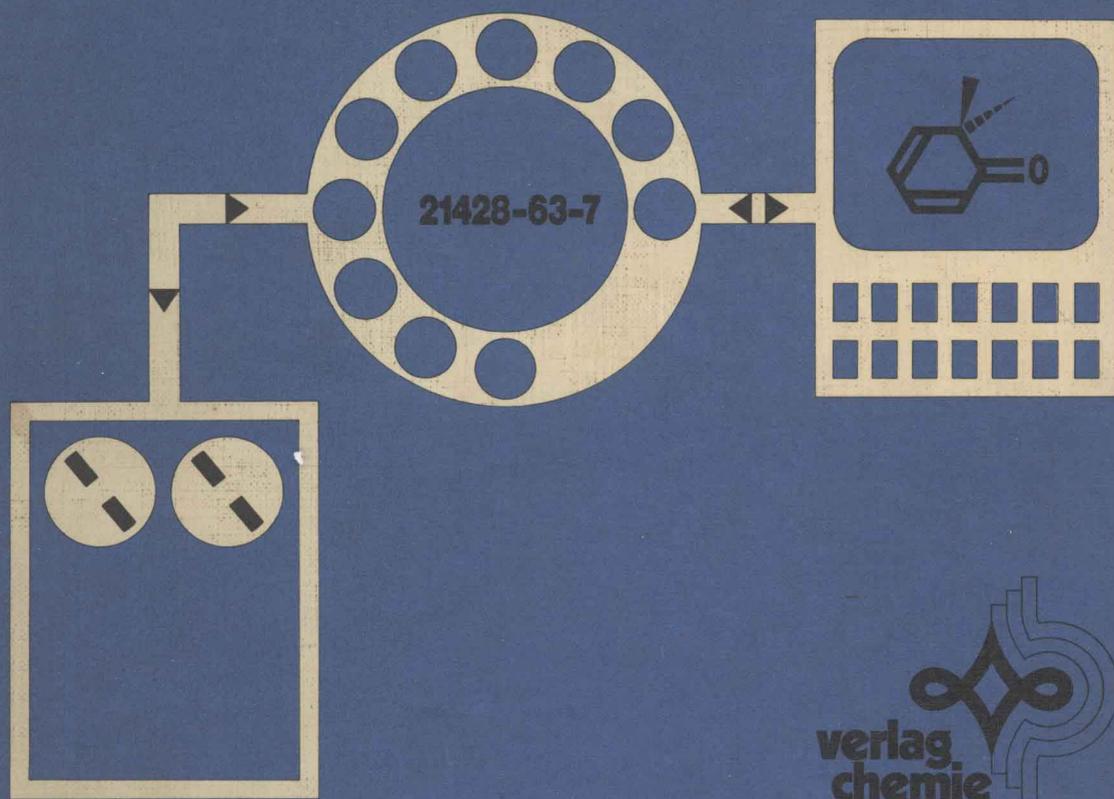


Rehm · Montforts · Ockenfeld · Wess

Online-Recherchen in Datenbanken des Chemical Abstracts Service

Eine Einführung in das System SDC/Orbit



Rehm · Montforts · Ockenfeld · Wess

Online-Recherchen in Datenbanken des Chemical Abstracts Service



D. Rehm · F.-P. Montforts · M. Ockenfeld · G. Wess

Online-Recherchen in Datenbanken des Chemical Abstracts Service

Eine Einführung in das System SDC/Orbit
mit einem Geleitwort von G. Quinkert



Weinheim · Deerfield Beach, Florida · Basel · 1982

Prof. Dr. Dieter Rehm
Dr. Franz-Peter Montforts
Dipl.-Chem. Marlies Ockenfeld
Dipl.-Chem. Günther Wess
Institut für Organische Chemie
der Johann-Wolfgang-Goethe-Universität
Niederurseler Hang
D-6000 Frankfurt am Main 50

Diese Anleitung entstand im Rahmen des vom Bundesminister für Forschung und Technologie geförderten Forschungsvorhabens „Entwicklung eines Referralsystems und Einrichtung einer Informations-Retrieval-Station – Ein Modell zur systematischen Informationsvermittlung und -beratung in einem universitären Fachbereich –“.

CIP-Kurztitelaufnahme der Deutschen Bibliothek

Chemical Abstracts Service (Columbus, Ohio):

Online-Recherchen in Datenbanken des Chemical Abstracts Service:

e. Einf. in d. System SDC/Orbit / D. Rehm ... Mit e. Geleitw. von G. Quinkert. – Weinheim; Deerfield Beach, Florida; Basel:

Verlag Chemie, 1982.

ISBN 3-527-25992-9

NE: Rehm, Dieter [Mitverf.]; HST

© Verlag Chemie GmbH, D-6940 Weinheim, 1982

Alle Rechte, insbesondere die der Übersetzung in fremde Sprachen, vorbehalten. Kein Teil dieses Buches darf ohne schriftliche Genehmigung des Verlages in irgendeiner Form – durch Photokopie, Mikrofilm oder irgend ein anderes Verfahren – reproduziert oder in eine von Maschinen, insbesondere von Datenverarbeitungsmaschinen, verwendbare Sprache übertragen oder übersetzt werden.

All rights reserved (including those of translation into foreign languages). No part of this book may be reproduced in any form – by photoprint, microfilm, or any other means – nor transmitted or translated into a machine language without written permission from the publishers.

Die Wiedergabe von Warenbezeichnungen, Handelsnamen oder sonstigen Kennzeichen in diesem Buch berechtigt nicht zu der Annahme, daß diese von jedermann frei benutzt werden dürfen. Vielmehr kann es sich auch dann um eingetragene Warenzeichen oder sonstige gesetzlich geschützte Kennzeichen handeln, wenn sie als solche nicht eigens markiert sind.

Umschlaggestaltung: TWI, J. Weisbrod, D-6943 Birkenau

Druck: betz-druck gmbh, D-6100 Darmstadt

Buchbinder: G. Kränkl, D-6148 Heppenheim

Printed in the Federal Republic of Germany

Geleitwort

1980 wurde im Mittel pro Minute eine chemische Publikation veröffentlicht. Zur Zeit erweitert sich das Reservoir registrierter chemischer Verbindungen pro Woche im Schnitt um 8000 weitere chemische Individuen. Pessimisten haben Angstvorstellungen entwickelt, nach denen die wachsende Flut publizierter Informationen die zur Regulierung der Informations-Wiedergewinnung errichteten Dämme bricht. Sie sprechen davon, daß in absehbarer Zukunft immer häufiger verschiedene Autoren die gleichen Forschungsergebnisse doppelt und dreifach publizieren würden. Da selbst der gewissenhafteste Forscher nicht mehr in der Lage sei, sämtliche für ihn wichtigen Veröffentlichungen aus Referateorganen geschweige denn aus der Originalliteratur zu beachten, käme man gegen die Vergeudung menschlicher Arbeitskraft und finanzieller Mittel, die mit einer wildwuchernden Überproduktion verknüpft sei, nicht mehr an.

Zum Glück gibt dieser Eindruck eher die Stimmung eines Alptraums als die unausweichliche Realität der Wissenschaft von heute oder auch von morgen wieder. Die seit 1965 in der Literatur erwähnten chemischen Verbindungen haben vom Chemical Abstracts Service eine individuelle Registriernummer erhalten. Sie sind seitdem, mit einer Fülle bibliographisch und chemisch interessanter Detailangaben versehen, bei einer ganzen Reihe von Datenbanken durch computer-unterstützte Literaturrecherchen wiederaufzufinden. Wo ehemals noch eine autodidaktische Aneignung von Kenntnissen zum Umgang mit Handbüchern und gedruckten Referatediensten ausreichte,

ist inzwischen eine von Lehrplänen des Chemie-Studiums zu berücksichtigende Methodologie des Informationsretrieval getreten.

Die vorliegende Anleitung zeigt einen sicheren Weg auf, publizierte Informationen aus dem Gebiet der Chemie durch Dialogrecherche im Online-Betrieb rasch wiederzufinden. Sie beschränkt sich aus didaktischen Gründen bewußt

- auf Informationen aus Datenbanken, die auf den gedruckten Diensten des Chemical Abstracts Service oder auf Theilheimers "Synthetic Methods of Organic Chemistry" aufbauen;
- auf die Retrievalsprache ORBIT, die der Hostbetreiber SDC Search Service in Santa Monica für den Dialog mit dem Computer vorgesehen hat;
- auf das tragbare Terminal TEXAS INSTRUMENTS SILENT 765 mit integriertem akustischen Koppler, das mit einer Geschwindigkeit von 30 Zeichen/s Informationen ausdruckt.

Die vorliegende Anleitung wendet sich an Wissenschaftler, die in Hochschulen oder vergleichbaren außeruniversitären Einrichtungen in der chemischen Forschung tätig sind und keine Erfahrung im Umgang mit automatisierter Informationsvermittlung haben. Sie spricht mit den hier aufgeführten Suchbeispielen vor allen anderen den synthetisch tätigen organischen Chemiker an, dessen Informationsbedürfnis nach aktuellem Know-how auf breiter Grundlage besonders ausgeprägt ist.

Die vorliegende Anleitung wird überall dort von Nutzen sein, wo interaktive Dialogrecherchen benötigt werden und Initiatoren die

Arbeit zur Einrichtung von Retrieval-Stationen übernehmen. Sie soll dazu beitragen, das hierzulande entstandene Defizit an Wissen um die Bedeutung von computer-unterstützten Möglichkeiten der Chemieinformation abzubauen.

Im Institut für Organische Chemie der Universität Frankfurt am Main wird seit Oktober 1980 vom Bundesminister für Forschung und Technologie ein Pilotprojekt zur Informationsvermittlung in einem universitären Fachbereich Chemie großzügig gefördert. Dieses Projekt ist auf die Einrichtung einer Informationsretrieval-Station sowie auf das Sammeln und Bewerten von Erfahrungen bei ihrer Nutzung angelegt. Bereits jetzt soll ein Teil dieser Erfahrungen an eine interessierte Öffentlichkeit weitergegeben werden. Damit der Anschluß an die hektische Entwicklung der Technologie des Online-Informationsretrieval im Bereich der Chemie möglichst rasch gewonnen werden kann, gehen die weiter unten aufgeführten Empfehlungen zur Einrichtung einer Informationsretrieval-Station über den Rahmen dieser Anleitung hinaus. Sie berücksichtigen die mit einem graphischen Terminal seit kurzem mögliche Substruktursuche in der chemischen Formelsprache. Dieser technologische Fortschritt hat dem Informationsbenutzer eine gravierende Kommunikationsbarriere aus dem Weg geräumt: Jedem Chemiker ist die visualisierte, keine Elemente der natürlichen Sprache enthaltende Information der chemischen Strukturformel von Anfang an vertraut. Dadurch entfallende Übersetzungsarbeit erhöht die Bereitschaft zur Dialogrecherche.

Nach unseren Erfahrungen empfehlen wir,

- daß eine Datenendstation mit graphischem Terminal, Drucker und Möglichkeit zur graphischen Eingabe zur Verfügung steht. Diese Empfehlung geht von der Einsicht aus, daß die genannte Installation den Kontakt mit zahlreichen einschlägigen Informationsanbietern und eine optimale zeitliche und sachliche Ausnutzung des Informationsangebots ermöglicht.
- daß die Datenendstation im Einvernehmen mit der zuständigen zentralen Bibliothek im Bereich der Chemie installiert und von Chemikern versorgt wird.
- daß nach Sicherung der Grundfinanzierung der Retrieval-Station anfallende Recherche-Kosten grundsätzlich zu Lasten des Informationsbenutzers gehen. Diese Empfehlung geht von der Einsicht aus, daß Finanzierungspläne, die Kosten für Informationsversorgung enthalten, nur dann aufgestellt werden können, wenn der finanzielle Rahmen zu überschauen und das Bewußtsein für den Wert käuflicher Informationen durch Selbstbeteiligung an den Kosten realistisch entwickelt worden ist. Eine Anschaltstunde kostet z.Zt. ca. DM 300,--. Nimmt man die seit kurzem ermöglichte Substruktursuche hinzu, die weit über den Rahmen einer klassischen Literaturrecherche hinausgeht und berücksichtigt man ferner Gebühren für Offline-Ausdrucke sowie für Beschaffung von Kopien der aufgefundenen, im eigenen Umkreis aber nicht zugänglichen Primärliteratur, so kommt man auf einen Betrag von ca. DM 400,-- pro Anschaltstunde. Geht man ferner davon aus, daß durch Rationalisierungsmaßnahmen in einem chemisch-synthetischen Laboratorium, zu denen Online-Literaturrecherchen einen nennenswerten Beitrag leisten, die Zeit für die ex-

perimentelle Durchführung einer Doktorarbeit auf ca. zwei Jahre reduziert werden kann (die mittlere Dauer ist seit Jahren in der Bundesrepublik wesentlich höher), ist es nach unseren Erfahrungen notwendig, daß jedem Doktoranden 5 Anschaltstunden pro Jahr, denen im Mittel jeweils das Fünffache an Vorbereitungszeit vorausgegangen sein sollte, zur Verfügung stehen;

- daß im jeweiligen Fachbereich ein Hochschullehrer als erfahrener Informationsvermittler zur Verfügung steht, der für die Benutzerausbildung und Benutzungsbewertung verantwortlich ist.

Wir verfolgen das Ziel, Informationsretrieval für Forschung und Lehre so weit zu entwickeln, daß Chemieinformation in naher Zukunft als viertes Fach im Vertiefungsstudium in Betracht gezogen werden kann. Wir lassen uns bei diesen Bemühungen von den Einsichten und Erfahrungen leiten, daß derjenige, der bereits im Studium die sich gerade im Gebiet der Chemie ständig erweiternden Informationsmöglichkeiten beherrscht,

- die Zeitspanne zur Anfertigung seiner Diplom- und Doktorarbeit ohne Qualitätseinbuße verkürzt;
- die eigenen Erfolgchancen zur Lösung aktueller Forschungsprobleme, die sich einer internationalen Bearbeitung erfreuen, erhöht;
- den Anforderungen der beruflichen Praxis nach Beendigung des Chemiestudiums besser gewachsen ist.

Wir sind uns bewußt, daß durch die Pflege einer informations-

handhabenden Methodologie erst die Voraussetzungen für eine Forschung geschaffen werden, die der wissenschaftlichen Tradition unseres Landes und der vorsorglichen Zukunftssicherung für nachkommende Generationen gerecht zu werden versucht.

Herr K.-D. Lehmann, Leitender Direktor der Stadt- und Universitätsbibliothek Frankfurt am Main und Herr Prof. W. Kunz von der Gesellschaft für Information und Dokumentation mbH Frankfurt am Main unterstützen durch ihr wohlwollendes Interesse sowie durch aktive Kooperation unsere Bemühungen. Herr Prof. D. Rehm hat an der Einrichtung und Entwicklung der Informations-Retrieval-Station im Institut für Organische Chemie der Universität Frankfurt am Main das Hauptverdienst.

Frankfurt am Main im April 1982

G. Quinkert

Vorwort

Diese Anleitung soll dem Chemiker den Start mit Dialogrecherchen bei SDC ORBIT in den auf Chemical Abstracts und dem Journal of Synthetic Methods/Theilheimer aufbauenden Datenbanken erleichtern. Sie kann und will kein Ersatz sein für die ausführlichen Handbücher des Datenbankanbieter SDC oder des Datenbasenherstellers Chemical Abstracts Service. Da diese Schriften nur in Englisch zur Verfügung stehen, wurden auch in dieser Anleitung englische Bezeichnungen beibehalten und nur beim ersten Auftreten eine deutsche Bezeichnung in Klammern hinzugefügt. Es entstand dadurch - beabsichtigt - eine Art "Fachjargon", den der Leser den Autoren bitte nachsehen möge.

Für seine Kommentare zum unvollständigen Vorabdruck danken wir Herrn Dr. W. Krietsch vom Fachinformationszentrum Chemie in Berlin. Herrn Dr. E. Zaß vom Laboratorium für Organische Chemie der ETH Zürich danken wir für intensiven und anhaltenden Erfahrungsaustausch.

Besonderer Dank gebührt Herrn Prof. Dr. G. Quinkert, der durch seine engagierte und kritische Anteilnahme am Information Retrieval nicht nur die Entstehung dieser Schrift initiiert sondern auch nachhaltig gefördert hat.

Die Verfasser

Inhalt

<i>Geleitwort</i>	5
<i>Vorwort</i>	11
<i>Inhalt</i>	13
1. Das Informationssystem des Chemical Abstracts Service (CAS).....	16
1.1 Gedruckte Dienste.....	16
1.2 Informations-Datenbanken.....	20
1.3 Gegenüberstellung von gedruckten Diensten und Informations-Datenbanken.....	22
2. Chemical Abstracts-Datenbanken und die Retrievalsprache ORBIT bei SDC.....	30
2.1 Chemical Abstracts-Datenbanken.....	30
2.1.1 Bibliographische Datenbanken.....	30
2.1.2 Datenbanken über chemische Verbindungen.....	30
2.2 Retrievalsprachen.....	32
2.2.1 Logische Operatoren.....	32
2.2.2 Wichtige Kommandowörter der Retrievalsprache ORBIT....	34
2.2.3 Datenbankregister.....	36
2.3 Zugriff zu den Chemical Abstracts-Datenbanken von SDC.	38
2.3.1 Vorbemerkungen.....	38
2.3.1.1 Zeitliche Verfügbarkeit der Datenbanken von SDC	38
2.3.1.2 Verwendung des Terminals Texas Instruments Silent 765.	40
2.3.1.3 Besondere Tasten.....	40
2.3.1.4 Korrektur der Eingabe.....	42
2.3.2 Aufbau der Verbindung zum Hostcomputer von SDC.....	42
2.3.2.1 Aufbau der Verbindung über TELENET.....	44
2.3.2.2 Aufbau der Verbindung über TYMNET.....	46
2.3.2.3 Aufbau der Verbindung über DATEX-P.....	48
2.3.3 Beenden der Verbindung.....	50
2.3.4 Unterbrochene Verbindung.....	50
3. Vorbereitung einer Online-Recherche und Suchhilfen....	52
3.1 Vorbereitung einer Online-Recherche.....	52

3.2	Gedruckte Suchhilfen.....	54
3.2.1	Allgemeine Suchhilfen von Chemical Abstracts.....	54
3.2.2	Spezielle Suchhilfen für die Datenbanken bei SDC.....	54
3.3	Dialoghilfen.....	56
4.	Suchbeispiele mit Erläuterungen.....	58
4.1	Suche nach der Chemical Abstracts Registry Number einer chemischen Verbindung.....	58
4.1.1	Beispiel: Molecular Formula, Name Fragments.....	58
4.1.2	Beispiel: Heading Parent.....	64
4.1.3	Beispiel: Ring System Description, Stereochemistry Fragments.....	66
4.2	Suche nach der Literatur zu einer bestimmten chemischen Verbindung.....	68
4.2.1	Beispiel: Registry Number.....	68
4.3	Suche nach den Veröffentlichungen bestimmter Autoren..	76
4.3.1	Beispiel: Zwei Autoren.....	76
4.3.2	Beispiel: Verschiedene Schreibweisen eines Autoren- namens.....	82
4.4	Suche nach Literatur zu bestimmten Begriffen.....	88
4.4.1	Beispiel: Bonellin.....	88
4.4.2	Beispiel: Darstellung von und Grignard-Reaktionen mit "Hagemann-Ester".....	90
4.4.3	Beispiel: Suche nach Dissertationen.....	96
5.	Suche nach chemischen Reaktionen.....	98
5.1	Beispiel: Suche in CAS7781.....	100
5.2	Beispiel: Suche in CRDS.....	102
6.	Abspeichern und wiederholte Ausführung von Suchprofilen.....	104
6.1	Kurzfristige Abspeicherung.....	106
6.2	Zeitlich unbegrenzte Speicherung.....	110
6.3	SDI-Profile.....	112
7.	Bibliographische und Literaturstandortnachweise.....	114
7.1	Die Datenbank CASSI ("CAS Source Index").....	114
7.1.1	Beispiel: Wo findet man in Deutschland die Zeit- schrift "SPECTROSCOPY LETTERS"?.....	116
7.1.2	Beispiel: Kontrolle bibliographischer Angaben.....	120

8.	Online-Bestellungen von Literatur.....	122
8.1	Beispiel: Amerikanische Dissertation.....	122
9.	Weitere Möglichkeiten in ORBIT.....	124
9.1	Crossfile-Technik.....	124
9.2	Löschen von Suchinformationen.....	125
9.3	Informationen und Nachrichten.....	126
9.4	STRINGSEARCH und SENSEARCH.....	127
9.5	Anpassung des Ausdrucks.....	128
9.6	ORBIT, ORBCHEM, ORBPAT.....	129
Anhang :	Übersicht.....	131
Anhang 1:	Datenendgeräte.....	132
Anhang 2:	Formalitäten und Anschriften.....	134
Anhang 3:	Datex-P-Knoten.....	136
Anhang 4:	Kosten.....	138
Anhang 5:	ORBIT bei DERWENT-SDC Search Service in Großbritannien.....	142
<i>Sach- und Namenregister</i>		144

1. Das Informationssystem des Chemical Abstracts Service (CAS)

1.1 Gedruckte Dienste

Der Referatedienst Chemical Abstracts bringt allwöchentlich ein Abstract Issue (*Referateheft*) heraus und verzeichnet im vierzehntägigen Abstand

- in Abstract Issues mit ungerader Numerierung Veröffentlichungen aus der Biochemie und der organischen Chemie,
- in Abstract Issues mit gerader Numerierung Veröffentlichungen aus der Makromolekularen Chemie, der Angewandten Chemie, der Chemischen Technologie, der Physikalischen Chemie und der Analytischen Chemie.

Die Literaturhinweise verteilen sich insgesamt auf 80 verschiedene Abstract Sections* (*Sachgebietsgruppen*). Ausführlichen bibliographischen Daten schließen sich in der Regel knappe Inhaltsangaben an. Letztere sind unkritisch und sollen dem Leser nur bei der Entscheidung behilflich sein, ob er die zugrunde liegende Originalpublikation lesen will.

Mit Hilfe eines abgestuften Registersystems ist es möglich, in den Chemical Abstracts untergebrachte Informationen

- über Arbeiten eines bestimmten Autors (Author Index, *Autorenregister*),
- über bestimmte chemische Verbindungen (Chemical Substance Index, *Verbindungsregister*; Formula Index, *Formelregister*; Index of Ring Systems, *Verzeichnis der Ringsysteme*),
- über bestimmte Patentschriften und den Zusammenhang mit Patentanmeldungen in anderen Ländern (Patent Index, *Patentregister*; vor 1981: Numerical Patent Index und Patent Concordance),
- für eine Literaturrecherche zu einem bestimmten Thema (General Subject Index, *allgemeines Sachregister*; Keyword Index, *Stichwortregister*)

effektiv und zuverlässig wiederzugewinnen. Die Indexe erleichtern das Information Retrieval (*die Informationswiedergewinnung*).

* Ab Vol. 96 (1982) wurden verschiedene Abstract Sections neu definiert (vgl. die Ausschnitte aus den Inhaltsverzeichnissen zweier Abstract Issues).