

# iz naših knjižnica

Uređuje: Danko Škare

## Depth-First: Walking the Web of Chemical Information

Marina Mayer

Knjižnica Instituta "Ruđer Bošković"  
E-mail: marina.mayer@irb.hr

Iz informacijske "vreće bez dna" zvane "web" na površinu je isplivala jedna "riba", tj. mrežna stranica čiji sadržaj bi mogao biti koristan našim kemičarima.

Riječ je o stranici pod naslovom "Depth-First: Walking the Web of Chemical Information" na adresi <http://depth-first.com>. Na prvi pogleda klasična stranica s člancima ipak ima oblik bloga. Autor stranice je Richard Apodaca, kemičar koji se bavi i razvojem softvera. Nešto više o njemu, kao i kontakt-adresu možete naći u odjeljku *About the Author* u desnom izborniku. Stranica postoji od 2006. godine i vrlo je živa i aktualna.



Slika 1

Glavni sadržaj stranice su autorovi članci o kemijskim alatima i softverima, online informacijskim izvorima i općenitijim aktualnim temama poput otvorenog pristupa. Novi se sadržaji pojavljuju redovito svakih nekoliko dana. Za komentiranje potrebno je kliknuti na naslov članka, čime se na kraju teksta prikazuju objavljeni komentari i mogućnost stavljanja novog. Struktura je stranice jednostavna i pregledna. U izborniku s desne strane izdvojeni su najčitaniji članci (*Popular Articles*), posljednji komentari čitatelja (*Recent Comments*), arhiva članaka (*Archives*) i poveznice na izabrane blogove s kemijskim sadržajima (*Chemical Informatics*, *Cheminformatics*, and *Cheminformatics*).

Iz izbora najpopularnijih članaka svakako vrijedi izdvojiti onaj pod naslovom *Thirty-Two Free Chemistry Database*. Lista od čak trideset i dvije besplatne baze iz područja kemije svakako je dobar početak za pretraživanje interneta u potrazi za informacijama iz područja kemije. Pogledajmo detaljnije neke od najzanimljivijih:



Slika 2

**PubChem** je svakako najpoznatija baza podataka opisana u ovom članku. Sastoji se od:

PubChem Compound – kemijski spojevi ovdje su pretraživi putem imena, sinonima, ključne riječi i strukture (Structure Search) koja se može nacrtati;

PubChem Substance – na jednak način ovdje su pretražive kemijske tvari;

PubChem BioAssay – sadrži podatke o biološkim analizama.

Dio zapisa izravno je povezan s literaturom u PubMed-u putem MESH predmetnica. PubChem je povezan i s drugim bazama podataka poput Medlinea te s Entrezom (pretraživač za biomedicinu i prirodne znanosti).



Slika 3

**ZINC** sadrži podatke o više od 4,6 milijuna komercijalno dostupnih spojeva. Dio ili cijela baza podataka može se preuzeti za nekomercijalnu upotrebu.



Slika 4

**eMolecules** je pretraživač za više od 7 milijuna kemikalija. Sučelje je jednostavno, a pretraživanje vrlo brzo. Dostupne su i poveznice na druge izvore informacija o pojedinoj kemikaliji (npr. na PubChem).



Slika 5

**ChEBI** je rječnik formulskih jedinica s naglaskom na male kemijske spojeve. Dva najvažnija izvora podataka su *Integrated Relational Enzyme Database* i *Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes*. Povezana je s CAS-ovim, Beilsteinovim i Gmelinovim registarskim brojevima.

# NIST

## National Institute of Standards and Technology

Slika 6

**NIST Chemistry WebBook** sadrži većinom fizikalne podatke za organske spojeve. Pretraživanje je moguće putem kemijske formule, strukture, CAS-ovog broja i IUPAC-ovog imena.



Slika 7

**BioCyc** sadrži podatke o oko 3500 spojeva koji su enzimski supstrati, produkti, inhibitori i aktivatori enzimskih reakcija. Cijela baza podataka može se besplatno preuzeti u formatu Chemical Markup Language.

### Compendium of Pesticide Common Names

Slika 8

**Compendium of Pesticide Common Names** sadrži više od 1100 standardnih imena kemijskih pesticida po ISO-standardu. To je jedina baza podataka s ISO-nazivima pesticida. Za pregledavanje je dostupno nekoliko abecednih lista s podklasifikacijama, a opisi pesticida sadrže i CAS-broj i IUPAC-ovo ime.



Slika 9

**NMRShiftDB** sadrži NMR-snimke (Nuclear Magnetic Resonance) organskih struktura i podatke o kemijskim pomacima za više od 22000 organskih spojeva i 19000 NMR-snimaka. Zapisi su pretraživi prema IUPAC-ovom imenju, kemijskom pomaku i jezgri.

### Chemical Structure Lookup Service

Slika 10

**CSLS (Chemical Structure Lookup Service)** je metapretraživač više od 80 baza podataka. Moguće je odabrati koje vrste izvora se želi pretraživati. Jednostavno i vizualno odbojno sučelje za pretraživanje nije dovoljan razlog za izbjegavanje ovog vrlo efikasnog pretraživača.

## DrugBank



Slika 11

**DrugBank** sadrži podatke o oko 4300 lijekova i molekula na koje pojedini lijek djeluje. Pretraživanje se može ograničiti na odobrene ili eksperimentalne lijekove.

**ChemRefer** je baza podataka cjelovitog teksta pretraživa preko ključnih riječi.

**Kyoto Encyclopedia of Genes and Genome (KEGG)** sadrži bazu podataka KEGG, a sastoji se od četiri dijela: KEGG Pathway, KEGG Genes, KEGG Brite i KEGG Ligand.

**ChemBank** sadrži podatke o više od 36000 bioloških analiza malih molekula. Mnogi podaci u bazi nikada nisu objavljeni nigdje drugdje. Za korištenje je potrebna registracija. Proizvođač je Institute of Chemistry and Cell Biology (ICCB) pri Harvardu.



Slika 12

**ChemExper** sadrži kontakt-podatke o dobavljačima kemikalija. Pretraživa je putem kemijske strukture, imena, molekulske formule i CAS-broja. Korisnici ju uz registraciju mogu i nadopunjivati.

Ostale besplatne baze podataka opisane u članku su:

- ChemDB
- National Institute of Allergy and Infectious Diseases Database
- National Toxicology Program
- NIST Chemical Kinetics Database
- Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database
- IUPAC-NIST Solubility Data Series
- SOLV-DB
- NIMH Psychoactive Drug Screening Program K<sub>i</sub> Database
- BRENDA
- Biochemical Pathways Database
- ChemMine
- Organic Syntheses
- WebReactions
- Spectral Database for Organic Compounds (SDBS)
- BindingDB
- PDBind
- AffinDB
- Wikipedia

Na stranici je još mnogo članaka koji zaslužuju pažnju, poput autorovog mišljenja o otvorenom pristupu kemijskim sadržajima na internetu, praktičnih uputa i savjeta o korištenju programa, softvera i baza podataka za područje kemije... Bude li autor nastavio s aktivnim radom na svom blogu, *Depth-First* može biti vrlo koristan izvor "svježih" kemijskih informacija.