

Bilance prvních deseti let 21. století v oblasti vědeckých informací

Jaroslav Šilhánek

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

Upřesnění pojmu „vědecké informace“ pro tuto přednášku !

- Nejdůležitějším informačním nástrojem vědeckých informací je článek ve vědeckém časopise.
- Nejtypičtější cesta k němu je ve vědecké praxi prostřednictvím sekundárních zdrojů – bází dat.
- Materiál je čerpán především z oblasti STM, tedy „Science“ neboli přírodní vědy.

Období ~ 1990-2000

- Principiální otevření možností zapojit se do budované celosvětové infrastruktury elektronických vědeckých informací.
- Budování počítačových sítí – připojení na sítě Eunet a následně Internet, podpora MŠMT, vznik Cesnetu.
- Postupné zpřístupňování prvních elektronických bází dat na jednotlivých univerzitách a počátky síťového zpřístupnění prostřednictvím sítě Cesnet, programy INFRA, TEN aj.
- První rozsáhlá vědecká báze dat „Beilstein“ na lokálním serveru na VŠCHT následně zpřístupněná formou konsorcia většině chemických fakult a ústavů v ČR – 1997.

Stručná chronologie 2000-2010:

- 2000 – víceleté programy MŠMT.
- 2000-2001 – v průběhu opakovaných vyhlášení programu LI byla postupně zpřístupněna velká část v té době nabízených bibliografických bází dat i elektronických verzí vědeckých periodik.
- 2004 – 2008 program 1N umožnil pokračování zpřístupněných zdrojů i případnou změnu volby.
- 2009 – program INFOZ znamenal sice mírnou redukci, ale v zásadě se rozsah zpřístupnění udržel.
- Úroveň rozsahu zpřístupnění je zajištěna do roku 2011-2012.

Individuální aktivity:

- Kromě centrálního financování byla řada zdrojů financována jednotlivými univerzitami a vědeckými ústavy.
- Od r. 2001 i formou oborových konsorcií nefinancovaných z programů LI, 1N a INFOZ.
- Příkladem jsou konsorcia chemických fakult pro zpřístupnění časopisů Americké chemické společnosti a Royal Chemical Society a pravděpodobně dalších.

Bilance první:

- Během prvních deseti let 21. století byla pro českou vědeckou komunitu obsahově a tématicky zpřístupněna většina důležitých vědeckých zdrojů, plně srovnatelná a možná i převyšující úroveň renomovaných západních univerzit.
- Orientace na několik největších producentů vedla ovšem k částečnému potlačení zdrojů menších vydavatelů, např. vědeckých společností, a to hlavně v oblasti periodik.
- Existuje cca 700 vědeckých společností vydávajících periodika, které „vzdorují“ zařazení do konsorciálních souborů.

Jak jsou nabízené možnosti zpřístupnění využívány ?

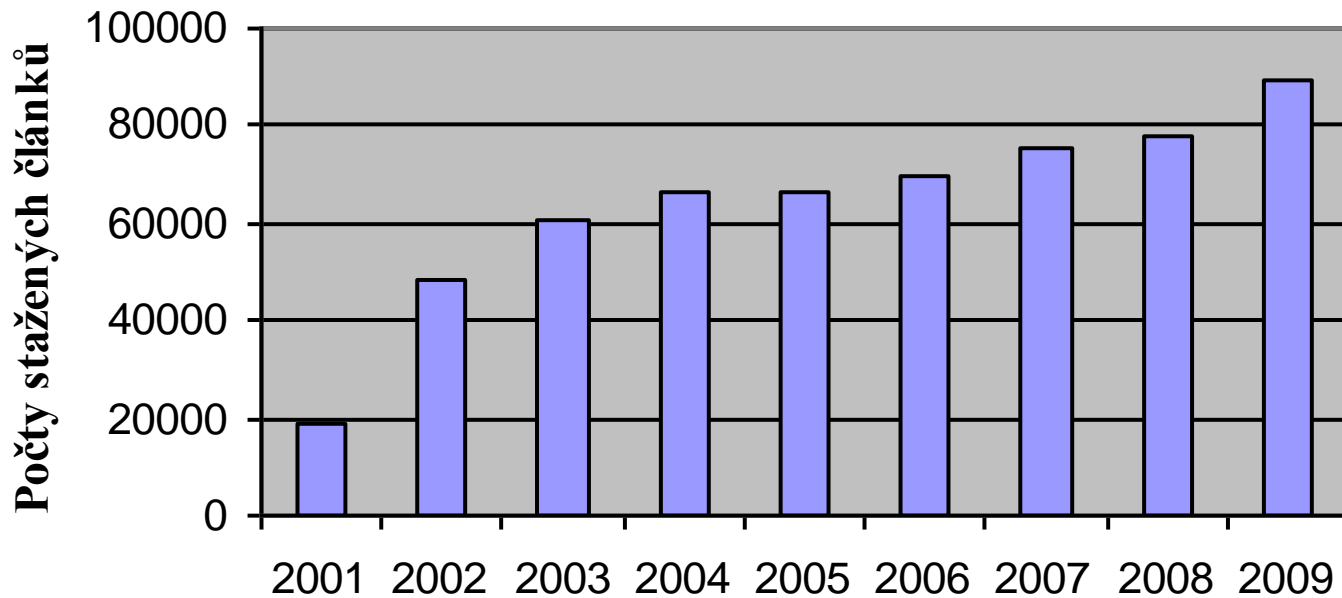
- Síťový přístup umožňuje snadné získávání statistických údajů o počtu přístupů.
- Licenční politika a kvalitní síťový přístup vedou k výraznému zvýšení počtu přístupů.
- Celkový objem vědeckých informací za 10 let ale rovněž velmi výrazně stoupl.
- Stejně tak během deseti let se zvýšil počet vědců, kteří vědecké informační zdroje využívají.

O čem vlastně statistiky vypovídají ?

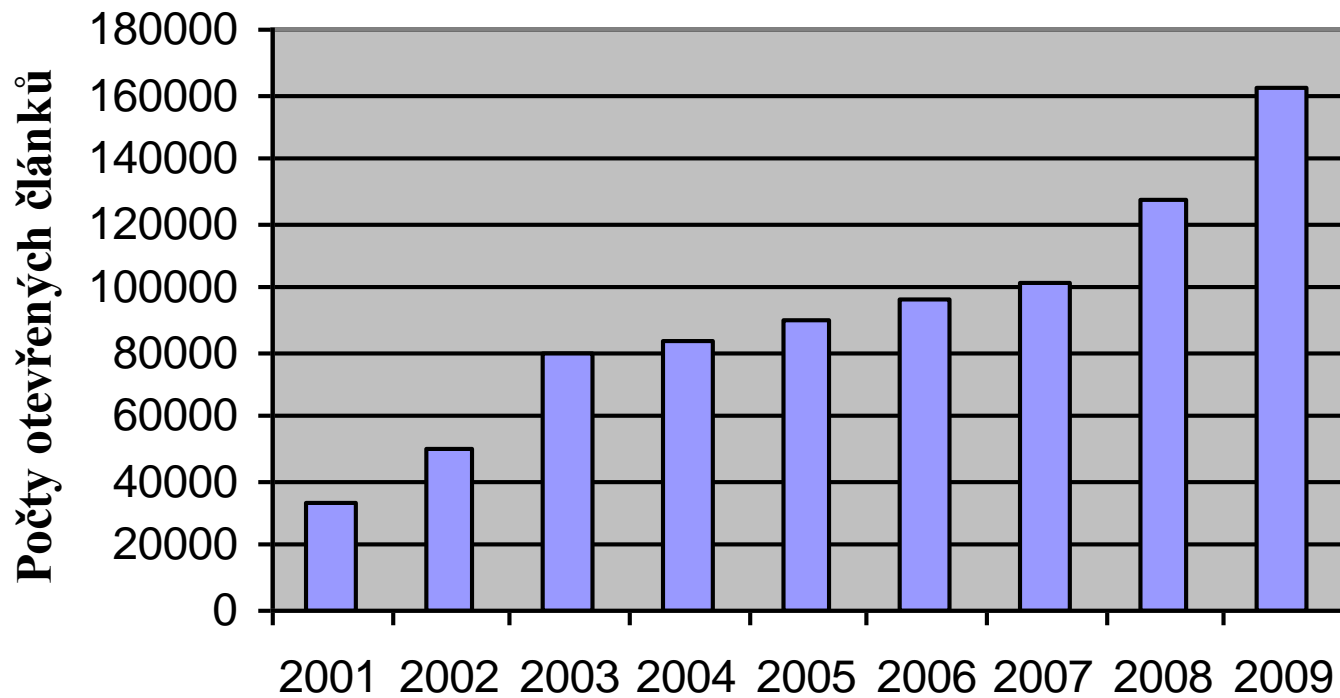
- Všechny statistiky budou ilustrovat nárůst využívání elektronických zdrojů.
- Údaje o připojení a otevření nebo stažení dokumentu z daného zdroje jsou v jistém smyslu spolehlivé – jsou odstraněny opakované pokusy, vícenásobné „klikání“ apod., ale mohou být manipulovány.
- Neinformují, jak byly dále využity nalezené informace.

Několik ilustrativních statistik.

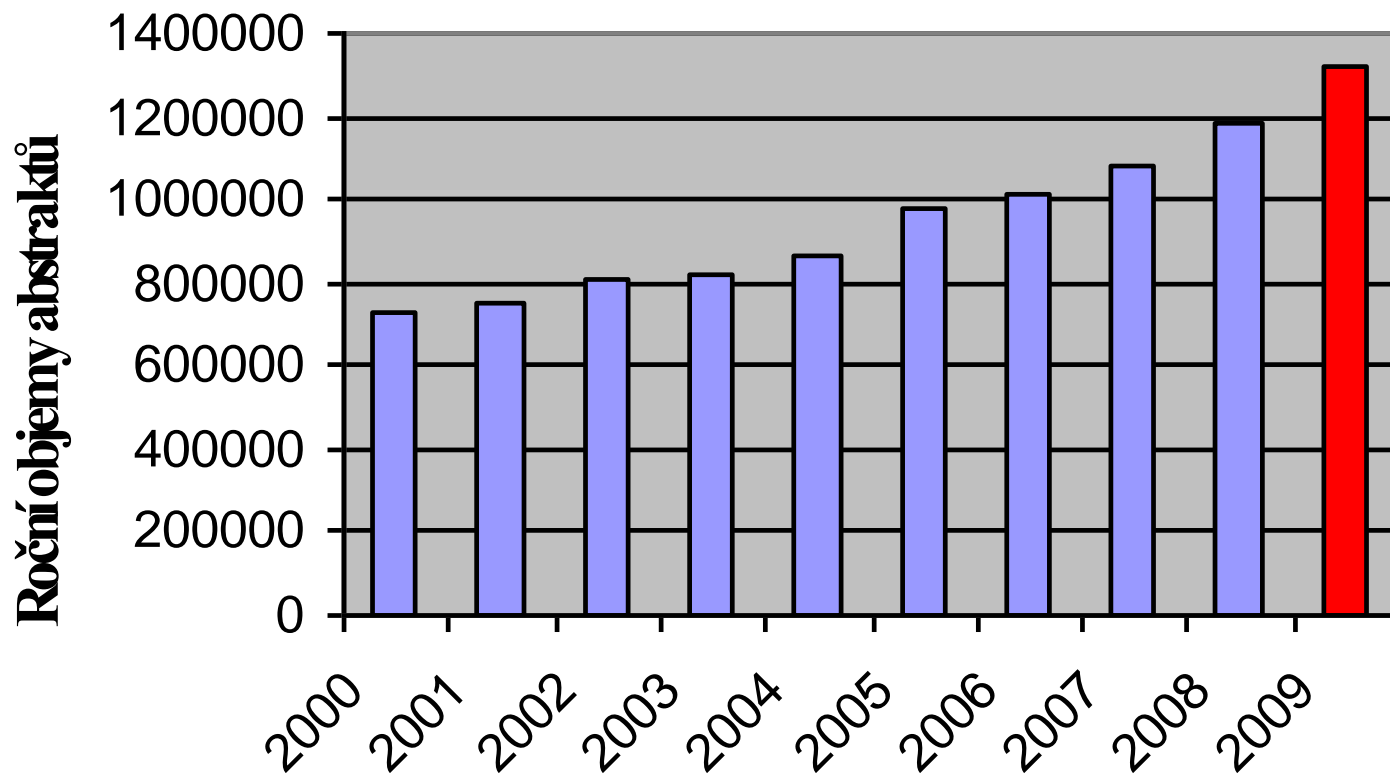
Statistika využití časopisů ACS pro konsorcium



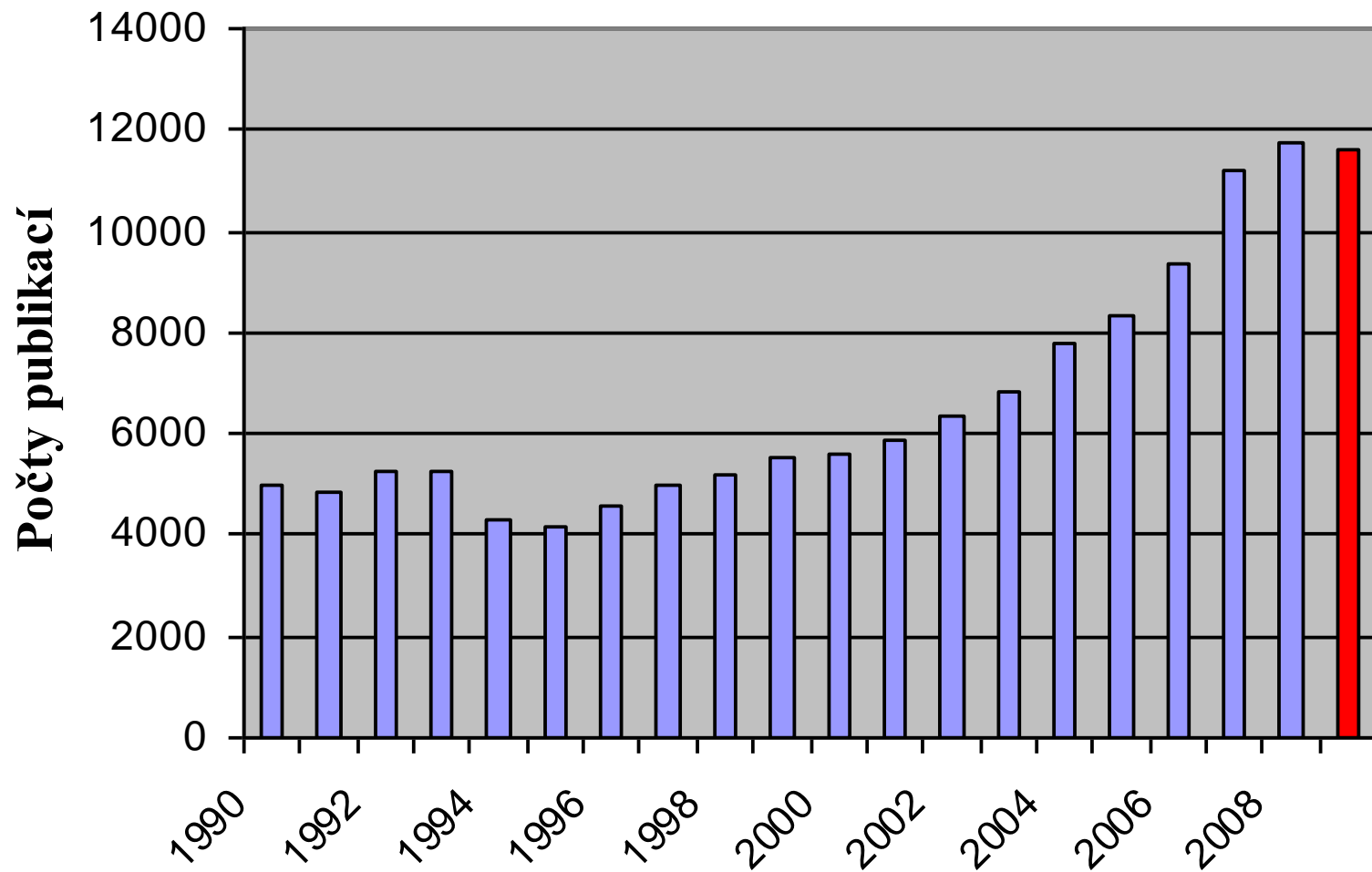
Statistika ScienceDirect - VŠCHT Praha



Nárůst počtu abstraktů v Chemical Abstracts

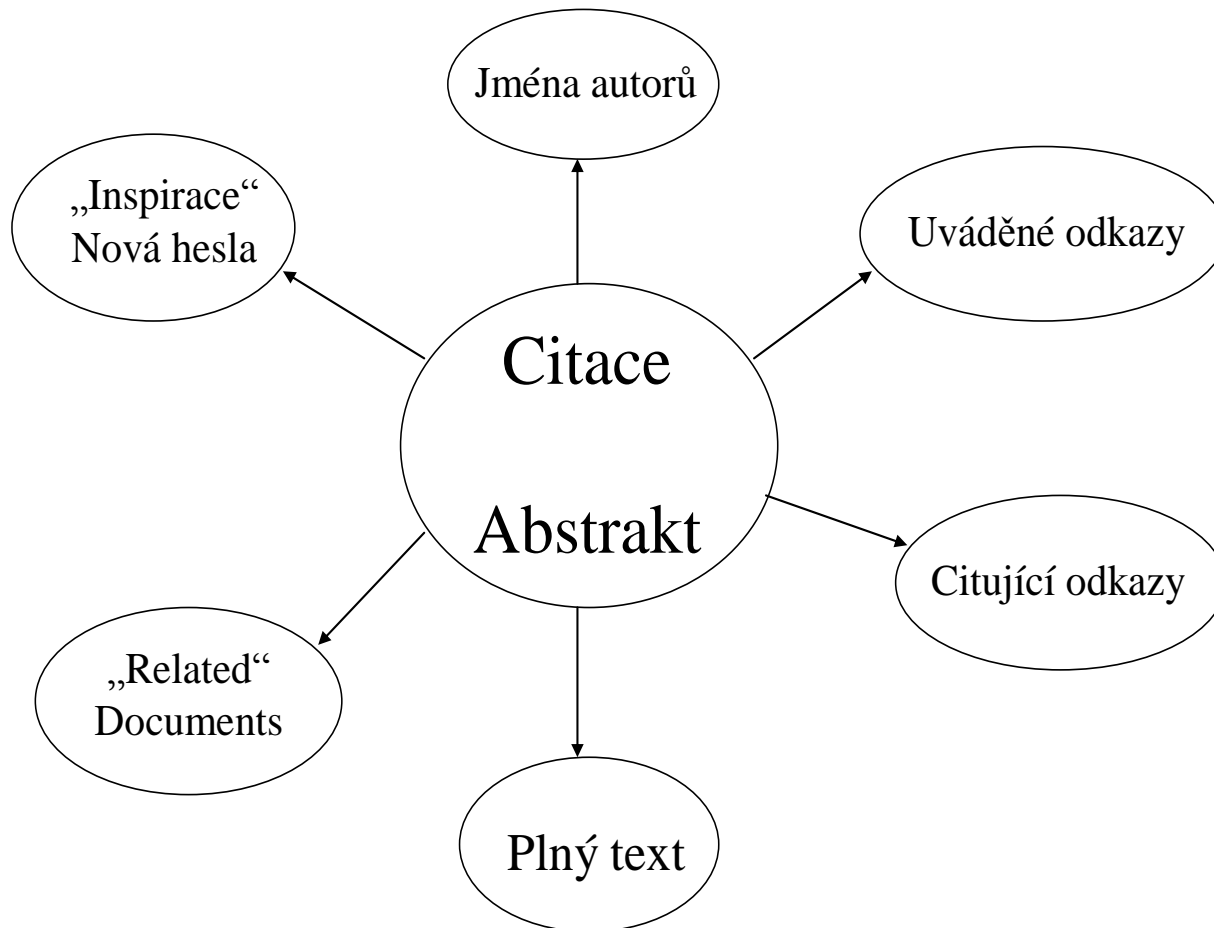


Roční produkce publikací z České republiky ve WoS



O čem statistiky vypovídají ?

- Impresivní údaje o vysokých počtech otevřených dokumentů nelze srovnávat s počty dokumentů vyhledaných v klasických knihovnách.
- Stejně tak údaje o přístupech k sekundárním bázím dat nejsou ekvivalentní řešením realizovaným v tištěných verzích.
- Proč jsou statistiky tak vysoké ?



Citations

- 1a) List, B; Tetrahedron 2002, V58, P5573
- 1b) Dalko, P; Angew Chem 2004, V116, P5248
- 1b) Dalko, P; Angew Chem Int Ed 2004, V43, P5138
- 1c) Pellissier, H; Tetrahedron 2007, V63, P9267
- 1d) Dondoni, A; Angew Chem 2008, V120, P4716
- 1d) Dondoni, A; Angew Chem Int Ed 2008, V47, P4638
- 2a) Anon; Chem Rev 2007, V107
- 2b) Anon; Acc Chem Res 2004, V37
- 2c) Anon; Adv Synth Catal 2004, V346, P9
- 2d) Dalko, P; Enantioselective Organocatalysis 2007

Indexing -- Section 64-0 (Pharmaceutical Analysis)

Pharmaceutical analysis
Raman spectroscopy
Structural phase transition
Vibrational spectroscopy
(anal. of solid-state transformations of pharmaceutical compds. using vibrational spectroscopy)

IR spectroscopy
(near-IR; anal. of solid-state transformations of pharmaceutical compds. using vibrational spectroscopy)

Spectroscopy
(terahertz pulsed; anal. of solid-state transformations of pharmaceutical compds. using vibrational spectroscopy)

1. Novel thiourea-amine bifunctional catalysts for asymmetric conjugate addition of nitroalkenes: rational structural combination for high catalytic efficiency

By Chen, Jia-Rong; Cao, Yi-Ju; Zou, You-Quan; Tan, Fen; Fu, Liang; Zhu, Xiao-Yu; Xiao, Wen-Jing
From Organic & Biomolecular Chemistry (2010), 8(6), 1275-1279. Language: English, Database: CAPLUS

[Substances](#) [Reactions](#) [Citing](#) [Full Text](#) [Link](#) [0 Comments](#) [0 Tags](#)

2. A new type of organocatalyst for highly stereoselective Michael addition of ketone water

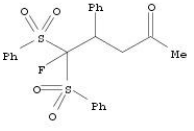
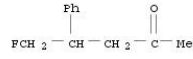
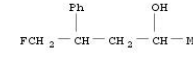
By Syu, Siang-en; Kao, Tzu-Ting; Lin, Wenwei
From Tetrahedron (2010), 66(4), 891-897. Language: English, Database: CAPLUS

[Substances](#) [Reactions](#) [Citing](#) [Full Text](#) [Link](#) [0 Comments](#) [0 Tags](#)

3. Novel Proflinamide-Camphor-Containing Organocatalysts for Direct Asymmetric Michael Addition of Unmodified Aldehydes to Nitroalkenes

By Reddy, Raju Jannapu; Kuan, Hsuan-Hao; Chou, Tsai-Yung; Chen, Kwunmin
From Chemistry--A European Journal (2009), 15(37), 9294-9298, S9294/1-S9294/29. Language: English, Database: CAPLUS

[Substances](#) [Reactions](#) [Citing](#) [Full Text](#) [Link](#) [0 Comments](#) [0 Tags](#)

<input type="checkbox"/> 1. Substance Detail 1186139-40-1	<input type="checkbox"/> 2. Substance Detail 1186139-39-8	<input type="checkbox"/> 3. Substance Detail 1186139-38-7
		
Rotation (+). C ₂₃ H ₂₁ F O ₅ S ₂ 2-Pentanone, 5-fluoro-4-phenyl-5,5-bis(phenylsulfonyl)-, (+)-	C ₁₁ H ₁₃ F O 2-Pentanone, 5-fluoro-4-phenyl-	C ₁₁ H ₁₅ F O Benzenepropanol, gamma-(fluoromethyl)-alpha-methyl-
~1 References Reactions Commercial Sources Regulatory Information Link	~1 References Reactions Commercial Sources Regulatory Information Link	~1 References Reactions Commercial Sources Regulatory Information Link

Ranking of polymorph stability for a pharmaceutical drug using the Noyes–Whitney titration template method

R.J. Willson^{a,*}, T.D. Sokoloski^b

^a GlaxoSmithKline, St. George's Avenue, Welbybridge, Surrey, UK

^b GlaxoSmithKline, Upper Providence, Collegeville, Philadelphia, USA

Received 10 June 2003; received in revised form 16 July 2003; accepted 16 July 2003

Available online 8 February 2004

Abstract

A further refinement to the screening process of candidate selection in early drug development is the selection of a polymorphic form on the bases of solid state stability. The Noyes–Whitney titration template method has been used routinely by others to determine the intrinsic solubility of sparingly soluble materials. This method uses potentiometric measurements whilst titrating over a pH range to determine the pH-solubility profile of a drug substance. Using a novel modification to the conventional Noyes–Whitney titration template method, this paper describes an application for the determination of the relative stability between polymorphic forms of materials. Such an assessment can be deduced from the change in Gibbs energy that accompanies the physical changes in materials when going from a solid to a solution phase and will be shown to be derived from the intrinsic solubility measurements. In addition, it will be shown that solution calorimetry was used to good effect to help in the interpretation of the solubility results.

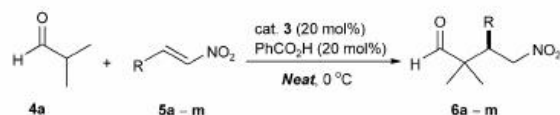
Experimental Section

General Procedure for the Asymmetric Michael Reaction

The α,α -disubstituted aldehyde (**4a** or **4b**) (0.80 mmol) was added to a mixture of catalyst **3** (13.6 mg, 0.04 mmol), benzoic acid (4.9 mg, 0.04 mmol) and corresponding nitroalkene (0.20 mmol). The reaction mixture was stirred at 0°C for the requisite times as indicated in Table 1, Table 2 and Table 3. After the nitroalkene had been consumed as shown by TLC analysis, the reaction mixture was subject to flash column chromatography on silica gel (ethyl acetate/hexanes: 1:10) to afford the pure Michael product.

2,2-Dimethyl-4-nitro-3-phenyl-butanal (6a): ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃): δ =9.49 (s, 1H), 7.34–7.29 (m, 1H), 7.28–7.22 (m, 2H), 7.22–7.15 (m, 2H), 4.85 (dd, J =13.1 and 11.3 Hz, 1H), 4.69 (dd, J =13.1 and 4.2 Hz, 1H), 3.78 (dd, J =11.3 and 4.2 Hz, 1H), 1.12 (s, 3H), 0.96 (s, 3H); ¹³C NMR (100 MHz, CDCl₃): δ =204.1, 135.3, 128.9, 128.5, 127.9, 76.1, 48.2, 48.0, 21.4, 18.6. The enantiomeric excess was determined by chiral HPLC analysis using a Chiralcel OD-H column (*i*-PrOH/hexanes: 20/80, flow rate: 0.8 mL min⁻¹, λ =254 nm): t_R =13.6 min (major), 18.5 min (minor).

Table 2. Substrate studies of the Michael addition of **4a** to various β -nitroalkenes (**5a–m**) under solvent-free conditions at 0°C^[a]



Entry	5	R	Product 6	Time [days]	Yield [%] ^[b]	ee [%] ^[c]
1	5a	C ₆ H ₅	6a	1.0	88	85
2	5b	4-Me-C ₆ H ₄	6b	0.5	89	84
3	5c	2-MeO-C ₆ H ₄	6c	3.0	92	71
4	5d	3-MeO-C ₆ H ₄	6d	0.5	88	85
5	5e	4-MeO-C ₆ H ₄	6e	0.5	96	83
6	5f	2-CF ₃ -C ₆ H ₄	6f	3.0	66	52
7	5g	3-CF ₃ -C ₆ H ₄	6g	0.5	88	85
8	5h	2-Br-C ₆ H ₄	6h	1.0	88	60
9	5i	3-Br-C ₆ H ₄	6i	0.5	89	85
10	5j	4-Br-C ₆ H ₄	6j	0.5	98	84
11	5k	3-Cl-C ₆ H ₄	6k	0.5	92	85
12	5l	4-Cl-C ₆ H ₄	6l	0.5	88	84
13 ^[d]	5m	PhCH ₂ CH ₂	6m	3.0	56	90

Sequence:

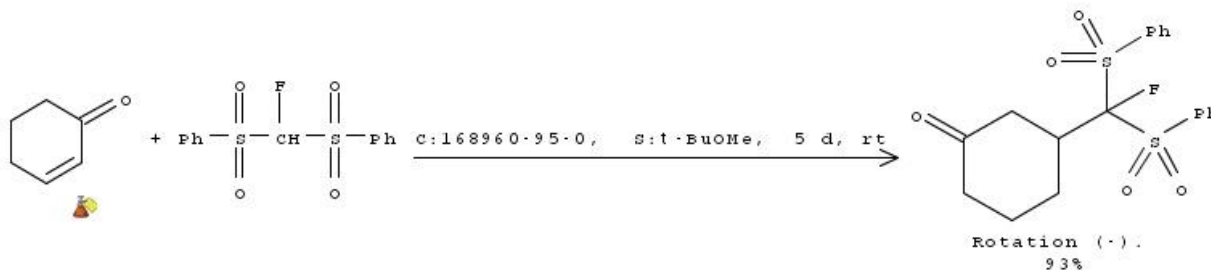
```
1  tgtataattg gatttcctaa tactgtcadc ctcaaagaaa gtgtattggg
51  tttttaaaaa agaaagggta tttggaaata aagtcagatg gaaaattcat
101 tttttaaatt cccgttttgt cactttttct gataaaagat ggccatatta
151 ccccttttctg gccccatgta tctcagtacc ccatggagct gggctaagta
201 aataggaatt ggtttcacgc ctgaggcaat tagacacttt ggaagatggc
251 ataacctgtc tcacctggac ttaagcgtct ggctetaatt cacagtgetc
301 ttttctctctc actgtateca ggttccctcc cagaggagcc accagttctc
351 atgggtggca ctcagtctct cttctctcca gctgactaaa cttttttctc
401 gtaccagtta atttttccaa ctactaatag aataaaggca gttttcaaaa
451 aataaaaaaa aagagggccn nnaaacatg teggcgcct cggcccagtc
501 gactctagac tegagcaa
```

Formula: C8 H7 N

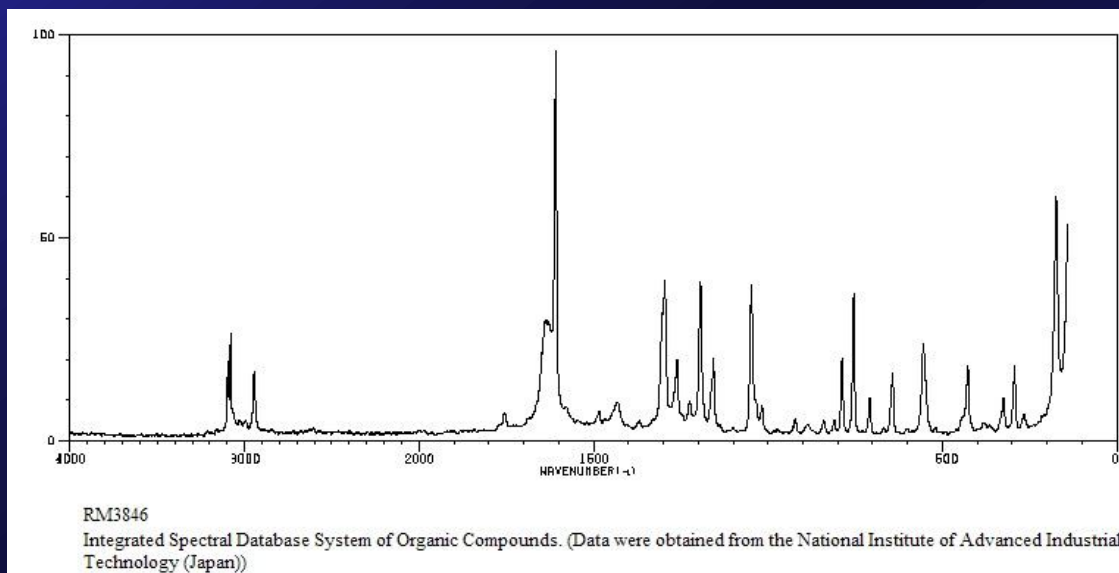
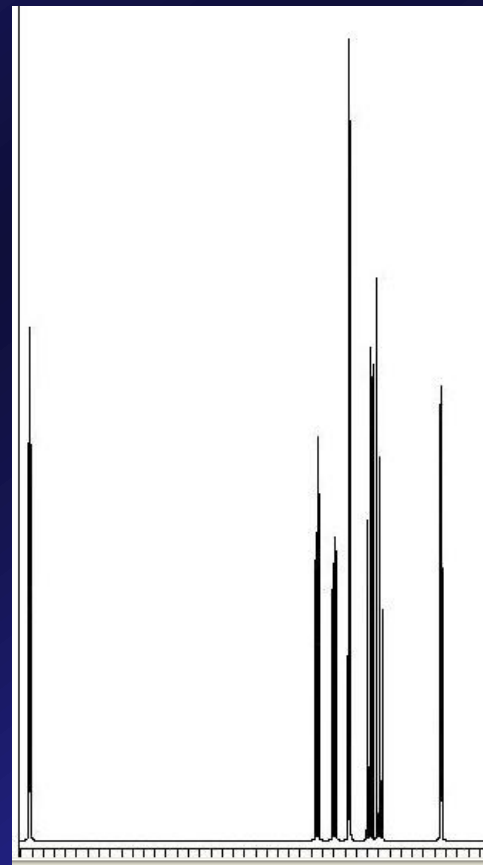
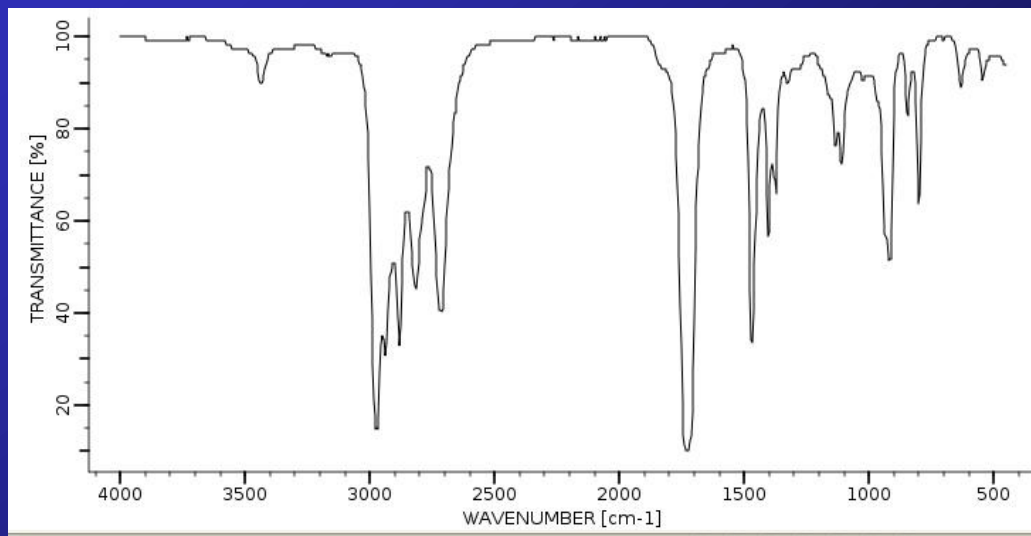
CA Index Name: 1H-Indole

Property	Value	Condition	Note
Acid/Base Dissociation Constant (Ka/Kb)	See full text	1 of 7	(1) CAS
Boiling Point	254-255 °C		(2) CAS
Boiling Point	254 °C		(3) SRC
Boiling Point	240-260 °C		(4) CAS
Boiling Point	167 °C		(5) CAS
Boiling Point	128-133 °C	Press: 28 Torr	(6) NLM
Boiling Point	120 °C	Press: 0.7 Torr	(7) CAS
Boiling Point	115 °C	Press: 2 Torr	(8) IC
Boiling Point	103-107 °C	Press: 2e-3 Torr	(9) CAS
Boiling Point	82 °C	Press: 1.0 Torr	(10) CAS
Boiling Point	80 °C	Press: 0.01 Torr	(11) CAS
Bond Angle	See full text		(12) CAS
Bond Length	See full text		(12) CAS
Carbon-13 NMR Spectrum	See spectrum		(13) WSS
Carbon-13 NMR Spectrum	See spectrum		(13) WSS

11. Reaction Detail [Link](#) [Similar Reactions](#)



NOTE: Michael addition, stereoselective,
Reactants: 2, Catalysts: 1, Solvents: 1,
Steps: 1, Stages: 1



Statistika celkového připojení:

- Báze dat Chemical Abstracts – SciFinder
- Duben 2010
- VŠCHT Praha
- Celkem 2044 připojení
- Celková doba připojení = 41.472 minut
- = ~ 691 hodin
- = ~ 29 dní

Bilance druhá:

- V uplynulých deseti letech došlo k velmi rozsáhlému vzájemnému propojení jak mezi informacemi v daném zdroji, tak mezi různými zdroji.
- Tato propojení a hlavně propojení na plné texty vědeckých dokumentů nesmírně zefektivnilo standardní způsob práce s vědeckými informacemi.
- Statistická data naznačují, že tyto evidentní možnosti elektronických verzí byly za uplynulých 10 let realizovány v takovém měřítku, že jsou dnes považovány za standard a nikoliv jen jako vize budoucnosti.

Otázky financování:

- Přesto, že v uplynulém období byla většina finančních prostředků vkládána do elektronických verzí, koncepce financování vychází stále v podstatě z předplatného tištěných verzí.
- Intenzivně se hledá vhodný obchodní model („business model“) pro financování přístupů k elektronickým verzím vědeckých informací. Open Access ???
- Statistiky umožňují vyjádřit náklady na přístup k dokumentům („cost per download“), ale porovnávat lze jen elektronické verze navzájem, srovnávání s přístupem k tištěným formám je problematické.

Orientační data pro porovnání:

- Nakladatelství Elsevier uvádí jako globální průměr nákladů na stažení jednoho dokumentu hodnoty:
2,75 USD „per download“ ~ 50 Kč
a jako výjimku pro nejmenovanou velkou americkou univerzitu hodnotu 0,60 USD
~ 11 Kč.
(v r. 2009 byly náklady na stažení 1 článku ze souboru ScienceDirect pro VŠCHT Praha 15 Kč)

Podle: Ware, M., Mabe, M.: The STM Report, International Association of Scientific, Technical and Medical Publishers, 2009.

- Obdobná dat pro akademické instituce ve Velké Británii pro rok 2007:

0,80 GBP ~ 27 Kč

RIN (2009) E-journals: their use, value and impact. A Research Information Network report, <http://is.gd/3Q7F>

- Plné využití možností síťového přístupu k vědeckých informacím v elektronických formách předpokládá co nejrozsáhlejší soubor licencovaných, a tedy průběžně financovaných zdrojů – tato alternativa přichází v úvahu především pro univerzity se širokým spektrem pěstovaných oborů.
- Jiné řešení může být založeno na dnes velmi rychlém dodání požadovaného dokumentu (často i tentýž den), případně úplné resignaci na udržování permanentních přístupů – standardních předplatných.
- Rozhodování mezi těmito dvěma alternativami bude individuální a mělo by být založeno jak na podrobné bilanci nákladů, tak i na rozsahu a zaměření vědecké činnosti.

Bilance třetí:

- Nepochybně klíčovým aspektem financování v uplynulých deseti letech byla podpora zpřístupňování elektronických zdrojů formou programů MŠMT.
- Druhým podstatným faktorem byla konsorciální forma financování a zpřístupňování.
- Vědecké informační zdroje byly financovány:
 - ve výši 100 % z prostředků programů
 - jen částečně v různé výši, 25 – 50 % v případě sekundárních zdrojů, ale až 90 % v případě periodik
 - plně financovány z prostředků vědeckých institucí, a to i v případě konsorcií.

Organizační aspekty:

- Nejvýznamnějším aspektem je umožnění konsorciálního zpřístupnění elektronických informačních zdrojů.
- V případě sekundárních bází dat se jedná především o záležitost organizační zahrnující v podstatě množstevní slevu.
- V případě periodik je to zásadně nový přístup vydavatelů velmi výrazně rozšiřující spektrum okamžitě dostupných titulů.
- Konsorciální řešení je ale dostupné jen neziskovému sektoru.

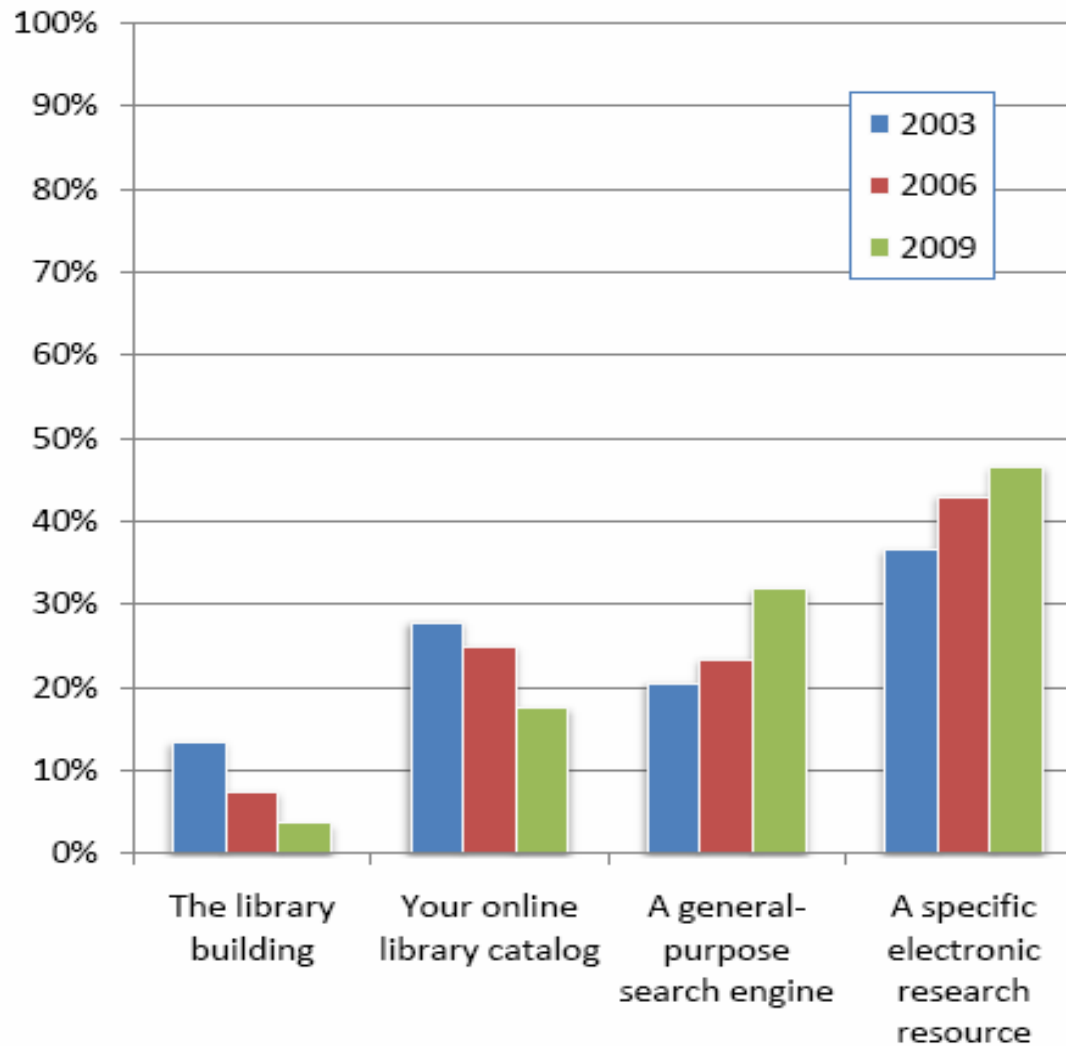
Univerzální řešení – databázová centra:

- Principiálně musí existovat cesta, jak získat vědecké informace pro jakéhokoliv zájemce bez ohledu na statut jeho pracoviště.
- Univerzální přístup k vědeckým bázím dat nabízí jen databázové středisko STN International, i když je spíše orientováno na oblast STM.
- Přístup a využívání je zpoplatněn, cena závisí o daného zdroje – báze dat.
- Univerzální přístup k vědeckým článkům je možný přímo ze serverů vydavatelů na základě přímé platby.
- Služba „Document Delivery Service“ závisí na politice konkrétní instituce, která ji realizuje a závisí na respektování vlastnických práv vydavatelů.

Existence knihoven:

- Vědecké knihovny na neziskových institucích v naprosté většině plní dále svoji funkci, včetně zpřístupňování elektronických zdrojů.
- Vědecké knihovny v průmyslu byly v převážné většině zrušeny, nebo nejsou systematicky doplňovány, případně jsou zakonservovány.
- Vývoj za uplynulých deset let ale jednoznačně ukazuje směřování k převážně elektronickým zdrojům.

Figure 1: Starting point for research identified by faculty, in 2003, 2006, and 2009



From: Schonfield R.C., Housewright R.: Faculty Survey 2009, April 7, 2010:

www.ithaka.org/ithaka-s-r

Copyright 2010 Ithaka.

Bilance čtvrtá:

- Pro neziskové instituce se v uplynulých deseti letech díky elektronickým verzím otevřelo široké spektrum cest k přímému přístupu k vědeckým informacím, které jsou prokazatelně vysoce využívány.
- Komerční subjekty ztratily v tomto období zřetelné a samozřejmé povědomí o standardních možnostech přístupu k vědeckým informacím v elektronické formě.

Bilance celková:

- V uplynulých deseti letech došlo k mimořádně výraznému rozšíření možností zpřístupnění vědeckých informací v elektronické formě, což se nepochybně projevilo zvýšením celkové efektivity práce s vědeckými informacemi a vědecké činnosti jako takové.
- Dosažená úroveň odpovídá v řadě vědeckých disciplín prakticky všem požadavkům a je především díky státní podpoře v uplynulém období v každém případě plně srovnatelná s úrovní přístupu a práce s vědeckými informacemi na předních světových univerzitách a vědeckých pracovištích.
- Z řady důvodů není zatím nová situace a možnosti v oblasti přístupu a využívání vědeckých informací zažita a aplikována v průmyslové sféře.

Děkuji za pozornost