

# KEMIAN ALAN TÄRKEIMMÄT TIETOKANNAT

Pro gradu-tutkielma

Jyväskylän yliopisto

Kemian laitos

Orgaanisen kemian laitos

18.12.2012

Anne Veitonmäki

## TIIVISTELMÄ

Työn kirjallisessa osassa tarkasteltiin kemian alan tärkeimpiä tietokantoja, joista oli valittu Web of Knowledge, CSD (Cambridge Structural Database) ja Scifinder. Web of Knowledge on tutkimusalusta, jonka kautta on pääsy tärkeimpiin viitetietokantoihin, mm. Web of Scienceen.<sup>1</sup> Web of Science sisältää useita alatietokantoja. Jyväskylän yliopiston tilaus sisältää Science Citation Index Expanded, Social Sciences Citation Index ja Art & Humanities Citation Index –tietokannat, joista Science Citation Index Expanded on luonnontieteiden osio.<sup>2</sup> CSD on kristallografian tietokanta, joka sisältää orgaanisten ja organometallisten yhdisteiden kokeellisesti määritettyä kiderakennetietoa.<sup>3</sup> Scifinder –liittymä tarjoaa pääsyn Chemical Abstracts Service (CAS) –tietokantoihin. CAS pitää yllä maailman laajinta kokoelmaa kirjallisuus- ja patenttiviitteitä, reaktioita ja yhdisteitä.<sup>4</sup> Scifinder on hyvä työkalu ammattimaiseen käyttöön ja tutkijoille.<sup>5</sup>

Työn kokeellisessa osassa rakennettiin tietokoneella kiderakennetietokanta JY:n orgaanisen kemian osastolla syntetisoiduista yhdisteistä. Tietokanta käsitti 626 rakennetta, jotka oli jaoteltu orgaanisiin rakenteisiin, metallikomplekseihin ja muihin rakenteisiin. Orgaaniset rakenteet jaoteltiin edelleen resorsinareeneihin, CHOX, CHNO, ja muihin orgaanisiin rakenteisiin.

## **ESIPUHE**

Erikoistyö ja pro gradu –tutkielma tehtiin loppuvuonna 2011 – 2012 Jyväskylän yliopiston kemian laitoksella, orgaanisen kemian osastolla. Erikoistyö tehtiin 11/2011 – 02/2012 välisenä aikana, ja pro gradu alkukeväällä 2012 ja syksyllä 2012.

Kirjallisuuslähteinä käytettiin CASin kotisivuja, CCDC:n kotisivuja, CCDC-tietokantaa, wosin kotisivuja, wos-tietokantaa, wikipediaa, Googlea, Jyväskylän yliopiston kirjaston sivuja, JYKDOKista JY:n opinnäytetöitä, Jyväskylän ylioppilaslehteä, kirjaa Steed, Jonathan W.; Turner, David R.; Wallace, Karl J.; Core Concepts in Supramolecular Chemistry and Nanochemistry ja luentomateriaaleja.

Kokeellisen osuuden ohjaajana ja tarkastajana toimi Kari Rissanen, ja kirjallisen osuuden toisena tarkastajana lisäksi Juhani Huuskonen. Haluan kiittää heitä hyvistä neuvoista, työn ohjaamisesta ja tarkastamisesta.

# SISÄLLYSLUETTELO

<b>TIIVISTELMÄ</b>	<b>i</b>
<b>ESIPUHE</b>	<b>ii</b>
<b>SISÄLLYSLUETTELO</b>	<b>iii</b>
<u>KIRJALLINEN OSA</u>	
<b>1 JOHDANTO</b>	<b>1</b>
<b>2 WEB OF KNOWLEDGE</b>	<b>3</b>
<b>2.1 Web of Knowledgen historiaa</b>	<b>4</b>
<b>2.2 Lehtien valintaprosessi</b>	<b>5</b>
<b>2.2.1 Perusjulkaisustandardit</b>	<b>5</b>
<b>2.3 Science Citation Index Expanded</b>	<b>6</b>
<b>2.3.1 Käyttö</b>	<b>6</b>
<b>2.3.2 Search-haku</b>	<b>7</b>
<b>2.3.2.1 Hakusäännöt</b>	<b>9</b>
<b>2.3.3 Haku tekijän nimellä (Author Finder)</b>	<b>11</b>
<b>2.3.3.1 Hakusäännöt</b>	<b>11</b>
<b>2.3.3.2 Haku</b>	<b>12</b>
<b>2.3.4 Advanced Search</b>	<b>12</b>
<b>2.3.4.1 Haun suoritus</b>	<b>13</b>
<b>2.3.5 Cited Reference Search</b>	<b>13</b>
<b>2.3.6 Hakuhistoria (Search History)</b>	<b>15</b>
<b>2.3.7 Tulokset (Results)</b>	<b>17</b>

<b>2.3.8 Viitteet</b>	<b>18</b>
<b>2.3.9 Citation Map (viitekartta)</b>	<b>19</b>
<b>2.3.10 Citation Report</b>	<b>21</b>
<b>2.4 Uusia ominaisuuksia</b>	<b>22</b>
<b>2.5 Esimerkki</b>	<b>22</b>
<b>3 CAMBRIDGE STRUCTURAL DATABASE</b>	<b>23</b>
<b>3.1 Datan lähettäminen tietokantaan</b>	<b>25</b>
<b>3.2 Yleinen informaatio sisältö</b>	<b>25</b>
<b>3.3 CSD</b>	<b>27</b>
<b>3.3.1 ConQuest</b>	<b>27</b>
<b>3.3.1.1 ConQuestin käyttö</b>	<b>28</b>
<b>3.3.2 WebCSD</b>	<b>31</b>
<b>3.3.3 Mercury</b>	<b>33</b>
<b>3.3.4 VISTA</b>	<b>34</b>
<b>3.3.5 IsoStar</b>	<b>35</b>
<b>3.3.6 Mogul</b>	<b>37</b>
<b>3.3.7 PreQuest</b>	<b>39</b>
<b>3.4 CCDC:n taustatietoa, historiaa ja yhteistyökumppanit</b>	<b>40</b>
<b>4 SCIFINDER</b>	<b>42</b>
<b>4.1 Käyttö</b>	<b>43</b>
<b>4.1.1 Viitteiden haku</b>	<b>43</b>
<b>4.1.2.1 Kemiallisten yhdisteiden haku</b>	<b>48</b>
<b>4.1.2.2 Piirtoeditori</b>	<b>51</b>
<b>4.1.3 Reaktioiden haku</b>	<b>53</b>

<b>4.2 Taustatietoa, historiaa ym.</b>	<b>58</b>
<b>4.3 CAS –tietokannat</b>	<b>58</b>
<b>4.3.1 CAS REGISTRY</b>	<b>58</b>
<b>4.3.2 CAPlus</b>	<b>60</b>
<b>4.3.3 CASREACT</b>	<b>61</b>
<b>4.3.4 CHEMCATS</b>	<b>62</b>
<b>4.3.5 CHEMLIST</b>	<b>63</b>
<b>4.3.6 MARPAT</b>	<b>64</b>
<b>5 YHTEENVETO</b>	<b>65</b>
<u>KOKEELLINEN OSA</u>	
<b>6 JOHDANTO</b>	<b>67</b>
<b>7 OHJELMAT</b>	<b>68</b>
<b>7.1 Jmol</b>	<b>68</b>
<b>7.2 CCDC</b>	<b>69</b>
<b>7.2.1 Conquest</b>	<b>69</b>
<b>7.2.2 Mercury</b>	<b>71</b>
<b>7.3 Irfanview</b>	<b>73</b>
<b>7.4 Coffee Cup HTML –editori</b>	<b>73</b>
<b>7.5 PrtScr</b>	<b>73</b>
<b>7.6 Word</b>	<b>73</b>
<b>8 TIETOKANNAN RAKENNE</b>	<b>73</b>
<b>9 TIETOKANNAN SISÄLTÖ</b>	<b>75</b>
<b>9.1 Tietokanta</b>	<b>75</b>

<b>9.1.1 Orgaaniset rakenteet</b>	<b>75</b>
<b>9.1.1.1 Resorsinareenit</b>	<b>75</b>
<b>9.1.1.2 CHOX</b>	<b>76</b>
<b>9.1.1.3 CHNO</b>	<b>77</b>
<b>9.1.1.4 Muita orgaanisia</b>	<b>78</b>
<b>9.1.2 Metallikompleksit</b>	<b>78</b>
<b>9.1.3 Muut rakenteet</b>	<b>79</b>
<b>10 TIETOKANNAN KÄYTTÖ</b>	<b>79</b>
<b>11 TYÖN SUORITUS</b>	<b>86</b>
<b>12 CD</b>	<b>89</b>
<b>13 KIRJALLISUUSLUETTELO</b>	<b>90</b>

## KIRJALLINEN OSA

### **1 JOHDANTO**

Tärkeimpiä tietokantoja ulkomaisten artikkeleiden hakuun JY:ssä ovat Scifinder, Reaxys –käyttöliittymä, PubMed (myös kemiaa), Web of Science, ETDEWeb-energiatietokanta, ERIC-tietokanta pedagogisia opintoja tekeväille kemistille (kasvatustieteellisen aineiston hakutyökalu) ja yliopiston kirjaston NELLI-portaali. Reaxys –käyttöliittymään kuuluu CrossFire Beilstein (orgaanisen kemian tietokanta) ja CrossFire Gmelin (epäorgaanisen kemian ja organometallien tietokanta). Reaxys – käyttöliittymä sisältää myös patenttitietokannan ja edellisiin pohjautuvan synteesisuunnittelukartan.<sup>6</sup>

Kotimaisten artikkelien hakuun JY:ssä löytyy ARTO –kotimainen, korkeakoulu- ja erikoiskirjastojen tuottama artikkeliviitetietokanta (kotimaisia tieteellisiä ja ammatillisia lehtiä kaikilta aloilta), Aleksis –erilaisten kotimaisten yleislehtien artikkeliviitteitä kaikilta aloilta ja suurimpien sanomalehtien viime vuosien artikkeleita, sekä eViikki – Viikin tiedekirjaston tuottama, vapaasti käytettävissä oleva tietokanta (tämä kattaa mm. seuraavia tieteenaloja: ympäristöala, metsä- ja puuala sekä biotieteet ja biotekniikka).<sup>7</sup>

Yhdisteiden ja reaktioiden hakuun JY:ssä löytyy Scifinder-tietokanta, Reaxys-tietokannat, CSD ja ICSD -kristallografian tietokannat, sekä ChemBioOffice.<sup>8</sup>

Thomson Reuters Web of Knowledge on tutkimusalusta, joka kerää yhteen monentyyppistä sisältöä (lehtiartikkeleita, patenteja, nettisivuja, konferenssijulkaisuja ja Open Access materiaalia) yhden käyttöliittymän kautta. Web of Science (WOS) - tietokantapakettia voidaan käyttää Web of Knowledgen kautta.<sup>19</sup>

(WOS)- viittaustietokantapaketti on viittaustiedon hakutyökalu, jota voidaan käyttää myös artikkeleiden hakuun, kuten mitä tahansa viitetietokantaa.<sup>6</sup> WOS sisältää ristiinhaettavaa, täysin indeksoitua bibliografista ja viitetietoa yli 100 vuoden ajalta.<sup>1</sup> Tutkimusinstituutit maksavat hakukoneen käytöstä. Jyväskylän yliopiston kirjaston tilaus sisältää alatietokannat Science Citation Index Expanded (luonnontieteiden osio), Social Sciences Citation Index ja Arts & Humanities Citation Index.<sup>2</sup> WOSin viitteistä pääsee myös Journal Citation Reports –tietokantaan, joka sisältää lehtien vaikutuskertoimet, eli impaktiluvut (impact factor).<sup>6</sup>



Kristallografian tietokanta CSD (Cambridge Structural Database) on orgaanisten rakenteiden tietokanta. Se sisältää orgaanisten yhdisteiden kiderakennetietoa, kuten kaava, alkeiskoppi, avaruusryhmä, atomien paikat ja muuta kristallografista tietoa, sekä hienonnustietoa. Tietokantojen kohdalla orgaaninen yhdiste on yhdiste, joka sisältää C-H sidoksen.<sup>10</sup>

CSD tietokantaa tuottaa ja ylläpitää Cambridge Crystallographic Data Centre, CCDC, <http://www.ccdc.cam.ac.uk/>. Tietokanta ei ole julkisessa käytössä. Tietokannan hankkii akateemiseen käyttöön Suomeen Tieteen tietotekniikan keskus CSC. Se hankkii lisenssit, maksaa ja jakaa ne yliopistoille. Kullakin laitoksella on kiinteä määrä lisenssejä.<sup>10</sup>

CSC – IT Center for Science Ltd järjestää IT tukea ja resursseja akateemiselle maailmalle, tutkimusinstituuteille ja yhtiöille Suomessa. Se on Suomen valtion omistama. CSC on Opetus- ja kulttuuriministeriön alainen organisaatio.<sup>11</sup> Funet verkkopalvelut (kansallinen tutkimus- ja koulutusverkko, jossa on nopea internetyhteys akateemisiin instituutioihin ja valtion laitoksiin) kuuluvat CSC:n palveluihin.<sup>12</sup> Funet verkon kautta tutkijat voivat käyttää laajaa kokoelmaa tieteellisiä ohjelmistoja ja tietokantoja Suomessa, mm. CSD ja Reaxys.<sup>13</sup>

Scifinder on laajimpia viitetietokantoja.<sup>6</sup> Chemical Abstracts Service (CAS) – tietokannat sisältävä Scifinder tarjoaa hyvät ominaisuudet yhdisteitä ja reaktioita koskevien hakujen tekemiseen ja käsittelyyn. Aiheenmukaiset haut Scifinderissa tehdään englannin kielellä, rakenne- ja reaktiohaut myös piirto-ohjelmaa käyttäen. CAS tietokanta CPlus sisältää n. 36 milj. kirjallisuusviitettä kemian kirjallisuuteen. Linkitys viitetietokannan viitteestä lehdenkustantajaan on lähes aina, kun lehteen on tilaus. CAS REGISTRY sisältää tällä hetkellä tiedot n. 69 milj. orgaanisesta ja epäorgaanisesta aineesta, sekä n. 64 milj. sekvenssistä ym. CASREACT sisältää tietoa orgaanisista reaktioista, CHEMCATS sisältää tietoa kaupallisesti saatavista kemikaaleista ja niiden jakelijoista, ja CHEMLIST sisältää tietoa säännellyistä kemikaaleista.<sup>14,15</sup>

Scifinderia käytetään netin kautta selaimella. Käyttölisenssi Jyväskylän yliopistossa kattaa 4 yhtäaikaista käyttäjää. Käyttöoikeus on vain yliopiston henkilökunnalla ja rekisteryidyillä opiskelijoilla julkisin varoin tehtävää opetus- ja tutkimustyötä varten. Ohjelman käyttö kaupallisiin tarkoituksiin on ehdottomasti kielletty. Tietokannan tuottaja seuraa käyttöä. Tietokannan tuottaja on Chemical Abstract Service, American Chemical Society:n jaosto.<sup>14</sup>

CrossFire Beilstein perustuu kuuluisaan ”Beilstein’s Handbuch der Organischen Chemie”, joka kattaa kirjallisuutta orgaanisen kemian alkuajoista lähtien. Beilstein sisältää avainlehdistä (1771-) ja patenttiasiakirjoista (1886-1980) peräisin olevaa orgaanista kemiaa. Beilstein on laajin kokeellista fysikaalista, spektroskopista, kemiallista ja biologista aktiivisuustietoa sisältävä tietokanta. CrossFire Gmelin sisältää avainlehdistä (1772-) peräisin olevaa epäorgaanista ja organometallikemiaa. Gmelin on Beilsteinia täydentävä tietokanta, joka perustuu kuuluisaan ”Handbuch der Anorganischen Chemie”. Se on laajin kokeellista tietoa keramiikasta, nanokiteistä, klustereista ja komplekseista sisältävä tietokanta.<sup>16</sup> Reaxys on käyttöliittymä Beilstein ja Gmelin tietokantoihin. Tietokantoja voidaan käyttää, kun halutaan tarkistaa kirjallisuudessa esiintyvä tyypillinen metodi alkuperäisestä kirjallisuudesta. Ne voivat toimia myös ideapankkina, esimerkiksi onko jollain yhdisteellä käyttöä lääkeaineena.<sup>17</sup>

ChemBioOffice on ohjelmapaketti kemistien ja biologien käyttöön. Ohjelmapaketin sisältöön kuuluu ChemBioDraw, ChemBio3D, ChemFinder, BioViz, BioAssay, Inventory ja E-Notebook. Ohjelmien avulla voidaan mm. luoda rakenteita, kuvia ja kaavioita, sekä mallintaa aineiden ominaisuuksia ja spektrejä rakenteiden perusteella. Paketti sisältää myös työkaluja tiedonhallintaan. Käyttölisenssi kattaa kemian laitoksen ja Ylistörinteen kirjaston. Ohjelmapaketti on kemian laitoksen hankinta.<sup>18</sup>

Internetissä on myös vapaasti käytettävissä olevia tietokantoja, mm. SDBS (Spectral Database for Organic Compounds) ja NIST Chemistry WebBook (kemiallisia ja fysikaalisia ominaisuuksia yli 40 000 yhdisteelle).

## **2 WEB OF KNOWLEDGE**

Thomson Reuters Web of Knowledge tutkimusalusta tarjoaa pääsyn tärkeimpiin viitetietokantoihin, ja työkaluja tiedon hakuun, jäljittämiseen ja mittaamiseen, sekä yhteistyöhön. Opiskelijat ja tutkijat yli 5600 instituutiossa ja laitoksessa, ja yli 100 maassa käyttävät Web of Knowledgea. Arkistoja ja viitetietoa on kattavasti luonnontieteiden, yhteiskuntatieteiden ja humanististen tieteiden aloilta yli 100 vuoden ajalta.<sup>19</sup>

Web of Knowledgen kautta voidaan käyttää seuraavia tietokantoja: Web of Science, Chinese Science Citation Database, Current Contents Connect, Derwent Innovations Index, BIOSIS Citation Index, BIOSIS Previews, Biological Abstracts, CABI: CAB

Abstracts ja Global Health, Inspec, Medline, Food Science and Technology Abstracts, Zoological Record, Journal Citation Reports ja Essential Science Indicators.<sup>19</sup>

Web of Knowledge sisältää 23 000 lehteä, 23 milj. patenttia 40 patentteja myöntävältä viranomaiselta, 110 000 konferenssijulkaisua, 9 000 nettisivua, 2 milj. kemiallista rakennetta, yli 100 vuoden ajalta arkistoja, yli 87 milj. lähdenimikettä, 700 milj. siteerattua viitettä ja 256 tieteenalaa.<sup>20</sup>

Web of Sciencessä saatavilla olevat alatietokannat ovat Science Citation Index Expanded, Social Sciences Citation Index, Arts & Humanities Citation Index, Conference Proceedings Citation Index, Index Chemicus ja Current Chemical Reactions.<sup>21</sup>

## 2.1 Web of Knowledgen historiaa

Vuonna 1955 julkistettiin idea viitteiden hausta ja luetteloinnista. Tekniikan kehittyessä, vuosikymmeniä myöhemmin, syntyi Web of Science, jossa yhdistyi nettilinkitys ja viitteidenhaku. Vuonna 2002 tuotiin markkinoille Web of Knowledge, uusi ainutlaatuinen tutkimusalusta. Sisältöön kuului dataa relevanteista tieteellisistä lehdistä, patentteja, julkaisuja ja arvioitua nettisisältöä luonnontieteiden, yhteiskuntatieteiden ja humanististen tieteiden aloilta. Kattavuus alkoi v. 1945, ja siihen kuului sekä laajaa, monitieteistä sisältöä, kuten Web of Science, että kohdennettua erikoissisältöä. Työkaluihin kuului ristiinhaku (kaikista tietokannoista haku), siteerattujen viitteiden haku ja kokoteksti -linkitys. Vuonna 2003 tutkijoilla yli 50 maassa oli pääsy keskimäärin 137 000 kokoteksti -linkkiin, ja v. 2004 keskimäärin 264 000 kokoteksti -linkkiin. Käyttöliittymän täysi uudelleensuunnittelu paransi käyttöä, ja Analyze -työkalu oli uusi ominaisuus. Vuonna 2005 tutkimusalustaan oli pääsy yli 3200 instituutiolla 74 maassa, keskimäärin 943 000 kokoteksti -linkkiin, ja v. 2006 yli 20 milj. käyttäjällä 81 maassa. Tietokannan päivityksessä oli mm. lisätty uusia sähköisiä arkistoja, kuten Web of Sciencen tieteellinen kattavuus v. 1900 lähtien, sekä uusia työkaluja (tekijän identifiointi, citation report, EndNote Web). Tutkimusalustalla tehtiin keskimäärin yli 150 000 käyntiä päivässä. Vuonna 2007 Web of Knowledge tarjosi uuden käyttöliittymän, jossa oli ominaisuuksia kaikille käyttäjä -tasolle ja kokoteksti -linkit yli 2000 uuteen tieteelliseen julkaisuun. Vuonna 2008 Web of Knowledgea käytti yli 3550 instituutiota 90 maassa. Tietokantaa oli taas päivitetty uusilla ominaisuuksilla. Web of Knowledge oli saatavilla englanniksi tai yksinkertaisella kiinalla.<sup>22</sup>

## 2.2 Lehtien valintaprosessi

On osoitettu, että suhteellisen pieni osa tieteellisistä lehdistä julkaisee pääosan merkittävistä tieteellisistä tutkimuksista. Tähän periaatteeseen viitataan Bradfordin lakina, jonka brittiläinen matemaatikko ja kirjastovirkailija S.C. Bradford havaitsi 1930-luvun puolivälissä. Thomson Reutersin analyysi 7621 lehdestä v. 2008 paljasti, että alle 300 lehteä käsittää 50 % siitä, mihin viitataan, ja 30 % siitä, missä julkaistaan. Lehtikoostumus vaihtelee heijastaen tieteellisten puheenaiheiden kehittymistä. Kattavuutta päivitetään tunnistamalla ja arvioimalla uusia lehtiä, ja tarpeen mukaan poistamalla vähemmän hyödyllisiä lehtiä.<sup>23</sup>

Valittaessa lehtiä Web of Scienceen otetaan huomioon monia määrällisiä ja laadullisia kriteerejä. Niihin kuuluu lehden julkaisustandardit, toimituksellinen sisältö, kirjoittajien kansainvälisyys ja viiteanalyysi. Thomson Reutersin toimittajilla, jotka suorittavat arviointeja, on vastuualueensa koulutustausta. Käytännössä jokainen uusi julkaistu tiedelehti arvioidaan.<sup>23</sup>

### 2.2.1 Perusjulkaisustandardit

Valintaprosessin peruskriteereihin kuuluu julkaisuaikataulussa pysyminen, tämä koskee myös sähköisiä lehtiä. Thomson Reuters arvioi, kuinka hyvin lehti seuraa kansainvälisiä toimituksellisia käytäntöjä, jotta lähdeartikkelien löytyminen saadaan optimoitua. Näihin käytäntöihin kuuluu informatiiviset lehtien otsikot, kattavasti kuvailevat artikkelien otsikot ja tiivistelmät, täydet bibliografiset tiedot siteeratuista viitteistä ja kaikkien kirjoittajien osoitetiedot. Thomson Reuters keskittyy lehtiin, jotka julkaisevat kokotekstin, tai vähintään bibliografiset tiedot englanniksi, koska englanti on kansainvälinen tieteen kieli. Kansainväliselle tutkimusyhteisölle tärkeimmät lehdet julkaisevat aina kokotekstin englanniksi, erityisesti luonnontieteissä. Myös vertaisarviointi ja tiedot rahoituksesta ovat tärkeitä. Arvioidessaan toimituksellista sisältöä Thomson Reuters määrittää, tuoko arvioinnin alla olevan lehden sisältö jotain uutta tietokantaan, vai onko aihe jo riittävästi katettuna tietokannassa. Nykypäivän tieteellinen tutkimus tapahtuu globaalissa kontekstissa, ja lehtien kansainvälisyyttä seurataan kirjoittajien, toimittajien ja hallituksen neuvoa antavien jäsenten suhteen. Thomson Reuters on kiinnostunut myös hyvistä alueellisista lehdistä, ja sisällyttää näitä pienen valikoiman mukaan joka vuosi. Ne on tarkoitettu pikemmin paikalliselle, kuin kansainväliselle yleisölle. Valintaprosessissa käytetään apuna viiteanalyysia. Web of

Science on viitehakemisto, joten Thomson Reutersilla on runsaasti viitedataa käytettävänä. Kaikki siteeratut viitteet indeksoidaan, riippumatta siitä, kuuluuko siteerattu työ Web of Scienceen.<sup>23</sup>

### **2.3 Science Citation Index Expanded**

WOS –tietokantapaketti sisältää artikkelien, ja sitä kautta kirjoittajien, saamia viittauksia tiedelehdissä. Jyväskylän yliopiston tilaus sisältää alatietokannat Science Citation Index Expanded, Social Sciences Citation Index ja Art & Humanities Citation Index.<sup>2</sup> Luonnontieteiden alan lehtiä indeksoidaan Science Citation Index Expanded –alatietokantaan. Science Citation Index Expanded on monitieteinen Web of Sciencen alatietokanta, joka kattaa 8300 tärkeintä lehteä 150 tieteen- ja tekniikan alalta. Tietokanta sisältää artikkeleita v. 1900 nykypäivään, ja sisältää kaikki viitetiedot luetteloiduista artikkeleista.<sup>24</sup>

#### **2.3.1 Käyttö**

Tietokantaan päästään kirjaston sivujen nelliportaalin kautta. Kirjaututaan portaaliin ja suoritetaan haku Find Database –kohdasta hakusanalla wos. Hakumahdollisuuksia tietokannassa ovat Search, Author Finder, Cited Referenced Search, Advanced Search ja Search History.<sup>25</sup> Search –haulla voidaan hakea tavalliseen tapaan hakusanoilla, tekijällä, lehden nimellä jne. Author Finder –toiminto tekijänhakuun erottelee samanimisten tekijöiden artikkelit ryhmiä. Cited Reference Search –haku tapahtuu artikkelin viittaustietojen perusteella. Artikkelisiin viitannoiden artikkelien perusteella voidaan seurata kyseisen tutkimuksen myöhempää etenemistä (WOS-tietokantapaketin erikoisominaisuus.) Current Limits –kohdassa näytön alareunassa voidaan Timespan –kohdan avulla valita haluttu aikaväli haulle. Citation Databases –kohdassa voidaan valita joko tietokantaosio SCIE, SSCI tai AHCI, ja Adjust –painikkeilla voidaan tehdä haku- tai tulosrajoituksia. Web of Sciencellä voidaan hakea useasta alatietokannasta samanaikaisesti.<sup>2</sup>

### 2.3.2 Search -haku

Kuvassa 1 on näkymä Search –haun aloitussivusta. Search –haun avulla etsitään viitteitä hakusanoilla, lehden nimellä, tekijällä, ResearcherID:llä, tutkimusryhmän nimellä, kustannustoimittajan nimellä, julkaisun nimellä, DOI:llä, julkaisuvuodella, osoitteella, kielellä, asiakirjatyypillä, rahoittajalla, määrärahan numerolla ja saantinumerolla.<sup>25</sup> Haut tehdään aina englannin kielellä, ja haun tulokset ovat aina englannin kielisiä.<sup>26</sup>

Search | Author Finder | Cited Reference Search | Advanced Search | Search History

**Web of Science®**

**Search**

Example: oil spill\* mediterranean in Topic

AND Example: O'Brian C\* OR OBrian C\* in Author  
Need help finding papers by an author? Use Author Finder.

AND Example: oil spill\* mediterranean in Publication Name

Add Another Field >>

Search Clear Searches must be in English

Current Limits: (To save these permanently, sign in or register.)

- Timespan
  - All Years (updated 2012-08-15)
  - Date Range
    - From: YYYY-MM-DD to: 2012-08-17
    - Use Processing Date instead of Publication Date
- Citation Databases
  - Science Citation Index Expanded (SCI-EXPANDED) --1945-present
  - Social Sciences Citation Index (SSCI) --1956-present
  - Arts & Humanities Citation Index (A&HCI) --1975-present
- Adjust your search settings
 

Note: Spelling variations (such as US and UK spelling differences) in topic and title search terms are found automatically (for example, bet

Lemmatization  On (finds alternative forms of the search term, for example, tooth and teeth)
- Adjust your results settings
 

Records per page 10

Sort by Publication Date -- newest to oldest

Refine panel Show

View in: 简体中文 | English | 日本語

© 2012 Thomson Reuters | Terms of Use | Privacy Policy | Please give us your feedback on using Web of Knowledge.

Kuva 1. Search –haku<sup>25</sup>

ResearcherID on tunnistusjärjestelmä tieteellisille kirjoittajille. Thomson Reuters esitteli järjestelmän tammikuussa 2008. Tunnistusjärjestelmä auttaa erottamaan toisistaan samanimiset kirjoittajat, tai kirjoittajat, joilla on samat alkukirjaimet, sekä jos lehdessä on kirjoitusvirheitä. Kirjoittajat voivat linkittää henkilökohtaisen ResearcherID:n artikkeleihinsa ResearcherID:n nettisivulla. Tällä tavalla he voivat pitää julkaisulistaansa päivitettyinä ja ajan tasalla. Kattava kuva tekijän tuotannosta on siten saatavilla, vaikkei kaikkia artikkeleita olisikaan indeksoitu Web of Scienceen. Yhdessä Digital Object Identifierin (DOI) kanssa ResearcherID tarjoaa ainutlaatuisen assosiaation tekijästä ja tieteellisistä artikkeleista.<sup>27</sup>

DOI-numero on v. 2000 käyttöön otettu elektronisille asiakirjoille, teksteille, kuville, äänelle, videoille ja ohjelmistoille annettava pysyvä tunniste. Se viittaa tiettyyn nimenomaiseen dokumenttiin osoitteesta riippumatta. DOI-tunnisteita käytetään hyvin usein tiedeartikkeleiden yhteydessä.<sup>28</sup> Tunnisteiden jakelua säätelee International DOI Foundation (IDF), joka on voittoa tavoittelematon järjestö. IDF omistaa DOI:n, joka on rekisteröity tavaramerkki. DOI Registration Agencies (Ras) on myöntänyt tähän mennessä yli 55 milj. DOI nimeä.<sup>29</sup>

Kun halutaan vaihtaa hakuasetuksia, mennään Current Limits –kohtaan hakusivulla. TimeSpan –vaihtoehdolla valitaan haluttu aikaväli haulle. All years hakee kaikilta vuosilta. Se on oletusasetus. Latest 5 years hakee tältä ja viideltä viimeiseltä julkaisuvuodelta. Year to date hakee nykyiseltä vuodelta, ja Latest 4 weeks, Latest 2 weeks ja Latest (current) week viimeisimmältä 4, 2 tai nykyiseltä viikolta. From – to hakee ajanjaksolta, joka perustuu julkaisuvuoteen. Klikkaus From –kenttään näyttää kalenterin, josta voidaan valita päivämäärä, josta haku aloitetaan. Myös to –kentän päivämäärä voidaan valita, kun klikataan kalenteri näkyviin kenttään. Kun halutaan lajitella hakutulokset prosessointipäivän (milloin viite on lisätty tietokantaan) mukaan, eikä julkaisupäivän mukaan, valitaan Use Processing Date instead of Publication Date.<sup>30</sup>

Adjust Your Search Settings –kohdassa oletusasetus Lemmatization ON hakee termien erilaisia muotoja (synonyymit, monikot ja yksiköt) Topic ja/tai Title hakukyselyissä. Esimerkiksi mouse-hakusana löytää mouse/mice ja defense löytää defense/defence. Lemmatization-toiminto ei koske lainausmerkeissä olevia hakusanoja. ”Color” hakee tuloksia, jotka sisältävät sanan color, mutta ei sanaa colour.<sup>30</sup>

Adjust Your Result Settings –kohdassa Records per Page voidaan valita näytettävien tulosten määrä Results –sivulla: 10, 25 tai 50 tulosta. Oletusasetus on 10 tulosta sivua kohti. Sort by –toiminnolla voidaan lajitella hakutuloksia Results –sivulla. Oletusasetus on Publication Date – newest to oldest. Refine panel –toiminnon oletusasetuksena on Show Refine Results. Tällöin Results –sivulla (kuva 2) vasemmassa laidassa näkyy Refine Results -sivupalkki, jonka vaihtoehtojen avulla haun tulosta voidaan työstää ja tarkentaa. Hakuruutuun kirjoitetaan tarkentavia hakusanoja, tai valitaan esim. tarkentava aihekatgoria, julkaisutyyppi, vuosi, tutkijan kotiorganisaatio jne.<sup>30</sup>

Search | Author Finder | Cited Reference Search | Advanced Search | Search History

**Web of Science®**

**Results** Topic=(Rissanen K)  
 Timespan=All Years. Databases=SCI-EXPANDED, SSCI, A&HCI  
 Lemmatization=On  
[Create Alert / RSS](#)

**Note:** Alternative forms of your search term (for example, tooth and teeth) may have been applied, in particular for Topic or Title searches that do not contain quotation marks around the

Results: 9 Page 1 of 1 [Go](#)

Save to: [ENDNOTE® WEB](#) [ENDNOTE®](#) [RefWorks](#) [ResearcherID](#) more options

**Refine Results**  
 Search within results for  [Search](#)

▼ Web of Science Categories [Refine](#)

- COMPUTER SCIENCE INFORMATION SYSTEMS (2)
- ENGINEERING ELECTRICAL ELECTRONIC (3)
- STATISTICS PROBABILITY (3)
- BIOCHEMISTRY MOLECULAR BIOLOGY (1)
- COMPUTER SCIENCE ARTIFICIAL INTELLIGENCE (1)

more options / values...

▼ Document Types [Refine](#)

- ARTICLE (9)
- PROCEEDINGS PAPER (2)

more options / values...

▶ Research Areas

▶ Authors

▶ Group Authors

▶ Editors

▶ Source Titles

▶ Book Series Titles

▶ Publication Years

▶ Organizations-Enhanced

▶ Funding Agencies

▶ Languages

▶ Countries/Territories

For advanced refine options, use [Analyze Results](#)

1. Title: Genetic Influences on Physical Activity in Young Adults: A Twin Study  
 Author(s): Mustelin, Linda; Joutsu, Jessica; Latvala, Antti, et al  
 Source: MEDICINE AND SCIENCE IN SPORTS AND EXERCISE Volume: 44 Issue: 7 Pages: 1293-1301 DOI: 10.1249/00005768-2012070000000170  
 Times Cited: 0 (from Web of Science)  
[Links](#) [View abstract](#)
2. Title: Serum angipoietin-like 4 protein levels and expression in adipose tissue are inversely correlated w  
 Author(s): Roblic, Marius R.; Naukkarinen, Jussi; Ortega-Alonso, Alfredo, et al.  
 Source: JOURNAL OF LIPID RESEARCH Volume: 52 Issue: 8 Pages: 1575-1582 DOI: 10.1194/jlr.P015867 Published  
 Times Cited: 4 (from Web of Science)  
[Links](#) [View abstract](#)
3. Title: An invariant Bayesian model selection principle for Gaussian data in a sparse representation  
 Author(s): Fossgaard, Erik; Fla, Tor  
 Source: IEEE TRANSACTIONS ON INFORMATION THEORY Volume: 52 Issue: 8 Pages: 3438-3455 DOI: 10.1109/TIT  
 Times Cited: 1 (from Web of Science)  
[Links](#) [View abstract](#)
4. Title: On the MDL principle for i.i.d. sources with large alphabets  
 Author(s): Shamir, Gil  
 Source: IEEE TRANSACTIONS ON INFORMATION THEORY Volume: 52 Issue: 5 Pages: 1939-1955 DOI: 10.1109/TIT  
 Times Cited: 8 (from Web of Science)  
[Links](#) [View abstract](#)
5. Title: Empirical limits for time series econometric models  
 Author(s): Flobberger, W.; Phillips, PCB  
 Source: ECONOMETRICA Volume: 71 Issue: 2 Pages: 627-673 DOI: 10.1111/1468-0262.00419 Published: MAR 200  
 Times Cited: 9 (from Web of Science)  
[Links](#) [View abstract](#)
6. Title: Extended stochastic complexity and minimax relative loss analysis  
 Author(s): Yamanishi, K  
 Book Editor(s): Watanabe, O.; Yokomori, T  
 Source: ALGORITHMIC LEARNING THEORY, PROCEEDINGS Book Series: LECTURE NOTES IN ARTIFICIAL INTELLI

## Kuva 2. Tulokset (Results) <sup>25</sup>

Analyze Results -kohdan avulla viitteiden jakaumia voidaan tarkastella kuvaajina esim. aihealueen, lehden, dokumenttityypin, vuoden tai tutkijan kotiorganisaation ym. perusteella.<sup>2</sup>

Kaikki onnistuneet haut tallennetaan hakuhistoriaan (Search History).<sup>26</sup>

Ohjeita Web of Sciencen käyttöön löytyy Web of Science Help -tiedostoista.

### 2.3.2.1 Hakusäännöt

Isoilla ja pienillä kirjaimilla ei ole väliä, ja molempia voidaan käyttää myös sekaisin.<sup>31</sup> Hakuoperaattoreita (AND, OR, NOT, NEAR, SAME) voidaan käyttää hakutermin yhdistämiseksi, laajentamaan tai kaventamaan hakua.<sup>32</sup> Niiden käyttö vaihtelee eri hakukentissä. Topic -kentässä voidaan käyttää hakuoperaattoria AND, mutta ei Publication Name -kentässä. NEAR -hakuoperaattoria voidaan käyttää lähes kaikissa kentissä, mutta ei Year Published -kentässä. SAME -hakuoperaattoria voidaan käyttää Address -kentässä, mutta ei muissa kentissä.<sup>31</sup>



AND, OR ja NOT ovat Boolean operaattoreita. AND –operaattorilla löytyy hakutulokset, jotka sisältävät kaikki operaattorin erottamat termit. OR –operaattorilla löytyy mitkä tahansa operaattorin erottamat termit. NOT –operaattorilla voidaan hausta sulkea pois tiettyjä sanoja sisältäviä hakutuloksia.<sup>32</sup>

NEAR/x –operaattoria käytetään hakemaan tuloksia, joissa operaattorin erottamat termit ovat tietyllä etäisyydellä toisistaan. Operaattori toimii, vaikka termit olisivat eri hakukentissä. Kun x korvataan numerolla, voidaan valita maksimimäärä hakutermejä erottavia sanoja. Kun NEAR –operaattoria käytetään ilman /x, haetaan tuloksia, joissa termit ovat 15 sanan sisällä toisistaan. SAME –operaattoria voidaan käyttää Address hauissa rajoittamaan haku termeihin, jotka esiintyvät samassa Full Record osoitteessa.<sup>32</sup>

Kun haussa käytetään useita eri hakuoperaattoreita, haku suoritetaan seuraavan tärkeysjärjestyksen mukaan: 1. NEAR/x 2. SAME 3. NOT 4. AND 5. OR. Operaattoreiden tärkeysjärjestys voidaan kumota sulkuja käyttämällä. Operaattori, joka on sulussa, suoritetaan ensin.<sup>32</sup>

Jokerikortteja (\*,?, \$) käytetään hakukyselyssä edustamaan tuntemattomia merkkejä. Niitä voidaan käyttää kaikissa hakukentissä, joissa sallitaan sanat ja fraasit. Tähti (\*) edustaa mitä tahansa merkkiryhmää, mukaan lukien ei yhtään merkkiä. Kysymysmerkki (?) edustaa mitä tahansa yksittäistä merkkiä. Dollarimerkki (\$) edustaa yhtä, tai ei yhtään merkkiä. Dollarimerkki on hyödyllinen, kun haetaan sekä brittiläistä, että amerikkalaista oikeinkirjoitusta samalle sanalle. Esimerkiksi flavo\$r hakee flavor ja flavour. Kysymysmerkki on hyödyllinen haettaessa tekijöiden sukunimiä, kun viimeinen merkki on tuntematon. Esimerkiksi Barthold? hakee Bartholdi ja Bartholdy (ei Barthold).<sup>33</sup>

Kun haetaan tarkkaa ilmaisua, käytetään lainausmerkkejä. Esimerkiksi hakukysely ”energy conversation” hakee ne tulokset, jotka sisältävät täsmälleen ilmaisun ”energy conversation”. Tämä pätee vain Topic ja Title hakuihin. Kun hakukysely kirjoitetaan ilman lainausmerkkejä, hakukone etsii tulokset, jotka sisältävät kaikki hakukyselyn sanat. Ne voivat olla, tai eivät ole lähellä toisiaan. Esimerkiksi ”energy conversation” hakee tulokset, jotka sisältävät täsmälleen ilmaisun ”energy conversation”, mutta myös tulokset, jotka sisältävät ilmaisun ”conversation of energy”. Kun kaksi hakukyselyn sanaa erotetaan väliviivalla, pisteellä tai pilkulla, hakutermi tulkitaan tarkkana ilmaisuna. Esimerkiksi hakutermi waste-water hakee tulokset, jotka sisältävät

täsmälleen ilmaisun waste-water tai waste water, mutta ei water waste, waste in drinking water, tai water extracted from waste.<sup>31</sup>

Sulkuja voidaan käyttää ryhmittelemään yhdistettyjä Boolean operaattoreita. Esimerkiksi (Antibiotic OR Antiviral) AND (Alga\* OR Seaweed). Heittomerkit eivät ole haettavia merkkejä. Hakua tehtäessä kannattaa etsiä myös ilman heittomerkkiä olevia muotoja. Esimerkiksi Paget's OR Pagets hakee tulokset Paget's ja Pagets. Kun haetaan väliviivallisia sanoja ja ilmaisuja, kannattaa hakutermit kirjoittaa sekä väliviivan kanssa, että ilman.<sup>31</sup>

### 2.3.3 Haku tekijän nimellä (Author Finder)

Author Finder –hakua (kuva 3) käytetään tekijänhakuun ja oikean tutkijan erottamiseen samannimisten joukosta. Toiminto hakee tulokset ja yksittäisiä tuloksia.<sup>34</sup> Refine Author Sets –valikosta valitaan rajaustapa, esimerkiksi lehden nimi, instituutio tai aihealue, kun hakutulos on iso. Väärien tutkijoiden viitteitä voidaan poistaa myös Distinct Author Sets -toiminnolla.<sup>25</sup>

The screenshot displays the 'Web of Science' interface for 'Author Finder'. At the top, there are navigation tabs: 'Search', 'Author Finder', 'Cited Reference Search', 'Advanced Search', and 'Search History'. The main heading is 'Web of Science®' followed by 'Search by Author Name'. There are two input fields: 'Last Name / Family Name (Required)' with an example 'Smith' and 'Initial(s) (One Required, up to 4 allowed)' with an example 'CE'. Below the fields is a checkbox for 'Exact Matches Only'. At the bottom of the search area are 'Search by Name' and 'Clear' buttons. The footer contains 'View in: 简体中文 | English | 日本語' and copyright information: '© 2012 Thomson Reuters | Terms of Use | Privacy Policy | Please give us your feedback on using Web of Knowledge.'

Kuva 3. Author Finder –haku<sup>25</sup>

#### 2.3.3.1 Hakusäännöt

Tekijän nimet ovat muotoa ensin sukunimi, ja sitten etunimen/-nimien alkukirjaimet (1-4). Sukunimi voi sisältää yhdysviivan, välilyönnin tai heittomerkin. Jokerikortteja (\*,?,\$) ei kannata käyttää.<sup>34</sup>

### 2.3.3.2 Haku

Tekijän sukunimi kirjoitetaan Last Name / Family Name -kenttään ja tekijän etunimien alkukirjaimet Initial(s) -kenttään. Rastittamalla Exact Matches Only voidaan hakua rajoittaa. Kun ruutu on tyhjä (oletus), haetaan automaattisesti kaikki tekijän nimen muodot käyttäen sisäistä jokerikorttia. Esimerkiksi tekijänhaku Johnson T hakee kaikki nimivaihtoehdot Johnson T, Johnson TC, Johnson TR, Johnson TRB jne. Kun Exact Matches Only on rastitettu, tekijänhaku rajoittuu niihin tekijän etunimen alkukirjaimiin, jotka on syötetty Initial(s) -kenttään.<sup>34</sup>

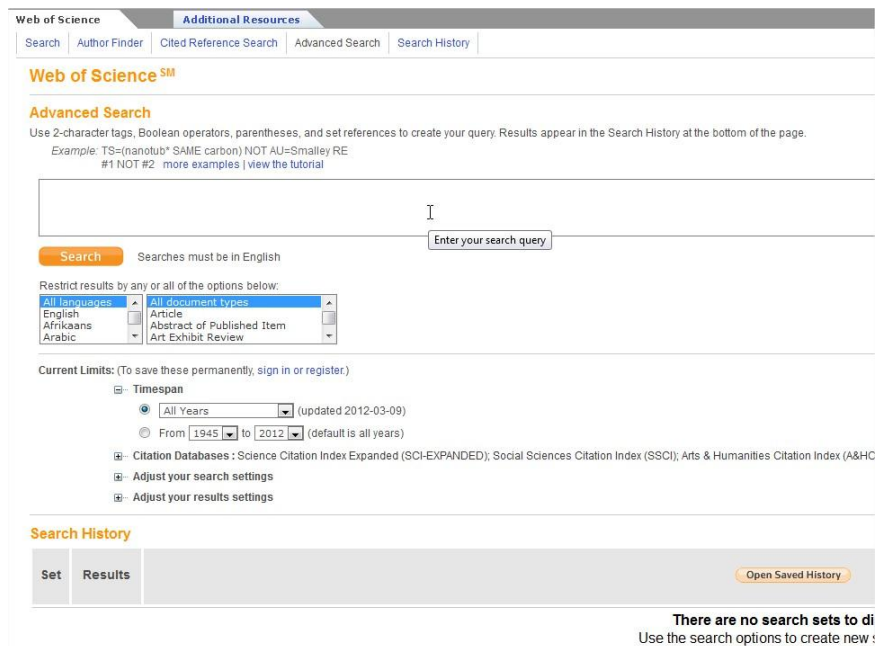
Klikkaamalla Search by Name siirrytään Distinct Author Sets-sivulle.<sup>34</sup>

Search –haun Current Limits -asetukset eivät ole voimassa Author –haussa.<sup>34</sup>

### 2.3.4 Advanced Search

Advanced Search –toiminto on pidemmälle viety hakutoiminto (kuva 4).<sup>35</sup>

Advanced Search –haku suoritetaan käyttäen kenttätageja (kuva 5), hakuoperaattoreita, sulkuja ja settireferenssejä, esimerkiksi TS=(nanotub\*SAME carbon) NOT AU=Smalley RE. Kaikki istunnon aikana tehdyt onnistuneet haut näkyvät hakuhistoriassa (Search History) sivun alareunassa. Advanced Search hakukysely muodostuu yhdestä tai useammasta kenttätageista ja hakuketjusta. Hakuoperaattoreita (AND, OR, NOT, NEAR ja SAME) ja jokerikortteja voidaan käyttää. Hakua voidaan laajentaa käyttämällä yhtäsuuruusmerkkiä (=) kenttätagin ja jokerikortin kanssa, esimerkiksi SO=Supramolecular Chemistry\* hakee Supramolecular Chemistry, Supramolecular Chemistry II Host Design And Molecular Recognition ja Topics in Current Chemistry.<sup>35</sup>



Web of Science Additional Resources

Search Author Finder Cited Reference Search Advanced Search Search History

Web of Science<sup>SM</sup>

**Advanced Search**

Use 2-character tags, Boolean operators, parentheses, and set references to create your query. Results appear in the Search History at the bottom of the page.  
 Example: TS=(nanotub\* SAME carbon) NOT AU=Smalley RE  
 #1 NOT #2 more examples | view the tutorial

Enter your search query

Search Searches must be in English

Restrict results by any or all of the options below:

All languages English Afrikaans Arabic

All document types Article Abstract of Published Item Art Exhibit Review

Current Limits: (To save these permanently, sign in or register.)

Timespan

All Years (updated 2012-03-09)

From 1945 to 2012 (default is all years)

Citation Databases: Science Citation Index Expanded (SCI-EXPANDED); Social Sciences Citation Index (SSCI); Arts & Humanities Citation Index (A&HC)

Adjust your search settings

Adjust your results settings

Search History

Set	Results

Open Saved History

There are no search sets to display. Use the search options to create new sets.

Kuva 4. Advanced Search -haku<sup>25</sup>

Field Tags:

TS= Topic	SG= Suborganization
TI= Title	SA= Street Address
AU= Author	CI= City
RID= ResearcherID	PS= Province/State
GP= Group Author	CU= Country
ED= Editor	ZP= Zip/Postal Code
SO= Publication Name	FO= Funding Agency
DO= DOI	FG= Grant Number
PY= Year Published	FT= Funding Text
AD= Address	SU= Research Area
OG= Organization-Enhanced	WC= Web of Science Category
OO= Organization	IS= ISSN/ISBN
	UT= Accession Number

Kuva 5. Kenttätagit<sup>25</sup>

### 2.3.4.1 Haun suoritus

Hakuasetuksia voidaan tarvittaessa muuttaa hakusivun Current Limits –osassa. Kirjoitetaan hakukysely tekstilaatikkoon käyttäen 2-merkkisiä kenttätageja, ja klikataan Search. Hakutuloksia voidaan tarkastella hakuhistoriassa (Search History) (kuva 4) klikkaamalla Results -sarakkeen linkkiä.<sup>35</sup>

### 2.3.5 Cited Reference Search

Cited Reference Search –haulla (kuva 6) haetaan lehtiartikkeleita, kirjoja, julkaisuja ja muita julkaistuja töitä, jotka viittaavat aiemmin julkaistuun työhön. Kaikki onnistuneet

haut tallennetaan hakuhistoriaan. Hakutoiminnolla saadaan selville, kuinka tunnettu idea tai keksintö on todistettu oikeaksi, kuinka sitä on sovellettu, paranneltu, laajennettu tai korjattu. Voidaan ottaa selville, kuinka tietty tutkimus vaikuttaa muiden tutkijoiden työhön maailmassa (tutkimuksen merkitys muiden tutkijoiden työlle), ja ketkä ovat viitanneet siihen.<sup>36</sup>

Web of Science Additional Resources

Search Author Finder Cited Reference Search Advanced Search Search History

Web of Science®

**Cited Reference Search** (Find the articles that cite a person's work)

**Step 1:** Enter information about the cited work. Fields are combined with the Boolean AND operator.

\* Note: Entering the title, volume, issue, or page in combination with other fields may reduce the number of cited reference variants found.

Example: O'Brian C\* OR OBrian C\* in Cited Author

Example: J Comp\* Appl\* Math\* (journal abbreviation list) in Cited Work

Example: 1943 or 1943-1945 in Cited Year(s)

Add Another Field >>

Search Clear Searches must be in English

Current Limits: (To save these permanently, sign in or register.)

Timespan

All Years (updated 2012-08-17)

Date Range

From: YYYY-MM-DD to: 2012-08-22

Use Processing Date instead of Publication Date

Citation Databases

Science Citation Index Expanded (SCI-EXPANDED) --1945-present

Social Sciences Citation Index (SSCI) --1956-present

Arts & Humanities Citation Index (A&HCI) --1975-present

Adjust your results settings

View in: 简体中文 English 日本語

© 2012 Thomson Reuters | Terms of Use | Privacy Policy | Please give us your feedback on using Web of Knowledge.

Kuva 6. Cited Reference Search, Step 1<sup>25</sup>

Cited Reference Search -haulla haetaan työn tekijän, työn, julkaisuvuoden, vuosikerran, numeron, sivun tai otsikon mukaan.<sup>36</sup> (Kuva 7)

Current Limits -osiossa voidaan tehdä haluttaessa hakuasetuksiin muutoksia, kun suoritetaan hakua. Kirjoitetaan ensisijaisen työn tekijän (Cited Author) nimi. Myös toissijaisen työn tekijän nimellä voidaan hakea. Kirjoitetaan viitatus lähteen (Cited Work) lyhennetty otsikko, ja klikataan Search. Lehtien lyhenteitä löytyy WoS Journal Abbreviations / Lehtien lyhenteet -listalta. Tällä listalla on Thomson Reutersin käyttämät lehtien otsikoiden lyhenteet. Jos osumia tulee liian paljon, palataan Cited Reference Search -sivulle, ja lisätään hakukriteerejä. Kun on klikattu Search, siteeratut viitteet näkyvät Cited Reference Search -hakemistossa, joka sisältää haetun tekijä/työ/otsikko tiedon (kuva 7).<sup>36</sup>

Rastitetaan halutut viitteet Cited Reference –hakemistosta sivun vasemmassa laidassa (Select). Kun halutaan valita kaikki sivun viitteet, klikataan Select Page, ja kun halutaan valita kaikki viitteet, klikataan Select All. Hakua voidaan rajoittaa sivun alareunassa esim. kieli- tai asiakirjatyypin mukaan.<sup>37</sup>

Web of Science®

<< Back to previous page

**Cited Reference Search** (Find the articles that cite a person's work)

**Step 2:** Select cited references and click "Finish Search."

Hint: Look for cited reference variants (sometimes different pages of the same article are cited or papers are cited incorrectly).

CITED REFERENCE INDEX  
References: 1 - 50 of 52

Page 1 of 2 Go

Select Page Select All Clear All Finish Search

Select	Cited Author	Cited Work [SHOW EXPANDED TITLES]	Year	Volume	Issue	Page	Identifier	Citing Articles **	View Record
<input type="checkbox"/>	Abate, Antonio...Rissanen, Kari [Show all authors]	CHEM COMMUN	2010	46	16	2724	10.1039/b924423a	17	View Record in Web of Science
<input type="checkbox"/>	Albrecht, Markus...Rissanen, Kari [Show all authors]	CHEM-EUR J	2010	16	17	5062	10.1002/chem.200903016	18	View Record in Web of Science
<input type="checkbox"/>	Albrecht, M...Rissanen, K. [Show all authors]	CRYSTENGGOM IN PRESS	2010				10.1039/C003636F	1	
<input type="checkbox"/>	Asthana, Deepak...Rissanen, Kari [Show all authors]	CHEM COMMUN	2011	47	31	8928	10.1039/c1cc12398j	2	View Record in Web of Science
<input type="checkbox"/>	Ay, S...Rissanen, K. [Show all authors]	J AM CHEM SOC	2010	132	37	12899	10.1021/ja1032502	8	View Record in Web of Science
<input type="checkbox"/>	Ayme, Jean-Francois...Rissanen, Kari [Show all authors]	NAT CHEM	2012	4	1	15	10.1038/nchem.1193	6	View Record in Web of Science
<input type="checkbox"/>	Ayme, J.-F...Rissanen, K. [Show all authors]	NAT CHEM	2011	4		15		4	
<input type="checkbox"/>	Beyeh, N. Kodiah...Rissanen, Kari [Show all authors]	ISR J CHEM	2011	51	7	769	10.1002/ijch.201100049	1	View Record in Web of Science
<input type="checkbox"/>	Beyeh, N. Kodiah...Rissanen, Kari [Show all authors]	ORG LETT	2010	12	7	1392	10.1021/ol100407f	6	View Record in Web of Science
<input type="checkbox"/>	Beyeh, N. Kodiah...Rissanen, Kari [Show all authors]	SUPRAMOL CHEM	2010	22	11-12	737	10.1080/10610278.2010.506543	1	View Record in Web of Science
<input type="checkbox"/>	Bhat, Shreedhar...Rissanen, Kari [Show all authors]	J CHEM SCI	2011	123	4	379		1	View Record in Web of Science
<input type="checkbox"/>	Brelot, Lydia...Rissanen, Kari [Show all authors]	CRYSTENGGOMM	2011	13	7	2346	10.1039/c0ce00814a	2	View Record in Web of Science

Kuva 7. Cited Reference Search, Step 2<sup>25</sup>

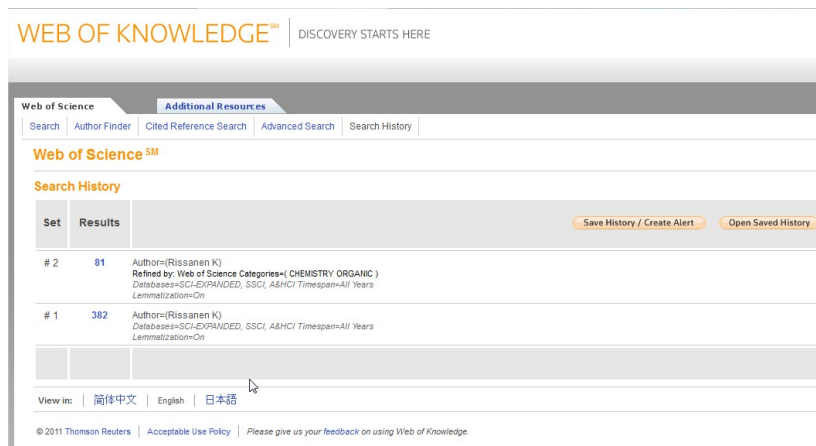
Kun halutaan tarkastella täysiä otsikkotietoja, klikataan Show Expanded Titles, ja kun halutaan näkyviin lyhennetyt otsikkotiedot, klikataan Show Abbreviated Titles (oletus). Kun kursoria liikutetaan View Record linkin päälle, siteeratun viitteen koko otsikko ponnahtaa näkyviin. Täysiä viitetietoja voidaan tarkastella klikkaamalla View Record.<sup>37</sup>

Klikkaamalla Finish Search siirrytään Results –sivulle. Tältä sivulta artikkeleita voidaan katsella, tulostaa, tallentaa, siirtää, lähettää sähköpostilla ja merkata.<sup>36</sup>

### 2.3.6 Hakuhistoria (Search History)

Haut säilyvät käytettävissä istunnon ajan ilman kirjautumista. Rekisteröityneille käyttäjille on käytettävissä pysyvät hakujen tallennukset, automaattihaut eli alert – hakupalvelut ja muut henkilökohtaiset palvelut. Rekisteröityminen tapahtuu Sign in –linkistä.<sup>2</sup>

Hakutulokset näkyvät hakuhistoriassa (Search History, kuva 8), ja haun numero näkyy hakuhistoriataulukossa (# 1, # 2, # 3, jne). Tulokset ovat käänteisessä aikajärjestyksessä viimeisin ensin Set -sarakeessa. Tulosten määrä näkyy Results -sarakeessa. Search History Details -sarakeessa näkyy kenttätagit, hakutermit, aikahaarukka (timespan) ja muuta tietoa. ”Refined by” ilmestyy näkyviin jokaisen sellaisen haun eteen, jotka on tehty käyttäen Search within Results, Refine Results ja Analyze Results -toimintoja. Klikkaamalla Results -sarakkeen linkkiä siirrytään Results -sivulle.<sup>38</sup>



Kuva 8. Search History<sup>25</sup>

Kaikkia niitä hakutuloksia voidaan yhdistää, joiden haussa on käytetty Search, Advanced Search, Cited Reference Search, Refine Results, Search within Results ja Analyze Results -toimintoja. Hakutulokset yhdistetään Combine Sets -sarakeen (kuva 9) AND tai OR -vaihtoehdoilla. Rastitetaan ne setit, jotka halutaan yhdistää, ja klikataan Combine.<sup>38</sup>



Kuva 9. Combine Sets/Delete Sets<sup>25</sup>

Delete Sets -toiminnolla (kuva 9) voidaan poistaa ei-halutut hakukyselyt.<sup>38,35</sup>

Save History / Create Alert -toiminnolla hakuhistoria voidaan tallentaa tiedostoksi, joka voidaan myöhemmin avata. Hakuhistoriatiedosto tallennetaan isäntäpalvelimelle tai

paikalliselle työasemalle. Hakuhistorioita voidaan tallentaa enintään 40. Kun halutaan avata tallennettu hakuhistoria, klikataan Search History –sivulta Open Saved History –kohdasta, jolloin siirrytään Open / Manage Saved Search –sivulle. Sieltä haluttu tiedosto voidaan avata. Siirrytään View History –sivulle, ja klikataan Run Search. Haluttaessa voidaan timespan, search ja results –asetuksia muuttaa. Klikataan Continue, jolloin siirrytään Search History –sivulle. Klikataan numerolinkkiä Results –sarakkeessa, jolloin siirrytään Results –sivulle, jossa tuloksia voidaan tarkastella ja tulostaa.<sup>38</sup>

### 2.3.7 Tulokset (Results)

Hakutulokset näkyvät lyhennetyssä muodossa. Results –sivulle näkyviin tulevat bibliografiset kirjaukset ovat lähdekirjauksia. Lehtitietoihin voi kuulua otsikko, tekijä(t), ryhmänjohtaja(t), lähteen otsikko, vuosikerta, lisäykset, numero, sivut, DOI ja julkaisuaika. Jokaisesta lähdekirjauksesta on koko viitetiedot (Full Record), joihin päästään viitteen otsikkoa klikkaamalla.<sup>39</sup>

Abstract –linkistä voidaan tarkastella tiivistelmää.<sup>25</sup>

Refine Results –työkaluilla voidaan hakua rajata eri kriteerien mukaan, ja Analyze Results (kuva 10) ominaisuudella voidaan käyttää edistyneempiä Refine Results vaihtoehtoja.<sup>25</sup>

**Results Analysis**  
 <<Back to previous page

9 records. Topic=(Rissanen K)

Rank the records by this field:	Set display options:	Sort by:
Authors Book Series Titles Countries/Territories Document Types	Show the top 10 Results. Minimum record count (threshold): 2	<input checked="" type="radio"/> Record count <input type="radio"/> Selected field





Analyze

Kuva 10. Analyze Results<sup>25</sup>

Klikkaamalla Links –linkkiä löytyy kokotekstilinkit ja muita linkkejä.<sup>25</sup>



## 2.3.8 Viitteet


   

**[4]Pseudorotaxanes with Remarkable Self-Sorting Selectivities**

**Author(s):** Jiang, W (Jiang, Wei)<sup>1</sup>; Sattler, D (Sattler, Dominik)<sup>1</sup>; **Rissanen, K** (Rissanen, Kari)<sup>2</sup>; Schalley, CA (Schalley, Christoph A.)<sup>1</sup>

**Source:** ORGANIC LETTERS **Volume:** 13 **Issue:** 17 **Pages:** 4502-4505 **DOI:** 10.1021/ol201618f **Published:** SEP 2 2011

**Times Cited:** 2 (from Web of Science)

**Cited References:** 27 [ [view related records](#) ]  [Citation Map](#)

**Abstract:** The synthesis and characterization of several self-assembled [4]pseudorotaxanes is reported, some of which form in a programmed way based on a preference for the formation of a [4]pseudorotaxane with an antiparallel rather than parallel alignment of crown ether building blocks is observed even in the

**Accession Number:** WOS:000294242600007

**Document Type:** Article

**Language:** English

**KeyWords Plus:** MASS-SPECTROMETRY; PSEUDOROTAXANES; MOLECULES

**Reprint Address:** Schalley, CA (reprint author), Free Univ Berlin, Inst Chem & Biochem, Takustr 3, D-14195 Berlin, Germany

**Addresses:**  
 1. Free Univ Berlin, Inst Chem & Biochem, D-14195 Berlin, Germany  
 2. Univ Jyväskylä, Dept Chem, Nanosci Ctr, Jyväskylä 40014, Finland

**E-mail Address:** christoph@schalley-lab.de

**ResearcherID Numbers:** [ ? ]  
 [ researcher(s) included this record in their ResearcherID My Publication List. Click to view. ]

**Funding:**

Funding Agency	Grant Number
Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)	SFB 765
German Academic Exchange Service (DAAD)	
Academy of Finland	212588 218325

[\[Show funding text\]](#)

**Publisher:** AMER CHEMICAL SOC, 1155 16TH ST, NW, WASHINGTON, DC 20036 USA


**Web of Science Category:** Chemistry, Organic

**Subject Category:** Chemistry

**IDS Number:** 811UW

**ISSN:** 1523-7060

### Kuva 11. Esimerkiviite (Full Record)<sup>25</sup>

Kuvassa 11 on avattuna Search –toiminnolla haettu viite. Viite avattiin Results –sivulta klikkaamalla viitteen otsikkoa (Title). Yksittäinen viite voidaan lähettää Marked –listalle (väkänen), tulostaa, lähettää tai siirtää esim. Refworksiin sen omasta painikkeesta. Keywords Plus –kentästä löytyy uusia hakusanoja. Oikean sivupalkin (kuva 12) Additional Information –kohdasta avautuu linkki Journal Citation Reports –tietokantaan, josta voidaan tarkistaa lehden viittauskerroin (impact factor, IF). Koko artikkeli avautuu  -linkistä, jos JY:ssa on tilaus ko. lehteen. Tiedot kyseiseen artikkeliin viitanneista artikkeleista löytyvät kohdasta Times Cited ja viitteiden jakaumat löytyvät Citation Map –linkistä.<sup>25</sup>

**Times Cited: 2**  
This article has been cited 2 times in Web of Knowledge.

Zheng, Bo. A Benzo-21-Crown-7/Secondary Ammonium Salt [c2]Daisy Chain. ORGANIC LETTERS, JAN 6 2012.

Mahata, Kingsuk. Impact of the level of complexity in self-sorting: Fabrication of a supramolecular scalene triangle. BEILSTEIN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, NOV 22 2011.

[Create Citation Alert](#)

**Additional information**

- View the journal's **impact factor** (in Journal Citation Reports®)

**Suggest a correction**  
If you would like to improve the quality of the data in this record, please suggest a correction.

Kuva 12. Oikea sivupalkki<sup>25</sup>

### 2.3.9 Citation Map (viitekartta)

Citation Map on graafinen esitys, joka näyttää viitteiden suhteet (artikkelien ja viitattujen lähteiden välillä) käyttäen erilaisia visualisointityökaluja ja –tekniikoita, oli kyseessä sitten mikä tahansa tietokannassa määritelty dokumenttityyppi (kuva 13).<sup>40</sup>

Citation Map –aloitussivulle päästään klikkaamalla Citation Map –linkkiä, joka löytyy Full Record –sivulta (kuva 11).<sup>40</sup>

Kuva 13. Citation Map –aloitussivu<sup>25</sup>



Citation Map –aloitussivulta (kuva 13) valitaan viittausten suunta. Forward Only: tarkastellaan tuloksia, jotka siteeraavat valittua viitettä. Backward Only: tarkastellaan tuloksia, joita valittu kohde käyttää lähteenään. Forward and Backward: tarkastellaan viittauksia molempiin suuntiin. Valitaan myös sukupolvi (generation). First Generation: tulokset, jotka siteeraavat valittua kohdetta, tai joihin valittu kohde viittaa. First Generation on oletusasetuksena. Second Generation: tulokset, jotka siteeraavat tuloksia, jotka siteeraavat valittua tulosta, ja tulokset, joihin viittaavat ne tulokset, joihin

alkuperäinen tulos viittaa. Klikataan Create, jolloin luodaan viitekartta. Citation Map aukeaa kolmipaneeliseen ikkunaan (kuva 14). Valittu kohde näkyy keskellä viitekarttaa.<sup>40</sup>

The screenshot displays a Citation Map interface. At the top, there is a navigation bar with options: Manage, Edit, Appearance, Print. Below this is a timeline from 1945 to 2012. The main area shows a citation network with a central node labeled 'PND' and two child nodes, one blue and one green. Below the network is a table of records with columns for Primary Author, Journal Name, and Article Title. The first record is highlighted in yellow. To the right of the table is a 'Record View' panel showing details for the selected record, including Number / Title, Journal Title, Publication Year, Author, Source Abbreviation, and Volume.

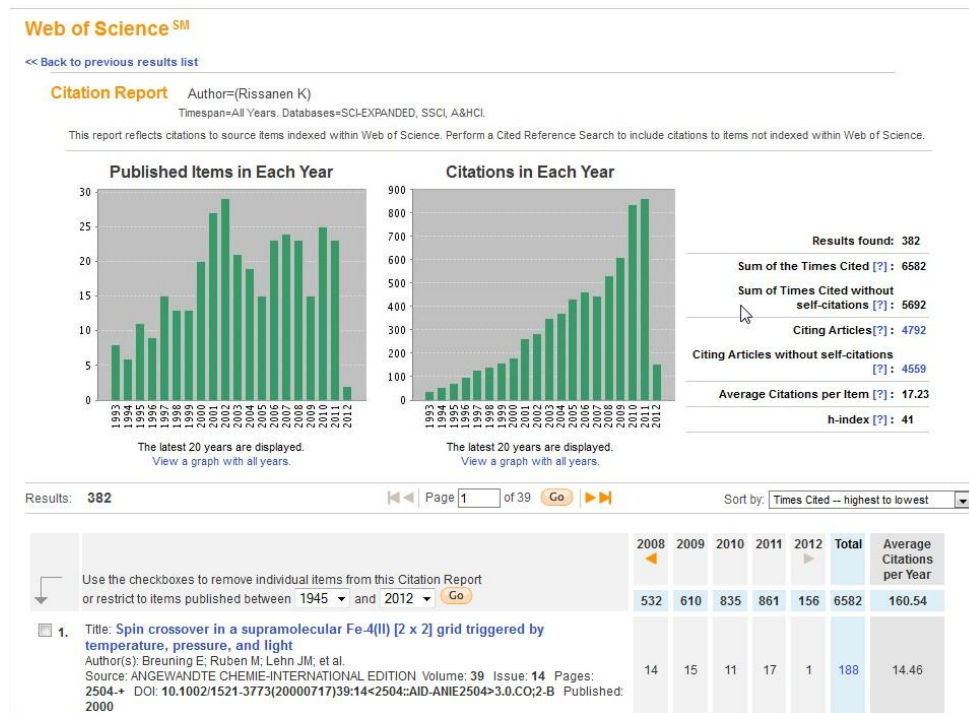
Primary Author	Journal Name	Article Title
Jiang, Wei	2011-ORGANIC LETTERS	[4]Pseudotaxanes with Remark...
Mahata, Kingsuk	2011-BEILSTEIN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY	Impact of the level of complex...
Zheng, Bo	2012-ORGANIC LETTERS	A Benzo-21-Crown-7/Secondary A...

Kuva 14. Citation Map<sup>25</sup>

Ylinnä on interaktiivinen, graafinen esitys viitekartasta. Siinä viitteet ovat puun muodossa, osoittaen niiden keskinäisiä suhteita. Vasemmalla alhaalla (Results Set) näkyy yhteenveto viittaustuloksista: Primary Author, Journal ja Article Title (ensisijainen tekijä, lehti ja artikkelin otsikko). Valittu viite on vasemmanpuoleisessa sarakkeessa (Results Set) keltaisella taustalla erottamaan se muista viitteistä. Nuoli oikealle  tarkoittaa sitä, että tulos on siteeraava artikkeli. Nuoli vasemmalle  tarkoittaa sitä, että tulos on se, mihin viitataan. Oikealla alhaalla (Record View) näkyy koko viite.<sup>40</sup>

Viitekartan yläpuolella on valikkoja, joiden avulla sitä voidaan käyttää, muokata ulkoasua ja tulostaa kuva. Manage -valikon avulla voidaan luoda uusi viitekartta ja tallentaa se editoitavana kuvana. Edit -vaihtoehdolla voidaan muuttaa viittausten suuntaa ja sukupolvien määrää. Appearance -valikon avulla voidaan järjestellä, värikoodata ja nimetä viitepuun solmuja. Print -painikkeella avautuu pop-up selainikkuna. Kuva tulostetaan klikkaamalla Print -linkkiä sivun oikeassa yläkulmassa.<sup>40</sup>

### 2.3.10 Citation Report



Kuva 15. Citation Report<sup>25</sup>

Citation Report tarjoaa tilastotietoa hakutuloksista (kuva 15). Toiminnolla voidaan tarkastella tekijän julkaisujen ja viittausten määriä, vuosittaista jakautumista ja viittauksia artikkelikohtaisesti. Tilastotietoon kuuluu tulosten kokonaismäärä (Results found), kuinka monta kertaa tuloksia on siteerattu (Sum of Times Cited), kuinka monta kertaa tuloksia on siteerattu vähennettynä setin artikkeleihin kohdistuvilla siteerauksilla (Sum of Times Cited without Self-sitations), viitteiden kokonaismäärä (Citing Articles), siteeraavien artikkelien määrä vähennettynä niillä artikkeleilla, jotka ovat hakutuloksetissa (Citing Articles without Self-sitations), kuinka monta kertaa viitettä on keskimäärin siteerattu (Average Citations per Item), siteerausten kokonaismäärä kaikkina vuosina tuloksetissa (Total) ja laskettu h-indeksi. H-indeksi perustuu julkaisulistaan, joka on järjestetty alenevassa järjestyksessä siteerausten määrän mukaan (Times Cited).<sup>41</sup>

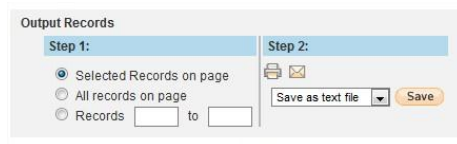
Tulokset lajitellaan Times Cited –highest to lowest oletusasetuksena. Asetusta voidaan vaihtaa Sort by –valikosta, joka on sivun oikeassa ylä- ja alalaidassa.<sup>41</sup>

Sarakeissa jokaisen viitetuloksen oikealla puolella näkyy siteerausten määrä kunakin vuotena.<sup>25</sup>

Yksittäisiä viitteitä voidaan poistaa luettelosta. Myös aikaväliä, jona viitteet on julkaistu, voidaan rajoittaa.<sup>25</sup>

Published Items in Each Year –kaaviokuva näyttää, kuinka monta hakutuloksen viitettä on julkaistu kunakin vuonna. Citations in Each Year –kaaviokuva kertoo, kuinka monta siteerausta kunakin vuonna on tehty haun tuloksiin.<sup>41</sup>

Output Records –osassa sivun alalaidassa (kuva 16) voidaan valita tietyt (tai kaikki) tulokset. Valitaan Sort –valikosta, kuinka halutaan lajitella tulokset. Mennään Output Records –osioon, klikataan Selected Records on page, ja valitaan halutut viitteet. Vaihtoehtoisesti valitaan All records on page. Valitaan output –vaihtoehto (print, E-mail, Save as Text, Save as Excel), ja klikataan Save.<sup>41</sup>



Kuva 16. Output Records<sup>25</sup>

## 2.4 Uusia ominaisuuksia

Web of Knowledgen viimeisin päivitys on versio 5.8 (lokakuu 2012).

## 2.5 Esimerkki

Jyväskylän yliopiston nimellä tehty haku WoS-tietokantaan tuo tulokseksi n. 10 000 artikkelia. Eniten osumia saavat fyysiikan tutkijat.<sup>42</sup>

Jyväskylän yliopiston eniten julkaissut tutkija on orgaanisen kemian akatemiaprofessori Kari Rissanen (marraskuussa 2010).<sup>42</sup> Hän on tekijänä n. 400 artikkelissa. Kari Rissanen on yksi Jyväskylän yliopiston viitatuimpia tutkijoita yli 7000 viittauksella.<sup>25</sup> Viitatuksi tuleminen viestii tutkimuksen korkeasta tasosta ja merkittävydestä. Julkaisujen määrän ja laadun välisestä suhdetta arvioidaan h-indeksillä eli Hirsch-indeksillä.<sup>42</sup> Hänen suosituimmalla artikkelillaan on n. 200 viittausta. Rissanen h-indeksi on 42, joka tarkoittaa sitä, että hänellä on 42 julkaisua, joihin on viitattu vähintään 42 kertaa. Kutakin artikkelia on siteerattu keskimäärin 17.64 kertaa (marraskuu 2012).<sup>25</sup>

Lehdet on laitettu järjestykseen JCR-tietokannassa, jossa jokaiselle lehdelle on laskettu impaktiluku.<sup>42</sup> JCR sisältää myös muita lehtien arviointiin tarkoitettuja suureita. Impaktiluku on alunperin Institute of Scientific Information (ISI) –laitoksen, sittemmin Thomson Scientific –yrityksen tuote. Impaktiluvut löytyvät ISI:n Journal Citation Reports (JCR) -tietokannasta. Sen voi tarkistaa myös ISI:n Web of Science –tietokannan viitteiden kautta.<sup>43</sup>

Impaktiluku lasketaan lehtikohtaisesti siten, että lehdessä vuonna x kahden/viiden edellisen vuoden artikkeleihin tehtyjen viittausten lukumäärä jaetaan kyseisinä vuosina lehdessä julkaistujen artikkeleiden määrällä. Laskukaava on esitetty JCR-tietokannassa. Viittausten määrän oletetaan korreloivan tutkimuksen merkittävyyden kanssa. Impaktiluku kertoo lehden keskimääräisen painoarvon. Impaktiluvun laskutapa aiheuttaa siihen heikkouksia. Impaktiluku ei kerro mitään yksittäisen artikkelin tai tutkijan tasosta. Impaktiluvun laskutapa suosii runsaasti viittauksia saavia artikkeleita, kuten katsauksia.<sup>43</sup> Huippulehtiä luonnontieteiden alalla, joilla on korkea impaktiluku, ovat esim. Nature ja Science.<sup>42</sup>

### **3 CAMBRIDGE STRUCTURAL DATABASE**

Vuonna 1965 perustettu Cambridge Structural Database (CSD) on maailmanlaajuinen kokeellisesti määritettyjen orgaanisten ja organometallisten kiderakenteiden kuvauskanta. Se sisältää yli puolen miljoonan röntgensäde- ja neutronidiffraktioanalyysin tulokset 3D rakennekuvineen. CSD kattaa takautuvasti ja kattavasti julkaistua kirjallisuutta ja dataa, jota ei ole julkaistu muualla (yksityisen tietoliikenteen kautta CSD:hen).<sup>43</sup>

CSD tuottaa 3D atomikoordinaattidataa vähintään kaikista ei-vety atomeista. Joissakin tapauksissa CCDC ei pysty hankkimaan koordinaatteja, ja tiedot arkistoidaan epätäydellisinä CSD:hen. CSD ei sisällä polypeptidejä ja polysakkarideja, joissa on enemmän kuin 24 yksikköä. Ne on tallennettu Protein Data Bank’iin. Se ei sisällä myöskään oligonukleotidejä, vaan ne on tallennettu Nucleic Acids Data Bank’iin. Se ei sisällä epäorgaanisia rakenteita. Epäorgaaniset rakenteet ovat tallennettu Inorganic Crystal Structure Databaseen, eikä se sisällä metalleja ja metalliseoksia, vaan ne ovat tallennettu CRYSTMET®:iin.<sup>44</sup>

Asiantuntijakemistit ja kristallografit käyvät läpi jokaisen kiderakenteen kohdalla laajan validaatio- ja tarkistusprosessin standardien täyttämiseksi. Jokainen tietokannan kirjaus sisältää puhtaan rakennedatan ohella bibliografiset, kemialliset ja fysikaaliset ominaisuustiedot. CSD:tä päivitetään jatkuvasti uusilla rakenteilla (n. 40 000 uudella rakenteella vuosittain) ja parannuksilla olemassa oleviin kirjauksiin.<sup>43</sup>

CSD on CCDC:n (Cambridge Crystallographic Data Centre) päätuote. CCDC:n kotisivu (<http://www.ccdc.cam.ac.uk/>) on kuvassa 17. CCDC:n tavoitteena on kemian ja kristallografian edistäminen ja kehittäminen julkisen edun hyväksi tarjoamalla korkealaatuisia informaatiopalveluja ja ohjelmistoja.<sup>45,44</sup>

Kuva 17. CCDC:n kotisivu<sup>46</sup>

The Cambridge Structural Database System (CSDS) käsittää ohjelmistotyökaluja ja rakennetietokantoja (yli 600 000 kiderakennetta).<sup>47</sup> CSD -System on yksi tuote, johon sisältyy CSD ja CSD ohjelmisto: haku ja tiedonetsintä (ConQuest, WebCSD), rakenteen visualisointi (Mercury CSD), haetun datan tilastollinen analyysi (Vista) ja ohjelmisto tietokantojen luomiseksi (PreQuest). Siihen kuuluu myös CSD:stä johdetut tietämuskannat Mogul (molekyylinsisäinen geometria) ja IsoStar (molekyylien väliset vuorovaikutukset, mukaan lukien dataa PDB:stä).<sup>48</sup>

CSD on keskeinen osa CSD –Systemiä, johon kuuluu myös ohjelmistoja tietokantaan pääsemiseksi, rakenteen visualisoimiseksi ja datan analysoimiseksi, ja CSD:stä johdettuja rakennetietokantoja.<sup>44</sup>

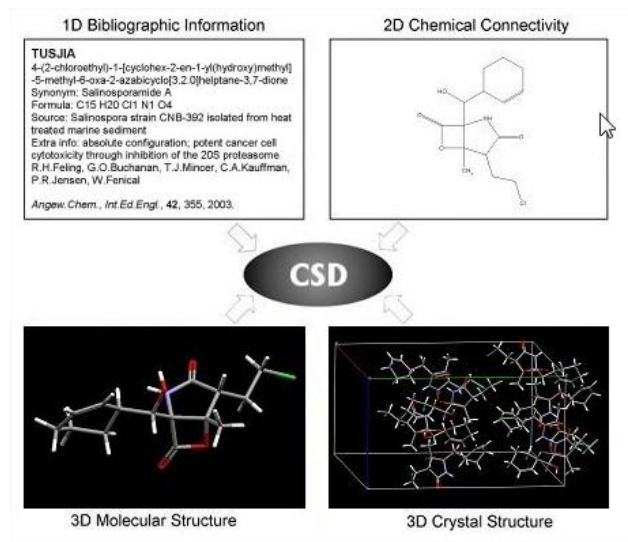
### 3.1 Datat lähtettäminen tietokantaan

Data voidaan tallentaa CCDC:hen nettipohjaisessa muodossa osoitteessa [http://www.ccdc.cam.ac.uk/services/structure deposit](http://www.ccdc.cam.ac.uk/services/structure_deposit). CCDC ottaa vastaan CIF – tiedostomuodossa olevaa kiderakennetietoa röntgensäde- ja neutronidiffraktio-, sekä pulveridiffraktiotutkimuksista, pääasiassa orgaanisista ja organometalliyhdisteistä.<sup>49</sup> Crystallographic Information File (CIF) on standardi tekstitiedostomuoto kristallografisen tiedon esittämiseen. Se on International Union of Crystallographyn (IUCr) sponsoroina. Monet molekyylien katseluun tarkoitettujen tietokoneohjelmat ovat yhteensopivia tämän formaatin kanssa, mukaan lukien Jmol.<sup>50</sup> CCDC:llä on ilmainen enCIFer ohjelma CIF –tiedostojen tarkistamiseen, editoimiseen ja visualisoimiseen. CCDC hyväksyy kahdentyyppistä tietoa: lehdissä julkaistavaksi hyväksytyjä rakenteita, ja rakenteita, joita ei aiota julkaista, mutta joiden toivotaan olevan muiden tutkijoiden saatavilla CSD:n kautta. Myös dataa rakenteista, jotka ovat jo ilmestyneet lehdissä, mutta joita ei ole vielä julkaistu CSD:ssä, otetaan vastaan.<sup>49</sup>

### 3.2 Yleinen informaatio sisältö

Kukin tietokannan kirjaus sisältää tietyn kiderakenteen yksilöllisen määrittelyn. Jokainen tietokannan kirjaus on yksilöity CSD –viitekoodilla, joka sisältää kuusi aakkosellista merkkiä (esim. BENZEN) kemiallisen yhdisteen yksilöimiseksi ja mahdollisen kaksimerkkisen numeron (esim. BENZEN05) tietyn koejärjestelyn yksilöimiseksi (esim. eri tutkimuksen tekijät, eri säteily, eri lämpötila, jne.). Tyypillinen CSD –kirjaus käsittää kuvan 18 informaatiokategoriat.<sup>51</sup>





Kuva 18. CSD –kirjauksen sisältö<sup>51</sup>

Teksti- ja numeeriseen tietoon kuuluu pakollisena tekijöiden nimet, kirjallisuusviitteet, kemiallisten yhdisteiden nimet ja kemiallinen kaava. Ei-pakolliseen tietoon (sisällytetään, jos oleellista tai saatavilla) kuuluu laadulliset ominaisuudet, kuten absoluuttinen konfiguraatio, polymorfia, neutronitutkimus, synkrotronisäteily, pulveritutkimus, diffraktiotutkimuksen lämpötila, ei-ympäröivä paine ja bioaktiivisuus. Ei-pakolliseen tietoon kuuluu myös kideominaisuudet (väri, kideasu, kiteytysliuotin ja sulamispiste), yhdisteen nimen synonyymi tai triviaalinimi, sekä aminohappojärjestys peptideillä, rakenteen epäjärjestyksen kuvaus ja toimitukselliset kommentit.<sup>51</sup>

Muodollinen 2D kemiallinen diagrammi on koodattu yhteystaulun muotoon atomi- ja sidosominaisuuksien avulla, jolloin sallitaan 2D ja 3D alarakenteiden haku, sekä 2D x,y-koordinaattien avulla, jolloin mahdollistetaan CSD System -ohjelmiston avulla luotu graafinen esitys. Atomiominaisuuksia ovat atominumero, alkuainetyyppi, toisiinsa yhteydessä olevien ei-vetyatomien määrä, päätevetyjen määrä ja muodollinen kokonaisvaraus. Sidosominaisuuksia ovat toisiinsa yhteydessä olevien atomien numerot, sidostyyppi ja sykliisyys/asykliisyys. CCDC:ssä käytettyjä sidostyyppejä ovat yksinkertainen, kaksois- ja kolmoissidos, nelinkertainen metalli-metallisidos, aromaattinen, delokalisoitunut kaksoissidos, piisidos ja polymeerisidos.<sup>51</sup>

3D kiderakennetietoihin kuuluu dimensiot ja standardiepävarmuus, redusoitu (Niggli) kenno, Z (rakenneyksikköjen määrä yksikköä kohti), Z' (rakenneyksikköjen määrä asymmetristä yksikköä kohti), Dx (laskettu tiheys), kristallografinen R-tekijä,

kidejärjestelmä, avaruusryhmä (Hermain-Mauguin merkintä), avaruusryhmän symmetriaoperaattorit, atomikoordinaatit ja niiden standardiepävarmuudet, atomin kovalenttinen säde (käytetään määrittämään sidosityhteyksiä kiderakenteessa) ja yhteensopivat kokonaisluvut, jotka kartoittavat kemiallisia atomeita (2D) suhteessa kideatomeihin (3D).<sup>51</sup>

Kaikki CSD:hen tuleva data, joko suoraan CIF -tiedostoina, tai CCDC:n toimittajilta, validoidaan, eli tarkistetaan ja arvioidaan enCIFer:in, PreQuestin ja muiden sisäisten CCDC:n ohjelmistojen avulla. Pieniä eroja voi esiintyä lehdessä julkaistun datan ja CSD –kirjauksen (ja siihen CCDC:n Supplementary Data Archive:ssa liitetyn CIF-tiedoston) välillä. Nämä erot syntyvät julkaisuprosesseissa ja CIF –tarkistuksissa. Validaatiossa tarkastettavia kohtia ovat CIF –formaatin eheys, tiettyjen tekstikenttien oikoluku, kemiallinen diagrammi valensseista, kemiallinen diagrammi vs. molekyylikaava, molekyylipaino vs. yksikön tilavuus vs. Z-arvo, 3D kiderakennetyhteytyneisyys vs. 2D kemiallinen kytkeytyneisyys (rakenteen yhteensopivuus), laskettu geometria vs. julkaistu (tai CIF) molekyyli geometria, numeeristen datakohtien arvojen järjestyminen, molekyylin sisäisen geometrian järjestyminen, lyhyet molekyylien väliset vuorovaikutukset ja aukot kiderakenteissa.<sup>51</sup>

### 3.3 CSDS:n ohjelmistotyökalut

CSD systeemiin kuuluu ConQuest, IsoStar, Mogul, WebCSD, CSD, Mercury ja PreQuest ja VISTA.<sup>48</sup>

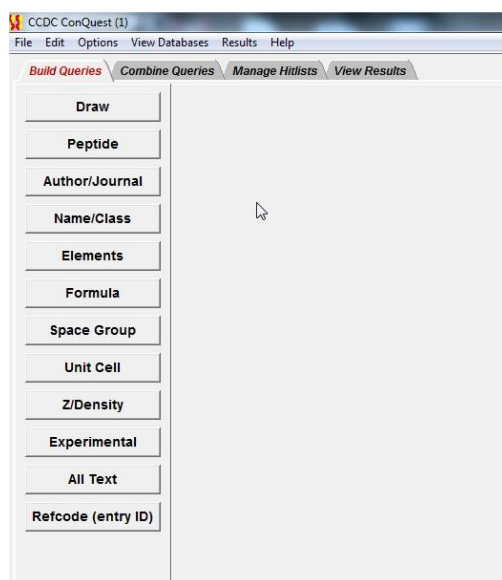
#### 3.3.1 ConQuest

ConQuest tarjoaa 3D rakenteiden haun Cambridge Structural Database –tietokannasta. ConQuest on ensisijainen ohjelma tiedonhakuun CSD:stä. ConQuest tarjoaa laajan valikoiman hakuvaihtoehtoja. Näihin kuuluu laaja valikoima teksti- ja numeerisia hakuvaihtoehtoja rakenteiden hakuun. Ne perustuvat yhdisteen nimeen, kaavaan, alkuainekoostumukseen, kirjallisuusviitteisiin ja kokeellisiin yksityiskohtiin. Näihin kuuluu kemiallisten alarakenteiden haku (kemiallisten rajoitteiden, kuten varauksen, hybridisaatiotilan ja sykliisyyden määrittely) ja 3D geometrinen haku (molekyyliaristen dimensioiden analysointi ja konformaationaalisten ensisijaisuuksien määrittely). Molekyylien välisen ja sidoksettoman vuorovaikutuksen haku mahdollistaa

kaikentyypisten vuorovaikutusten tutkimisen ja farmakologisten muotojen paikallistamisen.<sup>52</sup>

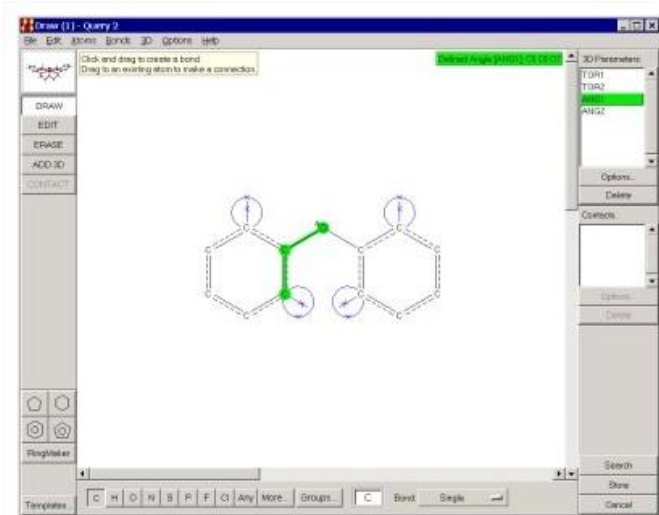
ConQuestiin kuuluu myös intuitiivinen luonnostelija kemiallisten alarakenteiden piirtämiseen ja geometrinen parametrien määrittämiseen, hakusuodattimia, joita voidaan käyttää hakutulosten rajoittamiseksi, ja yksinkertainen mekanismi, jolla yksittäisiä kyselyjä voidaan yhdistää monimutkaisemmiksi hauksi. Siihen kuuluu selkeä rakenteiden 3D visualisointi ja suorat linkit ensisijaiseen kirjallisuuteen, sekä laaja valikoima rakenteen siirtovaihtoehtoja. Siinä on suorat linkit Mercuryn visualisointiohjelmaan ja CSD hakudatan analyysiin, hallintaohjelma, jonka avulla hakutuloksia voidaan yhdistää ja varustaa huomautuksilla, ja komentojono rajapinta CSD hakujen eräajoon.<sup>52</sup>

### 3.3.1.1 ConQuestin käyttö



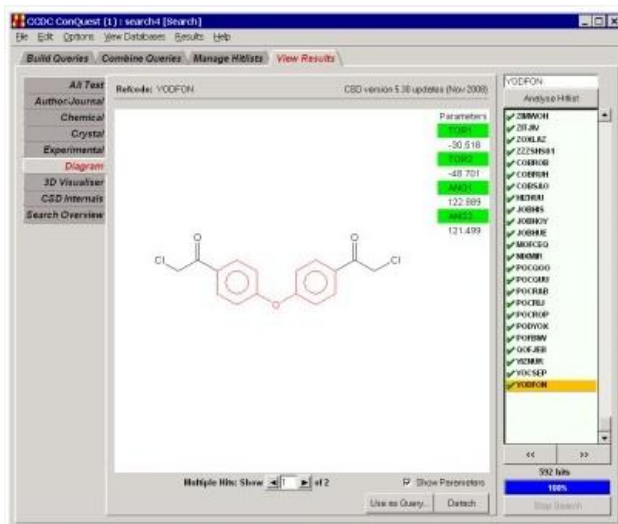
Kuva 19. ConQuestin aloitusvalikko<sup>53</sup>

Kuvassa 19 on ConQuestin aloitusvalikko. Build Queries (Muodosta kyselyjä) –toiminnon avulla voidaan suorittaa hakuja. Haut suoritetaan vasemman laidan vaihtoehtojen avulla: Draw, Peptide, Author/Journal, Name/Class, Elements, Formula, Space Group, Unit Cell, Z/Density, Experimental, All Text ja Refcode (entry ID). Author/Journal –palkkia klikkaamalla suoritetaan haku tekijän/lehden nimellä.<sup>53</sup>



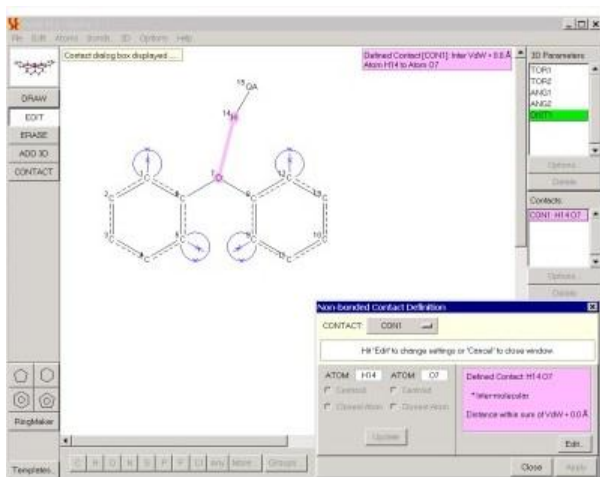
Kuva 20. ConQuestin Draw –ikkuna<sup>53</sup>

ConQuestin piirustusikkunaa (Draw) käytetään kemiallisten alarakenteiden luonnosteluun ja geometrinen parametrien määrittämiseen (kuva 20).<sup>53</sup>



Kuva 21. View Results –ikkuna<sup>53</sup>

View Results, eli Tarkastele tuloksia –näkömää (kuva 21) käytetään hakutulosten selailuun, kun haku on luotu. Kyselyn kohteena oleva kohta vasemmanpuoleisessa palkissa (ja yläpalkissa) on korostettu punaisella.<sup>53</sup>



Kuva 22. Draw/Edit –ikkuna<sup>53</sup>

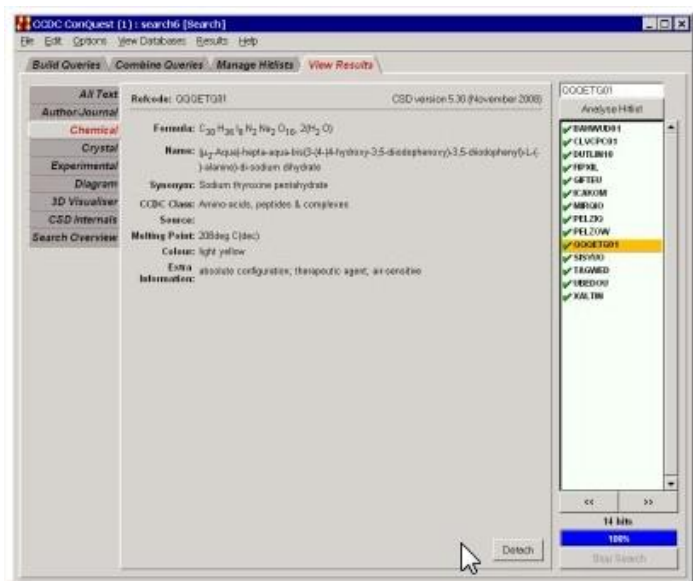
ConQuestin Draw/Edit –ikkunaa (kuva 22) käytetään molekyylien välisten kontaktien määrittämiseen hakutulokselle.<sup>53</sup>

The screenshot shows the "All Text" window in ConQuestin, displaying detailed information for a chemical structure. The window is titled "All Text" and shows the following information:

- Author:** Journal
- Reference:** Bull. Chem. Soc. Jpn., 1972, 45, 182
- Formula:** C<sub>12</sub>H<sub>12</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>
- Spacegroup:** Space: P2<sub>1</sub> Number: 14
- Cell:** a: 14.8730 Å b: 11.3170 Å c: 17.2196 Å alpha: 90.00 beta: 97.347 gamma: 90.00 Volume: 2766.036
- Reduced Cell:** a: 11.207 Å b: 14.873 Å c: 17.219 Å alpha: 97.04 beta: 90.00 gamma: 90.00 Volume: 2766.036
- Blended Volume:** 888.339
- Chemical Data:** 1
- Z, Z':** 2, 4.0 27, 1.0
- Molecular Weight:** 208.232
- Temperature (K):** Room Temp. (293.15)
- Density:** CSD: 1.308 Analysis: 1.300
- Intensity Scale:** arbitrary
- Average Sigma (I-O):** 0.008-0.010 Å
- Experimental Notes:** # 203 K
- Boiling Point:** 165-167 deg C
- Color:** yellow
- State:** block

Kuva 23. All Text –ikkuna<sup>53</sup>

All Text –ikkuna (kuva 23) sisältää kaiken tekstitiedon CSD -tietokannan kirjauksesta.<sup>53</sup>



Kuva 24. Chemical Information –ikkuna<sup>53</sup>

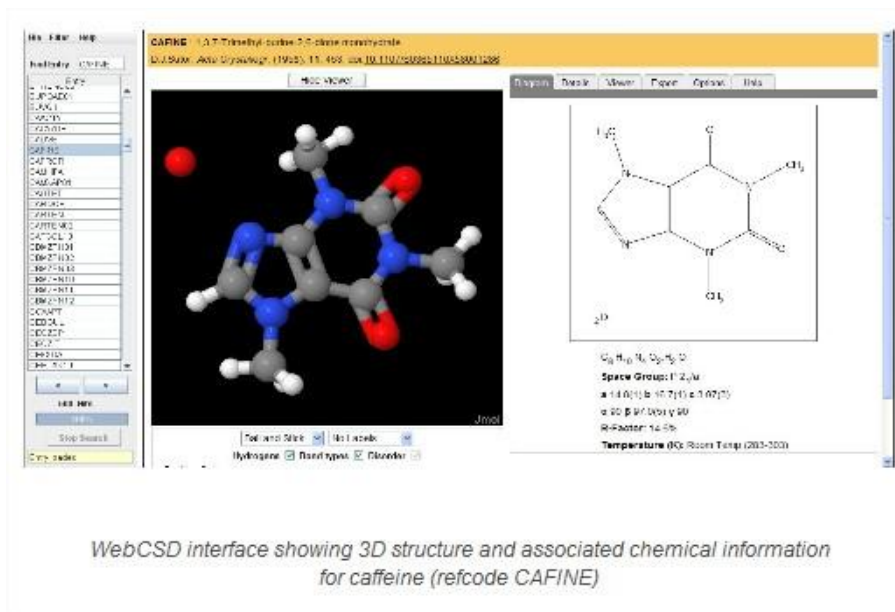
Chemical Information, eli Kemikaalitiedot (kuva 24) –ikkunassa on täydentävää tietoa, joka on peräisin rakenteen julkaisusta (kaava, nimi, synonyymi, CCDC luokka, lähde, sulamispiste, väri ja muuta lisätietoa).<sup>53</sup>

### 3.3.2 WebCSD

WebCSD on on-line portaali Cambridge Structural Databaseen (CSD). Ks. kuva 25. Se tarjoaa helpon pääsyn CSD:hen. Instituutiot, joilla on CSD –systemi, voivat hakea koko tietokannan miltä tahansa työpaikkansa tietokoneelta nettiselainta käyttäen. Mitään paikallista ohjelmistoa ei tarvitse asentaa tai rekisteröidä. Helppo pääsy CSD:n online-versioon tekee siitä ihanteellisen alustan 3D rakennetiedon esittelemiseen luokassa ja tietokoneopetuslaboratorioissa.<sup>54</sup>

WebCSD:hen kuuluu kokoteksti/numeerinen haku (lehtiviitteet, yhdisteen nimi, kokoteksti) ja 2D kemialliset alarakennekyselyt sisäänrakennettua luonnostelijaa käyttäen. Vastaavien rakenteiden haku on saatavilla vain WebCSD:ssä. Lisäksi siihen kuuluu tietokannan selailu, räätälöity 3D näyttö käyttäen sisäänrakennettua AstexViewer applettia (ohjelmiston paikallista asennusta ei tarvita), tulokset yhdessä ikkunassa, sekä rakenteiden ja tulosten siirtotoiminnot.<sup>54,55</sup>

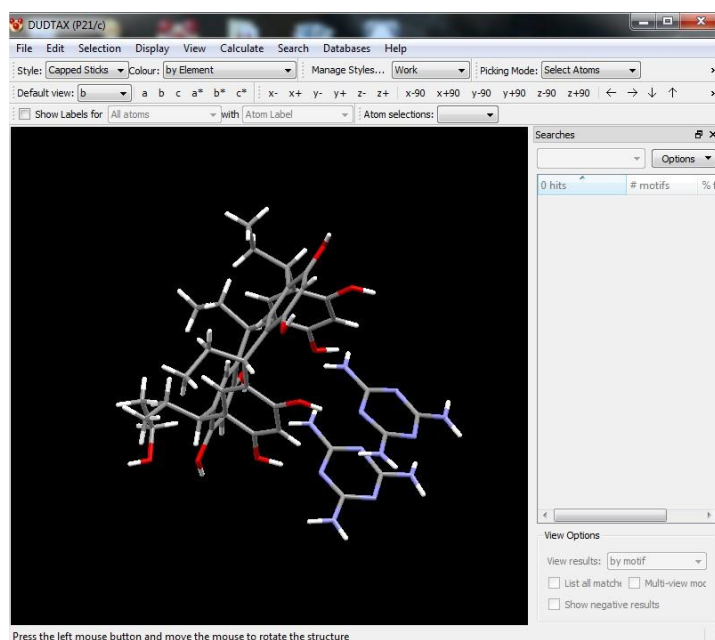
Jatkuvat päivitykset tarjoavat pääsyn uusimpiin arkistoituihin CSD rakenteisiin. Lisäksi WebCSD käyttäjillä on aikainen pääsy äskettäin julkaistuihin CSD rakenteisiin. Näitä rakenteita lisätään jatkuvasti sitä mukaa, kun niitä julkaistaan, tai tallennetaan yksityisen tietoliikenteen kautta (merkattuina tulossa oleviksi rakenteiksi 'structure pending'). Ne kasvavat täysiksi CSD kirjauksiksi tieteellistä prosessia seuraten.<sup>54</sup>



Kuva 25. WebCSD liitäntä, joka näyttää kofeiinin 3D rakenteen ja siihen liittyvän kemiallisen tiedon<sup>54</sup>

WebCSD:hen pääsemiseksi tarvitaan rajoittamaton paikallislisenssi Cambridge Structural Database Systemiin (CSDS). Pääsy tarjotaan CCDC:n yleisen palvelimen kautta. WebCSD on lisensoitu käyttäen IP –osoitteita. Kaikilla tietokoneilla instituution IP –osoitteen alueella on pääsy WebCSD:hen. Teollisilla organisaatioilla, joilla on CSDS lisenssi, on automaattisesti pääsy WebCSD:hen. Akateemiset instituutiot, joilla on CSDS lisenssi, voivat päivittää sen päästäkseen WebCSD:hen.<sup>55</sup>

### 3.3.3 Mercury



Kuva 26. Mercuryn näkymä<sup>56</sup>

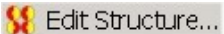
Mercuryä käytetään kiderakenteen visualisointiin, tutkimiseen ja analysointiin. Ks. kuva 26. Mercury tarjoaa kattavan valikoiman työkaluja 3D -rakenteen visualisointiin, kiteen pakkautumisen tutkimiseen ja CSD hakudatan tilastolliseen analyysiin. Mercuryllä voidaan luoda pakkautumisdiagrammeja, määrittää ja visualisoida Millerin tasoja, ja tehdä leikkauksia kiteestä mihin suuntaan tahansa. Sillä voidaan rakentaa ja tutkia molekyylien välisten kontaktien luomia verkostoja. Ks. kuva 27. Mercuryllä voidaan myös esitellä avaruusryhmän symmetriaelementtejä, laskea ja esittää aukkoja kiderakenteessa, esittää molekyyli pohjaisia kaasufaasilaskuja ja laskea molekyylien välisiä potentiaaleja.<sup>57</sup>

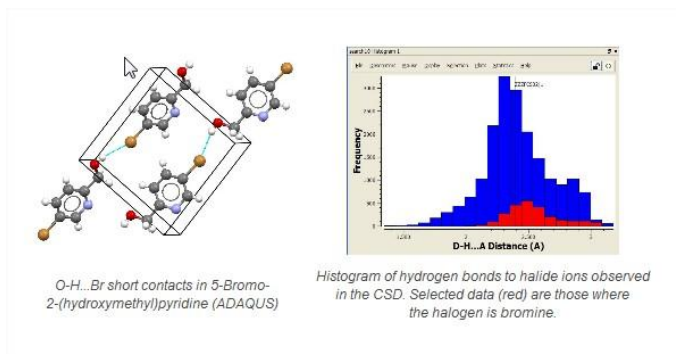
Mercury tarjoaa tilastotyökaluja kaavioiden ja karttojen tekemiseen. ConQuestin alarakennehakuja voidaan visualisoida ja analysoida, kun geometriset parametrit (esim. sidospituudet, kulmat, torsiot jne.) on määritetty hakukyselyssä. Mercury tarjoaa työkaluja rakennedatan käsittelyyn, kuten pääkomponenttianalyysi ja mahdollisuus käsitellä topologista symmetriaa molekylaarisissa hakufragmenteissa.<sup>57</sup>

Mercuryä käytetään julkaisulaatuisten kuvien luomiseen, ja siitä saatavia 3D kuvia voidaan siirtää monissa eri formaateissa.<sup>57</sup>



Perusversio Mercurysta on vapaasti ladattavissa. Mercuryn lisäominaisuudet ovat saatavilla CSDS:n lisensioituneille käyttäjille (varustettu pienellä CCDC:n logolla:

esim.  58



Kuva 27. O-H...Br lyhyitä kontakteja ja histogrammi halidi-ionien vetysidoksista <sup>57</sup>

### 3.3.4 VISTA

Vista on interaktiivinen tilastollinen ohjelma tilastolliseen analyysiin, ja geometrisen ja muun datan tulkintaan. Se lukee automaattisesti ConQuestilla luotuja tiedostoja, kun 3D parametrit on määritetty CSD (tai talon sisäistä tietokanta) -hakua varten. Saatu data luetaan suoraan VISTAssa, missä kaikki hakutulosten analyysi tapahtuu. VISTA näyttää molekylaariseen tai supramolekylaariseen alarakenteeseen liittyvän molekyyligeometrian ja muut parametrit taulukon muodossa.<sup>59</sup>

VISTA suorittaa joukon analyttisiä ja näyttöfunktioita, joihin kuuluu mm. seuraavan datan luominen: yksinkertainen kuvaileva statistiikka parametrien jakaumasta, histogrammit, sirontakuviot, poolisuuskartat ja tilastolliset analyysit, mukaanlukien lineaarinen regressio ja pääkomponenttien analyysi.<sup>59</sup>

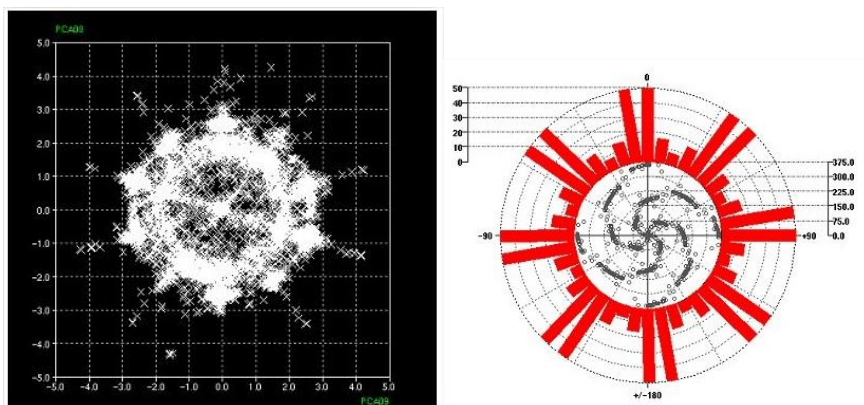
VISTAn ominaisuuksia ovat myös hyperlinkitys geometrisesta datasta takaisin alkuperäiseen CSD kirjaukseen, karttojen luominen raporteja ja julkaisuja varten ja pääsy joko ConQuestista tai komentorivin kautta.<sup>59</sup>

The screenshot shows the VISTA v.2.1 software interface. The main window displays a table with columns for Parameters, Fickoies, and Programis. The table contains data for various parameters, including ABK001 through ABK021. The interface also includes a 'Data Filter' section on the right with buttons for 'Link', 'Print', 'Data Manipulation', 'Parameters', and 'Miscellaneous'.

Parameters	Fickoies	Programis
7	7974	0
8	7974	0

Kuva 28. VISTA laskentataulukko<sup>59</sup>

Kuvassa 28 on laskentataulukko, jossa näkyy CSD -haun tulokset 5-jäsenisten karbosyklisten renkaiden torsiokulmille.<sup>59</sup>



Kuva 29. a) VISTA sirontakuviot ja b) poolinen sirontakuviot<sup>59</sup>

Kuvassa 29 a) on sirontakuviot, joka näyttää PCA -analyysin tulokset 5-jäsenisten karbosyklisten renkaiden konformaatiopreferenssistä. Kuvassa 29 b) on VISTAlla luotu poolinen sirontakuviot 8-jäsenisten renkaiden konformaatioanalyysistä.<sup>59</sup>

### 3.3.5 IsoStar

IsoStar on tietokantapohjainen kirjasto molekyylien välisistä vuorovaikutuksista. IsoStar on web-sovellus, joka sisältää tuhansittain interaktiivisia 3D sirontakuviotia. Ne näyttävät tapauksen todennäköisyyden ja avaruudelliset ominaisuudet

vuorovaikutuksille kemiallisten funktionaalisten ryhmien välillä. Sirontakuviot helpottavat molekyylien välisten vuorovaikutusten välistä tutkimusta ja arviointia, ilman että tarvitsee rakentaa monimutkaisia hakukyselyjä, tai toteuttaa yksityiskohtaisia data-analyysejä.<sup>60</sup>

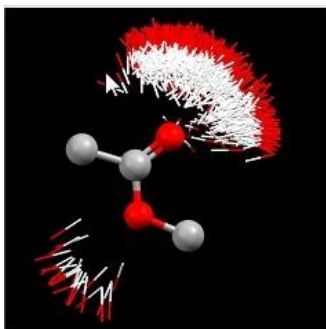
Jokaisessa sirontakuviossa näkyy kontaktiryhmän (esim. O-H donori) kokeellisesti havaittu jakauma tietyn keskusryhmän (esim. varauksellinen karboksylaattiryhmä) ympärillä. Jokainen sirontakuviokuva on myös laskettu ennakkoon hakemalla CSD tai PDB sidoksittomille vuorovaikutuksille funktionaalisten ryhmien A ja B välillä.<sup>61</sup>

IsoStarin sisältöön kuuluu tietoa molekyylien välisistä vuorovaikutuksista Cambridge Structural Databasesta (CSD) (pieni-molekyyliset kiderakenteet, 22 161 sirontakuviota) ja The Protein Data Bankista (proteiini-ligandivaikutuksista, joiden resoluutio on parempi kuin 2.5 Angstromin resoluutiota, 7459 sirontakuviota). Se sisältää myös teoreettisia vuorovaikutusenergioita, jotka on saatu käyttäen ab initio molekyylien välistä perturbaatioteoriaa (IMPT) (1550 potentiaalienergia minimiä).<sup>60,61</sup>

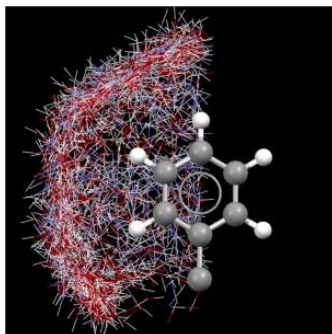
IsoStarin data taajuuksista ja molekyylien välisten kontaktien suuntaisuudesta on tärkeää etenkin lääkeainekemisteille, jotka ovat kiinnostuneita tunnistamaan biososteerisia korvautumisia, ja molekyyylimallintajille, jotka ovat kiinnostuneita rakennepohjaisesta lääkkeiden suunnittelusta.<sup>60</sup>

IsoStar on palvelin-asiakas paketti. Palvelin voidaan asentaa paikallisesti. Vaihtoehtoisesti julkinen palvelin on saatavilla osoitteessa <http://isostar.ccdc.cam.ac.uk/>. IsoStar jaetaan osana CSD Systemiä. Tieto päivittyy vuosittain uusissa CSD:n ja PDB:n versioissa.<sup>61</sup>

IsoStar System hyödyntää standardinettiselainta kontaktiryhmien (48 vaihtoehtoa) ja keskusryhmien (noin 300 vaihtoehtoa) valinnassa. Se näyttää sirontakuviot intuitiivisen visualisoijan avulla. Systeemi kontrolloi näytettävien kontaktien etäisyyksien rajoja. IsoStar näyttää statistiikkaa sirontakuvioista, mukaan lukien taajuudet ja kumulatiiviset jakaumat. Siihen kuuluu horisontaaliset sirontakuviot, joissa on käyttäjä-määritellyt korkeuskäyrän tasot. Sirontakuviot on linkitetty alkuperäisiin CSD- ja PDB -kirjauksiin ja kontaktigeometriat on laskettu. Mukaan kuuluu IsoGen, joka on avustava ohjelma sirontakuvioiden luomiseksi käyttäjäspesifisiin tarkoituksiin.<sup>61</sup>



Kuva 30. a)

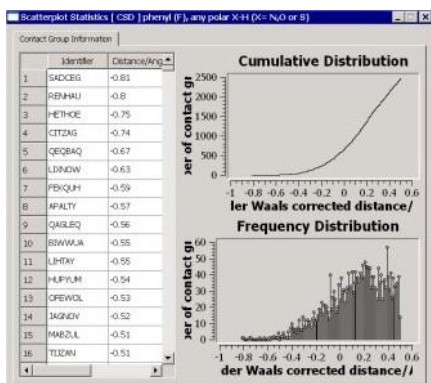


31. b)

Kontaktiryhmän jakauma keskusryhmän ympärillä<sup>60</sup>

Kuvassa 30 a) on vetysitoutuneita O-H kontakteja alifaattisten esteriryhmien ympärillä. Kuvassa näkyy, kuinka suurin osa näistä sidoksista on muodostunut  $-C=O$  happeen, eikä eetterin C-O-C happeen.<sup>60</sup>

Kuvassa 30 b) on CSD:n datan pohjalta tehty sirontakuviio, joka näyttää minkä hyvänsä polaarisen X-H kontaktiryhmän jakauman fenyylikeskusryhmän ympärillä.<sup>61</sup>



Kuva 31. Statiikkaa kuvan 31 b) sirontakuviolle<sup>61</sup>

Kuvassa 31 on statiikkaa kuvan 30 b) sirontakuviolle. Siihen sisältyy kontakti-, kumulatiiviset ja taajuusjakaumat.<sup>61</sup>

### 3.3.6 Mogul

Mogul on tietokantapohjainen CSD:stä johdettu molekyyli geometrian kirjasto. Se tarjoaa tarkkaa tietoa molekyyli geometrioista, mm. miljoonia kemiallisesti luokiteltuja

sidospituuksia, valenssikulmia, asyklisiä torsiokulmia ja rengaskonformaatioita. Mogulista on tulossa kristallografeille välttämätön työkalu, jolla voidaan luoda ligandeista kirjastoja. Mogulia käytetään rutiininomaisesti laskennallisesti ja kokeellisesti luotujen mallien konformaatioiden tarkistamiseen. Lääkeainekemistit luottavat Moguliin ligandigeometrioiden validoinnissa ja suunnittelun apuna.<sup>62</sup>

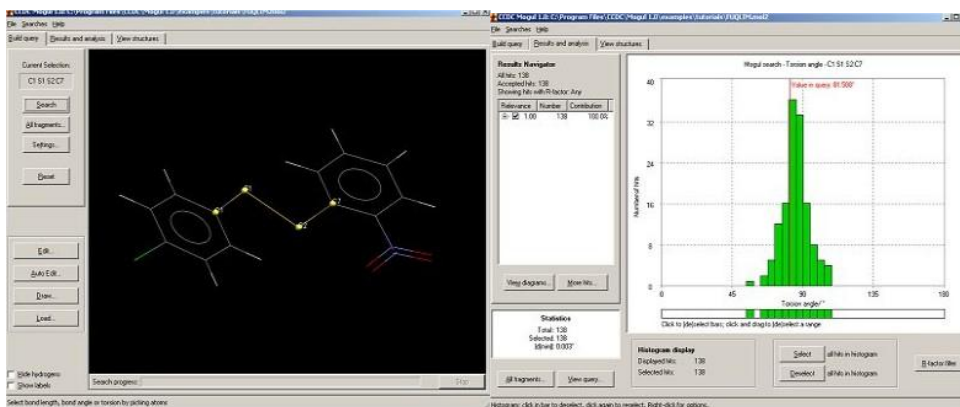
Mogul tarjoaa valmiuden ladata molekyyliä lukuisissa eri formaateissa (MOL2, CIF, PDB, RES) ja luonnostella 2D rakenteita. Moguliin kuuluu valikoima geometrisia ominaisuuksia ja kyky suorittaa validaatio yhdellä klikkauksella kysytyyn molekyylin kaikille sidoksille, kulmille, torsiokulmille ja rengaskonformaatioille. Mogulilla voi nopeasti validoida haetun rakenteen koko geometrian ja tunnistaa epätavalliset piirteet, tarvitsematta rakentaa monimutkaisia hakukyselyjä, tai yksityiskohtaisia data-analyysyjä. Mogul luo automaattisesti alarakennehakuja. Kiinnostuksen kohteena olevan ominaisuuden kemiallinen ympäristö on koodattu, millä taataan, että hakutulokset ovat relevantteja suhteessa kysytyyn rakenteeseen. Mogul kykenee myös löytämään rakenteellisesti läheiset fragmentit, jos osumia ei löydy riittävästi. Mogul hakee nopeasti geometrista dataa. Tulokset esitetään histogrammina, joka on laskettu CSD:n kirjausten mukaan. Mogulia voidaan ajaa komentoriviltä ja integroida asiakassovellusten kanssa.<sup>62,63</sup>

Statistiikka, kuten valenssi-kulman keski- ja mediaaniarvot, voidaan näyttää interaktiivisesti grafiikkaliitännässä, tai viedä ASCII-liitännän kautta toisiin ohjelmiin.<sup>63</sup>

Validaatiokokeet viittaavat siihen, että harvoja poikkeuksia lukuun ottamatta, hakutulokset tarjoavat tarkkoja ja harhattomia arvioita molekyylien geometrisistä preferensseistä.<sup>63</sup>

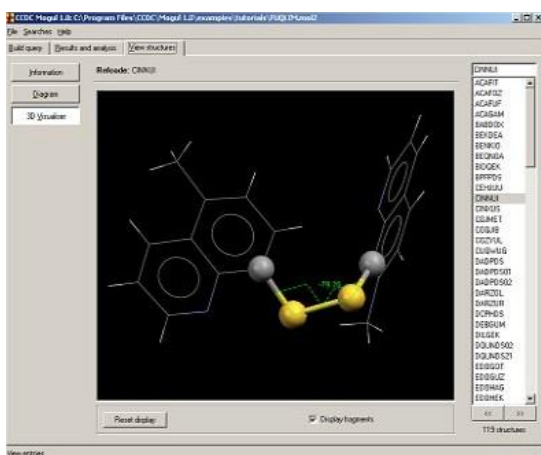
Mogul jaetaan osana CSD Systemiä.<sup>63</sup>

Kuvassa 32 a) on Moguliin haettu molekyyli.



Kuva 32. a) Moguliin haettu molekyyli b) haun tulokset histogrammina<sup>63</sup>

Kuvassa 32 b) on kuvan 32 a) haun tulokset esitetty histogrammina. Mukana on myös статистиikkaa. Kuvassa 33 on Mogulin histogrammista hyperlinkitetty CSD kirjaus.



Kuva 33. Histogrammiin vaikuttavia kiderakenteita<sup>63</sup>

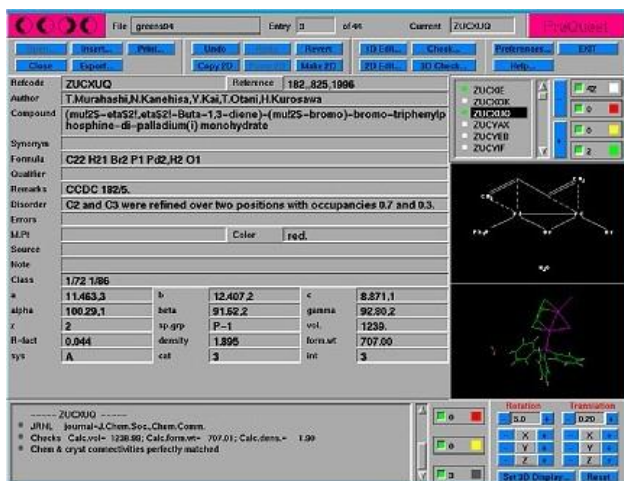
### 3.3.7 PreQuest

PreQuest on ohjelma tietokantojen luomiseen CSD formaatissa. Sen ensisijaisena tavoitteena on korkealaatuisten rakennedatatiekantojen luominen ConQuestilla haettavassa muodossa. PreQuest antaa käyttäjille mahdollisuuden rakentaa yksityisiä tietokantoja rakenteista. Rakenteet ovat sen jälkeen haettavissa joko itsenäisesti, tai Cambridge Structural Databasen (CSD) kautta.<sup>64</sup>

PreQuestin ominaisuuksiin kuuluu joukko syötetietostformaatteja (CIF, SHELX, SD-tiedostot, MOL2 ja BCCAB (CCDC tiedosto formaatti)), automaattinen 2D kemiallisen diagrammin luominen 3D kytkettyneisyys datasta ja tekstuaalisen ja numeerisen tiedon

modifiointi käyttäjän valitsemalla tekstieditorilla, tai interaktiivisesti GUI:n kautta. Siihen kuuluu 2D kemiallinen diagrammi editori, 3D rakennetiedon katselu ja editointi, sekä korjattujen kirjausten siirto CSD formaatissa (ASER) erillisten yksityisten tietokantojen luomiseksi.<sup>64</sup>

Kuvassa 34 on PreQuestin päävalikko.



Kuva 34. PreQuestin päävalikko<sup>64</sup>

### 3.4 CCDC:n taustatietoa, historiaa ja yhteistyökumppanit

CCDC on voittoa tavoittelematon yhtiö, ja se on Englannin lain alainen. CCDC sijaitsee Cambridgen yliopiston kemian kampuksella ja se rahoittaa ja hallinnoi itse itseään. Sen tulot tulevat CSDS:n tilauksista, myyntituloista ja ylläpitosopimuksista muille ohjelmistotuotteille biotieteiden ja kristallografian aloilla, sekä satunnaisista avustuksista teollisuudelta ja muilta lähteiltä ohjelmistokehityksen tai tutkimusprojektien tukemiseksi. CCDC:llä on 50 kokoaikaista työntekijää, ja vierailevia tutkijoita ja opiskelijoita, jotka työskentelevät CSD:hen tai muihin CCDC:n tuotteisiin liittyvissä projekteissa. CCDC on yksi Pfizer Institute for Pharmaceuticals Materials Sciencen kumppaneista yhdessä yliopiston kemian ja materiaalitieteiden laitosten kanssa.<sup>65</sup>

CCDC sai alkunsa Cambridgen yliopiston orgaanisen, epäorgaanisen ja teoreettisen kemian osaston kristallografian ryhmässä. Vuodesta 1965 eteenpäin ryhmä alkoi kerätä julkaistua bibliografista, kemiallista ja kiderakennedatata kaikista pienistä molekyyleistä, joita oli tutkittu röntgensäde- tai neutronidiffraktion avulla. Tietotekniikan nopeasti

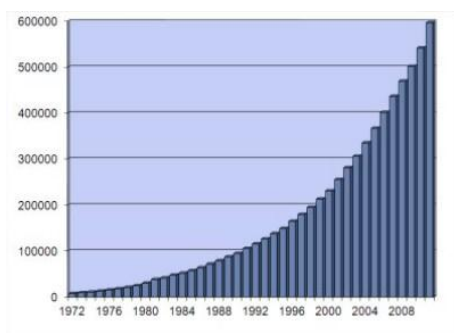
kehittyessä, kokoelma koodattiin sähköiseen muotoon ja tuli tunnetuksi Cambridge Structural Databasena (CSD).<sup>66</sup>

CSD oli yksi ensimmäisistä numeerisista tieteellisistä tietokannoista maailmassa. Se sai akateemista rahoitusta ja tukea useammasta lähteestä, mikä mahdollisti CSD:n ja siihen liittyvän ohjelmiston kehityksen 1970- ja 1980-luvuilla. Ensimmäiset CSD Systemin julkistukset USA:han, Italiaan ja Japaniin tapahtuivat aikaisin 1970-luvun alkupuolella. 1980-luvun alkupuoleen mennessä CSD Systemiä jaettiin yli 30 maahan maailmanlaajuisesti. Tällä vuosikymmenellä CSD System on saatavilla yli 50 maassa.<sup>66</sup>

1980-luvun aikana CSD Systemin kiinnostus farmaseuttisia ja agrokemikaaliyhtiöitä kohtaan kasvoi huomattavasti. Tämä lisätulolähde mahdollisti se, että CCDC:stä tuli v. 1989 itsenäinen yhtiö, jolla oli laillinen asema voittoa tavoittelemattomana vapaaehtoisjärjestönä. CCDC siirtyi v. 1992 tarkoitusta varten rakennettuihin tiloihin Cambridgen yliopiston kemian laitoksella.<sup>66</sup>

Viime vuosikymmenen aikana CCDC ohjelmistotuotteet ovat monipuolistuneet. Vaikka CCDC on itseään hallinnoiva organisaatio, se on säilyttänyt läheiset yhteydet Cambridgen yliopistoon. Se on yliopiston kumppani-instituutio, joka on pätevä kouluttamaan jatko-opiskelijoita.<sup>66</sup>

Kuvan 35 histogrammi näyttää CSD:n kasvun 1970-luvulta lähtien.



Kuva 35. CSD:n kasvu v. 1972 lähtien<sup>67</sup>

Kuvassa 36 on lueteltuna CCDC:n yhteistyökumppanit.



**Universities and Research Institutes in the UK**

- Department of Chemistry, University of Bath
- Department of Chemistry, University of Bristol
- Department of Chemistry, University of Cambridge
- Pfizer Institute for Pharmaceutical Materials Science, University of Cambridge
- Unilever Centre, University of Cambridge
- Rutherford Appleton Laboratory, Chilton, Oxfordshire
- Department of Chemistry, University of Durham
- Department of Chemistry, University of Edinburgh
- Department of Biology, University of Glasgow
- Department of Chemistry, University College London
- Chemical Crystallography Laboratory, University of Oxford
- Department of Information Studies, University of Sheffield
- Department of Chemistry, University of Southampton

**Universities and Research Institutes outside the UK**

- Department of Chemistry, University of Hyderabad, India
- Instituto de Quimica Medica, CSIC, Madrid, Spain
- Department of Pharmaceutical Chemistry, Philipps-Universität, Marburg, Germany
- Department of Chemistry, Queen's University, Kingston, Ontario, Canada
- Department of Information Studies and Computer Science, Queen's University, Kingston, Ontario, Canada
- Protein Data Bank, RCSB, Rutgers University, Brunswick NJ, USA

**Industrial collaborators**

- Astex Technology, Cambridge, UK
- GlaxoSmithKline, Stevenage, UK
- L'Oréal SA, France
- Pfizer Inc., Sandwich, UK and Groton, USA
- ChemAxon, Budapest, Hungary
- Univa UD, USA
- Altair Engineering, USA

**Partnerships**

-  Registered Supporters Of The InChI Trust
- Royal Society Of Chemistry Partner

Kuva 36. CCDC:n yhteistyökumppanit<sup>68</sup>

## 4 SCIFINDER

Chemical Abstracts Service (CAS) on American Chemical Societyn jaosto. CAS on maailman johtava kemiallisen tiedon lähde. Se kokoaa ja ylläpitää maailman laajinta kokoelmaa kirjallisuus- ja patenttiviitteitä, yhdisteitä, reaktioita ja muuta tutkijoille tärkeää sisältöä. Se on ainoa yhtiö, joka kerää ja järjestää kaiken ei-julkisen yhdistetiedon. CAS tietokantoja voidaan käyttää SciFinderin tai STN:n kautta. SciFinder -liittymä on hyvä tutkimustyökalu ammattimaiseen tiedonhakuun ja tutkijoille, STN taas komentorivipohjainen palvelu.<sup>54,20</sup>

CAS tietokantojen sisältöön kuuluu käsitteellistä tietoa (tutkimuksen luonteesta, prosesseja ja tekniikoita), sekä yhdistetietoa (kauppanimet, triviaalimet, systemaattiset nimet, synonyymit ja molekyylikaavat). Viitteistä on linkit sähköisiin lehtiin, patenttiasiakirjoihin ja muihin hyvämaineisiin nettilähteisiin.<sup>15</sup>

CAS tietokannat sisältävät yli 69 milj. uniikkia orgaanista ja epäorgaanista kemiallista yhdistettä, ja yli 64 milj. sekvenssiä. CAS tietokannoista CAS REGISTRY (tietolähde pienistä yhdisteistä ja CAS rekisterinumeroista) tietokantaa päivitetään joka päivä.

Patentit, jotka täyttävät CAS valintakriteerit, ovat saatavilla Internetissä CAplus tietokannassa kahden päivän sisällä patentin julkaisemisesta. CAplus tietokantaan lisätään yli 4500 viitettä päivittäin (joita tietokannassa on tällä hetkellä yli 36 milj.). Bibliografiset tiedot ja artikkelien tiivistelmät yli 1500 avainlehdessä lisätään CAplus tietokantaan 7 päivän sisällä.<sup>15</sup>

CAS -tietokantoja ovat CAS REGISTRY, CAplus, CASREACT, CHEMCATS, CHEMLIST, CIN ja MARPAT. CAS REGISTRY sisältää kemiallista yhdistetietoa, CAplus viitteitä, CASREACT reaktioita, CHEMCATS kemikaalien toimittajia, CHEMLIST säänneltyjä kemikaaleja ja MARPAT patenttien sisältämiä yhdisteitä. CIN -Chemical Industry Notes on saatavilla vain STN:n kautta.<sup>15</sup>

SciFinderin käyttö vaatii käyttäjäksi rekisteröitymisen ja kirjautumisen joka kerta omilla tunnuksilla. Kirjautuminen tapahtuu osoitteessa <https://scifinder.cas.org/scifinder/login.jsf>. Tietokantaa voidaan käyttää ainoastaan yliopiston verkkoalueella.<sup>14</sup>

## 4.1 Käyttö

### 4.1.1 Viitteiden haku

Kun halutaan hakea patentti- ja kirjallisuusviitteitä, valitaan Explore References. Eri hakutyypit viitteiden hakuun ovat vasemmanpuoleisessa valikossa. Haku voidaan tehdä tutkimusaiheen mukaan, tekijän nimellä, yhtiön nimellä, dokumenttitunnisteella (DOI), lehden nimellä, patentilla tai tageilla. Kuvassa 37 on esimerkiksi valittu viitteiden haku tutkimusaiheen mukaan (Explore References, Research topic). Kirjoitetaan kaksi tai kolme käsitettä englanniksi. Käytetään artikkeleita ja prepositioita käsitteiden yhdistämiseksi. Akronyymit ja synonyymit laitetaan sulkuihin synonyymisen käsitteen jälkeen. Käytetään ”not” tai ”except” jonkin termin poissulkemiseksi. Suoritetaan laaja haku, tai asetetaan hakurajoitteita, joita ovat julkaisuvuosi, dokumenttityyppi, kieli, tekijän nimi tai yhtiön nimi. Scifinder hakee automaattisesti toisiaan vastaavat termit ja ottaa huomioon vaihtoehtoiset kirjoitusasut ja sanojen loput tuloksia hakiessaan.<sup>69</sup>

Explore References

Research Topic

Examples:  
The effect of antibiotic residues on dairy products  
Photocyanation of aromatic compounds

Author Name  
Company Name  
Document Identifier  
Journal  
Patent  
Tags

Publication Year(s)   
Examples: 1995, 1995-1999, 1995-, -1995

Document Type(s)  Biography  Dissertation  Patent  
 Book  Editorial  Preprint  
 Clinical Trial  Historical  Report  
 Commentary  Journal  Review  
 Conference  Letter

Language(s)  Chinese  German  Polish  
 English  Italian  Russian  
 French  Japanese  Spanish

Author Name     
Last \* First Middle

Company Name   
Examples:  
Minnesota Mining and Manufacturing  
DuPont

Kuva 37. Viitteiden haku SciFinderilla tutkimusaiheen perusteella<sup>69</sup>

Valitaan hakutulokandidaattien joukosta (kuva 38) halutut viitteet hakutermien ja käsitteiden suhteiden mukaan. Termit ovat ”As entered”, kun ne löytyvät täsmälleen samassa muodossa, kuin missä ne kirjoitettiin. Termit ovat ”Closely associated with one another”, kun ne löytyvät samasta lauseesta tai otsikosta. Termit ovat ”Present anywhere within a reference”, kun ne löytyvät mistä tahansa tuloksen otsikosta, tiivistelmästä tai asiahakemistosta. Termit ovat ”Containig the Concept”, kun ne löytyvät tuloksesta. Tällöin syötetyt termit, synonyymiset termit, tai samankaltaiset termit löytyvät tuloksesta. Klikataan sitten Get References.<sup>69</sup>

Research Topic Candidates

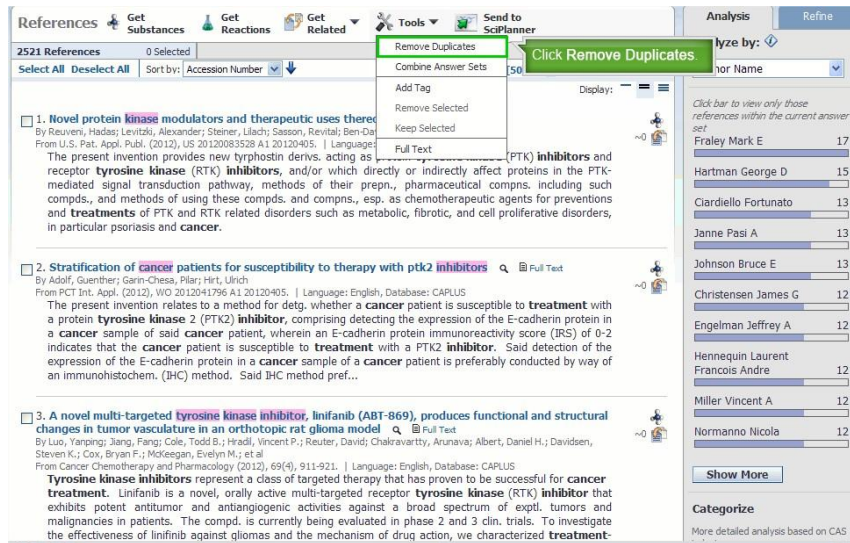
5 Topics 1 Selected

Select All Deselect All

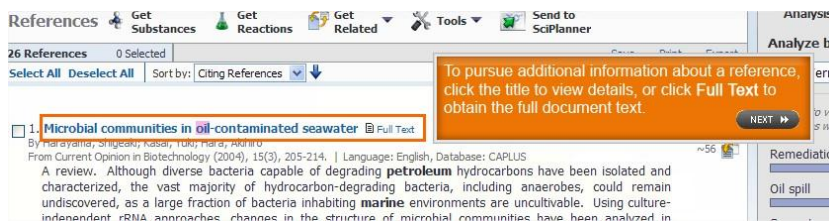
Research Topic Candidates	References
<input type="checkbox"/> 13 references were found containing "intramolecular hydroamination of aminoalkenes" as entered.	13
<input checked="" type="checkbox"/> 94 references were found containing the two concepts "intramolecular hydroamination" and "aminoalkenes" closely associated with one another.	94
<input type="checkbox"/> 126 references were found where the two concepts "intramolecular hydroamination" and "aminoalkenes" were present anywhere in the reference.	126
<input type="checkbox"/> 621 references were found containing the concept "intramolecular hydroamination".	621
<input type="checkbox"/> 670 references were found containing the concept "aminoalkenes".	670

Kuva 38. Tulokandidaatit<sup>69</sup>

Hakutulokset tulevat näkyviin, ja niitä voidaan tarkastella. Ks. kuva 39. Viitteiden yksityiskohtia voidaan esikatsella klikkaamalla Quick View pienkuvaketta viitteen otsikon perässä. Näkyviin tulee viitteen tiivistelmä ja yhdistekuvat. Viitteen koko tiedot tulevat näkyviin klikkaamalla viitteen otsikkoa tai Full Text –linkkiä (kuva 40). Hakutermit näkyvät korostettuna otsikossa ja tiivistelmässä. Duplikaatteja voidaan poistaa Tools (työkalut) –valikon kautta. Yksittäisiä viitteitä voidaan valita säilytettäväksi tai poistettavaksi.<sup>70</sup>



Kuva 39. Hakutulokset<sup>70</sup>



Kuva 40. Viitteen otsikkoa tai Full Text –linkkiä klikkaamalla tulee näkyviin viitteen tiedot tai kokoteksti<sup>71</sup>



Kuva 41. Tulokset lajitellaan oletusasetuksena saantinumeron mukaan<sup>70, 71</sup>

Tulokset lajitellaan oletusasetuksena saantinumeron mukaan (kuva 41).

Viitteet analysoidaan automaattisesti Author Name (tekijän nimen) mukaan oikean laidan Analysis -toiminnossa (kuva 42). Numerot palkkien perässä kertovat tulosten määrän kussakin alasetissä. Ensimmäiset kymmenen analyysipalkkia esitetään automaattisesti. Klikataan Show More, jolloin tulee näkyviin lisää analyysipalkkeja.<sup>69</sup>

Kun halutaan vaihtaa analyysikategoriaa, valitaan pudotusvalikosta toinen vaihtoehto. Vaihtoehtoja ovat CAS Registry Number (CAS rekisterinumero), CA Section Title, Company-Organization (teknologian alalla aktiivisesti julkaisevat organisaatiot), Database, Document Type (julkaisutyyppi), Index Term (indeksitermit), CA Concept Heading (käsitetermit), Journal Name, Language, Publication Year ja Supplementary Terms (tulokset, joilla on ensisijaisesti teknistä painoarvoa).<sup>69</sup>

Alasetin viitteitä voidaan tarkastella klikkaamalla alasetin otsikkoa. Kun halutaan valita useampia alasettejä kerralla, klikataan Show More. Valitaan halutut alasetit ja klikataan Apply.<sup>69</sup>

The screenshot shows the 'Analysis' tool interface. On the left, there is a 'Refine' panel with a dropdown menu for 'Analyze by:' set to 'Author Name'. Below this, a list of authors is displayed with their respective counts: Stubbert Bryan D (6), Hill Michael S (3), Hong Sukwon (3), Arrowsmiths Marie (4), Collin Jacqueline (4), Hartwig John F (4), and a 'Show More' button. Below the list is a 'Categorize' section with a 'Categories' button. The main area shows search results for 'Fraleley Mark E' with a count of 17. A green box highlights the author name and count. A tooltip above the list says: 'To view the references in a subset, click the subset title. For example, click Fraleley Mark E.' The right side of the interface shows a 'Refine' panel with 'Analyze by:' set to 'Author Name' and a 'Show More' button. Below this, a list of authors is displayed with their counts: Hartman George D (15), Ciardiello Fortunato (13), Janne Pasi A (13), Johnson Bruce E (13), Hennequin Laurent Francois Andre (12), Baselga Jose (11), Engelman Jeffrey A (11), Normanno Nicola (11), and Christensen James G (10). A 'Show More' button is at the bottom of this list.

Kuva 42. Analysis -toiminto<sup>72,69</sup>

Tulossetti tulee näkyviin (kuva 43). Klikkaamalla Keep Analysis (keltaiseksi maalatulla pohjalla), luodaan uusi tulossetti, joka sisältää vain analysoidun setin viitteet. Alkuperäiseen tulossettiin palataan klikkaamalla Clear Analysis.<sup>69</sup>

Year	Number of References
2010	22
2009	16
2007	11
2011	10
2008	10
2005	6
2012	4
2004	4

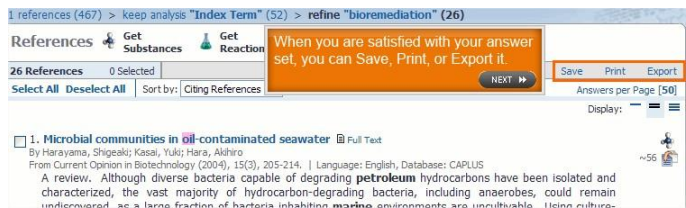
Kuva 43. Analysis –toiminnolla luotu tulossetti<sup>69</sup>

Categorize -toiminto on pidemmälle viety analyysivaihtoehto, joka perustuu kuhunkin viitteeseen yhdistettyihin indeksointitermeihin. Indeksointitermit on lajiteltu eri tieteenalojen sisällä kategorioittain. Kun valitaan kiinnostavat indeksointitermit, voidaan tulokset löytää ne viitteet, jotka liittyvät noihin termeihin. Categorize -toiminto sijaitsee oikean laidan Analysis -toiminnon alareunassa.<sup>69</sup>

Refine -toiminnon avulla voidaan lisätä kriteerejä viitteille (kuva 44). Vaihtoehtoja ovat Research Topic, Author Name, Company Name, Document Type, Publication Year, Language ja Database.<sup>69</sup>

Kuva 44. Refine työkalu<sup>69</sup>

Kuvissa 45 ja 46 näkyvät Save, Print, Export ja Add KMP Alert –toiminnot (tallenna, tulosta, siirrä ja luo hälytys), joilla tuloksia voidaan tallentaa, tulostaa, siirtää, tai luoda hälytys.

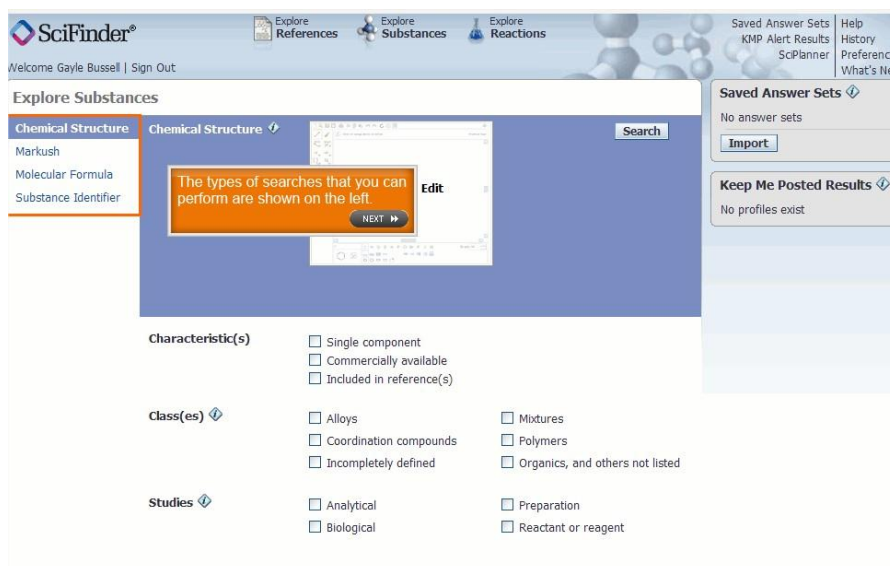


Kuva 45. Tulokset voidaan tallentaa, tulostaa tai siirtää.<sup>71</sup>



Kuva 46. Käyttöön voidaan ottaa Keep Me Posted (KMP) Alert –hälytystoiminto ajan tasalla pysymiseksi.<sup>71</sup>

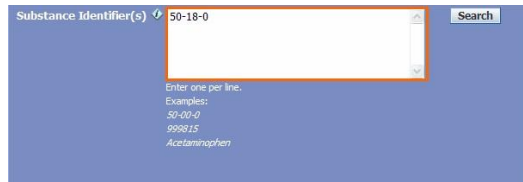
#### 4.1.2.1 Kemiallisten yhdisteiden haku



Kuva 47. Hakutyypit.<sup>73</sup>

Yhdisteiden haku tapahtuu Explore Substances sivulla (kuva 47). Yhdisteitä voidaan hakea kemiallisen rakenteen, Markush –yhdisteiden (patenttiviitteitä), molekyylikaavan, tai yhdisteiden tunnistetietojen mukaan (vaihtoehdot vasemmassa laidassa). Kemiallisia

rakenteita voidaan hakea tarkan rakenteen, alarakenteen, tai samankaltaisen rakenteen perusteella. Substance Identifier toiminto (kuva 48) hakee yhdisteitä kemiallisen nimen (yleinen nimi, kaupp nimi, akronyymi), tai CAS rekisterinumeron mukaan. Tietokannasta voidaan hakea useita eri yhdisteitä samanaikaisesti. Kuvassa 49 on suoritettu haku yhdisteen tunnistetietojen (Substance Identifier) mukaan.<sup>73</sup>



Kuva 48. Substance Identifier tekstiruutu<sup>74</sup>

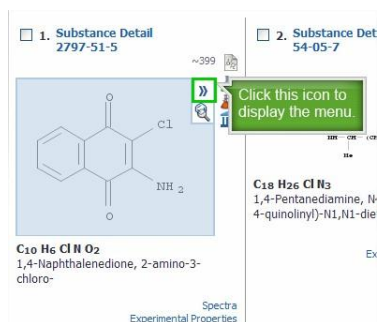
Kuva 49. Yhdisteen tunnistetietojen mukaan suoritettu haku<sup>73</sup>

Yhdistetietojen oikean laidan pienkuvakkeilla voidaan hakea viitteitä, reaktioita, kaupallisia lähteitä ja sääntelytietoa haetusta yhdisteestä. Alalaidassa on Spectra (spektrit) ja Experimental Properties –linkit (kokeellisesti mitatut ominaisuudet). Klikkaamalla Substance Detail saadaan lisätietoa yhdisteestä. Yhdisteen tunnistetiedot ovat ylinnä Substance Detail sivulla. Niihin kuuluu CAS rekisterinumero, molekyylikaava, kemialliset nimet ja kemiallinen rakenne. Näkyvissä on myös viitteiden määrä, alkuperäisten dokumenttien tyypit (esim. lehtiartikkeli, konferenssijulkaisu, tai patenttiviite) ja yhdisteiden roolit (esim. analyttinen tai biologinen tutkimus, esiintyminen, valmistus, prosessi, ominaisuudet, reaktantti tai reagenssi, käyttö). Viitteet saadaan näkyviin esim. hyperlinkkejä klikkaamalla. Sen




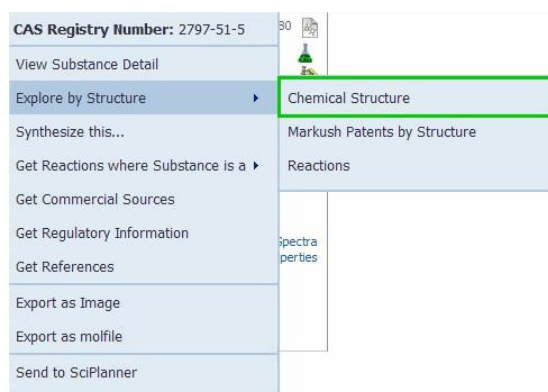
jälkeen Substance Detail -sivulla on esitetty ennustetut ja kokeelliset ominaisuudet ryhmittäin.<sup>73</sup>

Kun kursoria liikutetaan rakenteen päällä, rakenne korostuu, ja näkyviin tulevat vaihtoehdot rakenteen kanssa työskentelemiseksi (kuva 50).<sup>73</sup>



Kuva 50. Liikutetaan kursoria rakenteen päällä<sup>73</sup>

Klikkaamalla ylimmäistä kuvaketta korostetun alueen oikeassa yläreunassa tulee näkyviin menuvalikko (kuva 51).<sup>73</sup> Kaupallisia lähteitä voidaan hakea myös klikkaamalla Commercial Sources pienkuvaketta , tai valitsemalla Commercial Sources Tools (työkalut) -valikon kautta.<sup>69</sup> Scifinder tarjoaa tietoa yli 54 milj. kaupallisesti saatavilla olevasta tuotteesta yli 1220 kemiallisesta katalogista, yli 1094 toimittajalta ja yli 18 milj. ainutkertaista CAS rekisterinumeroa.<sup>74</sup>



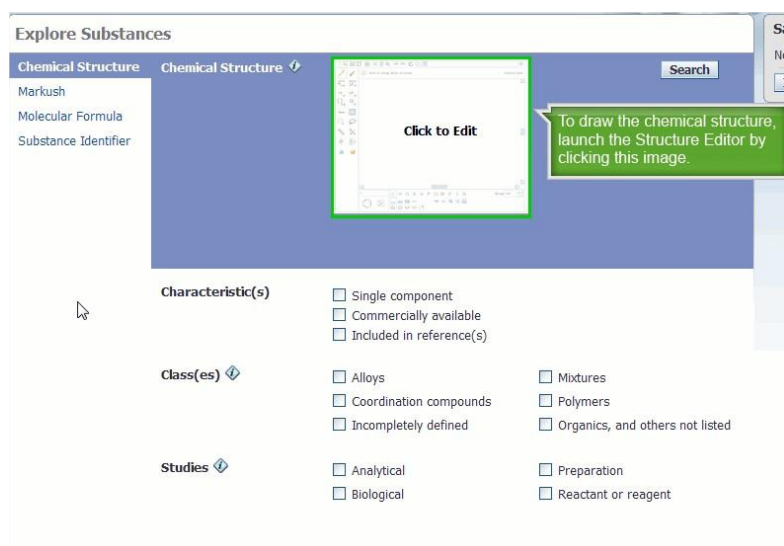
Kuva 51. Menuvalikko<sup>73</sup>

Sivun oikean laidan Analysis –toiminnoissa yhdisteet on analysoituna oletusasetuksena yhdisteen roolin (Substance Role) mukaan.<sup>73</sup> Analyze by –pudotusvalikon vaihtoehdoista voidaan valita Bioactivity Indicators (yhteys biologiseen aktiivisuuteen),

Commercial Availability (kaupallinen saatavuus), Elements (vastaussetin yhdisteiden sisältämät alkuaineet), Reaction Availability (reaktiivisuus), Substance Role (rooli, käyttö tai tutkimustyyppi) tai Target Indicators (yhdisteen suhde proteiinin, entsyymin tai muun kohteen välillä).<sup>75</sup> Refine –valikosta voidaan lisätä hakukriteerejä. Vaihtoehtoja ovat Chemical Structure, Isotope-Containing, Metal-Containing, Commercial Availability, Property Availability, Property Value, Reference Availability ja Atom Attachment.<sup>76</sup>

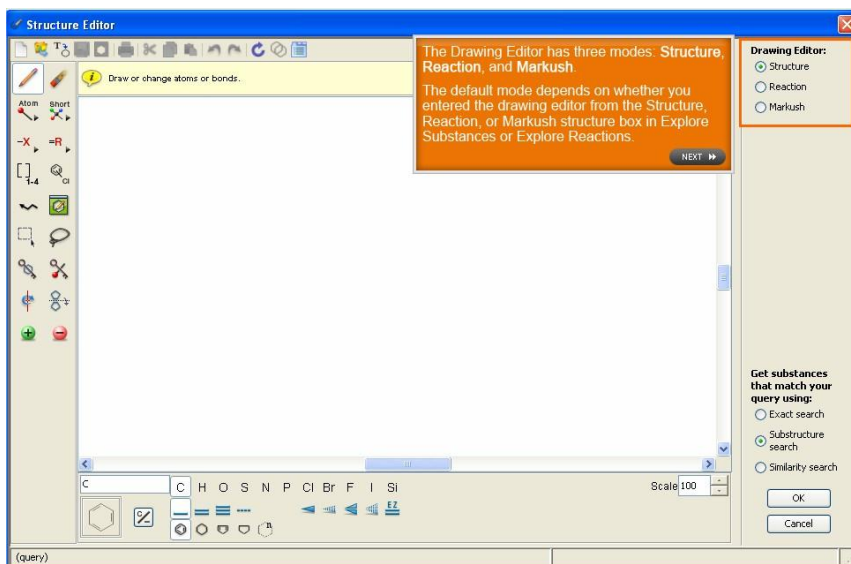
#### 4.1.2.2 Piirtoeditori

Piirtoeditori avataan klikkaamalla kuvaketta Explore Substances, Chemical Structure sivulla (kuva 52).<sup>76</sup>



Kuva 52. Piirtoeditorin avaaminen<sup>76</sup>

Piirtoeditorissa on kolme vaihtoehtoa: Structure, Reaction ja Markush. Oletusasetus riippuu siitä, avataanko piirtoeditori Structure, Reaction vai Markush hakuvalikosta Explore Substances tai Explore Reactions sivuilla. Kuvassa 53 on avattuna rakenne-editori.<sup>77</sup>



Kuva 53. Rakenne-editori<sup>77</sup>

Rakenteen piirtämiseen käytetään vasemman laidan ja alareunan työkaluja, kuten rengas, kynä, atomi, templeetti, lyhenne (esim Ph), ketju ja pyyhekumi. Rakenteita voidaan myös tuoda piirtoeditoriin muista sovelluksista. Import –kuvaketta voidaan käyttää .cxf tai .mol muodossa tallennetun rakennetiedoston tuomiseen. Rakenteita voidaan myös kopioida ja liittää ChemDraw:sta ja ISIS/ChemDraw:sta.<sup>77</sup>

Rakenteita voidaan hakea editoriin ulkoisen tunnisteiden avulla. Klikataan Add to Editor by External Identifier kuvaketta ja syötetään SMILES tai InChI merkkijono tekstiruutuun. Rakenne tulee näkyviin piirtoikkunaan.<sup>77</sup>

Piirtotyökalut ovat täsmälleen samat Markush ja Structure editoreissa. Markush kyselyt hakevat patenttiviitteitä, jotka sisältävät kyselyn kanssa yhteensopivia yleisiä rakenteita.<sup>77</sup>

Reaktioeditorissa (Reaction) on lisätyökaluja reaktioiden piirtämiseen, kuten reaktionuoli.<sup>77</sup>

Kemiallisen rakenteen hakutyyppejä ovat Exact search (tarkan rakenteen haku), Substructure search (alarakenteen haku) ja Similarity search (samankaltaisten rakenteiden haku). Tarkan rakenteen haku hakee tulokset, joihin kuuluu rakenne täsmälleen sellaisena, kuin se on piirretty, stereoisomeerit, tautomeerit (mukaan lukien keto-enol tautomeerit), kahtaisionit, koordinaatioyhdisteet, varatut yhdisteet, radikaalit tai radikaali-ionit, isotoopit ja polymeerit, joissa rakenne on monomeeri. Seokset ja

suolat, joissa rakenne esiintyy, haetaan myös. Haettu rakenne aukeaa näkyviin Explore Substances sivulle Rakenneikkunaan. Ks. kuva 54. Sivun alaosa voidaan valita hakurajoitteita, kuten Single Component (yksikomponenttiset yhdisteet) tai Commercially Available (kaupallisesti saatavilla olevat yhdisteet).<sup>76</sup>

Alarakennehaku hakee yhdisteitä, joissa haettu alarakenne on osana kemiallista rakennetta. Substituutio on mahdollista mihin tahansa atomipaikkaan alarakenteessa, ellei sitä lukita.<sup>78</sup>

Kuva 54. Rakennehaulla haettu rakenne aukeaa näkyviin Explore References sivulle Rakenneikkunaan<sup>76</sup>

Klikataan Search, jolloin hakutulokset tulevat näkyviin. Niitä voidaan sen jälkeen lajitella ja analysoida.<sup>78</sup>

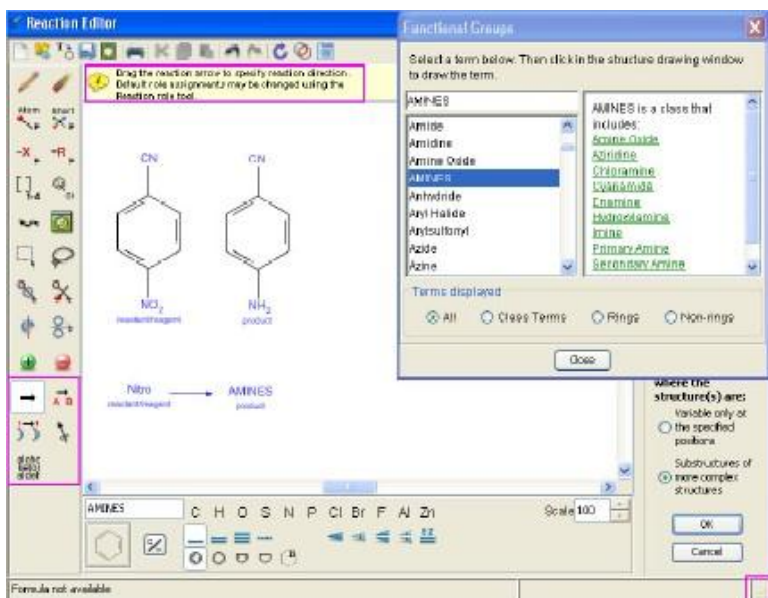
#### 4.1.3 Reaktioiden haku

Reaktiotiedon haku aloitetaan Explore Reactions sivulla. Avataan reaktioeditori klikkaamalla pienoiskuvaa Explore Reactions, Reaction Structure sivulla (kuva 55).<sup>79</sup>



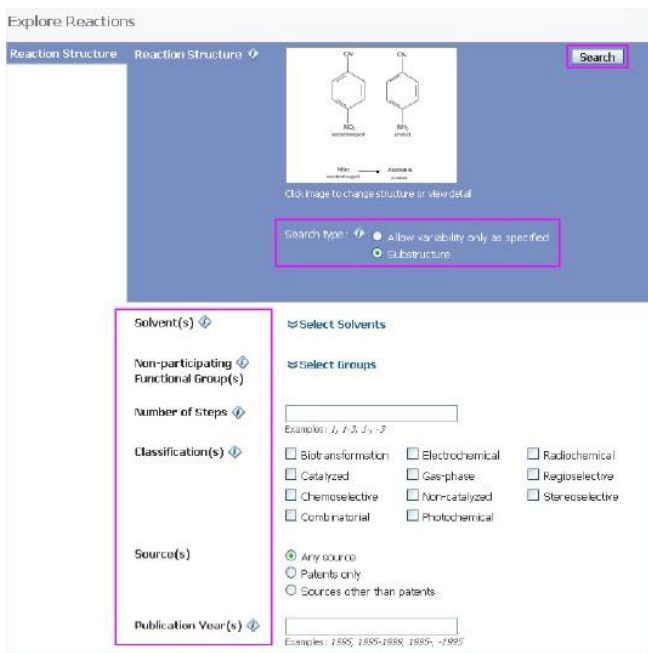
Kuva 55. Avataan reaktioeditori<sup>79</sup>

Käytetään vasemman laidan ja alalaidan reaktiospesifisiä työkaluja. Ikkunan kokoa voidaan muuttaa raahaamalla sitä oikean alalaidan nurkasta. Liikutetaan hiirtä työkalunappuloiden yli, jolloin nähdään niiden nimet tai kuvailut työkaluille.<sup>79</sup> Kuvassa 56 on reaktioeditori.



Kuva 56. Reaktioeditori<sup>79</sup>

Piirretään kaikki reaktioon osallistuvat yhdisteet. Määritetään kunkin yhdisteen rooli Reaction Arrow (reaktionuoli) tai Reaction Role (rooli reaktiossa) –työkalujen avulla. Valitaan hakutyyppiä Variable only at the specified positions tai Substructure of more complex structures (jolloin sallitaan lisäsubstituutio ja rengasfuusio), ja klikataan OK. Tulokset voidaan suodattaa liuottimen, reaktioon osallistumattomien funktionaalisten ryhmien, reaktioaskelten määrän, tietyn reaktiotyyppin, lähteen ja julkaisuvuoden mukaan. Ks. kuva 57.<sup>79</sup>



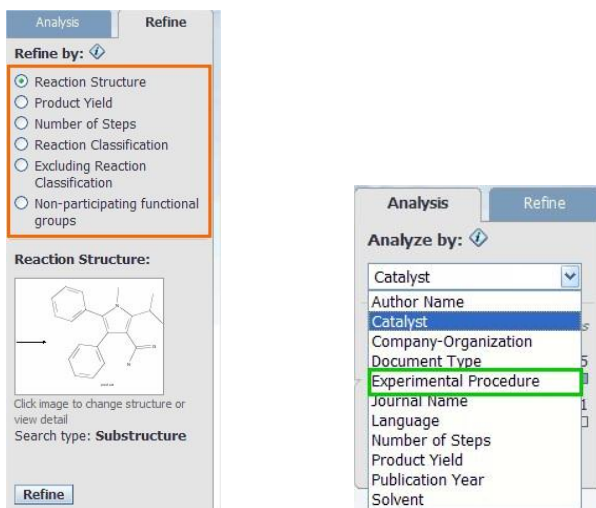
Kuva 57. Reaktioiden haku<sup>79</sup>

Klikataan Search ja tarkastellaan tuloksia (kuva 58).<sup>79</sup>

Kuva 58. Tulokset<sup>79</sup>

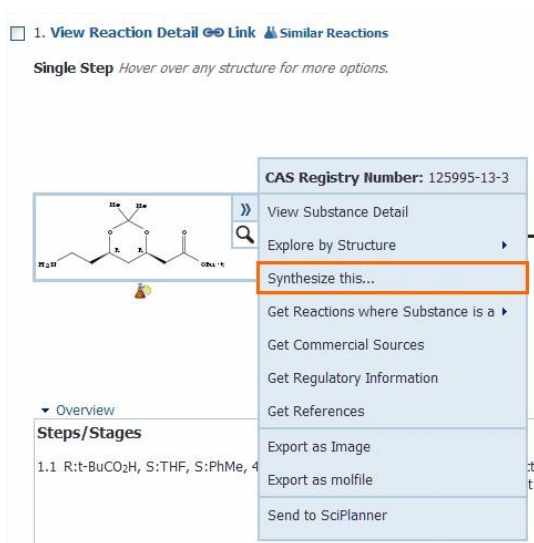
Klikkaamalla Get References tulee näkyviin reaktioiden viitteet. Viitetiedot voidaan tulostaa tai siirtää, tai hakea näkyviin kokoteksti dokumentit.

Tuloksia voidaan ryhmitellä ja lajitella Group by ja Sort by toimintojen avulla. Tulosten käsittelyyn on Analysis ja Refine työkalut (kuva 59).<sup>80</sup>



Kuva 59. Analysis ja Refine työkalut<sup>80</sup>

Kaksoisnuolikuvakkeesta klikkaamalla aukeaa valikko, jossa on vaihtoehtoja uuden haun aloittamiseksi (kuva 60). Suurennuslasikuvakkeesta klikkaamalla tulee näkyviin yhdistetiedot ponnahdusikkunaan.<sup>80</sup>



Kuva 60. Valikko, jossa vaihtoehtoja uuden haun aloittamiseksi<sup>80</sup>

Kun kaupalliset lähteet ovat saatavilla, Pricing & Availability linkistä päästään suoraan tuotteen toimittajan nettisivuille.<sup>80</sup>

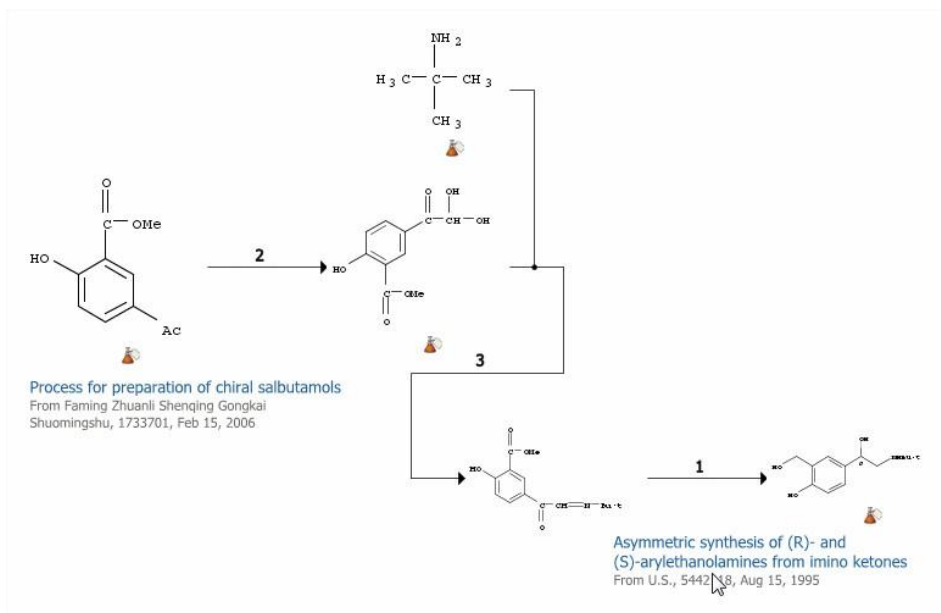
SciPlannerin avulla voidaan luoda synteesisuunnitelmia (kuva 61). SciPlanneriin voidaan lähettää yhdisteitä, reaktioita ja viitteitä useilla tavoilla. SciPlanneriin lähetetyt

kohteet varastoidaan kirjastoon. Kirjastosta voidaan siirtää yhdisteitä, reaktioita ja viitteitä työtilaan.<sup>81</sup>



Kuva 61. SciPlanner<sup>81</sup>

SciPlannerilla luotu synteesisuunnitelma (kuva 62) voidaan jakaa muille. Klikataan Workspace, Export, Saving Locally: SciPlanner eXchange (\*.pkx). Kun .pkx tiedosto halutaan jakaa jonkun toisen käyttäjän kanssa, täytyy heidän ensin kirjautua Scifinderiin päästäkseen tarkastelemaan sitä.<sup>81</sup>



Kuva 62. SciPlannerilla luotu synteesisuunnitelma<sup>81</sup>



## 4.2 Taustatietoa, historiaa ym.

William A. Noyes perusti CAS organisaation v. 1907. CAS:in juuret ovat Chemical Abstracts (CA) julkaisussa, johon koottiin painettuna valvotusti tiivistettyä ja indeksoitua kemiaan liittyvää kirjallisuutta. Ensimmäisenä vuonna CA sisälsi alle 12 000 abstraktia. Vuonna 1956 CA:sta tuli Chemical Abstracts Service (CAS), ja American Chemical Societyn toimiva yksikkö. Vuonna 1965 esiteltiin CAS Chemical Registry System ja CAS rekisterinumero kemiallisten yhdisteiden yksilöimiseksi. Vuonna 1995 esiteltiin Scifinder, joka tarjosi tutkijoille suoran pääsyn CAS tietokantoihin graafisen käyttöliittymän kautta. Vuonna 1997 esiteltiin ChemPort osana CAS ja STN palveluja. Se tarjosi kokotekstilinkit lehtiartikkeleihin ja patenteihin Internetin kautta. Vuonna 2009 CAS REGISTRY tietokantaan rekisteröityjen yhdisteiden määrä ylitti 50 milj. rajan.<sup>82</sup> CAS:n päämaja on Columbuksessa, Ohiossa, U.S.A:ssa. Työntekijöiden määrä on 1 300. Toimituksessa käydään läpi ja analysoidaan julkaistua tutkimusta yli 10 000 tärkeimmästä tieteellisestä lehdestä ja patenteja 63 patenttiviranomaiselta. Yli 1900 yliopistoa, 500 yhtiötä ja lähes kaikki tärkeimmät patenttitoimistot käyttävät CAS tuotteita.<sup>83</sup>

## 4.3 CAS -tietokannat

CAS tietokannat sisältävät säännöllisesti päivitettävää kemiaan ja siihen läheisesti liittyviin tieteisiin liittyvää tietoa. Ne kattavat useita tieteenaloja, mukaan lukien biolääketiede, kemia, tekniikka, materiaalitieteet ja maataloustiede.<sup>15</sup>

### 4.3.1 CAS REGISTRY

CAS REGISTRY tietokanta on kemiallisten nimien, rakenteiden ja CAS rekisterinumeroitten lähde. Sitä voidaan käyttää kemiallisten yhdisteiden tunnistamiseen. Tietokantaa voidaan käyttää kirjallisuusviitteiden, kokeellisen ja ennustetun ominaisuusdatan (kiehumis- ja sulamispisteet jne.), kaupallisen saatavuuden, valmistusmetodien, spektrien ja kansainvälisistä lähteistä peräisin olevan sääntelytiedon etsimiseen.<sup>84</sup>

CAS REGISTRY sisältää yli 69 milj. orgaanista ja epäorgaanista kemiallista yhdistettä, kuten metalleja, metalliseoksia, mineraaleja, koordinaatioyhdisteitä, organometalleja,

alkuaineita, isotooppeja, ydinhiukkasia, proteiineja ja nukleiinihappoja, seoksia, polymeereja, suoloja ja ei-rakennemateriaaleja (UVBC, ei voida määrittellä niiden kemiallisen koostumuksen perusteella), sekä yli 64 milj. sekvenssiä.<sup>85,86</sup> Sisältöön kuuluu kirjallisuudessa (lehtiartikkelit, patentit, kemialliset katalogit, ja mainittavat nettilähteet) raportoituja yhdisteitä aina 1800-luvun alkupuolelta lähtien.<sup>84,86</sup> Se kattaa tieteellisen kirjallisuuden v. 1957 lähtien. Sitä päivitetään 15 000 yhdisteellä päivittäin.<sup>85</sup> Yhdistetietoihin kuuluu kokeellista ja ennustettua ominaisuusdataa yli 3,8 mrd. suureen arvon verran.<sup>84</sup>

Kaikki tietokantaan rekisteröidyt yhdisteet on yksilöity Chemical Abstract Service (CAS) REGISTRY systeemin avulla. Yhdisteelle annetaan CAS rekisterinumero, kun se otetaan CAS REGISTRY tietokantaan. CAS rekisterinumero on numeerinen tunnistin, joka sisältää korkeintaan 10 numeroa, jotka on jaettu yhdysmerkeillä kolmeen osaan. Esimerkiksi 58-08-2 on kofeiinin CAS rekisterinumero. Kirjauksilla voi olla myös CA indeksointinimet, synonyymit, rakennediagrammit, stereokemia, molekyylikaavat, rengasanalyysidata, metalliseostaulukot, proteiini- ja nukleiinihapposekvenssit, polymeeriluokat ja viitteiden lukumäärä CA/CaPlus tietokannoissa. Kaikki tieto on näytettävissä ja haettavissa STN:llä, mutta osa on vain näytettävissä Scifinderilla. Kuvassa 63 on mallitalenne CAS REGISTRY tietokannan kirjauksesta.<sup>84</sup>

Sample record from SciFinder®

**Substance Detail**

Get References   Get Reactions   Get Commercial Sources   Get Regulatory Info   Send to SciPlanner

Link   Save

---

Return

**4.**

**CAS Registry Number: 58-08-2**

Cs H10 N4 O2

1H-Purine-2,6-dione, 3,7-dihydro-1,3,7-trimethyl-

Caffeine (8CI); 1,3,7-Trimethyl-2,6-dioxopurine; 1,3,7-Trimethylxanthine; 3,7-Dihydro-1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6-dione; 7-Methyltheophylline; Alert-Pep; Asia migrine; Cafalgine; Cafeina; Caffeidine; Caffein; Cafipel; DHCplus; Dasin; Diurex; Durvitan; Guaranine; Hycomine; Koffein; Mateina; Methyltheobromine; Midron extra; Miudol; NSC 5036; New Cetamol; No-Doz; Palergot-C; Phensal; Propoxyphene Compound 65; Refresh'n; SK 65 Compound; Shape Plus; Stay Alert; Stim; Synalgos; Thein; Theine; Tri-Aqua; Wigraine

**Deleted CAS Registry Numbers:** 71701-02-5, 95789-13-2



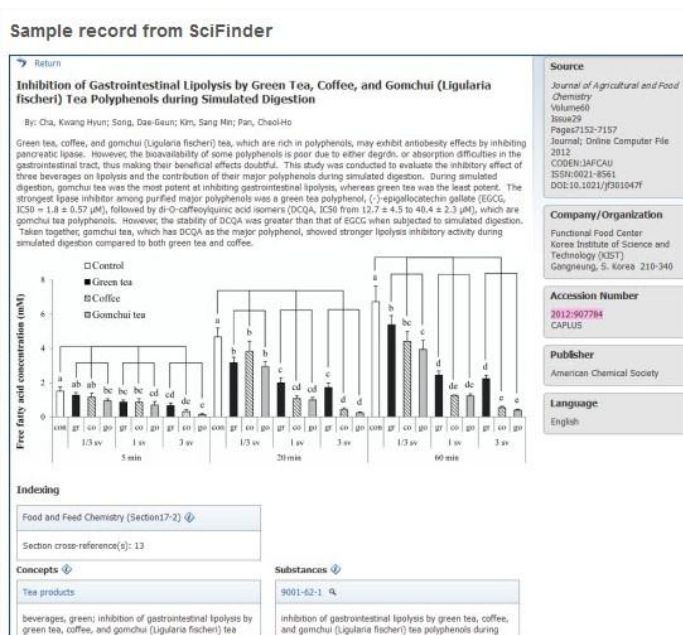
Kuva 63. Mallitalenne CAS REGISTRY tietokannan kirjauksesta<sup>84</sup>

### 4.3.2 CAplus

CAplus on tieteellisten artikkelien ja patenttien tietokanta. Mukana on tieteellisestä kirjallisuudesta (julkaistuna yli 50 eri kielellä yli 180 maassa) käännetyt englanninkieliset yhteenvedot. CAplus sisältää yli 36 miljoonaa kemiaan ja kemiaan liittyvää kirjausta viitteineen.<sup>87,86</sup>

Sen sisältöön kuuluu proteomiikkaa, genomiikkaa, biokemiaa, biokemiallista genetiikkaa, orgaanista kemiaa, makromolekyyliekemiaa, sovellettua kemiaa ja fysikaalista, epäorgaanista ja analyttistä kemiaa.<sup>86</sup> Se sisältää kaikki biokemian alat (maatalouskemikaalien asiamiehet, biokemiallinen genetiikka, käyminen, immunokemia, farmakologia) ja kaikki orgaanisen kemian alat (aminohapot, biomolekyylit, hiilihydraatit, organometalliset yhdisteet, steroidit). Se sisältää kaikki makromolekyyliekemian alat (selluloosa, ligniini, paperi, päällysteet, musteet, väriaineet, orgaaniset pigmentit, synteettiset elastomeerit, tekstiilit, kuidut) ja kaikki sovelletun kemian alat (ilman saasteet, keramiikka, eteeriset öljyt, kosmetiikka, fossiiliset polttoaineet, rautapitoiset metallit, metalliseokset). Se sisältää myös kaikki fysikaalisen, epäorgaanisen ja analyttisen kemian alat (pintakemia, katalyytit, faasitasapaino, ydinilmiöt, sähkökemialla).<sup>87</sup>

Tietokannan kattavuus alkaa 1800-luvun alkupuolelta. Siihen kuuluu yli 10 000 tieteellistä lehteä, yli 1500 tärkeintä kemian alan lehteä, patenteja 63 patenttiviranomaiselta, kokousjulkaisuja, teknisiä raportteja, kirjoja, väitöskirjoja, katsauksia, kokoustiivistelmiä, sähköisiä lehtiä ja netin ennakkopainoksia, sekä kannesta-kanteen kattavuus yli 1500 tärkeimmästä kemian alan lehdestä (alkaen lokakuusta 1994, mukaan kuuluu tallenteet dokumenttityypeistä, joita Chemical Abstracts (CA) ei kata): elämäkerralliset kappaleet, kirja-arvostelut, pääkirjoitukset, painovirheluettelot, kirjeet kustantajalle, uutistiedotteet ja tuotekatsaukset, kokoustiivistelmät. Kuvassa 64 on mallitalenne CAplus tietokannan kirjauksesta.<sup>87</sup>



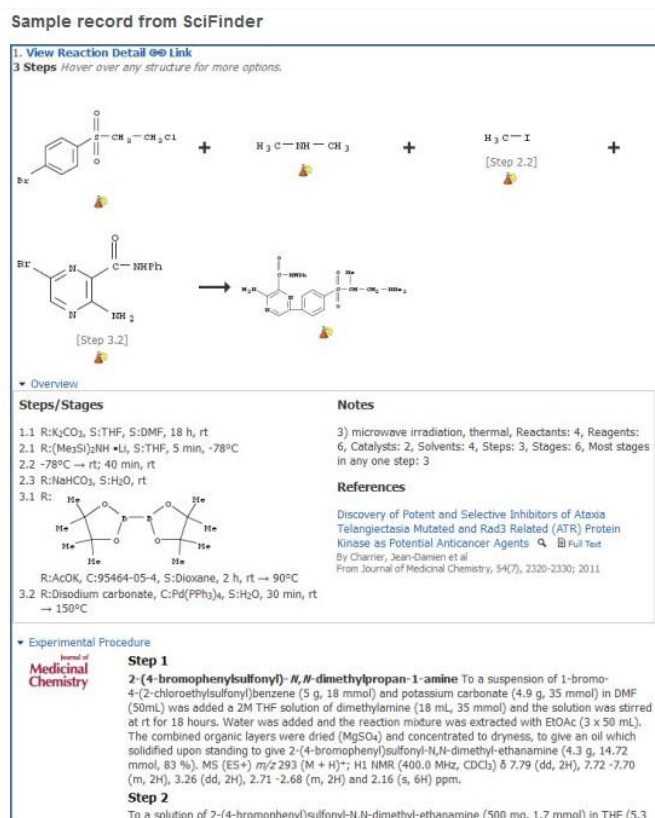
Kuva 64. Mallitalenne CAPLUS tietokannan kirjauksesta<sup>87</sup>

### 4.3.3 CASREACT

CASREACT on reaktiotietokanta, joka sisältää rakennediagrammeja reaktanteille ja tuotteille, CAS rekisterinumeroja kaikille reaktanteille, tuotteille, reagensseille, liuottimille ja katalyyteille. Se sisältää yksityiskohtaista tietoa reaktio-olosuhteista, kokeellisia järjestelyjä<sup>86</sup> ja tietoa saannoista ja katalyyteistä. Se tarjoaa pääsyyntä päivitettyyn tietoon synteettisestä orgaanisesta tutkimuksesta, mukaan lukien organometalliikka, luonnontuotteiden kokonaissynteesi ja biotransformaatioreaktiot. Sieltä löytyy vastauksia kysymyksiin, kuinka monet eri reaktiot tuottavat saman tuotteen, tietyn katalyytin käyttö ja sovellukset, tai eri tavat toteuttaa tietyn funktionaalisen ryhmän muuntumisia.<sup>88</sup>

CASREACT sisältää 60,2 milj. reaktiota,<sup>86</sup> joista yli 46,3 milj. yksi- (A→B, B→C, C→D) ja monivaiheista (A→C, A→D, B→D) reaktiota ja yli 13,9 milj. synteesiä. Synteetit löytyvät Scifinderin Explore Reactions toiminnon kautta.<sup>88</sup>

Kattavuus alkaa 1840-luvulta. CASREACT sisältää reaktiotietoa miljoonista julkaistuista lehtiartikkeleista, patenteista, väitöskirjoista ja arvioiduista viitteistä.<sup>86</sup> Tietokantaa päivitetään viikoittain 150 000 yksi- ja monivaiheisella reaktiolla. Kuvassa 65 on mallitalenne CASREACT tietokannan kirjauksesta.<sup>88</sup>



Kuva 65. Mallitalenne CASREACT tietokannan kirjauksesta<sup>88</sup>

#### 4.3.4 CHEMCATS

CHEMCATS (Chemical Catalogs Online) on hakemistotietokanta, joka sisältää tietoa kaupallisesti saatavilla olevista kemikaaleista ja niiden toimittajista. Tietokannasta löytyy toimittajasta riippuen katalogin nimi, tilausnumero, kemikaali- ja kauppanimet, CAS rekisterinumero, kemiallinen rakenne, kemikaalien määrät ja hinnat, toimittajan yhteystiedot (yhtiön nimi ja osoite, puhelin- ja faksinumerot, sähköposti ja nettiosoite).<sup>86,89</sup>

CHEMCATS sisältää yli 71 milj. kaupallisesti saatavilla olevaa tuotetta, yli 1120 kemikaalikatalogia, yli 990 toimittajaa ja yli 21 milj. CAS rekisterinumeroa. Tietokanta kattaa hakemistoja ja kemikaalikirjastoja v. 2009 lähtien. Kuvassa 66 on mallitalenne CHEMCATS tietokannan kirjauksesta.<sup>89</sup>

Sample record from SciFinder®

Commercial Source Detail

Return Link Print Export  
Previous Next

**163. SIAL**

<p>Catalog Information</p> <p>Catalog Publication Date: 24 May 2012</p> <p>Order Number: 27225</p> <p>Purity: 99.8-100.5%</p> <p>Quantity: 10kg, Price: contact supplier</p> <p>Quantity: 30kg, Price: contact supplier</p> <p><a href="#">Pricing &amp; Availability</a> <span style="color: red;">NEW</span></p>	<p>Substance Information</p> <p>CAS Registry Number: 64-19-7</p> <p>CAS Index Name: Acetic acid</p> <p>Chemical Name: Acetic acid puriss., meets analytical specification of Ph. Eur., BP, USP, FCC, 99.8-100.5% Glacial acetic acid</p> <div style="text-align: center;"> <chem>CC(=O)O</chem> </div>
--	--

Catalog Suppliers

Below are the contributing supplier(s) to this catalog:

Supplier Name	Address	Contact Information	Status
Sigma-Aldrich	P O Box 14508 St. Louis, MO 63178 USA	Phone: 1-800-325-3010 Phone: 1-314-771-5765 Phone: 1-314-771-5750 (Call Collect) Fax: 1-800-325-5052 Fax: 1-314-771-5757 Web: <a href="http://www.sigma-aldrich.com">http://www.sigma-aldrich.com</a> Please see website for additional locations around the world.	Unclassified

Kuva 66. Mallitalenne CHEMCATS tietokannan kirjauksesta<sup>89</sup>

#### 4.3.5 CHEMLIST

CHEMLIST (Regulated Chemicals Listing) on elektroninen kokoelma, jossa on sääntelytietoa markkinoilla säännellyistä kemikaaleista.<sup>90</sup> CHEMLIST sisältää kemiallisten yhdisteiden kemialliset nimet, synonyymit, sääntelylistat ja kemikaalin inventaariostatuksen. Tietokannassa on yli 295 000 kemikaalia.<sup>86</sup>

CHEMLIST alkoi kansallisista kemikaali-inventaarioista, kuten Toxic Substances Control Act (TSCA), European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances (EINECS) ja Existing and New Chemical Substances (ENCS). Nykyään se sisältää kansainvälisiä listoja HPV kemikaaleista, ensisijaisia kemikaaleja, vaarallisia kemikaaleja (joilla on kuljetusrajoituksia) ja kaasupäästöinventaarioita. Tietokanta kattaa listoja ja inventaarioita 1980-luvulta lähtien. Sitä päivitetään yli 50 uudella kemikaalilla tai lisäyksellä viikoittain. Kuvassa 67 on mallitalenne CHEMLIST tietokannan kirjauksesta.<sup>90</sup>

Sample record from SciFinder

Regulatory Information Detail	
CAS Registry Number:1920-90-7	$  \begin{array}{c}  \text{n-Bu} \\    \\  \text{n-Bu} - \text{Pb} - \text{Bu-n} \\    \\  \text{n-Bu}  \end{array}  $
Plumbane, tetrabutyl- (TSCA, NDSL, ASIA-PAC) Tetrabutylplumbate (French) (NDSL, EINECS) tetrabutylplumbane (REACH, EINECS) Tetrabutylplumbat (German) (EINECS) tetrabutylplumbato (Spanish) (EINECS) Lead, tetrabutyl- NSC 179770 Tetrabutyllead	
File Segment	
ASIA-PACIFIC: ASIA-PAC CANADA: NDSL EEC: EINECS EU: REACH Restricted Chemical Lists: RSTR USA: TSCA	
Confidentiality Status	
Public	
Regulatory List Number	
EC No.: 217-649-2 EINECS No.: 217-649-2 SINGAPORE PCDTBL111	
Inventory Status	
On TSCA Inventory December 2011 TSCA Inventory On NDSL Canada Gazette, Part I, January 31, 1998 On REACH List of Pre-Registered Substances, March 2009 Registration Date: 30-NOV-2010. On EINECS Annex to Official Journal of the European Communities, 15 June 1990 On ASIA-PAC 2011	
Restricted Chemical List	
SINGAPORE: List of Controlled Hazardous Substances, 2011.	

Kuva 67. Mallitalenne CHEMLIST tietokannan kirjauksesta<sup>90</sup>

### 4.3.6 MARPAT

MARPAT sisältää yli 953 000 haettavaa Markush rakennetta ja yli 392 000 patenttikirjausta ja patenttiviitetietoa. Tietokanta sisältää orgaanisten tai organometallisten yhdisteiden Markush rakenteita.<sup>86</sup> Tietokanta ei sisällä esim. metalliseoksia, metallioksideoja, epäorgaanisia suoloja tai polymeerejä.<sup>91</sup> Tietokannan kattavuus alkaa v. 1961. Tietokanta sisältää Markush rakenne kirjauksia patenteista CPlus tietokannassa v. 1988 lähtien ja valikoidun kattavuuden englantilaisia, japanilaisia ja saksalaisia patenteja v. 1987 lähtien. Venäläisten patenttien kattavuus alkaa v. 2000 lähtien. Tietokanta sisältää INPI (Institute National de la Propriete Industrielle) tietoa v. 1961-1987.<sup>86</sup> Tietokantaa päivitetään n. 60-75 patenttiviittauksen ja 150-200 Markush rakenteen verran päivittäin.<sup>91</sup>

## 5 YHTEENVETO

Web of Knowledge, aiemmin ISI Web of Knowledge, on Thomson Reutersin ylläpitämä akateeminen viitehakemisto ja hakukone, jossa on web-linkitys. Se tarjoaa bibliografista sisältöä ja työkaluja tutkimustiedon hakuun, analysointiin ja käsittelyyn.<sup>92</sup> Arkistoja ja viitetietoa on yli 100 vuoden ajalta.<sup>19</sup> Tietoa voidaan hakea monista tietokannoista samanaikaisesti.<sup>92</sup> Web of Knowledgeen hyväksytyt tiedot käyvät läpi arviointi- ja valintaprosessin, jonka kriteerejä ovat merkittävyys ja painoarvo, oikea-aikaisuus, vertaisarviointi ja maantieteellinen edustus.<sup>92</sup> Thomson Reuters on tunnustettu yhtenä tärkeimmistä ja vaikutusvaltaisemmista julkaisuista ja organisaatioista maailmassa. Hakukone on saanut useita merkittäviä palkintoja eri tahoilla.<sup>93</sup>

CCDC, joka on voittoatavoittelematon yhtiö ja rekisteröity järjestö, kokoaa ja jakaa Cambridge Structural Databasea (CSD).<sup>45</sup> CSD on perustettu v. 1965.<sup>3</sup> CSD on kokeellisesti määritettyjen orgaanisten ja organometallisten kiderakenteiden arkisto.<sup>45</sup> CSDS (CSD System) sisältää yli 600 000 kiderakennetta. CSD systeemiin kuuluvia ohjelmistotyökaluja ja rakennetietokantoja ovat ConQuest, IsoStar, Mogul, WebCSD, CSD, Mercury ja PreQuest.<sup>47</sup> CCDC:n tarjoamia ilmaisia ohjelmistoja ovat CellCheckCSD, CSDSymmetry, Mercury, CSD Teaching Database, enCIFer ja Relibase.<sup>45</sup>

CCDC:n Gold Suite ohjelmistotyökalupakettiin kuuluu GOLD, Hermes ja Goldmine.<sup>45</sup>

Biotieteiden alalta CCDC tarjoaa ohjelmisto- ja tietokantatyökaluina Relibase+:n ja SuperStarin. Relibase+ on webpohjainen systeemi julkisen ja yksityisen proteiiniligandi rakennedatan turvalliseen varastointiin ja analyysiin. SuperStarin käytetään tietokantapohjaiseen molekyylien välisten vuorovaikutusten farmakoforiseen luomiseen ja ennustamiseen.<sup>94</sup>

CCDC:n DASH on monipuolinen ja interaktiivinen työkalu kiderakenteiden ratkaisuun pulveridiffraktiodatasta.<sup>95</sup>

Chemical Abstracts Service (CAS) on American Chemical Societyn jaosto, jonka tavoitteena ainoana maailmassa on löytää, koota ja järjestää kaikki ei-julkinen yhdistetieto. CASin tietokannat ovat kemiallisten ja farmaseuttisten yhtiöiden, yliopistojen, hallituksen organisaatioiden ja patenttitoimintojen ympäri maailmaa virallisesti tunnustamia. Tietokannat on yhdistetty edistyneisiin haku- ja



analyysiteknologioihin (Scifinder ja STN), joiden avulla CAS tarjoaa ajankohtaisen, turvatun ja yhteenkytetyin digitaalisen informaatioympäristön.<sup>96</sup> Scifinderilla voidaan etsiä yhdisteitä, reaktioita ja patenti- ja lehtiviitteitä. Se tarjoaa työkaluja hakuun, suodattamiseen, analysointiin ja suunnitteluun.<sup>97</sup>

## KOKEELLINEN OSA

### **6 JOHDANTO**

Orgaanisen kemian erikoistyössä tehtiin kiderakennetietokanta orgaanisen kemian osastolla syntetisoiduista yhdisteistä. Tietokanta käsitti 626 rakennetta, joista orgaanisia oli 297, metallikomplekseja 250 ja muita rakenteita 79 kpl. Orgaaniset oli jaoteltu resorsinareeneihin (101 kpl), CHNO (88 kpl), CHOX (88 kpl) ja muihin orgaanisiin yhdisteisiin (20 kpl). Kiderakennetietokannan tekeminen aloitettiin jo orgaanisen kemian syventävät työt III Projektityössä (6 op) keväällä 2011, joka osuus liitettiin erikoistyöhön. Erikoistyö tehtiin syksyllä 2011 - talvella 2012. Työ tehtiin kotitietokoneella.

Työssä tarvittiin Mercury ohjelmaa, joka on molekyyliarakenteiden visualisointiohjelma sekä Conquest ohjelmaa, jotka ovat osa CSD eli Cambridge Structural Database tietokantaa, johon JY:n kemian laitoksella on rajoittamaton käyttöoikeus. Molekyylien kiderakennekuvat avattiin Mercury 2.4 ohjelmalla ja kuvat editoitiin, eli niistä poistettiin ylimääräiset liuotinmolekyylit. Lisäksi työssä tarvittiin MS Wordiä ja joitain ilmaisohjelmia.

Yhdisteiden kide- ja molekyyliarakenteet oli ratkaistu röntgendiffraktion avulla. Röntgendiffraktiomenetelmät ovat tärkeitä erityisesti orgaanisten rakenteiden ratkaisussa. Max von Laue työvereineen löysi kiteisen aineen röntgensäteilyssä aiheuttaman diffraktioilmion v. 1912. Röntgensäteilyn aallonpituus on samaa suuruusluokkaa kuin atomitasojen väliset etäisyydet kiteessä.<sup>98</sup> Muodostuvien atomitasojen välimatka on vakio koko kiteen läpi.<sup>99</sup> W.L.Bragg suoritti ensimmäiset kiderakennemääritykset v. 1913 ja selvitti mm. ruokasuolan rakenteen. Ensimmäistä kertaa voitiin luoda mielikuva kiinteän olomuodon atomirakenteesta. Automaattisten diffraktiomenetelmien nopea yleistyminen ja tietokoneohjelmien kehittyminen on tehnyt röntgendiffraktiosta tärkeän osan orgaanista rakenneanalyysiä.<sup>98</sup>

Valmis kiderakennetietokanta aukeaa sivulle, jossa on Orgaaniset rakenteet, Metallikompleksit ja Muut rakenteet -linkit. Orgaaniset rakenteet –linkistä aukeaa sivu, jossa on Resorsinareenit, CHOX, CHNO ja Muita orgaanisia –linkit. Linkkejä klikkaamalla aukeaa selaimen tietokanta, jossa on molekyylien jpg –rakennekuvat ja Author/Journal –tiedot. Kuvat on hyperlinkitetty viittaamaan vastaavan rakenteen html-

tiedostoon. Kun 2-D rakennekuva klikkaa, aukeaa selaimen 3-D jmol appletti, eli pyörivä kiderakennekuva.

## 7 OHJELMAT

### 7.1 Jmol

Jmol, eli Java viewer on ilmainen ja avoin netistä ladattava katseluohjelma 3D kemiallisille molekyyliarakenteille. JmolApplet on selainappletti eli Java-sovelma, joka voidaan integroida internetsivuihin. Se on ihanteellinen kehitettäessä kemiallisia tietokantoja, joissa halutaan pääsy nettiin. Jmol on käännetty monille kielille, ja se valitsee automaattisesti käyttäjän käyttöjärjestelmän kielen. Sitä voidaan käyttää Windows, Mac OS X ja Linux/Unix käyttöjärjestelmissä. Se tukee kaikkia tärkeimpiä verkkoselaimia: Internet Explorer, Mozilla Firefox, Safari, Google Chrome, Opera, Konqueror, Iceweasel...<sup>100</sup>

Java on Sun Microsystemsin kehittämä laaja teknologiaperhe ja ohjelmistoalusta. Siihen kuuluu mm. laitteistoriippumaton oliopohjainen ohjelmointikieli. Sun on ilmoittanut Javan julkaisusta vapaana ohjelmistona GNU GPL –lisenssillä. Java-alusta on käytössä n. 3,8 mrd laitteessa matkapuhelimista supertietokoneisiin. Java ohjelmointikielen kehittivät Bill Joy ja James Gosling kollegoineen 1990-luvun alussa Sun Microsystemsillä. Syksyllä 1995 ilmestyi JDK 1.0 (Java Development kit), joka soveltui www-sivulle luotavien applettien tekemiseen. Tämä nosti nopeasti Javan ohjelmointimaailman kuumaksi puheenaiheeksi. Syitä Java-kielen 1990-luvun lopulla saavuttamaan suosioon olivat paitsi laitteistoriippumattomuus, myös läheisesti C++-kieltä muistuttava, mutta helpommin omaksuttava kielioppi, oliopohjaisuus ja virtuaalikoneen mukana tuleva, erittäin kattava standardikirjasto. Muihin ohjelmointikieliin verrattuna (C+, C++), Java sisältää ominaisuuksia, kuten graafisen käyttöliittymäkirjaston, rinnakkaisuuden hallinnan, verkko-ominaisuudet ja rikkaat rajapinnat, jotka toisissa kielissä ovat käyttöjärjestelmäriippuvaisia, tai kolmansien osapuolten kirjastojen varassa. Javan lähdekoodia ei käännetä suoraan konekielille, vaan tavukoodiksi, joka suoritetaan virtuaalikoneessa. Koska Java-ohjelmat ajetaan virtuaalikoneessa, ne eivät normaalisti pysty vaikuttamaan suoraan muihin prosesseihin.

Javan ensimmäinen kohdeympäristö oli web-selaimet, jossa Java-sovelmia eli appletteja voitiin ajaa turvallisesti. Appletit olivat osa jo ensimmäistä Java-julkaisua v. 1995. Applettien suosio on jäänyt vähäiseksi.

Vaikka alunperin Java markkinoitiin web-käyttöön ja selaimen sisällä ajettavia sovelmia varten, on se kuitenkin osoittautunut tärkeämmäksi palvelinkäytössä, dynaamisia www-sivuja luotaessa (JSF, JSP, servlet), raskaissa palvelinsovelluksissa (Java EE) ja kännyköissä ja taskutietokoneissa (Java ME). Se on myös suosittu opetuskieli yleisyytensä ja ilmaisuutensa vuoksi.<sup>101</sup>

## 7.2 CCDC

The Cambridge Structural Database System (CSDS) on yksi tuote, johon kuuluu CSD eli The Cambridge Structural Database, CSDS ohjelmisto: ConQuest, Mercury, VISTA ja PreQuest sekä CSD:stä johdetut tietokannat Mogul ja Isostar. Lisäksi siihen kuuluu biotieteisiin liittyviä ohjelmia ja pulveridiffraktiotuote DASH (rakenteiden ratkaisu pulveridiffraktiodatasta).

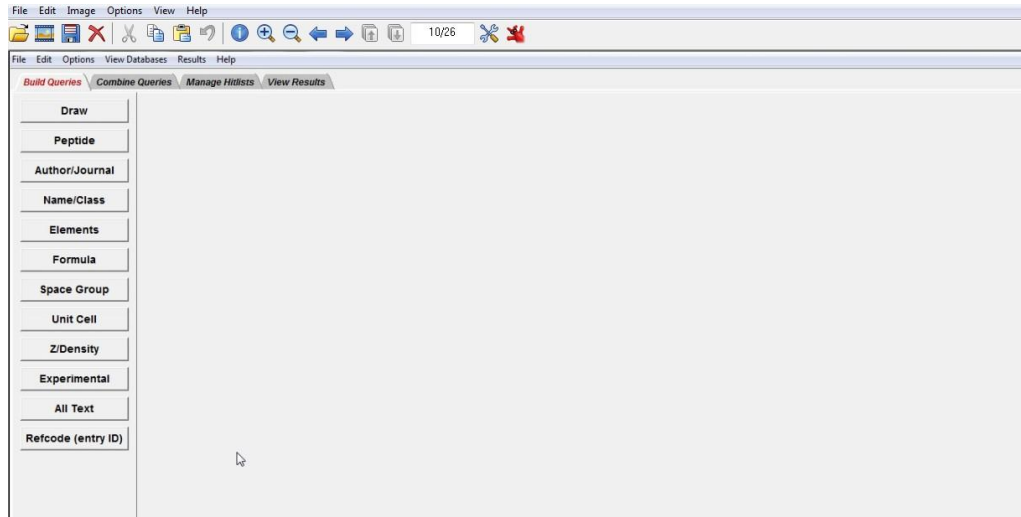
CSD on CCDC:n päätuote. Se on tärkeä tietopankki pienten molekyylien kiderakenteista. CSD:hen on tallennettu bibliografista, kemiallista ja kristallografista tietoa orgaanisista ja organometalliyhdisteistä. Niiden 3D rakenteet on määritetty röntgendiffraktion ja neutronidiffraktion avulla. CSD rekisteröi tuloksia yksikide- ja pulveridiffraktiomittauksista, joissa on 3D atomikoordinaatit ainakin kaikista ei-vetyatomeista.<sup>102</sup>

Käytin erikoistyössä kahta CSD:n ohjelmaa: Conquestia ja Mercuryä. Conquest on yhdisteiden hakuohjelma ja Mercury rakenteiden visualisointiohjelma.

### 7.2.1 Conquest

Conquest on pääasiallinen hakuohjelma tiedon etsimiseen CSD:stä. Kun halutaan etsiä jonkun henkilön nimellä yhdisteitä, klikataan aukeavasta valikosta Author/Journal. Authors' Names kohtaan syötetään artikkelin kirjoittajan nimi, painetaan Search ja aloitetaan haku (Start Search). Kun haku on suoritettu, näkyviin tulee sivu, jossa hakutulokset ovat sivun oikeassa reunassa. Klikkaamalla yhdisteen nimeä, voidaan siitä

hakea esimerkiksi julkaisutiedot klikkaamalla Author/Journal palkkia ja rakennekuva klikkaamalla Diagram palkkia (valikko sivun vasemmassa laidassa). Ks. kuvat 68-71.



Kuva 68. Conquestin aloitusvalikko

**Authors' Names** New Box

Rissanen  Exact surname  
(Required format: F.H.Allen, O'Hara, Murray-Rust etc.  
 Brown will hit Browning unless 'Exact surname' is selected)

**Journal Name**

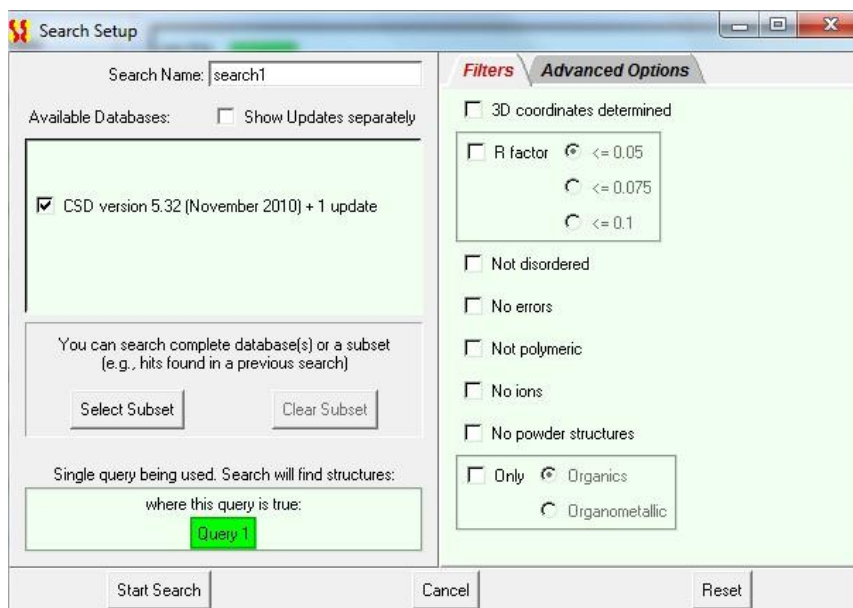
Type part of Journal name above to narrow list displayed  
 Select required journal in list below

- A.C.A.(Spring) [1974-1975]
- A.C.S.Mtg.172,Inorg. [1976]
- AAPS PharmSciTech [2004-2005]
- ACA Abstr.Papers(Winter) [1967-1986]
- ACA,Ser.2 [1977-1984]
- ACGC Chem.Res.Comm. [2005]
- ACGC Chem.Res.Comm. [2001]
- ACH-Models Chem. [1994-2000]
- ACS Applied Materials and Interfaces [2009]
- ACS Nano [2008]

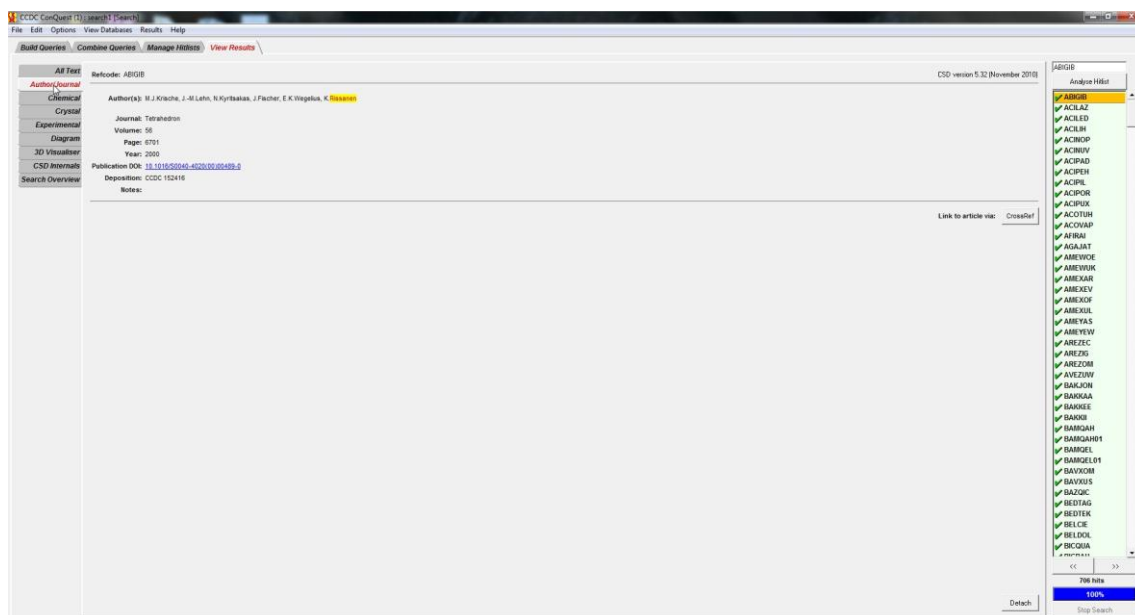
**Volume (14, 1.2 etc.)**  **Page (212,6-A etc.)**  **Year (1998, 2001 etc.)** during

**CCDC Number**  (Enter numeric part only, e.g. 123456 or 123/456)

Kuva 69. Haku Conquestista Author/Journal hakutoiminnolla



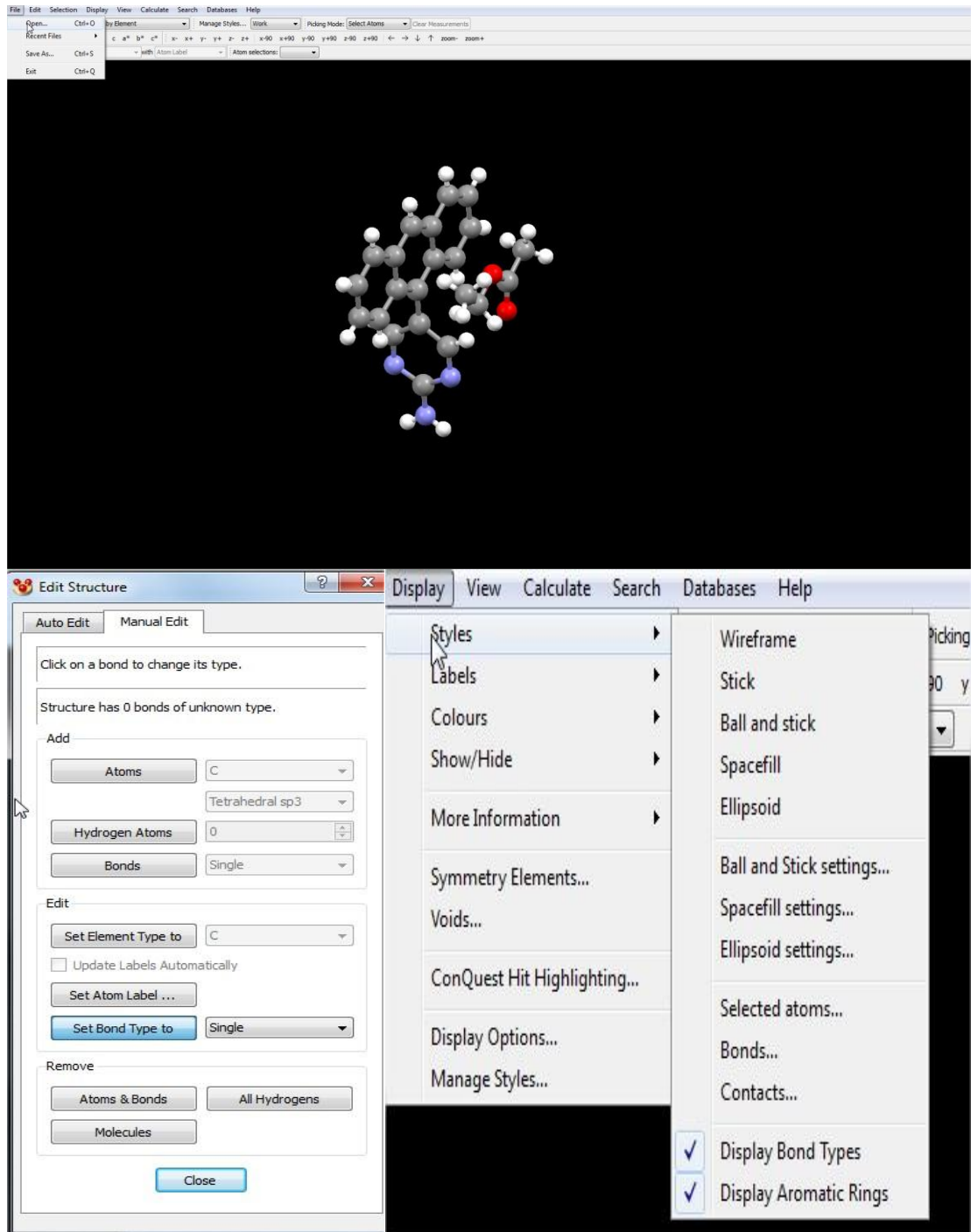
Kuva 70. Haun aloitus



Kuva 71. Hakutulokset ovat sivun oikeassa reunassa

## 7.2.2 Mercury

Perusversio Mercurystä on vapaasti ladattavissa. Sillä kiderakenteen visualisointi, tutkiminen ja analysointi on helppoa. Molekyylien kiderakennekuvia editoitiin poistamalla ylimääräisiä atomeja ja molekyyliä (Edit>Edit structure>Remove>Atoms & Bonds/Molecules). Ks. kuva 72.



Kuva 72. Mercuryn näkymä, jossa on 3D molekyyli ja avautuvia valikkoja

### **7.3 Irfanview**

Irfanview on nopea ja pienikokoinen, maksuton kuvankatseluohjelma. Vaikka se on tarkoitettu ensisijaisesti kuvien näyttöohjelmaksi, löytyy siitä myös useita kuvanmuokkaukseen tarvittavia ominaisuuksia.<sup>103</sup>

### **7.4 Coffee Cup HTML –editori**

CoffeeCup Free HTML editor on ilmainen HTML-editori, joka toimii Windows käyttöjärjestelmässä. HTML on avoimesti standardoitu kuvauskieli, erityisesti kieli, jolla nettisivut on koodattu. Html-tiedostoja tarvitaan, jotta voidaan esittää sivuja internetissä.<sup>104</sup>

### **7.5 PrtScr**

Tietokoneen näppäimistön oikeassa yläkulmassa olevaa Prt Scr (PRINT SCREEN) –näppäintä painamalla voi ottaa kuvan tietokoneen näytöstä ja kopioida sen tietokoneen muistiin.

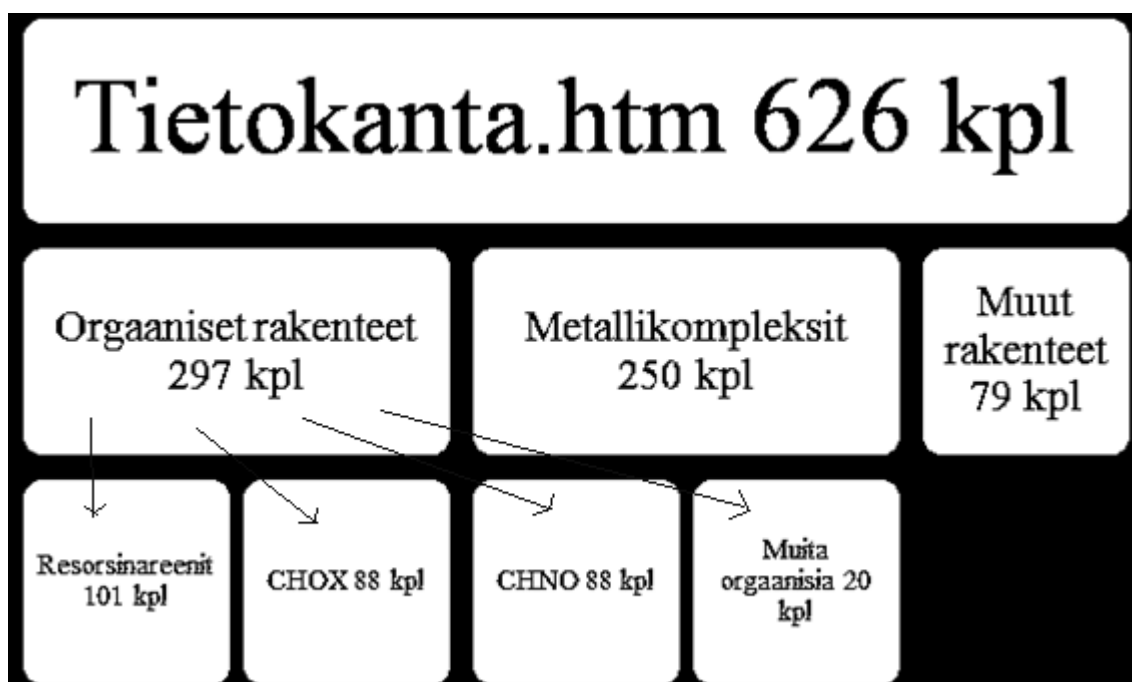
### **7.6 Word**

Wordia tarvittiin tietokannan tekemisessä. Käytin Microsoft Word 2010 tekstinkäsittelyohjelmaa. Molekyylilien piirroskuvat syötettiin Wordillä avattuihin htm.tietokantoihin ja hyperlinkitettiin vastaaviin html-tiedostoihin.

## **8 TIETOKANNAN RAKENNE**

Tietokanta käsitti 626 rakennetta, joista orgaanisia rakenteita oli 297, metallikomplekseja 250 ja muita rakenteita 79 kpl. Ks. kuva 73.





Kuva 73. Tietokannan rakenne

Jokaisesta molekyylistä tarvittiin jpg-, ent- ja html-tiedostot. Ent-tiedostot ovat PDB-formaatin mukaisia atomikoordinaattitiedostoja. Molekyylien IrfanView JPG File ja ent-tiedostot ovat kopioituina Resorsinareenit, CHOX, CHNO, Muuta orgaanisia, Met komp. ja muut tiedostokansioihin. Html-tiedostot ovat kopioituina Jmol kansioon. Jmol kansiossa on html kansio, jonka sisällä on htm kansiot jokaisesta molekyyliyryhmästä. Kunkin htm kansion sisälle on kopioitu molekyylien 2D rakennekaavakuvat. Molekyyli-rakennekuvat on hyperlinkitetty viittaamaan vastaavan rakenteen html-tiedostoon. Klikkaamalla 2D rakennekuvaa, aukeaa 3D jmol appletti selaimen. Mercurysta kopioidut ja ent-tiedostoina tallennetut molekyylien 3D rakennekuvat voidaan jmol-appletin avulla aukaista selaimen, jolloin näkyviin tulee pyörivä rakennemalli.

## 9 TIETOKANNAN SISÄLTÖ

### 9.1 Tietokanta

Tietokanta koostuu kemian laitoksen orgaanisen kemian osastolla valmistetuista yhdisteistä, joista julkaistuista artikkeleista yhtenä tekijänä on ollut Kari Rissanen. Yhteistä niille on, että ne ovat orgaanisia, eli sisältävät C-H sidoksen.

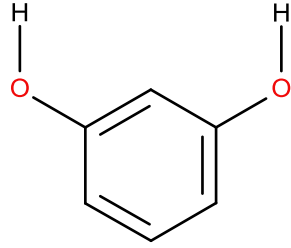
#### 9.1.1 Orgaaniset rakenteet

Orgaaniset rakenteet linkin alle on jaoteltu rakenteet, jotka voidaan jakaa resorsinareeneihin, CHOX, CHNO tai muihin orgaanisiin yhdisteisiin.

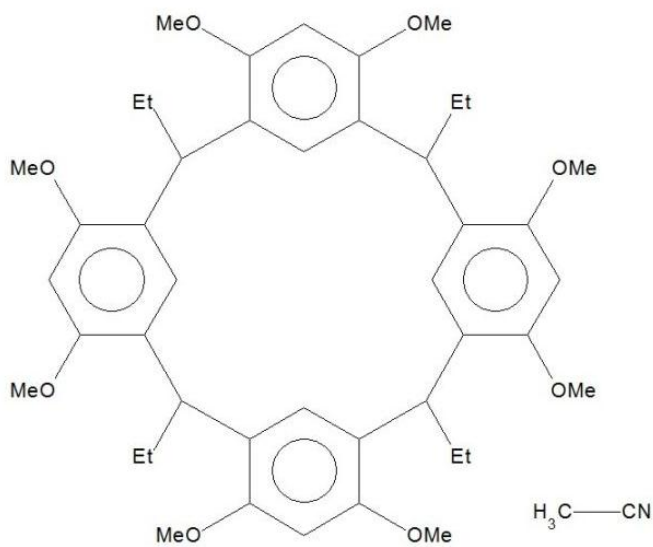
##### 9.1.1.1 Resorsinareenit

Syklofaaneihin kuuluu kaikki molekyylit, jotka sisältävät silloitetun aromaattisen renkaan.<sup>105</sup> Kaliksareenit ovat makrosyklejä, jotka syntyvät fenolin ja aldehydin hydroksialkylation tuotteena.<sup>106</sup> Resorsinareenit ovat tietynlaisia kaliksareeneja.<sup>107</sup> Ne ovat tärkeitä supramolekyylidemian isäntämolekyylejä. Ne sitoutuvat hyvin eri vierasmolekyyleihin ja -ioneihin aromaattisen kuppimaisen onkalonsa ja hydroksyyliyhdyntien ansiosta.<sup>108</sup> Resorsinareeneja syntetisoidaan tyypillisesti, kun resorsinoli reagoi happokatalysoidulla kondensaatioreaktiolla aldehydien kanssa. Uudelleenkiertyys yleensä tuottaa halutun isomeerin varsin puhtaassa muodossa.<sup>107</sup>

Resorsinareenin rakenne voidaan jakaa ylä- ja alakehään. Yläkehä koostuu makrosyklisasta ja sen resorsinolirenkaiseen liittyneistä substituenteista. Alakehän muodostaa puolestaan metiinisoltoihin liittyneet hiiliketjusubstituentit. Ks. kuvat 74-75.



Kuva 74. Resorsinoli

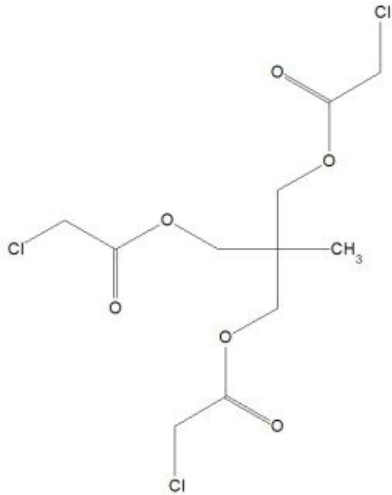


Kuva 75. Resorsinareeni

Resorsinareenien perusrakennetta voidaan muokata siten, että yläkehän resorsinolirenkaiden hydroksyyliiryhmät korvataan muilla funktionaalisilla ryhmillä. Renkaan hydroksyyliiryhmien väliseen hiileen, eli ns. 2-paikkaan liitetään funktionaalinen hiili. Myös isännän alakehälle saadaan uusia funktionaalisia ominaisuuksia metiinisiltojen substituentteja muokkaamalla.<sup>108</sup>

### 9.1.1.2 CHOX

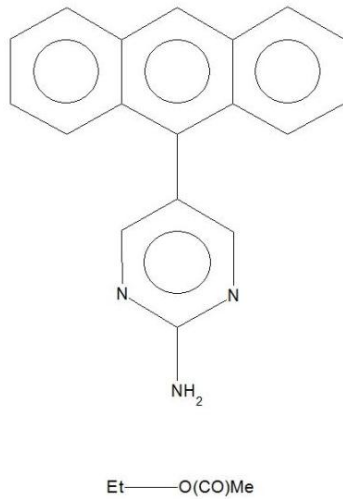
CHOX rakenteet sisältävät hiiltä, vetyä ja happea (sekä halogeenia, rikkiä, fosforia tai booria). Ks. kuva 76.



Kuva 76. CHOX

### 9.1.1.3 CHNO

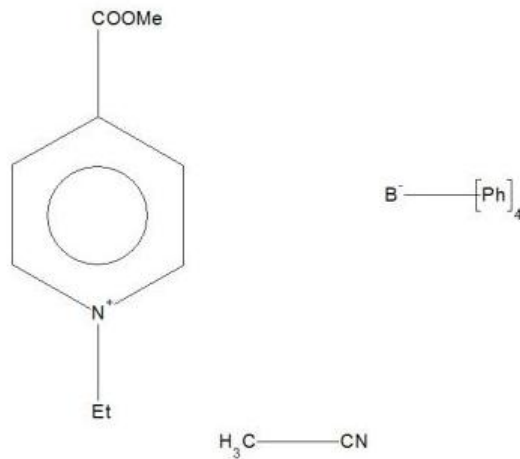
CHNO rakenteet sisältävät hiiltä, vetyä, typpeä ja happea. Ks. kuva 77.



Kuva 77. CHNO

### 9.1.1.4 Muita orgaanisia

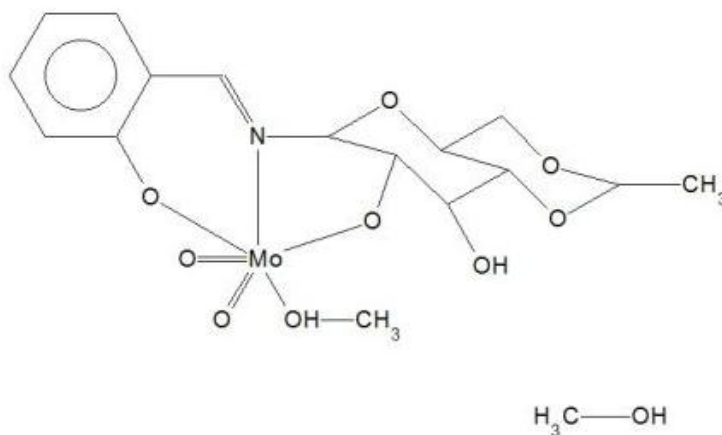
Muita orgaanisia -rakenteisiin kuuluu esimerkiksi sellaisia, jotka sisältävät hiiltä ja vetyä tai hiiltä, typpeä ja vetyä, sekä sellaisia, jotka sisältävät lisäksi happea, halogeenia, booria tai rikkiä. Ks. kuva 78.



Kuva 78. Muita orgaanisia

### 9.1.2 Metallikompleksit

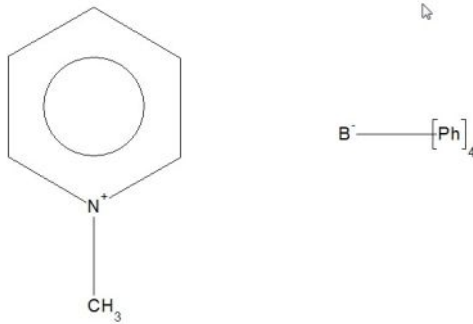
Metallikompleksit kansioon kuuluu sellaisia orgaanisia rakenteita, jotka sisältävät metalliatomin, joko keskusatomina tai muuten. Kun molekyylissä on yksi tai useampi metalliatomi keskusatomina, koordinoituvat sen ympärille ligandit. Ks. kuva 79.



Kuva 79. Metallikompleksit

### 9.1.3 Muut rakenteet

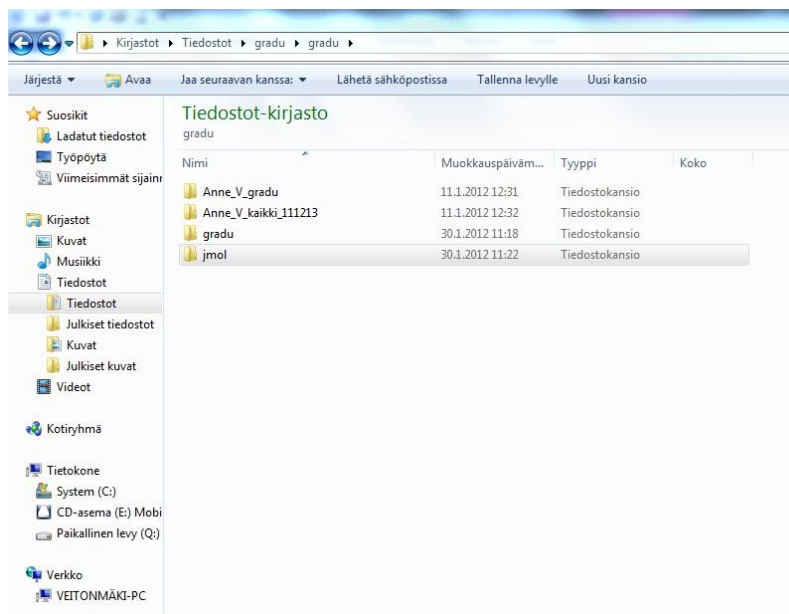
Muut rakenteet kansioon kuuluu muita orgaanisia rakenteita, jotka sisältävät esimerkiksi hiiltä, vetyä, happea, typpeä, halogeenia, booria, rikkiä tai piitä. Ks. kuva 80.



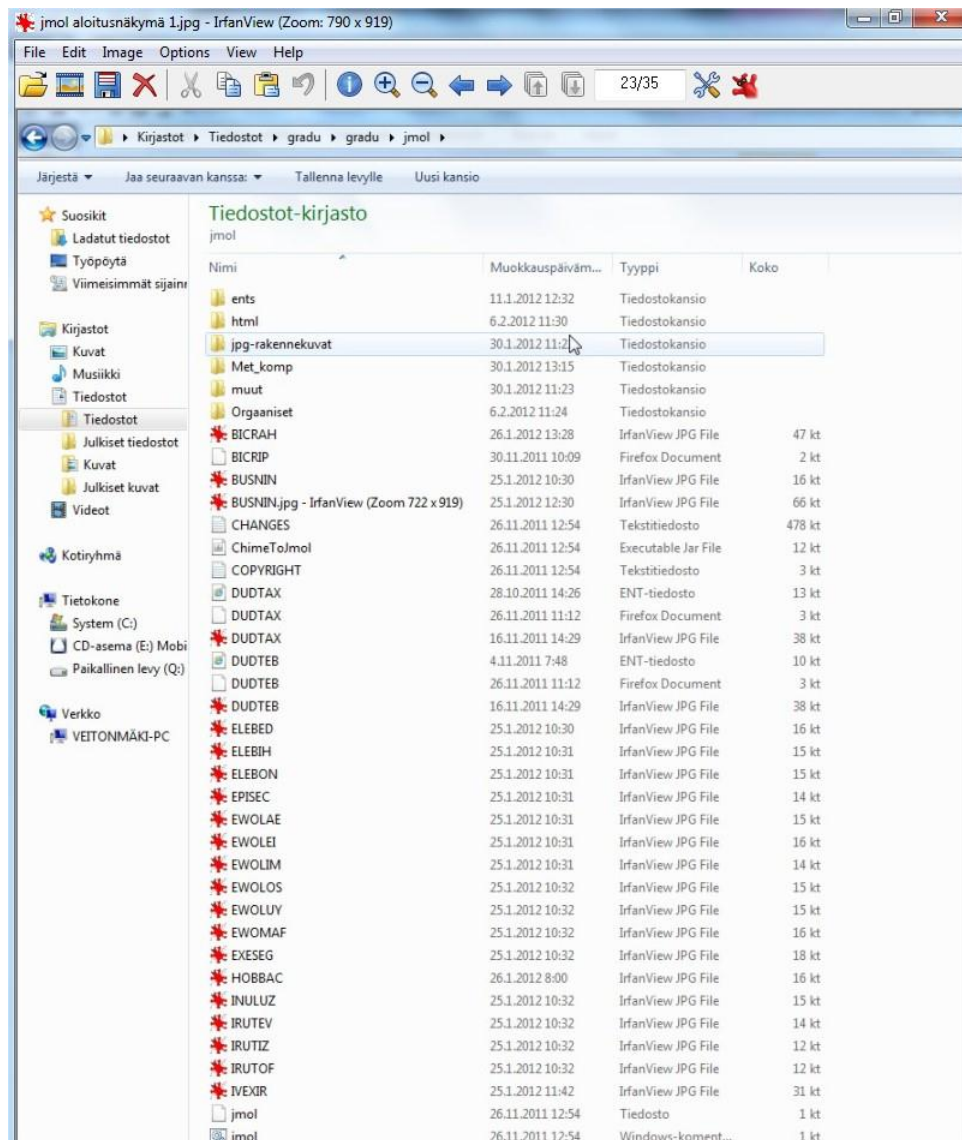
Kuva 80. Muut rakenteet

## 10 TIETOKANNAN KÄYTTÖ

Gradu kansion sisällä on jmol kansio. Tietokanta aukaistaan gradu>jmol linkistä. Ks. kuva 81.

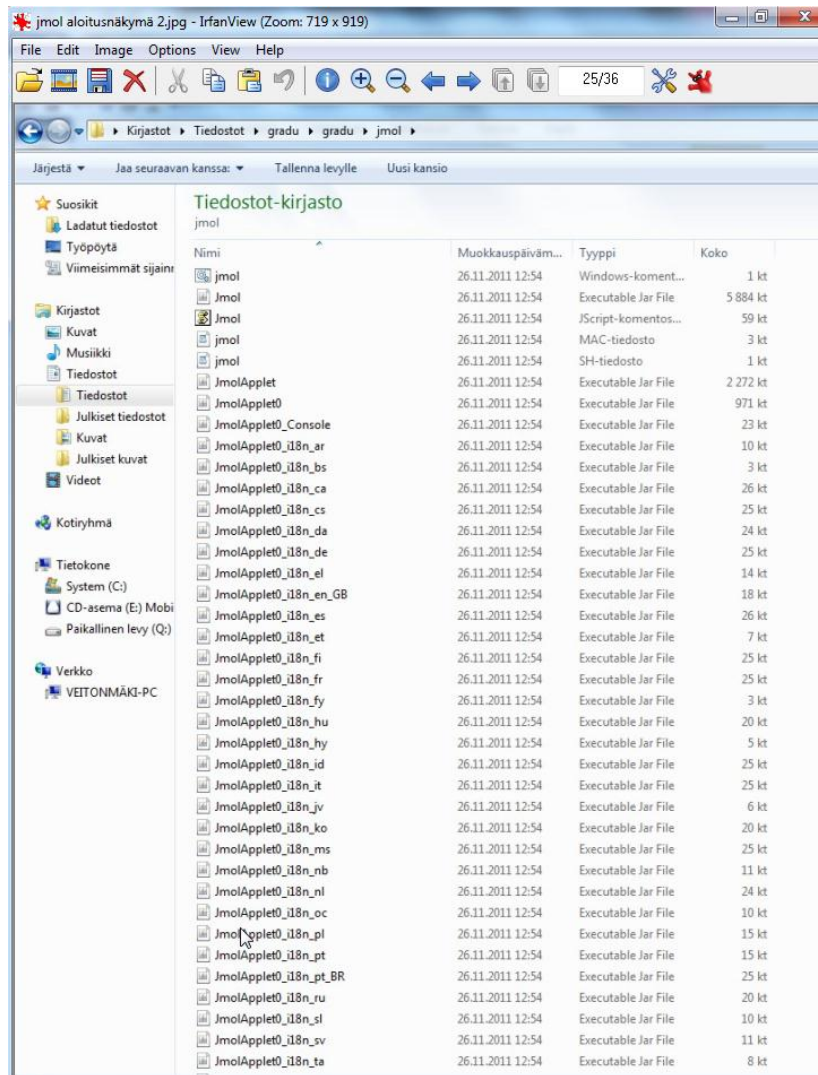


Kuva 81. Tietokanta aukaistaan gradu>jmol linkistä



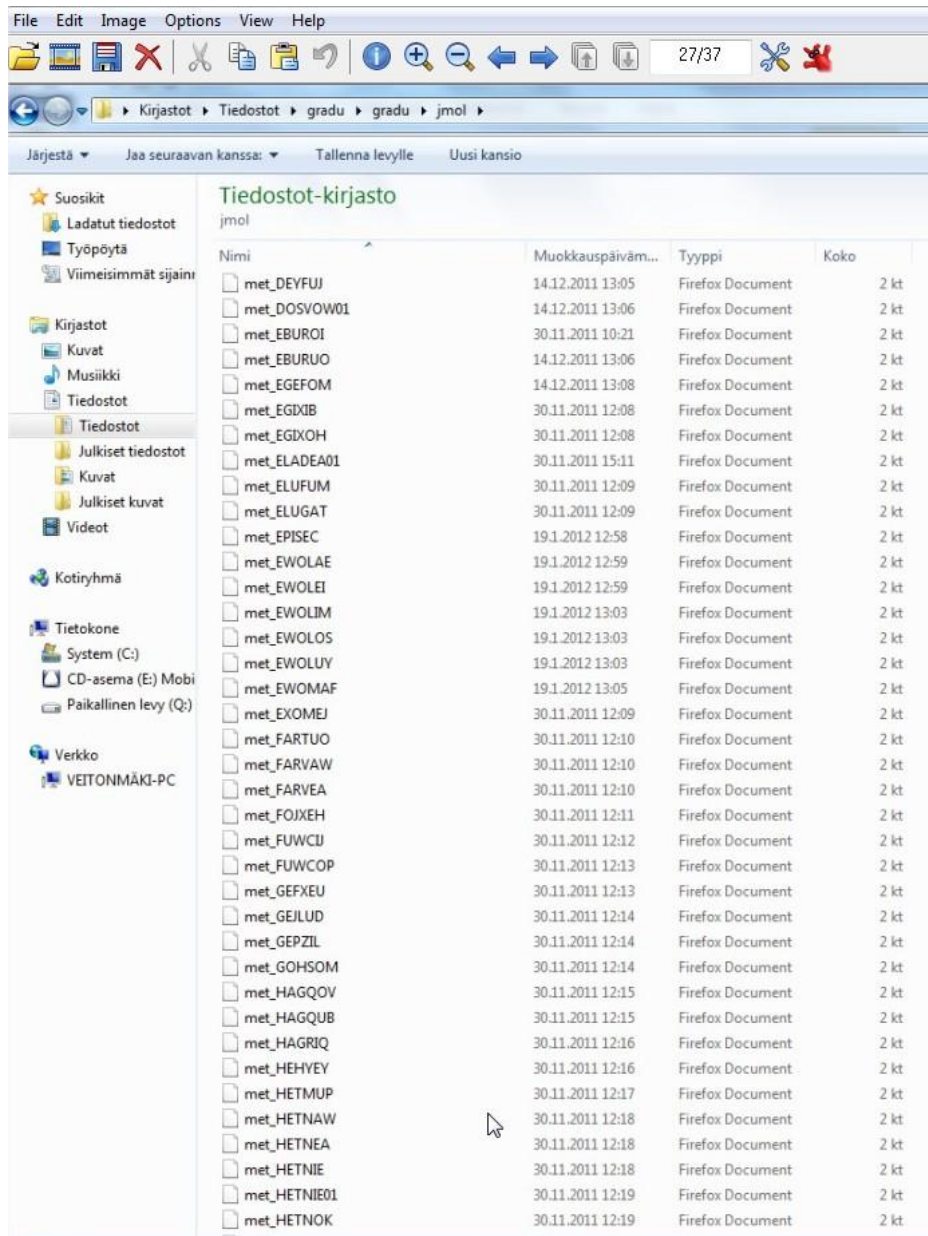
Kuva 82. Jmol kansio

Jmol kansion sisällä on html, jpg-rakennekuvat, Met\_komp, muut ja Organiset kansiot. Siellä on myös JmolApplet kansiot ja html-tiedostot yhdisteistä. Html kansion sisällä on kiderakennetietokanta. Met\_komp, muut ja Organiset kansioiden sisällä ovat ent- ja jpg -tiedostot yhdisteistä. JmolAppletteja tarvitaan, jotta Java vieweria, eli molekyyliarakenteiden katseluohjelmaa voitaisiin käyttää. Ks. kuvat 82-84.



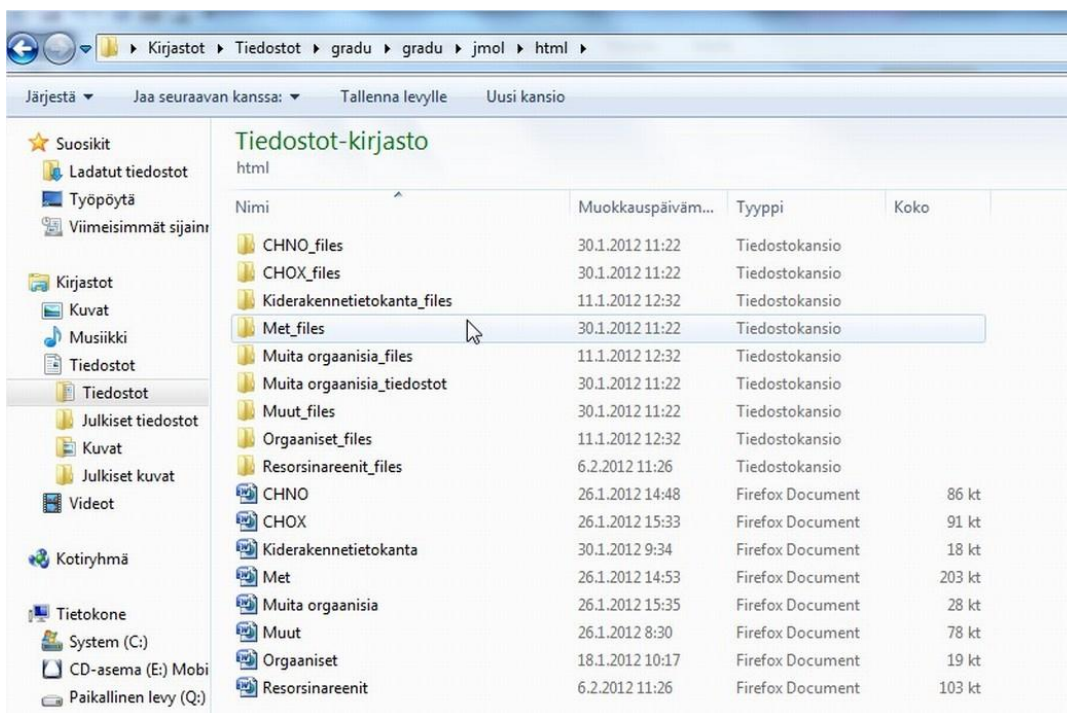
Kuva 83. Jmol kansio näkymä jatkuu





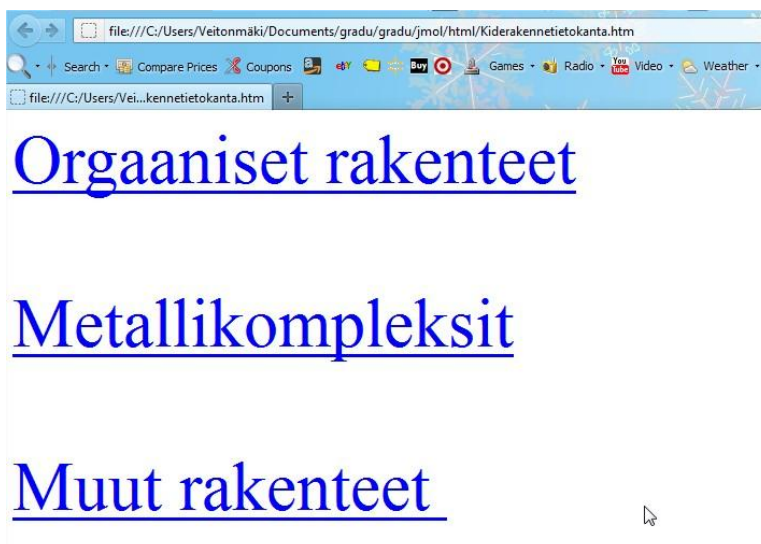
Kuva 84. Jmol kansio näkymä jatkuu edelleen

Kun klikataan Jmol kansion sisällä olevasta html linkistä, tulee näkyviin kiderakennetietokantaan liittyviä kansioita. Alkupään kansioissa on Irfanview JPG tiedostoja. Firefox tiedostokansiot ovat kiderakennetietokantaan kuuluvia tietokantoja. Ks. kuva 85.



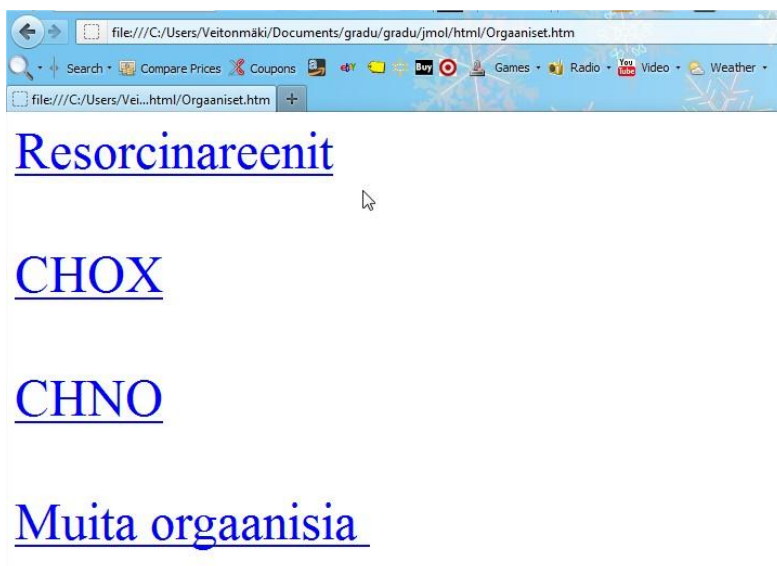
Kuva 85. Html kansio

Kiderakennetietokanta aukeaa sivulle, jossa on kolme linkkiä: Orgaaniset rakenteet, Metallikompleksit ja Muut rakenteet. Metallikompleksit ja Muut rakenteet linkeistä aukeaa suoraan tietokannat kyseisistä yhdisteistä. Ks. kuva 86.



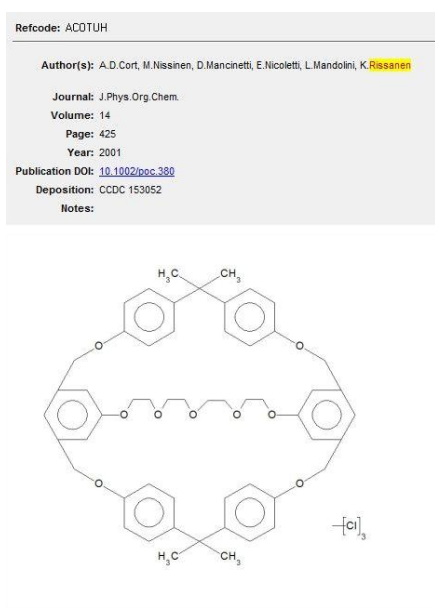
Kuva 86. Tietokannan aloitusnäky

Orgaaniset rakenteet linkin alta aukeaa sivu, jossa on neljä linkkiä: Resorcinareenit, CHOX, CHNO ja Muita orgaanisia. Linkeistä aukeaa tietokannat kyseisistä yhdisteistä. Ks. kuva 87.

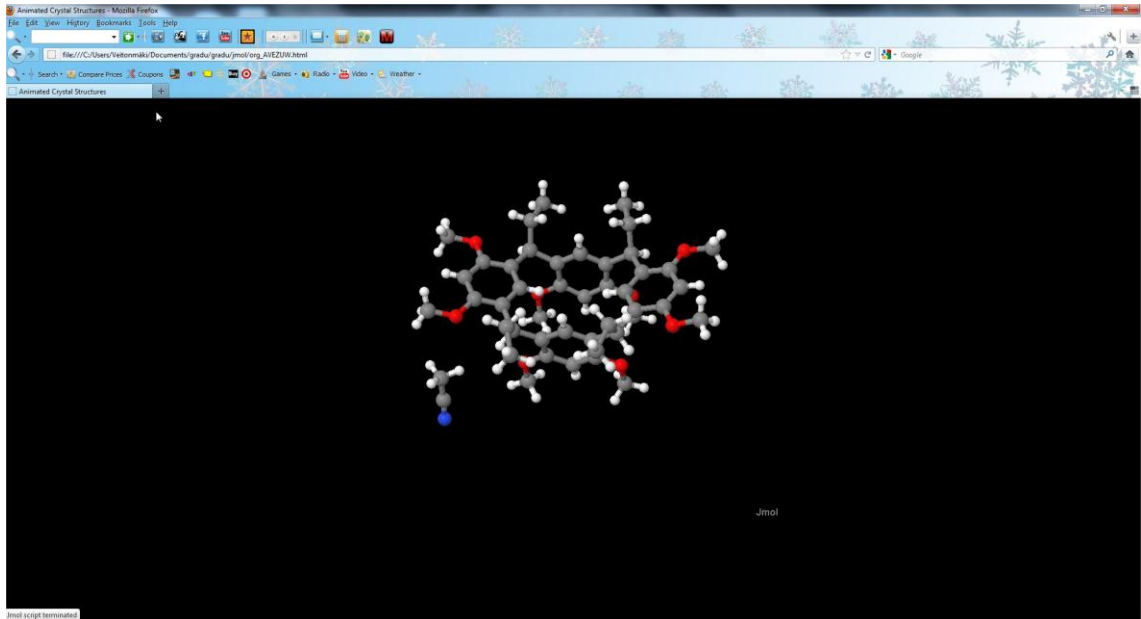


Kuva 87. Orgaaniset.htm aloitusvalikko

Tietokannoissa on jpg-rakennekuvat yhdisteistä, joita klikkaamalla aukeaa selaimeen pyörivä 3D rakennemalli. Ks. kuvat 88-89.



Kuva 88. Rakennepiirroskuva yhdisteestä



Kuva 89. Selaimen aukeava 3D rakennemalli

Kun painaa hiiren oikeasta näppäimestä, aukeaa valikko, jossa useita toimintoja. Ks. kuva 90.



Kuva 90. Hiiren oikeasta näppäimestä aukeavia toimintoja 3D malliin

## 11 TYÖN SUORITUS

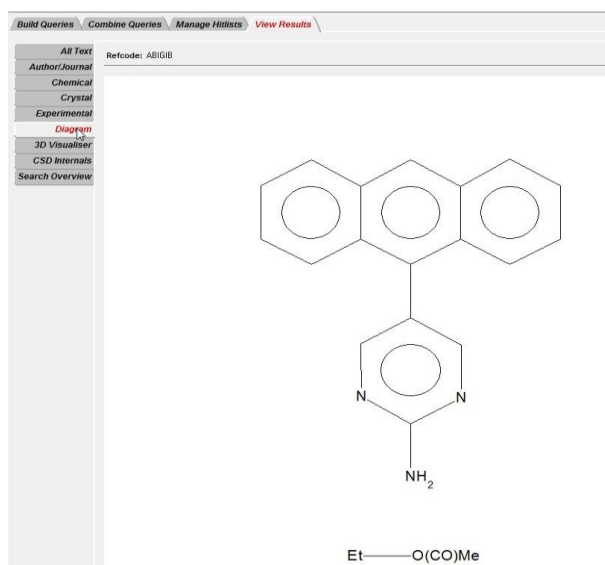
Molekyylien kiderakennekuvat avattiin CSD:n Mercury 2.4 ohjelmalla ja kuvat editoitiin, eli niistä poistettiin ylimääräiset liuotinmolekyylit. Kuvat tallennettiin ent-tiedostoina (PDB-formaatissa). CSD:n Conquest 1.13 ohjelmaa käytettiin rakenteiden etsimiseen. Haettiin rakenteita, joista kirjoitettujen artikkelien kirjoittajana oli ollut Kari Rissanen. Author/Journal syötettiin Kari Rissanen.

Haetuista yhdisteistä kaapattiin PrtScr -toiminnolla Author/Journal tiedot (kuva 91) ja Diagram tiedot (rakennekaavakuva) (kuva 92) ja tallennettiin jpg-tiedostona. Irfanview ohjelman Create Panorama picture toiminnolla kuvat yhdistettiin ja tallennettiin jpg-tiedostona (kuva 93).

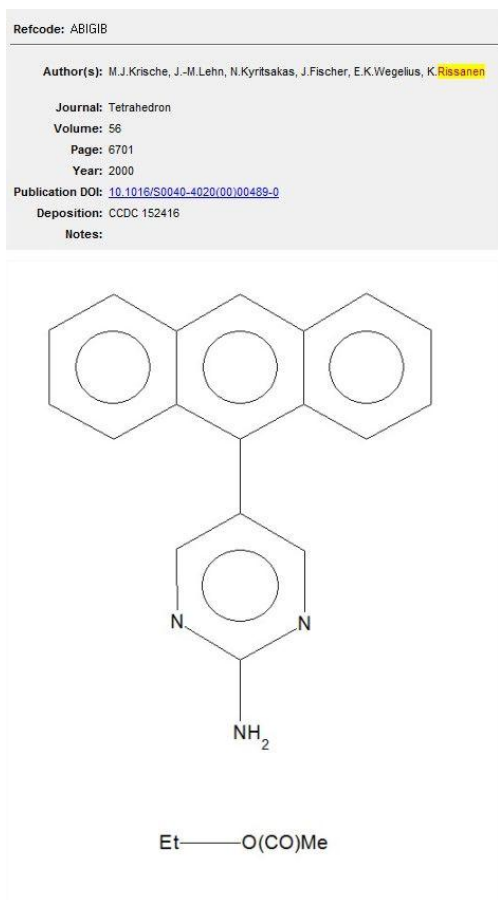
The screenshot shows the CSD database search results for refcode ABIGIB. The 'Author/Journal' tab is selected in the left sidebar. The main content area displays the following information:

Refcode: ABIGIB
Author(s): M. J. Krische, J. -M. Lehn, N. Kyriatsakos, J. Fischer, E. K. Wegelius, K. Rissanen
Journal: Tetrahedron
Volume: 56
Page: 6701
Year: 2000
Publication DOI: <a href="https://doi.org/10.1016/S0040-4020(00)00489-0">10.1016/S0040-4020(00)00489-0</a>
Deposition: CCDC 152416
Notes:

Kuva 91. Author/Journal tiedot haetusta yhdisteestä



Kuva 92. Diagram tiedot haetusta yhdisteestä



Kuva 93. Yhdistetyt Author/Journal ja Diagram tiedot = tallennettu jpg-rakennekaavakuva

CoffeeCup Free HTML editorilla tehtiin molekyyleistä html-tiedostot valmiin pohjan avulla (kuva 94). Kohtaan jmolApplet ( [ 700,700] ) täydennettiin ”load kansio/nimi.ent”. Tällöin html-tiedosto linkittyy kyseisen rakenteen ent-tiedostoon. Html-tiedostot tallennettiin jmol-kansioon.

```
<!DOCTYPE HTML PUBLIC "-//W3C//DTD HTML 4.01 Transitional//EN"
    "http://www.w3.org/TR/html4/transitional.dtd">

<html>

<head>
  <title>Animated Crystal Structures</title>
  <meta name="author" content="Unknown">
  <meta name="generator" content="Bluefish 1.0.7">
  <meta http-equiv="content-type" content="text/html; charset=iso-8859-1">
```

```

        <style type="text/css">
            <!--
            td { font-family: Verdana; color: #dfdfdf; }
            a {font-family: arial; font-size:10pt; color: #999999;
text-decoration: none;}
            input.btn {width:12px; height:12px;}
            .Stil1 {color: #FFFFFF}
            .Stil2 {font-family: Verdana, Arial, Helvetica, sans-
serif;}
            .Stil4 {font-size: 12pt; font-family: Verdana, Arial,
Helvetica, sans-serif; color: #FFFF00;}
            .Stil5 {font-style: italic}
            -->
        </style>

        <script src=" ../jmol/Jmol.js"></script>
</head>

<body bgcolor="#000000" marginwidth="0" leftmargin="0">

        <div align="center">
            </div>

        <div align="center">
            <!--Script for a single triangle/-->
            <script>
                jmolInitialize(" ../jmol");
                jmolSetAppletColor("#000000");
                jmolApplet([700, 700], "load Met_komp/ACILAZ.ent; wireframe 0.15;
rotate x -200; spin on;" +
                "zoom 100;");
            </script>

        </div>

</body>

</html>

```

Kuva 94. Html -pohja

Jpg- ja ent -tiedostot tallennettiin Met\_komp, Muut ja Orgaaniset>CHNO,CHOX, Muita orgaanisia tai Resorsinareenit -kansioihin. Kukin htm -tietokanta avattiin Wordillä, ja kansioihin kopioitiin rakennekaavakuvat Kopioi, Liitä -toiminnolla. Rakennekaavakuvat hyperlinkitettiin viittaamaan vastaavan rakenteen html-tiedostoon klikkaamalla hiiren oikealla näppäimellä ja valitsemalla avautuvasta valikosta ”Hyperlinkki”, jmol-kansiosta valittiin jpg-tiedoston nimeä vastaava html-tiedosto. Hyperlinkkien toimiminen testattiin selaimella.

## **12 CD**

CD:llä on kaksi tiedostoa, Jmol tietokanta ja sen käyttöohjeet. Jmol avataan kansioista ”Jmol tietokanta”, sitten avataan kansio ”jmol” ja sitten kansio ”html”. Tietokanta käynnistetään klikkaamalla tiedostoa "Kiderakennetietokanta.htm".



### 13 KIRJALLISUUSLUETTELO

1. Web of Knowledge > About > FAQ, <http://wokinfo.com/about/faq/>, Web of Knowledge, (31.07.2012).
2. Web of Science<sup>SM</sup> -pikaopas, <https://kirjasto.jyu.fi/tiedonhaku/tietokantaoppaat/WOShaku.pdf>, JYU, (05.12.2011).
3. Home / Solutions / CSD System / CSD (Cambridge Structural Database), <http://beta-www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/CSDSystem/Pages/CSD.aspx>, CCDC, (09.09.2012).
4. CAS is the WORLD'S AUTHORITY for CHEMICAL INFORMATION, <http://www.cas.org/>, CAS, (23.09.2012).
5. Home > About CAS > FAQs, <http://www.cas.org/about-cas/faqs>, CAS, (22.09.2012).
6. Ulkomaisten artikkeleiden haku, <https://koppa.jyu.fi/avoimet/kirjasto/kemia/lehdet-ja-sarjat/ulkomaisten-artikkeleiden-haku>, Jyväskylän yliopisto, (29.07.2012).
7. Kotimaisten artikkeleiden haku, <https://koppa.jyu.fi/avoimet/kirjasto/kemia/lehdet-ja-sarjat/kotimaisten-artikkeleiden-haku>, Jyväskylän yliopisto, (01.08.2012).
8. Yhdisteet ja reaktiot, <https://koppa.jyu.fi/avoimet/kirjasto/kemia/yhdisteet-ja-reaktiot>, Jyväskylän yliopisto, (01.08.2012).
9. Julkaisukäytänteistä, <https://koppa.jyu.fi/avoimet/kirjasto/kemia/julkaisukaeytaenteistae>, Jyväskylän yliopisto, (29.07.2012).
10. Jussi Valkonen, Kemian tiedonhankinta, luentomoniste, **2010**.
11. CSC - IT Center for Service, <http://www.csc.fi/english>, CSC, (29.07.2012).
12. CSC - IT Center for Science, [http://en.wikipedia.org/wiki/CSC\\_-\\_IT\\_Center\\_for\\_Science](http://en.wikipedia.org/wiki/CSC_-_IT_Center_for_Science), Wikipedia, (28.12.2011).
13. Software and databases, [http://www.csc.fi/english/research/software/index\\_html](http://www.csc.fi/english/research/software/index_html), CSC, (29.07.2012).

14. SciFinder-tietokanta, <https://koppa.jyu.fi/avoimet/kirjasto/kemia/yhdisteet-ja-reaktiot/scifinder-tietokanta>, Jyväskylän yliopisto, (01.08.2012).
15. Home > Content, <http://www.cas.org/content>, CAS, (22.09.2012).
16. Petri Pihko, CrossFire\_kurssi\_CSC\_Pihko, **2008**.
17. Reaxys-tietokannat, <https://koppa.jyu.fi/avoimet/kirjasto/kemia/yhdisteet-ja-reaktiot/reaxys-tietokantapaketti>, Jyväskylän yliopisto, (29.07.2012).
18. ChemBioOffice, <https://koppa.jyu.fi/avoimet/kirjasto/kemia/yhdisteet-ja-reaktiot/chembiooffice>, Jyväskylän yliopisto, (01.08.2012).
19. Web of Knowledge > About > What it is, <http://wokinfo.com/about/whatitis/>, Web of Knowledge, (05.07.2012).
20. Web of Knowledge > About > Quick Facts, <http://wokinfo.com/about/facts/>, Web of Knowledge, (05.07.2012).
21. Web of Science, [http://en.wikipedia.org/wiki/Web\\_of\\_Science](http://en.wikipedia.org/wiki/Web_of_Science), wikipedia, (02.05.2012).
22. Web of Knowledge > About > Who We Are, <http://wokinfo.com/about/howeare/>, Web of Knowledge, (05.07.2012).
23. The Thomson Reuters Journal Selection Process, [http://thomsonreuters.com/products\\_services/science/free/essays/journal\\_selection\\_process/](http://thomsonreuters.com/products_services/science/free/essays/journal_selection_process/), Thomson Reuters, (12.08.2012).
24. Web of Science, [http://wokinfo.com/products\\_tools/multidisciplinary/webofscience/](http://wokinfo.com/products_tools/multidisciplinary/webofscience/), Web of Knowledge, (13.08.2012).
25. Web of Science, *Web of Knowledge*, 5.7, (01.03.2012).
26. Web of Science Help, [http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS56B5/help/WOS/hp\\_search.html](http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS56B5/help/WOS/hp_search.html), Web of Science, (30.03.2012).
27. ResearcherID, <http://en.wikipedia.org/wiki/ResearcherID>, Wikipedia, (13.04.2012).

28. DOI, <http://fi.wikipedia.org/wiki/DOI>, Wikipedia, (22.06.2012).
29. The DOI System, <http://www.doi.org/index.html>, DOI, (07.08.2012).
30. Web of Science Help  
Current Limits,  
[http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hs\\_current\\_limits.html](http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hs_current_limits.html), Web of Science, (17.08.2012).
31. Web of Science Help Search Rules,  
[http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS56B5/help/WOS/hs\\_search\\_rules.html](http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS56B5/help/WOS/hs_search_rules.html), Web of Science, (30.03.2012).
32. Web of Science Help  
Search Operators,  
[http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hs\\_search\\_operators.html](http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hs_search_operators.html), Web of Science, (20.08.2012).
33. Web of Science Help  
Wildcards,  
[http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hs\\_wildcards.html](http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hs_wildcards.html), Web of Science, (20.08.2012).
34. Web of Science Help  
Author Finder,  
[http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hp\\_author\\_search.html](http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hp_author_search.html), Web of Science, (08.05.2012).
35. Web of Science Help  
Advanced Search,  
[http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hp\\_advanced\\_search.html](http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hp_advanced_search.html), Web of Science, (08.05.2012).
36. Web of Science Help  
Cited Reference Search: Step 1 of 2,  
[http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hp\\_crsearch1.html](http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hp_crsearch1.html), Web of Science, (08.05.2012).
37. Web of Science Help  
Cited Reference Search: Step 2 of 2,

[http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hp\\_crsearch2.html](http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hp_crsearch2.html), Web of Science, (08.05.2012).

38. Web of Science Help

Search History Table,

[http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hp\\_search\\_history.html](http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS57B4/help/WOS/hp_search_history.html), Web of Science, (08.05.2012).

39. Web of Science Help Results,

[http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS56B5/help/WOS/hp\\_results.html](http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS56B5/help/WOS/hp_results.html), Web of Science, (30.03.2012).

40. Web of Science Help

Citation Map,

[http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS56B5/help/WOS/hp\\_citation\\_map.html](http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS56B5/help/WOS/hp_citation_map.html), Web of Science, (08.07.2012).

41. Web of Science Help

Citation Report,

[http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS56B5/help/WOS/hp\\_citation\\_report.html](http://images.webofknowledge.com.ezproxy.jyu.fi/WOKRS56B5/help/WOS/hp_citation_report.html), Web of Science, (08.07.2012).

42. Viittausten ja julkaisujen kuninkaat, <http://www.jylkkari.fi/2010/11/viittausten-ja-julkaisujen-kuninkaat/>, JYVÄSKYLÄN YLIOPIPPILASLEHTI, (01.11.2010).

43. Impakttiluku ja muita arviointisuureita,

<https://koppa.jyu.fi/avoimet/kirjasto/tiedonhankinta-eritieteenoilla/luonnontieteet/impakttiluku-ja-muita-arviointisuureita>, Jyväskylän yliopisto, (08.09.2012).

44. Cambridge Structural Database, <http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd/>, CCDC, (09.09.2012).

45. CCDC new Beta Website

home, <http://beta-www.ccdc.cam.ac.uk/pages/Home.aspx>, CCDC, (09.09.2012).

46. Cambridge Crystallographic Data Center, <http://www.ccdc.cam.ac.uk/>, CCDC, (09.09.2012).

47. Home

Solutions

CSD System, <http://beta-www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/CSDSystem/pages/CSDSystem.aspx>, CCDC, (09.09.2012).

48. Home

Products

CSD System, [http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd\\_system/](http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd_system/), CCDC, (09.09.2012).

49. Home

Community

Deposit a Structure, <http://beta-www.ccdc.cam.ac.uk/Community/Depositstructure/pages/DepositStructure.aspx>, CCDC, (10.09.2012).

50. Crystallographic Information File,

[http://en.wikipedia.org/wiki/Crystallographic\\_Information\\_File](http://en.wikipedia.org/wiki/Crystallographic_Information_File), Wikipedia, (16.10.2011).

51. Home

Products

CSD

General Information Content,

[http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd/gen\\_information\\_content/](http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd/gen_information_content/), CCDC, (10.09.2012).

52. Home

Solutions

CSD System ConQuest, <http://beta-www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/CSDSystem/Pages/ConQuest.aspx>, CCDC, (11.09.2012).

53. CCDC, *ConQuest*, (01.11.2011).

54. Home

Solutions

CSD System

WebCSD,

[www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/CSDSystem/Pages/WebCSD.aspx](http://www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/CSDSystem/Pages/WebCSD.aspx), CCDC,  
(11.09.2012).

55. Home

Products

CSD System

WebCSD, [http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd\\_system/webcsd/](http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd_system/webcsd/), CCDC,  
(11.09.2012).

56. CCDC, *Mercury*, 2011.

57. Home

Solutions

CSD System

Mercury, <http://beta-www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/CSDSystem/Pages/Mercury.aspx>,  
CCDC, (11.09.2012).

58. Home

Products

CSD System

Mercury CSD, [http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd\\_system/mercury\\_csd/](http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd_system/mercury_csd/), CCDC,  
(11.09.2012).

59. Home

Products

CSD System

VISTA, [http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd\\_system/vista/](http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd_system/vista/), CCDC, (13.09.2012).

60. Home

Solutions

CSD System

IsoStar, <http://beta-www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/CSDSystem/Pages/IsoStar.aspx>,  
CCDC, (14.09.2012).

61. Home

Products

CSD System

IsoStar, [http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd\\_system/isostar/](http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd_system/isostar/), CCDC, (14.09.2012).

62. Home

Solutions

CSD System

Mogul, <http://beta-www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/CSDSystem/Pages/Mogul.aspx>,

CCDC, (19.09.2012).

63. Home

Products

CSD System

Mogul, [http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd\\_system/mogul/](http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd_system/mogul/), CCDC, (19.09.2012).

64. Home

Products

CSD System

PreQuest, [http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd\\_system/prequest/](http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd_system/prequest/), CCDC,

(21.09.2012).

65. Home

About CCDC

Company Information, [http://www.ccdc.cam.ac.uk/about\\_ccdc/company\\_information/](http://www.ccdc.cam.ac.uk/about_ccdc/company_information/),

CCDC, (21.09.2012).

66. Home

CCDC

Company Profile

History, <http://beta-www.ccdc.cam.ac.uk/CCDC/Companyprofile/Pages/History.aspx>,

CCDC, (21.09.2012).

67. Home

Products

CSD

Statistics, <http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd/statistics/>, CCDC, (21.09.2012).

68. Home

About CCDC

Science Profile

Collaborators, [http://www.ccdc.cam.ac.uk/about\\_ccdc/science\\_profile/collaborations/](http://www.ccdc.cam.ac.uk/about_ccdc/science_profile/collaborations/),

CCDC, (21.09.2012).

## 69. Scifinder

On-demand resources

Reference Searching, <http://www.cas.org/training/scifinder>, CAS, (04.11.2012).

## 70. Search for References by Research Topic,

<http://www.cas.org/etrain/scifinder/topic.html>, CAS, (23.09.2012).

## 71. Introduction to Reference Searching,

<http://www.cas.org/etrain/scifinder/introref.html>, CAS, (23.09.2012).

## 72. Analyze Reference Answer Sets,

<http://www.cas.org/etrain/scifinder/analyzeref.html>, CAS, (23.09.2012).

## 73. Introduction to Substance Searching,

<http://www.cas.org/etrain/scifinder/introsub.html>, CAS, (25.09.2012).

74. Get Commercial Sources, <http://www.cas.org/etrain/scifinder/suppliers.html>, CAS, (04.11.2012).

## 75. Scifinder

On-demand Resources

Substance Searching, <http://www.cas.org/training/scifinder>, CAS, (04.11.2012).

76. Search by Exact Structure, <http://www.cas.org/etrain/scifinder/exact.html>, CAS, (28.10.2012).

## 77. Introduction to the Scifinder Drawing Editor,

<http://www.cas.org/etrain/scifinder/introdraw.html>, CAS, (28.10.2012).

78. Search by Substructure, <http://www.cas.org/etrain/scifinder/sss.html>, CAS, (03.11.2012).

## 79. Scifinder

On-demand Resources

Reaction Searching, <http://www.cas.org/training/scifinder>, CAS, (06.11.2012).

## 80. Introduction to Reaction Searching,

<http://www.cas.org/etrain/scifinder/introrxn.html>, CAS, (06.11.2012).

81. Plan a Synthesis Project, <http://www.cas.org/etrain/scifinder/sciplanner.html>, CAS, (09.11.2012).



82. Home

About CAS

CAS History, <http://www.cas.org/about-cas/cas-history>, CAS, (09.11.2012).

83. Home

About CAS

CAS Fact Sheet, <http://www.cas.org/about-cas/cas-fact-sheets>, CAS, (09.11.2012).

84. Home

Content

Chemical Substances

CAS REGISTRY - The gold standard for chemical substance information,

<http://www.cas.org/content/chemical-substances>, CAS, (11.11.2012).

85. Home

Content

Chemical Substances

CAS REGISTRY and CAS Registry Number FAQs,

<http://www.cas.org/content/chemical-substances/faqs>, CAS, (11.11.2012).

86. Home

Content

At a Glance, <http://www.cas.org/content/at-a-glance>, CAS, (11.11.2012).

87. Home

Content

References

References - CAplus - Worldwide coverage of many scientific disciplines all in one source, <http://www.cas.org/content/references>, CAS, (11.11.2012).

88. Home

Content

Reactions

Reactions - CASREACT - Answers to your chemical reaction questions,

<http://www.cas.org/content/reactions>, CAS, (12.11.2012).

89. Home

Content

Chemical Suppliers

Chemical Suppliers - CHEMCATS - Find Commercially available chemicals, pricing, and supplier contact information, <http://www.cas.org/content/chemical-suppliers>, CAS, (13.11.2012).

90. Home

Content

Regulated Chemicals

Regulated Chemicals - CHEMLIST - Find whether a substance is regulated and by what agency, <http://www.cas.org/content/regulated-chemicals>, CAS, (14.11.2012).

91. Home

Content

Markush

Markush - MARPAT - Database containing the keys to substances in patents, <http://www.cas.org/content/markush>, CAS, (15.11.2012).

92. Web of Knowledge, [http://en.wikipedia.org/wiki/Web\\_of\\_Knowledge](http://en.wikipedia.org/wiki/Web_of_Knowledge), Wikipedia, (27.11.2012).

93. Home

About Us

Recognition, [http://thomsonreuters.com/about/awards\\_recognition/](http://thomsonreuters.com/about/awards_recognition/), Thomson Reuters, (02.12.2012).

94. Home

Solutions

Life Sciences, <http://beta-www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/LifeSciences/Pages/LifeSciences.aspx>, CCDC, (02.12.2012).

95. Home

Solutions

Powder Diffraction

DASH, <http://beta-www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/PowderDiffraction/Pages/DASH.aspx>, CCDC, (02.12.2012).

96. Home

About CAS, <http://www.cas.org/about-cas>, CAS, (02.12.2012).

97. Home

Products

Scifinder, <http://www.cas.org/products/scifinder>, CAS, (02.12.2012).

98. Lauri Niinistö and Lassi Hiltunen, Röntgendiffraktiomenetelmien periaatteet ja käyttö rakennetutkimuksessa erityisesti orgaanisten yhdisteiden kide- ja molekyyliarakenteen määrittämisessä, *Kemia-Kemi*. **1987**, 14, 6.

99. Anne Veitonmäki, *Orgaanisten molekyylien kiteyttäminen ja kiteiden kasvattaminen*, Jyväskylän yliopisto, Jyväskylä, 2010.

100. Jmol: an open -source Java viewer for chemical structures in 3D with features for chemicals, crystals, materials and biomolecules, <http://jmol.sourceforge.net/>, (13.01.2012).

101. Java, <http://fi.wikipedia.org/wiki/Java>, (13.01.2012).

102. CCDC, <http://www.ccdc.cam.ac.uk/>, Cambridge Crystallographic Data Centre, (25.01.2012).

103. Irfanview, <http://fi.wikipedia.org/wiki/IrfanView>, (24.12.2001).

104. CoffeeCup Free HTML Editor, <http://webdesign.about.com/od/freewebeditors/fr/coffeecup-free-html-editor.htm>, (25.01.2012).

105. Jonathan W. Steed, David R. Turner and Karl J. Wallace, *Core Concepts in Supramolecular Chemistry and Nanochemistry*, Painos, Wiley, England, 2007.

106. Calixarene, <http://en.wikipedia.org/wiki/Calixarene>, (20.11.2011).

107. Resorcinarene, <http://en.wikipedia.org/wiki/Resorcinarene>, (24.12.2011).

108. Tiia-Riikka Tero, *Resorsinareenien metallikompleksit*, Jyväskylän yliopisto, Kemian laitos, 2011.