

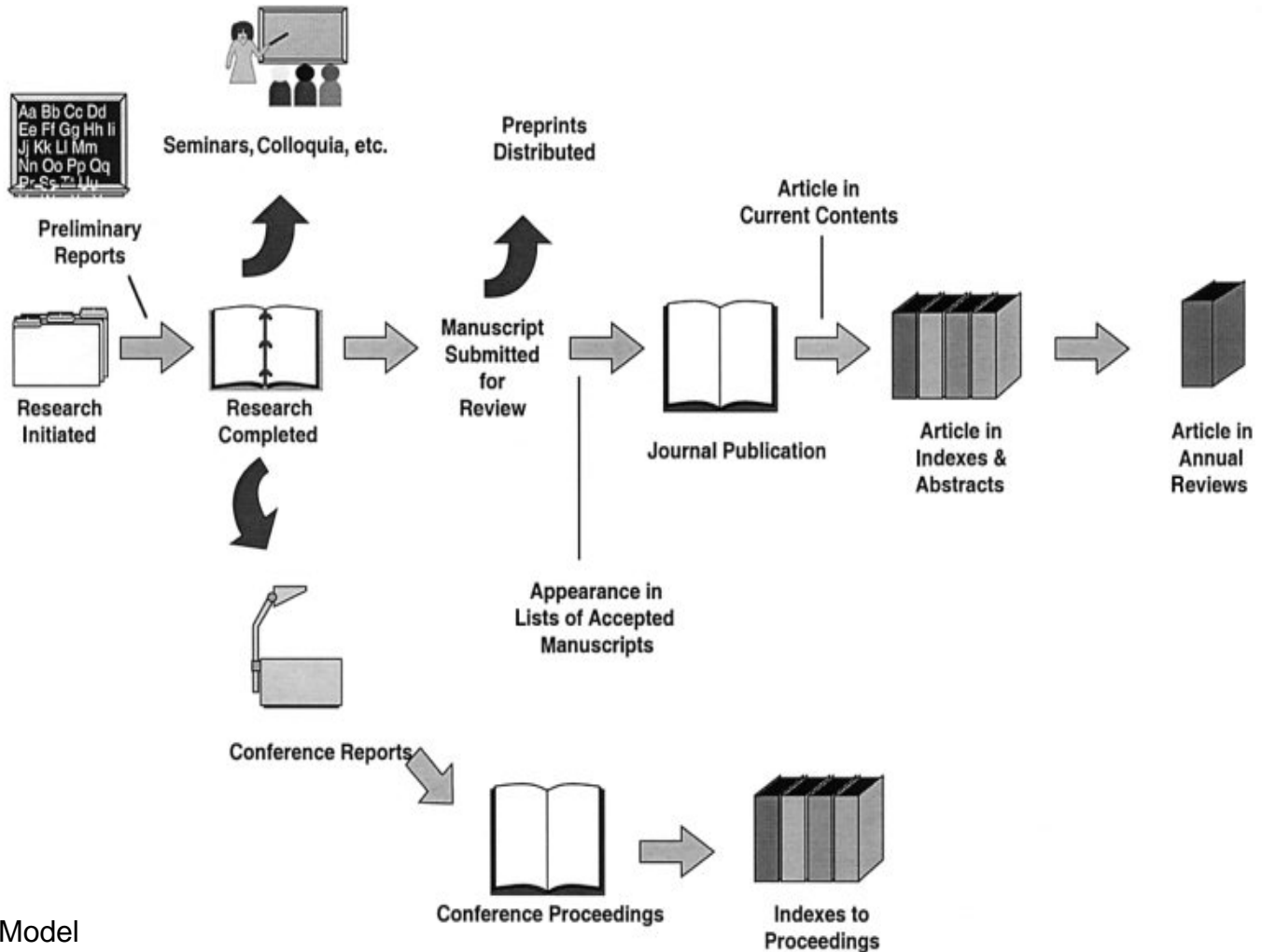


La recherche d'information en chimie

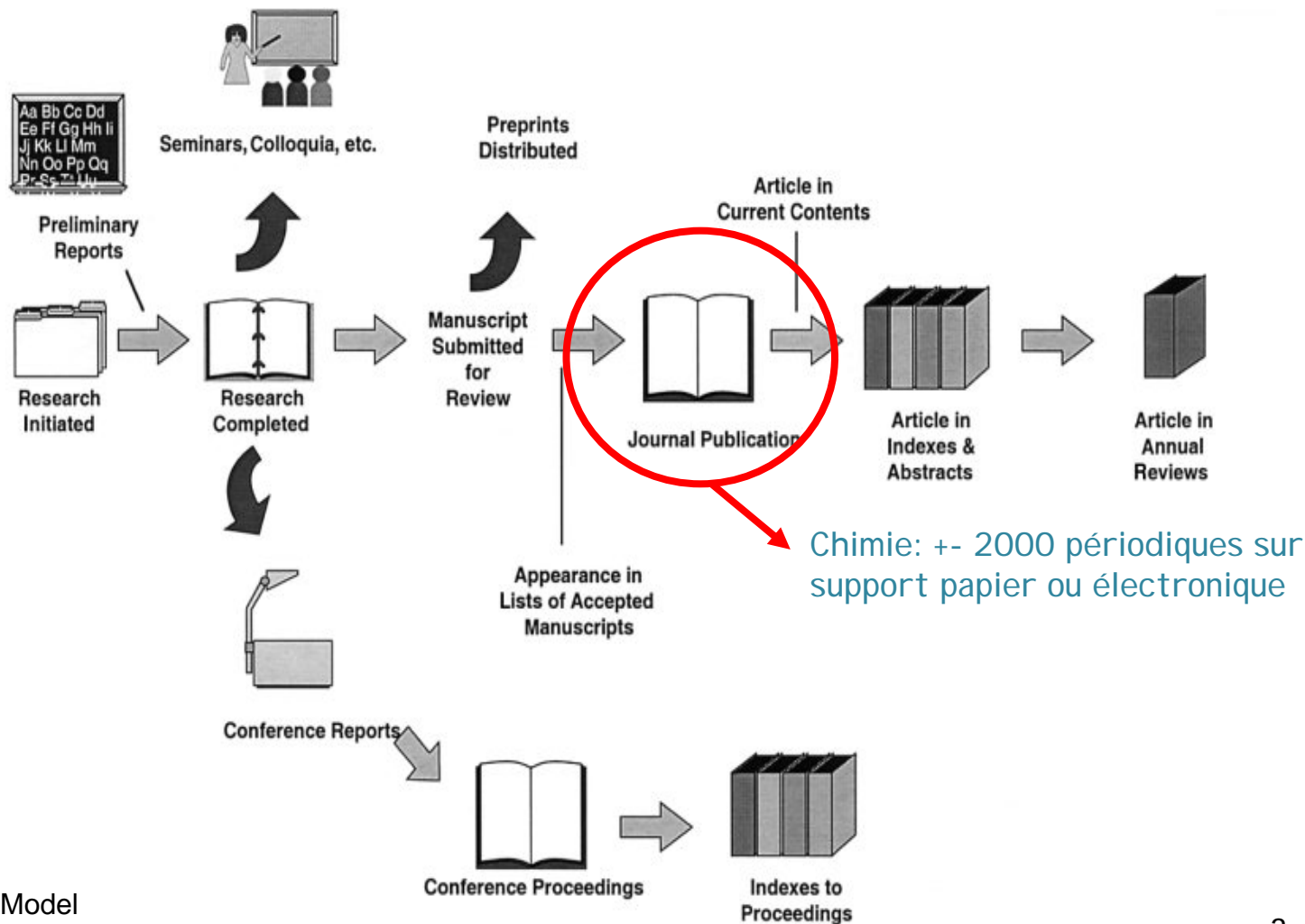
Dominique Lerinckx
dlerinck@ulb.ac.be

ULB – Bibliothèque
des Sciences et Techniques
bst@ulb.ac.be
<http://www.bib.ulb.ac.be/BST/>

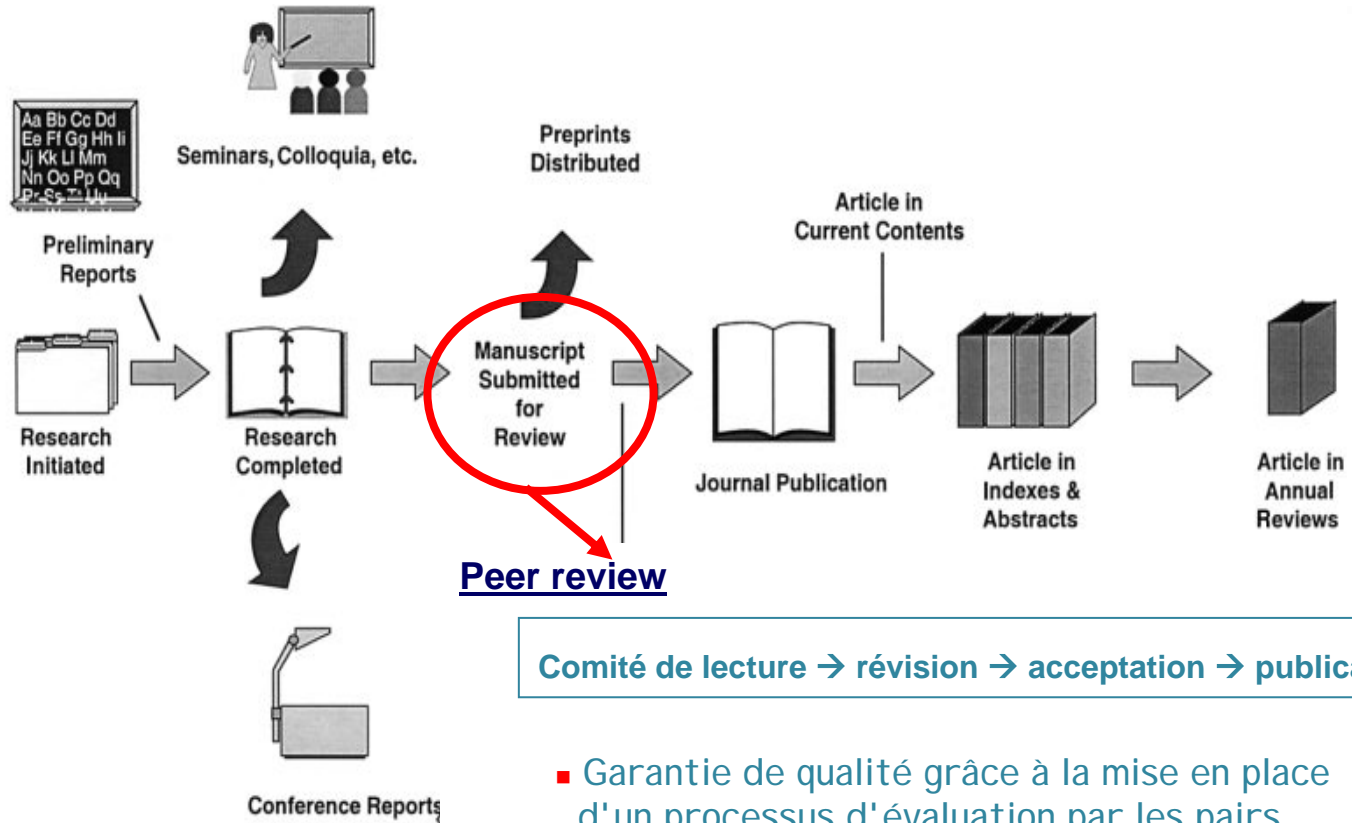
Modèle de diffusion de la recherche



Modèle de diffusion de la recherche

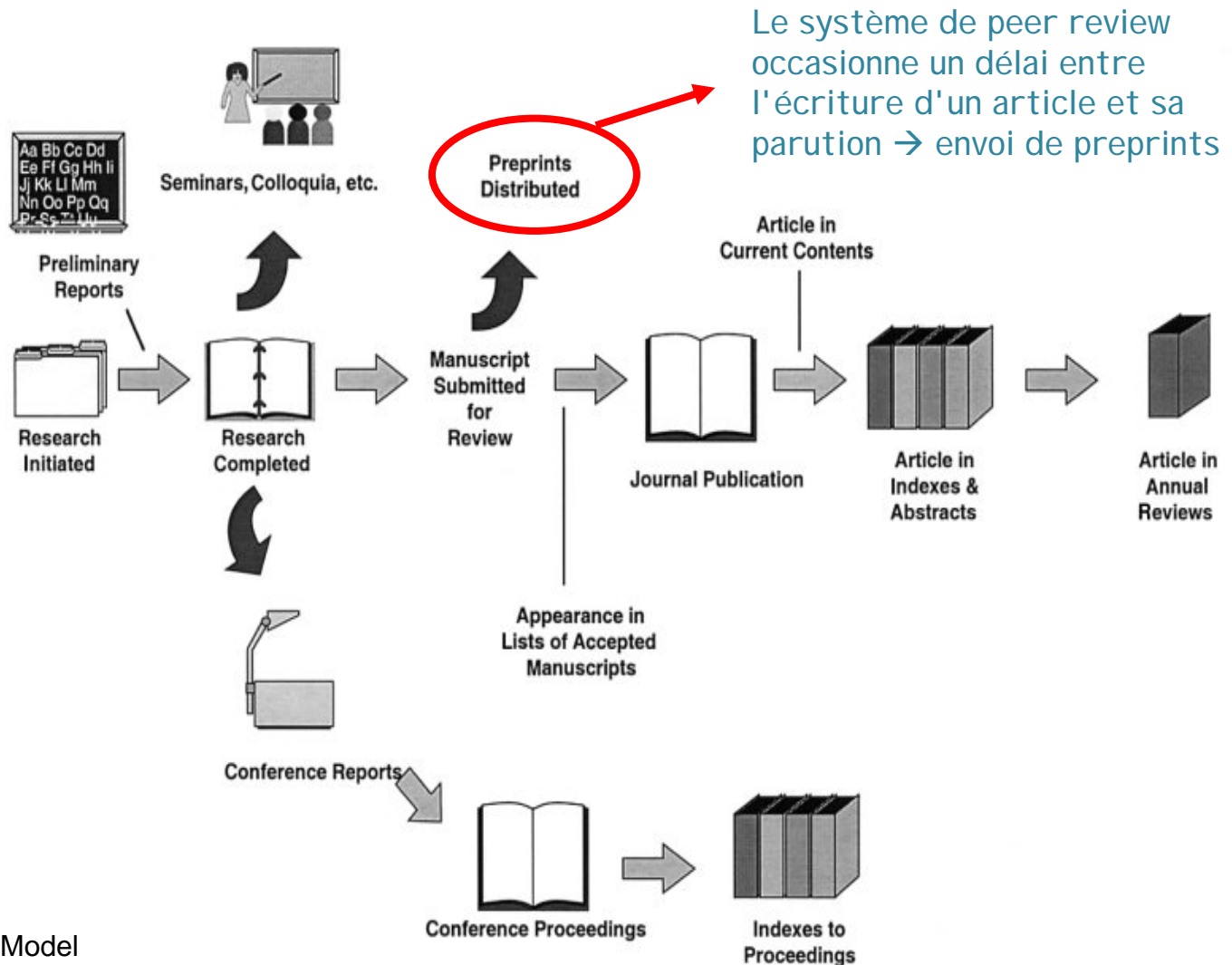


Contrôle de qualité d'un périodique à priori: le « peer review »



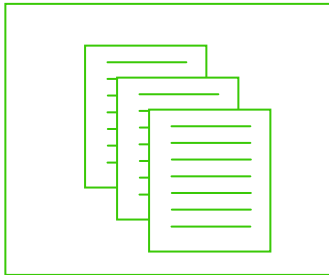
- Garantie de qualité grâce à la mise en place d'un processus d'évaluation par les pairs
- Permet le maintien de la politique éditoriale

Les « preprints » ou « tirés à part »

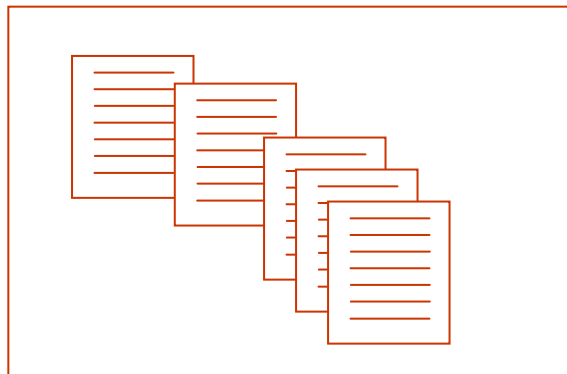
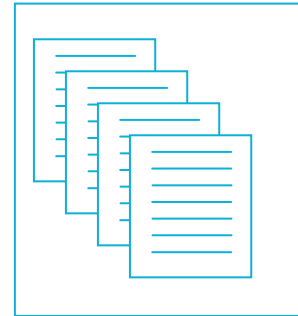


Le contrôle de qualité d'un périodique à posteriori:

Périodique V



Périodique B

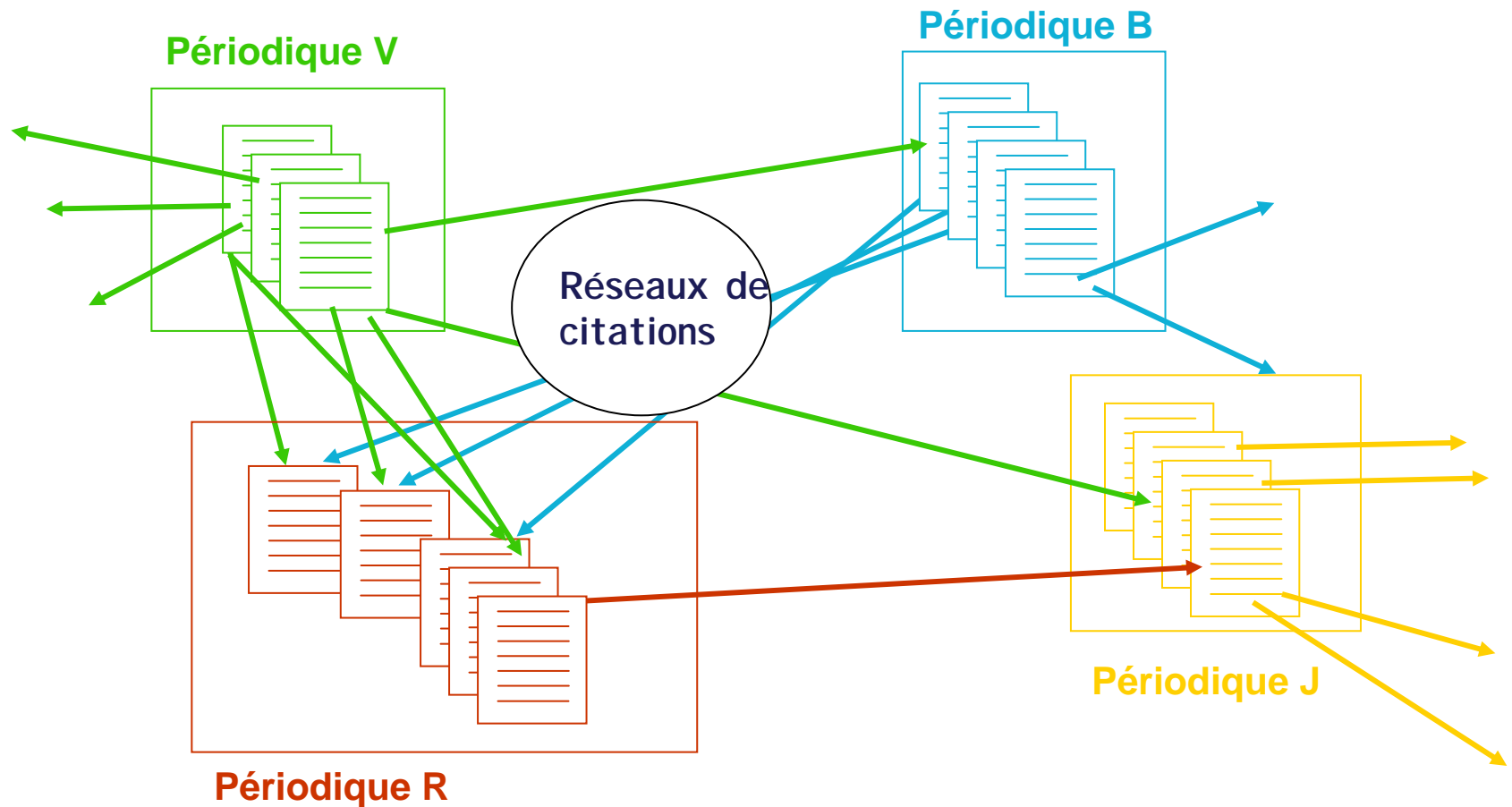


Périodique R



Périodique J

Le contrôle de qualité d'un périodique à posteriori: Les réseaux de citations





Le contrôle de qualité d'un périodique à posteriori: « Impact factors »

"Impact factor" ou facteur d'impact

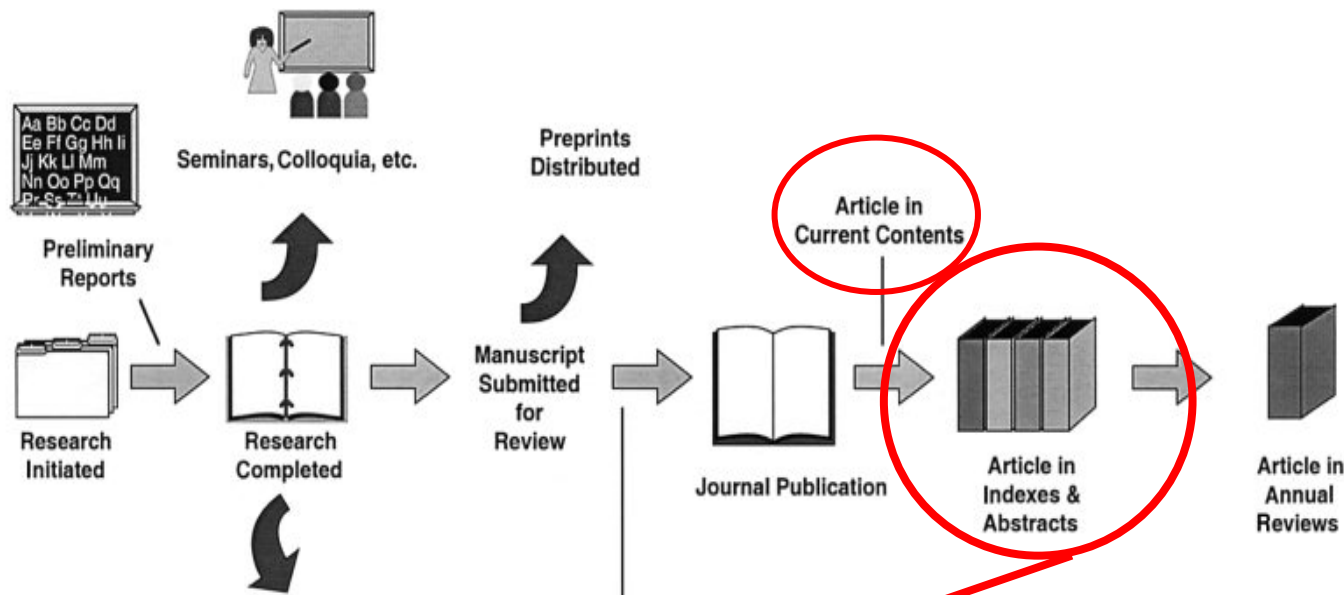
Publié par ISI (Institute for Scientific Information) dans le Journal of Citation Reports (JCR):

- valeur numérique basée sur les réseaux de citations établis par les chercheurs eux-mêmes
- fournit des données statistiques permettant de juger de l'importance relative des périodiques entre eux
- permet d'identifier les périodiques dans lesquels il est intéressant de publier sur base de la qualité et du domaine couvert par cette revue
- actuellement, l'indicateur bibliométrique le plus utilisé pour évaluer la recherche (FNRS)



Cette valeur n'a de sens que dans un même domaine de recherche car les habitudes de publication sont différentes entre communauté de chercheurs

Les index et abstracts

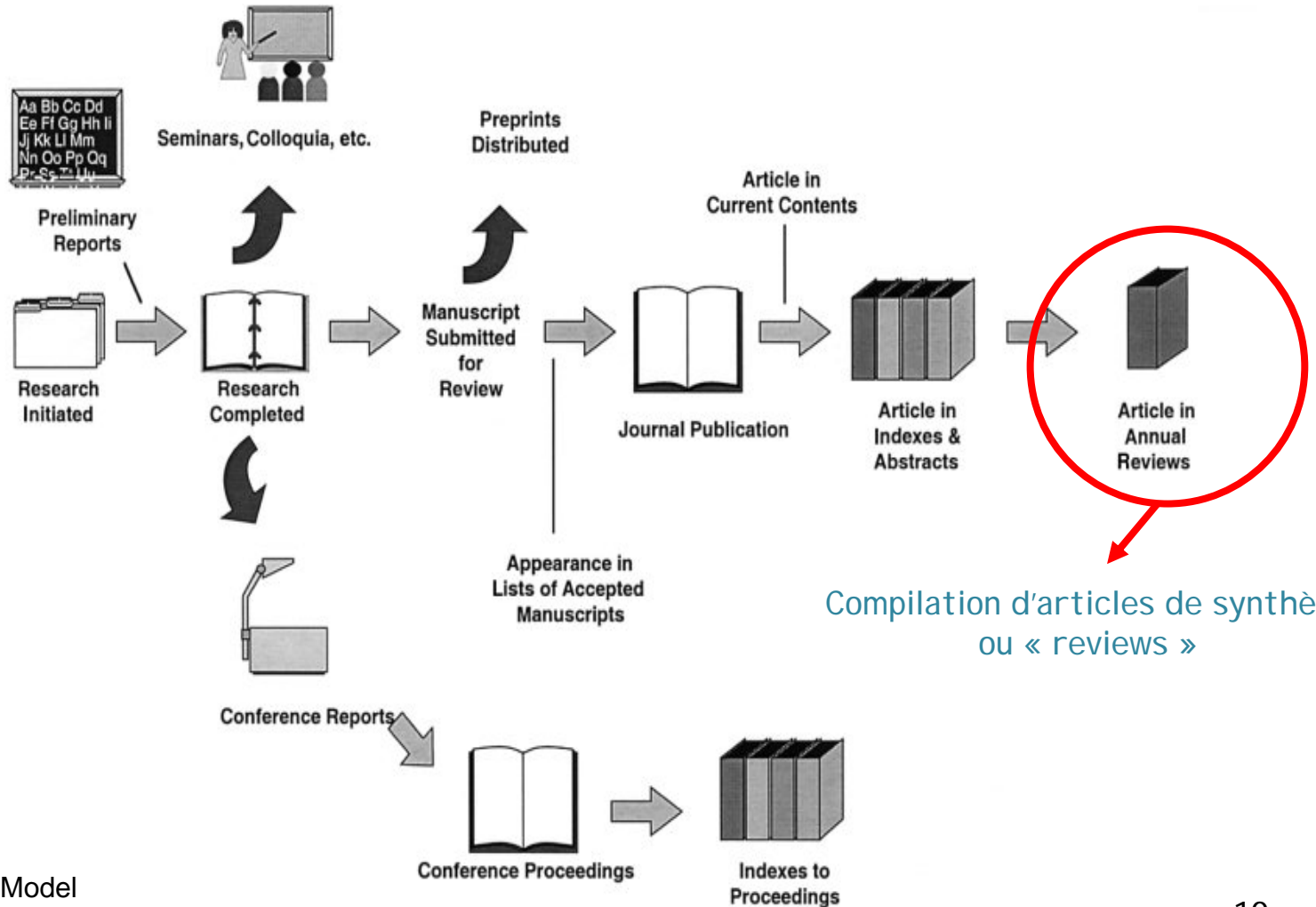


Bases de données ou bibliographies

Chaque base de données se différencie par :

- le niveau de spécialisation dans un domaine: bdd généraliste de mise à jour (Current Contents) ou plus pointue (chimie, chimie analytique...)
- le type de documents indexés: brevets, thèses...
- le type de données extraites des documents indexés: répertoire de substances, schémas réactionnels

Les articles de synthèse ou « reviews »



Compilation d'articles de synthèse
ou « reviews »



La recherche d'information en chimie: Les différents types de données indexées

Bibliographie

- ✓ sujet
- ✓ nom d'auteur
- ✓ substance

Texte complet

- ✓ auteur
- ✓ réf. d'article
- ✓ sujet

Répertoire

- ✓ nom chimique
- ✓ formule moléculaire
- ✓ structure

Citation

- ✓ auteur
- ✓ réf. d'article

Commerciales

- ✓ prix
- ✓ société...

Propriétés

- ✓ valeur numérique
- ✓ spectre

Réaction

- ✓ réactif
- ✓ produit
- ✓ catalyseur

Les bibliographies « papier » ou bases de données bibliographiques

Chemical
Abstracts

Science
Citation Index

Bibliographie

← CAPIus
← Current Contents
Web of Science...

Texte complet

✓ auteur
✓ réf. d'article
✓ sujet

Répertoire

✓ nom chimique
✓ formule moléculaire
✓ structure

Citation

✓ auteur
✓ réf. d'article

Commerciales

✓ prix
✓ société...

Propriétés

✓ valeur numérique
✓ spectre

Réaction

✓ réactif
✓ produit
✓ catalyseur



Section qui indique le sujet général de l'article

Bibliographic Information

Chemistry of heterocyclic compounds. Part 80. a-Methyl functionalization of electron-poor heterocycles. Chloromethyl derivatives of 2,2'-bipyridines. Newkome, George R.; Fuckett, Wallace E.; Kiefer, Garry E.; Gupta, Vinod D.; Xia, Yuanjiao; Coreil, Mark; Hackney, Melisa A. Dep. Chem., Louisiana State Univ., Baton Rouge, LA, USA. Journal of Organic Chemistry (1982), 47(21), 4116-20. CODEN: JOCEAH ISSN: 0022-3263. Journal written in English. CAN 97:162771 AN 1982:562771 CAPLUS

Abstract

Improved syntheses of I-III were developed. Thus, coupling of 2-bromo-6-methylpyridine, conversion into the di-N-oxide, diacetoxylation with Ac₂O, hydrolysis to the diol with anhyd. K₂CO₃ in EtOH, and reaction with SOCl₂ gave I.

Indexing -- Section 27-16 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom)

5315-25-3

Role: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)

(coupling reaction of)

.....

74065-64-8P

82740-64-5P

82740-65-6P

82740-68-9P

82740-72-5P

82740-75-8P

82740-76-9P

Role: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)

(prepn. of)

82740-67-8P

82740-70-3P

Role: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)

(prepn. and hydrolysis of)



Titre de l'article



Bibliographic Information

Chemistry of heterocyclic compounds. Part 80. a-Methyl functionalization of electron-poor heterocycles. Chloromethyl derivatives of 2,2'-bipyridines. Newkome, George R.; Puckett, Wallace E.; Kiefer, Garry E.; Gupta, Vinod D.; Xia, Yuanjiao; Coreil, Mark; Hackney, Melisa A. Dep. Chem., Louisiana State Univ., Baton Rouge, LA, USA. Journal of Organic Chemistry (1982), 47(21), 4116-20. CODEN: JOCEAH ISSN: 0022-3263. Journal written in English. CAN 97:162771 AN 1982:562771 CAPLUS

Abstract

Improved syntheses of I-III were developed. Thus, coupling of 2-bromo-6-methylpyridine, conversion into the di-N-oxide, diacetylation with Ac₂O, hydrolysis to the diol with anhyd. K₂CO₃ in EtOH, and reaction with SOCl₂ gave I.

Indexing -- Section 27-16 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom))

5315-25-3

Role: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)

(coupling reaction of)

.....

74065-64-8P

82740-64-5P

82740-65-6P

82740-68-9P

82740-72-5P

82740-75-8P

82740-76-9P

Role: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)

(prepn. of)

82740-67-8P

82740-70-3P

Role: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)

(prepn. and hydrolysis of)



Auteurs de l'article



Bibliographic Information

Chemistry of heterocyclic compounds. Part 80. a-Methyl functionalization of electron-poor heterocycles. Chloromethyl derivatives of 2,2'-bipyridines. Newkome, George R.; Puckett, Wallace E.; Kiefer, Garrv E.; Gupta, Vinod D.; Xia, Yuanjiao; Coreil, Mark; Hackney, Melisa A. Dep. Chem., Louisiana State Univ., Baton Rouge, LA, USA. Journal of Organic Chemistry (1982), 47(21), 4116-20. CODEN: JOCEAH ISSN: 0022-3263. Journal written in English. CAN 97:162771 AN 1982:562771 CAPLUS

Abstract

Improved syntheses of I-III were developed. Thus, coupling of 2-bromo-6-methylpyridine, conversion into the di-N-oxide, diacetylation with Ac₂O, hydrolysis to the diol with anhyd. K₂CO₃ in EtOH, and reaction with SOCl₂ gave I.

Indexing -- Section 27-16 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom))

5315-25-3

Role: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)

(coupling reaction of)

.....

74065-64-8P

82740-64-5P

82740-65-6P

82740-68-9P

82740-72-5P

82740-75-8P

82740-76-9P

Role: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)

(prepn. of)

82740-67-8P

82740-70-3P

Role: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)

(prepn. and hydrolysis of)



Lieu ou s'est déroulée la recherche

Bibliographic Information

Chemistry of heterocyclic compounds. Part 80. a Methyl functionalization of electron-poor heterocycles. Chloromethyl derivatives of 2,2'-bipyridines. Newkome, George R.; Puckett, Wallace E.; Kiefer, Garry E.; Gupta, Vinod D.; Xia, Yuanjiao; Coreil, Mark; Hackney, Melisa A. Dep. Chem., Louisiana State Univ., Baton Rouge, LA, USA. Journal of Organic Chemistry (1982), 47(21), 4116-20. CODEN: JOCEAH ISSN: 0022-3263. Journal written in English. CAN 97:162771 AN 1982:562771 CAPLUS

Abstract

Improved syntheses of I-III were developed. Thus, coupling of 2-bromo-6-methylpyridine, conversion into the di-N-oxide, diacetylation with Ac₂O, hydrolysis to the diol with anhyd. K₂CO₃ in EtOH, and reaction with SOCl₂ gave I.

Indexing -- Section 27-16 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom)

5315-25-3

Role: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)

(coupling reaction of)

.....

74065-64-8P

82740-64-5P

82740-65-6P

82740-68-9P

82740-72-5P

82740-75-8P

82740-76-9P

Role: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)

(prepn. of)

82740-67-8P

82740-70-3P

Role: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)

(prepn. and hydrolysis of)



Titre de la revue dans laquelle l'article a été publié,
volume, pages...

Bibliographic Information

Chemistry of heterocyclic compounds. Part 80. a-Methyl functionalization of electron-poor heterocycles. Chloromethyl derivatives of 2,2'-bipyridines. Newkome, George R.; Puckett, Wallace E.; Kiefer, Garry E.; Gupta, Vinod D.; Xia, Yuanjiao; Coreil, Mark; Hackney, Melisa A. Dep. Chem., Louisiana State Univ., Baton Rouge, LA, USA. Journal of Organic Chemistry (1982), 47(21), 4116-20. CODEN: JOCEAH ISSN: 0022-3263. Journal written in English. CAN 97:162771 AN 1982:562771 CAPLUS

Abstract

Improved syntheses of I-III were developed. Thus, coupling of 2-bromo-6-methylpyridine, conversion into the di-N-oxide, diacetylation with Ac₂O, hydrolysis to the diol with anhyd. K₂CO₃ in EtOH, and reaction with SOCl₂ gave I.

Indexing -- Section 27-16 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom))

5315-25-3

Role: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)

(coupling reaction of)

.....

74065-64-8P

82740-64-5P

82740-65-6P

82740-68-9P

82740-72-5P

82740-75-8P

82740-76-9P

Role: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)

(prepn. of)

82740-67-8P

82740-70-3P

Role: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)

(prepn. and hydrolysis of)



Langue de l'article

Bibliographic Information

Chemistry of heterocyclic compounds. Part 80. a-Methyl functionalization of electron-poor heterocycles. Chloromethyl derivatives of 2,2'-bipyridines. Newkome, George R.; Puckett, Wallace E.; Kiefer, Garry E.; Gupta, Vinod D.; Xia, Yuanjiao; Coreil, Mark; Hackney, Melisa A. Dep. Chem., Louisiana State Univ., Baton Rouge, LA, USA. Journal of Organic Chemistry (1982), 47(21), 4116-20. CODEN: JOCEAH ISSN: 0022-3263. Journal written in English. CAN 97:162771 AN 1982:562771 CAPLUS

Abstract

Improved syntheses of I-III were developed. Thus, coupling of 2-bromo-6-methylpyridine, conversion into the di-N-oxide, diacetylation with Ac₂O, hydrolysis to the diol with anhyd. K₂CO₃ in EtOH, and reaction with SOCl₂ gave I.

Indexing -- Section 27-16 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom)

5315-25-3

Role: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)

(coupling reaction of)

.....

74065-64-8P

82740-64-5P

82740-65-6P

82740-68-9P

82740-72-5P

82740-75-8P

82740-76-9P

Role: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)

(prepn. of)

82740-67-8P

82740-70-3P

Role: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)

(prepn. and hydrolysis of)

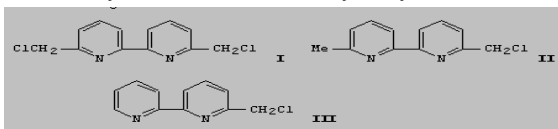
Résumé

Bibliographic Information

Chemistry of heterocyclic compounds. Part 80. a-Methyl functionalization of electron-poor heterocycles. Chloromethyl derivatives of 2,2'-bipyridines. Newkome, George R.; Puckett, Wallace E.; Kiefer, Garry E.; Gupta, Vinod D.; Xia, Yuanjiao; Coreil, Mark; Hackney, Melisa A. Dep. Chem., Louisiana State Univ., Baton Rouge, LA, USA. Journal of Organic Chemistry (1982), 47(21), 4116-20. CODEN: JOCEAH ISSN: 0022-3263. Journal written in English. CAN 97:162771 AN 1982:562771 CAPLUS

Abstract

Improved syntheses of I-III were developed. Thus, coupling of 2-bromo-6-methylpyridine, conversion into the di-N-oxide, diacetoxylation with Ac₂O, hydrolysis to the diol with anhyd. K₂CO₃ in EtOH, and reaction with SOCl₂ gave I.



74065-64-8P

82740-64-5P

82740-65-6P

82740-68-9P

82740-72-5P

82740-75-8P

82740-76-9P

Role: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
(prepn. of)

82740-67-8P

82740-70-3P

Role: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)
(prepn. and hydrolysis of)

Résumé toujours en anglais quelle que soit la langue de l'article + dessin des molécules (parfois différent de celui de l'article original)

Vocabulaire contrôlé ou termes d'indexation

Bibliographic Information

Chemistry of heterocyclic compounds. Part 80. a-Methyl functionalization of electron-poor heterocycles. Chloromethyl derivatives of 2,2'-bipyridines. Newkome, George R.; Puckett, Wallace E.; Kiefer, Garry E.; Gupta, Vinod D.; Xia, Yuanjiao; Coreil, Mark; Hackney, Melisa A. Dep. Chem., Louisiana State Univ., Baton Rouge, LA, USA. Journal of Organic Chemistry (1982), 47(21), 4116-20. CODEN: JOCEAH ISSN: 0022-3263. Journal written in English. CAN 97:162771 AN 1982:562771 CAPLUS

Abstract

Improved syntheses of I-III were developed. Thus, coupling of 2-bromo-6-methylpyridine, conversion into the di-N-oxide, diacetylation with Ac₂O, hydrolysis to the diol with anhyd. K₂CO₃ in EtOH, and reaction with SOCl₂ gave I.

Indexing -- Section 27-16 (Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom)

5315-25-3

Role: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)

(coupling reaction of)

.....

74065-64-8P

82740-64-5P

82740-65-6P

82740-68-9P

82740-72-5P

82740-75-8P

82740-76-9P

Role: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)

(prepn. of)

82740-67-8P

82740-70-3P

Role: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation); RACT (Reactant or reagent)

(prepn. and hydrolysis of)

→ Liste des RN (Registry Number) correspondants
aux molécules dont il est question dans l'article

→ Circonstances qui amènent l'auteur
à parler de ces substances
(« Role » joué par ces substances)



Termes d'indexation

RN: registry number

- clé d'identification d'une substance lors de toute recherche dans une base de données CAS
- permet d'identifier de manière univoque une substance:
 - synonymes
 - élimination des sels, esters, dérivés substitués...
 - évolution de la nomenclature CA (12CI , 13CI ...)
 - RN utilisé comme terme d'indexation dans les bases de données bibliographiques

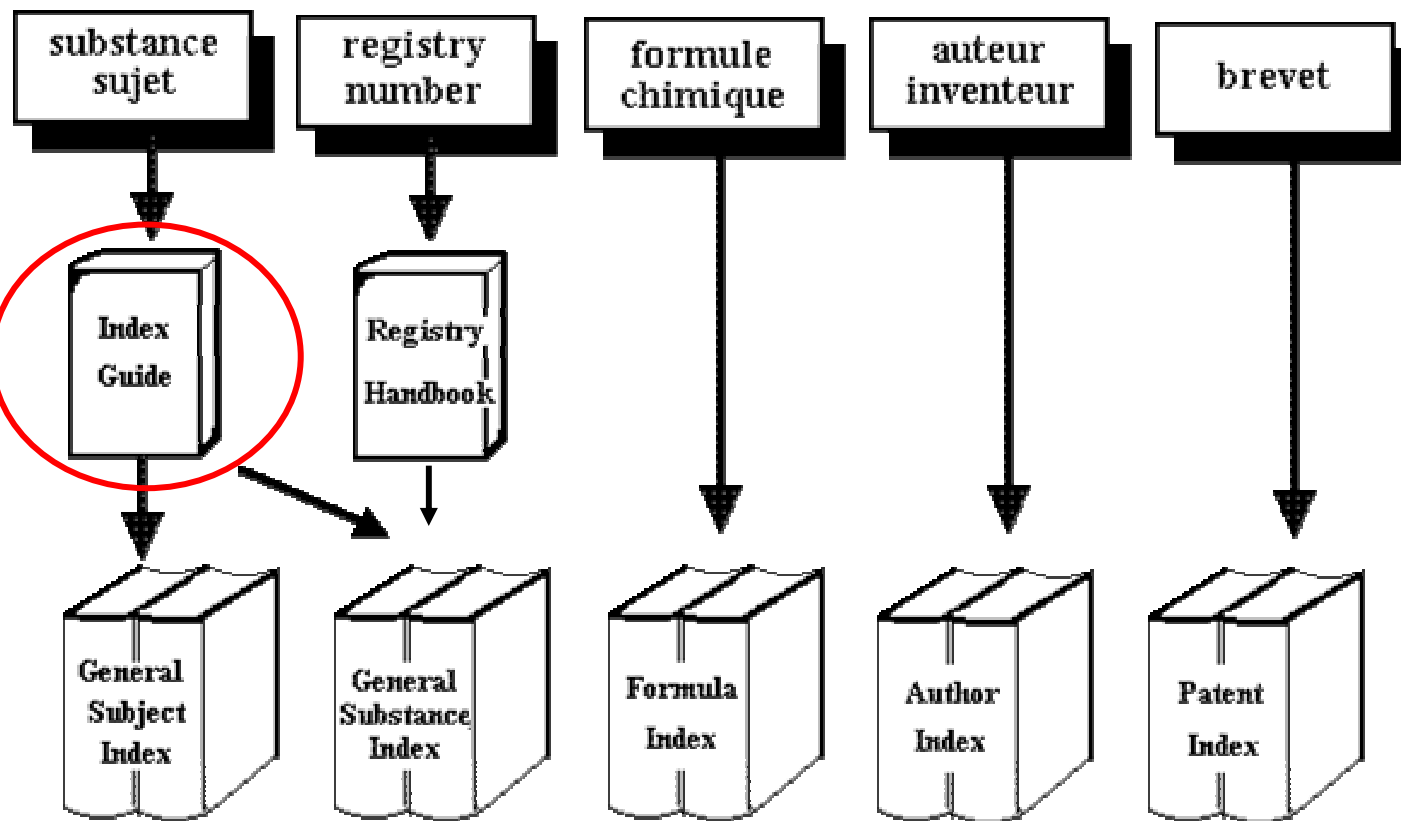
Rôles

- codes décrivant dans quel contexte on parle d'un composé (ex: synthèse, propriétés...)

Mot-clés

- Terminologie contrôlée pour décrire le(s) sujet(s) de l'article

Le Chemical Abstracts papier 1908-



Vocabulaire
contrôlé

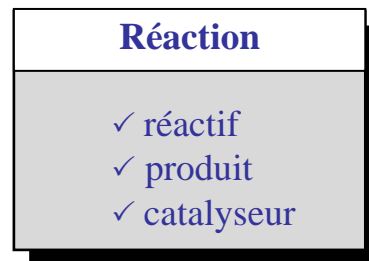
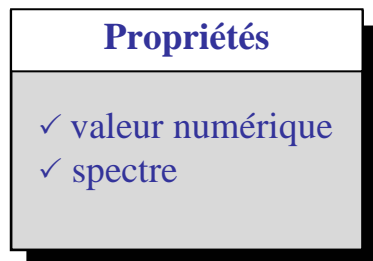
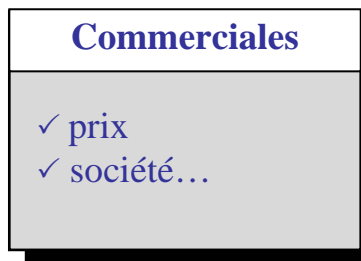
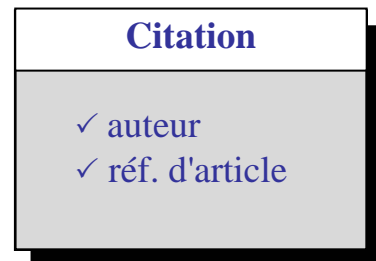
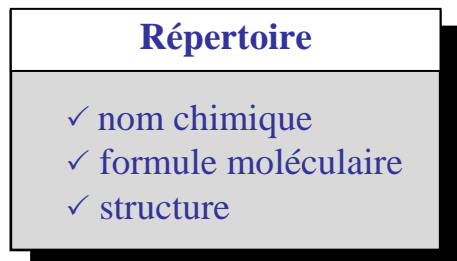
Outils de localisation d'un périodique et du texte intégral de l'article original



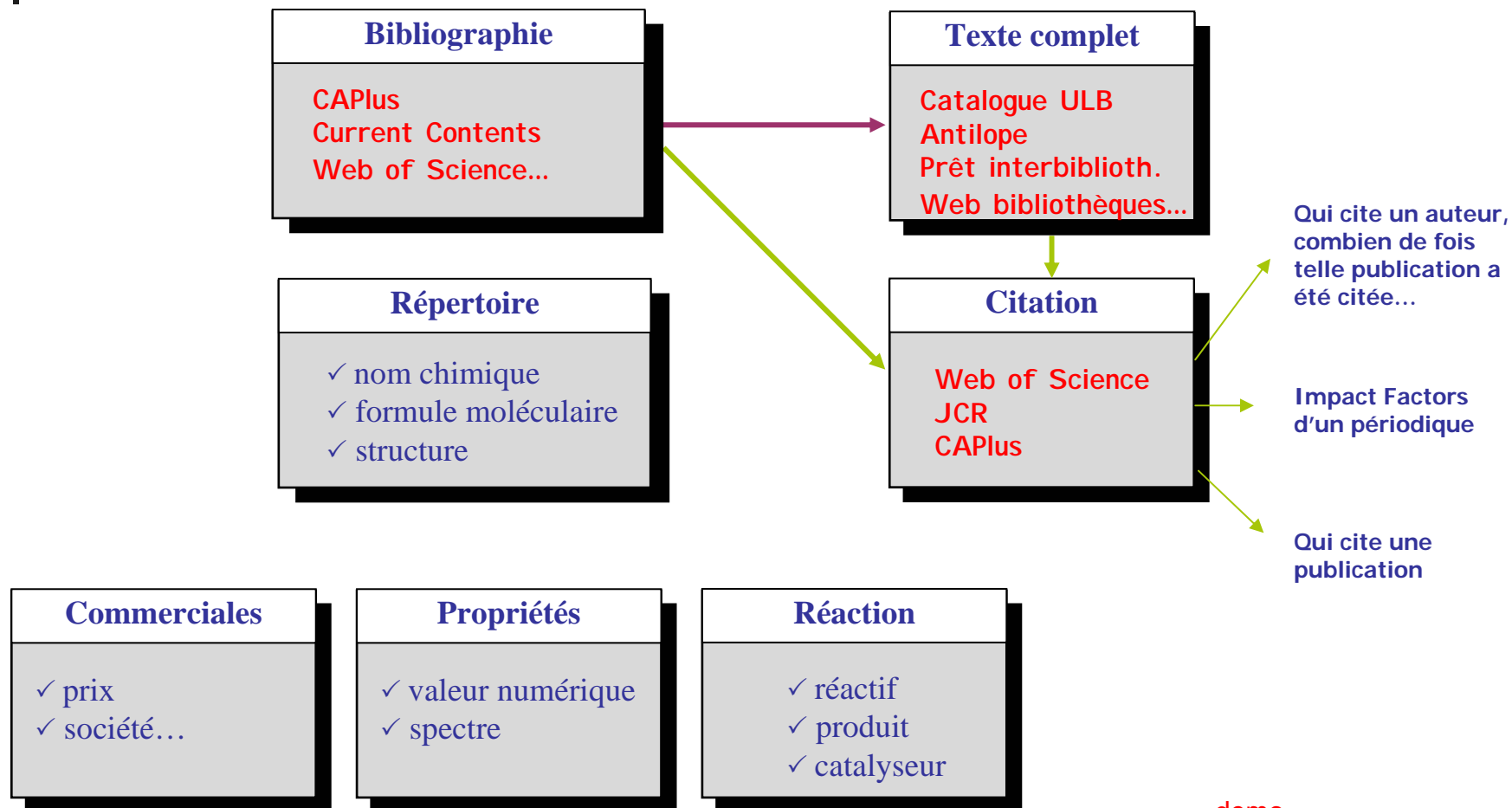
→ Titres papiers et électroniques ULB

→ Titres papiers Belgique

→ Collections: ScienceDirect, SwetsWise...



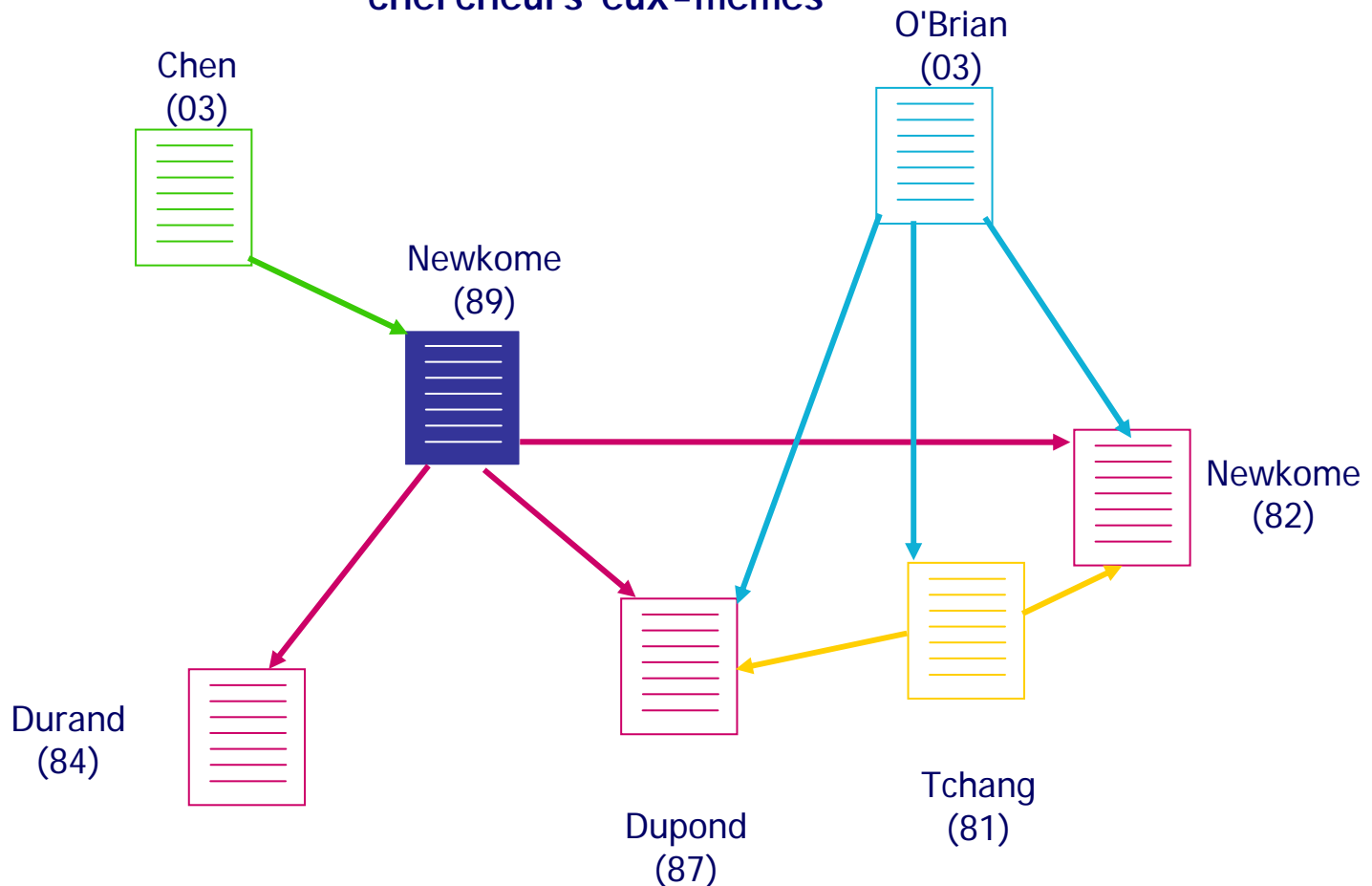
Les bases de citations: relations entre les documents établies par les chercheurs



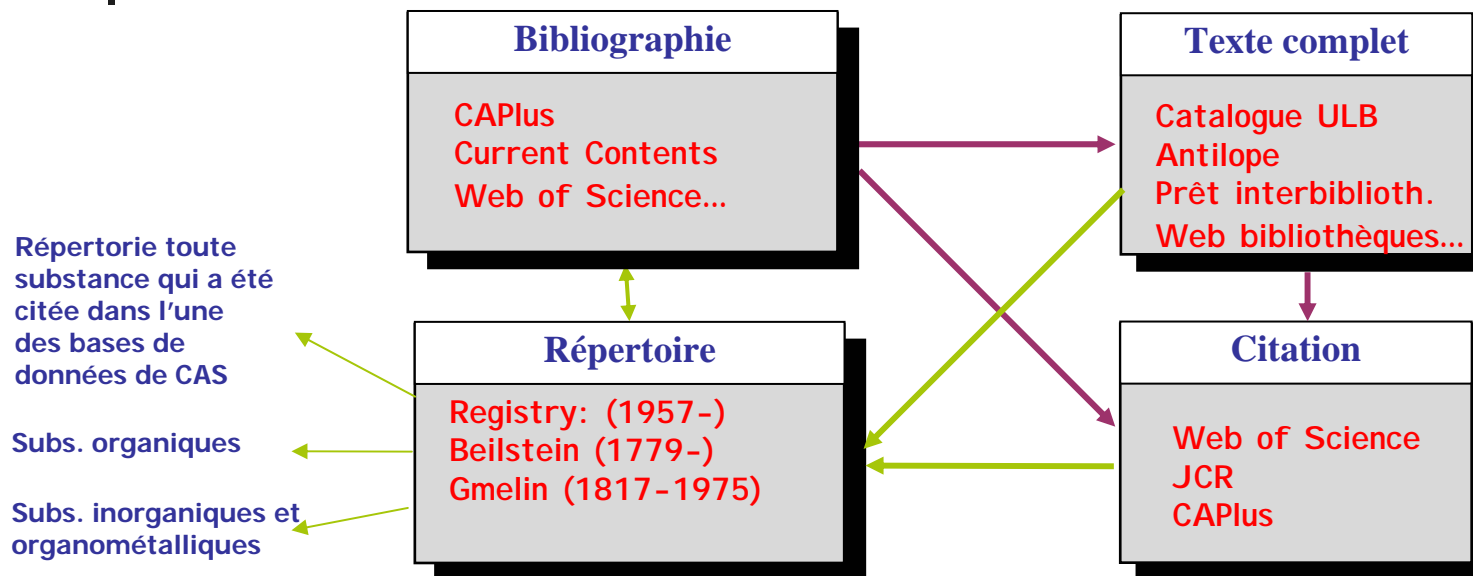
demo

Réseaux de citations

relations sémantiques entre documents établies par les chercheurs eux-mêmes



Les répertoires de substances

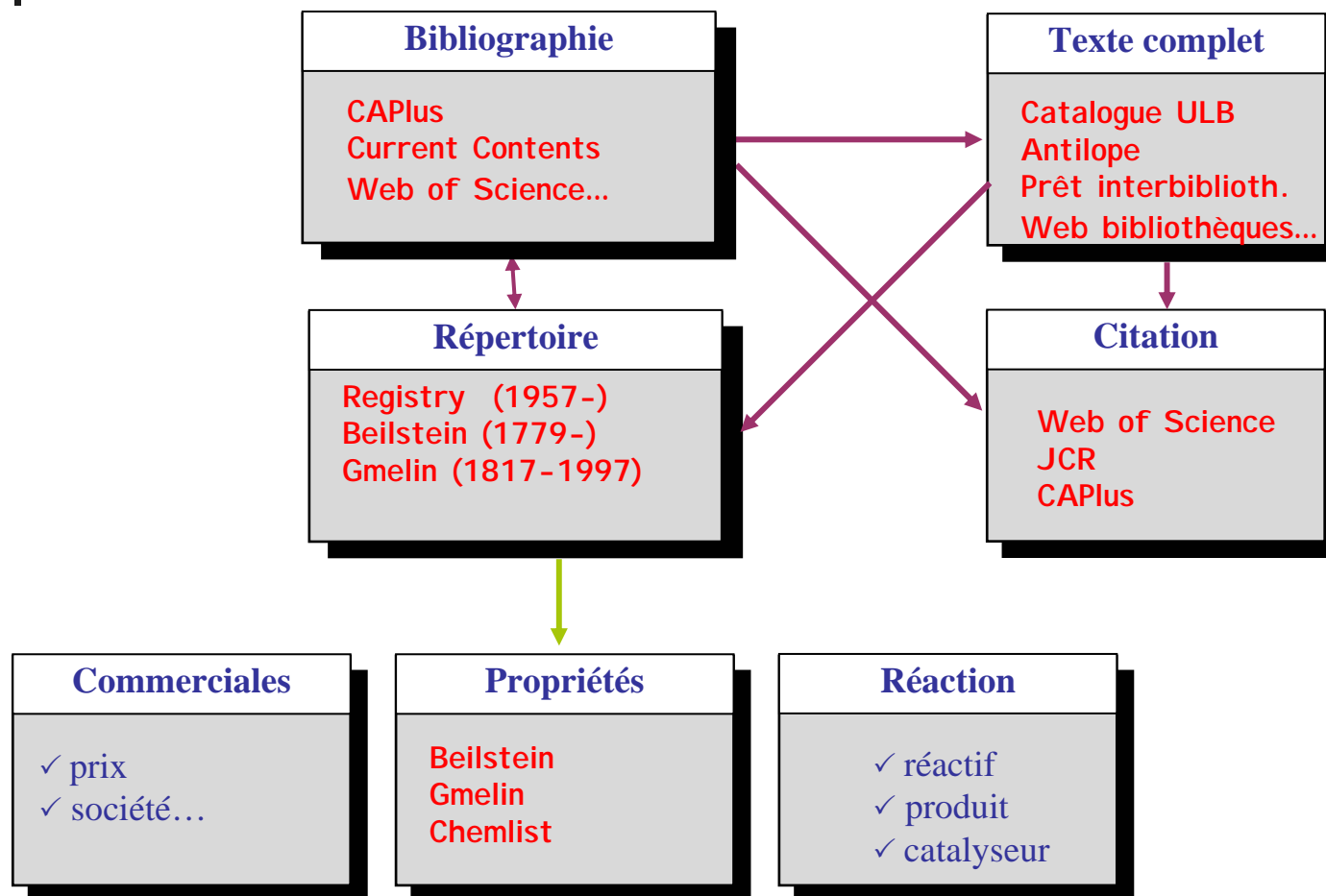


Commerciales
<ul style="list-style-type: none"> ✓ prix ✓ société...

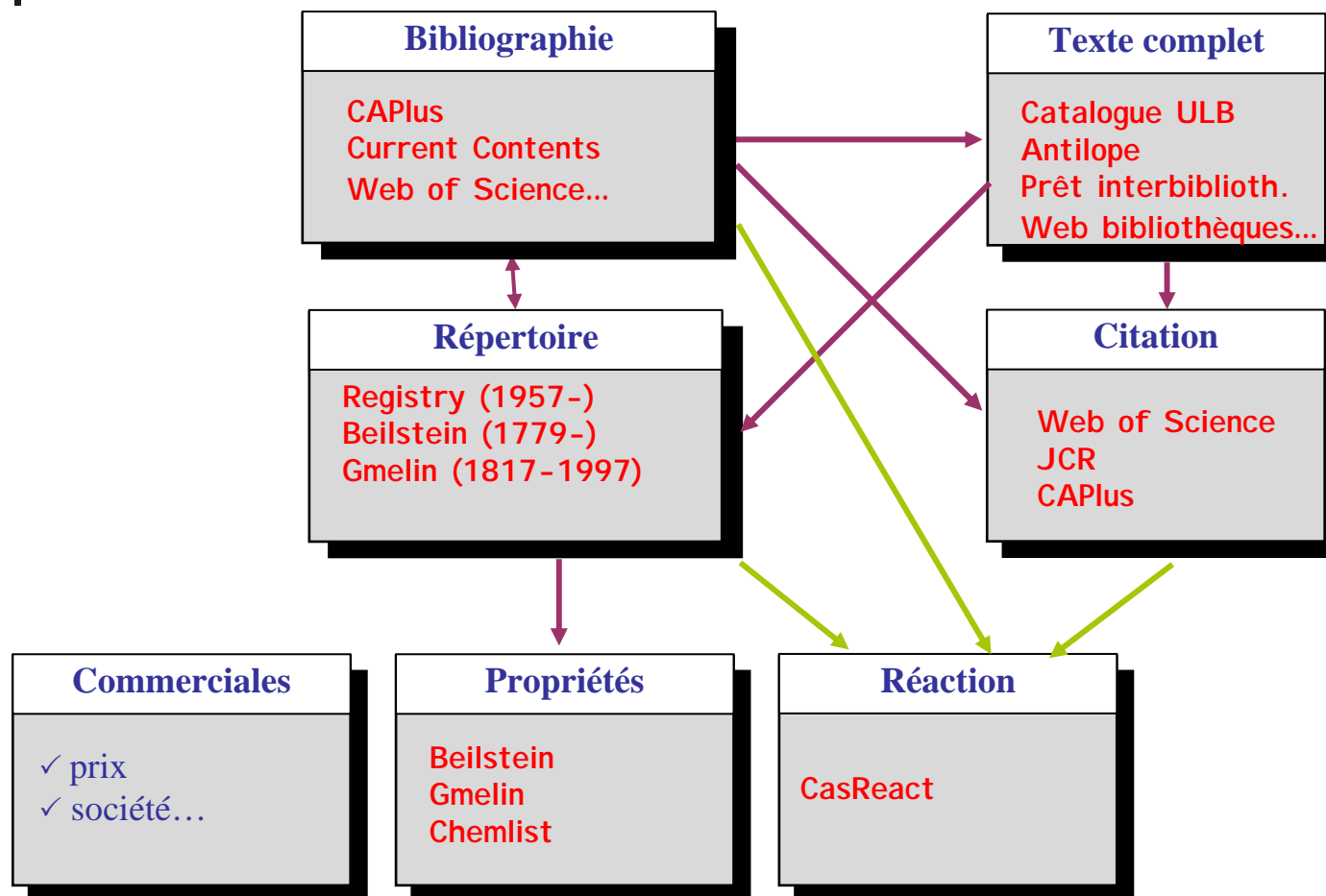
Propriétés
<ul style="list-style-type: none"> ✓ valeur numérique ✓ spectre

Réaction
<ul style="list-style-type: none"> ✓ réactif ✓ produit ✓ catalyseur

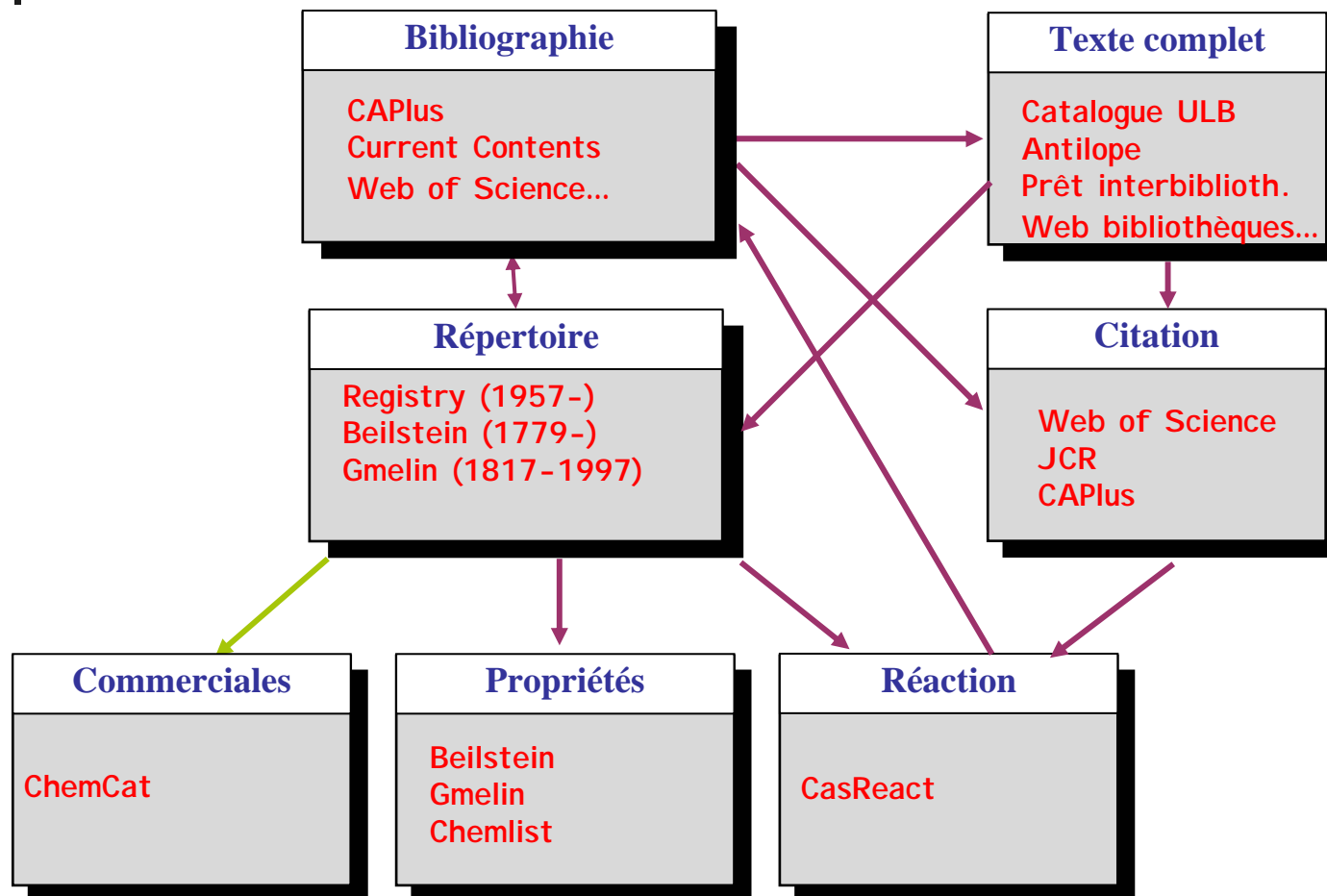
Les bases de propriétés physico-chimiques



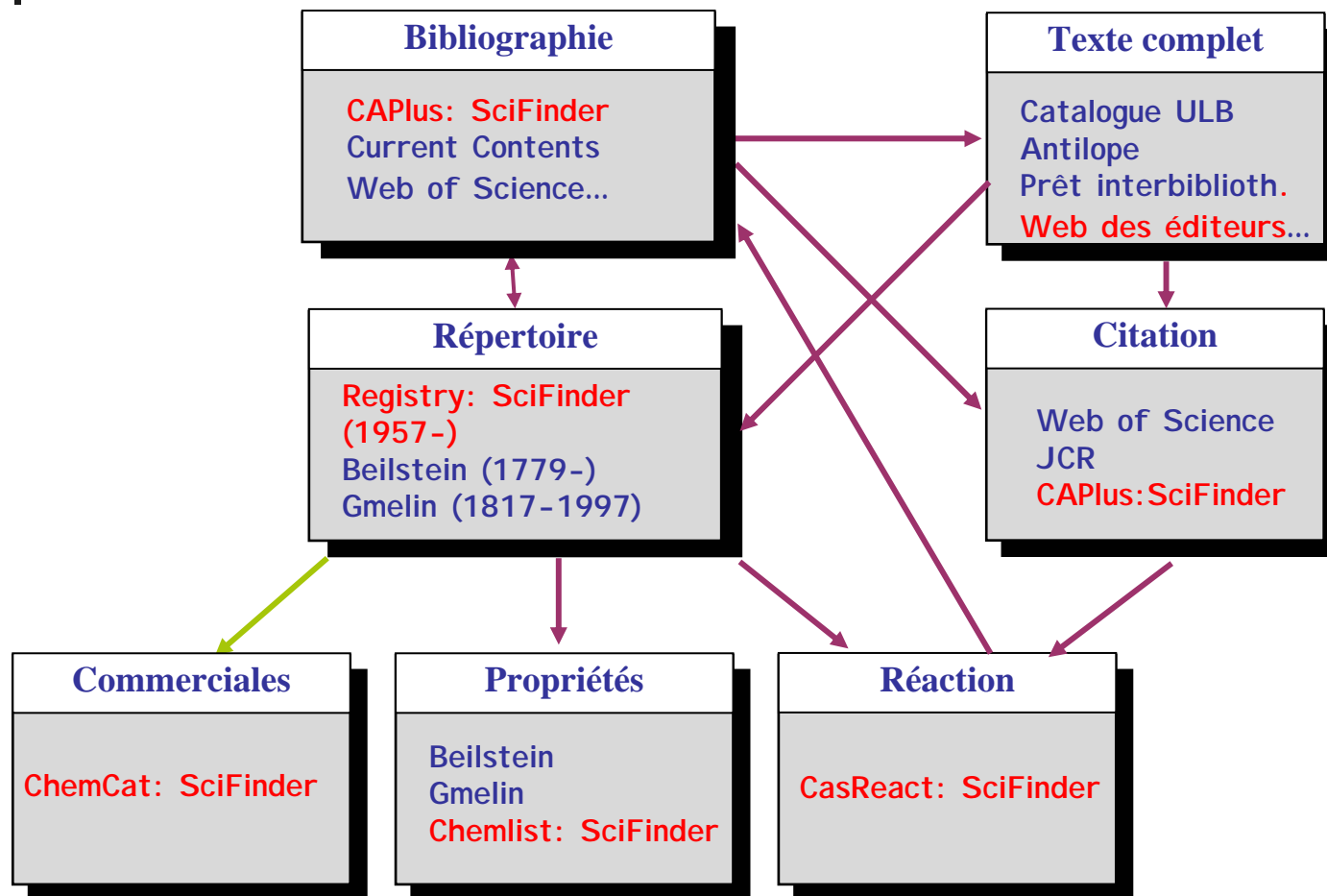
Les bases de réactions chimiques



Les bases d'information commerciale



Les différents types de données indexées dans SciFinder



The logo for SciFinder features a stylized crosshair. A vertical black line and a horizontal black line intersect. The top-left quadrant is a yellow square, the bottom-left is a red square, and the bottom-right is a blue square. The text 'SciFinder' is positioned to the right of the intersection.

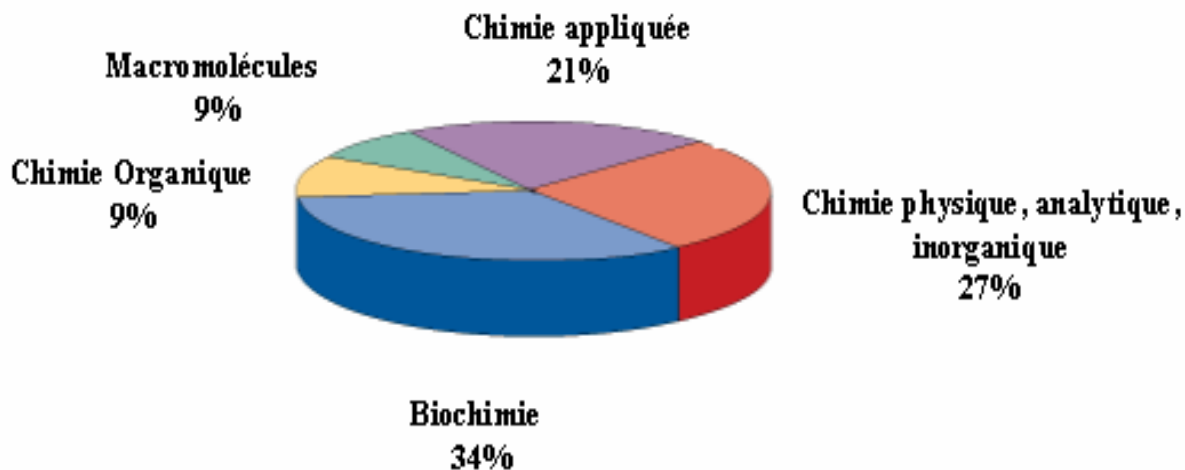
SciFinder

→ Système d'information le plus complet en chimie

- Accès à plusieurs bases de données dont le Chemical Abstracts au départ d'une plate-forme unique
- Moteur de recherche puissant
- Ajout de mots-clés et classification par des docteurs en chimie
- Interface graphique conviviale

- **CAPLUS**

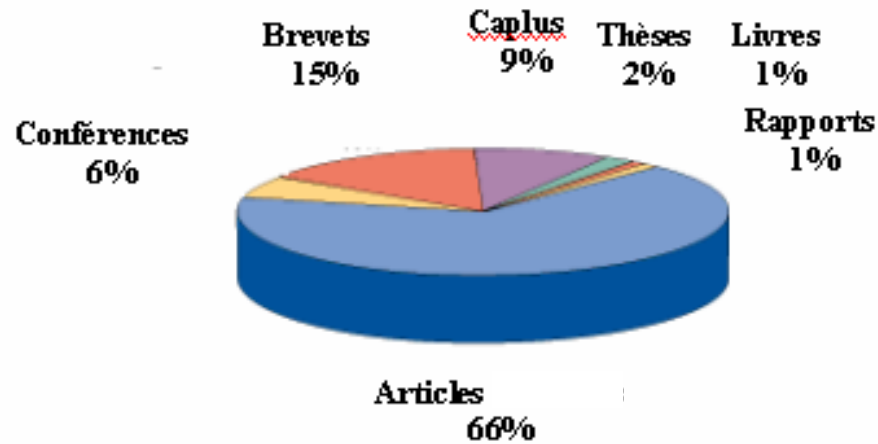
→ Propose près de 20 millions de références bibliographiques en chimie depuis 1907-



SciFinder

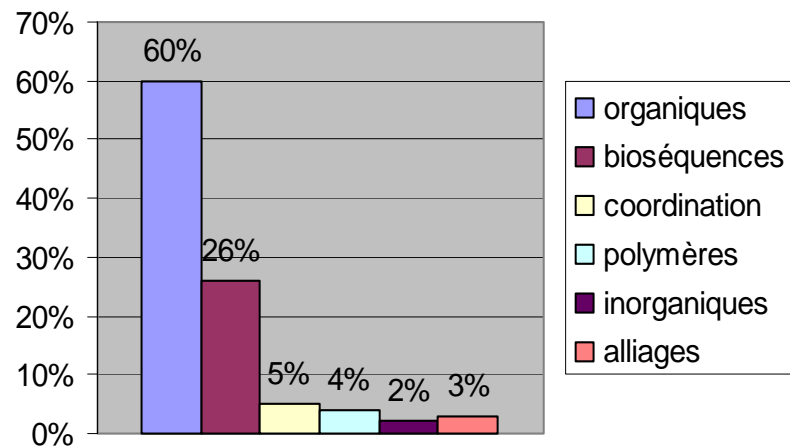
- **CAPLUS**

→ Principalement des articles de pointe, des brevets et des articles de synthèse (reviews)



SciFinder

- CAPLUS
- REGISTRY
 - Dictionnaire de substances
26 millions de substances chimiques (1957-).





SciFinder

- CAPLUS
- REGISTRY
- MEDLINE
 - Medline complet intégré dans SciFinder pour sa partie biochimie (1958-)



SciFinder

- CAPLUS
- REGISTRY
- MEDLINE
- CASREACT
 - Schémas réactionnels tirés d'une sélection de périodiques ciblés en synthèse organique (1907-)
 - Produits
 - Réactifs
 - Catalyseurs
 - Solvant
 - Rendement



SciFinder

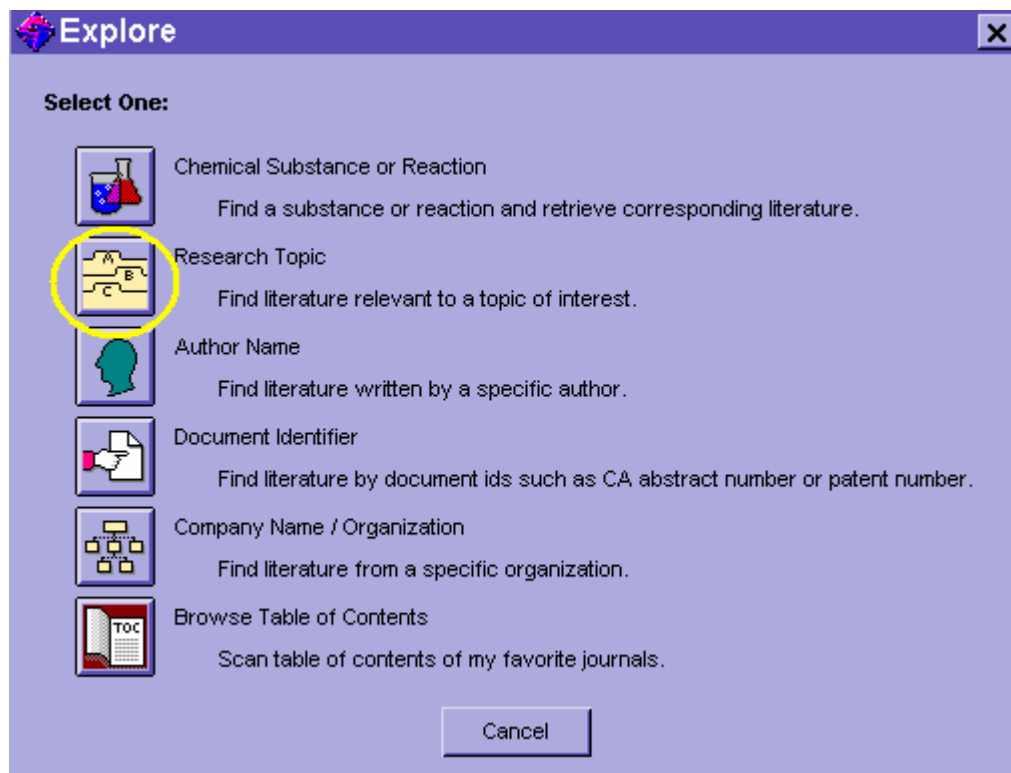
- CAPLUS
- REGISTRY
- MEDLINE
- CASREACT
- CHEMCATS
 - Catalogues commerciaux de produits chimiques
- CHEMLIST
 - Propriétés toxicologiques & physicochimiques



SciFinder: modalités d'accès

- Requiert l'installation d'un logiciel client → pas d'accès via une interface web
 - Accès au départ d'un poste dédié à la consultation de SciFinder à la BST
 - Installation sur demande du logiciel client sur le poste des chercheurs/professeurs sur le réseau informatique de l'ULB (gratuit)
- Contrôle d'accès par reconnaissance de l'adresse IP (164.15.*)
- Mise à jour annuelle du logiciel client (fonctionnalités supplémentaires)
- 5 accès simultanés pour toute l'ULB

Recherche par sujet





Recherche par sujet

Question:

photosensibilisation des sapphyrins dans les membranes biologiques

→ 3 concepts:

- | | | |
|-------------------------|-------|---|
| 1) Photosensitization | syn: | photosensitizers |
| | gén: | spectroscopy |
| 2) Sapphyrins | gén: | porphyrins |
| | RN: | nom générique → ≠ RN |
| 3) Biological membranes | abbr: | biol. membrane |
| | rôle: | BAC (Biological activity)
BIOL(Biological study) |



Explore by research topics

Equation de recherche (langage naturel):

photosensitization of sapphyrins in biological membranes

→ SciFinder cherche automatiquement:

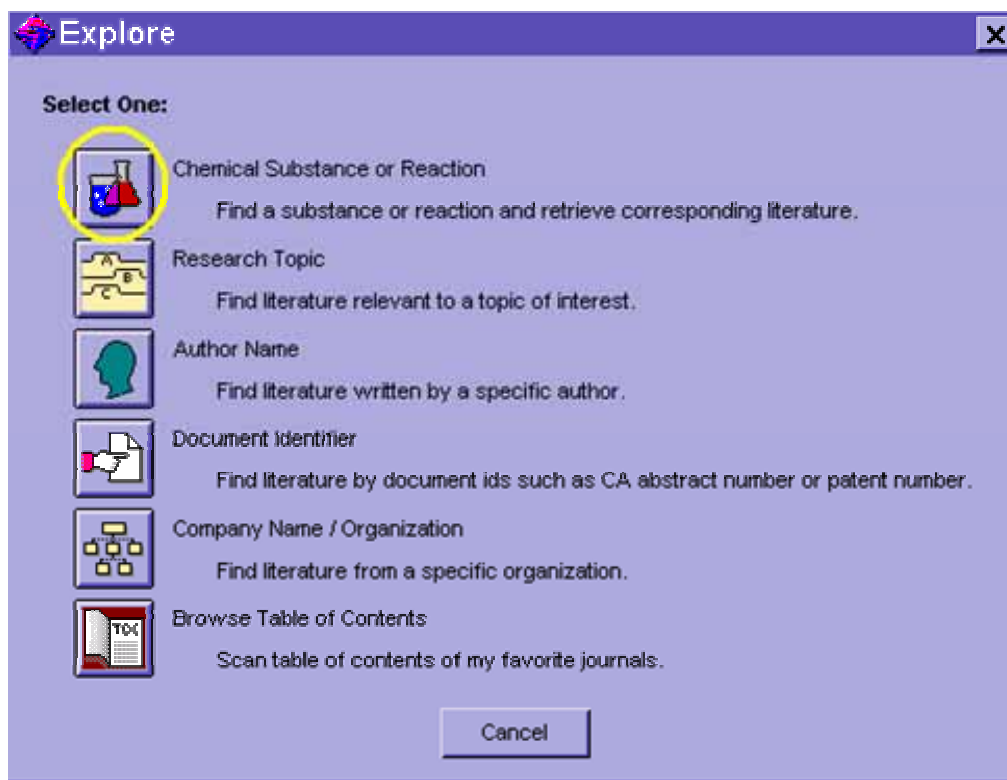
- synonymes
- pluriels, adjectifs, abréviations...
- exclut les mots vides: prépositions, articles, etc...

→ liste de candidats:

- closely associated: même unité d'information
- anywhere

Remarques: Possibilité de forcer l'ajout de synonymes en ajoutant les termes entre parenthèses

Recherche basée sur une substance chimique





Options de recherche d'une substance chimique

- Explore by structure
 - Exact match
 - Substructures search
 - Reactions
- Explore by substance identifier
 - Nom CAS, noms commerciaux
 - RN
- Explore by molecular formula
 - Composés organiques: $C_xH_xNO\dots$
 - Composés inorganiques: ordre alphabétique

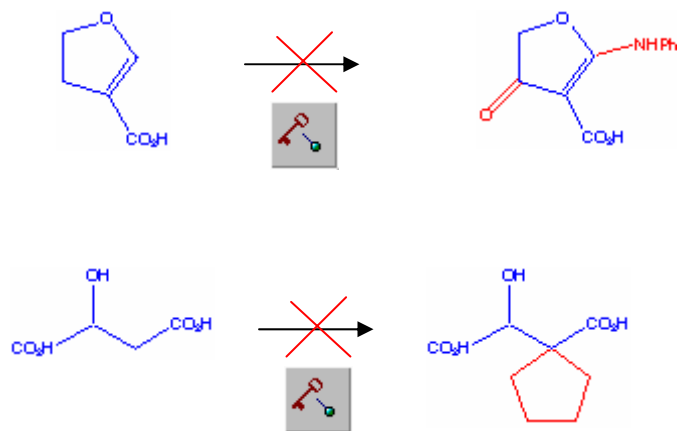


6,6'-bis-(chlorométhyl)-2,2'-bipyridine

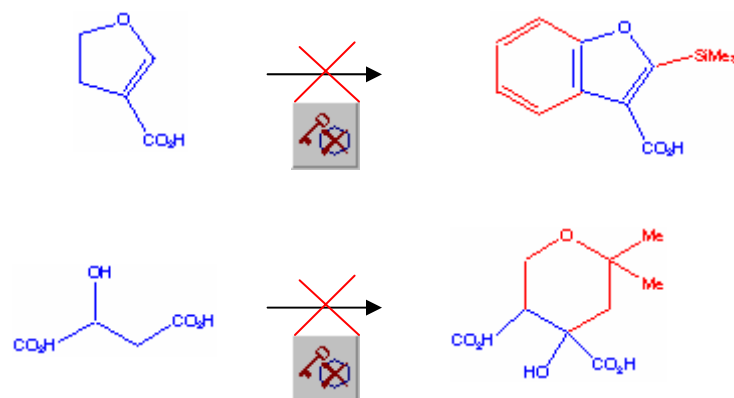
Donner sa structure et ses différentes voies de synthèses

Options pour contrôler les substitutions (1)

Lock out substitutions



Lock out rings



Options pour contrôler les substitutions (2)

Utiliser des variables



→ X = halogènes
M = métaux
etc...



→ Définir un groupe:
- atomes
- shortcut: CH₃, CH₂OH

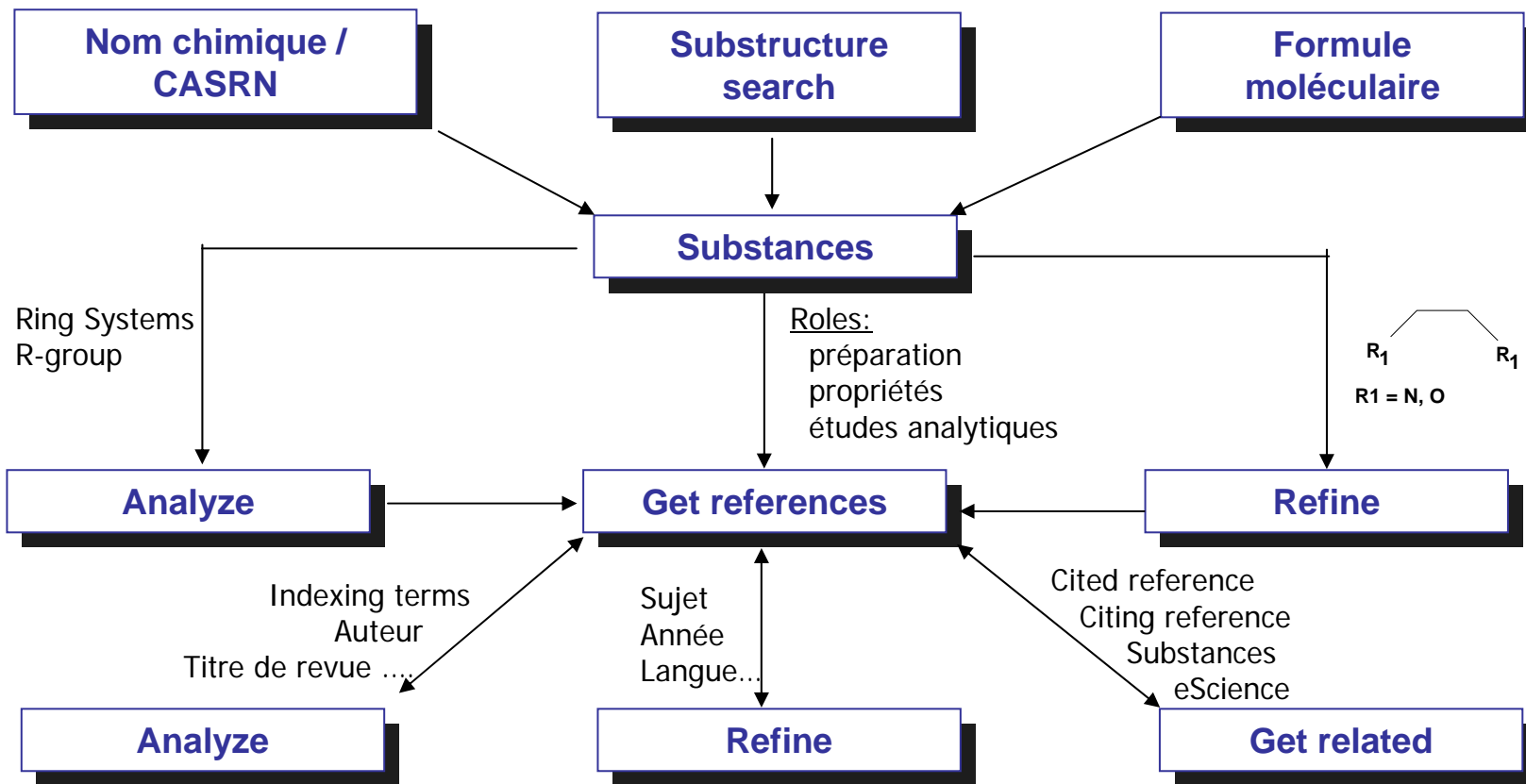
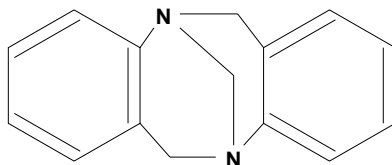
Utiliser les options de recherche



Éliminer:

- isotopes
- mélanges
- polymères
- substances mal définies
- organométalliques

Explore by chemical substances





En conclusion

- L'exhaustivité et la précision de la recherche dépend de différents critères:
 - Connaissance suffisante de la matière:
 - Pouvoir cerner le sujet avec précision
 - Savoir formuler clairement sa question
 - Bonne utilisation des fonctionnalités de l'outil:
 - Connaissance du contenu de la bases de données et des modes d'indexation
 - Utiliser à bon escient les options additionnelles
 - Connaissance générale des modes de publication:
 - Brevets, reviews...