

Сс. от\* 1. Организм (биол.)

2. Психология

3. Систем теория”.

Под рубрикой “Адаптация” собираются документы, имеющие между собой весьма мало общего. Здесь, на наш взгляд, необходимо снять полисемию при помощи уточнений в скобках: “Адаптация (биол.)”, “Адаптация (психол.)”, “Адаптация (систем.)”. Подробнее об этом написано в более ранней статье автора [7].

Как видно из вышеприведенных примеров, одна из важнейших задач разработчиков вербальных ИПЯ заключается в снятии противоречия между лингвистической стороной этого ИПЯ и его информационно-поисковой прагматикой. В полной мере это относится к явлениям вариативности I и II рода.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шрайберг Я. Л. Автоматизированная библиотечно-информационная сеть: основные элементы понятийного аппарата // Автоматизированные библиотеч-

но-информационные сети и системы: проблемы разработки, функционирования и развития: Сб. науч. тр. / ГПНТБ СССР.— М., 1989.— С. 19-27.

2. Зайцева Е. М., Фуралев О. А. Формальная диагностика глагольных фраз в аннотациях в процессе автоиндексирования научно-технических текстов // Перспективные информационные технологии и концепция развития ГПНТБ СССР.— Сб. науч. тр. / ГПНТБ СССР.— М., 1991.— С. 94-102.

3. Кругликова В. П. Предметизация произведений печати: Общая методика.— М.: Книга, 1967.— 173 с.

4. Воройский Ф. С. Индексирование документов в АБИС // Библиотека.— 1996.— № 9.— С. 42-44.

5. Матлина С. Г. Библиотечное обслуживание как диалог // Сов. библиотечное ведение.— 1990.— № 6.— С. 43-51.

6. Cutter Ch. A. Rules for a printed dictionary catalogue.— Washington: Gov. print. off., 1876.— 89 p.

7. Ручимская Е. М. Некоторые предложения по унификации языка предметных рубрик // Науч. и техн. б-ки.— 1996.— № 2.— С. 56-64.

Материал поступил в редакцию 19.10.99.

УДК 004.6:577.1

В. М. Хуторецкий, В. М. Ефременкова, В. А. Тартаковский

# Соотношение классификационных схем базы данных Chemical Abstracts и соответствующих ей частей системы баз данных ВИНТИ

## ЧАСТЬ 2. ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

*Проведено сопоставление классификационных схем баз данных Chemical Abstracts и политематической системы баз данных ВИНТИ для второго тематического раздела Классификатора CAS — органическая химия. Полученные данные сопоставительного анализа классификаторов исследуемых баз данных показали близость подхода к классификации рассматриваемого раздела химии.*

Органическая химия — химия веществ живой природы — оставалась таковой до конца прошлого века. К этому времени стало ясно, что объем сведений по химии углерода и его соединений, как теперь трактуют тематику органической химии [1], значительно превышает объем сведений по химии всех остальных элементов. Это связано с тем, что атомы углерода способны образовывать цепи и циклы произвольной длины и размера. Однако из химии углерода выделяют биохимию и макромолекулярную химию. Собственно органическая химия как в СА, так и в ВИНТИ делится по классам веществ, а также включает теорию и механизмы органических реакций, методы анализа, общие процессы синтеза органических соединений. Поэтому раздел “Органическая химия” БД СА, к которо-

му отнесены секции 21-34, представлен практически полностью в одной БД ВИНТИ — “Химия” (вклад публикаций из БД “Физика” около 1%, БД “Геология” около 0.1%).

Постановка задачи и методика проведения сопоставления описаны в первой части работы [2]. Краткое описание принципов распределения материала по секциям, приведенное далее, дается на основе пояснений к каждой секции из печатной версии Chemical Abstracts.

**Секция 21 — Общая органическая химия.** В этой секции освещаются общие процессы синтеза (например: гидрирование, синтез при высоком давлении), методы исследования (препаративная хроматография), реакции, номенклатура, компьютерные приложения в той мере, в какой они приме-

\* Сс. от — ссылка от

нимы к широкому разнообразию классов органических соединений. Сюда же кроме статей входят другие материалы — обзоры, дискуссии, книги, технические отчеты и доклады на конференциях — представляющие общий интерес для химиков-органиков, как, например, исследование органических соединений неизвестного строения. Исследования общего характера по физической органической химии помещают в секцию 22; промышленное производство и переработку органических соединений — в секцию 45.

**Секция 22 — Физическая органическая химия.** Исследования кинетики и механизма реакций алифатических, циклоалифатических, ароматических и гетероциклических соединений, а также изучение спектральных, спектрохимических и термодинамических свойств, работы по корреляционному анализу и квантовой механике, если акцент в них сделан на реакции. Информацию по физической органической химии металлорганических соединений и органических природных продуктов следует искать в секциях 24 и 29–34. Если явно выражена биологическая направленность исследования, документ отражается в соответствующей биохимической секции раздела “Биохимия”. Публикации, относящиеся к фундаментальным принципам квантовой механики, термодинамики и спектроскопии, помещают в секции 65, 69 и 73 соответственно, если в работе нет явного указания на исследование структуры и реакции органических соединений.

**Секция 23 — Алифатические соединения.** Синтез, очистка, стабилизация, реакции и определение молекулярной структуры ациклических соединений углерода. Изучение их физической органической химии освещают в секции 22. Циклические производные алифатических кислот, такие как лактамы и лактоны, отнесены к секциям 27 и 28; производство, переработка и свойства обычных мономеров — к секциям 35–37 и 39 раздела “Макромолекулярная химия”; производство алифатических соединений с целью их использования в качестве или в составе топлива — к секции 51 раздела “Прикладная химия”. Промышленное производство и переработку продуктов, отнесенных к секции 23, обычно включают в секцию 45.

**Секция 24 — Алициклические соединения.** Синтез, очистка, стабилизация, реакции и определение структуры молекул алициклических соединений углерода, включая полностью гидрированные производные полиядерных конденсированных бензольных соединений и таких ароматических соединений, как азулены, фульвены и тропоны. Изучение их физико-органических свойств включено в секцию 22. Циклические производные алициклических кислот, типа лактамов и лактонов, отнесены к секциям 27 и 28; простагландины и другие алициклические природные продукты и их синтетические аналоги — к секции 26; промышленное производство и переработка веществ, обычно относимых к данной секции, входит в секцию 45.

**Секция 25 — Бензол, его производные и конденсированные бензоидные соединения.** Синтез, очистка, стабилизация и реакции бензола и его производных, а также конденсированных карбоциклических соединений, содержащих по край-

ней мере одно сопряженное бензольное ядро. Изучение физической органической химии этих веществ отнесено к секции 22; циклические производные кислот, такие как ангидриды и лактоны — к секциям 27 и 28; производство бензола и его производных, предназначенных для использования в качестве топлива, — к секции 51. Производство, переработку и свойства обычных мономеров освещают в секциях 35–37 и 39; промышленное производство и переработку соединений, обычно относимых к этой секции, включают в секцию 45.

**Секция 26 — Биомолекулы и их синтетические аналоги.** Синтез, реакции, изучение физической органической химии и определение молекулярной структуры встречающихся в природе  $\beta$ -лактамов и других антибиотиков, простагландинов, флавоноидов, порфиринов, феромонов и витаминов, включая аналоги и промежуточные продукты для их синтеза, но исключая природные продукты, отнесенные к более конкретным секциям раздела “Биохимия”. Использование простых биомолекул в небиологических целях, например, небиологическое использование этанола, лимонной кислоты, кумарина или фурфурала, относят к соответствующей биоорганической или другой секции раздела “Биохимия”. Работы, в которых сообщается о выделении и/или определении структуры, — к секции 11 или другой секции раздела “Биохимия”; химический синтез, в котором центральное место занимает ферментативная стадия — к секции 16.

**Секция 27\* — Гетероциклические соединения с одним гетероатомом.** Синтез, очистка, стабилизация, реакции и определение структуры молекул циклических соединений, содержащих в одном кольце два и более атомов углерода и не более одного гетероатома (азот, кислород, сера, галоген), а также спиросоединения с одним гетероатомом в каждом кольце. Исследование физической органической химии этих соединений отнесено к секции 22; сведения о получении, обработке и свойствам обычных мономеров типа капролактама, окисей этилена и пропилена, если только не подчеркнуто в явном виде их немономерное применение, отнесено к секциям 35 и 36; промышленное производство и переработка соединений, которые обычно относят к данной секции, включены в секцию 45.

**Секция 28\* — Гетероциклические соединения с более чем одним гетероатомом.** Синтез, очистка, стабилизация, реакции и определение структуры молекул, содержащих в одном цикле один и более атомов углерода наряду с двумя и более в сумме гетероатомов (азот, кислород, сера или галоген). Изучение их физической органической химии отнесено к секции 22. Цефалоспорины, пенициллины, их аналоги и промежуточные продукты в части их получения включены в секцию 26; нуклеозиды и нуклеотиды — в секцию 33; промышленное производство и переработка соединений, которые обычно включают в данную секцию, отнесены к секции 45.

**Секция 29 — Металлорганические и элементорганические соединения.** Синтез, стабилизация, очистка, исследование физической органической химии и определение структуры соеди-

\* Секции 27 и 28, в отличие от всех остальных секций, имеют деление на подсекции в печатном издании СА по размерам цикла (трех-, четырех-, пяти- и т. д. членные циклы) и числа и характера гетероатомов в цикле.

нений, которые содержат одну или более металлуглеродную или элемент-углеродную ковалентную (сигма или пи) связь. Сюда же включают металлогетероциклы, не содержащие связей углерод—металл в цикле (например, боразин, фосфазен, циклотрисилоксан) или гомоциклы (например, циклогерман); простые карбонилы, цианиды, карбиды или цианаты металлов относятся к секциям 49 и 78.

**Секция 30 — Терпены и терпеноиды.** Синтез, реакции, физико-химические свойства, идентификация, исследование структуры терпенов и терпеноидных соединений, имеющих углеродный скелет, большая часть которого может рассматриваться как построенная путем слияния двух и более изопреновых единиц. Сюда же включают стероидные терпеноиды, а также розины, толловое масло, смоляные кислоты и скипидар, если отмечены специфические терпеноидные компоненты. Терпеноидные алкалоиды отнесены к секции 31. Исследования по выделению, также как и работы, связанные и с выделением, и с идентификацией или оценкой структуры — к секции 11 или другим секциям раздела “Биохимия”.

**Секция 31 — Алкалоиды.** Синтез, реакции, идентификация, физико-химические свойства, изучение структуры алкалоидов (азотистых оснований растительного, животного или микробного происхождения с характерной типичной физиологической активностью), а также их аналоги и промежуточные продукты их синтеза, включая терпеноидные и пептидные алкалоиды. Стероидные алкалоиды отнесены к секции 32; выделение, а также те работы, где наряду с выделением проводится идентификация или устанавливается структура, относят к секции 11 или другой биохимической секции. Биологические амины (такие как фенилэтиламин и тирамин) и пуриновые производные (такие как кофеин, теобромин или теофиллин) освещают в секции 26.

**Секция 32 — Стероиды.** Синтез, идентификация, физико-химические свойства, изучение структуры стероидов — веществ, содержащих структуру циклопента[а]фенантрена, которые могут иметь растительное, животное или микробное происхождение, а также очень близкие к ним соединения, включая стероидные алкалоиды. Терпеноидные структуры отнесены к секции 30, а стероидные сапонины — к секции 33. Выделение, а также те работы, где наряду с выделением проводится идентификация или определяется структура, относят к секции 11 или другой секции раздела “Биохимия”; химический синтез, в котором ключевая стадия ферментативна, — к секции 16.

**Секция 33 — Углеводы.** Непромышленный синтез, реакции, физико-химические свойства и изучение структуры трех- и более членных углеводов, их производных и полимеров, включая нуклеозиды, нуклеотиды, стероидные сапонины и химический и полухимический синтез нуклеиновых кислот. Выделение, а также работы, где наряду с выделением производится идентификация или установление структуры, относят к секции 11 или другой биохимической секции; химический синтез, в котором ключевая стадия ферментативна, — к секции 16. Гликопептиды и гликопротеины включа-

ют либо в секцию 34, либо в биохимическую секцию. Углеводы, имеющие коммерческое или промышленное значение, например, тростниковый и свекловичный сахар, мелассы, крахмалы, камеди, растительные клеи и пектины, относят к секции 44 раздела “Макромолекулярная химия” или к разделу “Биохимия”.

**Секция 34 — Аминокислоты, пептиды и белки.** Синтез, реакции, идентификация, физико-химические свойства, изучение структуры аминокислот и пептидов растительного, животного и микробного происхождения, а также их производные, включая поли(аминокислоты) и полипептидные последовательности, полученные из аминокислот, встречающихся в природе, гликопептиды и химический или полухимический синтез белков и гликопротеинов. Другие исследования белков и гликопротеинов, включая аминокислотные композиции и последовательности, а также функциональные группы и сшивки, относят к секции 66. Синтез и свойства поли(аминокислот) или их производных, которые в первую очередь используются (или могут использоваться) в качестве пластиков или волокон, или которые получены или изучены ради их макромолекулярных свойств, относят к секциям 35, 36 или 40.

Выбор рубрик БД ВИНТИ, относящихся к тематике каждой секции СА, проводился с учетом вышеприведенного описания принципов распределения материала по секциям и на основе пояснений к каждой секции из “Subject Coverage and Arrangement of Abstracts by Section in Chemical Abstracts” [3]. Перечень рубрик (второго или третьего) уровней Рубрикатора ВИНТИ [4] разделов “Химия и химическая технология”, “Физико-химическая биология”, “Физика” и “Геология”, в которых могут быть отражены публикации, относящиеся к тематике анализируемого раздела “Органическая химия” СА представлены в табл. 1.

Таблица 1

Перечень основных рубрик второго или третьего уровней Рубрикатора ВИНТИ, тематически сопоставимых с секциями СА “Органическая химия”

Рубрика	Содержание рубрики
311.21	Органическая химия
311.23	Природные органические соединения и их синтетические аналоги
314.23	Биоорганическая химия БД (“Физико-химическая биология”)
611.45	Технология химико-фармацевтических средств
611.57	Технология природных высокомолекулярных соединений
383.23.25	Органическая геохимия (БД “Геология”)
291.19.31	Полупроводники (БД “Физика”)

Результаты сопоставительного анализа представлены в табл. 2.

## Сопоставление секций раздела "Органическая химия" Классификатора СА и рубрик рубрикатора ВИНТИ

СА		ВИНТИ	
Секция	Наименование секции	Рубрика	Содержание рубрики
21.	General Organic Chemistry	311.21.01 311.21.19 311.23.01  291.19.31.41 291.19.04.15.17  <i>Альтернативные рубрики:</i> 383.33.25	Общие вопросы органической химии Общие синтетические методы Общие вопросы химии природных органических соединений и их синтетических аналогов Органические полупроводники Строение органических аморфных и аморфно-кристаллических твердых тел  Органическая геохимия (секция 53)
22.	Physical Organic Chemistry	311.21.15 311.21.17 311.21.18	Вопросы строения и стереохимия Реакционная способность Механизмы органических реакций
23.	Aliphatic Compounds	311.21.21 <i>Альтернативные рубрики:</i> 611.45.31.15	Алифатические соединения  Алифатические соединения, синтетические лекарственные вещества (секция 63)
24.	Alicyclic Compounds	311.21.23 <i>Альтернативные рубрики:</i> 611.45.31.17	Алициклические соединения  Алициклические соединения, синтетические лекарственные вещества (секция 63)
25.	Benzene, Its Derivatives and Condensed Benzenoid Compounds	311.21.25 <i>Альтернативные рубрики:</i> 611.45.31.19	Ароматические соединения  Ароматические соединения, синтетические лекарственные вещества (секция 63)
26.	Biomolecules and their Synthetic Analogs	311.23.23 311.23.35 311.23.37 311.23.39  311.23.41 311.23.43 311.23.99 <i>Альтернативные рубрики:</i> 611.45.31.25, 611.45.31.33, 611.45.31.35, 611.45.31.45, 611.45.31.47, 611.45.31.99 314.23.23 314.23.25 314.23.35 314.23.39  311.23.99	Витамины, коферменты Лейкотриены и простагландины Феромоны Кумарины, флавоноиды, антоцианины и родственные соединения Порфирины, хлорофиллы и другие природные пигменты Макролиды и их аналоги Прочие природные органические соединения  Органические синтетические лекарственные вещества (секция 63)  Витамины, коферменты (секция 6) Антибиотики (секция 6) Лейкотриены и простагландины (секция 6) Кумарины, флавоноиды, антоцианины и родственные соединения (секция 6) Прочие природные органические соединения (секция 6)
27.	Heterocyclic Compounds (One Hetero Atom)	311.21.27.15 311.21.27.17 311.21.27.19 <i>Альтернативные рубрики:</i> 611.45.31.21	Кислородсодержащие гетероциклические соединения Серосодержащие гетероциклические соединения Азотсодержащие гетероциклические соединения  Гетероциклические соединения, синтетические лекарственные вещества (секция 63)
28.	Heterocyclic Compounds (More Than One Hetero Atom)	311.21.27.21 311.21.27.22 311.21.27.23 311.21.27.25  <i>Альтернативные рубрики:</i> 611.45.31.21	Гетероциклические соединения с кислородом и серой Гетероциклические соединения с кислородом и азотом Гетероциклические соединения с серой и азотом Гетероциклические соединения с несколькими различными гетероатомами  Гетероциклические соединения, синтетические лекарственные вещества (секция 63)

СА		ВИНИТИ	
Секция	Наименование секции	Рубрика	Содержание рубрики
29.	Organometallic and Organometalloidal Compounds	311.21.29 <i>Альтернативные рубрики:</i> 611.45.31.23	Элементоорганические соединения Элементоорганические соединения, синтетические лекарственные вещества (секция 63)
30.	Terpenes and Terpenoids	311.23.17 <i>Альтернативные рубрики:</i> 611.45.31.27 314.23.17	Терпены и родственные соединения Терпены, синтетические лекарственные вещества (секция 63) Терпены и родственные соединения (6)
31.	Alkaloids	311.23.21 <i>Альтернативные рубрики:</i> 611.45.31.31 314.23.21	Алкалоиды Алкалоиды, синтетические лекарственные вещества (секция 63) Алкалоиды (секция 6)
32.	Steroids	311.23.19 <i>Альтернативные рубрики:</i> 611.45.31.29 314.23.19	Стероиды и родственные соединения Стероиды, синтетические лекарственные вещества (секция 63) Стероиды и родственные соединения (секция 6)
33.	Carbohydrates	311.23.15 311.23.29 <i>Альтернативные рубрики:</i> 611.45.31.39  611.57.31 314.23.15 314.23.29	Углеводы и родственные соединения Нуклеозиды, нуклеотиды, нуклеиновые кислоты Нуклеозиды, нуклеотиды, нуклеиновые кислоты, синтетические лекарственные вещества (секция 63) Высшие полисахариды и их производные, лигнин (секция 39) Углеводы и родственные соединения (секция 6) Нуклеозиды, нуклеотиды, нуклеиновые кислоты (секция 6)
34.	Amino Acids, Peptides and Proteins	311.23.27 <i>Альтернативные рубрики:</i> 611.45.31.37  314.23.27	Аминокислоты, пептиды, белки Аминокислоты, пептиды, синтетические лекарственные вещества (секция 63) Аминокислоты, пептиды, белки (секция 6)

Следует отметить, что деление СА по секциям выдерживается почти постоянным [2], несмотря на изменение интересов химического сообщества, выражаемое в числе документов, отнесенных к различным секциям. Очевидно, что такая стабильность поддерживается намеренно, в интересах постоянных пользователей, но она приводит к очень большой разнице в наполнении секций (отношение max/min до 15-кратного).

\* \* \*

Авторы признательны CAS и ВИНТИ за возможность использования их баз данных.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 98-07-90122а)

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Большой энциклопедический словарь "ХИМИЯ". — М.: Большая Российская энциклопедия, 1998. — 791 с.
2. Ефременкова В. М., Каменская М. А., Хуторецкий В. М. Соотношение классификационных схем базы данных Chemical Abstracts и соответствующих ей частей системы баз данных ВИНТИ. Ч. 2. Биологическая химия // НТИ. Сер. 1. — 1999. — № 12. — С. 20-34.
3. Subject Coverage and Arrangement of Abstracts by Section in Chemical Abstracts. CAS, Columbus, 1997. — 312 p.
4. Рубрикатор информационных изданий ВИНТИ. — М.: ВИНТИ, 1999. — 448 с.

Материал поступил в редакцию 25.11.99.