

# Química en pant@lla

Jaume Farràs

Una de les tasques més freqüents del químic és la recerca d'informació. Tant si es tracta de mantenir-se al dia en un determinat camp de treball o, simplement, de trobar la manera més eficient de resoldre qualsevol dels problemes pràctics que apareixen en l'exercici quotidià de la professió, el químic necessita consultar sistemàticament la informació publicada en les revistes especialitzades. Però aquesta tasca no és gens fàcil. Fa cent anys, n'hi havia prou amb unes quantes revistes i els famosos *Handbuch der Organischen Chemie*, del professor Beilstein, i *Handbuch der Anorganischen Chemie*, del professor Gmelin. Avui en dia, però, la producció científicotecnològica és tan enorme que resulta poc pràctic cercar la informació directament a la literatura primària. És en aquest punt on les bases de dades especialitzades entren en joc i Internet les ha posades a l'abast dels nostres ordinadors personals. Això, juntament amb el nombre creixent de revistes especialitzades que ofereixen l'accés en línia als seus articles, està canviant de manera radical la manera de treballar del químic actual.

Sens dubte la base de dades més extensa i completa és la del Chemical Abstracts Service, CAS (<http://www.cas.org>), que és una divisió de l'American Chemical Society (<http://www.chemistry.org>). Des de 1907, el CAS es dedica a inspeccionar, resumir i indexar de manera extensiva la literatura química especialitzada. El CAS entén la química en el sentit més ampli del terme i inclou la literatura de tots aquells camps de coneixement on aquesta disciplina hi juga un paper rellevant. El resultat és una base de dades enorme que inclou uns vint-i-quatre milions de resums d'articles científics i de patents que, en conjunt, descriuen uns vint-i-vuit milions de substàncies químiques i cinquanta-set milions de seqüències de proteïnes i d'àcids nucleics. No deixa de ser curiós que, fins i tot avui en dia, la informació recopilada pel CAS encara es publiqui en suport escrit, però l'enorme volum de la informació disponible fa que aquest hagi esdevingut un format poc pràctic. Per això, des dels anys seixanta, el CAS s'ha anat informatitzant cada cop més fins al punt que, actualment, ofereix tot un ventall d'eines informàtiques per a accedir a les seves bases de dades (<http://www.cas.org/prod.html>). Les més noves són el SciFinder i la seva variant acadèmica, el SciFinder Scholar, que permeten accedir de forma gràfica, fàcil i intuïtiva a la informació del CAS des de qualsevol ordinador personal connectat a Internet. Les tarifes d'accés al SciFinder són prohibitives, però aquells professionals que treballen en empreses o institucions que se'n poden permetre una llicència saben prou bé que el preu s'ho val. Aquells que no tinguen accés al SciFinder poden fer-vos una idea de les seves prestacions amb els *tutorials* i *e-seminars* que trobareu a la seva web (<http://www.cas.org/SCIFINDER/SCHOLAR/resources.html>).

L'accés al SciFinder es fa a través d'un programa client que cal instal·lar a l'ordinador. Aquest és un programa que permet cercar informació de múltiples maneres dins la base de dades. Així, a més de les típiques cerques per paraules clau, autor o nom químic, també incorpora un cercador *intelligent* on podem introduir conceptes més elaborats com, per exemple, "intramolecular hydroamination of aminoalkenes" o "the effect of antibiotic residues on dairy products". El resultat de la cerca és una llista exhaustiva de tots els treballs publicats sobre el tema en qüestió, amb el seu resum corresponent i la possibilitat de descarregar els articles originals a través

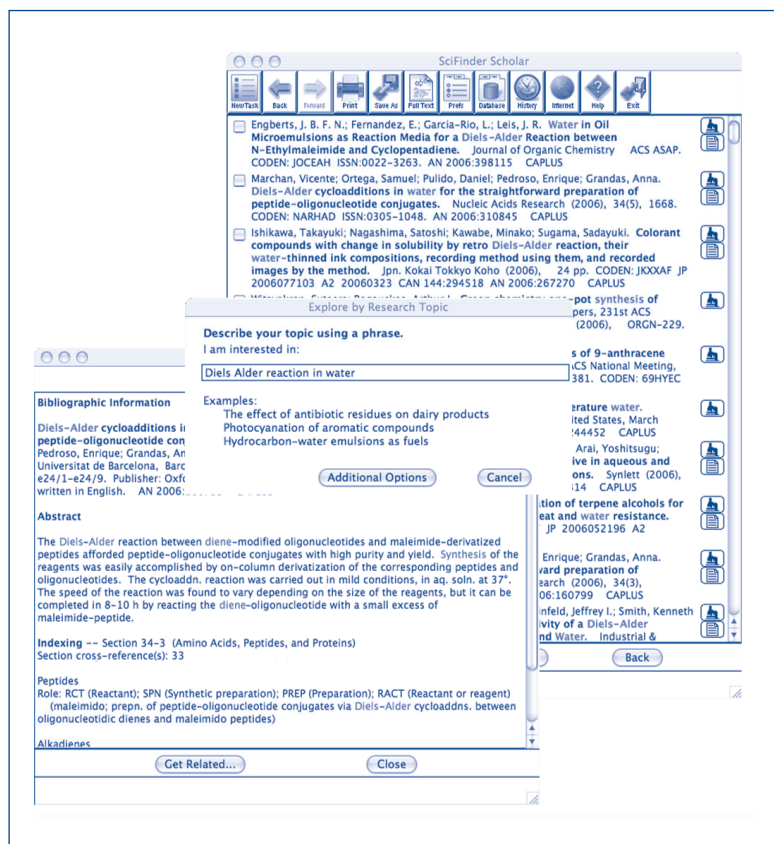


FIGURA 1. Una cerca amb el SciFinder.

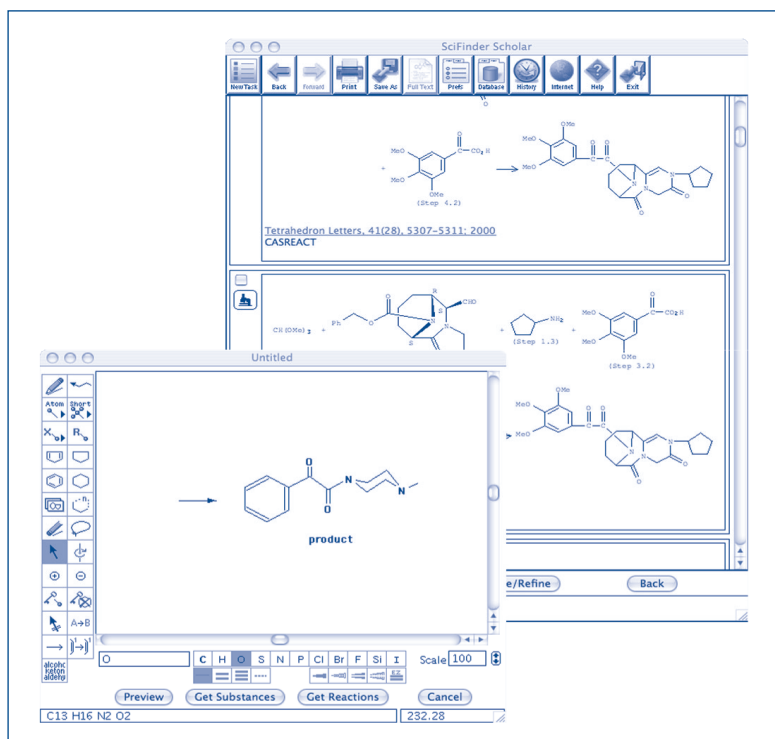


FIGURA 2. Una cerca gràfica amb el SciFinder.

vida. D'aquestes, les més conegudes són el Beilstein Crossfire, centrat en la química orgànica, i el Gmelin Crossfire, que gira al voltant de la química inorgànica. En total, el sistema dóna accés a setze milions d'estructures i deu milions de reaccions. Una de les diferències amb el SciFinder és que el DiscoveryGate, a més de proporcionar referències a la literatura primària, també inclou informació química concreta sobre les substàncies i la seva reactivitat (300 milions de dades associades a les estructures, 26.000 mètodes sintètics, etc.). En aquest sentit, SciFinder i DiscoveryGate es complementen mútuament.

L'accés al DiscoveryGate és a través del navegador i també permet cercar gràficament estructures, subestructures i transformacions químiques com el SciFinder. L'accés al DiscoveryGate és restringit als clients que han adquirit la llicència corresponent però, si hi esteu interessats, podeu demanar-ne una d'avaluació que serà vàlida tot un mes. Alternativament, podeu fer-vos una idea del seu funcionament mitjançant el conjunt de vídeos interactius accessibles des de la seva pàgina principal.

d'Internet. Per descomptat, el programa ofereix tota una varietat d'opcions per a analitzar els resultats obtinguts o «refinar» la cerca per tal d'identificar els articles més rellevants.

Una de les opcions més apreciades pels químics és la possibilitat de *dibuixar* directament en la pantalla una estructura o, fins i tot, una reacció química i demanar al programa que proporcioni una llista exhaustiva de tots els articles i patents on apareixen aquests elements. El programa és prou *expert* per saber identificar estructures *similars* o treballar amb reaccions més o menys genèriques. Actualment, la base de dades inclou més de deu milions de transformacions químiques i informació sobre els proveïdors de més de vuit milions de reactius i compostos arreu del món.

L'empresa Elsevier-MDL ha comercialitzat recentment DiscoveryGate (<http://www.discoverygate.com>), un producte que permet examinar de forma unificada els continguts de més d'una dotzena de bases de dades relacionades amb la química i les ciències de la

The image shows the DiscoveryGate interface. The main window displays search results for "CrossFire B 2095727". The interface includes a search bar, a list of search results, and a detailed view of the selected substance. The detailed view shows the chemical structure of the substance and a table of melting point data.

Melting Point (hide)				
Melting Point (C)	Solvent	Entry Date	Comment	Citation
121.6		1988/06/27		1
121.5 - 122		1988/06/27		2
120	H2	1988/06/27	1	3
120 - 121		1995/12/31		4
118		1988/06/27	1	5
108 - 109		1988/06/27		6

FIGURA 3. Al DiscoveryGate podem trobar, entre moltes altres coses, dades químiques de més de setze milions de substàncies.



FIGURA 4. Totes les patents al nostre abast amb esp@cenet.

Un tercer producte comercial que cal comentar és la Web of Knowledge (<http://scientific.thomson.com/webofknowledge>) de l'empresa Thomson Scientific. La WoK també proporciona un accés integrat a diverses bases de dades a través del navegador. Les més conegudes pels químics són les del Science Citation Index, que permeten localitzar tots els articles que citen un treball determinat o que, tot i no citar-lo, hi estan relacionats. La Fundació Espanyola para la Ciencia y la Tecnología (FECYT) ha adquirit una llicència de la WoK que proporciona accés gratuït a totes les institucions públiques d'investigació de l'Estat (<http://www.accesowok.fecyt.es>). Aquells que no tinguen accés a la WoK podeu veure-la en funcionament mitjançant els *tutorials* que trobareu a la seva pagina principal (en anglès) o a la pàgina de la FECYT (en castellà).

I què puc fer si no em puc permetre contractar cap d'aquests productes tan cars? Doncs bé, la resposta podria ser el MEDLINE. Aquesta base de dades està gestionada per la National Library of Medicine (<http://www.nlm.nih.gov>) dels National Institutes of Health, NIH (<http://www.nih.gov>), als Estats Units. Incorpora uns catorze milions de referències en biomedicina i s'hi pot accedir de forma totalment gratuïta des de PubMed (<http://www.pubmed.gov>). Tot i que és una base de dades bio-

mèdica també conté molta informació química, en especial pel que fa a les àrees de la química orgànica més relacionades amb la biomedicina. Moltes vegades, aquesta base de dades pot proporcionar una informació similar a la que s'obté amb el SciFinder, però no suporta la cerca gràfica i això limita la seva utilitat. Val a dir que l'NIH ofereix molts altres recursos gratuïts que també poden ser d'interès per als químics. En aquest sentit us recomanem que visiteu el full del National Center for Biotechnology Information (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov>) i, en especial, el del seu sistema Entrez (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/gquery/gquery.fcgi>). I si esteu interessats en les patents aleshores esteu de sort perquè tant la cerca de patents com l'accés als documents originals a escala mundial es poden fer a través de l'esp@cenet (<http://es.espacenet.com>) de la Oficina Española de Patentes. El servei és del tot gratuït.

No podem acabar aquest tema sense parlar de l'accés en línia als articles de les revistes especialitzades. Al cap i a la fi, moltes vegades, el resultat final d'una recerca a les bases de dades no és més que un

conjunt de cites bibliogràfiques que cal examinar. La utilitat de les bases de dades es veuria reduïda si no anés acompanyada de la possibilitat d'examinar aquests resultats de forma immediata a través d'Internet. Afortunadament, tot i que aquest ha estat un fenomen recent, avui en dia la major part

TAULA 1.

Portal	Adreça
Publicacions de l'American Chemical Society	<a href="http://pubs.acs.org">http://pubs.acs.org</a>
Publicacions de la Real Society of Chemistry	<a href="http://www.rsc.org/Publishing">http://www.rsc.org/Publishing</a>
ScienceDirect, de l'editorial Elsevier	<a href="http://www.sciencedirect.com">http://www.sciencedirect.com</a>
SpringerLink, de l'editorial Springer	<a href="http://www.springerlink.com">http://www.springerlink.com</a>
InterScience, de la editorial Wiley	<a href="http://www.interscience.wiley.com">http://www.interscience.wiley.com</a>
Blackwell Synergy, de l'editorial Blackwell Publishing	<a href="http://www.blackwell-synergy.com">http://www.blackwell-synergy.com</a>
Nature	<a href="http://www.nature.com">http://www.nature.com</a>
Science	<a href="http://www.sciencemag.org">http://www.sciencemag.org</a>
Proceedings of the National Academy of Sciences	<a href="http://www.pnas.org">http://www.pnas.org</a>
Annual Reviews	<a href="http://www.annualreviews.org">http://www.annualreviews.org</a>

de les editorials científiques ja disposen de portals des d'on es pot accedir als treballs de nova publicació en format electrònic. Les més importants han anat més enllà i han fet accessible el seu fons històric, tot possibilitant la consulta dels treballs publicats des dels seus inicis fins a l'actualitat. Algunes revistes de nova creació ja han renunciat completament al format imprès i s'editen exclusivament en format electrònic. Pels professionals que disposen de les eines que hem descrit més amunt, l'accés als articles en format electrònic és molt fàcil ja que les mateixes eines són capaces de localitzar i descarregar els articles sol·licitats. En cas contrari cal cercar-los amb el navegador a través d'algun portal especialitzat. A la taula 1 us n'hem resumit les adreces d'alguns dels més interessants.

En general, aquests portals permeten visualitzar els articles en format html o pdf i solen proporcionar la possibilitat de cercar els seus continguts per títol, autor, data, etc. En molts casos els articles originals inclouen una secció de *material suplementari* que conté valuosa informació experimental. Ara bé, l'accés als continguts no és lliure i requereix una subscripció que, normalment, sol ser més econòmica que la de la versió impresa. Per als visitants sense subscripció, la major part dels portals ofereixen una funcionalitat limitada que pot anar des de la mera consulta de les taules de continguts de les revistes, fins a la possibilitat de fer cerques, de visualitzar els resums dels treballs publicats i de *comprar* els articles seleccionats. Darrerament estan apareixent també noves revistes en format exclusivament electrònic i que són d'*accés lliure*. Les

TAULA 2.

Portal	Adreça
Directory of Open Access Journals	<a href="http://www.doaj.org">http://www.doaj.org</a>
BioMed Central	<a href="http://www.biomedcentral.com">http://www.biomedcentral.com</a>
RACO	<a href="http://sumaris.cbuc.es/raco">http://sumaris.cbuc.es/raco</a>
e-revist@s	<a href="http://www.tecnociencia.es/e-revistas">http://www.tecnociencia.es/e-revistas</a>
ReviCien	<a href="http://www.revicien.net">http://www.revicien.net</a>
SciELO	<a href="http://www.scielo.org">http://www.scielo.org</a>

adreces recollides a la taula 2 són un bon punt de partida per a localitzar aquest tipus de material.

Com a conclusió final podríem dir que l'accés a la informació química a través d'Internet és un tema que cada vegada està més ben resolt i aporta avantatges obvis sobre els mètodes tradicionals. Els químics més grans encara recorden com el fet de recopilar la bibliografia sobre un tema determinat podia requerir tot un munt de dies de treball tediós i intens a les biblioteques universitàries especialitzades. Avui en dia, el mateix treball es pot dur a terme en poques hores i des de la comoditat del despatx. El fet de poder descarregar d'Internet els articles originals en format pdf i de poder emmagatzemar-los al nostre propi disc dur està deixant obsolets aquells arxivers plens a revessar de *separates* que tan sols fa uns anys ens semblaven imprescindibles. Tota aquesta comoditat té un preu, és clar.