

Информационное обеспечение научных исследований и разработок в области энергоэффективных каталитических технологий – базы данных и справочные системы

Учебный курс для магистрантов и аспирантов НОЦ ЭК

ПРОГРАММА

АННОТАЦИЯ

Одно из необходимых условий дальнейшего развития образования и науки – обеспечение современными информационными ресурсами. Предлагаемый учебный курс «Информационное обеспечение научных исследований и разработок в области энергоэффективных каталитических технологий – базы данных и справочные системы» направлен на включение в химическое образование на ФЕН НИУ-НГУ новейших информационных технологий. Курс создан в рамках концепции систематического обучения студентов-магистрантов и аспирантов ФЕН НИУ-НГУ адресному поиску химической информации, адаптированного к их специализациям и позволяющего вводить блоки информационных поисковых технологий в учебный процесс на протяжении всего периода обучения.

Предлагаемый курс состоит из нескольких разделов, посвященных информационно-поисковым системам (ИПС) и базам данных (БД) различного типа, содержащим химическую информацию – библиографическим (в том числе патентным), фактографическим, структурно-химическим (включая БД химических реакций). Такая структура курса позволяет последовательно и детально знакомить магистрантов и аспирантов ФЕН с основными мировыми БД и ИПС и учесть специфику поиска химической информации в области катализа.

Полученные знания помогут магистрантам и аспирантам при поиске и подборе литературного материала для магистерских и диссертационных работ, и позволят выработать подходы к поиску и обработке специализированной химической информации с использованием поисково-аналитических возможностей современных БД и ИПС, необходимые для последующей профессиональной деятельности. Навыки и умения, вырабатываемые в ходе занятий по данному курсу, являются необходимыми базовыми знаниями, которыми должны обладать квалифицированные специалисты в различных областях химии.

1. Организационно-методический раздел

1.1. Курс «Информационное обеспечение научных исследований и разработок в области энергоэффективных каталитических технологий – базы данных и справочные системы» реализуется в рамках направления подготовки 020100 «Химия» (магистр химии), относится к разделу стандарта специальные дисциплины, относится к вузовской компоненте.

Курс входит в магистерскую программу высшего профессионального образования (МП ВПО) «Энергоэффективный катализ» (020100.68.19).

Курс готовит специалиста квалификации «Магистр» в области катализа, инженерной химии, инноваций и предпринимательства к решению следующих профессиональных задач:

сбор и анализ научной литературы по заданной тематике;

владение современными компьютерными технологиями, применяемыми при сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований (ОК-5);

умение анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по предлагаемой научным руководителем теме и самостоятельно составлять план исследования (ПК-4);

умением принимать нестандартные решения (ОК-2);

способность анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения (ПК-5).

Решение этих задач необходимо для формирования у магистров химии умения компетентно формулировать проекты, связанные с использованием катализа для решения важнейших вопросов химической промышленности, энергетики, сырьевой базы и сохранения окружающей среды.

1.2. Цели и задачи курса

Курс «Информационное обеспечение научных исследований и разработок в области энергоэффективных каталитических технологий – базы данных и справочные системы» предназначен для магистрантов и аспирантов НОЦ ЭК, обучающихся на кафедре катализа и адсорбции ФЕН НГУ.

Основная цель изучения дисциплины – освоение методов поиска специализированной химической информации в области катализа и адсорбции; получение навыков работы с отечественными и зарубежными компьютерными базами данных химической информации, в том числе патентными.

Для достижения поставленной цели выделяются задачи углубленного анализа основных компьютерных ресурсов химической информации в области катализа и адсорбции, овладение современными приемами и методами получения релевантной информации.

1.3. Требования к уровню освоения содержания курса

По окончании изучения указанной дисциплины обучающийся должен:

иметь представление об основных мировых информационных ресурсах в области химии и науки о катализе;

знать методы и приемы поиска специализированной научной информации;

уметь находить релевантную научно-техническую информацию по тематике научной (курсовой, дипломной, диссертационной) работы.

1.4. Формы контроля

Итоговый контроль: зачет по результатам выполнения контрольных работ и проведения поиска по теме научной работы.

Текущий контроль: не предусмотрен.

2. Содержание дисциплины

2.1. Новизна курса

Курс, учитывающий специфику поиска химической информации в области катализа с использованием основных отечественных и зарубежных компьютерных информационных ресурсов, не имеет аналогов и является полностью новым для России. Актуальность курса связана с очень большим, и продолжающим стремительно увеличиваться, мировым информационным массивом в области химии и науки о катализе, что серьезно затрудняет поиск необходимых сведений, и появлением новых компьютерных информационных ресурсов. Умение самостоятельно работать с онлайн-овыми информационно-поисковыми системами и базами данных – важный аспект профессиональной подготовки современного химика, включающий ряд знаний и навыков. Для самообразования предмет слишком сложен. Полученные в рамках курса знания будут полезны при поиске литературных данных для курсовых, дипломных и диссертационных работ, а также в последующей профессиональной деятельности.

2.2. Тематический план курса (распределение часов)

Наименование разделов и тем	Количество часов				
	Лекции	Семинары	Лабораторные работы	Самостоятельная работа	Всего часов
1. Специфика химической информации. Проблемы поиска химической информации и пути их решения	2				2
2. Поиск информации в библиографических базах данных	4	2			6
3. Индексирование катализаторов в базах данных	2				2
4. Поиск информации в базах данных химических веществ	4	2			6
5. Поиск информации в базах данных химических реакций	2	2			4
Итого по курсу:	14	6			20

2.3 Содержание отдельных разделов и тем.

1. Специфика химической информации. Проблемы поиска химической информации и пути их решения.

- Быстрое возрастание объема и диверсификация источников информации.
- Специфика работы с химической информацией.
- Основные типы компьютерных баз данных (БД) – источников химической информации (библиографические, БД веществ, БД реакций, фактографические БД, справочники).
- Характеристика основных источников информации. Информационно-поисковые системы, платформы и сети баз данных (SciFinder, Reaxys, Web of Knowledge, SciVerse, STN International и др.).

2. Поиск в библиографических базах данных

- Библиографические базы данных: Chemical Abstracts (CAPlus) на платформе SciFinder; Science Citation Index Expanded (Web of Science), Scopus (SciVerse).
- Основные понятия / терминология: запись БД, поля / индексы, основной и специализированные индексы, операторы булевой логики и операторы близости, символы усечения и маскирования.
- Поиск по автору, организации, использование других специализированных индексов (год, тип, язык оригинальной публикации).
- Анализ информации, в том числе по цитированию.

3. Индексирование катализаторов в Chemical Abstracts Service (CAS)

- Охват катализаторов и катализа в CAS.
- Отнесение публикаций к тематическим рубрикам. Политика индексирования катализаторов: индексирование веществ и предметных концептов. Тезаурусы. Роли веществ: катализатор, реагент / реагент, продукт и др.
- Особенности индексирования веществ, используемых в качестве промышленных катализаторов (металлы, соли и оксиды металлов, смешанные оксиды, гетерополикислоты, алюмооксаны, цеолиты, энзимы).
- Каталитическая информация в патентах.

4. Поиск информации в базах данных веществ

- Базы данных веществ: Registry (SciFinder), Beilstein и Gmelin (Reaxys), химические каталоги, нормативные перечни.
- Регистрационные номера веществ CAS.
- Поиск веществ по молекулярным (суммарным) формулам. Система Хилла. Регистрация многокомпонентных веществ (соли, полимеры).
- Поиск веществ по названиям (систематическим и тривиальным).
- Поиск веществ по химической структуре (фрагменту структуры).
- Нахождение свойств веществ. Спектральная информация. Расчетные и экспериментальные свойства.

5. Поиск информации в базах данных химических реакций

- Базы данных реакций: CASReact (Scifinder), Reaxys.
- Различия в индексировании катализаторов между БД CAplus и CASReact.
- Роли веществ в реакции: реагент (реагент), растворитель, катализатор.

2.4. Перечень примерных контрольных вопросов и заданий для самостоятельной работы (см. раздел 3.2).

3. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

3.1. Темы рефератов или курсовых работ: не предусмотрены.

3.2. Образцы вопросов для подготовки к зачету:

1. Провести поиск информации по автору.
2. Найти патенты Института катализа 2000-2010 гг.
3. Выявить в патентах фирмы Exxon катализаторы, наиболее часто используемые для производства изотактического полипропилена.
4. Найти европейские патенты по церий-обменным цеолитам как катализаторам.
5. Найти основные компании, патентующие гетерополикислотные катализаторы, содержащие молибден и кремний.
6. Найти патенты последних лет компании Dow по катализаторам полимеризации.
7. Найти патенты на катализаторы, содержащие оксиды Fe-Cr-V.
8. Провести поиск информации по теме курсовой (дипломной) работы.

3.3. Список основной и дополнительной литературы

Основная литература

1. Зибарева И.В. Химические базы данных международной сети научно-технической информации STN International // Известия АН. Сер. химическая. 2012. № 3. С. 679-716.
2. Потапов В.М., Розенман М.И., Кочетова Э.К., Покровский Б.И. Поиск химической информации. Справочное руководство по использованию традиционных и компьютерных средств. М: Изд-во МГУ, 1990. 174 с.
3. Ridley D.D. Information Retrieval: SciFinder / 2nd Ed. John Wiley & Sons, 2009. 214 pp.
4. Краткая инструкция по работе с базой данных Reaxys. URL: http://elsevierscience.ru/files/pdf/Reaxys_Guide_Russ.pdf
5. Хуторецкий В.М. Общие представления о поиске научно-технической информации в режиме онлайн. Базы данных STN International в теледоступе. М: РХТУ, 2000. 42 с.
6. Зибарева И.В. Поиск химической информации в научно-технических базах данных: Учебно-методический комплекс. 2012. URL: <http://lib.nsu.ru:8080/xmlui/handle/nsu/673>
7. Зибарева И.В. Поиск химической информации в научно-технических базах данных: Электронно-лекционный курс. 2013. URL: <http://lib.nsu.ru:8080/xmlui/handle/nsu/672>

Дополнительная литература

8. Ridley D.D. Online Searching: A Scientist's Perspective. A Guide for the Chemical and Life Sciences. Chichester: John Wiley & Sons, 1996. 344 pp.
9. Бобров Л.К. Мировая индустрия онлайн-баз данных // Вычислительные технологии. 1997. Т. 2. № 3. С. 7-24.
10. Weisgerber D.W. Chemical Abstracts Service chemical Registry system: history, scope, and impacts // Journal of the American Society for Information Science. 1997. V. 48. N 4. P. 349-360.
11. Buntrock R.E. Chemical Registries – in the forth decade of service // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. 2001. V. 41. N 2. P. 259-263.
12. Powell E.C. A history of Chemical Abstracts Service, 1907-1998 // Science and Technology Libraries. 2000. V. 18. N 4. P. 93-110.
13. Shively E. CAS patent information: then and now // World Patent Information. 2004. V. 26. P. 57-59.
14. Ефременкова В.М., Круковская Н.В. 100-летний юбилей Chemical Abstracts Service: факты и цифры // Научно-техническая информация. Сер. 1. 2007. № 12. С. 24-29.
15. Parlevliet F., Eijsbouts S. Research on sulfidic catalysts: match between academia and industry // Catalysis Today. 2008. V. 130. P. 254–264.
16. Simmons E.S. The grammar of Markush structure searching: vocabulary vs. syntax // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. 1991. V. 31. 1. P. 45–53.

17. Ebe T., Sanderson K.A., Wilson P.S. The Chemical Abstracts Service generic chemical (Markush) structure storage and retrieval capability. 2. The MarPat file // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. 1991. V. 31. N 1. P. 31-36.
18. Adams S. The Beilstein Handbook as a source of pre-1960 chemical patent literature // World Patent Information. 1999. V. 21. N 2. P. 75-81.
19. Jochum C. The Beilstein Information System is not a reaction database, or is it? // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. 1994. V. 34. N 1. P. 71-3.
20. Barth A. Status and future developments of reaction databases and online retrieval systems // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. 1990. V. 30. N 4. P. 384-393.
21. Blake J.E., Dana R.C. CASReact: more than a million reactions // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. 1990. V. 30. N 4. P. 394-399.
22. Dawson P.H., Jacobs D.L., Yang S.Q. An Online Tutorial for SciFinder for Organic Chemistry Classes // Science & Technology Libraries. 2010. V. 29. N 4. P. 298-306.
23. Ferrer-Vinent I.J. Teaching SciFinder Basics to Organic Chemistry Students // Science & Technology Libraries. 2012. V. 31. N 2. P. 164-179.
24. Garritano J.R. Evolution of SciFinder, 2011-2013: New Features, New Content // Science & Technology Libraries. 2013. V. 32. N 4. P. 346-371.
25. Ridley D.D. Strategies for chemical reaction searching in SciFinder // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. 2000. V. 40. N 5. P. 1077-1084.
26. Wagner A.B. Finding physical properties of chemicals: a practical guide for scientists, engineers, and librarians // Science and Technology Libraries. 2001. V. 21. N. 3. P. 27-45.
27. Westhaus U., Droege T., Sass R. DETherm – a thermophysical property database // Fluid Phase Equilibria. 1999. V. 158-160. P. 429-435.
28. Smith A.L. Finding chemical information through Citation Index searching // Journal of Chemical Education. 1999. V. 76. N 8. P. 1153-1157.
29. Badger E.W., Siems C.-D. Host-enhanced chemical indexing in technical databases // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. 1989. V. 29. N. 4. P. 279-283.
30. Кузьмичев А.Е. Современные источники патентной информации // Российский химический журнал. 2000. Т. XLIV. № 5. С. 94-97.

Программу разработала, к.п.н.

И. В. Зибарева