

SciFinder Scholar und CrossRef und Web of Science und ... Luxus oder Notwendigkeit ?

Engelbert Zass

Informationszentrum
Chemie Biologie Pharmazie

ETH Zürich

8093 Zürich, Schweiz



Gesammelte „Weisheiten“

- „Warum DiscoveryGate testen, ich finde alles in SciFinder Scholar“ (2006)
- „Wir benutzen Beilstein nicht, weil unsere Recherchemittel schon für Chemical Abstracts aufgebraucht wurden“ (1993)
- „Ich kenne alle wichtigen Leute auf meinem Gebiet, da brauche ich keine Datenbanken“ (1982)

Chemiedatenbanken ETH

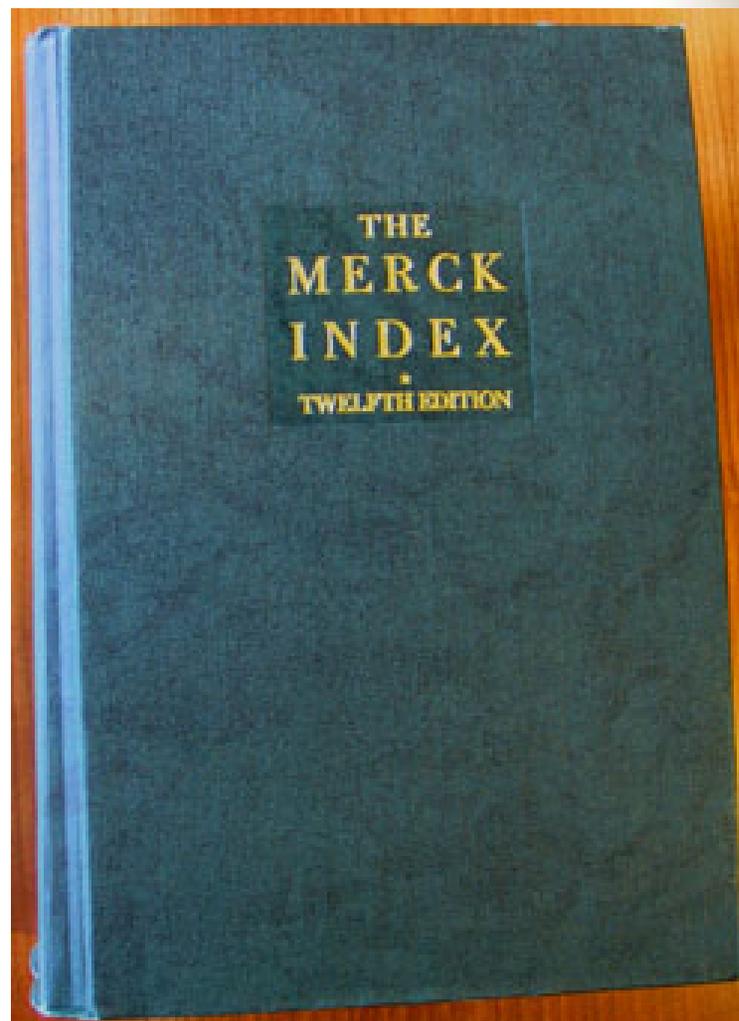
- SciFinder Scholar Chemical Abstracts
- CrossFire Beilstein
- CrossFire Gmelin
- Web of Science

und weitere 40 kostenpflichtige für **Endnutzer**

*Hosts **STN**, **Dialog**, **DataStar***



Spezialdatenbanken



Datenbanken - Mozilla Firefox

Datei Bearbeiten Ansicht Chronik Lesezeichen Extras Hilfe

http://www.infochembio.ethz.ch/db.html

Wikipedia (English)

Informationszentrum
Chemie Biologie Pharmazie

Datenbanken und Nachschlagewerke

English Home > Datenbanken

Datenbanken

- CA on CD
- CrossFire Beilstein/Gmelin
- DiscoveryGate
- PubMed (Medline)
- SciFinder Scholar
- SpecInfo
- Web of Knowledge

Suchen in Website:

Index

25.06.2007 - Impressum

Alphabet: Alle [A](#) [B](#) [C](#) [D](#) [E](#) [F](#) [G](#) [H](#) [I](#) [J](#) [K](#) [L](#) [M](#) [N](#) [O](#) [P](#) [Q](#) [R](#) [S](#) [T](#) [U](#) [V](#) [W](#) [X-Z](#)

Datenbank suchen

Datenbanken nach Verwendungszweck

Anorganische Verbindungen	Medizinische Daten	Sicherheit
Autoren	Metallorganische Verbindungen	Spektren
Biologische Daten	Nachschlagewerk	Strukturen
Chemikalien	Organische Reaktionen	Suchhilfe
Enzyklopädie	Organische Verbindungen	Themen
Kataloge	Patente	Toxikologie
Kristallstrukturen	Pharmazeutische Daten	Umwelt
Laufende Information	Physikalische Daten	Verbindungen
Lexikon	Reaktionen	Zitationen

Recherchen und Feedback

Für spezielle Recherchen, Fragen und Anregungen wenden Sie sich an:

- [Dr. Engelbert Zass](#) (Recherchen in externen Datenbanken)
- [Dr. Martin Brändle](#) (Fachspezialist Chemie)
- [Blanka Cartier](#) (Fachspezialistin Biologie)

[Elektronische Bibliothek](#)

Fertig

Informationsbeschaffung

- **Inhalte:**
Vielfalt der Quellen
(Datenbanken für Literatur, Fakten,
Verbindungen/Reaktionen)
- **Zugriff:**
Vielfalt der Benutzeroberflächen
(Retrievalsysteme)

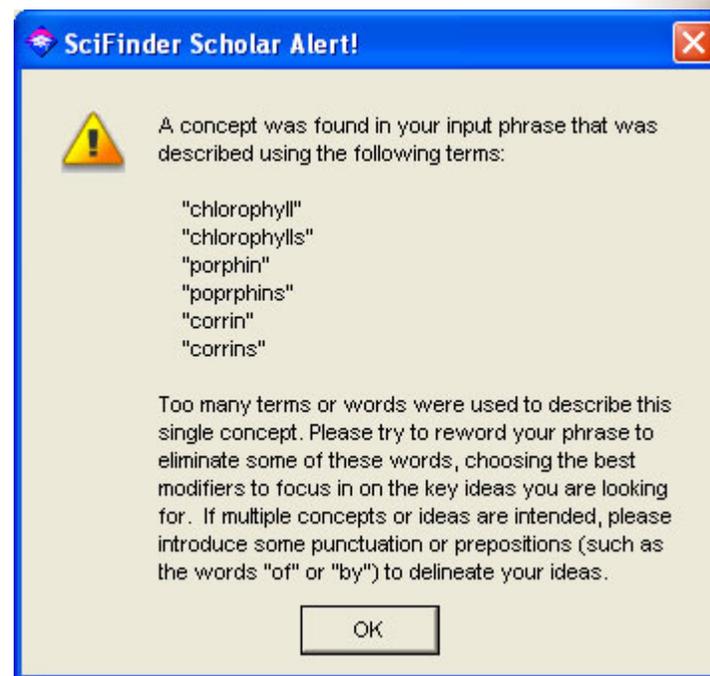
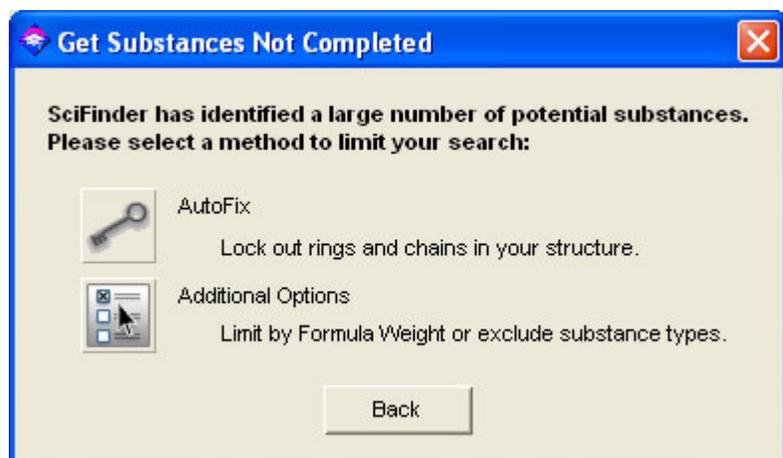


Zugriff: Benutzeroberflächen

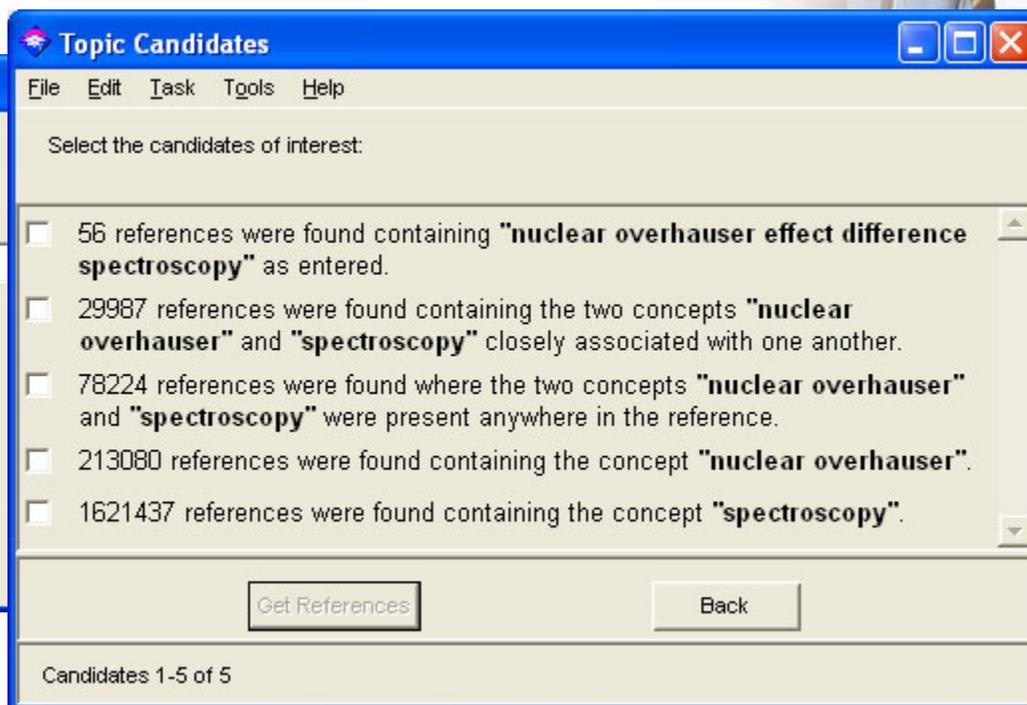
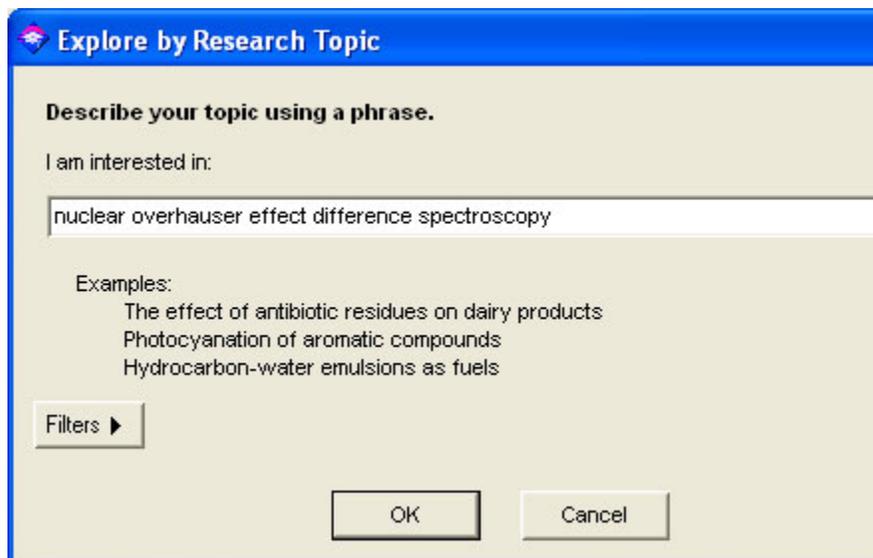
- Chemical Abstracts
 - STN International
 - **STN Messenger**
 - STN on the Web
 - STNeasy
 - div. Hosts
 - **SciFinder (Scholar)**
 - **CA on CD**
 - CA Student Edition



SciFinder Scholar: Grenzen



SciFinder vs. STN Messenger



=> S (NOE OR OVERHAUSER) (A) DIFFEREN?

8126 NOE

9644 OVERHAUSER

3889191 DIFFEREN?

L1 859 (NOE OR OVERHAUSER) (A) DIFFEREN?

Inhalt: Erfassung in Datenbanken

- Quantitativ
 - Typen der Quellen (Primärliteratur)
 - Zahl der Titel (Zeitschriften, Patentbehörden, ...)
 - Zeitrahmen
- Qualitativ
 - Erfassungskriterien (Auswahl)
 - Erschliessungstiefe (Indexierung)



Unterschiede quantitative Erfassung

- Typen und Titel 1°-Literatur
 - **CA:** **alle**
 - Zeitschriften: ca. **9'500**
 - **Beilstein:**
 - Zeitschriften: z.Z. **174**
 - Patente nur bis 1980



Chemical Abstracts: Organische Chemie

- Jahr 2000
- CA Organic Sections (– Organometallic)
 - 47'196 Publikationen, davon
 - 26'151 Zeitschriftenartikel
 - aus **1'173** Zeitschriften
 - nur je 1 Artikel aus 387 Zeitschriften
 - **150** Zeitschriften liefern 81 % aller Artikel !
- Beilstein: 52'256 Publikationen

Unterschiedliche Erfassung

Die Suche nach Literatur zum Heterozyklus 6,7-Dimethoxy-1,2,3,4-tetrahydro-isochinolin, insbesondere zu seiner Herstellung, gab in den Datenbanken von Chemical Abstracts (SciFinder Scholar) und im Beilstein folgende Resultate:

6,7-Dimethoxy-1,2,3,4-tetrahydro-isochinolin	Beilstein	CAplus	CASREACT
Literatur total	121	189	-
Literatur zur Herstellung	36	26	14

Von den Literaturzitate zur Herstellung kommen 17 sowohl in Chemical Abstracts als auch im Beilstein vor.

Von den 9 Zitate exklusiv in Chemical Abstracts ist eines aus dem Jahr 2004 noch zu neu - Handbücher hatten wegen ihrer aufwändigen Erfassung traditionell einen grösseren Zeitrückstand auf die Originalliteratur als Referateorgane wie Chemical Abstracts, und das hat sich auf die entsprechenden Datenbanken übertragen: die CAS-Datenbanken werden wöchentlich, teilweise sogar täglich aktualisiert, Beilstein nur viermal pro Jahr. Vier Artikel stammen aus den Zeitschriften **Acta Poloniae Pharmaceutica**, **Journal of Heterocyclic Chemistry** und **Phytochemistry**, die vom Beilstein an sich erfasst werden, in diesem Fall aber offensichtlich nicht. Die übrigen stammen aus Informationsquellen, die vom Beilstein nicht erfasst werden: ein japanisches Patent, **Journal of Chromatography, B: Biomedical Applications**, **Dokladi na Bulgarskata Akademiya na Naukite** (bulgarisch) und **Szegedi Tanarkepzo Foiskola Tudomanyos Kozlemenyei** (ungarisch).

Die 19 Publikationen zur Herstellung exklusiv im Beilstein sind alle aus Zeitschriften, die an sich von CAS ausgewertet werden, und aus dem von CA abgedeckten Zeitraum. Zu einer davon haben wir gezeigt, warum eine Originalpublikation vom Beilstein erfasst wurde, und von CAS offensichtlich nicht.

Unterschiede qualitative Erfassung

- **Namen von Autoren** *Adressen*
 - **Chemical Abstracts**
 - bis 1996: max. 10 (> 10: 1-9 + *et al.*)
 - ab 1997: max. 150 ? *nur **eine** Adresse*
 - **Beilstein**
 - bis 1979: max. 2
 - ab 1980: max. 6 ***keine** Adressen*
 - **Science Citation Index**
 - **alle** ***alle** Adressen*



Unterschiedliche Erschliessung

Östron-Totalsynthese im Beilstein

Der Artikel von Bachmann, Kushner und Stevenson zur Östron-Totalsynthese aus dem Jahr 1942 enthält im Allgemeinen und Experimentellen Teil insgesamt 69 organische und anorganische Verbindungen (davon 34 als wichtige Produkte bzw. Edukte in Reaktionen) sowie 38 Reaktionen.

Davon waren in CA/CAPlus suchbar (Stand: 18.9.2005):

- 11 Verbindungen mit ihrer CAS Registry Number (und damit sowohl direkt über diese als auch indirekt über ihre Struktur suchbar)
- 4 Verbindungen mit ihrem CA Indexnamen (nicht via Struktur suchbar!)
- 2 Reaktionen (mit Strukturen, in CASREACT)

Eine dieser beiden Reaktionen ist "nur" eine Dehydrierung zur Bestätigung der Konstitution (also nicht auf dem "Hauptweg" zur Totalsynthese), die andere erfasste Reaktion zur Synthese eines Vorläufers des Ausgangsmaterials der beschriebenen Totalsynthese, ist sogar falsch, weil sie gar nicht in diesem Artikel vorkommt, sondern in einer früheren Publikation von Bachmann und Thomas: J. Am. Chem. Soc. (1942) 64, 94-97.

Demgegenüber wurde für den Beilstein (ursprünglich für das gedruckte Handbuch, dann in die Datenbank übertragen) wesentlich mehr erfasst:

- 35 Verbindungen
- 36 Reaktionen

Klassische Aufgabenteilung

- Themen, Autoren, **Verbindungen**:
Chemical Abstracts (32.5 Mio. Verbindungen)
- **Verbindungen** + Eigenschaften:
Beilstein (320 Mio. Datensätze), **Gmelin**
- Zitationen (interdisziplinär):
Science Citation Index
- Spezialdatenbanken für
Reaktionen, Patente, Spektren, usw.

Verbindungsrecherchen

Vergleich CA / Beilstein

In dieser Tabelle vergleichen wir die Resultate der Suche im Beilstein und alle N,O-alkylsubstituierten Tetrahydroisochinoline aus der entsprechenden Suche in Chemical Abstracts.

Nr.	Substituent am N	Subst. am O	Subst. am O	Beilstein	CA
1	Methyl	Methyl	Methyl	X	X
2	Ethyl	Methyl	Methyl	X	X
3	Methyl	Ethyl	Methyl	X	X
4	Methyl	Methyl	Ethyl	X	X
5	Methyl	Ethyl	Ethyl		X
6	n-Propyl	Methyl	Methyl	X	X
7	i-Propyl	Methyl	Methyl	X	
8	Methyl	Methyl	i-Propyl	X	X
9	n-Butyl	Methyl	Methyl	X	
10	n-Pentyl	Methyl	Methyl	X	X
11	2-Methyl-butyl	Methyl	Methyl	X	

Neuere Erweiterungen

- Beilstein
 - 1980: auch Abstracts
- Chemical Abstracts
 - 1997-2003: Literatur vor 1967
 - ab 1999: Zitationen (ab 1997)
 - ab 2001: berechnete Daten (8 \Rightarrow 15)
 - ab 2003: gemessene Daten (13 + 196)
- Science Citation Index
 - Literatur vor 1945 (Century of Science)



Daten Siliziumtetrafluorid SiF₄: CA

Experimental Property Values			
Registry Number: 7783-61-1			
		10	
Formula: F4 Si			
CA Index Name: Silane, tetrafluoro-			
Property	Value	Condition	Note
Boiling Point	-86 °C		(1) CAS
Boiling Point	-86 °C		(2) NLM
Boiling Point	-95.0 °C		(3) CAS
Boiling Point	-95.7--86.0 °C		(1) CAS
Electron Spectrum	See full text		(4) CAS
Fluorine-19 NMR Spectrum	See full text		(5) CAS
IR Absorption Spectrum	See full text		(6) CAS
IR Absorption Spectrum	See full text		(7) CAS
IR Absorption Spectrum	See full text		(8) CAS
IR Absorption Spectrum	See full text		(9) CAS
LC50	See full text		(10) CAS
Mass Spectrum	See spectrum		(11) WSS
Mass Spectrum	See spectrum		(11) WSS
Mass Spectrum	See full text		(12) CAS
Melting Point	-90.2 °C		(3) CAS
Melting Point	-95.7 °C (sublm)		(13) NIOSH
Photoelectron Spectrum	See full text		(14) CAS
UV and Visible Absorption Spectrum	See full text		(15) CAS
X-Ray Spectrum	See full text		(16) CAS

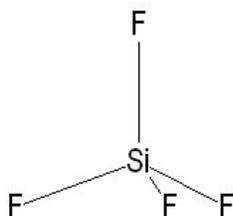


Daten Siliziumtetrafluorid SiF_4 : Gmelin

Substance Identification

GMELIN Registry Number	1949
Linear Structure Formula	SiF_4
Molecular Formula	F_4Si
Molecular Weight	104.079
Chemical Name	silicon tetrafluoride
	tetrafluorosilan
	silicon tetrafluoride
	tetrafluorosilane
	silicon tetrachloride
Type of Substance	Coordination compound

GRN=1949



64

Field Availability List 1-10 of 71

Code	Field Name	Occ.
RX	Reaction	458
PUR	Purification	6
USE	Use of the Substance	1
HDLG	Handling	1
PHYB	Physiological Behavior	1
ECON	Economic Data	1
CONF	Conformation and Bonding Models	3
PGR	Symmetry / Point Group	1
IDA	Intramolecular Distances and Angles	11
VIB	Molecular Vibration	16

Field Availability List 11-20 of 71

Code	Field Name	Occ.
MRC	Molecular Rotation	5
EST	Electronic States	7
EDIS	Bond Dissociation Energy	5
DM	Dipole Moment	2
IP	Ionization Potential	11
PEE	Potential Energy Function	1
TP	Triple Point	4
CRPO	Critical Point	8
MP	Melting Point	3
HFUS	Melting Enthalpy	1

Field Availability List 21-30 of 71

Code	Field Name	Occ.
SFUS	Melting Entropy	1
SP	Sublimation Point	9
HSUB	Sublimation Enthalpy	5
SSUB	Sublimation Entropy	3
SPEI	Sublimation Point (Further Information)	1
BP	Boiling Point	8
HVAP	Boiling Enthalpy	3
SVAP	Boiling Entropy	6
VP	Vapor Pressure	82
VPEI	Vapor Pressure (Further Information)	9

Field Availability List 31-40 of 71

Code	Field Name	Occ.
COHA	Color / Habit	1
CBND	Crystal Bonding	3
CEN	Crystal Energy	3
CST	Crystal Structure	6
VOL	Mole Volume	4
COMP	Compressibility	1
DEN	Density	28
TEC	Thermal Expansion	4
CP	Specific Heat at Constant Pressure	11
CPEI	Cp (Further Information)	2

Code	Field Name	Occ.
HFOR	Enthalpy of Formation	8
GFOR	Gibbs Energy of Formation	1
SFOR	Entropy of Formation	2
EQST	Equation of State	2
ELSR	Electronic Band Structure	1
DIC	Dielectric Constant	3
RI	Refractive Index	7
OA	Optical Anisotropy	1
ELOP	Electrooptical Effects	2
NMR	NMR Spectroscopy	9

Field Availability List 51-60 of 71

Code	Field Name	Occ.
IR	IR Spectroscopy	33
NQR	NQR Spectroscopy	1
MS	Mass Spectrometry	20
UV	UV/VIS Spectroscopy	3
ROT	Rotational Spectroscopy	1
RAMAN	Raman Spectroscopy	2
UPS	UV Photoelectron Spectroscopy	11
XPS	X-ray Photoelectron Spectroscopy	4
XSPE	X-ray Spectroscopy	5
AUG	Auger Spectroscopy	7

Field Availability List 61-70 of 71

Code	Field Name	Occ.
FLU	Fluorescence Spectroscopy	4
LUM	Luminescence Spectroscopy	3
EEL	Electron Energy Loss Spectroscopy	6
SLB	Solubility	32
SPOF	Sorption of Title Compound	46
QUAN	Quantum Chemical Calculations	200
DP	Decomposition	1
STAB	Information on Stability	3
CAT	Behavior as Catalyst	2
ACBS	Behavior as Acid / Base	4

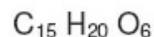
Field Availability List 71-71 of 71

Code	Field Name	Occ.
CNR	Reference	1252

Datenbankinhalte: Recherchebeispiel

Ausgangssituation:

Bei der Überprüfung eines Weizens zur Herstellung von Futtermittel wurden bei der Routineüberprüfung mit Hilfe der GC/MS ungefähr 800 µg/kg eines unbekanntes Analyten qualifiziert. Von dem Analyten konnte nach dem Isolieren aus dem Futtermittel folgende empirische Zusammensetzung ermittelt werden:



Es besteht der Verdacht, dass es sich um ein Mykotoxin handelt.

Fragestellung:

1. Handelt es sich bei der Verbindung um ein „gängiges Mykotoxin“?

Wenn das der Fall ist:

2. Welche Pilzart könnte das Mykotoxin bilden?
3. Welche Gefahren gehen von dem Mykotoxin aus?
4. Wie sind die chemischen und physikalischen Eigenschaften des Mykotoxins?
5. Welche Strukturformel hat das Toxinmolekül
6. Wie müssen sich die Mitarbeiter im Labor vor dem Toxin schützen?
7. Kann das Toxin eine „Carry over“ – Kontaminierung auslösen?
8. Wie sind die Grenzwerte für das Toxin (europäische Verordnung (EG)), ist das Futtermittel noch zu verwenden?
9. Welche analytischen Verfahren gibt es, um das Toxin genau und schnell zu quantifizieren?
10. Wie kann das Toxin zerstört werden?



Vergleich Resultate Mykotoxin

	Myko toxin	Pilzart	Gefah ren	Eigen schaften	Struk tur	Schutz	carry over	Grenz wert	Analyse	Zerstö rung
Römpp	Red	Magenta	Magenta	White	White	White	White	Pink	Magenta	White
EAC	White	White	White	White	White	White	White	White	Red	White
CA	Red	Magenta	White	Red	Red	White	Magenta	White	Magenta	Magenta
Beilstein	Magenta	Magenta	White	Red	Magenta	White	White	Pink	White	White
HSDB	Magenta	White	Red	Magenta	White	Red	White	White	Magenta	White
ANABS	White	White	White	White	White	White	White	White	Red	White

Ullmann, FSTA: nicht erfolgreich

Mykotoxin: Deoxynivalenol

- gemessene Daten
 - Beilstein
 - 6 physikalische + 26 biologische
 - Chemical Abstracts
 - 7 physikalische + 1 biologische
- Literatur zur Toxizität
 - Chemical Abstracts: 262 Zitate
 - CrossFire Beilstein: 27 Zitate*
 - MDL Toxicity Database: 34 Zitate*

* mit Daten

WWW

Was Wo Wie finden

- Existenz von Verbindungen
- Einstiegsinformation (Themen)
- Literatur: Autoren, Verbindungen, Themen
- Reaktionen und Synthesemethoden
- **Eigenschaften (Daten, Spektren)
von Verbindungen**



Eigenschaften-Quellen-Index



Elastizitätsmodul - Eigenschaften-Quellen-Index: Details - Microsoft Internet Explorer

Address: http://www.eq1.ethz.ch/fmi/xsl/eq1/eq1_property_details_de.xsl?db=Eigenschaften&token.session=1918853325291746&token.filter=&node_id=211&find

EQ1
Informationszentrum
Chemie Biologie Pharmazie

English Français

Home > Mechanische Eigenschaften > Module > Elastizitätsmodul

Eigenschaften
Systeme
Quellen

Hilfe
Über EQ1
Informationszentrum

Impressum - 20.6.2007
ETH
Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
Swiss Federal Institute of Technology Zurich

Elastizitätsmodul

Definition (RÖMPP): Definition im RÖMPP Online (nur für Institutionen mit einer Nutzungslizenz)

Einheit: Pa

Symbol: E
 C_{pq} ($p = 1..6, q=1..6$)

Synonyme: Young-Modul

Übersetzung: EN Modulus of Elasticity
FR Module d'élasticité

Quellen

Es wurden erst 7 Dokumente bewertet. Falls Sie eine Rangierung wünschen oder uns bei der Bewertung unterstützen möchten, kontaktieren Sie bitte Dr. Martin Brändle (braendle<at>chem.ethz.ch).

Titel	Urheber	Medium	Standort	Rang	Qualität	Quantität	Quellenart	Systeme
Landolt-Börnstein: New Series = Neue Serie Gruppe 3 Vol. 2: Crystal and Solid State Physics = Kristall- und Festkörperphysik Elastic, Piezoelectric, Piezooptic, Electrooptic Constants, and Nonlinear Dielectric Susceptibilities of Crystals		Print	8 F	1	1		Daten gemessen	
Handbook of the Physicochemical Properties of the Elements	Samsonow G.V. (Ed.)	Print	592 E	2	1		Daten gemessen	
Landolt-Börnstein: 6. Aufl. Vol. 4 Teil 2 b: Technik = Technology Stoffwerkstoffe und Verhalten von metallischen Werkstoffen	Borchers Heinz ; Schmidt Ernst (Eds.)	Print	8 B	3			Daten gemessen	

Internet



Elastizitätsmodul	
Definition (RÖMPP):	Definition im RÖMPP Online (nur für Institutionen mit einer Nutzungslizenz)
Einheit:	Pa
Symbol:	E c _{pq} (p = 1...6, q=1..6)
Synonyme:	Young-Modul
Übersetzung:	EN Modulus of Elasticity FR Module d'élasticité

Quellen		Filter: Polymere = ein. Aus						
Es wurden erst 7 Dokumente bewertet. Falls Sie eine Rangierung wünschen oder uns bei der Bewertung unterstützen möchten, kontaktieren Sie bitte Dr. Martin Brändle (braendle<at>chem.ethz.ch).								
Titel	Urheber	Medium	Standort	Rang	Qualität	Quantität	Quellenart	Systeme
Physical properties of polymers handbook	Mark James E.	Print	NEBIS				Daten gemessen	Polymere
CRC Materials Science and Engineering Handbook	Shackelford James F. (Ed.)	Print	303 D				Daten gemessen	Festkörper Polymere
Polymers A Property Database		Online	Online			52 Verbindungen	Daten gemessen	Polymere

[Zurück zu Suchresultaten](#)

[Navigation im Thesaurus](#)

Eigenschaften

 Mechanische Eigenschaften

 Module

 Elastizitätsmodul

 Druckkoeffizient

 Elastizitätskoeffizient

 Nichtlineare Elastische Eigenschaften

 Temperaturkoeffizient

Danke für Ihre Aufmerksamkeit !

