

# L'INIST-CNRS

## et les services du portail TitaneSciences

Nathalie Antonot  
Ingénieur documentaliste – INIST-CNRS

## L'INIST-CNRS

### INstitut de l'Information Scientifique et Technique du CNRS

#### Services de signalement et d'accès à l'information, permettant la diffusion des résultats de la recherche

- **Services de recherche et de signalement de l'information :**
  - **Fourniture de documents**, grâce à une importante collection de publications scientifiques
  - Production de **bases de données bibliographiques**
  - Réalisation de **portails d'information** permettant l'accès mutualisé à un ensemble de ressources numériques
  
- **Expertise en Information Scientifique et Technique :**
  - **Edition** numérique
  - **Veille** documentaire
  - **Formations** en Information Scientifique et Technique
  - **Terminologie, ingénierie** de l'information

## Fourniture de documents

### ❑ Fonds documentaire :

- 20 000 titres de périodiques dont 6 500 collections en cours
- 75 000 rapport scientifiques
- 115 000 comptes rendus de congrès français et internationaux
- 125 000 thèses françaises de Sciences et Techniques
- 13 000 ouvrages

### ❑ Fourniture de copies de documents :

- Plusieurs modes de commande et de livraison, dont un **mode de transmission électronique**
- Tarif préférentiel pour les laboratoires CNRS, INSERM, et autres organismes de recherche

### ❑ Catalogue électronique du fonds documentaire : [article@inist](mailto:article@inist), **cat.inist**

### ❑ Refonte en cours : système **ReFDoc** mis en service en janvier 2010. Interface unique, 35 millions de références d'articles, ouvrages, rapports

# Bases de données bibliographiques

## □ Base PASCAL :

- Plus de **17 millions de références en science, technologie et médecine**, depuis 1973
- Mots-clés en anglais et français, et en espagnol
- 3 100 titres analysés en 2008 ; 480 000 références ajoutées par an
- Quelques exemples de thèmes transversaux : pharmacologie, nanotechnologie, environnement, biodiversité et développement durable
- Partenariats : BDSP, ICONDA, TI, ...
- Diffusée sur différents serveurs : Datastar, Dialog, Ovid, STN, ...

## Bases de données bibliographiques

### □ Base FRANCIS :

- Près de **3 millions de références en sciences humaines et sociales**, depuis 1972
- Plus de 2 000 titres analysés en 2008 ; près de 30 000 références ajoutées par an
- Partenariats : DOGE, ERUDIT, DAPHNE, ...
- Diffusée sur : Ovid, OCLC, ...

### □ Base ISD (International Science Database) :

- Plus de **15 millions de références en science, technologie, médecine et sciences humaines et sociales**, depuis 1990
- Diffusée sur : Ovid
- Accès réservé au CNRS

## Portails d'information scientifique et technique

- Présentent des ressources documentaires (bases de données et revues) négociées par le CNRS et mises à la disposition des laboratoires du CNRS
  
- **Les portails :**
  - **BiblioCNRS** : réservé aux membres du CNRS. Inscription préalable. Présente l'ensemble des ressources négociées par le CNRS. Personnalisable
  - **BiblioPI@nets** : destiné aux unités CNRS des domaines Planète et Univers
  - **BiblioSHS** : unités de l'Institut des Sciences Humaines et Sociales (INSHS)
  - **BiblioST2I** : unités de l'Institut des Sciences et Technologies de l'Information et de l'Ingénierie
  - **BiblioVie** : unités de l'Institut des Sciences Biologiques (ISB)
  - **TitaneSciences** : unités de l'Institut de Chimie (INC) (ressources réservées CNRS) et laboratoires universitaires (ressources payantes)
  - **BiblioSciences** : unités CNRS de Mathématiques, Physique, Environnement, Moyens Communs
  - **Archives de l'IOP** (Institute Of Physics) : toute unité CNRS. Nombre d'inscriptions limité

## Les autres services

- ❑ **Veille** : Veille sur Internet, recherches bibliographiques, dossiers de synthèse, identification d'experts. Prestations sur devis
- ❑ **I-revues** : Propose aux éditeurs de tout domaine scientifique la **diffusion électronique de leurs revues ou livres**
- ❑ **Formation** : Formations en IST, à l'INIST, sur site ou à distance (WEBEX)
- ❑ **Terminologie** : portail TermSciences : multidisciplinaire (STM, SHS) et multilingue
- ❑ **Ingénierie** de l'information
- ❑ **Sites d'actualité** dans différents domaines : agroalimentaire, santé, recherche polaire, IST



# TitaneSciences

## Service d'information en sciences chimiques

<http://titanesciences.inist.fr>



## 2 types de services

### □ Bases de données spécialisées :

- CrossFire **Beilstein**, CrossFire **Gmelin**, bases **ISIS**, hébergées par l'INIST-CNRS
- À destination des unités CNRS et des établissements universitaires
- Accessibles sur abonnement
- **Cambridge Structural Database (CSD)**, réservée aux laboratoires CNRS, sur demande

### □ Services réservés aux unités Chimie du CNRS :

- Ressources négociées par le CNRS et mises à disposition de ses unités
- Bases de données bibliographiques
- Revues et livres électroniques en texte intégral



Services d'information en sciences chimiques

TitaneSciences est un service d'information en sciences chimiques développé par l'INIST-CNRS à la demande du Ministère délégué à la Recherche et de l'Institut de Chimie du CNRS.

Il présente des bases de données factuelles en chimie hébergées par l'INIST-CNRS et des ressources documentaires, en libre accès ou en accès réservé.

TitaneSciences ?

CrossFire Beilstein et Gmelin

MDL@ISIS

Cambridge Structural Database

S'abonner aux bases CrossFire, MDL et CSD

Services réservés CNRS-Chimie

Aides / Tutoriels

Sélection de sites

Nous contacter

Rechercher  
Sur le WEB du CNRS



### Informations générales

Rencontres 2009 des Professionnels de l'IST

Campagne de tests de ressources 2009

Déclaration de l'International Coalition of Library Consortia

Acquisitions électroniques 2009 pour TitaneSciences

- avril 2009 - [ADIT - Nouveaux Rapports d'Ambassades](#)
- janvier 2009 - [Information sur le renouvellement du groupement de commande Springer](#)
- janvier 2009 - [Changement des codes d'accès aux ressources CNRS](#)

[Voir toutes les actualités](#)

### Mises à jour CrossFire

- juin 2009 - [Mise à jour de la base CrossFire Beilstein](#)
- janvier 2009 - [Mise à jour de la base CrossFire Gmelin](#)
- juillet 2008 - [Informations sur la mise à jour Beilstein BS0802](#)

[Voir toutes les mises à jour](#)

Mise à jour des bases ISIS

### Services réservés de l'Institut de Chimie du CNRS

#### Bases de données

- [Webspurs Multibases](#)
- [Web of Knowledge](#)
- [OvidSP](#)
- [Cambridge Structural Database](#)
- [Engineering Village](#)
- [Liste des bases de données](#)

#### Documents en texte intégral

- [Rechercher une revue](#)
- [Elsevier ScienceDirect](#)
- [Journals@Ovid FT](#)
- [SpringerLink](#)
- [Archives de l'IOOP](#)
- [Revue ACS](#)
- [L'Actualité Chimique](#)
- [Livres électroniques](#)
- [Obtenir une copie de document](#)

#### Contacts/Informations

- [Unités et personnels CNRS ayants droit](#)

## Services réservés

- Bases bibliographiques
- Revues et livres électroniques

## Informations

- Liste des unités ayants-droit
- Inscrire son unité

Basés spécialisés

Actualités et mises à jour



## Nouvelle version du portail

- ❑ Disponible fin 2009
- ❑ Système d'onglets pour les différents types de ressources
- ❑ Service recentré sur les ressources réservées, accessibles dès la page d'accueil



# Bases de données spécialisées



## Bases CrossFire (Elsevier) et ISIS (Symyx)

### □ CrossFire Beilstein

- Base factuelle spécialisée en **chimie organique**
- 11 millions de composés organiques avec leurs propriétés associées
- 22 millions de réactions
- 2 millions de références bibliographiques

### □ CrossFire Gmelin

- Base factuelle spécialisée en **chimie minérale**
- 2,6 millions de composés minéraux et organométalliques avec leurs propriétés associées
- 2 millions de réactions
- 1,3 million de références bibliographiques

### □ Bases ISIS

- 12 bases de données spécialisées en **synthèse organique, bioactivité, toxicologie, métabolisme**

Ces bases sont interrogeables par recherche structurale, sous-structurale ou par recherche de réactions.

Elles sont accessibles sur abonnement.



## Un exemple de recherche de composé dans CrossFire Beilstein

MDL CrossFire Commander - [Beilstein(2005/02):Q01 Substance 1 of 1]

File Edit Task View Options Window Help

MDL CrossFire Commander Query Results Reports Alerts AutoNom Substances: hit 1 of 1

History | Print Hits | View all | Show Grid | List | Get | Sort Hits | Copy | Export Hits | Copy to Report

Gmelin(2005/02)  
Beilstein(2005/02)  
  Saved Hitssets/Alert Hitssets  
  Session Hitssets  
    Q: Q01 (1 Substances)

### Substance Identification

Beilstein Registry Number **779271**

Beilstein Preferred RN 50-78-2

CAS Registry Number 50-78-2

Chemical Name  
2-acetoxy-benzoic acid  
2-Acetoxy-benzoésaeure  
acetylsalicylic acid  
salicylic acid acetate  
2-(acetyloxy)-benzoic acid  
O-acetyl-salicylic acid  
**aspirin**

Autoname 2-acetoxy-benzoic acid

Molecular Formula  $C_9H_8O_4$

Molecular Weight 180.16

Lawson Number 11694, 1155

Type of Substance isocyclic

Constitution ID 665551

Tautomer ID 705488

Beilstein Reference 0-10-00-00067, 1-10-00-00028, 2-10-00-00041, 3-10-00-00102, 4-10-00-00138, 5-10, 6-10

BRN=779271

Field Availability List 1-10 of 58

Code Field Name idle ALL Substances

identification

structure

58 propriétés



## Exemple de propriétés pour ce composé

MDL CrossFire Commander - [Beilstein(2005/02):Q01 Substance 1 of 1]

File Edit Task View Options Window Help

MDL CrossFire Commander Query Results Reports Alerts AutoNom Substances: hit 1 of 1

History | Print Hits | View all | Show Grid | List | Get | Sort Hits | Copy | Export Hits | Copy to Report

Gmelin(2005/02)  
Beilstein(2005/02)  
Saved Hitsets/Alert Hitsets  
Session Hitsets  
Q: Q01 (1 Substances)

### Field Availability List 1-10 of 58

Code	Field Name	Occ.
<b>PHARM</b>	Bioactivity: Pharmacological Data	1059
<b>ECC</b>	Ecological Data: Ecotoxicology	26
<b>ECC</b>	Ecological Data: Concentration in the Environment	2
<b>ECDH</b>	Ecological Data: Abiotic Degradation, Hydrolysis	1
<b>RX</b>	Reaction	281
<b>CDER</b>	Derivative	26
<b>PUR</b>	Purification	1
<b>CNF</b>	Conformation	1
<b>IDA</b>	Interatomic Distances and Angles	3
<b>EM</b>	Electrical Moment	3

1059 données pharmacologiques

281 réactions

### Field Availability List 11-20 of 58

Code	Field Name	Occ.
<b>ELP</b>	Electrical Polarizability	1
<b>CPD</b>	Crystal Property Description	2
<b>MP</b>	Melting Point	43
<b>CRYPH</b>	Crystal Phase	23
<b>DP</b>	Decomposition	1
<b>CPTP</b>	Transition Point(s) of Crystalline Modification(s)	1
<b>CSYS</b>	Crystal System	3
<b>CSG</b>	Space Group	2
<b>CDEN</b>	Density of the Crystal	11
<b>LIQPH</b>	Liquid Phase	1

### Field Availability List 21-30 of 58

For Help, press F1 | idle | ALL | Substances



## Un exemple de recherche de réactions dans CrossFire Beilstein

MDL CrossFire Commander - [Beilstein(2005/02):Q02 Reaction 1 of 14]

File Edit Task View Options Window Help

MDL CrossFire Commander Query Results Reports Alerts AutoHom Reactions: hit 1 of 14

History | Print Hits | View all | Show | Grid | List | Get | Sort Hits | Copy | Export Hits | Copy to Report

- Gmelin(2005/02)
- Beilstein(2005/02)
  - Saved Hitsets/Alert Hitsets
  - Session Hitsets
    - Q: Q01 (14 Reactions)
    - Q: Q02 (14 Reactions)**

Hit 1 RX.ID=758128

Reactant 1 → Product 1

Hit 2 RX.ID=2239231

Hit 3 RX.ID=2239236

Reactant 1 → Product 1

Hit 4 RX.ID=3551844

For Help, press F1 | Idle | GRID | Reactions



## Les bases ISIS

- ❑ **Available Chemicals Directory**
  - base de 500 000 produits chimiques commerciaux
- ❑ **Comprehensive Medicinal Chemistry**
  - informations de type structure-activité pour 9000 composés
- ❑ **Drug Data Report**
  - 195 000 composés biologiquement actifs étudiés pour la conception de médicaments
- ❑ **National Cancer Institute Databases**
  - base de 213 000 composés étudiés pour leurs propriétés anticancéreuses et anti-VIH
- ❑ **Toxicity Database**
  - base de 167 000 substances chimiques toxiques
- ❑ **Metabolite Database**
  - 90 000 transformations métaboliques de composés xénobiotiques
- ❑ **Reaction Browser**
  - 6 bases en synthèse organique, contenant plus de 1,4 million de réactions



## La base Cambridge Structural Database (CSD)

- ❑ Base factuelle spécialisée en **crystallographie**
- ❑ Editée par le Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC)
- ❑ Diffusée par l'INIST aux laboratoires CNRS sur simple demande
- ❑ Base sur CDROM (1 poste) ou en ligne via l'INIST
- ❑ Structures cristallines de **456 000 composés organiques ou organométalliques**
- ❑ Techniques de diffraction RX ou neutron

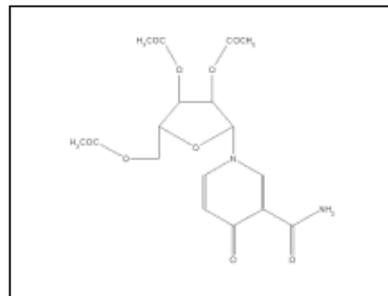


## La base Cambridge Structural Database (CSD)

### 1D Bibliographic Information

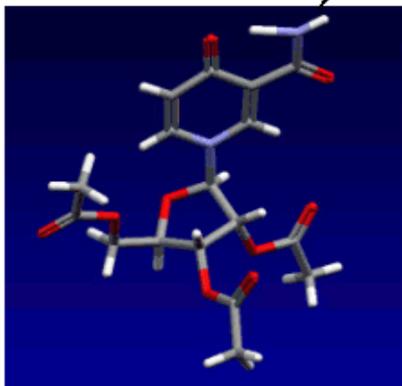
**BASYOJ**  
 4-Oxonicotinamide-1-  
 (1'-beta-D-2',3',5'-tri-O-  
 acetyl-ribofuranoside)  
 Source: Rothmannia longiflora  
 C17 H20 N2 O9  
 G. Bringmann, M. Ochse, K. Wolf,  
 J. Kraus, K. Peters, E-M. Peters,  
 M. Herderich, L. Ake, F. Tayman  
*Phytochemistry* 51 (1999), p271

### 2D Chemical Connectivity

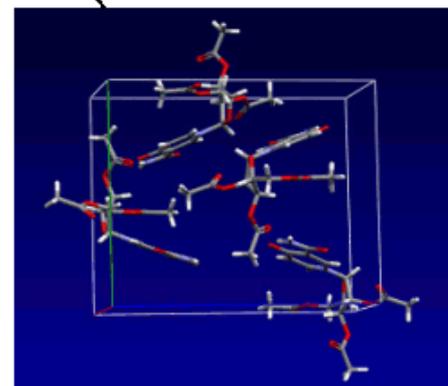


**CSD**

### 3D Molecular Structure



### 3D Crystal Structure



Source : CCDC



## Applications associées

- ❑ **ConQuest** : système d'interrogation (recherches textuelles, numériques, structurales, combinées)
- ❑ **VISTA** : logiciel d'analyses statistiques
- ❑ **Mercury** : logiciel de visualisation 3D
- ❑ **Mogul** : base de géométrie moléculaire
- ❑ **PreQuest** : logiciel de création de bases de données locales en format CSD (sous Unix)
- ❑ **IsoStar** : base d'interactions intermoléculaires (sous Unix)



# Services réservés aux unités Chimie du CNRS



## Bases de données bibliographiques

- Plateforme **WebSpirs** : remplacée en 2009 par **OvidSP** :
  - **PASCAL** (STM), **FRANCIS** (SHS), **ISD**, **Current Contents** (multidisciplinaire), **INSPEC** (physique, électronique), **MEDLINE** (médecine), **Compendex** (ingénierie), **NTIS** (rapports techniques américains)
  
- **ISI Web of Knowledge** :
  - **Web of Science** (Science Citation Index, Index Chemicus, Conference Proceedings), **Current Contents**, **MEDLINE**
  - Web of Science contient des données de citations et permet de calculer l'indice h
  - Outils d'analyse : **Journal Citation Reports** (facteurs d'impact), Essential Science Indicators
  - Outil de gestion bibliographique : **EndNote Web**
  
- **Engineering Village** :
  - **Compendex**
  - 2 collections de livres électroniques **en ingénierie**



## Revue et livres en texte intégral

- ❑ Plateforme **ScienceDirect** :
  - Plus de 1900 revues et une sélection d'archives de l'éditeur Elsevier
  - Collection de livres électroniques en Chimie de cet éditeur
  
- ❑ **SpringerLink** :
  - 1300 revues de l'éditeur Springer
  
- ❑ **American Chemical Society** : 34 titres
  
- ❑ **L'Actualité Chimique**, éditée par la SCF
  
- ❑ **Journals@Ovid Full Text** : sélection de revues, dont Science (1993-2003), et Nature
  
- ❑ **Archives de l'IOP** :
  - Archives de 60 titres de l'**Institute of Physics** (IOP) (unités CNRS inscrites)
  
- ❑ **Engineering Village** : 2 collections de livres électroniques **Referex Engineering**
  - Mechanical Engineering and Materials
  - Civil and Environmental Engineering



## Modalités d'accès

- Après inscription au portail, les unités CNRS Chimie reçoivent un **code d'accès**, permettant de s'identifier pour la consultation des bases bibliographiques, revues et livres électroniques



Vous souhaitez consulter une plate-forme d'éditeur, une revue, une base bibliographique en abonnement mutualisé pour vos unités du CNRS. Veuillez **vous identifier pour accéder à ce service**.

Nom :	<input type="text"/>
Mot de passe :	<input type="password"/>
	<input type="button" value="Login"/>

Vous n'aurez plus à vous identifier pour utiliser les autres plates-formes, revues ou bases pendant toute la session (jusqu'à ce que vous quittiez votre navigateur).



## Pour toute information

<http://www.inist.fr>  
[assistance-portail@inist.fr](mailto:assistance-portail@inist.fr)

<http://titanesciences.inist.fr>  
[titanesciences@inist.fr](mailto:titanesciences@inist.fr)