

Infozine No. 1

Das Magazin für Anwender wissenschaftlicher Informationen

Willkommen bei Infozine!

Dies ist die erste Ausgabe von Infozine, dem Newsletter des Informationszentrums Chemie Biologie Pharmazie. Infozine möchte Ihnen die sich schnell weiter entwickelnde und faszinierende Welt der wissenschaftlichen Information näherbringen und Ihnen zeigen, was es alles an neuen Möglichkeiten gibt. Das neue Magazin des Infozentrums soll Ihnen aber auch helfen, aus der Vielzahl von Informationsressourcen und Informationslösungen die richtige auszuwählen. Und dies möglichst anhand von praktischen Beispielen und so unterhaltsam wie möglich. Gerne nehmen wir auch Ihre Fragen und Anregungen auf – es soll Ihr Magazin werden. Schicken Sie einfach ein Mail an [renn\(at\)chem.ethz.ch](mailto:renn(at)chem.ethz.ch).

Diese und alle künftigen Ausgaben von Infozine finden Sie auf der Webseite des Infozentrums als PDF zum Download. Über neue Ausgaben, die etwa alle zwei Monate erscheinen sollen, informieren wir Sie bis auf weiteres über die E-Mail-Verteiler der Departemente. Geplant ist aber der Einsatz eines Aboverwaltungssystems, so dass Sie Infozine selbst abonnieren bzw. abbestellen können.

Und noch etwas: Diese erste Ausgabe ist ausschliesslich in deutscher Sprache.

Möchten Sie Infozine lieber in Englisch lesen – oder zusätzlich in Englisch? Stimmen Sie ab, ganz einfach mit einem Klick unter <https://de.surveymonkey.com/s/infozine>.

Wir wünschen Ihnen eine unterhaltsame Lektüre!

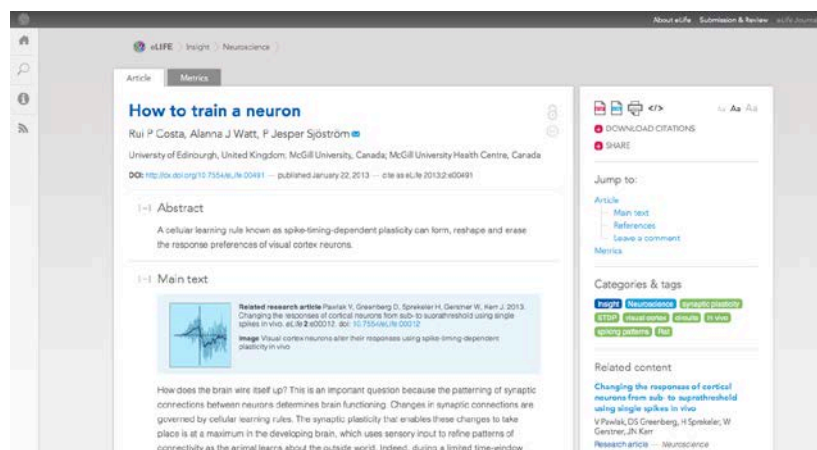
Ihr Infozentrum Chemie Biologie Pharmazie

Aus dem Inhalt: No. 1 – Februar 2013

- 1 Neue Informationsressourcen
- 2 British Pharmacopoeia
- 3 Test von Embase, TargetInsights und Pharmapendium verlängert
- 4 Neues aus der Verlagswelt
- 5 Im Fokus: Reaxys Xcelerate
- 6 Reaktionen auf dem iPad lernen
- 8 Umfrage des Infozentrums
- 8 Broschüre des ICBP

eLife ist live

Neue Publikationsformen, die an sich neue und innovative Formen der wissenschaftlichen Kommunikation darstellen – was Publizieren letztlich bewirken will – sind nicht mehr nur in der Physik ein Thema. Dort waren sie ursprünglich getrieben vom Wunsch nach Open Access, bei Verlagen von der Erkenntnis, dass digitale Möglichkeiten genutzt werden müssen (Elseviers Projekt des „Article of the Future“). Bei den Machern von eLife ist es sicher beides: die Überzeugung, dass Open Access das Publikationsmodell der Zukunft sein muss und der Wunsch, heutige technologische Möglichkeiten auszuschöpfen.



eLife ist das erste Projekt einer im Juni 2011 gestarteten Zusammenarbeit von drei grossen funding agencies: dem Howard Hughes Medical Institute, der Max-Planck-Gesellschaft und dem Wellcome Trust. Ziel: ein „major open-access research journal covering life and biomedical sciences“. Am 13.12.2012 war es soweit, e-life (<http://elife.elifesciences.org>) wurde gestartet. Derzeit sind über 60 papers auf der Plattform zu finden, die zwar auch als klassische PDFs verfügbar sind, aber eben auch z.B. als XML-Dateien.

Besonders stolz sind die Macher von eLife auf die Nutzung der digitalen Möglichkeiten. Abbildungen und Supplementary Material stehen für weitere Analysen bereit, Videos sind eingebunden und Data Sets können von jedem heruntergeladen werden, Article Metrics stehen zur Verfügung, und auch das gesamte Peer-Review-Verfahren ist transparent und nachlesbar. Zusätzlich wird ein API zur Verfügung gestellt, so dass Dritte Anwendungen programmieren können, die die Inhalte von eLife nutzen.

Bis auf weiteres werden von den Autoren auch keine Publikationsgebühren verlangt – wie es bei Open-Access-Publikationen üblich ist. Auf der Website finden Sie ein Video (www.elifesciences.org/about) zu eLife's Statement „eLife is not just a journal. That's just the beginning.“ Am Beginn stehen auch noch die Filtermöglichkeiten: es lässt sich z.B. nicht nach der Affiliation der Autoren suchen. Mindestens ein ETH-Autor ist aber bereits dabei.

British Pharmacopoeia online

Ab sofort können Sie *British Pharmacopoeia* (www.pharmacopoeia.co.uk) aus dem Netzwerk der ETH direkt als Webanwendung nutzen. Damit haben Sie automatisch immer Zugriff auf die aktuellste Version.



Was ist die British Pharmacopoeia?

Sie ist relevant für alle aus dem IPW bzw. für alle, die sich für Pharmazeutische Wissenschaften interessieren. *The British Pharmacopoeia (BP) is the official collection of standards for UK medicinal products and pharmaceutical substances, produced by the British Pharmacopoeia Commission Secretariat of the Medicines and Healthcare products Regulatory Agency. Since 1864, the BP has been providing authoritative standards for pharmaceutical substances and it continues to play an important role in the standard-setting process worldwide.*

Aus den Zeitschriften

Über die ETH-Bibliothek stehen Ihnen Tausende von Zeitschriften zur Verfügung. Die jährlich dazukommenden Hunderttausende, Millionen von Artikeln können Sie nicht alle lesen. Einen unterhaltsamen Artikel wollen wir Ihnen aber nicht vorenthalten:

Niedriger Lohn erhöht den Blutdruck

Laut den Autoren einer kürzlich publizierten Studie im *European Journal of Public Health* (2012; 22: 854-859) von der School of Medicine in Sacramento (University of California, Davis) ist das Einkommen ein guter Gradmesser für das Hypertonie-Risiko. Die Autoren empfehlen ein häufigeres Screening bei Patienten mit niedrigem sozioökonomischen Status.

Sie möchten bestimmt wissen, wie Sie sich zielgerichtet Alerts zu Ihrem Interessengebiet einrichten können? Im nächsten Infozine stellen wir Ihnen verschiedene Möglichkeiten vor.

Hazmat Navigator

Bereits seit Herbst letzten Jahres steht unter www.hazmatnavigator.com der Hazmat Navigator von Elsevier zur Verfügung – wir möchten aber in diesem Infozine gerne nochmals darauf hinweisen. Nutzen Sie den Hazmat Navigator zu Ihrer eigenen Sicherheit – und schlagen Sie sicherheitsrelevante Informationen vor der Durchführung Ihrer Experimente nach.

Boron azide dichloride ([print format](#))

Show All

<p>Common Reactive Hazards H350</p> <p>Related Records</p> <p>References</p>	<p>A hard crust of sublimed material exploded when or during solvent removal were known previously [P]</p> <p>NON-METAL AZIDES</p> <ul style="list-style-type: none"> • Anon. (1970). <i>Angew. Chem. (Nachr.)</i>, 18, 27. • Paetzold, P. I. (1963). <i>Z. Anorg. Chem.</i>, 326, 47.
-----------------------------------------------------------------------------------------	-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Ein *Fact Sheet* zum Hazmat Navigator und ein *Video* finden Sie unter der URL <http://www.elsevierdirect.com/hazmatnavigator/advantages.html> zum Download (Flyer 2.5 MB, Watch a demonstration 175 MB).



Was ist der Hazmat Navigator?

Hazmat Navigator is a chemical safety database that helps chemists and safety personnel quickly access critical, detailed chemical hazards information.

Three reasons you need Hazmat Navigator:

- ➔ Reduce likelihood of accidents, injuries, and property loss
- ➔ Save time and enhance your productivity

With Hazmat Navigator, information can be found through one integrated interface in a matter of minutes-with minimal disruption to a user's workflow. You can search by chemical substructure and similarity as well as chemical name, molecular formula, and CAS number. This unique functionality speeds users to chemical safety data on reactivity, toxicity, fire hazards, and chemical regulations.

- ➔ Unique, reliable information

Primary sources for Hazmat Navigator's extensive database include Bretherick's Handbook of Reactive Chemical Hazards, Sittig's Handbook of Toxic and Hazardous Chemicals and Carcinogens, Sittig's Handbook of Pesticides and Agricultural Chemicals, Encyclopedia of Toxicology, and the Fire Protection Guide to Hazardous Materials.

Methods Navigator

Elsevier hat weitere „Navigators“ im Angebot. Neben dem *Hazmat Navigator* wird Ihnen von der ETH-Bibliothek der *Methods Navigator* zur Verfügung gestellt (www.methodsnavigator.com). Da dieses Tool noch relativ unbekannt zu sein scheint, möchten wir in diesem Infozine gerne darauf hinweisen.

Methods Navigator: Search. Access. Apply.

Browse Protocols Ordered by topic ▾

- Cell Protocols (18)
- Basic Microbiological Techniques (2)
- Cellular Fractionation (2)
- Knock-outs and Gene Replacements (6)
- Microbiological Media (2)
- Growth Media for *E. coli* (1)
- Growth Media for
 - Saccharomyces cerevisiae Growth Media (1)
 - Preparation of Slides for Microscopy (6)
- DNA Protocols (28)
- Lipid and Carbohydrate Protocols (4)
- Other Protocols (3)
- Protein Protocols (53)
- RNA Protocols (22)

Was ist der Methods Navigator?

Methods Navigator is an amazing collection of methods papers and freshly brewed protocols, all tied together using multiple taxonomies of standard industry terms, by drawing on content from the acclaimed series Methods in Enzymology and Methods in Cellular Biology. Methods Navigator offers a extensive library including over 40,000 articles from the acclaimed series Methods in Enzymology, Methods in Cell Biology and 15 relevant journals. Specially commissioned for and exclusive to Methods Navigator are over 120 interactive Molecular Biology protocols which take users step-by-step through some of the most commonly used techniques for easy replication., enhanced with flowcharts and video.

Akquisition 1 – Elsevier & Aureus

Elsevier hat Aureus, einen französischen Anbieter von Datenbanken mit sofortiger Wirkung übernommen. Aureus ist spezialisiert auf Datenbanklösungen, insbesondere für Wissenschaftler in pharmazeutischen und Biotech-Unternehmen.

Akquisition 2 – Springer & Papers

Papers ist eine Software, mit der Wissenschaftler in einer Art persönlicher Forschungsbibliothek ihre Literatur verwalten und austauschen können. Mit der Akquisition wird Springer ebenfalls zum Anbieter nicht nur von Inhalten, sondern von Informationslösungen.

Evaluierung von EMBASE, TargetsInsights und PharmaPendium verlängert!

Das Infozentrum Chemie | Biologie | Pharmazie hat einen Testtrial zu **PharmaPendium, Embase & TargetInsights** organisiert. Die Datenbanken stehen noch bis etwa **Ende Februar 2013** kostenlos zur Verfügung.

EMBASE (www.embase.com) ist für alle Wissenschaftler im Bereich Chemie Life Sciences interessant, PharmaPendium (www.pharmapendium.com) für alle im Bereich Drug Development, TargetInsights für alle im Bereich Molekularbiologie, Bioinformatik, Pharmakologie und Medizinische Chemie (www.targetinsights.com).

Bei entsprechendem Interesse kann der Testzugang evtl. auch verlängert werden. Bei Fragen mailen Sie bitte an infoz_consulting@chem.ethz.ch.

Lizenzierung Ja oder Nein?

Ihr Feedback zu den Trials können Sie unter wenigen Klicks unter der URL https://de.surveymonkey.com/s/elsevier_trials ganz einfach abgeben.

What is TargetInsights?

Designed for researchers involved in target identification, prioritization and validation. Search functions enhanced by taxonomies and full text indexing as well as relationship search to determine relationships between topic areas: protein, cell line, function and disease.

Who should use TargetInsights?

TargetInsights enables filtered and highly specific content searches for molecular biologists, preclinical pharmacologists, discovery chemists and bioinformaticians.

What is EMBASE?

Over 25 million records from >7,600 journals, including >2,000 titles not available on MEDLINE and >600,000 conference abstracts, indexed by biomedical experts using Elsevier's unique life science thesaurus, Emtree, including chemical names, trade names, etc.

Who should use EMBASE?

If you are searching on topics such as drug development or use, toxicology, drug safety, adverse drug reactions, medical devices, basic biomedical science and more.

What is PharmaPendium?

FDA drug approval review and correspondence documentation since 1938, as well as an EMA documents. Meticulously indexed and hierarchically structured, allowing you to search e.g. for comparative data on candidates sharing any similarities.

Who should use PharmaPendium?

Researchers involved in drug discovery and drug development, safety assessment including toxicologists, safety pharmacologists, pharmacokineticists, pharmacoepidemiologists.

The screenshot shows the PharmaPendium interface. The search bar contains 'Indium In-111 Pentetreotide - FDA Approval Package'. The results page displays a 'Medical Officer's Response to Questions In Regards Review of NDA' for NDA # 20314. The agent is 'Indium-111-Pentetreotide (OctreoScan-111)' and the sponsor is 'Mallinckrodt Medical, Inc., 675 McDonnell Blvd, P.O. Box 5840, St. Louis, MO 63134'.

The screenshot shows the TargetInsights search results page. The search query is 'doc('metastasis' AND '1,4,7,10 tetraazacyclododecane 1,4,7,10 tetraacetic acid')'. The results show 477 results for search #2. The top results are:

- Optical molecular imaging detects changes in extracellular pH with tLoja M.N., Luo Z., Greg Farwell D., Luu Q.C., Donald P.J., Amott D., [In Process] *International Journal of Cancer* 2013 132:7 (1613-162)
- High tumor uptake of 64Cu: Implications for molecular imaging of tJørgensen J.T., Persson M., Madsen J., Kjær A. [Article in Press] *Nuclear Medicine and Biology*
- Initial characterization of a dually radiolabeled peptide for simultaneMebrшту E., Zheleznyak A., Hur M.A., Laforest R., Lapi S.E. [In Process] *Nuclear Medicine and Biology* 2013 40:2 (190-196)

The screenshot shows the EMBASE search interface. The search term is 'DOTA'. The results show a list of related terms and their usage in various contexts, such as 'DOTA use: tetraacetat', 'gadolinium DOTA use: gadoteric acid', and 'gadolinium DOTA meglumine use: gadoterate meglumine'.

Reaxys Medicinal Chemistry

Nach Reaxys Xcelerate (siehe S. 5) kommt Elsevier nun mit einem weiteren Modul von Reaxys, Reaxys Medicinal Chemistry, welches sich insbesondere an Forscher im Bereich Medicinal Chemistry richtet. Dieses ermöglicht laut Elsevier „*access to comprehensive, referenced and well-structured data to enhance the compound selection process across discovery and preclinical stages in drug research and development. Reaxys Medicinal Chemistry will significantly improve the efficiency and productivity of researchers engaged in the process of designing compounds and optimizing their compatibility with one or more targets in order to successfully treat a disease. Reaxys Medicinal Chemistry can be used in conjunction with Elsevier's suite of life science products; including Reaxys, the leading chemistry discovery engine, and PharmaPendium, which focuses on regulatory approvals and drug safety. This solution effectively brings together lead identification, confirmation and drug repurposing.*“

Noch ist unklar, ob das neue Produkt an der ETH zur Verfügung stehen wird.

Springer digitalisiert alle Bücher

Springer, gemäss Anzahl der publizierten Bücher der grösste Wissenschaftsverlag der Welt, hat bekanntgegeben, dass Ende des Jahres das Springer Book Archives (SBA) zur Verfügung stehen soll, mit insgesamt 100'000 Titeln aus 170 Jahren Verlagsgeschichte. Das Paket wird – natürlich gegen Zahlung einer Lizenzgebühr – über SpringerLink zur Verfügung stehen. Derzeit sind schon 85'664 Titel online.



Akquisition 3: Mendeley

Keine Akquisition, sondern bisher nur ein Gerücht, ist die Information, dass der Verlag Elsevier das Programm Mendeley kaufen will, eine Plattform zum Austausch und zur Verwaltung wissenschaftlicher Literatur. Bemerkenswert an Mendeley ist das extrem rasche Wachstum der Nutzer: seit dem Start der Plattform im Jahr 2009 wächst die Zahl der Nutzer nahezu exponentiell an.



open access zum Ryan Air-Schnäppchenpreis

Wer in Open Access-Journalen publizieren will, muss Publikationsgebühren bezahlen, so will es das Business Modell von Open Access. Nicht der Leser zahlt für die Möglichkeit zu lesen, sondern der Autor für die Möglichkeit, gelesen zu werden. Die durchschnittliche Publikationsgebühr liegt bei 1'000 US\$. Der Verlag Sage hat jetzt angekündigt, dass die Publikation nun schon für 99 US\$ zu haben ist. Ob dafür Qualität zu haben ist, ist zu bezweifeln.

Bei keiner der zahlreichen Diskussionen um Open Access (egal ob es die Golden oder Green Road ist) wurde übrigens diskutiert, inwieweit sich Publikationsgebühren auf das Publikationsverhalten der Wissenschaftler auswirken – zumindest sind dem Verfasser keine solchen Diskussionen bekannt. Auch bei der APE 2013 war das kein Thema. Vor die Entscheidung gestellt, zwar solide aber wenig spektakuläre Forschungsergebnisse zu publizieren, mag sich mancher für Reisen oder Laborausrüstungen und gegen das Publizieren entscheiden. Schliesslich kann man so mindestens \$1'000 sparen, und die Zeit, die für das Schreiben des Papers benötigt wird, ist auch nicht zu vernachlässigen. Im schlimmsten Fall kann es dazu kommen, dass Forschungsarbeiten unwissentlich ein zweites oder drittes Mal durchgeführt werden, weil kein Forscher – wegen der nicht erfolgten Publikation – weiss, dass auf diesem Gebiet bereits geforscht worden ist.

Open Access bei Büchern

Die Open Access-Bewegung nimmt nun auch zunehmend Bücher in den Fokus. Autoren, die dafür bezahlen, dass ihr Buch frei verfügbar publiziert wird, gibt es (noch) wenige. Wie jetzt bekanntgegeben wurde, haben die Max-Planck-Gesellschaft und der Wissenschaftsverlag De Gruyter eine richtungweisende Rahmenvereinbarung über die Publikation von Open Access-Büchern beschlossen. Werke, die unter der Federführung von den derzeit 80 Max-Planck-Instituten entstehen, sollen für jeden Nutzer kostenfrei im Internet abrufbar sein.

Akquisition 4 – Wiley & FIZ Chemie Berlin

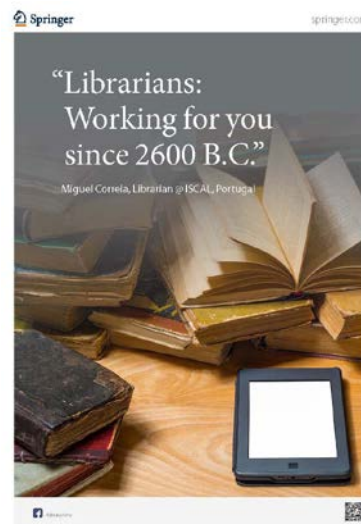
Die „Assets“ des sich in „Abwicklung“ befindlichen Fachinformationszentrums FIZ Chemie in Berlin wurden vom Verlag Wiley übernommen, wie Wiley und der beauftragte Rechtsanwalt **bekanntgaben**. Zu den erworbenen Produkten gehören der wöchentliche Referatedienst ChemInform, die Reaktionen-Datenbank ChemInform RX (CIRX), sowie die erste und älteste Referatezeitschrift Chemisches Zentralblatt, die thermophysikalische Stoffdatenbank InfoTherm – im und über das Infozentrum verfügbar –, und schliesslich auch noch die eLearning-Produkte Chemgaroo und Chemgapedia.

Über ein Viertel aller Todesfälle ist auf Krebs zurückzuführen

Wie das Deutsche Statistische Bundesamt zum Weltkrebstag am 4. 2. mitteilte, starben im Jahr 2011 26% aller rund 852'000 in Deutschland verstorbenen Menschen an einem Krebsleiden. Krebs ist nach den Herz-Kreislauf-Erkrankungen zwar weiterhin „nur“ die zweithäufigste Todesursache, sein Anteil an allen Todesfällen der letzten 30 Jahre ist aber um ca. 25% gestiegen – im gleichen Masse, wie die durch Herz-Kreislauf-Erkrankungen verursachten Todesfälle zurückgingen. (s. Buchtipp S. 8)

Springer: Librarian Poster Contest

Springer hat über Facebook einen Wettbewerb für ein Werbeplakat für Bibliotheken ausgeschrieben: Dies ist der Gewinner.



Innovative Features in Reaxys Xcelerate

Reaxys von Elsevier ist eine Browserbasierte und benutzerfreundliche Oberfläche, die dem synthetisch arbeitenden oder an physikalischen Eigenschaften interessierten Chemiker die Suche nach organischen, anorganischen und metallorganischen Verbindungen, Reaktionen und Eigenschaften erlaubt. Mit über 21 Millionen Verbindungen, 33 Millionen Reaktionen, 4 Millionen Literaturhinweisen und mehreren 100 Millionen Eigenschaften ist Reaxys eine der wichtigsten Informationslösungen in der Chemie und deckt die chemische Literatur seit ihren Anfängen seit 1771 ab. Reaxys enthält die drei Quellen Beilstein, Gmelin und Patent Chemistry, die in einer einzigen Datenbank zusammengefasst sind.

Seit kurzem können Sie nun unter der bisherigen Adresse www.reaxys.com auf die Premium-Version Reaxys Xcelerate zugreifen. Sie bietet folgende nützliche Zusatzfunktionen: Report, Analysis View und Autoplan.

Report

Mit diesem Feature können einzelne Informationen aus den Resultaten einer Verbindungs- oder Reaktionssuche in einen individuell zusammenstellbaren Bericht kopiert werden. Wenn Sie mit der Maus über eine Information fahren, wird in deren linken unteren Ecke ein Eselsohr angezeigt (Abb. 1):

Abb. 1. Eselsohr in der linken unteren Ecke als Hinweis für kopierbare Information

Wenn Sie das Eselsohr mit der Maus anklicken, erscheint ein Menü und Sie können die gewünschte Information in einen Report kopieren (s. Abb. 2):

Abb. 2. Kopieren der Information in den Report

Den so erstellten Bericht können Sie über den Menüeintrag "Report" weiter bearbeiten (Abb. 3), annotieren, auf dem eigenen Rechner abspeichern und später wieder in Reaxys öffnen, oder ausdrucken. Nützlich ist auch die Funktion "Regroup", mit der gemeinsame Eigenschaften zu einer Verbindung oder gemeinsame Reaktionsvorschriften (Reaction Details) zu einem Reaktionsschema zusammengefasst werden können.

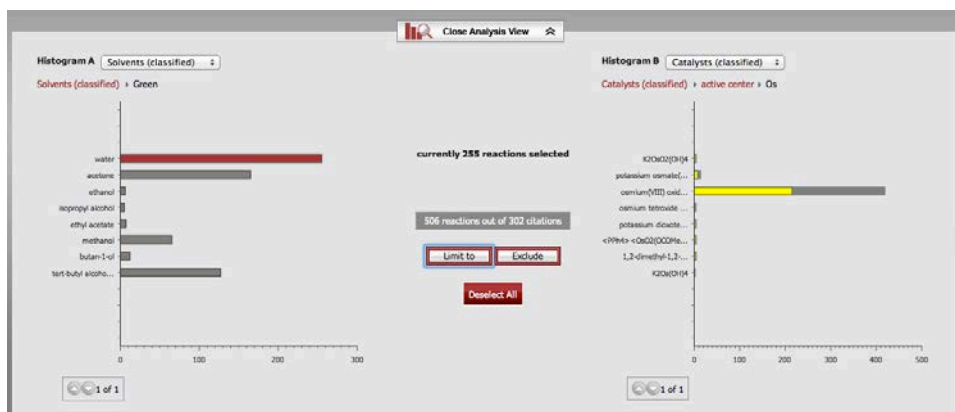


Abb. 3. (oben): Reportbearbeitung

Analysis View

Analysis View erlaubt, die gefundenen Resultate – Substanzen, Reaktionen oder Literaturreferenzen – zu kategorisieren und die Werte für jeweils zwei Kategorien als Histogramme darzustellen, um Korrelationen zwischen den Kategoriwerten aufzuspüren. Dies ist beispielsweise nützlich, wenn Sie bei einer Suche nach Herstellungen in Ihren Resultaten Reaktionen identifizieren möchten, die eine hohe Ausbeute versprechen und gleichzeitig mit umweltfreundlichen (sogenannten "grünen") Lösungsmitteln durchgeführt werden können, oder um eine geeignete Kombination Reagens – Lösungsmittel aufzufinden. Aktiviert wird diese Funktion über die Schaltfläche "Open Analysis View" (Abb. 4). Abhängig vom Suchkontext können folgende Kategorien gewählt werden:

Abb. 4. (unten) Analysis View: "Grüne" Lösungsmittel vs. verwendeten Katalysator für die cis-Hydroxylierung von Cyclopenten



a) für Substanzen Summenformel, Molmasse, Dichte, Schmelz- und Siedepunkt, pharmakologische Wirkung, physikalische Eigenschaften, spektroskopische Daten und bibliographische Angaben, b) für Reaktionen Lösungsmittel (klassiert und unklassiert), Reagenzien/Katalysatoren (klassiert und unklassiert), Reaktionsklassifikation, Ausbeute und bibliographische Angaben, und c) für Literaturstellen bibliographische Angaben.

Die Histogramme sind miteinander verknüpft: Werden im Histogramm A oder B ein oder mehrere Werte durch Anklicken der Balken gewählt, zeigt das jeweils andere Histogramm die zugehörigen Eigenschaften an. Die Schaltfläche "Limit to" können Sie dann auf die markierten Resultate anwenden.

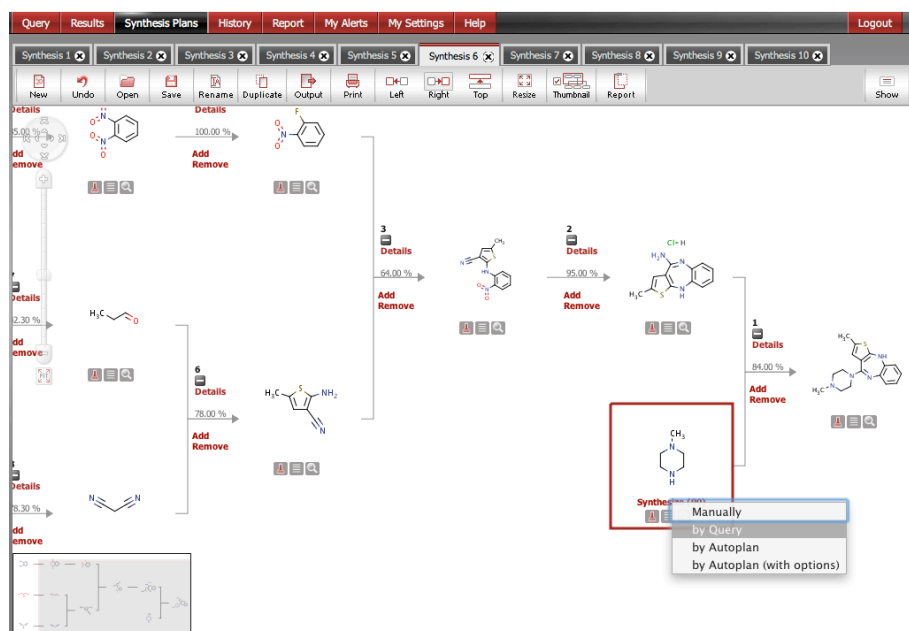


Abb. 5. Durch Autoplan erzeugte Syntheserouten in "Synthesis Plans".

Zur Zeit muss man noch die Balken anklicken, damit die Zusammenhänge ersichtlich werden. Das Infozentrum als Reaxys Development Partner hat den Reaxys-Entwicklern vorgeschlagen, auch sog. Heatmaps zu implementieren, womit dann Hotspots einfach erkannt werden können.

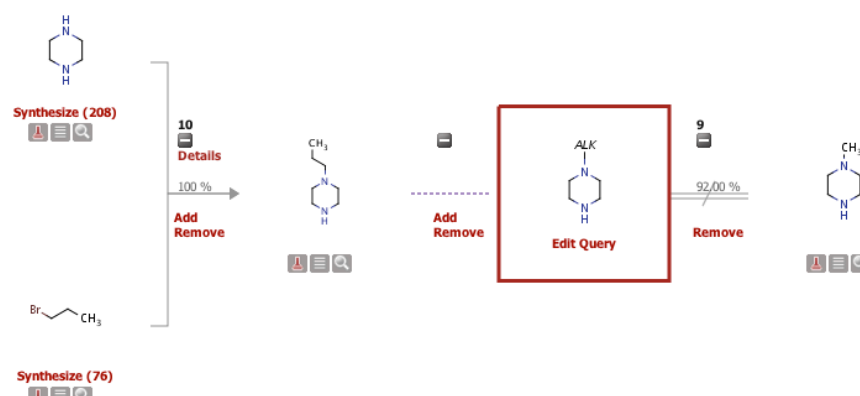
Autoplan

Autoplan schlägt mehrere Syntheserouten für eine Verbindung vor und eliminiert damit das aufwändige Suchen nach Synthesevarianten weitgehend. Es kann auf folgende Weisen ausgelöst werden:

a) über die Autoplan-Schaltfläche auf den Startseiten für die Verbindungs- und Reaktionssuche. Damit werden mögliche Syntheserouten automatisch erzeugt und als separate Reiter unter "Synthesis Plans" eingetragen (Abb. 5). Arbeitet man mit seinem persönlichen Login, kann man die Parameter, welche die Tiefe der Suche und Anzahl der Pläne kontrollieren, im Menüpunkt "My Settings" einstellen.

b) über den Synthesize-Link unter einer Verbindung in der Anzeige der Resultate für eine Verbindungs- oder Reaktionsrecherche. Dabei kann zwischen manueller Syntheseplanung – wie bisher in Reaxys vorhanden –, automatischem Autoplan und parametergesteuertem Autoplan gewählt werden.

c) über den Synthesize-Link unter einer Verbindung im Syntheseplan. Zusätzlich zu den in b) erwähnten Optionen wird "by Query" (Abb. 5 rechts unten) angeboten. Diese Auswahl ist dann nützlich, wenn Autoplan die Suche bei einer Verbindung in einem Ast des Synthesebaums abbricht, weil entweder die maximale Suchtiefe erreicht wurde oder keine kommerziell erhältlichen Edukte auffindbar waren. Die Verbindung wird dann in den Struktureditor übernommen, und Sie können sie dann für eine Substruktursuche erweitern, um Synthesewege für ähnliche Verbindungen aufzufinden. Im Syntheseplan werden so gefundene Routen mit einer grauen Doppellinie angezeigt (Abb. 6).



Fazit

Das Informationszentrum schätzt Reaxys als eines der innovativsten Produkte im Markt der Chemieinformation ein. Wir denken, dass mit Reaxys Xcelerate einige nützliche Features eingeführt wurden, die Sie bei der Literaturrecherche und der Syntheseplanung unterstützen können – probieren Sie sie aus! Als Reaxys Development Partner sind wir in engem Kontakt mit dem Hersteller und können Vorschläge in die Entwicklung einfließen lassen. Wir sind deshalb auch froh über Ihre Rückmeldungen – positive oder negative, was gut funktioniert oder weniger, die wir kommentieren und an den Hersteller weiterleiten.

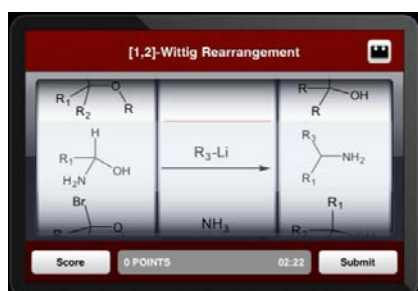
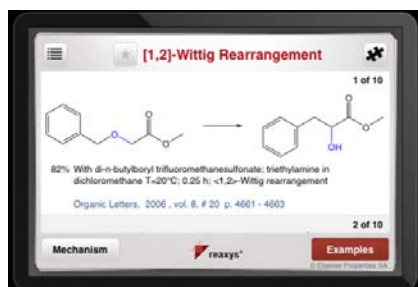
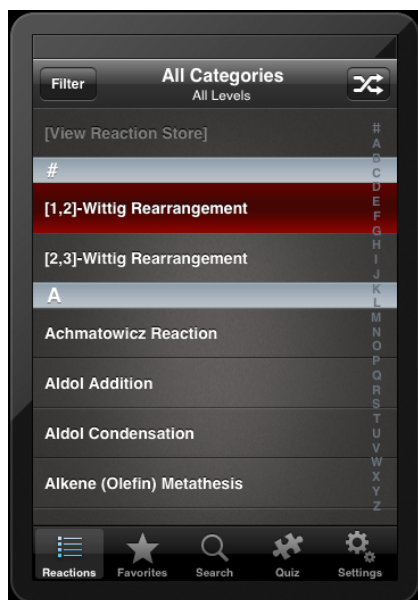
(Dr. Martin Brändle)

Abb. 6. Mit der Suchoption "by Query" ergänzte Syntheseroute. Das 1-Methylpiperazin wurde dazu als Alkylpiperazin für eine Substruktursuche "aufgebohrt".

Lieber auf dem iPhone spielen als chemische Reaktionen büffeln?

Sie wollten eigentlich organische Namensreaktionen büffeln, lassen sich aber von Ihrem iPhone oder iPad ablenken? Oder spielen lieber an einem einarmigen Banditen? Das muss nicht mehr sein. Sie können jetzt **alles** haben: Mit **Reaction-**

Flash Reaktionen auf dem iPad lernen und spielerisch überprüfen, ob Sie alles können. Der Einsatz: 0 CHF, denn die App ist umsonst!



EndNote

EndNote, ein an der ETH Zürich weit verbreitetes Literaturverwaltungsprogramm, ist nun auch als App für das iPad verfügbar. Laut Thomson Reuters, dem Anbieter sowohl von Endnote als auch von Reference Manager, soll der nahtlose Austausch zwischen allen Computern des Nutzers möglich sein. Integriert sind weitere Thomson Reuters-Produkte wie Web of Knowledge oder das ScholarOne Manuscripts-Peer-Review-System. Die App ist in allen internationalen Apple Stores verfügbar.

SciVal zur Analyse der Research Performance

Elsevier ist nicht nur ein Anbieter von Büchern und Zeitschriften, sondern stellt auch eine grosse Anzahl von Datenbanken zur Verfügung (Scopus, Reaxys, PharmaPendium, Illuminat8, Target Insights, Brain Navigator ...) wie auch Informationslösungen, um den Forschungsoutput einer Universität zu evaluieren. So haben kürzlich die Kanazawa University in Japan und Elsevier **bekanntgegeben**, dass gemeinsam und mit Hilfe der Informationslösungen SciVal Experts, SciVal Funding, SciVal Spotlight, SciVal Strata, SciVal Analytics umfangreiche Analysen gemacht wurden, die nun dazu dienen, die künftige Forschungsstrategie der Universität zu definieren. Daneben arbeiten auch verschiedene britische Universitäten im Rahmen des Snowball Metrics Recepte Book mit Elsevier zusammen.



Impressum

Infozine wird herausgegeben vom Informationszentrum Chemie Biologie Pharmazie (ICBP), einer Einrichtung der beiden Departemente Chemie und Angewandte Biowissenschaften und Biologie an der ETH Zürich.

Redaktion, soweit nicht namentlich gekennzeichnet: Dr. Oliver Renn
Gestaltung und Layout: Dr. Oliver Renn
Schlusskorrektur: Inge Vetsch

Google und französische Verlage einigen sich

Google bezahlt einmalig 60 Millionen Euro in einen Innovationsfonds der französischen Zeitungsverlage für die Auflistung (oder: das Auflisten) ihrer Artikel (mit kurzem Anriss der Inhalte) in den Suchdiensten von Google.

Lob dem Amerikanischen Geheimdienst

In einem Weblog der HTW Chur berichtet Informationswissenschaftler Prof. Semar, dass er Studierende darauf aufmerksam macht, dass E-Mails mit verschlüsseltem Inhalt, die einen Empfänger in den USA haben, mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit von amerikanischen Informations-Systemen und -Spezialisten automatisch indiziert und ausgewertet werden. Er illustriert dies mit diesem Beispiel:

Seit mehr als 40 Jahren lebte ein alter Araber in Chicago. Eines Tages wollte er gerne in seinem Garten Kartoffeln anpflanzen, aber er ist allein, alt und schwach. Daher schreibt er eine E-Mail an seinen Sohn, der seit Jahren in Paris studiert.

„Lieber Ahmed, ich bin sehr traurig, weil ich in meinem Garten keine Kartoffeln pflanzen kann. Ich bin sicher, wenn du hier wärst, könntest Du mir helfen und den Garten umgraben. Dein Dich liebender Vater.“

Wenig später erhält der alte Mann eine E-Mail aus Paris:

„Lieber Vater, bitte rühre auf keinen Fall irgendetwas im Garten an. Dort habe ich wichtige Dinge für eine heilige Mission vergraben. Dein Dich liebender Sohn Ahmed.“

Keine sechs Stunden später umstellen die US Army, die Marines, das FBI und die CIA das Haus des alten Mannes. Sie nehmen den Garten vollkommen auseinander und wühlen den ganzen Garten durch, finden aber nichts. Enttäuscht ziehen sie wieder ab. Ein paar Tage später erhält der alte Mann wieder eine E-Mail von seinem Sohn:

„Lieber Vater, ich nehme an, dass der Garten inzwischen komplett umgegraben ist. Viel Freude an Deinen Kartoffeln. In Liebe Ahmed. Gepriesen sei der amerikanische Geheimdienst.“

Machen Sie mit bei der Umfrage des Infozentrums!

Wir wissen es – es gibt zuviele Umfragen, nicht nur an der ETH. Deshalb, und weil wir eigentlich skeptisch gegenüber dem Nutzen von Umfragen sind, haben wir uns gut überlegt, ob wir uns an der „Umfrageritis“ beteiligen wollen. Wir glauben aber, dass dieser Survey helfen kann, das Infozentrum jetzt und in Zukunft optimal zu entwickeln. Dem Departementsvorsteher des D-CHAB haben wir versprochen, dass es so schnell keinen Survey mehr geben wird. Ihnen versprechen wir, dass wir nicht nur die Ergebnisse publizieren, sondern auch über die Schlussfolgerungen und Massnahmen berichten werden. Nehmen Sie also teil, nur noch bis zum **24.2. 2013!**

Hier geht es zum Fragebogen für **Studierende** (in deutscher Sprache):
https://de.surveymonkey.com/s/studenten_ICBP

Hier geht es zum Fragebogen für **Doktorierende und Postdocs** in D-CHAB, D-BIOL und D-MATL (englisch)
www.surveymonkey.com/s/phd_postdoc_ICBP

Hier geht es zum Fragebogen für **Professoren und Senior Scientists** des D-CHAB, D-BIOL, D-MATL (englisch):
www.surveymonkey.com/s/faculty_ICBP

Die Bearbeitung sollte nicht länger als 15 min. dauern, Zeit zum Nachdenken eingerechnet. Den Survey können Sie auch auf dem iPad beantworten.

Ablösung der CD-Bibliothek

Nicht nur das einst weit verbreitete Medium Mikrofilm wird verschwinden. Das Infozentrum bemüht sich derzeit, die Datenbanken, die über die CD-Bibliothek als virtualisierte CD-ROM zur Verfügung stehen, künftig als webbasierte Datenbanken zur Verfügung zu stellen. In manchen Fällen fehlt es noch an geeigneten Lizenzmodellen der Verlage – wir bleiben aber dran. Wir reduzieren damit nicht nur unseren internen Aufwand, sondern wollen es Ihnen auch leichter und bequemer machen, schnell auf die benötigten Informationen zuzugreifen. Die erste Datenbank ist bereits umgestellt, nämlich die British Pharmacopoeia (s. Beitrag S. 3).

Broschüre des Infozentrums

Über unsere Angebote und Services informiert Sie neu eine **Broschüre**, die Sie unter dem neuen Menüpunkt „**Publikationen**“ auf der Website des Infozentrums finden. Dort sehen Sie auch die aktuellen Ausgaben des Infozine, sowie aktuelle Mitteilungen in den „Infozentrum News“.



Mitarbeiter des InfoZentrums

In dieser und den nächsten Ausgaben des Infozine möchten wir Ihnen auch Mitarbeiter des Infozentrums vorstellen. Sie möchten wissen, wer der junge Mann ist, der seit letztem Sommer regelmässig auch am Infodesk zu finden ist? Es ist Jan Wyler (29), Infospezialist mit einem Bachelor der Informationswissenschaft von der Hochschule für Technik und Wirtschaft (HTW) in Chur, aber auch ausgebildeter Sortimentsbuchhändler. Er kommt von der Zürcher Kantonalbank, wo er die letzten fünf Jahre als Informationsspezialist am dortigen Info Center tätig war und bringt so Erfahrungen aus der Privatwirtschaft mit. In seiner Freizeit singt er in einem gemischten Chor und spielt Altsaxophon. Um in Form zu bleiben, ist er oft auf dem Tennisplatz anzutreffen. Für eine Partie Tennis ist er jederzeit zu haben: challenge accepted !:-)



Freier Durchblick zum Museum

Seit Mitte Januar haben Sie im H-Stock freien Durchblick zu den Vitrinen des Museums mit den pharmakognostischen und chemischen Sammlungen (www.chab.ethz.ch/museum/index).

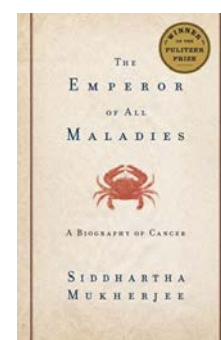


Grund dafür sind die fehlenden Mikrofiche- und Mikrofilmlesegeräte. Die gute Abdeckung durch E-Journals macht es immer seltener notwendig, auf das veraltete Medium Mikrofilm und Mikrofiche zurückzugreifen. Da die Benutzung der Mikrofilme dramatisch zurückgegangen ist, bieten wir das Kopieren ab Mikrofilm ab sofort nur noch als kostenlosen Service an. Lassen Sie sich überraschen, was mit der freiwerdenden Fläche passiert. Wir werden Sie im nächsten Infozine informieren.

Buchtipp

The Emperor of all Maladies: A biography of cancer, by Siddhartha Mukherjee, M.D.

Krebs ist in der Schweiz die zweithäufigste Todesursache. Krebs ist nicht **eine** Krankheit sondern eine ganze Familie von Krankheiten. Diese Krankheiten sind auf einem fundamentalen biologischen Level miteinander verbunden. Jeder Krebs hat sein eigenes



Gesicht, welches in einprägsamen und aufrüttelnden Geschichten beschrieben wird. Der Autor dieser Krebs-Biografie ist Arzt und Krebsforscher an der Columbia Universität. Er erzählt in einem über Jahrhunderte gespannten Bogen die wissenschaftliche, politische und kulturelle Geschichte der Krebsforschung; von Entdeckungen, Rückschlägen, Siegen und Todesfällen im Kampf gegen den Krebs. Das Buch finden Sie in CLICAPS, und es ist im Infozentrum vorhanden.
(R. Furegati)