательно ввести заглавие набора ответов в поле *Title*;
5. дополнительно ввести описание набора ответов в поле *Description*;
6. нажать кнопку *OK* для подтверждения совершенных действий.

Отдельную запись можно сохранить по команде *Save* на экране *Reference Detail*.

## Обмен записями

Гиперссылку на отдельную запись, сохраненный набор ответов или результат оповещения КМР можно отправить другим пользователям SciFinder. Для этого нужно на экране *Reference Detail* выбрать опцию *Link*; или из закладки *Saved Searches* перейти в раздел *Saved Answer Sets*, используя иконку *Link* рядом с набором ответов; или из той же закладки перейти в раздел *Keep Me Posted* с использованием иконки *Link*. Далее следует скопировать URL из ниспадающего текстового окна с помощью клавиш *Ctrl-C* или другим способом. Этот URL нужно вставить в сообщение по электронной почте, или в документ, или использовать в качестве закладки в браузере.

## Экспорт записей

Найденные записи можно экспортировать в файлы нескольких форматов, в том числе с использованием специального программного обеспечения для работы со ссылками. Последовательность действий:

1. на экране *References* отметить записи для экспорта; для экспорта всех записей необходимо маркировать их с помощью опции *Select All*, для отмены маркирования – использовать опцию *Deselect All*;
2. экспорт записей осуществляется по команде *Export*;
3. в диалоговом окне *Export* выбрать экспорт всех записей / ответов – *All*, или только отмеченных записей – *Selected*, или записей в заданном интервале – *Range*;
4. в разделе *For* выбрать тип файла, что определит поля, которые появятся в разделе *Details*:

Тип / формат файла	Импорт записей в программное обеспечение
citation export format (*.ris)	Endnote и Reference Manager
quoted format (*.txt)	данные разделяются кавычками или другим выбранным пользователем символом, формат воспринимается большинством электронных таблиц (таких как <i>Microsoft Excel</i> ) и баз данных (таких как <i>Microsoft Access</i> и <i>Lotus Notes</i> )
tagged format (*.txt)	данные представлены несколькими строками, каждая включает метку и значение поля; основное использование формата – импорт ссылок в такое программное обеспечение, как, например, <i>Endnote</i> и <i>Reference Manager</i> ; формат также воспринимается большинством электронных таблиц и баз данных
portable document format (*.pdf)	нужна программа (PDF reader) для просмотра и печати
rich text format (*.rtf)	редакторы <i>Microsoft Word</i> и подобные
answer keys (*.txt)	ответы сохраняются в виде номеров доступа, которые можно скопировать из текстового файла (txt) и поместить в поле <i>Document Identifier</i> для проведения поиска в SciFinder
answer key eXchange (*.akx)	файлы экспортируются в формат АКХ, который можно импортировать в SciFinder по команде <i>Import</i> на экране <i>Explore References</i>

5. ввести данные в раздел *Details*;
6. осуществить экспорт, используя команду *Export*.

## Импорт записей

Записи, ранее сохраненные в формате akx (*answer key eXchange*), можно импортировать. Импортированные записи становятся текущим набором ответов.

Последовательность действий:

1. для импорта записей применяется опция *Import* в закладке *Saved Answer Sets* с правой стороны экрана;
2. для выбора akx-файла применяется команда *Browse*;
3. выбор файла производится двойным кликом на его названии или использованием команды *Open*;

4. подтверждение операций осуществляется командой ОК.

## Распечатка записей в формате PDF

Выбранные записи можно распечатать в формате PDF. Последовательность действий:

1. для печати нужных записей их надо отметить на экране *References*; для маркирования всех записей применяется опция *Select All*; для отмены маркирования – опция *Deselect All*;
2. в бланке *Print* следует выбрать опцию печати всех записей – *All*, отмеченных записей – *Selected*, или интервала записей – *Range*;
3. в опции *Format* выбрать нужный формат;
4. дополнительно можно ввести заголовок PDF файла в поле *Title*;
5. дополнительно можно отметить боксы *Task History* для включения истории поиска, *Tags* – для включения меток, и / или *Comments* – для включения комментариев;
6. печать осуществляется по команде *Print*.

Отдельную запись можно распечатать, выбрав опцию *Print* на экране *Reference Detail*. Заголовок вводится в поле *Title*, отмечаются другие необходимые поля / боксы, печать производится по команде *Print*.

## Отправка записей в SciPlanner

Опция *SciPlanner* позволяет систематизировать записи в визуальном рабочем пространстве для сохранения и дальнейшего использования совместно с коллегами. Последовательность действий:

1. на экране *References* нужно отметить ссылки для отправки в *SciPlanner*; для маркировки всего набора ответов используется опция *Select All*; для отмены маркировки – опция *Deselect All*;
2. для отправки применяется опция *Send to SciPlanner*.

Отдельную запись можно отправить с экрана *Reference Detail*, выбрав команду *Send to SciPlanner*.



## Открытие сохраненного набора ответов

При открытии сохраненного набора ответов записи выводятся на экран *References* и становятся текущим набором ответов. Для открытия сохраненного набора следует выбрать его название в разделе *Saved Answer Sets* справа на экране *Explore* или, если нужного набора в приведенном списке нет, использовать опцию *View All* справа внизу экрана, или опцию *Saved Answer Sets* в закладке *Saved Searches* слева вверху экрана. Затем нужно выбрать закладку *References* и в ней – нужный набор ответов.

## Редактирование информации о сохраненном наборе ответов

У сохраненного набора ответов можно изменить название или описание. Последовательность действий:

1. выбрать опцию *Saved Answer Sets* в закладке *Saved Searches*;
2. выбрать тип редактируемого набора ответов – *References*, *Substances* или *Reactions*;
3. применить команду *Edit* к выбранному набору ответов;
4. изменить заголовок *Title* или описание *Description*;
5. подтвердить произведенные операции командой *OK*.

## Удаление сохраненных наборов ответов

Сохраненный набор ответов можно необратимо удалить с сервера SciFinder. Последовательность действий:

1. выбрать опцию *Saved Answer Sets* в закладке *Saved Searches*;
2. выбрать тип набора ответов для удаления – *References*, *Substances* или *Reactions*;
3. отметить выбранный набор;
4. удалить набор, применив команду *Delete Selected*:

## Комментирование и маркирование записей

## Опции комментирования и маркирования записей

К найденным записям можно добавлять комментарии или метки / теги с помощью собственных поисковых терминов – для облегчения последующего нахождения записей:

Опция	Возможности
добавление комментариев	можно добавить 1 комментарий ко многим записям; 1 запись может иметь до 50 комментариев; комментарии можно видеть на экране <i>Reference Detail</i>
добавление тегов*	можно пометить записи собственными поисковыми терминами; можно добавить 1 тег / метку к нескольким записям; 1 запись может иметь до 50 тегов; помеченные записи находятся с помощью опции <i>Tag</i>
нахождение ссылок с тегами	при использовании опции <i>Tag</i> выводится список всех созданных тегов; выбрав тег, можно извлечь все записи, помеченные этим тегом
удаление тегов	поисковый тег можно удалить из записи
редактирование комментариев	комментарий, добавленный к записи, можно модифицировать / редактировать
удаление комментариев	комментарий, добавленный к записи, можно удалить

\* Теги / *Tags* – поисковые термины, которые можно добавлять к записям. Они позволяют быстро найти сохраненные записи с помощью опции *Tags*.

## Добавление комментариев к записям

К отдельным записям можно добавлять собственные комментарии, которые можно просматривать на экране *Reference Detail*. По комментариям поиск не проводится, но к записям с комментариями можно добавлять теги, по которым их легко найти, используя опцию *Tags*.

Комментарии к записям вводятся в окно *Add Comment* вверху экрана *Reference Detail*. Один комментарий может содержать не более 1024 символов (количество доступных символов указывается в нижнем правом углу экрана).

Комментарий добавляется в список *Comments* по команде *Save*. Можно добавлять до 50 комментариев на запись. Комментарии могут быть

отсортированы в любом хронологическом порядке – так, чтобы сначала были более новые (*Newer First*) или более старые (*Older First*). Для редактирования или, при необходимости, удаления комментария имеются опции – *Edit* и *Delete*, соответственно.

К прокомментированной записи можно добавить поисковый тег, облегчающий ее нахождение в дальнейшем. Для этого в опции *Tags* открывается закладка *Edit Tags*, в поле *Add Tags* которой вводится тег, по команде *Save* добавляемый в список тегов.

К одной записи можно добавить до 50 тегов. Один и тот же тег можно использовать для нескольких записей одновременно (см. следующий раздел).

## Добавление тегов к записям и их использование

Записи можно пометить, используя в качестве тегов собственные поисковые термины. Такие записи легко находятся с помощью опции *Tag*. Тег не должен превышать 100 символов. Можно добавлять один и тот же тег к нескольким записям – до 500 одновременно. Одна запись может иметь до 50 тегов.

Для добавления тегов к отдельной записи на экране *Reference Details* под заголовком *Tags* следует выбирать опцию *Edit Tags*. Тег(и) вводятся в поле *Add Tags*. Теги, каждый из которых может содержать не более 100 символов, разделяются точкой с запятой. К записи можно добавить до 50 тегов, операция осуществляется по команде *Save*.

Для добавления нескольких тегов к нескольким записям на экране *References* выбирают нужные записи – если этого не сделать, то теги будут приписаны ко всему набору ответов. В меню *Tools* выбирается поле *Add Tag*, в которое вводятся теги, разделяемые точками с запятой. Операция осуществляется по команде *Save*.

Для нахождения записей, помеченных тегами, в закладке *Explore* выбирается опция *Tags*, где в алфавитном списке тегов находится нужный.

## Удаление тегов

Поисковый тег можно удалить из записи. Для этого:

1. на экране *Reference Detail* в разделе *Quick Links* следует перейти по гиперссылке *Tags / Comments* к тегам и комментариям к записям;
2. затем надо перейти по гиперссылке *Edit Tags* и выбрать клавишу X рядом с удаляемым тегом;
3. для завершения операции используется команда *Save*.

## Редактирование или удаление комментариев к записям

Комментарии, добавленные к записи, можно отредактировать или удалить.

Для редактирования:

1. на экране *Reference Detail* в разделе *Quick Links* следует перейти по гиперссылке *Tags / Comments* к тегам и комментариям к записям;
2. далее перейти по гиперссылке *Edit*;
3. редактирование комментария производится в поле *Add Comment*, сохранение изменений осуществляется командой *Save*.

Для удаления:


1. на экране *Reference Detail* в разделе *Quick Links* следует перейти по гиперссылке *Tags / Comments* к тегам и комментариям к записям;
2. далее перейти по гиперссылке *Delete*;
3. удаление подтверждается командой *OK*.

## Доступ к патентам с помощью PatentPak

Опция *PatentPak* обеспечивает мгновенную связь с полными текстами патентов основных мировых патентных ведомств с доступом к альтернативным языковым версиям патента; указывает номера страниц патента для ключевых химических веществ.

Если *PatentPak* не лицензирован, можно использовать бесплатный тестовый доступ для просмотра 5 примеров. При просмотре PDF файлов патентов

с помощью *PatentPak* ниспадающее сообщение покажет, сколько бесплатных просмотров осталось.

Доступ к полнотекстовым PDF файлам патентов (или членов патентного семейства), входящих в набор ответов, осуществляется с помощью иконки . Эта возможность также доступна в окне быстрого просмотра *Quick View*.

На экране *Reference Detail* можно использовать команду *View with PatentPak* для просмотра полнотекстовых PDF файлов патентов. Раздел *Patent Information* на этом экране предоставляет таблицу членов патентного семейства. Можно использовать гиперссылки *PatentPak* в этой таблице для открытия PDF файлов доступных патентов. Если патентный номер имеет гиперссылку, то по ней можно перейти на экран *Reference Detail* с этим патентом.

На экране *Reaction Detail* можно использовать команду *View with PatentPak* для просмотра полнотекстовых PDF файлов патентов или членов патентного семейства.

Индексируемые в патенте вещества выводятся на экран в закладке *Substance Images* в опции быстрого просмотра *Quick View*. Номер в нижнем правом углу указывает соответствующую страницу в PDF файле патента. При открытии PDF файла в меню *PatentPak* и задании номера страницы можно перейти непосредственно к ней. Номера страниц для веществ также приводятся в разделе *Substances* на экране *Reference Detail*. Следует иметь в виду, что не все вещества имеют связанные номера страниц.

## 2. ПОИСК ИНФОРМАЦИИ О ВЕЩЕСТВАХ

### Проведение поиска по веществам

Ниже представлены основные возможности поиска информации о веществах и обмену ею с коллегами:

<b>Действие</b>	<b>Возможности</b>
поиск информации о веществе (ax)	использование следующих типов поисковых запросов / критериев: точная структура; фрагмент структуры; структурное подобие; структура Маркуша; молекулярная (суммарная, брутто-) формула; физическое свойство; идентификатор вещества
просмотр, анализ и уточнение ответов	выявление наиболее релевантных ответов посредством: сортировки веществ в соответствии с выбранными критериями – например, молекулярный вес / масса, количество связанных с веществом ссылок; анализа ответов по различным критериям – например, показателям биологической активности; уточнения набора ответов добавлением более точных поисковых критериев – например, наличие / отсутствие обогащения изотопами, коммерческая доступность; набор наиболее релевантных ответов можно сохранить, несколько наборов можно объединить
получение данных о веществах	из ответов можно извлечь ссылки на вещества и их реакции, а также на нормативную информацию и коммерческие источники
сохранение ответов и обмен ими	возможно сохранение, печать или экспорт ответов, а также посылка коллегам гиперссылок на интересующие вещества

### Опции поиска по веществам

Поисковые опции на экране *Explore Substances* позволяют искать вещества, используя запросы разного типа:

<b>Поисковый запрос</b>	<b>Опция</b>	<b>Будут найдены</b>
точная структура	<i>Exact Structure</i>	вещества, химическая структура которых точно соответствует запросу
фрагмент структуры	<i>Substructure</i>	вещества, химическая структура которых содержит заданный фрагмент

структурное подобие	<i>Similarity</i>	вещества, химическая структура которых подобна заданной
структура Маркуша	<i>Markush</i>	ссылки на патенты, вещества в которых соответствуют заданной структуре Маркуша
молекулярная формула	<i>Molecular Formula</i>	вещества с молекулярными (суммарными, брутто-) формулами, точно соответствующими заданной
физическое свойство	<i>Property</i>	вещества с физическими свойствами, соответствующими заданным
идентификатор вещества	<i>Substance Identifier</i>	вещества с регистрационными номерами CAS или химическими названиями, соответствующими заданным

---

## Поиск по точной структуре Exact Structure

При поиске *Exact Structure* структуре будут найдены: индивидуальные соединения с химической структурой, идентичной заданной; стереоизомеры; таутомеры, включая кето-енольные; изотопомеры; заряженные соединения; цвиттер- (биполярные) ионы; нейтральные и заряженные радикалы, т.е. ион-радикалы, соответствующие заданной структуре; координационные соединения, компоненты (лиганды) которых имеют заданную структуру; полимеры, мономеры которых имеют заданную структуру; смеси и соли, компоненты которых обладают заданной структурой. Последовательность действий:

1. для проведения структурного поиска выбирается опция *Chemical Structure* в закладке *Explore*;
2. для импорта структуры, ранее сохраненной в формате CXF (используемом в системе SciFinder для сохранения запросов по веществам и / или их реакциям и структурам), применяется команда *Import CXF*;
3. для рисования новой структуры используются структурные редакторы – *Java* и *Non-Java*, переключение между которыми возможно с помощью соответствующих закладок (редактор *Java* требует *Java JRE* и

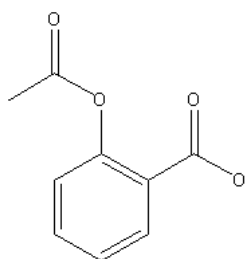
- соответствующий плагин); нарисованная структура переносится в поисковое окно экрана *Explore* по команде *OK*;
4. выбирается тип поиска *Exact Structure*;
  5. с помощью опции *Show precision analysis* на экран выводятся структуры, ранжированные по соответствию искомой, которые можно использовать для уточнения запроса; категории соответствия включают условно точные (*Conventional Exact*), близко родственные таутомеры и цвиттер-ионы (*Closely Associated Tautomers and Zwitterions*), слабо родственные таутомеры и цвиттер-ионы (*Loosely Associated Tautomers and Zwitterions*), и другие (*Other*) структуры;
  6. опция *Advanced Search* позволяет ограничить поиск дополнительными критериями; отметка *Always Show* обеспечивает постоянное присутствие этих критериев (ограничителей) на экране;
  7. поиск начинается по команде *Search*.

### Поиск по фрагменту структуры Substructure

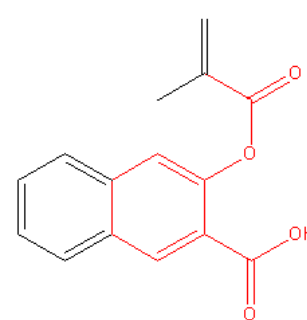
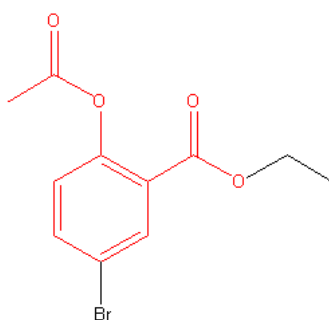
При поиске по фрагменту химической структуры находятся вещества, содержащие заданный фрагмент. Во всех положениях фрагмента возможно замещение атомов водорода, если только они специально не заблокированы.

Пример:

#### Фрагмент структуры



#### Найденные ответы



Последовательность действий:

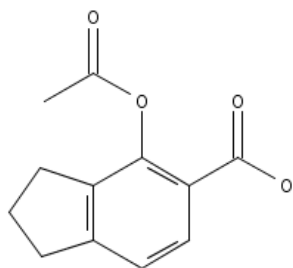


1. для проведения поиска в закладке *Explore* выбирается опция *Chemical Structure*;
2. для импорта структуры, ранее сохраненной в формате CXF, применяется команда *Import CXF*;
3. для рисования новой структуры используется структурный редактор (см. предыдущий раздел);
4. выбирается тип поиска *Substructure*;
5. с помощью опции *Show precision analysis* на экран выводятся структуры, ранжированные по соответствию искомой (см. предыдущий раздел), которые можно использовать для уточнения поиска;
6. опция *Advanced Search* позволяет ограничить поиск дополнительными критериями; отметка *Always Show* обеспечивает постоянное присутствие этих критериев (ограничителей) на экране;
7. Поиск начинается по команде *Search*.

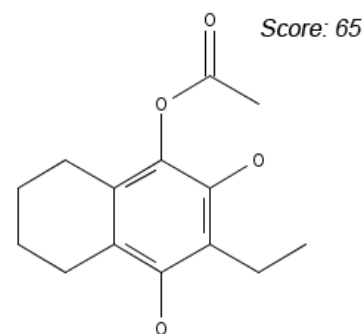
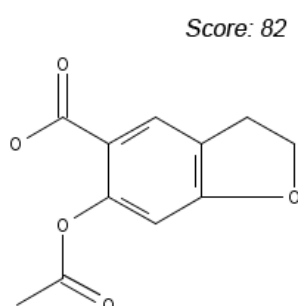
## Поиск структурно-подобных веществ Structure Similarity

При поиске структурно-подобных веществ находятся вещества, имеющие строение, сходное с заданной структурой. Показатели подобия рассчитываются на основе структурных дескрипторов (см. ниже), чем выше показатель подобия, тем больше сходство. Пример:

### Заданная структура



### Найденные вещества



В отличие от поиска по фрагменту, поиск по подобию может найти вещества, не содержащие в точности заданную структуру, но родственные ей. Такие возможности поиска по фрагменту, как переменные типы атомов, в поисках по подобию не разрешены. Последовательность действий:

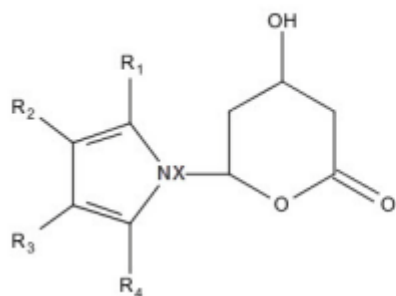
1. в закладке *Explore* выбирается опция *Chemical Structure*;
2. для импорта структуры, ранее сохраненной в формате CXF, применяется команда *Import CXF*;
3. для рисования новой структуры используется структурный редактор (см. выше);
4. выбирается тип поиска *Similarity*;
5. с помощью опции *Show precision analysis* на экран выводятся структуры, ранжированные по соответствию искомой (см. выше), которые можно использовать для уточнения поиска;
6. опция *Advanced Search* позволяет ограничить поиск дополнительными критериями; отметка *Always Show* обеспечивает постоянное присутствие этих критериев (ограничителей) на экране;
7. Поиск начинается по команде *Search*.

Поиск приводит к ранжированному на основании показателей подобию (*similarity scores*) набору веществ. Ранжирование осуществляется двумерным сравнением (не полимерных) молекул с использованием метрики подобию Танимото (*Tanimoto similarity metric*), основанной структурных дескрипторах CAS. Показатель подобию  $Score = (100 * C) / [(QS + FS) - C]$ , где C – количество дескрипторов, общих для запроса и набора ответов; QS и FS – количество дескрипторов в запросе и наборе ответов, соответственно. Дескрипторами являются количества атомов и циклов, последовательности атомов и химических связей, дополненные (augmented) атомы, степень связности, элементный состав, способ аннелирования циклов. Дескрипторы не учитывают стереохимию, изотопное обогащение, атомы водорода (за исключением заряженных – т.е. ионов) и заряды не водородных атомов. Для структур, отличающихся только этими признаками, показатели подобию идентичны. В случае многокомпонентных веществ каждая компонента получает свой показатель подобию, наивысший показатель используется как показатель всего вещества.

## Поиск патентов по структурам Маркуша

Патенты часто содержат структуры Маркуша, представляющие химические соединения, охватываемые формулой изобретения (включая гипотетические), в общем виде. Например:

trans-6-[2-(Substituted pyrrol-1-yl)alkyl]pyran-2-one inhibitors of cholesterol synthesis



R1 = (un)substituted Ph, naphthyl, cyclohexyl, norbornenyl, etc.

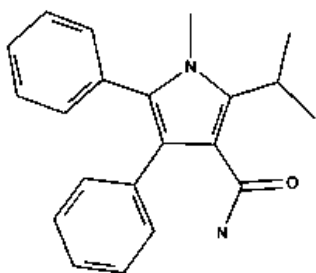
R2, R3 = H, Br, Cl, cyano, C1-4 alkyl, etc.

R2R3 = atoms required to form a fused heterocycle

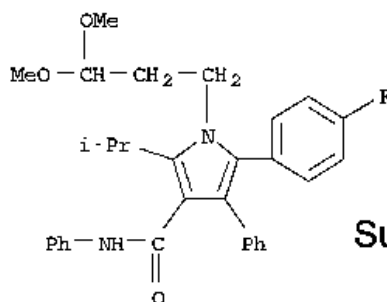
R4 = C1-4 alkyl, cycloalkyl, CF3

X = CH2, CH2CH2, CHMeCH2

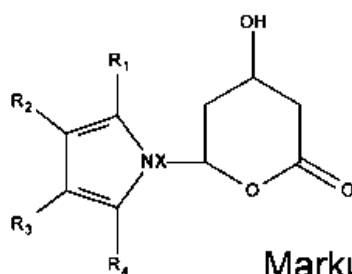
Результатом поиска по структурам Маркуша является список патентов, в которых они фигурируют. При этом изобретателю не обязательно реально синтезировать или / и тестировать весь охваченный в патенте набор веществ. Достаточно правдоподобного заявления об эквивалентности всех соединений, охватываемых общей для них структурой Маркуша. Таким образом, поиск по структуре Маркуша отличается от поиска по фрагменту структуры тем, что имеет дело с обобщенными структурами веществ.



Structure query



Substructure match



Markush match

Последовательность действий:

1. в закладке *Explore* выбирается опция *Markush*;
2. для импорта структуры, ранее сохраненной в формате CXF, применяется команда *Import CXF*.
3. для рисования новой структуры используется структурный редактор (см. выше); поиск по структурам Маркуша автоматически выделяет в запросе циклы и запрещает их конденсацию посредством замещения в них – это установочный параметр, от которого нельзя отказаться;
4. выбирается тип поиска *Similarity*; опция *Allow variability only as specified* разрешает замещение только там, где это специально указано с помощью R-групп или других переменных характеристик атомов или химических связей; опция *Substructure* позволяет замещение во всех положениях, где оно однозначно не заблокировано;
5. поиск начинается по команде *Search*.

## Поиск по молекулярной формуле

При поиске по молекулярной (суммарной, брутто-) формуле находятся вещества, чей состав (т.е. количество атомов конкретных элементов) точно соответствуют заданному. Последовательность действий:

1. в закладке *Explore* выбирается опция *Molecular Formula*;
2. запрос вводится в поле *Molecular Formula*;

чтобы избежать неоднозначности, в двухбуквенных символах химических элементов капитализируется только первая буква, например, Ca, Fe; между символами элементов с количествами их атомов используются пробелы, например, C21 H26 N2 S2; указывать количество атомов 1 не обязательно, например, C O2;

в многокомпонентных формулах следует использовать: точки, окруженные пробелами, для разделения компонент, например, C4 H11 N O3 . C2 H4 O2; круглые скобки для группировки формул компонент, например (C15 H10 N2 O2 . C6 H14 O3 . 3(C3 H6 O . C2 H4 O)x)x; круглые скобки для повторяющейся

формульной единицы, сопровождаемые соответствующим числом  $n$ , например,  $(C_2 H_3)_n C_{14} H_{13} N_4 O_2$ ;

формуле компоненты может предшествовать: целочисленный коэффициент, например,  $C_2 H_4 O_2 \cdot 3 H_2 O \cdot Na$ ; дробный коэффициент, например,  $C_2 H_4 O_2 \cdot 1/2 Ca$ ; неопределенный коэффициент  $x$ , например,  $(C_8 H_8 O_3 S)_x \cdot (C_8 H_8 O_3 S)_x \cdot x H_3 N \cdot x K$ ;

формулы полимеров могут быть одно- или многокомпонентными: у однокомпонентного гомополимера формула состоит из формулы мономера, заключенной в скобки, сопровождаемые числом  $x$ , например,  $(C_2 H_3)_x$ ; у многокомпонентного полимера формула состоит из формул компонент, заключенных в круглые скобки, сопровождаемые числом  $x$ , например,  $(C_2 H_4 \cdot C Br F_3)_x$ .

3. Поиск начинается по команде *Search*.

### Поиск по физическим свойствам

Поиск по веществам можно проводить на основе экспериментальных или рассчитанных / теоретических значений их некоторых физических свойств (см. ниже). Последовательность действий:

1. в закладке *Explore* выбирается опция *Property*;
2. выбираются экспериментальные (*Experimental*) или расчетные (*Predicted*) свойства;
3. в ниспадающем списке выбирается конкретное свойство;
4. в текстовое поле вводятся конкретные значения или интервал величин;
5. поиск начинается по команде *Search*.

Для следующих физических свойств значения, указываемые в поисковом запросе, округляются до установленного количества десятичных разрядов: температура кипения (*Boiling Point*) – 1; плотность (*Density*) – 3; энтальпия испарения (*Enthalpy of Vaporization*) – 2; температура воспламенения (*Flash Point*) – 1; логарифм коэффициента распределения (distribution – D)  $\log D$  – 2; логарифм коэффициента разделения (partition – P)  $\log P$  – 3; молярный объем (*Molar Volume*) – 1; молекулярный вес (*Molecular Weight*) – 2; показатель кислотности  $pK_a$  – 2. Например, для температуры кипения значение в запросе округляется до одного

десятичного знака. Следовательно, в запросе температура кипения 100.4°C не будет соответствовать значениям 100, или 100.1, или интервалу 99-100. Однако температура кипения 100.43 будет округлена до 100.4, и, следовательно, станет соответствовать значению 100.4 или интервалу 99-100.4.

Экспериментальные физические свойства веществ, по которым возможен поиск:

<b>Свойство</b>	<b>Определение</b>
температура кипения <i>Boiling point</i>	температура, при которой происходит кипение жидкости, находящейся под постоянным давлением; соответствует температуре насыщенного пара над плоской поверхностью кипящей жидкости; измеряется в градусах Цельсия (°C) с указанием величины давления в миллиметрах ртутного столба / торрах (mm Hg / Torr); минимум –273°C; максимум без ограничения; минимальное давление 0, максимальное без ограничения; в запросе округляется до 1 десятичного знака
плотность <i>Density</i>	отношение массы тела к занимаемому им объему, измеряется в граммах на кубический сантиметр (g.cm <sup>-3</sup> ); условия: температура (°C), эталонная температура (RefTemp, °C), давление (Torr); в запросе округляется до 3 десятичных знаков
электропроводность <i>Electrical Conductance</i>	легкость, с которой электрический ток проходит через материал – отношение силы тока к разности приложенных потенциалов; измеряется в сименсах (S); условия: температура (°C), комнатная температура
удельная электропроводность <i>Electric Conductivity</i>	электропроводность на единицу площади или объема, измеряется в сименсах на сантиметр (S.cm <sup>-1</sup> ); условия: температура (°C), комнатная температура
электрическое сопротивление <i>Electric Resistance</i>	трудность прохождения электрического тока через материал – отношение величины электрического напряжения к силе тока; измеряется в омах (Ohm); условия: температура (°C), комнатная температура
удельное электрическое сопротивление <i>Electric Resistivity</i>	электрическое сопротивление на единицу площади или объема; измеряется в омах на сантиметр (Ohm.cm <sup>-1</sup> ); условия: температура (°C), комнатная температура
температура	температура (обычно середина температурного

<p>стеклования <i>Glass Transition Temperature</i></p>	<p>интервала), выше которой аморфный материал переходит из твердого состояния в эластичное текучее состояние – жидкость или, в случае полимеров, эластомерное состояние; измеряется в °С.</p>
<p>ИК (инфракрасные) спектры <i>IR (Infrared) Spectra</i></p>	<p>данные инфракрасной спектроскопии (ИКС) веществ; на экран выводятся спектры поглощения в графическом виде; уточнение запроса данными ИКС может найти вещества, для которых измерены спектры поглощения, отражения или эмиссии / люминесценции; некоторые спектры могут быть выведены на экран в графическом виде; условия: указывается марка спектрометра, на котором проведены измерения, например, JASCO FT-IR-410, Nicolet 170SX, т.д.</p>
<p>магнитный момент <i>Magnetic Moment</i></p>	<p>отношение вращательного момента (момента силы), оказываемого магнитным полем, на атом или молекулу к силе поля; измеряется в магнетонах Бора (<math>\mu_B</math>); условия: температура (К), комнатная температура</p>
<p>масс-спектры <i>Mass Spectra</i></p>	<p>данные масс-спектрометрии (МС) веществ; уточнение запроса данными МС может найти вещества, для которых измерены масс-спектры, некоторые из них могут быть выведены на экран в графическом виде; условия: способ ионизации вещества (например, электронный удар 75 эВ); система ввода вещества (например, прямой ввод); ускоряющее напряжение (например, 8-10 кВ); масса зарегистрированных ионов (например, <math>m/z = 266</math>); количество спектральных пиков (например, 11); давление (например, 0.001 Torr); марка спектрометра (например, Varian HA-100, JASCO FT-IR-410, т.д.); температура (°С)</p>
<p>средняя смертельная (летальная) доза (ЛД50) <i>Median Lethal Dose (LD50)</i></p>	<p>средняя доза вещества, вызывающая гибель половины членов испытываемой группы; измеряется в миллиграммах на килограмм (<math>mg \cdot kg^{-1}</math>); условия: организм; способ ввода вещества в организм</p>

температура  
плавления  
*Melting Point*

температура (°C), при которой вещество переходит из твердого состояния в жидкое; для кристаллического вещества обычно указываются растворитель, из которого оно было кристаллизовано;  
Интервал значений: минимум –273°C, максимум – без ограничения; некоторые температуры плавления могут помечаться одним из кодов: *Polymorph* – температура плавления одной из нескольких кристаллических форм вещества (полиморфов) или температура, при которой вещество трансформируется из одной кристаллической формы в другую (т.е. из одного полиморфа в другой); *Sublim* – температура, при которой давление пара твердого вещества равно давлению атмосферы (температура сублимации), приводится вместе с давлением, при котором измерена; *Decomp* – температура, при которой твердое вещество испытывает видимое изменение, отличное от плавления или сублимации, обычно – температура разложения

спектры ядерного  
магнитного  
резонанса (ЯМР)  
*Nuclear Magnetic  
Resonance (NMR)  
Spectra*

данные спектроскопии ЯМР веществ, зарегистрированные для определенных ядер данного вещества, например:  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{29}\text{Si}$  и  $^{31}\text{P}$ ; спектры выводятся на экран в графическом виде;  
уточнение запроса данными спектроскопии ЯМР может найти вещества, для которых измерены спектры  $^1\text{H}$ ,  $^{11}\text{B}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{29}\text{Si}$ ,  $^{31}\text{P}$  и других ядер, включая ядра различных металлов; а также двумерные спектры;  
условия: растворитель (например, уксусная кислота и его регистрационный номер CAS; может быть указано несколько растворителей, разделенных запятыми); температура (°C); стандарт (например, тетраметилсилан, и его регистрационный номер CAS); марка спектрометра (например, Varian HA-100, Bruker DRX-500, т.д.); рабочая частота (например, 300 МГц / MHz); мультиплетность спектральных линий: D – дублет, Q – квартет, S – синглет, T – триплет, U – не указана

оптическая  
активность  
*Optical Rotatory  
Power*

способность вещества (твердого, жидкого, газообразного) вращать плоскость поляризации проходящего через него оптического излучения / света влево (–) или вправо (+); характеризуется величиной угла вращения (в градусах); условия: температура (°C); для растворов – растворитель и концентрация ( $\text{g} \cdot 100 \text{ mL}^{-1}$ ); длина волны проходящего излучения в нанометрах (Wavlen, nm), длина пути в дециметрах (Len, dm)

спектры  
комбинационного  
рассеяния (КР)  
*Raman Spectra*

данные спектроскопии КР веществ; при уточнении запроса данными спектроскопии КР могут быть найдены вещества, для которых эти спектры измерены; некоторые спектры могут быть выведены на экран в графическом виде



показатель преломления <i>Refractive Index</i>	отношение синуса угла падения к синусу угла отражения для светового луча, проходящего через поверхность раздела двух сред; условия: температура (°C), длина волны светового луча в нанометрах (Wavlen, nm)
предельная прочность на разрыв или растяжение <i>Tensile Strength</i>	максимальное приложенное продольное напряжение (stress), которое материал выдерживает без разрыва (tearing); Измеряется в мегапаскалях (MPa); условия: температура (°C)

Расчетные физические свойства веществ, по которым возможен поиск:

<b>Свойство</b>	<b>Определение</b>
коэффициент биоконцентрации <i>Bioconcentration Factor</i>	отношение концентрации конкретного химического вещества в тканях организма к концентрации этого же вещества в окружающей среде; характеризует накопление загрязняющих веществ путем поглощения из водной фазы в органическую фазу; выражается значением соответствующего logD (см. ниже), рассчитанным для 25°C; интервал значений: минимум 0, максимум – без ограничения; значение pH среды может варьироваться от 1 до 10 (по умолчанию pH = 7), оно может использоваться для уточнения поиска
температура кипения <i>Boiling Point</i>	см. выше таблицу экспериментальных свойств; условия: давление 760 торр
плотность Density	см. выше таблицу экспериментальных свойств
энтальпия испарения <i>Enthalpy of Vaporization</i>	количество энергии в кДж на моль ( $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ), необходимое для превращения жидкости в пар при температуре кипения; интервал значений: минимальное 0, максимальное без ограничения; давление 760 торр; в запросе округляется до 2 десятичных знаков
температура вспышки <i>Flash Point</i>	см. выше таблицу экспериментальных свойств

<p>связи со свободным вращением <i>Freely Rotatable Bonds</i></p>	<p>общее число не входящих в состав циклов простых химических связей в молекуле, вращение вокруг которых приводит к значительным изменениям взаимного пространственного положения ее атомов; интервал значений: минимальное 0, максимальное – без ограничения</p>
<p>акцепторы водорода <i>Hydrogen Acceptors</i></p>	<p>общее число атомов азота и кислорода молекулы, способных к образованию водородных связей; интервал значений: минимальное 0, максимальное – без ограничения</p>
<p>доноры водорода <i>Hydrogen Donors</i></p>	<p>общее число атомов водорода молекулы (обычно связанных с атомами азота или / и кислорода), способных к образованию водородных связей; интервал значений: минимальное 0, максимальное – без ограничения</p>
<p>общее количество доноров и акцепторов водорода <i>Hydrogen Donors / Acceptors Sum</i></p>	<p>общее число атомов молекулы, способных к донированию и акцептированию атомов водорода; интервал значений: минимальное 0, максимальное – без ограничения</p>
<p>коэффициент поглощения органического углерода <i>Organic Carbon Adsorption Coefficient</i></p>	<p>для вещества, добавленного к смеси почвы (soil) и воды – отношение количества вещества, адсорбированного на единицу веса органического углерода в почве к равновесной концентрации вещества, оставшегося в воде, выраженное значением соответствующего logD (см. ниже), рассчитанного для 25°C; интервал значений: минимальное 0, максимальное – без ограничения; значения pH могут варьироваться от 1 to 10, любые из них могут использоваться для уточнения поиска</p>
<p>логарифм коэффициента распределения <i>logD</i></p>	<p>логарифм коэффициента распределения вещества между октанолом и водой при данном значении pH для смеси нейтральной и ионной форм вещества, рассчитанный при 25°C; в запросе округляется до 2 десятичных знаков; интервал значений: –10 (минимум) – 10 (максимум); значения pH могут варьироваться от 1 to 10, любые из них могут использоваться для уточнения ответов;</p>
<p>логарифм коэффициента разделения <i>logP</i></p>	<p>логарифм коэффициента распределения нейтральной формы вещества между октанолом и водой, рассчитанный при 25°C; в запросе округляется до 3 десятичных знаков; интервал значений: минимальное 0, максимальное – без ограничения</p>

<p>собственная весовая растворимость <i>Mass Intrinsic Solubility</i></p>	<p>растворимость (S) нейтральной формы вещества, выраженная в граммах растворенного вещества на литр раствора (<math>\text{g.L}^{-1}</math>); вещества условно подразделяются на хорошо растворимые (<math>S \geq 100 \text{ g.L}^{-1}</math>), растворимые (<math>10 \leq S &lt; 100 \text{ g.L}^{-1}</math>), малорастворимые (<math>1 \leq S &lt; 10 \text{ g.L}^{-1}</math>) и плохо (sparingly) растворимые (<math>S &lt; 1 \text{ g.L}^{-1}</math>); условия: температура (<math>^{\circ}\text{C}</math>), комнатная температура</p>
<p>весовая растворимость <i>Mass Solubility</i></p>	<p>растворимость (S), выраженная в граммах вещества, растворенных в буферированной или не буферированной воде с образованием литра насыщенного раствора; для растворимости в не буферированной воде итоговое значение pH рассчитывается для <math>25^{\circ}\text{C}</math>; вещества условно подразделяются на хорошо растворимые, растворимые, малорастворимые и плохо растворимые (см. выше); значения pH буферированной воды могут быть от 1 to 10, любое значение может использоваться для уточнения ответов; у не буферированной воды указывается интервал pH, который может быть открытым</p>
<p>собственная молярная растворимость <i>Molar Intrinsic Solubility</i></p>	<p>растворимость (S) нейтральной формы вещества, выраженная числом молей растворенного вещества на литр раствора (<math>\text{mol.L}^{-1}</math>); вещества условно подразделяются на хорошо растворимые, растворимые, малорастворимые и плохо растворимые (см. выше); условия: температура (<math>^{\circ}\text{C}</math>), комнатная температура</p>
<p>молярная растворимость <i>Molar Solubility</i></p>	<p>растворимость (S) вещества, выраженная числом молей вещества, растворенных в буферированной или не буферированной воде с образованием литра насыщенного раствора; вещества условно подразделяются на хорошо растворимые, растворимые, малорастворимые и плохо растворимые (см. выше); значения pH буферированной воды могут быть от 1 to 10, любое значение может использоваться для уточнения запроса; у не буферированной воды указывается интервал pH, который может быть открытым</p>
<p>молярный объем <i>Molar Volume</i></p>	<p>объем количества вещества, выраженный в кубических сантиметрах на моль (<math>\text{cm}^3.\text{mol}^{-1}</math>); в запросе округляется до 1 десятичного знака; интервал значений: минимальное 0, максимальное – без ограничения; условия: температура <math>25^{\circ}\text{C}</math>, комнатная температура; давление 760 торр</p>



молекулярный вес <i>Molecular Weight</i>	сумма атомных весов атомов молекулы, рассчитанная с использованием значений, утвержденных ИЮПАК / IUPAC в 1997 г.; в запросе округляется до 2 десятичного знака; интервал значений: минимальное 0, максимальное – без ограничения
спектры ядерного магнитного резонанса (ЯМР) <i>Nuclear Magnetic Resonance (NMR) Spectra</i>	см. выше таблицу экспериментальных свойств; в графическом виде на экран выводятся спектры ЯМР $^1\text{H}$ и $^{13}\text{C}$ ; условия: температура ( $^{\circ}\text{C}$ ), стандарт (например, тетраметилсилан, и его регистрационный номер CAS), рабочая частота (например, 300 МГц / MHz)
отрицательный логарифм константы кислотнo-основной диссоциации <i>pKa</i>	отрицательный логарифм константы кислотнo-основной диссоциации (в интервале 0-14) в водном растворе при $25^{\circ}\text{C}$ и нулевой ионной силе для наиболее кислотного или основного центров молекулы; pKa для наиболее основного центра – это pKa молекулы после его протонирования; в запросе округляется до 2 десятичного знака; интервал значений: минимальное 0, максимальное – без ограничения; ограничение: наиболее кислотный и наиболее основной центры молекулы
площадь полярной поверхности <i>Polar Surface Area</i>	сумма поверхностей полярных атомов (кислорода, азота и связанных с ними атомов водорода) молекулы, выраженная в квадратных ангстремах ( $\text{\AA}^2$ ); интервал значений: минимальное 0, максимальное – без ограничения
давление пара <i>Vapor Pressure</i>	Равновесное давление пара вещества (торр) над его жидкой или твердой фазой при $25^{\circ}\text{C}$

## Поиск по идентификатору вещества

Поиск веществ осуществляется по их регистрационным номерам CAS или полным химическим названиям, допустимы общепринятые и торговые названия или акронимы. Последовательность действий:

1. в закладке *Explore* выбирается опция *Substance Identifier*;
2. одновременно можно ввести до 25 идентификаторов веществ, каждый – в отдельной строке; идентификатор может содержать до 200 символов;
3. поиск начинается по команде *Search*.

## Использование набора веществ для нового поиска

По завершении поиска ответы выводятся на экран *Substances*. Можно поместить курсор на любой из ответов, чтобы активировать опции работы с соответствующим веществом, включая использование его структуры в качестве основы для нового поиска. Последовательность действий: при помещении курсора на нужную структуру появятся две иконки: *Quick View*  позволяет предварительно просмотреть информацию о веществе без ухода с текущего экрана;  – используется для начала нового поиска по этому веществу и обеспечивает просмотр имеющихся опций:

Опция	Возможности
поиск по структуре <i>Explore by Structure</i>	выбор типа поиска из вторичного меню: <i>Chemical Structure</i> – перенос структуры в поле <i>Chemical Structure</i> на экране <i>Explore Substances</i> ; в нем можно выбрать тип поиска – <i>Exact Structure</i> , <i>Substructure</i> или <i>Similarity</i> ; <i>Markush Patents by Structure</i> – перенос структуры в поле <i>Markush</i> на экране <i>Explore Substances</i> ; в нем можно выбрать тип поиска – <i>Allow variability only as specified</i> или <i>Substructure</i> ; <i>Reactions</i> – перенос структуры в поле <i>Reaction Structure</i> на экране <i>Explore Reactions</i> ; в нем можно выбрать тип поиска – <i>Allow variability only as specified</i> или <i>Substructure</i> ; роль вещества в реакции будет Any Role
поиск методов синтеза вещества <i>Synthesize this</i>	нахождение реакций, в которых вещество является продуктом
поиск реакций, в которых вещество участвует в определенной роли <i>Get Reactions where Substance is a</i>	нахождение реакций, в которых вещество участвует в конкретной роли; выбор роли в реакции из вторичного меню: <i>Product</i> , <i>Reactant</i> , <i>Reagent</i> , <i>Reactant / Reagent</i> , <i>Catalyst</i> , <i>Solvent</i> , <i>Any Role</i>
поиск коммерческих источников вещества <i>Get Commercial Sources</i>	нахождение коммерческих источников вещества – если опция не активируется, вещество коммерчески недоступно
поиск нормативной информации <i>Get Regulatory Information</i>	нахождение нормативной информации для вещества – если опция не активируется, нормативная информация по веществу отсутствует

## Просмотр, анализ и уточнение наборов веществ

### Опции просмотра, анализа и вывода веществ


Система SciFinder позволяет быстро оценить результаты поиска и выбрать наиболее релевантные ответы:

Опция	Описание
просмотр ответов	по завершению поиска ответы выводятся на экран <i>Substances</i> ; можно бегло просмотреть структуры и сопутствующие данные или перейти к просмотру полной информации в записи о веществе по гиперссылке <i>Substance Detail</i> ; доступны опции контроля количества ответов на странице и столбцов при выводе
сортировка ответов	ответы можно отсортировать в соответствии с избранными критериями, например, можно сделать сортировку по молекулярному весу веществ или найти самые последние пополнения БД
детальный просмотр ответов	для детального просмотра ответов по веществу используется гиперссылка на его регистрационный номер CAS; экран <i>Substance Detail</i> обеспечивает вывод химических названий, расчетных и экспериментальных свойств, спектров, ссылок и индексируемых данных, которые можно использовать как основу для поисков
анализ текущего набора ответов	анализ текущего набора ответов возможен по ряду критериев – например, индикаторы биоактивности <i>Bioactivity Indicators</i> или роли веществ <i>Substance Roles</i> ; по результатам анализа можно создать новый набор ответов, или вернуться к просмотру исходного набора
хранение или удаление избранных веществ	вещества, вручную отобранные из набора ответов, можно сохранить или удалить
уточнение набора ответов дополнительными поисковыми критериями	опции закладки <i>Refine</i> позволяют задать дополнительные поисковые критерии, такие как физические свойства, присутствие изотопов или коммерческая доступность

возврат к предыдущему набору ответов	после уточнения результатов поиска создается новый набор ответов, запись о котором включается в «поисковый след» наверху экрана <i>Substances</i> ; по этой записи можно вернуться к предыдущему набору ответов
комбинирование наборов ответов	можно создать новый набор, комбинируя имеющиеся наборы ответов с помощью логических / булевых операторов объединения, пересечения или исключения

## Просмотр / вывод веществ

По завершению поиска ответы / вещества выводятся на экран *Substances*:

1. для изменения количества выводимых ответов и / или столбцов на странице применяется функция *Display Options*; выбор опций производится в выводимом диалоговом окне, для его подтверждения применяется кнопка *OK*;
2. для просмотра других страниц используются стрелки перехода на первую, предыдущую, следующую или последнюю страницу; можно ввести номер нужной страницы для перехода непосредственно на нее;
3. для просмотра детальной информации о веществе применяется клик на его регистрационном номере CAS над структурой, информация будет выведена на экран *Substance Detail*;
4. если ниже структуры имеются гиперссылки на свойства (например, нормативная информация – *Regulatory Information*, спектры *Spectra*, экспериментальные свойства *Experimental Properties*), то по ним можно перейти к соответствующим разделам на экране *Substance Detail*;
5. для просмотра информации без ухода с текущего экрана следует поместить курсор на вещество и выбрать появившуюся иконку Quick View .

## Сортировка веществ

Вещества в наборе ответов можно отсортировать в соответствии с выбранными критериями. Последовательность действий:

1. выбрать опцию сортировки в выпадающем меню *Sort by*:

Опция	Сортировка
<i>Relevance</i>	по релевантности / степени соответствия структурному запросу
<i>CAS Registry Number</i>	по уникальным идентификационным номерам, присвоенным химическим веществам в CAS
<i>Number of References</i>	по количеству релевантных документов
<i>Molecular Weight</i>	по расчетному значению молекулярного веса
<i>Molecular Formula</i>	по количеству химических элементов
<i>Similarity Score</i>	по показателю структурного подобия – вещества с большими значениями показателя более релевантны запросу, чем вещества с меньшими

- с помощью голубой стрелки установить направление сортировки – в порядке возрастания (↑) или в порядке убывания (↓).

## Вывод детальной информации о веществе

Детальная информация о конкретном веществе выводится на экран *Substance Detail*. Последовательность действий:

- от экрана *Substances* перейти по гиперссылке на регистрационном номере CAS интересующего вещества на экран *Substance Detail*;
- возвращение производится по команде *Return*.

Для просмотра детальной информации по следующему или предыдущему веществу используются опции *Next* или *Previous*.

## Анализ текущего набора ответов

После проведения поиска можно упорядочить ответы по ряду критериев – например, по показателям биологической активности *Bioactivity Indicators* или ролям веществ *Substance Roles*. При этом возникнут новые наборы ответов. Затем можно просмотреть вещества в интересующем наборе и, при



необходимости, создать следующий набор, состоящий из выведенных веществ, или вернуться к исходному набору ответов. Если набор превышает 20 тыс. веществ, его полный анализ не пройдет, а в закладке *Analysis* будут только результаты предварительного анализа *Sample Analysis* (см. соответствующий раздел для дополнительной информации). Последовательность действий:

1. на экране *Substances* выбрать опции анализа в поле *Analyze by* (см. описание ниже);
2. выбрать планку для просмотра веществ в соответствующем наборе.

Можно также использовать команду *Show More* для просмотра большего, чем 10 выведенных, количества наборов.

Опции *Analyze by* включают: *Bioactivity Indicators* – показатели биологической активности, связанные с ~260 терминами с установленной взаимосвязью между веществами, учтенными в БД Registry, и публикациями, учтенными в БД CAPlus (индикаторы, имеющие в конце (all) – индексные термины CA); *Commercial Availability* – сведения о коммерческой доступности веществ из БД ChemCats; *Elements* – перечень химических элементов, присутствующих в веществе; *Reaction Availability* – сведения о реакциях вещества, учтенных в БД CASReact; *Substance Role* – охарактеризованные в публикациях роли вещества – например, побочный эффект (*Adverse Effect*), биологическое исследование (*Biological Study*), препаративные способы синтеза (*Preparation*); *Target Indicators* – показатели, связанные с набором ~5800 белков / протеинов, ферментов / энзимов других биологических мишеней, для установлена взаимосвязь между веществами, учтенными в БД Registry, и публикациями, учтенными в БД CAPlus

*Опция Show More.* Для сортировки различных наборов ответов в алфавитном порядке следует выбрать опцию *Natural Order*, для сортировки по количеству релевантных веществ – опцию *Frequency*, а для экспорта списка избранных наборов в таблицу Excel или PDF файл – опция *Export*. Для выбора / маркирования нужных наборов применяется команда *Apply*.

После просмотра имеющихся / созданных наборов ответов можно создать новый набор на основе выведенных веществ с использованием опция *Keep analysis*. Можно также вернуться к полному набору ответов, применив опцию *Clear analysis*.

На экране желтая часть планки указывает выводимые в настоящий момент вещества.

## Сохранение или удаление выбранных / маркированных веществ

Текущий набор ответов можно модифицировать, отметив вещества вручную и затем выбрав опцию их хранения или удаления. Последовательность действий:

1. на экране *Substances* нужно выбрать / маркировать интересующие вещества;
2. затем в меню *Select* выбрать опцию *Keep Selected* или *Remove Selected*.

## Уточнение набора ответов с помощью дополнительных критериев

Закладка *Refine* позволяет применить дополнительные критерии к текущему набору ответов. Последовательность действий:

1. выбрать закладку *Refine*;
2. выбрать опцию *Refine by* – соответствующие поисковые критерии появятся ниже;
3. ввести нужный критерий;
4. при необходимости / целесообразности задать дополнительные характеристики;
5. применить команду *Refine*.

Опции уточнения:

Опция	Комментарий
<i>Chemical Structure</i>	активируется структурный редактор <i>Chemical Structure</i> ; если нет возможности использовать редактор <i>Java</i> , следует выбрать закладку <i>non-Java</i> для переключения на другой редактор; модификация структурного запроса и подтверждение его переноса в закладку <i>Refine</i> подтверждается командой <i>OK</i> ; возможно ограничение набора веществ теми, которые имеют записи, являются коммерчески доступными или / и однокомпонентными, относятся к конкретному классу веществ в имеющемся списке классов, или используются в конкретных типах исследований в имеющемся тематическом списке исследований

<i>Isotope-Containing</i>	имеется выбор между включением / не включением в поиск изотопно-меченных веществ: <i>Include only isotope-containing substances / Exclude isotope-containing substances</i>
<i>Metal-Containing</i>	имеется выбор между включением / не включением в поиск веществ, содержащих металлы: <i>Include only metal-containing substances / Exclude metal-containing substances</i>
<i>Commercial Availability</i>	имеется выбор между включением в поиск коммерчески доступных / не доступных веществ: <i>Commercially available / Not commercially available</i>
<i>Property Availability</i>	имеется выбор между поиском веществ с любыми свойствами ( <i>Any property</i> ); любыми расчетными ( <i>Any predicted property</i> ) или экспериментальными ( <i>Any experimental property</i> ), или некоторыми экспериментальными ( <i>Any selected experimental property</i> ) свойствами; на экране появляется список экспериментальных свойств
<i>Property Value</i>	по команде <i>Select Property</i> на экране появляется диалоговый бокс <i>Refine by Property Value</i> с возможностью выбора экспериментальных ( <i>Experimental</i> ) или расчетных ( <i>Predicted</i> ) свойств; справа от него появятся поля для введения значений / величин свойств; можно выбрать несколько свойств, ввод значений для каждого свойства следует делать до выбора следующего свойства; имеется опция включения веществ, не имеющих значений выбранных свойств – <i>Include substances with no values for selected properties</i> ; если не сделать соответствующую отметку, то уточненный набор ответов не будет включать такие вещества; уточнение осуществляется по команде <i>Refine</i>
<i>Reference Availability</i>	имеется выбор между нахождением веществ, релевантных не менее, чем одному документу ( <i>1 or more references</i> ), или не релевантных учтенным документам ( <i>0 references</i> )
<i>Atom Attachment</i>	по команде <i>Select Attachments</i> на экранке появляется диалоговый бокс <i>Refine by Atom Attachment</i> , позволяющий задавать типы атомов / молекулярных фрагментов в определенном положении выводимой структуры: например, S – сера, Nu – гетероцикл, Ak – алкильная группа; они приводятся справа, вместе с числом веществ, имеющих этот атом / структурный фрагмент; выбор осуществляется по команде <i>Refine</i>

---

## Уточнение результатов значением / величиной физических свойств

Текущий набор ответов можно уточнить, задавая величины / значения экспериментальных или расчетных некоторых физических свойств (см. выше).

Последовательность действий:

1. в закладке *Refine* по команде *Select Properties* выбрать опцию *Property Value*;

2. выбрать нужное свойство (например, температуру кипения – *Boiling Point*) на панели слева; ввод значений в соответствующие поля производится на панели справа; изменения осуществляются по команде *Reset* (для удаления введенных значений);
3. для задания дополнительных свойств повторяется предыдущее действие;
4. для включения в набор ответов веществ, не имеющих численных значений избранных свойств, следует использовать опцию *Include substances with no values for selected properties*;
5. Операция осуществляется по команде *Refine*.

Для следующих физических свойств численное значение в поисковом запросе округляется до определенного количества десятичных разрядов: температура кипения (*Boiling Point*) – 1; плотность (*Density*) – 3; энтальпия испарения (*Enthalpy of Vaporization*) – 2; температура воспламенения (*Flash Point*) – 1; *logD* – 2; *logP* – 3; молярный объем (*Molar Volume*) – 1; молекулярный вес (*Molecular Weight*) – 2; *pKa* – 2. Например, для температуры кипения значение в запросе округляется до одного десятичного знака. Следовательно, в запросе температура кипения 100.4 не будет соответствовать значениям 100 или 100.1, или интервалу 99-100. Однако, в запросе температура кипения 100.43 будет округлена до 100.4, и, следовательно, станет соответствовать значению 100.4 или интервалу 99-100.4.

### Уточнение набора ответов присоединением атомов

В закладке *Refine* опция уточнения *Atom attachment* доступна только в том случае, если набор ответов является результатом поиска по фрагменту структуры. Последовательность действий:

1. в закладке *Refine* нужно выбрать опцию *Atom Attachment* и подтвердить выбор командой *Select Attachments*;
2. в запросе по фрагменту структуры выбрать атом;
3. возможные присоединения избранного атома появятся на панели справа вместе с количеством соответствующих веществ; выбор интересующих опций осуществляется по команде *Refine*.

## Возврат к предыдущему набору ответов

Когда исходный поиск и / или его уточнение, создающее новый набор ответов, завершены, в «поисковый след» наверху экрана *Substances* добавляется соответствующая запись. К веществам из предыдущего набора ответов можно вернуться, выбрав нужную запись в «поисковом следе». Последовательность действий:

1. для просмотра нужного набора ответов следует поместить курсор на соответствующую запись в «поисковом следе» – в ниспадающем окне появится требуемая информация;
2. для возврата к веществам из предыдущего набора ответов нужен клик на соответствующей записи.

## Комбинирование наборов веществ

Комбинируя наборы ответов с помощью логических / булевых операторов объединения, пересечения или исключения, можно создать новый набор ответов. Возможно комбинирование текущего набора ответов с ранее сохраненными наборами или комбинирование ранее сохраненных наборов. Последовательность действий при комбинировании текущего набора ответов с ранее сохраненными наборами:

1. в меню *Tools* выбрать опцию *Combine Answer Sets*;
2. в списке сохраненных наборов ответов отметить один или несколько из них; если выбран более чем один сохраненный набор, то в следующем действии комбинирование будет ограничено опциями *Combine* и *Intersect*;
3. выбрать нужную опцию;
4. осуществить операцию по команде *Combine Answer Sets*.

Для комбинирования ранее сохраненных наборов следует:

1. в закладке *Saved Searches* выбрать опцию *Saved Answer Sets*;

2. для вывода сохраненных наборов веществ использовать закладку *Substances*;
3. выбрать два или более наборов ответов и применить функция *Combine Answer Sets* для их комбинирования; если выбрано более двух сохраненных ответов, то последующее действие будет ограничено опциями *Combine* и *Intersect*;
4. выбрать нужную опцию комбинирования;
5. осуществить комбинирование по команде *Combine Answer Sets*.

## Получение сопутствующих данных для веществ

Для нахождения данных сопутствующих данных по отдельному веществу, избранному или всем веществам из набора ответов, можно провести ряд действий:

Опция	Пояснение
получение библиографических ссылок	нахождение документов, упоминающих вещество; их можно ограничить указанием научной тематики (например, <i>Analytical Study</i> , <i>Biological Study</i> ) или найти все релевантные веществу публикации; результат – новый набор ответов, состоящий из библиографических ссылок, а не веществ
получение списка химических реакций вещества	нахождение химических реакций вещества; их можно ограничить, задав роль вещества в реакции (например, <i>Product</i> , <i>Catalyst</i> ) или найти реакции, в которых вещество играет любую роль – <i>Any role</i> ; результат – новый набор ответов, состоящий из списка реакций, а не веществ
получение списка коммерческих поставщиков веществ	нахождение информации о коммерческих поставщиках вещества; результат – список коммерческих поставщиков
получение нормативной информации	нахождение нормативной информации по веществам, обращение / использование которых регулируется международными или национальными / государственными агентствами

## Получение библиографических ссылок для вещества

Можно найти библиографические ссылки, относящиеся к отдельному веществу, избранными или всем веществам из набора ответов.

Последовательность действий:

1. для получения ссылок, относящихся к одному веществу, используется опция *References*; для получения ссылок, связанных с несколькими веществами, их следует отметить и использовать опцию *Get References*; если вещества не отмечены, будут получены ссылки для всех веществ в наборе ответов; отметить / отменить маркировку всех веществ можно осуществить с помощью ниспадающего меню *Select*;
2. для получения ссылок для всех или только избранных веществ в диалоговом окне *Get References* нужно выбрать опцию *All substances* или *Selected substances*, соответственно;
3. ссылки можно ограничить интересующими ролями веществ;
4. по команде *Get* найденные ссылки станут новым набором ответов.

Кроме того, можно использовать опцию *Get References* на экране *Substance Detail*.

## Нахождение реакций, связанных с веществом

Можно найти реакции, связанные с отдельным веществом, избранными или всем веществам в наборе ответов. Последовательность действий:

1. на экране *Substances* рядом со структурой вещества имеется иконка *Reactions*; для нахождения реакций, связанных с несколькими веществами, их следует отметить и использовать опцию *Get Reactions*; если вещества не отмечены, подразумевается, что нужны реакции всех веществ в наборе ответов; можно отметить / убрать маркировку всех веществ с помощью ниспадающего меню *Select*;
2. в диалоговом окне *Get Reactions* выбрать реакции либо всех, либо только избранных веществ, используя опции *All substances* и *Selected substances*, соответственно;

3. можно ограничить реакций выбором роли веществ;
4. по команде *Get* найденные реакции станут новым набором ответов.

Также можно использовать опцию *Get Reactions* на экране *Substance Detail*.

## Поиск коммерческих источников веществ

Можно найти коммерческие источники отдельного вещества, избранных или всех веществ из набора ответов. Последовательность действий: на экране *Substances* над структурой вещества имеется иконка *Commercial Sources*; интересующие вещества следует отметить и затем использовать опцию *Commercial Sources*; если никакие вещества не отмечены, предполагается, что нужны коммерческие источники всех веществ в наборе ответов; отметить / убрать отметку всех веществ можно с помощью ниспадающего меню *Select*.

Для нахождения реакций отдельного вещества можно также использовать опцию *Get Commercial Sources* на экране *Substance Detail*.

## Получение нормативной информации для веществ

Можно найти нормативную информацию для конкретного вещества: на экране *Substances* нужно использовать гиперссылку *Regulatory Information* ниже структуры вещества для перехода к релевантной нормативной информации; на экране *Substance Detail* следует воспользоваться опцией *Regulatory Information*.

## Сохранение информации о веществах и обмен ею с коллегами

Полученные ответы можно сохранить для последующего использования и / или обмена с другими пользователями системы SciFinder:

<b>Действие</b>	<b>Пояснение</b>
сохранение текущего набора ответов	наборы ответов сохраняются на сервере SciFinder; их можно использовать в дальнейшей работе с системой SciFinder
открытие сохраненного набора ответов	вещества из сохраненного набора ответов становятся в следующем поиске текущим набором и выводятся на экран <i>Substances</i>



обмен веществами из ответов	можно обмениваться гиперссылками на сохраненные индивидуальные вещества, сохраненный набор ответов или результат текущего оповещения КМР; для просмотра получатель гиперссылки должен иметь подписку на SciFinder
экспорт веществ из ответов	вещества можно экспортировать в файлы различных форматов, включая MOL и SDF
импорт веществ из ответов	можно импортировать вещества, сохраненные в формате AKX (Answer Key eXchange), импортированные вещества станут текущим набором ответов
печать набора ответов	набор ответов по веществам можно распечатать в формате PDF
отправка набора ответов в SciPlanner	SciPlanner визуально систематизировать вещества и другие поисковые результаты с сохранением и возможностью обмена с коллегами
редактирование информации о сохраненном наборе ответов	можно изменить заголовок или описание сохраненного набора ответов
удаление сохраненных наборов ответов	можно необратимо удалить сохраненный набор ответов с сервера SciFinder

---

## Сохранение текущего набора веществ

Набор ответов будет сохранен на сервере SciFinder. В дальнейшем можно получить к нему доступ, выбрав в разделе *Saved Searches* опцию *Saved Answer Sets*. Последовательность действий:

1. на экране *Substances* следует отметить вещества для сохранения, затем перейти по гиперссылке *Save* наверху экрана; если вещества не выбраны, подразумевается, что нужно сохранить все вещества из набора ответов; можно отметить / снять отметку со всех веществ с помощью ниспадающего меню *Select*;
2. в появляющемся диалоговом окне выбрать сохранения всех или только избранных ответов, используя опции *All answers* и *Only selected answers*, соответственно;
3. ввести заголовок *Title* набора ответов;

4. ввести описание *Description* набора ответов;
5. подтвердить сохранение набора командой *OK*.

Ответы для отдельного вещества можно сохранить, применяя команду *Save* на экране *Substance Detail*.

## Обмен информацией по веществам

Можно обмениваться гиперссылками на сохраненные наборы ответов по веществам или результаты текущего оповещения КМР, получатель гиперссылки должен иметь доступ к SciFinder. Последовательность действий:

1. на экране *Substance Detail* нужно выбрать опцию *Link*; в закладке *Saved Searches* перейти на экран *Saved Answer Sets* или экран *KMP Alert Results* и выбрать иконку *Link* рядом с набором ответов;
2. скопировать URL из всплывающего текстового окна с помощью клавиш клавиатуры *Ctrl-C* или другим способом;
3. внести URL в сообщение по электронной почте или другой документ, или использовать в качестве закладки в браузере.

## Экспорт веществ

Данные по веществам можно экспортировать в файлы нескольких форматов, включая электронные таблицы *Microsoft Excel*. Последовательность действий:

1. На экране *Substances* нужно отметить вещества для экспорта и применить команду *Export*; если вещества не маркированы, предполагается, что нужен экспорт всех веществ из набора ответов; можно выбрать / отменить маркирование всех веществ с помощью соответствующей опции ниспадающего меню *Select*;
2. в диалоговом окне *Export* в разделе *Export* следует указать экспорт либо всех (*All*), либо только маркированных (*Selected*), либо интервала (*Range*) указанных веществ;

3. в разделе *For* меню *Export* надо выбрать тип / формат файла:

---

Тип / формат файла	Пояснение
Portable Document Format (*.pdf)	экспорт структур и других данных в формате <i>Summary</i> или <i>Detail</i> в PDF файл; для просмотра и печати требуется программа чтения PDF файлов
Rich Text Format (*.rtf)	экспорт структур и других данных в формате <i>Summary</i> или <i>Detail</i> в RTF файл, читаемый текстовым редактором – например, Microsoft Word
Properties only – Microsoft Excel worksheet (*.xls)	экспорт избранных экспериментальных и / или расчетных свойств в таблицу Microsoft Excel; вещества идентифицируются по регистрационным номерам CAS / или по названиями по номенклатуре CAS – CAS Index Name; при выборе этой опции появится кнопка выбора свойств <i>Select Properties</i> , с помощью которой можно указать те или иные экспериментальные и / или расчетные свойства
Answer keys (*.txt)	экспорт номеров веществ; номера можно скопировать из txt-файла и поместить в поле <i>Substance Identifier</i> для проведения поиска по идентификатору вещества
Quoted format (*.txt)	экспорт информации, идентифицирующей вещество
Tagged format (*.txt)	экспорт информации, идентифицирующей вещество, в тегированном формате; записи разделяются предложениями <i>START RECORD</i> и <i>END RECORD</i> ; каждое поле данных идентифицируется названием и появляется в отдельной строке
Answer Key eXchange (*.akx)	вещества экспортируются в формат AKX, который можно импортировать в SciFinder с помощью кнопки <i>Import</i> ; импортированные вещества становятся текущим набором ответов
SDFfile (*.sdf)	экспорт структур и идентификаторов веществ в формат, читаемый некоторыми программами баз данных, содержащих сведения о молекулах; структуры будут представлены в molfile-формате; экспорт SDF файла в настоящее время доступен только коммерческим организациям; сотрудникам научно-образовательных учреждений, желающим экспортировать SDF файлы, следует обращаться в службу помощи <a href="mailto:Help@cas.org">Help@cas.org</a>

---

4. ввести данные в столбец *Details*; появляющиеся поля зависят от типа файла, выбранного на предыдущем этапе (структуры в формате *Summary* будут представлены тремя колонками; структуры в формате *Detail* – одной; они соответственно масштабируются);
5. применить команду *Export*; подобным образом можно экспортировать и отдельное вещество на экране *Substance Detail*.

Для экспорта значений физических свойств следует:

1. выбрать в экспериментальные (*Experimental*) или расчетные (*Predicted*) свойства;
2. под соответствующим заголовком экспериментальных (*Experimental*) или расчетных (*Predicted*) свойств выбрать опции *All* для экспорта всех свойств;
3. для отмены выбора всех свойств под соответствующим заголовком экспериментальных (*Experimental*) или расчетных (*Predicted*) свойств использовать опцию *None*;
4. для возврата в диалоговое окно *Export* применить кнопку *OK*.

## Импорт веществ

Вещества, ранее сохраненные в формате обмена АКХ (*Answer Key eXchange*), можно импортировать, импортированные вещества станут текущим набором ответов. Последовательность действий:

1. в разделе *Saved Answer Sets* справа на экране *Explore* перейти по гиперссылке *Import*;
2. выбрать формат АКХ, применив команду *Browse*;
3. выбрать нужный файл АКХ;
4. подтвердить выбор командой *OK*.

## Печать списка веществ

Список найденных веществ можно распечатать в формате PDF, последовательность действий:

1. на экране *Substances* отметить нужные вещества; если вещества не отмечены, предполагается, что нужно распечатать весь набор ответов; можно отметить / снять маркировку со всех веществ, выбрав соответствующую опцию в ниспадающем меню *Select*;
2. в меню *Print to PDF* выбрать печать всех (*All*), только отмеченных (*Selected*) или интервала (*Range*) ответов;
3. выбрать формат вывода в опции *Format* (структуры в формате *Summary* будут представлены в трех столбцах, в формате *Detail* – в одном; они будут соответственно масштабированы);
4. ввести в поле *Title* заголовок, который будет включен в распечатку;
5. выбрать опцию в разделе *Include* для включения в распечатку ролей вещества (*CAS reference Roles*) и / или поискового запроса (*Task History*); для форматов *Summary* и *Detail* доступны разные опции;
6. печать производится по команде *Print*.

Аналогично, перейдя по гиперссылке *Print*, можно распечатать результаты для отдельного вещества: на экране *Substance Detail* ввести заголовок в поле *Title*, добавить другие данные (*Chemical Names, Bioactivity and Target Indicators, Experimental Properties, Predicted Properties, Task History*) и применить команду *Print*.

## Отправка веществ в SciPlanner

Опция *SciPlanner* позволяет визуально упорядочить результаты поиска, сохранить и обмениваться ими с другими коллегами – пользователями *SciFinder*. Для этого результаты нужно отправить в *SciPlanner*: на экране *Substances* отметить интересующие вещества и применить команду *Send to SciPlanner*. Также

можно отправить вещества с экрана *Substance Detail*, выбрав на нем опцию *Send to SciPlanner*.

## Открытие сохраненного набора веществ

При открытии сохраненного набора ответов вещества будут выведены на экран *Substances* и станут текущим набором ответов. Для этого нужно:

1. выбрать название набора в разделе *Saved Answer Sets* справа на экране *Explore*; если нужный набор там отсутствует, то выбрать опцию *View All* ниже или опцию *Saved Answer Sets* в разделе *Saved Searches*;
2. выбрать закладку *Substances*;
3. щелкнуть по названию набора ответов.

## Редактирование информации о сохраненном наборе веществ

Название или описание сохраненного набора веществ можно изменить. Последовательность действий:

1. выбрать в разделе *Saved Searches* опцию *Saved Answer Sets*;
2. выбрать в соответствующей закладке (*References*, *Substances* или *Reactions*) тип редактируемого набора ответов;
3. использовать гиперссылку *Edit* рядом с названием редактируемого набора;
4. изменить название (*Title*) или описания (*Description*) набора;
5. подтвердить действия командой *OK*.

## Удаление сохраненных наборов веществ

Сохраненный набор веществ можно необратимо удалить с сервера SciFinder. Последовательность действий:

1. выбрать в разделе *Saved Searches* опцию *Saved Answer Sets*;
2. выбрать в соответствующей закладке (*References*, *Substances* или *Reactions*) тип удаляемого набора;

3. отметить набор, подлежащий удалению;
4. использовать опцию *Delete Selected* из ниспадающего меню *Select*.

### 3. ПОИСК ИНФОРМАЦИИ О РЕАКЦИЯХ

#### Проведение поиска по реакциям

Основные действия при поиске информации о химических реакциях:

Действие	Пояснение
проведение поиска	в поиске задаются структуры реагентов, реактивов и / или продуктов реакции; поиск можно ограничить дополнительными критериями – например, растворителями или <i>не участвующими</i> функциональными группами; для конкретной реакции можно найти другие реакции с подобными реакционными центрами, или реакции, приводящие к тем же продуктам
просмотр, анализ и уточнение ответов	для получения наиболее релевантных ответов можно: просмотреть уравнения и схемы реакций, отдельные этапы и стадии синтеза, экспериментальные методики; группировать реакции по типам превращений, или по типам документов (для каждого документа выводится одна репрезентативная реакция); сортировать реакции в соответствии с выбранными критериями – например, выходами продуктов; анализировать ответы, используя такие критерии, как катализатор или растворитель, и создавать соответствующие наборы для дальнейшего использования или удаления; уточнять набор ответов, добавляя более конкретные поисковые критерии – например, количество стадий; сохранять или удалять выбранные реакции и объединять несколько наборов ответов
получение сопутствующих данных	можно получить библиографические ссылки по найденным реакциям и участвующим в них веществам, включая коммерческие источники последних
сохранение результатов и обмен ими	можно сохранить, распечатать или экспортировать результаты поиска, и отправить гиперссылку коллегам

Основные опции поиска по химическим реакциям:



Опция	Пояснение
поиск по структуре	нахождение реакций, соответствующих структурам участвующих реагентов, реагентов и / или продуктов
уточнение результатов поиска	уточнение результатов возможно заданием дополнительных поисковых критериев – например, растворителей, не участвующих функциональных групп, количества стадий, характера превращений, источников, времени публикаций
спецификация растворителей	задание растворителей для реакции – конкретных растворителей или их классов
спецификация <i>не участвующих</i> функциональных групп	задание не участвующих в реакции функциональных групп – отдельных групп или их классов
нахождение подобных реакций	для реакции из текущего набора ответов можно найти другие реакции с подобными реакционными центрами
нахождение дополнительных реакций	для реакций из текущего набора ответов можно найти другие реакции, приводящие к тем же продуктам

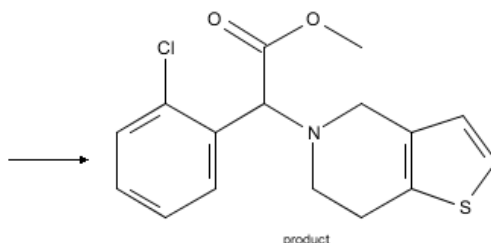
## Поиск по структурам

Поиск реакций по структурам веществ *Reaction Structure* позволяет находить реакции, структура реагентов, реагентов и / или продуктов которых соответствует запросу. Предварительно следует решить, являются ли вещества:

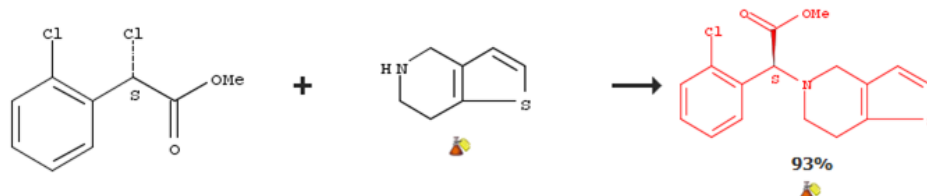
изменяемыми только в заданных положениях, т.е. точно соответствующими структурному запросу, за исключением случаев, когда структурная переменность в нем специально задана с использованием таких характеристик как, например, переменные типы атомов (например, X = любой галоген) или R-группы;

фрагментами более сложных структур – с разрешением замещения во все положения, за исключением специально заблокированных с помощью таких характеристик запроса как, например, блокировка атома *Lock Atom*.

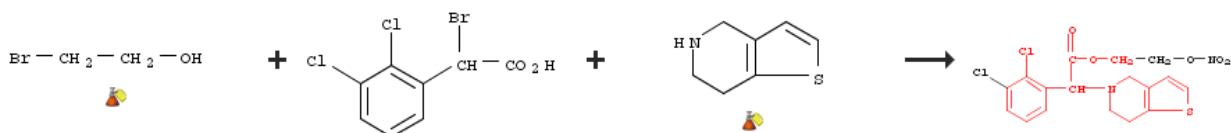
Пример запроса:



Пример ответа – переменные только в заданных положениях:



Пример ответа – фрагмент более сложных структур:



Последовательность действий:

1. в закладке *Explore* выбрать опцию *Reaction Structure*;
2. для импорта структуры, ранее сохраненной в формате CXF (*Chemical eXchange*, используемый в SciFinder для сохранения запросов по веществам, их структурам и реакциям), применить функцию *Import CXF*;
3. для рисования новой структуры использовать редактор реакций (*Java* или *Non-Java*, между которыми возможно переключение; *Java* требует *Java JRE* и

соответствующий плагин); нарисовать структуру и назначить роль вещества – реактант, реагент или продукт;

4. задать тип поиска:

опция *Variable only at the specified positions* допускает переменные только в заданных положениях – вещества должны точно соответствовать структурному запросу, за исключением случаев, когда вариабельность в нем специально задана с помощью таких характеристик как, например, переменные типы атомов (например, X = любой галоген) или R-группы (см. соответствующий раздел ниже);

опция *Substructures of more complex structures* позволяет использовать фрагменты, включенные в более сложные структуры – с возможностью замещения во все положения, за исключением специально заблокированных с помощью таких характеристик запроса, как, например, блокировка атома *Lock Atom* (см. соответствующий раздел ниже);

5. перенести запрос в окно редактора *Reaction Structure*, применив команду *OK*:

6. при необходимости / целесообразности выбрать опцию *Advanced Search* для ограничения результатов поиска дополнительными критериями; если их нужно постоянно видеть на экране – использовать опцию *Always Show* (если поисковые требования не слишком конкретны, полезно начать поиск более широко, не используя ограничители с самого начала – их можно задать позже на вкладке *Refine* для уточнения набора ответов);

7. начать поиск по команде *Search*.

## Расширенные поисковые опции

Дополнительно к критериям структуры можно задать критерии реакции, ограничивающие / уточняющие запрос, используя опцию *Advanced Search* (если такие ограничители поиска необходимо постоянно видеть на экране, то следует отметить окно *Always Show*):

---

Ограничитель	Пояснение
--------------	-----------

---

растворители <i>Solvents</i>	выбор растворителя производится с помощью опции <i>Select Solvents</i> ; в диалоговом окне иерархии растворителей <i>Solvent Hierarchy</i> выбирается конкретный растворитель или их класс (см. раздел <i>Спецификация растворителей</i> ниже); закрытие диалогового окна производится по команде <i>Close</i> ; количество выбранных растворителей появляется на экране рядом с ограничителем <i>Solvents</i>
не участвующие функциональные группы <i>Non-participating Functional Groups</i>	выбор не участвующих функциональных групп производится с помощью опции <i>Select Groups</i> ; в диалоговом окне можно выбрать отдельные группы или их классы (см. раздел <i>Спецификация функциональных групп</i> ниже); для закрытия диалогового окна применяется команда <i>Close</i> ; количество выбранных групп появляется на экране рядом с ограничителем <i>Non-participating Functional Groups</i>
количество стадий <i>Number of Steps</i>	для ограничения количества стадий реакции используются числа или интервалы чисел; можно задать открытый интервал: например, $-3$ означает реакцию / метод синтеза с не более чем тремя стадиями
классификации <i>Classifications</i>	<p>выбор классификации реакции:</p> <p><i>Biotransformation</i> – реакции с участием микробиологических или клеточных объектов (например, липазы), подобные протекающим в биологических системах (например, ферментативное восстановление)</p> <p><i>Catalyzed</i> – каталитические реакции с известным катализатором</p> <p><i>Chemoselective</i> – реакции, протекающие по конкретной функциональной группе в присутствии других, не реагирующих функциональных групп</p> <p><i>Combinatorial</i> – реакции, используемые в комбинаторном синтезе</p> <p><i>Electrochemical</i> – реакции, протекающие в электрохимической ячейке вследствие прохождения через нее электрического тока</p> <p><i>Gas-phase</i> – реакции, все участники которых находятся в газовой фазе</p> <p><i>Non-catalyzed</i> – реакции, для которых не сообщается о катализаторе</p> <p><i>Photochemical</i> – реакции, инициируемые светом</p> <p><i>Radiochemical</i> – реакции с участием радиоактивных</p>

	веществ
	<i>Regioselective</i> – реакции, преимущественно протекающие по одному из нескольких возможных положений, т.е. с преимущественным образованием одного из нескольких возможных региоизомеров
	<i>Stereoselective</i> – реакции, в которых преимущественно образуется один из возможных стереоизомеров
источники	выбор типов документов / публикаций
<i>Sources</i>	
время публикации	выбор года / временного интервала публикации, включая открытый – например, 1995– означает публикации 1995 г. и более поздние
<i>Publication Years</i>	

## Спецификация растворителей

Результаты поиска по реакциям можно ограничить, задавая допустимые растворители – конкретные или классы. Последовательность действий:

1. выбрать опцию *Advanced Search*, затем опцию *Select Solvents*;
2. в диалоговом окне иерархии растворителей *Solvent Hierarchy*:  
 выбрать нужный класс растворителей;  
 отметить конкретный растворитель или их класс; затемненное окно рядом с классом растворителей указывает, что были отмечены некоторые из растворителей этого класса, но не все; поскольку растворитель может принадлежать более чем к одному классу, его маркирование может служить причиной затемнения окон нескольких классов;  
 общее количество выбранных растворителей будет показано в строке текущего состояния; для демаркирования всех растворителей используется опция *Deselect All*;
3. выбрать опцию *View Solvent List* для вывода на экран списка растворителей в алфавитном порядке; диалоговое окно изменится на *Solvent List* со списком растворителей (для возвращения в иерархию растворителей применяется опция *View Solvent Hierarchy*); можно выбрать кнопку вывода всех

растворителей *All solvents* или только избранных – *Selected solvents*; можно маркировать или демаркировать отдельные растворители из списка;

4. для поиска конкретного растворителя напечатать его название в окне поиска *Find* вверху диалогового окна и использовать опцию *Next* – первое найденное название растворителя, содержащее заданный текстовый фрагмент, будет выделено в списке растворителей *Solvent List*; для нахождения следующего примера снова применить опцию *Next*; для возврата в предыдущий пример – опцию *Previous*;
5. для завершения выбора растворителей применить опцию *Close* вверху диалогового окна – количество выбранных растворителей появится рядом с ограничителем *Solvents*.

### Спецификация не участвующих функциональных групп

Результаты поиска можно ограничить заданием присутствующих в веществах, но не участвующих в реакциях функциональных групп. Последовательность действий:

1. выбрать опцию *Advanced Search*, затем опцию выбора групп *Select Groups*;
2. в появившемся диалоговом окне отметить функциональные группы или их классы; количество выбранных групп появится в строке текущего состояния; для демаркирования всех групп применить опцию очистки *Clear Selections*;
3. для вывода функциональных групп по типу – выбрать их в ниспадающем меню опции *View*;
4. после выбора задать присутствие в веществах всех (*All*) или любых (*Any*) отобранных групп;
5. применить опцию *Close*, расположенную выше диалогового окна; количество выбранных групп появится рядом с ограничителем *Non-participating Functional Groups* вместе с условием всех (*All*) или любых (*Any*) выбранных групп.

## Нахождение подобных реакций

Для конкретной реакции в текущем наборе ответов можно найти другие реакции с подобными реакционными центрами. Соответствующая опция *Similar Reactions* доступна только для одностадийных реакций. Последовательность действий:

1. на экране *Reactions* для интересующей реакции выбрать опцию *Similar Reactions*;
2. в диалоговом окне выбрать нахождение подобных реакций либо из всех реакций, учтенных в БД (*All reactions*), либо только из реакций текущего набора ответов (*Current answer set*); если выбрана опция *All reactions*, количество реакций, найденных на каждом уровне подобия, будет выведено в скобках; на широком (*Broad*) уровне подобия сравниваются только реакционные центры, на среднем (*Medium*) – реакционные центры и соседние связи и атомы, на узком (*Narrow*) – реакционные центры и связи и атомы в  $\alpha$ - и  $\beta$ -положениях по отношению к реакционным центрам;
3. выбрать уровень *Broad*, *Medium* или *Narrow*;
4. применить команду *Get Reactions*.

## Нахождение дополнительных реакций

Для выбранных реакций в текущем наборе ответов можно найти дополнительные реакции – в документах, сообщающих о получении тех же самых продуктов. Последовательность действий:

1. на экране *Reactions* выбрать реакции, приводящие к интересующим продуктам, затем – опцию *Find Additional Reactions* в меню *Tools*; если реакции не выбраны, опция *Find Additional Reactions* будет применена ко всем продуктам в текущем наборе ответов; дополнительные реакции будут автоматически добавлены к текущему набору ответов в его конце; на вкладке *Analysis* появятся списки исходных (*Reactions*) и дополнительных реакций (*Additional Reactions*);
2. для вывода дополнительных реакций применить опцию *Additional Reactions*; с помощью опции *Keep Analysis* выведенные реакции можно сделать

текущим набором ответов, с помощью опции *Clear Analysis* – возвратиться к полному набору ответов.

## Просмотр, анализ и уточнение набора реакций

Можно быстро оценить результаты поиска и выбрать наиболее релевантные из них:

Опция	Пояснение
просмотр набора реакций	по завершению поиска ответы выводятся на экран <i>Reactions</i> , содержащий опции контроля и анализа
группировка реакций	группировка реакций по типу превращений ( <i>Transformation</i> ) или релевантных документов ( <i>Document</i> ); для каждого документа выводится одна репрезентативная реакция
сортировка реакций	сортировка реакций в соответствии с выбранными критериями: по релевантности, номеру доступа, экспериментальной методике, количеству стадий, выходу продукта, году публикации
просмотр экспериментальных методик	экспериментальные методики берутся из оригинальных документов (статей или патентов); можно отсортировать или проанализировать набор ответов по критерию доступности методик и затем просмотреть методики
хранение или удаление реакций	ручной отбор реакций с целью их сохранения или удаления
анализ текущего набора ответов	анализ набора ответов по ряду критериев: имени автора, катализатору, компании / организации, типу документа, экспериментальной методике, названию журнала, языку публикации, количеству стадий, выходу продукта, растворителю
уточнение набора ответов дополнительными критериями	использование опций уточнения в закладке <i>Refine</i> для задания дополнительных критериев на основе структуры веществ, выходов продуктов, количества стадий, классификации реакций, <i>не участвующих</i> функциональных групп
возвращение в предыдущий набор ответов	после завершению поиска и уточнения его результатов с созданием нового набора ответов в «поисковый след» наверху экрана добавляется запись, по которой можно вернуться к предыдущему набору найденных реакций
комбинирование наборов ответов	создание нового набора ответов комбинированием других наборов с помощью логических / булевых операторов



## Просмотр набора реакций

По завершению поиска ответы выводятся на экран *Reactions*, имеющий опции контроля и анализа. Последовательность действий:

1. применить опцию *Display Options* для изменения количества выводимых на страницу ответов и подтвердить выбор командой *OK*; при выборе опции *Reaction Scheme* будет выведена только схема реакции, а разделы *Overview* и *Experimental Procedure* свернуты; при выборе опции *Reaction Scheme and Overview* будет выведена схема реакции и обзорная информация, а раздел *Experimental Procedure* свернут;
2. просмотреть другие страницы с помощью опций перехода к первой, предыдущей, следующей или последней странице; можно ввести номер нужной страницы и перейти непосредственно на нее;
3. для предварительного просмотра информации о публикации без ухода с текущего экрана применить опцию быстрого просмотра *Quick View* рядом с названием публикации – информация появится во всплывающем окне *Quick View*;
4. для предварительного просмотра информации о веществе без ухода с текущего экрана поместить курсор на структуру вещества для его выделения и применить появляющуюся при этом опцию быстрого просмотра *Quick View* – информация появится во всплывающем окне *Quick View*;
5. для открытия полнотекстового PDF файла патентного документа или члена патентного семейства использовать опцию *PatentPak* рядом с названием документа, затем выбрать документ в всплывающем окне (требуется модуль *PatentPak*);
6. для получения полнотекстовых документов извне системы SciFinder применить опцию *Other Sources* рядом с заглавием документа; полнотекстовые документы могут быть доступны в библиотеках по местонахождению пользователя, или же он будет перенаправлен на нужный web-сайт – бесплатный или требующий подписки / оплаты.

## Быстрый просмотр информации о публикации

Опция быстрого просмотра *Quick View* позволяет предварительно оценить информацию о публикации без ухода с текущего экрана – информация появляется во всплывающем окне. Если доступны графические рисунки, они появятся в закладке *Reference Images*. Можно использовать планку слева от рисунка для того, чтобы спрятать реферат и увеличить рисунок.

В зависимости от доступных для документа опций можно:

выбрать опцию *PatentPak* рядом с названием документа для открытия полнотекстового PDF файла патента или члена патентного семейства, а затем выбрать документ во всплывающем окне (требуется модуль *PatentPak*);

для получения полнотекстовых источников извне системы SciFinder использовать опцию *Other Sources* рядом с названием документа; полнотекстовые документы могут быть доступны в библиотеках по местонахождению пользователя, или же он будет перенаправлен на нужный web-сайт – бесплатный или требующий подписки / оплаты.

## Быстрый просмотр информации о веществе

Опция быстрого просмотра *Quick View* позволяет предварительно оценить информацию о веществе без ухода с текущего экрана – информация появляется во всплывающем окне. Можно использовать планку *Show / Hide* слева от изображения вещества для того, чтобы скрыть информацию о нем и увеличить изображение структуры. Для просмотра деталей следует перейти по гиперссылке на регистрационном номере вещества *CAS Registry Number*.

## Группировка реакций

Найденные реакции можно сгруппировать по типу превращений (*Transformation*) или релевантных документов (*Document*), для каждого документа будет выведена одна репрезентативная реакция. Последовательность действий при группировке по типу документа:

1. выбрать опцию *Document* в меню *Group by* – для каждого ответа будет выведен заголовок документа вместе с репрезентативной реакцией;

2. для нахождения других реакций из документа перейти по гиперссылке на их количестве.

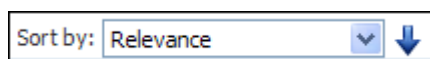
Последовательность действий при группировке по типу превращений:

1. выбрать опцию *Transformation* в меню *Group by* – одностадийные реакции будут сгруппированы по типу превращения, а не сгруппированные одно- и многостадийные реакции появятся в конце списка;
2. перейти к просмотру реакций с определенным типом превращений по гиперссылке на количестве реакций.

## Сортировка реакций

Реакции в наборе ответов можно отсортировать по ряду критериев. Последовательность действий:

1. выбрать опцию сортировки в раскрывающемся окне *Sort by*:



Опция	Пояснение
Релевантность <i>Relevance</i>	сортировка по релевантности ответов запросу
номер доступа <i>Accession Number</i>	сортировка ответов по номеру, назначенному при вводе реакции в БД – большие номера указывают на более новые записи; меньшие – на более старые
экспериментальная процедура <i>Experimental Procedure</i>	сортировка реакций по доступности данных об экспериментальных методиках – по умолчанию первыми выводятся реакции с методиками эксперимента
Число стадий <i>Number of Steps</i>	сортировка реакций по количеству стадий
выход продукта <i>Product Yield</i>	сортировка реакций по выходу (целевого) продукта – по умолчанию реакции, для которых выходы продуктов не приведены, выводятся последними

---


время публикации      сортировка в хронологическом порядке

*Publication Year*

подобие                      сортировка реакций по подобию запросу, доступная только для наборов ответов, полученных поиском реакций по подобным данной

*Similarity*

---

2. для изменения порядка сортировки применить стрелку , направив ее вверх для сортировки в возрастающем порядке, вниз – в убывающем.

## Просмотр экспериментальных методик

Экспериментальные методики берутся из оригинальных документов – статей, патентов. Набор ответов можно отсортировать / проанализировать по доступности методик и затем их посмотреть.

Для просмотра экспериментальных методик надо открыть сжатый по умолчанию раздел *Experimental Procedure* с помощью соответствующей гиперссылки.

Для сортировки ответов по наличию экспериментальных методик нужно выбрать опцию *Experimental Procedure* в меню сортировки *Sort by* – реакции с описанными методиками эксперимента будут выведены в верхней части списка.

Для анализа доступности экспериментальной методики надо:

1. в закладке *Analysis* выбрать опцию *Experimental Procedure* в меню *Analyze by*;
2. выбрать опцию *Experimental Procedures Available* – будут выведены только реакции, для которых есть экспериментальные методики;
3. при необходимости / целесообразности создать новый набор ответов, содержащий только реакции с приведенными методиками эксперимента, применив команду *Keep Analysis*; вернуться к исходному полному набору ответов позволяет команда *Clear Analysis*.

Для печати методик эксперимента следует:

1. отметить интересующие реакции и использовать опцию *Print*; если реакции не выбраны, подразумевается печать всех реакций из набора ответов; можно маркировать / демаркировать все реакции, выбрав соответствующую опцию в раскрывающемся меню;
2. в диалоговом окне *Print* отметить включение экспериментальных методик с помощью опции *Experimental Procedure* (если имеется); при выборе вместо опции печати *Print* опции экспорта реакций *Export* отметить включение экспериментальных методик в диалоговом окне *Export*;
3. распечатать методики, применив команду *Print*.

### Сохранение или удаление выбранных реакций

Текущий набор ответов можно модифицировать, отобрав реакции вручную, и затем сохранить или удалить выбранные реакции. Для этого нужно на экране *Reactions* отметить нужные реакции и применить к ним опцию сохранения *Keep Selected* или удаления *Remove Selected*.

### Анализ текущего набора реакций

После завершения поиска ответы можно проанализировать по ряду критериев – таких как, например, катализатор или растворитель, что даст новые наборы ответов. Их можно вывести на экран или вернуться к исходному набору ответов. Если набор ответов превышает 20 тыс. реакций, полный анализ не будет выполнен и на вкладке *Analysis* будет показан лишь пробный результат (*Sample Analysis*). Последовательность действий:

1. на экране *Reactions* выбрать опцию *Analyze by* (см. описание ниже);
2. выбрать нужную планку для просмотра реакций в анализируемом подмножестве;
3. для просмотра более чем 10 выводимых подмножеств использовать опцию *Show More*.

Опции анализа в закладке *Analyze by* включают: *Author Name* – авторы найденных публикаций по реакциям; *Catalyst* – катализаторы реакций; *Company – Organization* – компании / организации, с которыми аффилированы публикации по

реакциям; *Document Type* – типы оригинальных документов; *Experimental Procedure* – доступность экспериментальных методик; *Journal Name* – журналы, в которых опубликованы реакции; *Language* – языки оригинальных публикаций; *Number of Steps* – количество стадий реакции; *Product Yield* – выходы (целевых) продуктов в процентах; *Publication Year* – время публикации документов; *Reagent* – используемые в реакциях реагенты; *Solvent* – используемые в реакциях растворители.

При выборе опции *Show More* следует:

1. для сортировки в алфавитном порядке выбрать *Natural Order*, для сортировки по количеству связанных реакций – *Frequency*.
2. применять команду *Export* для экспорта списка выбранных реакций в таблицу Excel или файл PDF;
3. маркировать выбор в окнах выводимых наборов;
4. для вывода избранных наборов использовать команду *Apply*.

После просмотра созданных наборов ответов можно:

1. создать другие наборы на основе выводимых реакций с помощью опции *Keep Analysis*;
2. отменить анализ и вернуться к просмотру исходного набора ответов с помощью опции *Clear Analysis*.

### Уточнение набора реакций с помощью дополнительных критериев

Закладка *Refine* предоставляет дополнительные критериев, которые можно применить к текущему набору ответов. Последовательность действий:

1. активировать закладку *Refine*;
2. выбрать одну из опций *Refine by* – соответствующие критерии появятся ниже;
3. выбрать критерий;
4. применить команду *Refine*:

---

**Опция**

**Пояснение**

---

---

<p>структура <i>Reaction Structure</i></p>	<p>запуск структурного редактора; имеется возможность переключения между использованием редактора на основе <i>Java</i> и <i>Non-Java</i>; модификация запроса и перенос нового запроса в закладку <i>Refine</i> с подтверждением <i>OK</i></p>
<p>выход продукта <i>Product Yield</i></p>	<p>ввод верхнего (<i>Upper Limit</i>) и нижнего (<i>Lower Limit</i>) значений для интервала выходов продукта; отметка опции, разрешающей включение в набор ответов реакций, для которых выход не сообщается</p>
<p>количество стадий <i>Number of Steps</i></p>	<p>ввод соответствующего числа или интервала, в том числе открытого – например, –3 означает «не более 3-х стадий»</p>
<p>классификация реакции <i>Reaction Classification</i></p>	<p>маркирование / выбор классификации реакций:</p> <p><i>Biotransformation</i> – реакции с участием микробиологических или клеточных объектов (например, липазы), подобные протекающим в биологических системах (например, ферментативное восстановление)</p> <p><i>Catalyzed</i> – реакции, для которых известен катализатор</p> <p><i>Chemoselective</i> – реакции, протекающие по конкретной функциональной группе в присутствии других, не реагирующих, функциональных групп</p> <p><i>Combinatorial</i> – реакции, используемые в комбинаторном синтезе</p> <p><i>Electrochemical</i> – реакции, протекающие в электрохимической ячейке в результате прохождения через нее электрического тока</p> <p><i>Gas-phase</i> – реакции, все участники которых находятся в газовой фазе</p> <p><i>Non-catalyzed</i> – реакции, для которых не сообщается о катализаторе</p> <p><i>Photochemical</i> – реакции, протекающие под действием света</p> <p><i>Radiochemical</i> – реакции с участием радиоактивных веществ</p> <p><i>Regioselective</i> – реакции, преимущественно протекающие по одному из нескольких возможных положений, т.е. с преимущественным образованием одного из нескольких</p>

---

	возможных региоизомеров
исключение классификации реакций	<i>Stereoselective</i> – реакции, в которых преимущественно образуется один из возможных стереоизомеров исключение классификаций реакций
<i>Excluding Reaction Classification</i>	
не участвующие функциональные группы	задание функциональных групп, присутствующих в веществах, но не участвующих в интересующих реакциях; в меню <i>View</i> можно выбрать все группы ( <i>All</i> ), их классы ( <i>Classes</i> ), циклические ( <i>Rings</i> ) или ациклические ( <i>Non-rings</i> ) группы; в веществах могут присутствовать все ( <i>All selections</i> ) или любые ( <i>Any selection</i> ) заданные группы
<i>Non-participating functional groups</i>	

## Возвращение к предыдущему набору реакций

По завершению поиска или уточнения его результатов, при котором создается новый набор ответов, в «поисковый след» наверху экрана *Reactions* добавляются соответствующие записи. С их помощью можно вернуться к предыдущему набору ответов. Последовательность действий:

1. для просмотра информации о наборе ответов поместить курсор на нужную запись в «поисковом следе» – информация появится в всплывающем окне;
2. для перехода к реакциям из предыдущего набора ответов использовать гиперссылку на соответствующей записи в «поисковом следе».

## Комбинирование наборов реакций

С помощью логических / булевых операторов объединения, пересечения и исключения можно создать новый набор ответов, комбинируя имеющиеся. Существуют две возможности – комбинирование текущего набора ответов с ранее сохраненными наборами и комбинирование ранее сохраненных наборов. Последовательность действий при комбинировании текущего набора с ранее сохраненными:

1. выбрать опцию *Combine Answer Sets* в меню *Tools*;



2. в списке сохраненных наборов ответов отметить один или несколько; если выбрано более одного сохраненного набора, возможности комбинирования на следующем этапе ограничены опциями *Combine* и *Intersect*;
3. выбрать нужную опцию;
4. скомбинировать наборы ответов по команде *Combine Answer Sets*.

Последовательность действий при комбинировании ранее сохраненных наборов ответов:

1. выбрать в закладке *Saved Searches* опцию *Saved Answer Sets*;
2. выбрать закладки *Reactions* для просмотра сохраненных наборов реакций;
3. отметить два или более сохраненных ответов для комбинирования и применить команду *Combine Answer Sets*; если выбрано более двух сохраненных наборов ответов, возможности комбинирования ограничивается опциями *Combine* и *Intersect*;
4. выбрать нужную опцию;
5. скомбинировать наборы ответов по команде *Combine Answer Sets*.

## Получение дополнительных данных

Возможно получение дополнительных данных, связанных с реакциями:

Опция	Пояснение
получение библиографических ссылок	нахождение библиографических ссылок для всего набора ответов или для избранных реакций
получение полного текста публикации	получение полных текстов публикаций по найденным реакциям; полнотекстовые патентные документы можно получить, используя опцию <i>PatentPak</i> ; другие документы – из внешних источников: библиотек и / или web-сайтов

нахождение информации о веществах	можно получить информацию о реактантах, реагентах, растворителях и продуктах в текстовом виде; эти участники реакций могут также использоваться в дополнительных поисках реакций для синтеза целевых веществ
нахождение коммерческих источников участников реакций	нахождение коммерческих поставщиков нужных для реакции веществ

---

## Получение библиографических ссылок

Для избранных реакций или всего набора ответов можно найти библиографические ссылки. Для этого надо отметить нужные реакции и использовать опцию *Get References*; если реакции не маркированы, подразумевается, что требуются ссылки для всех реакций в наборе ответов; можно маркировать / демаркировать все реакции, выбрав соответствующую опцию из всплывающего меню.

Ссылки для отдельных реакций можно получить, используя опцию *Get Reference Detail* на экране *Reaction Detail*.

## Получение полного текста библиографической ссылки

Для получения полных текстов найденных библиографических ссылок существуют следующие возможности:

опция *PatentPak* обеспечивает получение полнотекстового PDF файла для патентной ссылки или члена патентного семейства (требуется подписка на *PatentPak*);

опция *Other Sources* обеспечивает переход к полнотекстовым источникам вне SciFinder; полнотекстовые документы могут быть доступны из библиотек по местонахождению пользователя, или он будет перенаправлен к web-источникам – бесплатным или платным / по подписке.






Для получения полнотекстовых PDF файлов патентов на экране *Reactions* надо выбрать опцию *PatentPak*, затем выбрать нужную ссылку в ниспадающем списке; PDF файлы патентов будут на оригинальном языке. Также можно

использовать переход по гиперссылке *PatentPak* при быстром просмотре ссылки *Quick View*, или применить опцию *View with PatentPak* на экране *Reaction Detail*.

Для получения полных текстов других документов на экране *Reactions* нужно выбрать опцию *Other Sources* рядом с заглавием библиографической ссылки в разделе *Overview*, или перейти по гиперссылке *Other Sources* при быстром просмотре ссылки *Quick View*, или воспользоваться опцией *Link to Other Sources* на экране *Reaction Detail*.

## Получение информации о веществе

Можно получить дополнительную текстовую информацию о веществах – участниках реакций: реактантов, реагентов, продуктов и растворителей, Эти вещества могут также использоваться в дополнительных поисках, например, реакций для синтеза целевых продуктов. Последовательность действий:

1. поместить курсор на реакцию, реагент или растворитель в разделе *Overview* – появятся иконки  и ;
2. иконку  использовать для просмотра информации о веществе без ухода с текущего экрана;
3. иконку  использовать для просмотра информации о веществе с выводом доступных для него опций меню *View Substance Detail*;
4. иконку  использовать для нового поиска со следующими опциями:

---

Опция	Пояснение
-------	-----------

---

---

*Explore by Structure*

выбор типа поиска из вторичного меню:

*Chemical Structure* – перенос поисковой структуры в поле *Chemical Structure* на экране *Explore Substances*; в нем можно задать тип поиска *Exact Structure*, *Substructure* или *Similarity*

*Markush Patents by Structure* – перенос поисковой структуры в поле *Markush* на экране *Explore Substances*; в нем можно задать тип поиска *Allow variability only as specified* или *Substructure*

*Reactions* – перенос поисковой структуры в поле *Reaction Structure* на экране *Explore Reactions*; в нем можно задать тип поиска *Allow variability only as specified* или *Substructure*; роль вещества в реакции будет *Any*

*Synthesize this*

нахождение реакций, в которых вещество является продуктом

*Get Reactions where Substance is a*

нахождение реакций, в которых вещество участвует в реакции в заданной роли; выбор роли в реакции из вторичного меню: *Product*, *Reactant*, *Reagent*, *Reactant/Reagent*, *Catalyst*, *Solvent*, *Any Role*

*Get Commercial Sources*

нахождение коммерческих поставщиков вещества – если эта опция затемнена, вещество коммерчески недоступно


*Get Regulatory Information*

нахождение нормативной информации для вещества – если эта опция затемнена, применение / обращение вещества не регулируется

*Get References*

нахождение библиографических ссылок, на документы, упоминающие вещество

---

5. применить иконку  для экспорта вещества с использованием следующих опций:
- 

**Опция**


**Пояснение**

---


*Export as image*

изображение вещества сохраняется в виде GIF файла

---

6. использовать иконку  для отправки вещества в SciPlanner по команде *Send to SciPlanner*.

## Нахождение коммерческих поставщиков веществ – участников реакции

Для того, чтобы найти коммерческих поставщиков веществ – участников реакции, следует щелкнуть по изображению колбы ниже изображения вещества; если изображение колбы отсутствует – вещество коммерчески недоступно. Альтернативно, можно поместить курсор на реакцию, реагент или растворитель в разделе *Overview* – появятся две иконки; иконку  применить для выбора опции *Get Commercial Sources*.

## Сохранение реакций и обмен этой информацией с коллегами

После получения наборов ответов по реакциям их можно сохранить для будущей работы и / или обмена с коллегами – пользователями системы SciFinder, для чего имеется ряд возможностей:

---

<b>Опция</b>	<b>Пояснение</b>
сохранение текущего набора ответов	наборы ответов сохраняются на сервере SciFinder, к ним можно обращаться в дальнейшем
обмен наборами ответов	можно поделиться гиперссылкой на отдельную реакцию или весь сохраненный набор ответов с коллегами, имеющими доступ к SciFinder
экспорт реакций	реакции можно экспортировать в PDF или RTF файлы – для чтения в Word, или в AKX (Answer Key eXchange) файл – для чтения в SciFinder
импорт реакций	можно импортировать реакции, сохраненные в формате AKX, импортируемые реакции становятся текущим набором ответов и выводятся на экран <i>Reactions</i>
печать списка реакций	печать списка реакций в формате PDF
отправка реакций	SciPlanner позволяет визуально организовать полученный

в SciPlanner	набор ответов в рабочем пространстве SciFinder; результаты можно сохранять и обменивать
открытие сохраненного набора ответов	реакции из сохраненного набора ответов становятся текущим набором и выводятся на экран <i>Reactions</i>
редактирование сохраненного набора ответов	можно изменить название или описание сохраненного набора ответов
удаление сохраненных наборов ответов	можно необратимо удалить сохраненный набор ответов с сервера SciFinder

---

### Сохранение текущего набора реакций

Набор ответов будет сохранен на сервере SciFinder, к нему можно получить доступ, выбрав в закладке *Saved Searches* опцию *Saved Answer Sets*. Последовательность действий:

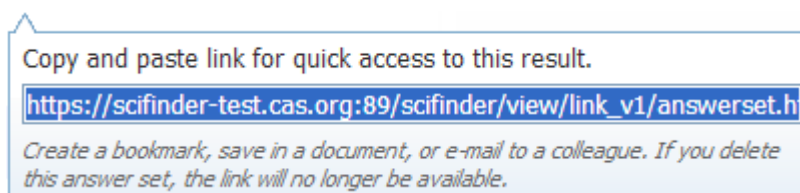
1. на экране *Reactions* отметить сохраняемые реакции и подтвердить действия командой *Save*; если реакции не маркированы, подразумевается, что нужно сохранить все реакции из набора ответов; можно маркировать / демаркировать все реакции, выбрав соответствующую опцию в всплывающем меню;
2. в появившемся диалоговом окне выбрать установку сохранения всех (*All answers*) или только маркированных (*Only selected answers*) ответов;
3. ввести название набора ответов в поле *Title*;
4. ввести описание набора ответов в поле *Description*;
5. подтвердить произведенные действия командой *OK*.

Отдельную реакцию можно сохранить на экране *Reaction Detail*, применив команду *Save*.

## Обмен наборами реакций

Можно поделиться с коллегами гиперссылкой на отдельную реакцию или весь сохраненный набор ответов – пользователями системы SciFinder. Последовательность действий:

1. использовать опцию *Link* на экране *Reaction Detail* или на экране *Saved Answer Sets*;
2. скопировать URL в всплывающем текстовом окне:



3. поместить URL в сообщение электронной почты, или в другой документ, или использовать в качестве закладки в браузере.

## Экспорт реакций

Найденные реакции можно экспортировать в форматы PDF и RTF – для чтения в текстовых редакторах или в формат AKX – для чтения в системе SciFinder. Последовательность действий:

1. на экране *Reactions* отметить реакций для экспорта и использовать опцию *Export*; если реакции не отмечены, подразумевается, что нужно экспортировать все реакции в наборе ответов; можно маркировать / демаркировать все реакции, выбрав соответствующую опцию в всплывающем меню *Select*;
2. выбрать все (*All*) или только маркированные (*Selected*) ответы, или определенный интервал (*Range*) ответов;
3. в разделе *For* выбрать тип файла:

---

Тип файла	Пояснение
Portable Document Format (*.pdf)	экспорт схем реакций и других данных из полей <i>Summary</i> или <i>Detail</i> в PDF файл; требуется PDF ридер для просмотра и печати файла

---

---

Rich Text Format (*.rtf)	экспорт схем реакций и других данных из полей <i>Summary</i> или <i>Detail</i> в RTF файл для чтения в текстовом редакторе, например, Microsoft Word
--------------------------	--

Answer Key eXchange (*.akx)	реакции, экспортированные в формате AKX, можно импортировать в SciFinder, используя опцию <i>Import</i> ; импортированные реакции станут текущим набором ответов
-----------------------------	--

---

4. ввести данные в раздел *Details*; появляющиеся поля ввода данных зависят от типа файла, выбранного на предыдущем этапе;
5. применить команду *Export*.

Отдельную реакцию можно экспортировать по команде *Export* на экране *Reaction Detail*.

## Импорт реакций

Реакции, сохраненные в формате AKX, можно импортировать, эти реакции станут текущим набором ответов и будут выведены на экран *Reactions*.  
Последовательность действий:

1. в разделе *Saved Answer Sets* с правой стороны экрана *Explore* выбрать опцию *Import*;
2. применить команду *Browse* для выбора AKX файла;
3. дважды щелкнуть на нужном AKX файле или отметить его и открыть командой *Open*;
4. подтвердить действия командой *OK*.

## Печать результатов поиска

Для печати информации о реакциях в формате PDF следует:

1. на экране *Reactions* отметить нужные реакции и использовать опцию *Print*, если реакции не отмечены, подразумевается, что нужно распечатать все реакции в наборе ответов; можно маркировать / демаркировать все реакции, выбрав соответствующую опцию в всплывающем меню *Select*;



2. в окне *Print to PDF* выбрать печать всех (*All*) или только выбранных (*Selected*) ответов, или определенного интервала (*Range*) ответов;
3. выбрать формат вывода в разделе *Format*;
4. ввести название (*Title*) для включения в PDF файл;
5. отметить опции в разделе *Include* – для полей *Summary* и *Detail* доступны разные опции;
6. применить команду *Print*.

Отдельную реакцию можно распечатать по команде *Print* на экране *Reaction Detail*. Нужно ввести название *Title*, отметить нужные данные и применить команду *Print*.

## Отправка реакций в SciPlanner

Опция *SciPlanner* позволяет систематизировать результаты поиска в визуальном рабочем пространстве, сохранять и обмениваться ими с коллегами. Для этого нужно на экране *Reactions* отметить реакции для отправки в *SciPlanner* и использовать опцию *Send to SciPlanner*, если реакции не выбраны, подразумевается, что нужно отправить в *SciPlanner* все реакции в наборе ответов; можно маркировать / демаркировать все реакции, выбрав соответствующую опцию в всплывающем меню *Select*.

Отдельную реакцию можно отправить в *SciPlanner* по команде *Send to SciPlanner* на экране *Reaction Detail*.

## Открытие сохраненного набора реакций

При открытии сохраненного набора ответов реакции выводятся на экран *Reactions* и становятся текущим набором ответов. Для открытия набора нужно:

1. щелкнуть по его названию в разделе *Saved Answer Sets* на боковой панели экрана *Explore*, или воспользоваться опцией *View All* на боковой панели, или опцией *Saved Answer Sets* в закладке *Saved Searches*;
2. выбрать закладку *Reactions*;
3. выбрать название набора ответов.

## Редактирование сохраняемого набора реакций

Можно изменить название или описание сохраняемого набора ответов. Последовательность действий:

1. выбрать в закладке *Saved Searches* опцию *Saved Answer Sets*;
2. выбрать закладку с типом набора ответов для редактирования – *References*, *Substances* или *Reactions*;
3. выбрать опцию *Edit* рядом с редактируемым набором ответов;
4. изменить название (*Title*) или описание (*Description*) набора на нужные;
5. подтвердить действия командой *OK*.

## Удаление сохраненных наборов реакций

Сохраненный набор ответов можно необратимо удалить с сервера SciFinder. Последовательность действий:

1. выбрать в закладке *Saved Searches* опцию *Saved Answer Sets*;
2. выбрать закладку с типом удаляемого набора ответов – *References*, *Substances* или *Reactions*;
3. маркировать удаляемый набор;
4. удалить набор по команде *Delete Selected*.

## 4. Нахождение коммерческих поставщиков

### Опции нахождения коммерческих поставщиков

Если вещества – участники реакций коммерчески доступны, можно найти информацию об их поставщиках:

---


Опция	Пояснение
нахождение	можно найти коммерческих поставщиков нужных веществ

коммерческих поставщиков	
сортировка коммерческих поставщиков	поставщиков нужных веществ можно отсортировать в соответствии с выбранными критериями
редактирование списка поставщиков	можно отредактировать список поставщиков, отобрав вручную и сохранив нужных, или удалив ненужных
анализ поставщиков	можно разделить поставщиков на группы по ряду критериев – например, страна ( <i>Country</i> ), предпочитаемые поставщики ( <i>Preferred Suppliers</i> ), и создать новые наборы ответов; или отменить анализ и вернуться к исходному
детальная информация	информация о каталогах, веществах и поставщиках
задание предпочитаемых / не предпочитаемых поставщиков	поставщиков можно разделить на предпочитаемых ( <i>Preferred</i> ) и не предпочитаемых ( <i>Non Preferred</i> ); при просмотре этот статус будет выведен на экран <i>Commercial Sources</i> ; поставщиков можно сортировать / анализировать по их статусу
печать списка поставщиков	список поставщиков будет распечатан в формате PDF
экспорт данных о поставщиках	данные о поставщиках можно экспортировать в ряд форматов, включая Microsoft Excel

## Поиск коммерческих поставщиков

Можно найти коммерческих поставщиков нужных веществ.

Последовательность действий:

1. отметить вещество на экране, дважды щелкнуть по иконке  для вывода имеющихся опций;
2. выбрать опцию *Get Commercial Sources* – список поставщиков вещества будет выведен на экран *Commercial Sources*.

Коммерческие поставщики могут также быть найдены при поиске по веществам (*Нахождение коммерческих поставщиков веществ*) и / или реакциям (*Нахождение коммерческих веществ – участников реакции*), и в *SciPlanner* (*Получение дополнительных данных для ответов в SciPlanner*).

## Сортировка списка коммерческих поставщиков

Коммерческих поставщиков нужных веществ можно отсортировать по ряду критериев. Последовательность действий:

1. выбрать опцию сортировки в раскрывающемся списке *Sort by*:

<b>Опция</b>	<b>Сортировка</b>
<i>CAS Registry Number</i>	по регистрационным номерам CAS – уникальным идентификаторам химических веществ
<i>Commercial Source</i>	по названиям поставщиков в алфавитном порядке
<i>Country</i>	по странам поставщиков в алфавитном порядке
<i>Order from Source</i>	по наличию гиперссылки к web-странице поставщика
<i>Preferred Sources</i>	по предпочтению – <i>Preferred, No Preference, Non-Preferred</i>
<i>Purity</i>	по чистоте нужных веществ
<i>Quantity</i>	по количествам нужных веществ
<i>Ships Within</i>	по гарантируемому времени выполнения заказа
<i>Stock Status</i>	по наличию на складе

2. задать стрелкой восходящий или нисходящий порядок сортировки.

## Редактирование списка коммерческих поставщиков

Текущий список коммерческих поставщиков можно отредактировать – выбрать нужных вручную и затем сохранить их или удалить ненужные. Для этого надо на экране *Commercial Sources* отметить конкретных поставщиков и выбрать опцию сохранения (*Keep Selected*) или удаления (*Remove Selected*) отмеченных записей в всплывающем меню *Select*.

## Анализ коммерческих поставщиков

Коммерческих поставщиков можно разделить на группы по ряду критериев. Группы можно вывести на экран и создать на их основе новые наборы ответов,

или отменить анализ и вернуться к исходному набору ответов. Если набор ответов содержит более 20 тыс. коммерческих источников, то его полный анализ невозможен, и на вкладке *Analyze* будут представлены результаты только предварительного анализа *Sample Analysis*. Последовательность действий:

1. на экране *Commercial Sources* выбрать опцию *Analyze by* (см. описание ниже);
2. выбрать нужную планку просмотра;
3. для просмотра более чем 10 верхних групп поставщиков использовать опцию *Show More*.

Опция *Analyze by* обеспечивает группировки: *Bulk* – по доступности веществ в больших (объемных) количествах; *CAS Registry Number* – по регистрационным номерам CAS веществ; *Commercial Source* – по названию поставщика; *Country* – по стране поставщика; *Order from Source* – по доступности гиперссылки на сайт поставщика; *Preferred Sources* – по степени предпочтительности поставщика: *Preferred*, *Non-Preferred* или *No Preference*; *Purity* – по чистоте веществ; *Quantity* – по количеству; *Screening* – по доступности скрининговых количеств; *Ships Within* – по гарантируемому времени доставки; *Stock Status* – по наличию веществ на складе.

При использовании опции *Show More* следует:

1. выбрать опцию *Natural Order* для сортировки в алфавитном порядке и опцию *Frequency* – для сортировки по встречаемости в наборе ответов;
2. выбрать опцию *Export* для экспорта результатов в таблицу Excel или файл PDF;
3. отметить нужное;
4. вывести нужные результаты по команде *Apply*.

После просмотра результатов можно создать новый набор ответов, используя опцию *Keep Analysis*, или отменить анализ и вернуться к исходному набору ответов, применив опцию *Clear Analysis*.

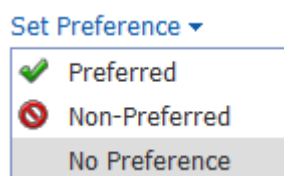
## Просмотр дополнительных сведений о коммерческих поставщиках

Найденные коммерческие поставщики вещества эти источники выводятся на экран *Commercial Sources*. Для просмотра дополнительной информации по поставщику нужно щелкнуть по его названию – сведения будут выведены на экран *Commercial Source Detail*.

## Задание статуса коммерческих поставщиков

Коммерческих поставщиков можно разделить на предпочитаемых / не предпочитаемых – *Preferred / Non-Preferred*. При просмотре статус поставщика будет выведен на экран *Commercial Sources*. Можно задать вывод на экран сначала предпочитаемых поставщиков, а потом не предпочитаемых, или только предпочитаемых. Статус предпочитаемый / не предпочитаемый можно задать при просмотре поставщиков на экране *Commercial Sources*, или во время просмотра дополнительной информации по отдельному поставщику на экране *Commercial Source Detail*. Последовательность действий:

1. на экране *Commercial Sources* или *Commercial Source Detail* использовать опцию *Set Preference*;
2. выбрать статус:



## Печать списка коммерческих поставщиков

Список коммерческих поставщиков нужных веществ можно распечатать в формате PDF. Последовательность действий:

1. на экране *Commercial Sources* отметить поставщиков и использовать опцию *Print*; если поставщики не выбраны, подразумевается, что на печать нужно отправить всех; можно маркировать / демаркировать всех поставщиков выбрав соответствующую опцию из всплывающего меню;
2. в разделе *Print to PDF* выбрать печать всех (*All*) или только выбранных (*Selected*) ответов, или заданного интервала (*Range*) ответов;

3. выбрать формат в разделе *Format*;
4. ввести название *Title* для включения в PDF файл;
5. выбрать опцию в разделе *Include* – для полей *Summary* и *Detail* доступны разные опции;
6. отправить на печать по команде *Print*.

### Экспорт данных о коммерческих поставщиках

Данные о коммерческих поставщиках можно экспортировать в несколько форматов, включая Microsoft Excel. Последовательность действий:

1. на экране *Commercial Sources* отметить нужных поставщиков и использовать опцию *Export*;
2. в разделе *Export* выбрать все (*All*) или только отмеченные (*Selected*) ответы, или определенный интервал (*Range*) ответов;
3. в разделе *For* выбрать тип файла:

Тип файла	Пояснение
Portable Document Format (*.pdf)	экспорт данных в форматах <i>Summary</i> или <i>Detail</i> в PDF файл; требуется PDF ридер для просмотра и печати
Rich Text Format (*.rtf)	экспорт данных в форматах <i>Summary</i> или <i>Detail</i> в RTF файл для чтения в текстовом редакторе, например, Microsoft Word
Таблица Microsoft Excel	экспорт данных в таблицу Microsoft Excel
Quoted format (*.txt)	экспорт данных в формат <i>Quoted</i> – будет предложено выбрать символы объединения ( <i>Quote</i> ) или разделения ( <i>Delimiter</i> ) элементов данных
Tagged format (*.txt)	экспорт данных в тегированный формат; записи будут разделены операторами <i>START RECORD</i> и <i>END RECORD</i> ; каждое поле данных идентифицируется названием и появляется в отдельной строке

4. ввести данные в раздел *Details*, появляющиеся поля которого зависят от выбора, сделанного на предыдущей стадии;
5. подтвердить экспорта командой *Export*.

Данные по отдельному поставщику можно экспортировать, выбрав функцию *Export* на экране *Commercial Source Detail*.



# ПРИЛОЖЕНИЕ

## Характеристики БД, входящих в ИПС SciFinder

Тип	Библиограф. ссылки	Химические вещества	Химические реакции	Регулируемые химикаты	Поставщики	Структуры Маркуша
БД	CAPlus	Registry	CASReact	ChemList	ChemCats	Marpat
Количество	> 38 млн. записей	> 76 млн. органических и неорганических веществ, > 65 млн. биопоследовательностей	> 70.3 млн. реакций: > 56.8 млн. одно- и многостадийных реакций и > 13.5 млн. способов синтеза	> 308 тыс. нормативных или регулируемых химикатов	> 70 млн. коммерчески доступных веществ, > 22 млн. регистрационных номеров веществ CAS	> 1 млн. структур Маркуша, > 416 тыс. патентных записей
Содержание	публикации по химии и смежным областям: органическая, высокомолекулярная, прикладная, физическая, неорганическая, аналитическая, биохимия, биохимическая генетика, протеомика, геномика	информация о веществах: названия и синонимы; молекулярные формулы; циклические системы; структурные диаграммы; экспериментальные и расчетные свойства; ссылки на литературу	информация о реакциях: структурные диаграммы реагентов и продуктов; регистрационные номера CAS реагентов, продуктов, реагентов, растворителей, катализаторов; детальные условия проведения реакций; экспериментальные процедуры	регулируемые химические вещества, химические названия и синонимы, нормативные перечни и их статус	коммерчески доступные химикаты и их поставщики; регистрационные номера CAS; сведения о поставщике, количествах и ценах	поиск по структурам Маркуша органических и металлоорганических соединений, патентные ссылки
Охват	1800+, > 50 тыс.; в наст. время > 10 тыс. научных журналов; быстрый анализ > 1.5 тыс. ведущих химических журналов; патенты 63 патентных ведомств; труды конференций / тезисы докладов; технические отчеты, книги, диссертации,	1800+, вещества из химических каталогов и авторитетных web-источников; биопоследовательности из БД GenBank; органические, металлоорганические, координационные и неорганические соединения, сплавы, соли, смеси, минералы,	1840+, химические реакции из журналов, патентов, диссертаций и надежных справочных изданий	1980+, нормативные перечни TSCA** 1985 г. и дополнения U.S. Government Federal Register International Chemical Regulations, 14 национальных и международных нормативных перечня	> 870 мировых коммерческих поставщиков химикатов, > 980 тыс. химических каталогов	1961+, структуры Маркуша из патентов в БД CAPlus с 1988 г. по настоящее время – с охватом избранных английских, французских, немецких и японских патентов с 1987 г., российских с 11.01.2000 г.; данные INPI*** 1961-1987 гг.

Обновление	обзоры, электронные журналы, web- препринты	полимеры, биопоследоват ельности, белки / протеины				
	ежедневно	ежедневно	ежедневно	еженедельно	еженедельно	ежедневно

\* С 1907 г. по настоящее время в CAS индексировалась химическая информация из > 50 тыс. журналов. За это время многие издания прекратили существование, объединились, разделились или / и изменили тематику. В настоящее время в CAS анализируется и индексируется > 10 тыс. журналов.

\*\* TSCA – Toxic Substances Control Act (издан Environmental Protection Agency, США).

\*\*\* INPI – Institute Nationale de la Propriete Industrielle, Франция.

## Дополнительные инструкции по тематическому поиску

### Общие

При тематическом поиске или уточнении его результатов следует использовать полные предложения на нормативном английском языке. Ключевые слова / концепты и их соотношения определяются системой SciFinder автоматически.

Поиск автоматически проводится по родственным терминам, при этом учитываются альтернативные написания и окончания слов.

#### *Рекомендации:*

задание двух или трех концептов на нормативном английском языке;

использование предлогов и артиклей для связи концептов;

заклучение акронимов / аббревиатур или синонимов в скобки после соответствующего концепта;

использование отрицаний not или except для исключения термина;

применение ограничений для уменьшения количества результатов в наборе ответов.

#### *Определение темы поиска:*

Тема должна состоять из двух или трех концептов, объединенных предлогами, союзами и другими простыми частями речи.

*Ограничения, налагаемые на вводимую фразу:*

число слов не может превышать 40;

число логических операторов and или or, используемых для определения отдельного концепта, не может превышать 3;

число используемых концептов не может превышать 7;

число используемых терминов для определения отдельного концепта не может превышать 8.

*Примеры:*

effect of penicillin on milk production in dairy cows;

liver apoptosis and nasal apoptosis

*Предлоги:*

Следует использовать распространенные предлоги after, among, at, between, from, in, into, on, upon, within.

*Языковые особенности:*

Следует учитывать особенности английского языка. Например, между фразами *Reactions caused by heat* и *Reactions causing heat* имеется семантическое различие.

*Использование логических / булевых операторов and и or:*

В некоторых контекстах различие в операторах and и or не распознается. В этих случаях на выбор представляются оба результата.

Не следует использовать and и or, если имеется более точный по контексту предлог. Например, не human growth hormone and fetal development, а effects of human growth hormone on fetal development.

Не следует применять оператор and, когда в действительности в виду имеется оператор or, используемый для обозначения присутствия в искомых документах или одного, или обоих терминов. Например, I am interested in interface software for bibliographic information OR numeric data. Оператор and применяется только для обозначения присутствия обоих терминов. Например: I am interested in interface software for bibliographic information AND numeric data.

*Распределенные определения / обстоятельства:*

Хотя фраза I am interested in liver or nasal apoptosis грамматически корректна, распределенные модификаторы не распознаются. Тема должна быть описана фразой I am interested in liver apoptosis or nasal apoptosis.

*Использование отрицания:*

Можно описать тему, используя такие отрицания, как *not* или *except*.  
Например: *ringed planets but not Saturn*.

#### *Сокращения и орфографические ошибки:*

Системой SciFinder распознаются и воспринимаются часто используемые сокращения, например, *BTU* и *Prep*; распространенные ошибки, например, *affect* вместо *effect*; британский и американский варианты английского языка, например, *colour* и *color*.

#### *Синонимы:*

При формулировке поискового запроса можно использовать синонимы. Их следует помещать в круглые скобки следом за поисковой формулой. Например: *milk production of cows (bovines)* – поиск будет проведен по обоим терминам *cows* и *bovines*.

#### *Усеченные слова и символы усечения:*

Усечение терминов, учет множественных и других форм слов, глаголов в прошедшем времени происходит автоматически. Например: *effects of age on calcium absorption in women* – запрос будет автоматически расширен включением таких терминов, как *aged* и *aging*. Не надо включать символы усечения и маскирования (! или \*) в поисковые формулы – они будут проигнорированы, а оставшиеся символы восприняты буквально.

#### *Логические / булевы операторы:*

Не следует использовать операторы булевой логики или группировки слов. В системе SciFinder в скобках указывают синонимы, а не группировки. Вместо булевых операторов следует использовать союзы и предлоги.

## **Практические**

### *Начало поиска*

Хотя поиск в системе SciFinder возможен с одновременным использованием 7 концептов, обычно полезнее начать его с 2-х или 3-х, а затем, в зависимости от результатов, уточнить с помощью дополнительных терминов. Если при использовании 2-х или 3-х концептов получен очень большой набор ответов, целесообразно провести новый поиск, добавив 4-й концепт или применив ограничители опции *Advanced Search* для сужения поисковых критериев. Альтернативно, можно использовать опции *Analyze and Refine* для сужения большого набора ответов.

### *Использование предлогов для разделения концептов*

В системе SciFinder предлоги помогают идентифицировать концепты в тематическом поиске, и их следует ставить между всеми концептами в поисковом запросе. Концепт, являющийся фразой, должен вводиться в форме фразы, например, acid rain, absorption **of** iron **in** humans, liquid chromatograph **for** pyrogroloquinoline quinines. Предлоги не являются частью запроса. Предлоги and и or не рекомендованы для использования в системе SciFinder, поскольку совпадают с соответствующими логическими / булевыми операторами.

### *Использование опций Analyze и Refine для уточнения результатов поиска*

Опции *Analyze* и *Refine* (и *Categorize* в тематическом поиске) позволяют сфокусировать результаты поиска. Эти инструменты позволяют эффективно сузить поиск. Опции *Sort* и *Group* (в поиске по реакциям) также полезны для фокусировки набора ответов.

### *Использование усечений и множественных форм*

Для ускорения и облегчения поиска по ключевым словам система SciFinder автоматически ищет множественные формы, распространенные суффиксы и аббревиатуры. Например: вместе с clean находится cleaning, cleaned, cleaner, cleans и clean up; вместе с chromatography – chromatog., chromatograph и chromatographic; вместе с mouse – mouses and mice. В поисковых терминах или фразах следует использовать единственные формы. Исключение – использование индексных терминов (см. ниже): если они во множественной форме, то именно эта форма должна использоваться в поисковом запросе. **Enter**

### *Использование научного индексирования*

Один и тот же концепт может быть выражен / представлен несколькими способами. Поэтому при поиске в системе SciFinder следует использовать стандартизованные концепты (*Concepts*), они же индексные термины (*index terms*). Сотрудники CAS применяют научное индексирование (*Concepts*) к каждой библиографической записи. Использование индексных терминов делает поиск более полным и релевантным. Чтобы найти нужные, целесообразно сначала провести предварительный поиск, просмотреть *Reference Details* с релевантными ответами, выбрать релевантные концепты (*Concepts*) и провести поиск с этими

концептами как синонимами. Концепты должны быть использованы в той орфографии, к которой они используются в индексировании.

#### *Использование собственных синонимов*

Система SciFinder автоматически ищет распространенные синонимы и стандартные аббревиатуры в британском и американском написании. Целесообразно добавлять в поисковый запрос до 3-х синонимов каждого концепта. Вначале надо ввести нужные термины, затем добавить к каждому до 3-х синонимов, разделенных запятыми, заключая каждый набор в круглые скобки: например, *nanosponge (nanoporous material, nanostructured material)*. При этом можно использовать слова, которые, строго, синонимами не являются, например, *the analysis of pesticides in blackberry (blueberry, raspberry, strawberry)*.

#### *Множественный поиск и комбинирование результатов*

В ряде случаев, целесообразно провести поиск несколькими способами. Можно сохранить результаты первого поиска и затем объединить их с результатами последующих. Для этого используется закладка *References Toolbar*, где нужно кликнуть *Tools* и затем выбрать *Combine Answer Sets*. Можно объединить два набора ответов, вычесть один из другого, или создать набор, содержащий только записи, присутствующие в обоих исходных наборах. Альтернативно, сохранив каждый набор ответов, можно перейти к закладке *Saved Searches*, кликнуть *Saved Answer Sets* и выбрать наборы для комбинирования, осуществляемого посредством команды *Combine*.

#### **Советы Д. Д. Ридли / Ridley**

<b>Действие SciFinder</b>	<b>Совет</b>	<b>Комментарий</b>
<b><i>Концепты</i></b>		
Система использует предлоги, союзы и т.н. стоп-слова для определения отдельных концептов	В целом между терминами лучше использовать предлоги, вводя в поисковый запрос не более 6 терминов	Используйте запрос <i>measurement of mass of quarks</i> , а не <i>measurement mass quarks</i> . При необходимости применяйте инструменты уточнения набора ответов

Если слова в запросе не разделены предлогами, союзами или стоп-словами система идентифицирует их как единый концепт	Поиск по точной фразе почти неизменно пропускает важные ответы. Лучшая опция – тесно связанные термины. Многословный концепт требует, чтобы все слова были в одном предложении	Запрос <i>treatment of wastewater from gold mining</i> держит <i>gold mining</i> в одном предложении. Попробуйте сначала <i>treatment of wastewater with gold</i>
Система автоматически применяет усечение и единственные / множественные формы (за исключением некоторых случаев, когда введенный термин соответствует индексному заголовку Index Heading или названию вещества)	Это значительно сокращает количество терминов, которые нужно вводить, хотя иногда автоматическое усечение может привести к нерелевантным ответам. В этом случае следует использовать инструменты уточнения или выбрать релевантные ответы вручную	Запрос <i>damon</i> приведет к ответам, релевантным терминам <i>damongo</i> , <i>damonsil</i> , <i>damonia</i> . Опция <i>Analyze: CA Section Title</i> позволит уточнить ответы магнитными и оптическими исследованиями, например, относящимися к теории Damon–Eshbach
Система автоматически применяет синонимы, включая принятые в БД CAPlus и БД Medline акронимы и сокращения	Это существенно облегчает подготовку запроса и дает более полные результаты; при наличии нежелательных синонимов следует использовать инструменты уточнения или отобрать релевантные записи вручную	Запрос <i>sheep</i> даст ответы, содержащие <i>lamb(s)</i> и <i>ram(s)</i> , но также и <i>RAM</i> (т.е. <i>random access memory</i> ). Опция <i>Analyze: CA Section Title</i> позволит их удалить

---

### Опции

Система предоставляет список, указывая количество ответов, в которых концепты тесно связаны (обычно в одном предложении) или находятся в любом месте документа ( <i>anywhere in the reference</i> )	Идентифицированные SciFinder концепты выделяются жирным шрифтом и заключаются в кавычки. Следует проверить, те ли это концепты, что имелись в виду. Опции <i>closely associated</i> и <i>anywhere in the reference</i> предлагают альтернативы, относящиеся к близости терминов. Считается, что чем термины ближе, тем теснее они связаны	В БД CAPlus индексный заголовок ( <i>Index Heading</i> ) тесно связан с поясняющей текстовой фразой. Однако различные индексные заголовки не являются тесно связанными, даже если имеют одинаковую поясняющую фразу. Слова в заглавиях и в каждом предложении реферата – тесно связанные
---	---	--

Система также указывает количество ответов, в которых тесно связаны или находятся в любом месте документа комбинации определенных концептов	Если идентифицированы три концепта А, В, С, то указывается количество ответов для комбинаций А и В, А и С, В и С	Запрос <i>the reaction of propiolates with amines</i> дает ~20 ответов, где все 3 концепта тесно связаны. Ответов с 2 тесно связанными концептами <i>propiolates</i> и <i>amines</i> больше в ~2 раза, что может быть более информативным
Система указывает количество ответов и для индивидуальных концептов	Чем больше концептов, тем больше ограничений на ответы. Поэтому полезно просмотреть списки индивидуальных концептов, особенно если найдены документы, содержащие все концепты	Запрос <i>wastewater from gold mine tailings</i> дает относительно мало ответов для концепта <i>gold mine tailings</i> – пользователь сразу же идентифицирует релевантные результаты

---

### **Синонимы**

Система позволяет использовать альтернативные термины, заключив их в круглые скобки	Следует соблюдать осторожность с распределенными определениями / обстоятельствами (см. ниже)	Лучше использовать запрос <i>chiral reduction (chiral hydrogenation)</i> , чем <i>chiral reduction (hydrogenation)</i>
---	--	--

---

### **Логические / булевы операторы**

Система интерпретирует оператор <i>and</i> как требование, чтобы оба термина были где-либо в документе, а не как условие <i>closely associated</i>	Используйте <i>and</i> вместо предлога, чтобы не налагать условие <i>closely associated</i>	Лучше ввести запрос <i>mass of quarks</i> , а не <i>mass and quarks</i>
В некоторых случаях система может интерпретировать <i>and</i> как <i>or</i>	Следует вводить <i>or</i> между синонимами	Лучше ввести запрос <i>sugars or carbohydrates</i> , чем <i>sugars and carbohydrates</i>
Система интерпретирует оператор <i>or</i> как требование поиска любого термина	При работе с <i>Explore References: Research Topic</i> не имеет значения, помещаются ли альтернативные термины в круглые скобки или объединяются оператором <i>or</i>	Запросы <i>steroid analysis in blood of men or women</i> или <i>steroid analysis in blood of men (women, humans)</i> дадут одинаковые результаты



Система интерпретирует оператор <i>not</i> как исключаящий записи с соответствующими терминами	Запрос интерпретируется системой слева направо, поэтому наборы ответов зависят от места оператора	Запрос <i>tea and sugar not coffee</i> неэквивалентен запросу <i>tea not coffee and sugar</i>
Система не распределяет определения / обстоятельства	Слова, используемые как определения, нужно вводить с каждым термином, к которому они относятся	В запросе <i>chiral reduction (hydrogenation)</i> система идентифицирует концепты <i>chiral reduction</i> и <i>hydrogenation</i> . Поэтому запрос следует формулировать как <i>chiral reduction (chiral hydrogenation)</i>

---