

11	DESCRIPCIÓ DE BASES DE DADES D'INFORMACIÓ QUÍMICA	
A INTERNET		429
11.1	Introducció	429
11.1.1	Definició de base de dades	429
11.1.2	Breu introducció històrica de les bases de dades. Bases de dades a Internet	430
11.2	Paràmetres de descripció i classificació de bases de dades	433
11.3	Estudi selectiu de bases de dades presents a Internet	441
11.3.1	Criteris de descripció de les bases de dades	442
11.3.2	Descripció de les bases de dades seleccionades en aquest estudi	443
11.3.3	Especificacions de les opcions de cerca en les bases de dades moleculars	470
11.3.4	Especificacions de les opcions de cerca en les bases de dades documentals	473
11.4	Bibliografia	477

11 Descripció de bases de dades d'informació química a Internet

11.1 Introducció

11.1.1 Definició de base de dades

Una base de dades pot ser definida, tal com ho fa Abadal¹, com “un conjunt d'informació bàsicament textual o alfanumèrica que ha estat gravada en un suport electrònic i que disposa, a més a més, d'un programa informàtic que en facilita la recuperació”. Codina², per la seva banda, la defineix com “un conjunt d'informacions relatives a un mateix domini del coneixement, registrades en un suport llegible per ordinador i articulades en unes unitats lògiques anomenades registres”.

Una tercera definició seria la recollida en el TermCat³, on es parla d'una “estructura que permet rebre dades, emmagatzemar-les i extreure-les a petició d'usuaris múltiples i independents entre ells”.

D'aquestes definicions es podrien destacar els dos trets més característics:

- El fet que es tracta d'informació electrònica, que necessita d'un ordinador o un aparell per a la seva consulta.
- Que disposa o necessita d'un programa informàtic per a poder accedir a la informació que hi tenen emmagatzemada. De fet, la recuperació de la informació³, el conjunt de mètodes i procediments destinats a extreure, de dades situades a la memòria, informacions referents a un tema determinat, esdevé una disciplina de la Documentació desenvolupada des dels inicis de la informació electrònica.

Una base de dades presenta una sèrie de conceptes i termes necessaris per a comprendre el seu funcionament que convé esmentar breument prèviament al desenvolupament del capítol. Aquests són:

- Entitat: pot definir-se com la característica comuna que comparteixen tots aquells objectes que resten inclosos en una base de dades. Així, en la CSD les entitats serien molècules amb estructura cristal·lina resolta, essent doncs aquest el tret en comú que pot permetre la inclusió d'un nou registre en aquesta base de dades.
- Registre: unitat mínima d'informació de què es compona una base de dades. Així, en la CSD a cada resolució estructural d'una molècula li correspondrà un registre, de la mateixa manera que en un catàleg bibliotecari a cada document del fons bibliogràfic li és assignat també un registre.

El que és pretén amb la creació d'una base de dades és, doncs, que d'un conjunt molt voluminós de registres, per tant, d'informació, es puguin recuperar aquells que compleixin una sèrie de condicions que s'especifiquen i concreten en l'equació de cerca. Per a això és necessari haver creat camps de descripció del registre.

- Un camp és cadascuna de les àrees d'informació específica dins d'un registre. En els camps es troben definits els atributs dels registres de manera que així com l'entitat és allò que tenen en comú, els camps són allò que ens permetrà de diferenciar-les, atès que recullen cadascuna de les característiques de les entitats i permeten que aquestes es diferenciïn entre elles. Evidentment, depenent de l'entitat es poden crear uns camps específics, atès que les característiques d'una molècula no seran les mateixes que les d'una fotografia o d'un document en general.

11.1.2 Breu introducció històrica de les bases de dades. Bases de dades a Internet

Abadal¹ situa l'origen de les bases de dades cap als anys 60, quan grans institucions dels Estats Units productores de butlletins de resums (la NASA, la National Library of Medicine i l'American Chemical Society) comencen a emprar

la informàtica per tal d'emmagatzemar i gestionar de forma automatitzada la seva informació. El 1966, també el *Science Citation Index* comença a ser difós en cintes magnètiques⁴.

Cal tenir en compte que crear una base de dades de qualsevol entitat implica que la informació ha d'estar prou ben estructurada per a què els camps puguin ser ben definits i permetin la diferenciació eficient dels registres. Això i el fet que siguin òptimes per a treballar amb grans volums d'informació féu que les primeres fonts d'informació en ser introduïdes en forma de bases de dades fossin les obres de referència, atès que constaven d'una estructura formalitzada, en format paper, i ja estaven pensades per a què els usuaris en fessin una lectura puntual més que no pas una lectura d'inici a final.

A principis dels anys 70 les bases de dades comencen a difondre's. En el camp de la Química, caldria destacar el 1976, quan *CAS Online* comença a ser operativa, per ser el 1980 consultable a través de distribuïdors com Dialog o més endavant a través de STN⁵. Una altra data a esmentar és l'any 1994 quan la interfície de cerca de *Beilstein Crossfire* permet accedir al fons dels tractats *Beilstein* i *Gmelin*⁶. Per la seva banda, el 1995 CAS desenvolupa *Scifinder*, per a realitzar cerques a diverses bases de dades integrades en una mateixa plataforma⁷. Finalment, el 1998 els productes de l'Institute for Scientific Information, com ara el *Science Citation Index* o el *Journal Citation Reports*, són consultables a través de *Web of Science*^{8,9}.

Les primeres bases de dades en línia, de tipus sobretot comercial (és a dir, de pagament) empraven les primeres xarxes de telecomunicacions per a la seva difusió. Aquest fet dóna lloc a la teledocumentació, definida per Fuentes¹⁰ com a la "utilització conjunta d'ordinadors i telecomunicacions per a automatitzar les operacions clàssiques de la documentació, que permet l'accés a la informació de forma selectiva i a distància".

Posteriorment, el desenvolupament del CD-ROM obrí una nova via per a la difusió de la informació electrònica, atès que aquesta podia restar emmagatzemada en un suport fàcilment manejable i que es podia instal·lar en diferents ordinadors o en un servidor central.

Tot i això, la baixa freqüència d'actualització i el desenvolupament d'Internet han esdevingut un fre per a esdevenir el suport majoritari. És doncs,

altre cop la xarxa de xarxes el mitjà amb més futur per a la difusió de la informació electrònica.

Les bases de dades més importants i amb un millor tractament de la informació (des del punt de vista de la quantitat i de la qualitat) continuen essent les de tipus comercial, accessibles en línia mitjançant diferents distribuïdors, com ara STN o Dialog. Moltes d'aquestes són produïdes per altres institucions, generalment de tipus privat. Tot i així, a Internet han començat a aparèixer diferents bases de dades les capacitats de les quals són també prou valuoses.

En aquest capítol no es pretén proposar la substitució de les subscripcions a bases de dades de pagament, ni influir en la decisió de la tria entre les que són gratuïtes i les que no. Vagi en aquest sentit per endavant la consideració que la informació ben tractada i òptimament difosa ha d'implicar una despesa de diners. El que es pretén és incidir en la necessitat que per a dur a terme aquesta tria és necessari el coneixement previ de les fonts d'informació

Convé recordar, tal com s'ha destacat en la introducció de la segona part d'aquest treball, que la Química té una característica específica respecte a altres ciències, i és el fet que a part de la vessant acadèmica, té al costat la molt potent indústria quimicofarmacèutica. La seva importància econòmica de la qual permet a la indústria de productes informatius invertir en la creació de bases de dades de gran qualitat i de pagament, atès que el sector quimicofarmacèutic sap de la importància de tenir la millor informació a l'abast, tot i que això impliqui una despesa econòmica elevada.

Diferents autors han realitzat estudis sobre algunes de les més rellevants bases de dades, com ara *Scifinder*¹¹⁻¹⁵ (o bé la seva versió acadèmica *Scifinder Scholar*), *Beilstein Crossfire*^{6,16-18}, *Web of Science*^{8,9,11} o bé el *Cambridge Structural Database*¹⁹⁻²³, a més d'altres estudis comparatius, per exemple, entre bases de dades de Química Ambiental²⁴.

La mateixa concepció de les bases de dades i llurs capacitats han anat variant al llarg dels anys. Meehan i Schofield afirmen que en els primers anys no era gaire habitual la consulta directa per part de l'usuari¹⁷. El motiu principal era que les primeres bases de dades en línia necessitaven una més gran

expertesa per al seu ús i eren normalment emprades per documentalistes o persones que havien dut a terme cursos especialitzats.

Actualment, però, moltes bases de dades es presenten amb formats encarats a l'usuari final, amb interfícies més amigables i llenguatges d'interrogació molt més senzills.

11.2 Paràmetres de descripció i classificació de bases de dades

Diversos autors han classificat les bases de dades en funció de diferents criteris^{1,10,24} que poden servir a la vegada per a definir alguns dels paràmetres amb què es poden descriure i avaluar. A tall d'exemple es mostra a la Fig. 11-1

la classificació feta pel Consorci d'Informació i Documentació de Catalunya, actualment Institut d'Estadística de Catalunya i recollida per Fuentes¹⁰ l'any 1990, basada en la naturalesa de la informació que ofereix. Tot i que el mateix concepte de base de dades ha evolucionat força des de llavors, pot considerar-se encara vàlida, tot i que en aquest apartat serà modificada per a reflectir alguna especificitat inherent a la realitat química més actual.

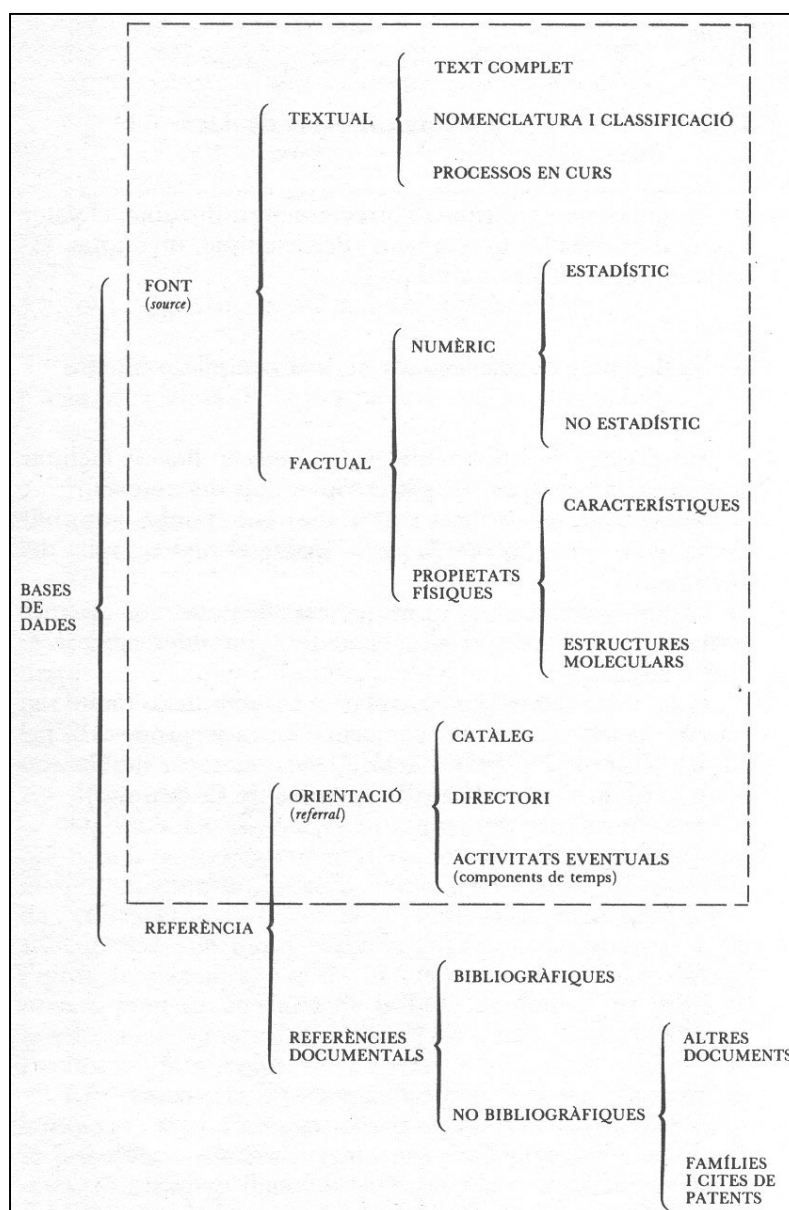


Fig. 11-1 Classificació de les bases de dades en funció de la naturalesa de la informació que contenen (extret de ref.: 10)

A continuació esmentarem altres criteris de classificació tot proposant alguns exemples, no necessàriament relacionats amb la Química, però sí amb el món de la Ciència i la Tecnologia.

➤ Segons el tipus de suport

Com ja s'ha esmentat, la informació electrònica pot romandre en diferents suports, podent ser un criteri per a diferenciar les bases de dades. Cal considerar que no és únicament un paràmetre de presentació, sinó que pot determinar la freqüència d'actualització, cosa que en determinades ciències com, per exemple en Biotecnologia, pot ser clau.

- CD-ROM: té el gran avantatge per l'usuari de no haver-se de connectar en línia, oferint la comoditat de poder-se triar la forma distribuïda (a través d'un servidor comú) o bé la instal·lació en ordinadors concrets, qüestió aquesta que també pot dependre de la llicència que s'hagi establert²⁵. El gran desavantatge seria que no es poden anar actualitzant de manera contínua sinó que cal esperar a la recepció del nou CD-ROM. Alguns exemples serien *Cambridge Structural DataBase* o bé *Current Contents* en CD-ROM.
- Actualitzades: són aquelles bases de dades que, potencialment, poden ser actualitzades dia a dia. Cal fer èmfasi en la potencialitat, atès que no necessàriament n'és una conseqüència en el 100% dels casos. Entre aquestes podem distingir dos tipus:
 - En línia: les primeres que hi va haver. Acostumen a ser de pagament, i la informació que ofereixen és d'alta qualitat. Alguns exemples serien *CAPLUS*, *WPI*, *BIOSIS*, *Gmelin* o *Beilstein*.
 - Via web: dins d'aquest grup és on trobem la major heterogeneïtat, en tant com podem trobar bases de dades de pagament i d'alta qualitat (com ara *STN on the Web*, *Web of Science*) i d'altres gratuïtes amb millor o pitjor qualitat, que seran l'objecte d'estudi d'aquest capítol. Per a descriure aquestes és quan s'han de tenir en compte altres criteris.

Tanmateix, no es pot deixar de considerar el fet que algunes bases de dades tenen múltiples formes d'accés, podent-se trobar *Chemical Abstracts* en

CD-ROM o accedir-hi a través de web (via *STN on the Web*) o bé en línia via *STN Express*. A més a més, el mateix contingut d'una base de dades es pot presentar en diferents suports a l'abast així com en diferents interfícies de cerca, com succeeix en el cas de *Medline*, que pot ser consultada via *PubMed* o bé via *Scifinder Scholar*, cosa que pot implicar en el darrer cas aprofitar la indexació de les molècules i la possibilitat d'emprar la cerca subestructural.

➤ Segons el mercat objectiu

Aquesta classificació ja fou suggerida per Abadal¹, però en aquest treball ha estat ampliada i concretada en la vessant científicotècnica.

- Gran públic: bases de dades destinades a la societat en general, com ara el catàleg de la Biblioteca de Catalunya.
- Professionals: bases de dades destinades a sector professionals concrets i especialitzats, com ara BBDD de Dret tipus *Aranzadi*.
- Científicotècniques: bases de dades amb un alt contingut científicotècnic, pensades per a investigadors. Son òbviament aquelles que ens interessin en aquest capítol. Dins d'aquestes, distingirem entre dos àmbits més:
 - Multidisciplinàries, com ara *PASCAL*, *INSPEC*, etc.
 - Dins d'una àrea concreta de coneixement, com ara *Medline*, *MathScinet* o *Analytical WebBase*.

En aquest sentit caldria comentar que tot i que *Scifinder Scholar*, per exemple, és considerada com a paradigma de base de dades destinada als químics, la realitat és que la cobertura de literatura científica que duu a terme fa que actualment pugui ser considerada com a interdisciplinària en recollir informació útil per a bioquímics, biotecnòlegs i biometges, entre d'altres, no només pel fet d'incloure *Medline* sinó també per les revistes que cobreix.

➤ Segons el tipus d'informació

- Font: el resultat que dóna és directe, hi podem trobar aquella informació que es pretén per a respondre a una necessitat informativa concreta.
 - Textuals: aquest seria el cas d'*Abbreviations and Acronyms of Chemical Compounds*, una base de dades d'acrònims i abreviacions de tipus químic que serà comentada més endavant en aquest mateix capítol.
 - Numèriques/Gràfiques: Aquestes són més importants i nombroses en Química, com ara, per exemple l'*Index Merck* o *NIST Webbook*.
 - Textual-numèriques-gràfiques. Per exemple el format electrònic de *Kirk-Othmer*, *Beilstein Crossfire* o bé *CAS React*.

- Bibliogràfiques/Documentals: dóna com a resultat referències bibliogràfiques de documents on ampliar la informació. Aquí caldria concretar pel tipus d'entitat que conté, atès que pot tractar-se de:
 - Un sol tipus de documents: només articles com ara *Science Citation Index* (tot i que després es pugui concretar per tipus d'article), només patents com *Espacenet* o *WPI*, o només tesis doctorals com ara TDX, etc.
 - Diversos tipus de documents a la vegada: com ara *Chemical Abstracts* (articles, patents, tesis, llibres, conferències, etc.) o bé *BIOSIS/RRM* (informes tècnics, articles de revisió i conferències).

D'aquesta classificació en funció del tipus d'informació, caldria matisar que actualment i mercès a les noves tecnologies, es pot considerar que s'ha trencat en molts casos la divisió clàssica entre les fonts secundàries i les primàries (la diferencia de les quals rau en la possibilitat d'accedir a la informació directament o no) quant al format de base de dades, atès que gràcies a opcions com *ChemPort*²⁶ o al mateix fet que les bases de dades incloquin sovint el text complert (el cas d'*Espacenet*) fa que aquesta frontera encara real en el món de les fonts d'informació en

paper, en el cas de la informació electrònica resti molt més difusa com a conseqüència, en molts casos, de la implementació d'Internet.

Així, el concepte de considerar una base de dades com a font secundària perquè l'edició en paper ho és podria haver-se de variar. Aquest fet fa que es pugui considerar un altre paràmetre dins d'aquesta classificació com seria la consideració de si es tracta d'una base de dades documental de text complert, si conté eines com *ChemPort*²⁶ o *CrossRef*²⁷ (la qual cosa la deixaria a mig camí, perquè el text complet no resta inclòs en la mateixa base de dades però facilita l'obtenció del document) o bé si no conté cap mode d'enllaçar al text complet, essent doncs completament secundària.

➤ Segons l'origen

Aquest paràmetre permet explicar algunes de les capacitats en funció de d'on provenen les base de dades. Pot distingir-se en dues famílies:

- Les provinents d'obres existents ja en paper
 - D'obres de referència primàries, com ara *Beilstein Crossfire* (que engloba els tractats en Química *Gmelin* i *Beilstein*), *Kirk-Othmer* (que prové de l'Enciclopèdia del mateix nom), entre d'altres.
 - De publicacions secundàries, com ara *BIOSIS* (que prové de *Biological Abstracts*, *COMPENDEX* (que prové d'*Engineering Index*), *Science Citation Index* (del mateix nom), entre d'altres.

Totes aquelles bases de dades l'origen de les quals resta lligat a la font en paper tenen normalment com a característiques una major antiguitat (i en alguns casos això pot implicar major cobertura), un major coneixement per part dels usuaris (i normalment implica més demanda) i en alguns casos una estructuració que pot seguir la versió en paper tot i que també es pot trencar la seva verticalitat, donant un veritable valor afegit a la base de dades (com ara la hipertextualitat o els modes de visualització). Cal recordar que aquest tipus d'obres foren les primeres a passar a format electrònic per la gran quantitat d'informació que contenien, així com per l'alt grau d'estructuració que mostraven.

Així, per exemple, el fet que *CAplus* parteixi de *Chemical Abstracts* permet que es pugui cercar per la situació dins la versió en paper, com succeeix en el cas de la patent alemanya del 1906 que duu per títol *Readily soluble and stable double compounds of thiourea with silver salts* i que pot ser cercada a la vegada per la seva localització en el volum 2 de *Chemical Abstracts* en paper, resum 8223, o bé emprant la cerca per identificador de *Scifinder Scholar* tot introduint CA2:8223.

Aquesta antiguitat pot presentar algun desavantatge en certs casos suposadament de tipus tècnic per tenir registres antics juntament amb d'altres de més recent. Per exemple, la cerca per citacions que *Scifinder Scholar* incorpora (semblant a *Science Citation Index*) tan sols és possible en els documents a partir d'un cert any (inicis de les revistes electròniques) i no pas en tots.

- Creades directament en versió electrònica, com ara *Protein Data Bank*, *SDBS*, *ChemID*, etc., moltes d'elles de tipus font. El fet de ser creades de bell nou també pot comportar l'avantatge de crear capacitats diferents de cerca tot aprofitant les noves tecnologies.

➤ Segons la forma de pagament

Aquest criteri no és únicament per diferenciar entre fonts d'informació, sinó que pot ser un criteri per a diferenciar entre diferents formes d'accedir a una mateixa base de dades.

- Gratuïtes, com ara *Protein Data Bank*, *ArXiv*, etc. perquè per exemple tot i que Medline pugui ser, per exemple, gratuïta, existeixen les versions de pagament que milloren diferents opcions com ara la forma de consulta (més interfícies de consulta, més capacitats d'acotar, més indexació) o bé la forma de guardar resultats (enregistrar tasques/historial). Actualment, a través de la xarxa n'estan apareixent moltes de documentals, de les mateixes editorials i de portals que recullen aquesta informació mitjançant motors de cerca. Les bases de dades de patents de les oficines de patents (Europea, Estats Units, Japó) han realitzat un gran esforç en aquest sentit.

- Pagament, com ara les distribuïdes per STN. Poden existir també diferents formes de pagament:
 - Un únic pagament per a fer totes les opcions possibles.
 - Pagament per nombre de consultes (ideal per a empreses petites).
 - Pagament per forma de visualització, o bé per nombre de referències obtingudes.
 - Pagament segons el tipus d'institució (si és Universitat o Empresa). Ex: *Scifinder* i *Scifinder Scholar*, tot i que entre aquestes dues existeix alguna capacitat diferenciada com la forma de creació d'informes de resultats, per exemple.
 - Pagament diferenciat si es disposa de la publicació secundària en paper en el cas de les bases de dades que tenen en aquesta el seu origen, com succeïa amb *Scifinder Scholar* per a institucions que tenien *Chemical Abstracts* en paper.

Totes aquestes qüestions es negocien en la contractació de la llicència.

➤ Segons l'usuari que l'ha de consultar

- Intermediari: persona que realitza la cerca per a una altra, molt habitual en els serveis bibliotecaris i departaments de documentació en empreses, acostumen a ser persones expertes en la consulta de bases de dades en línia, sobretot en les tradicionals, ja siguin documentalistes o científics formats en la Recuperació de la Informació.
- Usuari final (*end-user* en anglès): entenent com a tal aquella persona que té la necessitat informativa i que fa ús directament de les bases de dades.

Aquesta distinció es pot veure reflectida en l'amigabilitat que presenten, les opcions de visualització i els operadors que cerca, atès que tot sovint les bases de dades encarades o creades per a l'usuari final no incorporen tots els operadors possibles, com ara operadors de proximitat més complexos (on es poden triar, per exemple, el nombre de paraules que volem entre dues paraules

clau), sinó que empen finestres desplegable per a triar els camps i únicament operadors booleans ja escrits per a no haver de construir complexes equacions de cerca, cosa que a la vegada pot empobrir el procés de cerca.

Per a posar un exemple clarificador d'aquesta diferència, esmentarem les diferents formes de consulta de STN International (distribuïdor coparticipat per CAS, l'alemanya FIZ Karlsruhe i la japonesa JST), com ara *STN*, *STN Easy* (pensada per a usuaris finals) o bé *STN on the Web*, amb una amigabilitat molt major^{28,29}.

Tal com s'ha esmentat anteriorment, una de les tendències de canvi de les bases de dades és el fet que cada cop més s'està tendint a donar prioritat a aquelles destinades a l'usuari final, presentant interfícies més amigables tot tenint en compte el procés d'aprenentatge que els usuaris han hagut de dur a terme per a navegar eficientment per Internet. Així, les noves bases de dades que van apareixent tendeixen a presentar entorns hipertextuals semblants als d'Internet i interfícies on tan sols calgui escriure paraules clau.

➤ Segons l'idioma

Per a contemplar aquesta darrera classificació cal tenir ben present que en Ciència i Tecnologia la gran majoria de bases de dades són en anglès, la llengua més internacional també en el cas de la Química, sobretot perquè les grans productores empen aquest idioma en els seus productes informatius. Altres idiomes emprats poden ser l'alemany i el japonès, atès que les comunitats amb aquest idioma són també industrialment força potents. Aquest fet, però, implica tot sovint que aquestes bases de dades així com d'altres fonts d'informació deixin de ser consultades, sobretot les japoneses, per la resta d'usuaris.

Quant a l'espanyol, s'haurien de destacar dos productes: *ICYT, Ciencia y Tecnología*, produïda pel CSIC i les bases de dades que depenen de la *Oficina Española de Patentes y Marcas*, com ara *OepmPat* o bé *Espacenet*, que tot i que és una base de dades de patents d'arreu del món, la seva interfície és consultable en espanyol.

11.3 Estudi selectiu de bases de dades presents a Internet

Es va creure oportú engagar un estudi sobre un tipus de bases de dades poc estudiat d'entre les que contenen informació química, aquelles que resten a Internet i que són de tipus gratuït, tot i que en algun cas es demani un registre previ a l'usuari. Aquest tipus d'estudi ha estat realitzat en altres branques científiques, com ara la Biologia³⁰⁻³³. Per les característiques d'Internet, en aquest estudi es proposà un criteri selectiu, atès que la gran quantitat de bases de dades d'informació química en feia inassolible un d'exhaustiu.

Es decidí estudiar aquelles que fossin de tipus gratuït, tot i que algunes, tal com s'especificarà, requereixin que l'usuari s'hagi registrat prèviament.

Tanmateix, es va dur a terme un extens treball previ de revisió de més de 100 bases de dades per a la selecció d'aquelles considerades més útils per als químics. Es considera rellevant esmentar que és possible trobar moltes bases de dades amb pocs registres, poques capacitats de cerca, baixa freqüència d'actualització (de vegades tan sols són creades i penjades i no es torna a modificar el seu contingut), fet que prova que generalment gratuïtat i qualitat no van del bracet en els fluxos d'informació química.

Així doncs, els objectius d'aquest apartat són:

- Establir uns criteris d'avaluació de bases de dades químiques que puguin ser emprats per tal d'aconsellar la seva consulta o la seva inclusió en un directori selectiu (com el descrit en el capítol X).
- Establir una classificació del tipus de bases de dades a Internet més útils en Química, per tal de reflectir quines són les necessitats informatives que preferentment poden dur a terme un procés paral·lel (que no substitutiu) a la cerca en bases de dades comercials.
- Avaluar si Internet ha aportat la creació d'algun concepte nou en la consulta de bases de dades que no hagués estat ja incorporat en les tradicionals en línia o al contrari, si les noves tecnologies permeten emmagatzemar molta informació però potser no incorporen opcions de cerca específicament químiques com ara la cerca estructural o subestructural.

- Descriure aquelles bases de dades de diferents tipus que hagin estat considerades com a més rellevants, tot emprant uns paràmetres de descripció específics per a la informació química.
- Concretar propostes de millora i tendències de futur en la creació de noves bases de dades presents a Internet.

11.3.1 Criteris de descripció de les bases de dades

Els criteris que s'empraran per a descriure les bases de dades, alguns d'ells ja utilitzats en l'avaluació dels directoris, són els següents:

- A. Creador** (empresa, institució, ...): aquest criteri té la seva importància atès que s'estan estudiant les bases de dades gratuïtes i d'aquesta manera es pot establir quines institucions majoritàriament en són les creadores.
- B. Any de creació:** des de quan està activa aquella base de dades
- C. Visibilitat:** nombre de pàgines amb un enllaç dirigit cap a elles. Cal tenir en compte que en aquest cas no pot ser considerat únicament un criteri qualitatiu, atès que es pot tractar una base de dades excel·lent però només per a un tipus d'usuaris en una subdisciplina química concreta, cosa que farà que sigui menys referenciada.
- D. Nombre de registres que conté:** criteri clau, atès que permet saber si és possible emprar-la per a tot tipus de necessitat o bé si té limitacions quant a la possibilitat que ofereixi una bona resposta.
- E. Cobertura:** aquest paràmetre es refereix tant al tipus d'entitat que conté com a d'altres criteris, per exemple d'acotació cronològica o temàtica.
- F. Estructura del registre:** el tipus de camps que conté, si són de tipus textual, numèric, gràfic, si està organitzat o bé hi ha tota la informació sense separació visible de les característiques.
- G. Usuaris potencials:** aquest criteri resta molt unit als dos anteriors, atès que en funció del tipus i l'estructura del registre i la seva temàtica es pot destriar quin és l'usuari potencial, o dit d'una

altra manera, el tipus de necessitat informativa que pot ajudar a respondre.

- H. Descripció dels tipus de cerca:** en aquest apartat es descriurà quins tipus de cerca emprà, si hi ha interfícies simples i avançades, possibilitat de buscar per gràfica, etc.
- I. Facilitat de navegació/disponibilitat de menú d'ajuda:** el que es pretén és comprovar si és una base de dades òptima per a un usuari final, o bé, per la poca informació d'ajuda de què disposa o els modes de visualització, el seu ús presenta certes mancances.
- J. Freqüència d'actualització:** atès que resta en web, cal comprovar, sempre que sigui possible, cada quan s'actualitza en els registres o bé se'n creen de nous.
- K. Mode d'inclusió:** hi ha algunes bases de dades que poden convidar a l'usuari a introduir registres, cosa que tot i facilitar un entorn associatiu pot implicar un baix nivell de confiança en les dades obtingudes.
- L. Formats de visualització:** cal comprovar si es tenen en compte la utilització, sobretot en les bases de dades moleculars, de connectors per a visualitzar-les o bé d'altres possibilitats.
- M. Altres:** qualsevol altre comentari que es consideri valuós per a la seva descripció i que no hagi estat inclòs en cap altre apartat.

11.3.2 Descripció de les bases de dades seleccionades en aquest estudi

S'han seleccionat 24 bases de dades presents a Internet tenint finalment en compte les següents concrecions:

- Havien de ser bases de dades de tipus gratuït o que únicament calgués un registre previ per part de l'usuari, com ara *Beilstein Abstracts* que resta dins del portal Chemweb.com i que demana que l'usuari s'hagi registrat tot i que sense efectuar cap tipus de pagament.
- Es va triar un ventall prou heterogeni per tal de poder mostrar d'una manera prou àmplia l'adaptació d'aquestes fonts d'informació en l'entorn web, cosa que ha de permetre copsar

quins tipus de bases de dades s'han adaptat de manera més eficient o poden respondre millor a les necessitats informatives del químic.

Les bases de dades que han estat finalment seleccionades per al seu estudi són les que es presenten en la següent classificació, on ja s'especifica el tipus de recurs en funció del tipus d'informació que recull. El nombre de bases de dades en cada cas ja reflexa quines han estat les més adaptades a Internet i també aquelles que millor ho han fet, atès que s'han seleccionat preferentment els recursos de major qualitat.

En la pàgina següent es presenta la classificació de les bases de dades presents a Internet des del punt de vista químic, incloent ja aquelles que seran tractades en aquest apartat. Aquelles fonts d'informació que presentin diferents tipus d'informació romanen repetides, com ara el cas de *Toxnet*, que pot ser interpretada a la vegada com a base de dades documental i de tipus molecular, pel que les bases de dades moleculars (*HSDB* i *ChemIDplus*) que inclou resten diferenciades de les documentals. Així, també *Chemfinder* resta repetida en la classificació, en ser una base de dades molecular a la vegada que de pàgines web, en aquest cas de certes pàgines que parlen de cada molècula.

El format escollit per a presentar les dades ha estat en forma de taules. En les files es recullen les característiques de cadascun dels paràmetres escollits en la descripció de les bases de dades, que fou revisada l'abril de 2003.

Únicament la descripció dels tipus de cerca s'efectuarà separatament per tipus de bases de dades, atès que és una de les parts que considerem que necessiten una major extensió per a explicar cadascuna de les capacitats que ofereixen les bases de dades d'aquest estudi. En aquest punt es concretarà, per exemple si les bases de dades moleculars permeten cerques subestructurals, a través de quin tipus d'interfície així com les prestacions que ofereix.

Bases de dades

- **Moleculares**
 - **Dades estructurals** { ▪ 1 NIST WebBook, 2 Chemfinder, 3 ChemIDplus, 4 ChemExper, 5 Enhanced NCI Database Browser, 6 Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Structure Index
 - **Dades físicoquímiques** { ▪ 1 NIST WebBook, 2 Chemfinder, 3 ChemIDplus, 4 ChemExper, 7 SDBS, 8 HSDB, 9 SOLV DB
 - **Catàlegs comercials** { ▪ 4 ChemExper 5 Enhanced NCI Database Browser, 10 ChemDat – The Merck Chemical Databases, 11 Search Center – Sigma-Aldrich Catalog, 12 Chem.com, 13 MetaXChem Chemicals,
 - **Dades de seguretat/ perillositat** { ▪ 3 ChemIDplus, 8 HSDB

- **Documentals**
 - **MSDS** { ▪ 14 TheMSDS.com
 - **Pàgines web^a** { ▪ 2 Chemfinder, 15 Scirus
 - **Articles** { ▪ 15 Scirus, 16 Toxnet, 17 Beilstein Abstracts, , 18 Infotrieve - Article Finder, 19 MetaXChem Articles
 - **Patents** { ▪ 20 Espacenet, 15 Scirus
 - **Tesis doctorals** { ▪ 21 TDX, 22 Teseo

- **Textuals**
 - **Acrònims** { ▪ 23 Abbreviations of Chemical Compounds
 - **Nomenclatura** { ▪ 6 Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Structure Index

- **Altres** { ▪ 24 World Database of Crystallographers

^a Equivalents als motors de cerca, ja vistos majoritàriament en el capítol X. Tal com llavors es va esmentar, bases de dades de diferents tipus de documents poden incloure entre els seus registres llocs web, i aquestes seran les descrites en aquest capítol.

NIST Chemistry WebBook

NIST Standard Reference Database Number 69 - March, 2003 Release

View: [Search Options](#), [Models and Tools](#), [Documentation](#), [Notes](#)

[Show Credits](#)

NIST reserves the right to charge for access to this database in the future.

Search Options [top](#)

General Searches

- Formula
- Name
- CAS registry number
- Reaction
- Author
- Structure

Physical Property Based Searches

- Ion energetics properties
- Vibrational and electronic energies
- Molecular weight

Models and Tools [top](#)

- Thermophysical Properties of Fluid Systems High accuracy data for a select group of fluids.
- Group Additivity Based Estimates Estimates of gas phase thermodynamic properties based on a submitted structure.

Fig. 11-2 Fragment de la pàgina web *NIST Chemistry WebBook*

ChemFinder.Com
Database & Internet Searching

[ChemStore.Com](#) [ChemFinder.Com](#)
[ChemNews.Com](#) [ChemClub.Com](#)
[CambridgeSoft.Com](#)

[REFERENCE](#) [CHEMICALS](#) [REACTIONS](#) [SAFETY](#) [REGISTER](#) [ABOUT](#) [CONTACT](#)
[ChemFinder \(Free Searching\)](#) [ChemINDEX](#) [The Merck Index](#) [NCI](#)

Enter a Chemical Name, CAS Number, Molecular Formula or Weight.
Use * for partial names (e.g. ben*).

Search here for free. For professional searching, use [ChemINDEX](#).

[Substructure Query with Plugin](#) | [Download Free Plugin](#) | [Add a Compound](#) | [Search Tips](#) | [Glossary](#)

Individual access to ChemFinder is complimentary on a limited basis. Access by corporations, academic institutions and government organizations is granted on an enterprise subscription basis.
Please contact databases@cambridgesoft.com for enterprise subscription information.

Reference Databases			
ChemFinder	FREE	Search	About
ChemINDEX		Search	About
NCI		Search	About
The Merck Index		Search	About
Chemical Databases			
ChemACX Net	FREE	Search	About
ChemACX Pro		Search	About
ChemACX Pro & ChemACX-SC Pro	CD only		About
Reaction Databases			
Organic Synthesis	FREE	Search	About
Compendium of Chiral Auxiliary Applications		Search	About


 The Professional's ChemFinder.Com

Hate Pop-Up Ads? Subscribe to ChemINDEX, a Professional's version of ChemFinder...

- Search with no ads.
- Get all available hits, not just the first 25.
- Export your hit lists.

ChemINDEX & NCI Personal Internet Edition: One Year Subscription
 Commercial Price: \$149.00
 Educational Price: \$49.00
 Student Price: \$29.00
[Learn More](#)

An Enterprise Internet Edition for corporations, universities, libraries, is also available. Email databases@cambridgesoft.com for information.

Fig. 11-3 Fragment de la pàgina web *Chemfinder*

Taula 11-1 Descripció de *NIST WebBook* i *Chemfinder*

	1 NIST WebBook³⁴	2 Chemfinder³⁵
Creador	National Institute of Standards and Technology, institució pública dels Estats Units creada el 1901	CambridgeSot, una empresa que ofereix altres serveis a través del seu portal
Any de creació	1996	1995
Visibilitat	1460	4250
Nombre de registres que conté	Aproximadament 48.000	Vora 75.000
Cobertura	Dades numèriques, fisicoquímiques i estructurals de molècules orgàniques i petites molècules inorgàniques	Dades numèriques de molècules relativament conegudes i senzilles
Estructura del registre	Fòrmula, pes molecular, CAS Registry Number, estructura química, sinònims, dades a l'abast (espectres, dades termodinàmiques), estructura en 2-D i 3-D	Nom, CAS Registry Number, Sinònims, Fórmula, pes molecular, punts d'ebullició i fusió, solubilitat, enllaços a un recull de 8000 pàgines on es parla d'aquesta substància
Usuaris potencials	Mateix tipus d'usuaris que necessiten emprar un manual tipus <i>Handbook</i> , químics en general amb una necessitat puntual de consulta	Qualsevol científic que necessiti una dada concreta o bé trobar pàgines web que parlin d'una molècula
Facilitat de navegació/disponibilitat de menú d'ajuda	Bona, diferents menús on s'explica el contingut i els tipus de cerca	Intuïtiva, ofereix enllaços per a descarregar connectors i glossari del significat dels camps
Freqüència d'actualització	Elevada, cada any elaboren un informe dels canvis i els nous continguts	Baixa, molts dels enllaços ja no són actius
Mode d'inclusió	Selecció per part de la institució	En una versió anterior permetia afegir registres
Formats de visualització	Arxius estructurals en format mol, dades termodinàmiques en Sistema Internacional o bé en calories	Permet veure molècules en 3-D mitjançant el Chem3D Plugin Net
Altres	Permet cerca per reacció, essent de les poques bases de dades a Internet que ho permet	A partir de la tercera cerca en un mateix dia cal registrar-se tot i que és gratuït. Existeix la versió de pagament

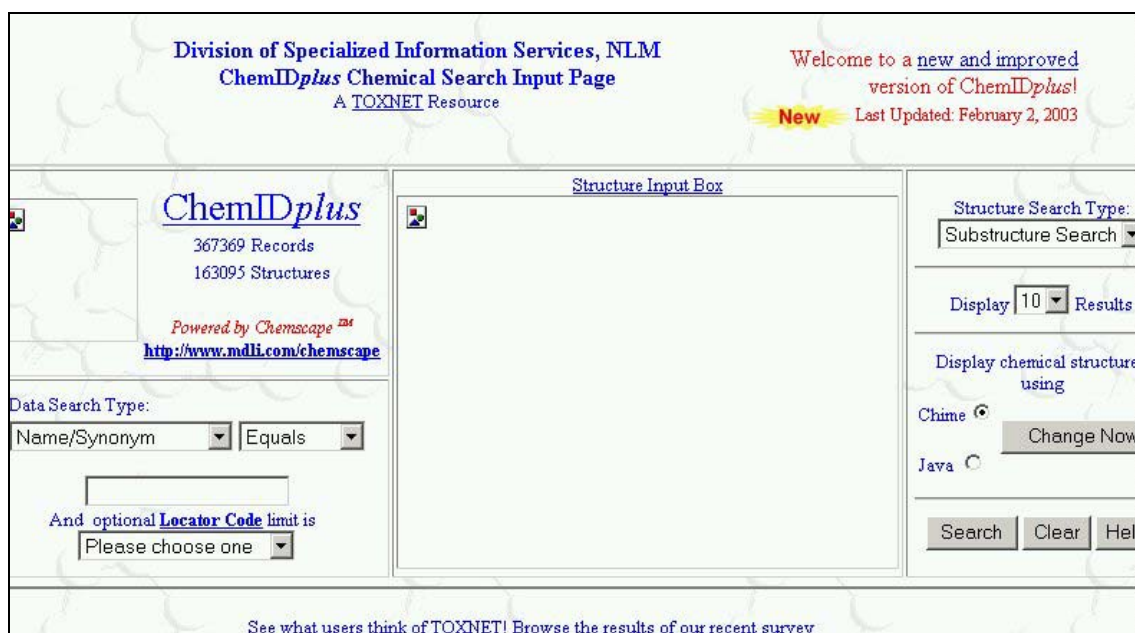


Fig. 11-4 Fragment de la pàgina web ChemID

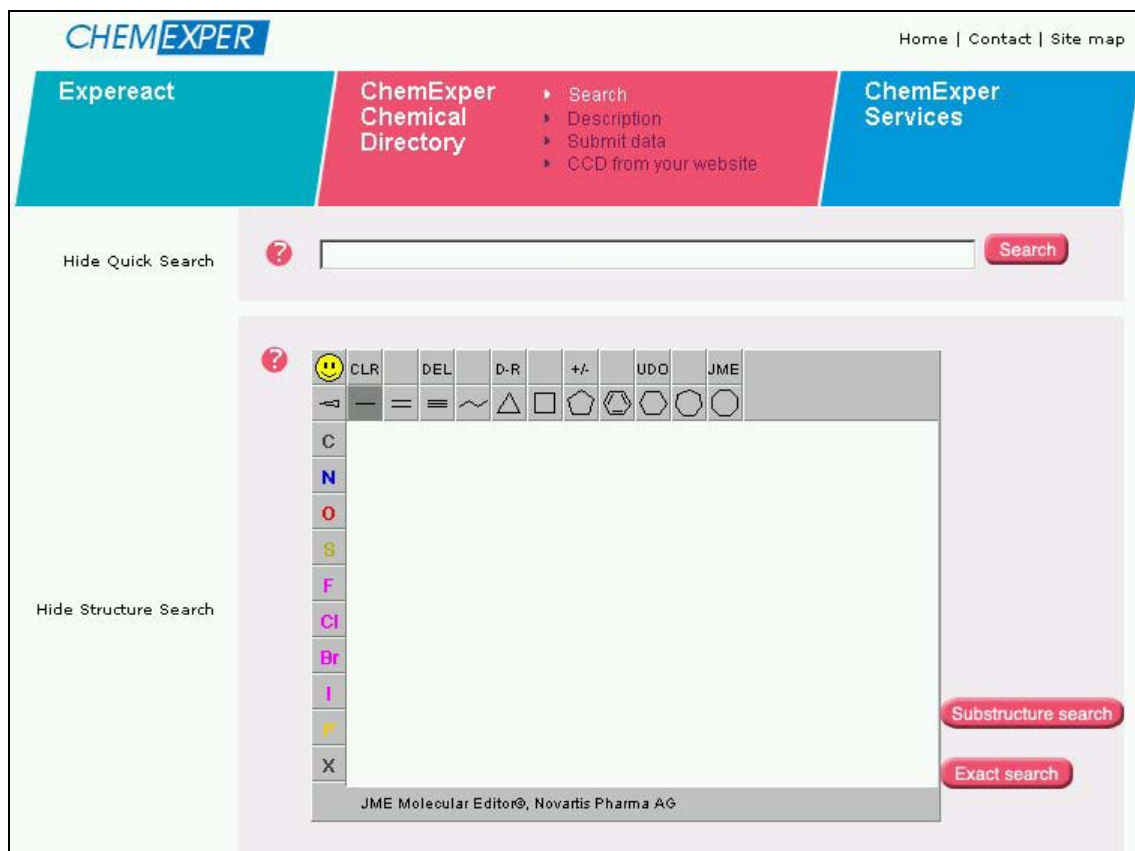


Fig. 11-5 Fragment de la pàgina web ChemExper

Taula 11-2 Descripció de ChemIDplus i ChemExper

	3 ChemIDplus³⁶	4 CCD ChemExper Chemical Directory³⁷
Creador	National Library of Medicine	ChemExper sprl, empresa amb seu a Bèlgica
Any de creació	1999	1998
Visibilitat	866	117
Nombre de registres que conté	367338 registres 163088 estructures	70.000 substàncies de 20 subministradors, es tracta d'un catàleg de diverses empreses integrat en un de sol
Cobertura	Molècules químiques, la majoria d'elles amb les seves dades de seguretat, perillositat, fisicoquímiques, etc.	Substàncies químiques a la venda
Estructura del registre	Mitjançant diferents marcs diferencia entre l'estructura molecular, noms i sinònims, codis que té en les diferents classificacions de regulació i perillositat, CAS Registry Numbers actual i obsolets, enllaços a d'altres bases de dades on es parla de cada substància, ja siguin moleculars com documentals	Nom, sinònims, fórmula molecular, pes molecular, CAS Registry Number, punt de fusió, símbols de perillositat, MSDS, dades espectrals (5000 IR), accés a dades estructurals, accés a cada subministrador oferint dades de comanda, puresa i codi dins del respectiu catàleg
Usuaris potencials	Qualsevol científic o metge amb necessitats de dades puntuals sobre substàncies químiques	Químics que vulguin saber quines empreses comercialitzen un producte que volen adquirir
Facilitat de navegació/ disponibilitat de menú d'ajuda	Bona, tot i que el sistema de marcs pot confondre en determinades tries que s'ofereix a l'usuari. Manuals ben fets i compredors	Millorable, la veritable interfície de cerca no resta del tot visible
Freqüència d'actualització	Elevada, darrera versió febrer 2003	Elevada, atès que les empreses són les primeres interessades
Mode d'inclusió	Selecció per part de la institució	Permet a les empreses afegir els seus productes
Formats de visualització	Arxiu estructural en format mol	Arxiu estructural en format mol
Altres	Un exemple que no tota la informació de qualitat ha de ser de pagament, tot i que depèn d'una de les institucions més reconegudes, de tipus públic, amb visió d'assistir als seus usuaris	

Database status: 230251 open structures ready for searching.
 Mail [Wolf-D. Ihlenfeldt](#) for bug reports, comments and questions (and CC to [Marc C. Nicklaus](#) if you like).

Start Search | Reset

Query Type	Negate	Query Data Value
NSC Number(s)	<input type="checkbox"/>	Editor []
CAS Number(s)	<input type="checkbox"/>	Editor []
Formula...	<input type="checkbox"/>	Editor []
Record Number(s)	<input type="checkbox"/>	Editor []
Molecular Weight Range	<input type="checkbox"/>	Editor []
Number of Atoms Range	<input type="checkbox"/>	Editor []
Number of ESSR Rings Range	<input type="checkbox"/>	Editor []
Number of H-Bond Donors Range	<input type="checkbox"/>	Editor []
Number of H-Bond Acceptors Range	<input type="checkbox"/>	Editor []
Number of Rotatable Bonds Range	<input type="checkbox"/>	Editor []
Number of Catalyst Conformers	<input type="checkbox"/>	Editor []
Exact Structure...	<input type="checkbox"/>	Editor []

Connect query fields by: AND OR XOR

Max. number of hits and search time: 100 hits, 90 seconds Background job named []

Output Format: HTML Table with Samples preferably 3D

Output Sort: NSC Number

Start Search | Reset | Page loads: 02.1428 | Queries: 00.1294

Fig. 11-6 Fragment de la pàgina web *Enhanced NCI Database Browser*

NIST Special Publication 922

Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Structure Index

Lane C. Sander and Stephen A. Wise
 Chemical Science and Technology Laboratory
 National Institute of Standards and Technology
 Gaithersburg, MD 20899

NIST Special Publication 922 "Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Structure Index" is presented as an aid in the identification of the chemical structures and nomenclature of 660 common (and not so common) polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs). This electronic version of the Structure Index allows you to [browse](#) or [search](#) to display name(s), chemical structures, Chemical Abstract Service (CAS) Registry numbers, molecular weights, and molecular descriptors. The database may be searched by name and/or molecular weight. From each structure record you can also display pages from the original print publication, and chemical structures may be downloaded as Windows metafiles or [molfiles](#). This work was undertaken in part to provide a self-consistent source of length-to-breadth (L/B) ratio data for PAHs, and SP 922 represents the most comprehensive listing of calculated L/B ratios published to date.

Search

Compound Name contains []

Molecular Weight contains []

Enviar

is
is not
before
after

Browse

< Start with last structure Start with first structure >

[Alphabetical Index](#) [Introduction](#)

Fig. 11-7 Fragment de la pàgina web *Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Structure Index*

Taula 11-3 Descripció d'Enhanced NCI Database i Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Structure Index

	5 Enhanced NCI Database³⁸	6 Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Structure Index³⁹
Creador	Computer Chemistry Center (Alemanya) i National Cancer Institute (Estats Units) amb col·laboració d'empreses com ara Novartis o ACD Labs	National Institute of Standards and Technology, institució pública dels Estats Units creada el 1901
Any de creació	1996	1997
Visibilitat	Es tracta d'una nova versió, pel que l'enllaç encara no ha estat prou actualitzat i s'ha considerat més adient no calcular-la	49
Nombre de registres que conté	250.251	660
Cobertura	Estructures moleculars de substàncies químiques amb altres dades numèriques experimentals o calculades	Es tracta de la versió electrònica d'una obra de referència de molècules policíclics aromàtiques
Estructura del registre	Un registre força llarg que recull informació molt heterogènia, des de les dades habituals a dades de perillositat (calculades), concentració en la cèl·lula, etc. Hi ha un apartat que recull enllaços a altres bases de dades complementàries, com ara NIST WebBook, Chemfinder o ChemIndustry	Ofereix els diferents noms d'aquest tipus de molècules de difícil nomenclatura així com el CAS Registry Number i una numeració dels àtoms
Usuaris potencials	Científics preferentment interessats en dades estructurals	Químics, sobretot orgànics, amb dificultats de trobar el nom normalitzat de molècules policíclics
Facilitat de navegació/ disponibilitat de menú d'ajuda	Bona, cal una mica de pràctica atesa la gran quantitat de paràmetres que l'usuari pot emprar però el producte resta ben presentat	Senzilla, atès que l'obra és força concreta i fàcil de consultar
Freqüència d'actualització	Elevada	Tan sols es la transcripció d'una obra en format paper sense intenció formulada de ser actualitzada
Mode d'inclusió	Per part dels creadors	Tria per part dels creadors
Formats de visualització	Arxiu estructural en format mol, pdb, Rasmol, Smiles, etc.	Permet descarregar l'arxiu en format mol o en wmf
Altres	Es pot considerar la base de dades amb la millor interfície de cerca de totes les descrites	

Search Compounds	Search NMR	Search MS
Compound Name: <input type="text"/>	^{13}C Shift (ppm) <input type="text"/>	^1H Shift (ppm) <input type="text"/>
Molecular Formula: <input type="text"/>	<input type="text"/> AND <input type="text"/>	<input type="text"/> AND <input type="text"/>
Number of Atoms: Carbon <input type="text"/> to <input type="text"/> Hydrogen <input type="text"/> to <input type="text"/> Oxygen <input type="text"/> to <input type="text"/> Nitrogen <input type="text"/> to <input type="text"/>	<input type="text"/> AND <input type="text"/> <input type="text"/> AND <input type="text"/> <input type="text"/> AND <input type="text"/> allowance \pm 2.0	<input type="text"/> AND <input type="text"/> <input type="text"/> AND <input type="text"/> <input type="text"/> AND <input type="text"/> allowance \pm 0.2
Molecular Weight: <input type="text"/> to <input type="text"/>	NOT <input type="text"/> to <input type="text"/> <input type="text"/>	NOT <input type="text"/> to <input type="text"/> <input type="text"/>
CAS Registry No.: <input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
SDBS No.: <input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<input type="button" value="Clear"/>	<input type="button" value="Clear"/>	<input type="button" value="Clear"/>
<input type="button" value="Back to Home Page"/>	<input type="button" value="Query"/>	<input type="button" value="Clear All"/>

Fig. 11-8 Fragment de la pàgina web SDBS

About • Contact • Search

National Library of Medicine

Specialized Information Services

▶ Tox. & Env. Health ▶ TOXNET ▶ HSDB

Hazardous Substances Data Bank

Databases

- [Hazardous Substances Data Bank](#) i
- [IRIS](#) i
- [Genetic Toxicology \(Mutagenicity\)](#) i
- [CCRIS](#) i
- [GENE-TOX](#) i
- Multi-Databases** i
- [TOXLINE](#) i
- [DART/ETIC](#) i
- [TRI](#) i
- [ChemIDplus](#) i
- [TOXNET Home](#)

Search HSDB

For chemicals, add synonyms and CAS numbers to search:

Yes No

Other NLM Resources

- [DIRLINE](#)
- [Haz-Map](#)
- [AltBib](#)
- [Tox Weblinks](#)
- [MEDLINEplus](#)
- [Tox/Env. Health subset](#)
- [PubMed](#)
- [NLM Gateway](#)
- [Locatoplus](#)

Support Pages

- [Help](#)
- [Fact Sheet](#)
- [Sample Record](#)
- [HSDB Scientific Review Panel](#)

U.S. National Library of Medicine, 8600 Rockville Pike, Bethesda, MD 20894,
 National Institutes of Health, Department of Health & Human Services
 Copyright and Privacy Policy, Freedom of Information Act, Accessibility
 Customer Service: tehip@eh.nlm.nih.gov

Fig. 11-9 Fragment de la pàgina web HSDB

Taula 11-4 Descripció de *SDBS* i *HSDB*

	7 SDBS⁴⁰	8 Hazardous Substances Data Bank (HSDB)⁴¹
Creador	National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (Japó)	National Library of Medicine
Any de creació	Iniciada l'any 1982, formalment enllestida l'any 1999 ⁴²	Es consulta a partir de Toxnet, que serà descrit més endavant
Visibilitat	487	Es consulta a partir de Toxnet, que serà descrit més endavant
Nombre de registres que conté	30.300 registres, 20.500 espectres MS, 13.700 RMN ¹ H, 11.800 RMN ¹³ C, 47.300 IR, 3.500 RAMAN, 2.000 ESR	4.671
Cobertura	Molècules únicament orgàniques	Substàncies perilloses amb diferents estudis realitzats i amb avaluació d'experts
Estructura del registre	Nom (i sinònims, fórmula molecular, dibuix 2-D, pes molecular, CAS Registry Number, espectres (en gràfica i tabulats))	Efectes sobre humans, toxicitat en animals, tractament mèdic en cas d'emergència, metabolisme, farmacologia, propietats fisicoquímiques, referències on aprofundir la informació, sinònims i identificadors
Usuaris potencials	Químics que volen saber les dades espectrals d'una molècula o bé quines molècules poden correspondre a determinats senyals en els espectres	Químic, bioquímics i metges que volen saber els efectes tòxics de substàncies químiques
Facilitat de navegació/ disponibilitat de menú d'ajuda	Molt intuïtiva, manual d'ajuda on resta les diferents opcions de cerca explicades	Molt bona, presenta manuals d'ajuda i una descripció prèvia acurada del que es pot trobar
Freqüència d'actualització	Darrera març 2001	Elevada, darrera abril 2003
Mode d'inclusió	Per part dels creadors	Per part dels creadors
Formats de visualització	-	-
Altres	Apart de certs catàlegs comercials que ofereixen dades d'anàlisi de puresa, única alternativa de certa qualitat, segons el nostre coneixement, a les bases de dades comercials d'aquest tipus d'informació	-

NCMS
National Center for
Manufacturing Sciences

SOLV-DB®

Choose Solvent Lookup Criteria:(How to use these selections.)

Solvent Name Select By Solvent Name

Chemical Abstracts Number Select By Chemical Abstracts Number

Sax Number Select By Sax Number

Chemical Formula Select By Chemical Formula

Select By Chemical Category Select By Chemical Category

Select By Property Range Select By Property Range

Select By Matching Text Select By Matching Text

Select By Synonym Select By Solvent Synonym

NCMS Home Page SOLV-DB® Home Page Comments To Webmaster

Fig. 11-10 Fragment de la pàgina web SOLV-DB

MERCK

Corporate Investors / Media Pharmaceuticals Chemicals Merck Worldwide Contact Search

ChemDAT Bases de Datos Químicos Merck CONTACTO DECLINACIÓN DE RESPONSABILIDAD AYUDA

www.chemdat.de These pages are also available in Select Language

HOME CATÁLOGOS Y DOCUMENTOS SEGURIDAD OTROS SERVICIOS ¡MERC ES MÁS!

Catálogo Merck - búsqueda estándar - búsqueda por estructura gráfica - palabras clave/acceso directo :: Certificados de Análisis :: Merck Synopsis :: Microbiology Manual

Merck búsqueda por estructura química

Diseñar una molécula

☺ CLR DEL D-R +/- UDO JME

→ ← = ≡ ~ △ □ ○ ◻ ◻ ◻

C

N

O

S

F

Cl

Br

I

P

X

Especificar opciones

Modo de búsqueda:

estructura exacta

subestructura

Limitar el número de resultados a:

25 resultados

Fig. 11-11 Fragment de la pàgina web ChemDat Merck

Taula 11-5 Descripció de SOLV-DB i ChemDat -Merck

	9 SOLV DB⁴³	10 ChemDat – The Merck Chemical Databases⁴⁴
Creador	National Center for Manufacturing Sciences, organització no lucrativa dels Estats Units	Merck i Chemdat
Any de creació	1997	[1997]
Visibilitat	137	64
Nombre de registres que conté	Aproximadament 180	10.500 registres
Cobertura	Solvents orgànics emprats en el món de la indústria i en els laboratoris	Productes comercialitzats per Merck
Estructura del registre	Té quatre apartats de cada registre, dades de salut i seguretat, físicoquímiques, de regulació i de tipus mediambiental	De cada registre es poden consultar dades generals (pes i fórmula molecular, densitat, sinònims, CAS Registry Number), dades toxicològiques, de seguretat, transport i emmagatzematge, especificacions, MSDS i certificats d'anàlisi
Usuaris potencials	Enginyers químics i químics que necessita saber informació sobre solvents pel seu ús o la seva degradació	Químics interessats en la compra d'un determinat producte
Facilitat de navegació/disponibilitat de menú d'ajuda	Bona, explicacions dels tipus de cerca que permet	Bona, permet diferents tipus de cerca i amb consells per una cerca òptima
Freqüència d'actualització	Irregular, no sembla haver actualitzat el seu contingut en el darrer any	Elevada
Mode d'inclusió	Per part dels creadors	Per part de l'empresa
Formats de visualització	-	-
Altres	És una petita base de dades però d'un tipus d'informació molt concreta, útil en cas de necessitar aquelles dades, atès que no acostumen a aparèixer en altres fonts d'informació	Dins dels catàlegs comercials d'una sola empresa, és un dels millors que s'ha trobat a Internet

SIGMA-ALDRICH Click for SEARCH CENTER

YOUR SOURCE | Order | Login/eProfile | Technical Service | Customer Service

Product Search

1. Select Search Type:

Product Name CAS# Full Text
 Product Number MDL# Keyword
 Molecular Formula

2. Select Search Scope:
All Research Products

3. Enter Search Text:

GO help

MSDS & CofA Direct

Material Safety Data Sheets (MSDS)
 Certificate of Analysis (CofA)

For Product Number:

From This Brand:
Choose a Brand

GO help

Other Search Options

Sub Structure Search
Use your favorite drawing tools to copy and paste a structure into this powerful tool.

Supelco Chromatograms

Retrieve product data (ie: description, pricing and ordering information) with links to more product information documents using this interface.

If the product you need is not available, please click here.

Fig. 11-12 Fragment de la pàgina web Search Center Sigma-Aldrich

Main | suppliers | catalogs | custom synthesis | distributors | sale | services | companies | structure search

Click on the logo to visit:

WILEY
The latest and best books in chemistry from Wiley...

chem.com
Product Catalogs

Dear Chemical Buyer,
Please use the two query boxes below to search our comprehensive WWW Chemicals and WWW Specialty Chemicals Catalogs. Product lines of all listed suppliers are included.
To search individual company catalog, click on company name in the left frame window.

WWW CHEMICALS	WWW SPECIALTY CHEMICALS
If you are looking for Fine Chemicals, or Biochemicals, and know chemical name (e.g., pyridine), CAS number (110-86-1), molecular formula (C ₅ H ₅ N), or catalog number, type any of these search criteria in this box :	If you are searching for Specialty Chemicals, you can type catalog number, trade name, generic name, application area (e.g., resins, films), serviced industry (e.g., consumer goods, electronics, health care), or other criteria in this box :
<input type="text"/> SEARCH	<input type="text"/> SEARCH

Search [WWW Chemical Equipment Catalog](#)

BEYO CHEMICAL

- [Argus Chemicals](#)
- [Australian Textile Chemicals](#)
- [Bedoukian Research](#)
- [Beijing Golden Olive](#)
- [BEYO Chemical](#)
- [Cambrex Innovator Pharmaceutical](#)
- [Cardinal Industries](#)
- [Changchem](#)
- [ChemDiv](#)
- [Chinaphotochem](#)
- [Chiron AS](#)
- [Contract Chemicals](#)
- [Degussa Fine Chemicals](#)
- [Digital Specialty Chemicals](#)
- [Esprich Technologies](#)
- [Fluorochem](#)
- [Gadiv Petrochemical Industries](#)
- [Jiangsu Feixiang Chemical](#)
- [Korea Fine Chemical](#)
- [Linchuan Chemical](#)
- [Longshen Fine Chemical](#)
- [Miteni](#)
- [Narchem](#)
- [Nantong Benison Chemicals](#)
- [Oakwood Products](#)
- [Omega Chemical](#)

Fig. 11-13 Fragment de la pàgina web Chem.com

Taula 11-6 Descripció de Search Center Sigma-Aldrich i Chem.com

	11 Search Center Sigma-Aldrich Catalog⁴⁵	12 Chem.com Catalogs⁴⁶
Creador	Sigma-Aldrich	Chem.com, una empresa dels Estats Units
Any de creació	No s'ha pogut esbrinar aquesta data, però és anterior a l'any 2000	1995
Visibilitat	1150	13
Nombre de registres que conté	85.000	No especificat
Cobertura	Substàncies bioquímiques i orgàniques comercialitzades per aquesta empresa	Productes comercialitzats per un conjunt de 38 distribuïdors de productes químics
Estructura del registre	Nom, sinònims, pes i fórmula moleculars, CAS <i>Registry Number</i> , puresa, referències bibliogràfiques en l'Índex (a Merck i Beilstein, entre d'altres), MSDS, IR's, certificat d'anàlisi	Més que donar un registre del producte mostra les empreses que el comercialitzen i un enllaç al propi catàleg de l'empresa on llavors s'haurà de tornar a fer la cerca
Usuaris potencials	Químics interessats en la compra d'un determinat producte	Químics interessats en la compra d'un determinat producte
Facilitat de navegació/disponibilitat de menú d'ajuda	Bona, amb explicacions dels passos a seguir	Regular, atès que és un portal amb molts serveis i poca informació prèvia
Freqüència d'actualització	Elevada	Irregular, alguna de les seves pàgines no semblen haver canviat des del 2002
Mode d'inclusió	Per part dels creadors	Cada empresa ha d'actualitzar i afegir els seus registres
Formats de visualització	-	-
Altres	-	Tot i ser valuós per tenir diferents empreses amb llurs catàlegs, no presenta tantes capacitats com les altres recentment esmentades.

CHEMIE.DE
INFORMATION SERVICE

MetaXChem > Chemicals

Sonntag, 01. Juni 2003

Chemicals | **Articles**

Enter Search Keyword(s) or Click Icon to Edit Structure

Search by: Product Name
 Product Name
 CAS Registry No
 Structure (SMILES)
 Substructure (SMILES) [Reset]

Timeout in

Select Suppliers

- ABCR Database
- ACROS Organics
- ALFA AESAR Database
- Bedoukian
- Chemexpo Database
- Dojindo Chemicals
- EM Science
- Merck KGaA
- NIST Webbook
- PFALTZ & Bauer Database
- Pfanstiehl Chemicals
- SYNCHEM Laborgemeinschaft **NEW!**
- TCI America

NOVARTIS
IME Structure Editor © Peter Ertl, Novartis

Fig. 11-14 Fragment de la pàgina web *MetaXChem Chemicals*

themsds.com

search MSDS

contact | terms

Find

Simple Searches:
Searches for MSDS, Manufacturer, CAS#. All searches are case insensitive and accent sensitive. Searching for "WD-40" will match the lowercase "wd-40", uppercase "WD-40".

Expand your search using wildcards:
By typing an * at the end of a keyword, you can search for the word with multiple endings.

Including or excluding words:
To make sure that a specific word is always included in your search topic, place the plus (+) symbol before the key word in the search box. To make sure that a specific word is always excluded from your search topic, place a minus (-) sign before the keyword in the search box.

Searching for web addresses:
If your search term is a URL, like www.themsds.com, the search engine will redirect you directly to the URL.

© 2000-2002 DSJ Enviro. All right reserved.

Fig. 11-15 Fragment de la pàgina web *theMSDS.com*

Taula 11-7 Descripció de *MetaXChem Chemicals* i *TheMSDS.com*

	13 MetaXChem Chemicals⁴⁷	14 TheMSDS.com⁴⁸
Creador	GmbH	TheMSDS.com
Any de creació	1997	2000
Visibilitat	11	No calculat, atès que ha tingut canvis d'adreça que pot fer que els enllaços restin repartits
Nombre de registres que conté	No especificat, però de com a mínim 50.000, el que cobreix un dels catàlegs inclosos en el cercador	74.355
Cobertura	Substàncies químiques de 12 distribuïdors més les contingudes al NIST Webbook	Full de dades de seguretat de materials (Material Safety Data Sheets) de substàncies químiques fets per diferents empreses
Estructura del registre	Depèn de cadascun dels catàlegs, atès que un enllaç condueix al catàleg de l'empresa en qüestió	Dóna enllaços a documents de diferents formats (html, txt, pdf) que resten penjats en pàgines web
Usuaris potencials	Químics o altres científics que volen adquirir algun producte químic	Qualsevol científic amb necessitats informatives de perillositat de substàncies químiques
Facilitat de navegació/disponibilitat de menú d'ajuda	Bona, en la pàgina inicial del cercador especifica les concrecions de l'interfície. Manca, però, un manual d'ajuda	Interfície de cerca molt senzilla, el que comporta que tingui menys capacitats de cerca
Freqüència d'actualització	Elevada, però depenent de cadascun dels distribuïdors	No especificada
Mode d'inclusió	Per part dels creadors	Sembla ser la selecció per part d'un motor de cerca però no s'explica l'algoritme que empra
Formats de visualització	Depenent dels distribuïdors, en quin lloc web es visualitzen finalment els resultats	Enllaç a la pàgina on resta contingut la MSDS
Altres	Pot considerar-se un metacercador de productes químics	Pot considerar-se un metacercador de MSDS

scirus
for scientific information only

About Us | Newsroom | Advisory Board | Submit Website | Search Tips | Contact Us

Advanced Search | Basic Search | Search Preferences

Search input fields and dropdowns for search criteria.

AND

Published between: 1930 and 2004

Information types

- All
- Abstracts
- Articles
- Books
- Company homepages
- Conferences
- Patents
- Preprints
- Scientist homepages

File formats

- All
- HTML
- PDF

Content sources

- All journal sources
 - Beilstein on ChemWeb
 - BioMed Central
 - MEDLINE on BioMedNet
 - ScienceDirect
 - Society for Industrial & App. Mathematics
- All Web sources
 - Chemistry Preprint Server
 - CoqPrints
 - E-Print ArXiv
 - Computer Science Preprint Server
 - Mathematics Preprint Server

Search filters dropdown menu:

- All content fields
- Article title
- Journal title
- Author(s) name
- Author affiliation(s)
- Keyword(s)
- ISSN
- (Part of a) URL

Fig. 11-16 Fragment de la pàgina web Scirus

About • Contact • Search

National Library of Medicine
Specialized Information Services

SIS **NLM**

TOXNET ▶ Tox. & Env. Health ▶ TOXNET

Welcome to TOXNET, a cluster of databases on toxicology, hazardous chemicals, and related areas.

Databases

- HSDB
- IRIS
- GENE-TOX
- CCRIS
- Multi-Databases
- TOXLINE
- DART/ETIC
- TRI
- ChemIDplus

Search All Databases

Search input field with Search and Clear buttons.

Other NLM Resources

- DIRLINE
- Haz-Map
- AltBib
- Tox Weblinks
- MEDLINEplus
- Tox/Env. Health subset
- PubMed
- NLM Gateway
- Locatoplus

Support Pages

- Help
- Database Descriptions
- News
- Recent TOXNET Survey Results

Need More Information?

U.S. National Library of Medicine, 8600 Rookville Pike, Bethesda, MD 20894,
National Institutes of Health, Department of Health & Human Services
Copyright and Privacy Policy, Freedom of Information Act, Accessibility
Customer Service: tehip@eh.nlm.nih.gov
Last modified on May 8, 2002.

Fig. 11-17 Fragment de la pàgina web Toxnet

Taula 11-8 Descripció de Scirus i Toxnet

	15 Scirus⁴⁹	16 Toxnet⁵⁰
Creador	Elsevier	National Library of Medicine
Any de creació	2000	1998
Visibilitat	3240	2430
Nombre de registres que conté	Atès que recull diferents tipus de documents, destacarem alguns d'aquests: <ul style="list-style-type: none"> ▪ 45 milions pàgines .edu, 14.8 milions pàgines .org, 5.5 milions pàgines .ac.uk, 18 milions pàgines .com 4.7 milions pàgines .gov ▪ 12.65 milions resums de Medline, 2.35 milions articles ScienceDirect ▪ 1 milió patents USPTO ▪ 675.000 resums Beilstein Abstracts ▪ 217 milions articles electrònics E-Print Arxiv, 1070 articles de BioMed Central 	Permet cercar en diferents bases de dades de molècules o documentals. Aquestes són: <ul style="list-style-type: none"> ▪ HSDB (molecular) 4671 ▪ IRIS (molecular) 500 ▪ GENE (molecular) 3000 ▪ CCRIS (molecular) 8000 ▪ TOXLINE (documental): 3 milions referències bibliogràfiques ▪ DART/ETIC 100.000 referències ▪ ChemID 367.000
Cobertura	Recull diferents tipus de documents: articles, patents, pàgines web, informes, publicacions preliminars i articles únicament electrònics no únicament de Química sinó de qualsevol de les disciplines científiques, podent-se, però, acotar per cadascuna	Diferents articles i molècules des del punt de vista toxicològic, cancerigen i de salut.
Estructura del registre	Descripció breu de cada resum, depenent de cada tipus de documents, però oferint un enllaç a cada una de les fonts d'informació que recopila	Depèn de cadascuna de les bases de dades
Usuaris potencials	Qualsevol científic	Metges, químics i altres científics interessats en la perillositat de substàncies
Facilitat de navegació/disponibilitat de menú d'ajuda	Molt bona, amb bona informació prèvia del que es pot trobar i tipus de cerca	Molt intuïtiva i amb gran quantitat de manuals d'ajuda
Freqüència d'actualització	No especificada	No especificada
Mode d'inclusió	Algun tipus de motor de cerca, tot i que no s'especifica quin	Per part dels creadors
Formats de visualització	Depenent del recurs	-
Altres	-	-

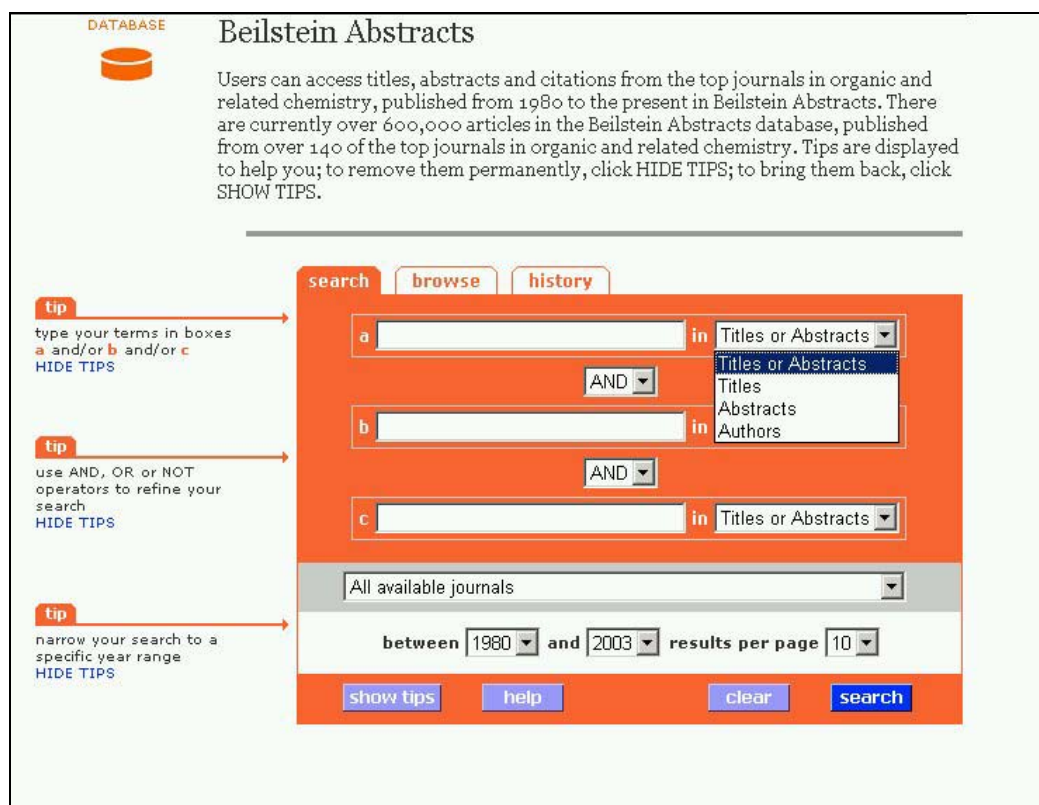


Fig. 11-18 Fragment de la pàgina web *Beilstein Abstracts*



Fig. 11-19 Fragment de la pàgina web *ArticleFinder*

Taula 11-9 Descripció de *Beilstein Abstracts* i *ArticleFinder*

	17 Beilstein Abstracts⁵¹	18 ArticleFinder⁵²
Creador	<i>Beilstein Institut für Literatur der Organischen Chemie</i>	<i>Infotrieve</i>
Any de creació	1988	2000 (el servei Article Finder)
Visibilitat	46, tot i que convé aclarir que forma part del portal Chemweb on cal registrar-se	606
Nombre de registres que conté	675.000	20 milions de referències bibliogràfiques i 13 milions de resums
Cobertura	Articles de més de 140 revistes especialitzades en química orgànica des de 1980	Conté articles de diferents disciplines, incloent a més a més de Química referències provinents de Medline, ERIC, IEEE i d'altres
Estructura del registre	Cada registre consta, entre d'altres dels camps títol, autors, revista (amb localització), tipus de document, llengua, resum i accés al text complet	Títol, autors, revista amb localització, resum (si està inclòs), ISSN, editorial i preu (per poder-lo adquirir si no s'està subscrit a la revista)
Usuaris potencials	Qualsevol químic, tot i que preferentment els químics orgànics	Científics de diferents disciplines
Facilitat de navegació/disponibilitat de menú d'ajuda	Bona, amb manual d'ajuda i bona presentació de resultats en forma clara de registre	Bona, interfície clara i amb manual d'ajuda i FAQ's.
Freqüència d'actualització	No especificada però permet acotar la cerca fins l'any 2003	S'afegeixen uns 14.000 documents setmanalment
Mode d'inclusió	Selecció i indexació per part de l'institut Beilstein, de contrastada reputació	Per part dels creadors
Formats de visualització	Registre en forma de fitxa	-
Altres	Inclusa a Scirus	Malauradament, a partir del 18 de juny del 2003 caldrà pagar per cerca a diferència d'ara, on només calia pagar per accedir als articles



Fig. 11-20 Fragment de la pàgina web *MetaXChem Articles*

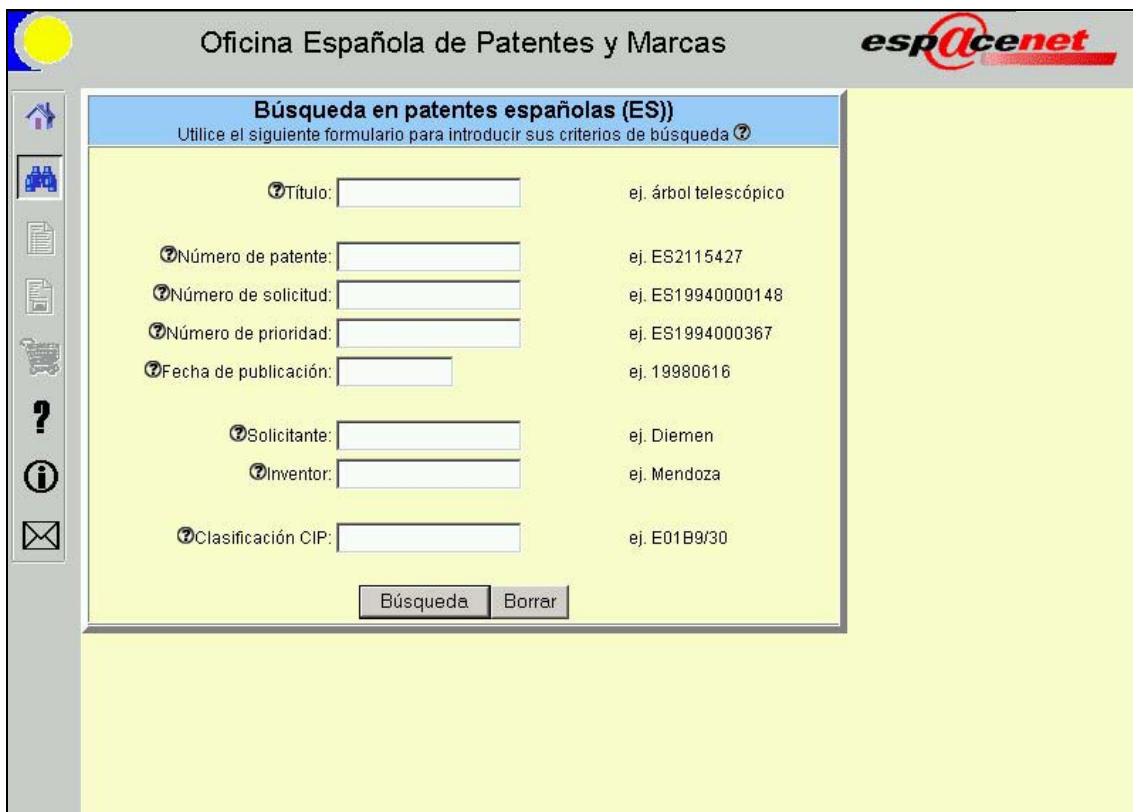


Fig. 11-21 Fragment de la pàgina web *Espacenet*

Taula 11-10 Descripció de *MetaXChem Articles* i *Espacenet*

	19 MetaXChem Articles⁴⁷	20 Espacenet⁵³
Creador	<i>GmbH</i>	<i>European Patent Office</i>
Any de creació	1997	[2000]
Visibilitat	11	51 (la versió en espanyol)
Nombre de registres que conté	No especificat, atès que recull documents de recursos web diferents	Aproximadament 30 milions de documents
Cobertura	Articles i resums de les editorials ACS, RSC, Springer, Elsevier, Kluwer, Wiley, Academic Press, World Scientific i d'altres fonts com e-Print Archive, ChemWeb, Pubmed, podent-se acotar en quines es vol fer la cerca	Patents publicades en els dos darrers anys en qualsevol estat membre de l'Organització Europea de Patents, així com de l'Oficina Europea de Patents i de l'Organització Mundial de la Propietat Intel·lectual ⁵⁴
Estructura del registre	Enllaç a l'article i en quina base de dades de les acotades s'ha trobat el resultat	Número de patent, data de publicació, inventor/s, sol·licitant/s, número de publicació, de sol·licitud, de prioritat, classificació CIP, equivalents i resum
Usuaris potencials	Preferentment químics tot i que altres científics poden trobar articles del seu interès atès el ventall ampliat de disciplines	Qualsevol científic acadèmic o de la indústria amb necessitats de cerca de patents o patentabilitat
Facilitat de navegació/disponibilitat de menú d'ajuda	Senzilla, però manca manual d'ajuda per saber què cerca realment	Bona, disposa de manual d'ajuda previ, tot i que costa saber quin tipus de patents es cerca concretament i si resta en text complet o no
Freqüència d'actualització	No especificada	No especificada
Mode d'inclusió	Indexació de cadascun dels recursos recollits	Per part de les oficines
Formats de visualització	-	Html, pdf
Altres	Forma part del mateix lloc web dedicat a substàncies <i>MetaXChem Chemicals</i> prèviament descrit	Excel·lent per localitzar un document concret, no tant recomanable per a fer cerques

Fig. 11-22 Fragment de la pàgina web TDX

Fig. 11-23 Fragment de la pàgina web Teseo

Taula 11-11 Descripció de TDX i Teseo

	21 TDX (antiga TDCat)⁵⁵	22 Teseo⁵⁶
Creador	<i>Servei coordinat pel DURSI, el CBUC i diferents universitats dels Països Catalans</i>	<i>Ministerio de Educación, Cultura y Deporte</i>
Any de creació	1999	1976
Visibilitat	41	154
Nombre de registres que conté	1012 (essent-ne un 40% de Ciències Aplicades)	No especificat
Cobertura	Tesis doctorals en format electrònic des de l'any 1999 de la UAB, UB, UPC, UPF, UdG, UdL, URV, UOC, UJI, UIB, UV.	Tesis doctorals defensades i considerades aptes a l'Estat Espanyol des de 1976. Sense text complet.
Estructura del registre	Autor, codi dins TDX, títol, universitat, departament, àrea de coneixement, matèries (CDU), directors/tutors, paraules clau, data de defensa, resum i arxius	Títol, autor, any acadèmic, universitat, centre de lectura, departament, programa doctorat, director, tribunal, descriptors, resum,
Usuaris potencials	Qualsevol usuari interessat en tesis publicades a universitats dels Països Catalans	Qualsevol usuari interessat en tesis publicades a universitats de l'Estat Espanyol
Facilitat de navegació/disponibilitat de menú d'ajuda	Bona, amb una interfície de cerca intuïtiva	Bona, amb una nova interfície de cerca
Freqüència d'actualització	Elevada, darrera inclusió abril 2003.	Suposadament un cop l'any, manquen registres de l'any 2003
Mode d'inclusió	Per part de les pròpies universitats	Per part de les Comissions de Doctorat de les Universitats que envien les dades al Consejo de Coordinación Universitaria
Formats de visualització	Pdf, rtf o .doc depenent de l'original	-
Altres	Conté alguns errors d'indexació per matèria Forma part de la Networked Digital Library of Theses and Dissertations ⁵⁷	-

Abkürzungen chemischer Verbindungen / Abbreviations of Chemical Compounds

Puede buscar en este índice. Introduzca las palabras clave que desea buscar:

Deutsch: Geben Sie eine Abkürzung für den Namen einer chemischen Verbindung ein.

English: Type in an abbreviation of the name of a chemical compound.


Beispiele / Examples

ALA - alanine
DMF - N,N-dimethylformamide
DMSO - dimethyl sulfoxide
THF - tetrahydrofuran

Siehe auch die allgemeine [Akronym-Datenbank](#) (Abkürzungen).

See also the general [acronym database](#).

Fig. 11-24 Abbreviations of Chemical Compounds



World Database of Crystallographers

And Of Other Scientists Employing Crystallographic Methods

General Form

This form will send a compound query to the IUCr database server.

WDC Server:

At least one of these fields must be specified:

- Family Name
- Title and Other Names
- Interests (by keyword)
- IUCr or other responsibilities

[Show additional fields to narrow query](#)

[Return different set of fields from default](#)

Click on button to submit query

Fig. 11-25 Fragment de la pàgina web *World Database of Crystallographers*

Taula 11-12 Descripció d'Abbreviations of Chemical Compounds i World Database of Crystallographers

	23 Abbreviations of Chemical Compounds⁵⁸	24 World Database of Crystallographers (10th Edition)⁵⁹
Creador	<i>Institu für Chemie, Freie Universität Berlin</i>	<i>International Union of Crystallographers</i>
Any de creació	1997	1997
Visibilitat	306	3
Nombre de registres que conté	Més de 12.000	No especificat
Cobertura	Abreviacions i acrònims, la majoria de compostos químics	Cristal·lògrafs d'arreu del món
Estructura del registre	Únicament l'acrònim o l'abreviatura desenvolupada	Cognom, nom, any de naixement, càrrec, estat, adreça institucional, institució, interessos clau, altres.
Usuaris potencials	Lectors de literatura química que volen saber el significat de determinats acrònims	Científics que vulguin trobar cristal·lògrafs especialitzats en determinats camps
Facilitat de navegació/disponibilitat de menú d'ajuda	Interfície molt senzilla, no hi ha manual d'ajuda	Interfície molt senzilla, no hi ha manual d'ajuda
Freqüència d'actualització	No especificada, tot i que la pàgina de presentació fa anys que no ha variat la seva estètica ni el text	S'estava realitzant l'onzena edició, però no sembla que s'hagi enllestit o inclòs a la base de dades
Mode d'inclusió	Per part dels creadors	Els cristal·lògrafs poden afegir les seves dades si no restaven incloses o canviar-ne
Formats de visualització	-	-
Altres	Es tracta d'una obra de referència especial per la seva informació i la manca d'altres bases de dades semblants especialitzades en química	Un tipus d'obra de referència per Internet que s'hauria d'estendre a les restants disciplines

11.3.3 Especificacions de les opcions de cerca en les bases de dades moleculars

Com ja s'ha comentat anteriorment, les bases de dades moleculars poden tenir concrecions diferents de les documentals quant a les opcions de cerca que ofereixen. Així, es decidí dur a terme un estudi separat de les opcions de cerca que permet cada una de les bases de dades prèviament descrites.

A continuació, a Taula 11-13 es mostren aquests resultats

Taula 11-13 Descripció de les opcions de cerca en les bases de dades moleculars

Base de dades	Nom químic	Fórmula molecular	CAS Registry Number	Cerca estructural	Cerca subestructural	Eina emprada per a la cerca gràfica	Altres tipus de cerca
NIST Webbook	Sí	Sí	Sí	Sí	Sí	Aplicació Java, arxiu format mol	Acotació per grups funcionals
Chemfinder	Sí	Sí	Sí	Sí	Sí	Connector ChemDraw Active X	Pes molecular, punts de fusió i ebullició
ChemIDplus	Sí	Sí	Sí	Sí	Sí	Connector Chime i Aplicació Java ChemSymphony	Codis de classificació
ChemExper	Sí	Sí	Sí	Sí	Sí	Aplicació Java JME Molecular Editor	Smiles, pes molecular, punts de fusió i ebullició, densitat, rotació òptica
Enhanced NCI Database	Sí	Sí	Sí	Sí	Sí	Aplicació Java JME Molecular Editor	Restriccions tridimensionals, Pes molecular
Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Structure Index	Sí	Sí	Sí	No	No	-	Índex alfabètic
SDBS	Sí	Sí	Sí	No	No	-	Interval d'àtoms i de pes molecular, per senyal en els espectres RMN i masses

Base de dades	Nom químic	Fórmula molecular	CAS Registry Number	Cerca estructural	Cerca subestructural	Eina emprada per a la cerca gràfica	Altres tipus de cerca
HSDB	Sí	No	Sí	No	No	-	-
SOLV DB	Sí	Sí	Sí	No	No	-	Grup funcional, pes molecular, punts de fusió, punts d'ebullició, pressió de vapor, densitat
ChemDat – The Merck Chemical Databases	Sí	Sí	Sí	Sí	Sí	Aplicació Java JME Molecular Editor	Número de catàleg
Search Center Sigma-Aldrich Catalog	Sí	Sí	Sí	Sí	Sí	ChemDraw Iis Draw Kekule	Paraula clau, número de catàleg
Chem.com Catalogs	Sí	Sí	Sí	No	No	-	Número de catàleg
MetaXChem Chemicals	Sí	No	Sí	Sí	Sí	Aplicació Java JME Molecular Editor	-

Aquestes dades mostren una sèrie de fets:

- la majoria de bases de dades moleculars empen en les opcions de cerca aquells paràmetres tradicionalment usats per a caracteritzar una molècula, com ara el nom, la fórmula molecular, el CAS Registry Number.
- a més a més i com a autèntic valor afegit en eines específicament químiques, alguns d'ells empen també interfícies gràfiques. Com es pot observar, tots els que permeten una cerca estructural permeten també que sigui subestructural.
- Es pot comprovar que a Internet no existeix un estàndard de dibuix químic, que algunes bases de dades empen aplicacions Java, altres empen connectors i d'altres permeten la transferència des de programes com ISIS Draw.
- SDBS és una eina molt pràctica però potser la seva major mancança és el fet de no poder fer cerques gràfiques, atès que permetria veure els senyals a què habitualment surten determinats grups funcionals i permetria ser un bon substitut per a

llibres de taules clàssics com ara las *Tablas para la determinación estructural por métodos espectroscópicos*⁶⁰.

- La base de dades que permet més opcions de cerca és Enhanced NCI Database.
- El fet que bases de dades com HSDB o d'altres dedicades a perillositat no continguin tantes opcions de cerca (a excepció de *ChemIDplus*) podria explicar-se pel fet que aquestes estan més encarades a oferir informació de determinats productes concrets, és a dir, que estan més pensades per a què l'usuari busqui informació d'una molècula concreta més que no pas a cercar informacions de molècules que continguin determinats grups.
- Les millors bases de dades molecular gratuïtes a Internet, a excepció de pocs exemples realitzats per algunes institucions públiques (NIST Webbook, ChemIDplus, Enhanced NCI Database, quasi totes dels Estats Units) són les ofertes per catàlegs comercials, és a dir, que volen, per la seva qualitat, fidelitzar els clients i ser les primeres a on es dirigeixin els usuaris.
- Aquest darrer fet és un valor afegit de les grans empreses de tipus internacional que ofereixen aquest tipus de bases de dades, cosa que pot afavorir la seva expansió davant de empreses locals més petites i amb menys recursos.
- Aquest tipus d'interfícies gràfiques de cerca molecular són els que manquen en els cercadors vistos en el capítol anterior i que millorarien de manera notable el procés de cerca de pàgines web, tot tenint en compte, evidentment, una indexació per molècula.
- La majoria de bases de dades tenen més aviat una gran cobertura en el cas de la Química Orgànica i molècules habituals, pel que poden destacar-se per a fer cerques de productes de partida, però no pas de no pas per molècules de Química fina.
- El mateix podria esmentar-se en el cas de la Química Organometàlica o bé de Compostos de Coordinació, atès que només es poden trobar molècules molt conegudes com el cisplatí, el carboplatí o la magnetita, però no d'altres. Una explicació seria que les bases de dades més dirigides al món empresarial

s'adreçarien precisament a la indústria farmacèutica, que segurament necessita més informació de química orgànica.

11.3.4 Especificacions de les opcions de cerca en les bases de dades documentals

De la mateixa manera que s'ha fet amb les bases de dades moleculars, en el cas de les documentals cal especificar quin tipus de cerca permeten fer, perquè a part de la cobertura, la capacitat òptima de poder recuperar documents vindrà donada precisament per aquestes opcions.

En la següent taula es presenten aquests resultats:

Taula 11-14 Especificacions de les opcions de cerca en les bases de dades documentals

Base de dades	Cerca per camps concrets	Cerca en tot el registre	Nombre d'interfícies combinables	Ús d'operadors booleans	Acotació cronològica	Altres
Scirus	Sí	Sí	2	Sí	1930-2000	Frase exacta. Acotació d'àrea temàtica
Toxnet	Tan sols permet fer cerca per paraula clau, podent ser CAS Registry Number, per exemple, tot i que no és unívoca, degut a que cerca en diferents bases de dades					
Beilstein Abstracts	Sí	Només en títol i resum a la vegada	3	Sí	1980-2003	Permet la consulta del fitxer invers de cada camp (Títol, resum, autors) Permet acotar per revista
Article Finder	Sí	Sí	4	Sí	1966-2003	Acotació temàtica, operadors de proximitat, truncament, sinònims, frase exacta
MetaXChem Articles	Sí	Sí	3	Sí	No	Permet concretar en quines de les diferents bases de dades que

Base de dades	Cerca per camps concrets	Cerca en tot el registre	Nombre d'interfícies combinables	Ús d'operadors booleans	Acotació cronològica	Altres
						recull es vol fer la cerca
Espacenet	Sí	Sí	A cada camp es pot concretar	No	No	Per país
TDX	Sí	Sí	A cada camp es pot concretar	No	No	Acotació per universitat i per matèria podent veure l'índex de matèries en CDU
TESEO	Sí	No	A cada camp es pot concretar i a més es poden combinar tres equacions de descriptors	Sí, en el cas dels descriptors	Sí	Permet veure un índex de descriptors, que equival a un tesaurus ^b

Aquestes dades mostren una sèrie de fets:

- La majoria de bases de dades documentals empenen opcions de cerca típiques de bases de dades documentals, així com alguns dels operadors.
- Les bases de dades, tot i cobrir informació química, no empenen cap tipus de cercador relacionat amb les molècules que intervenen. Això vol dir que en cap cas s'ha realitzat una indexació d'aquestes molècules com es fa, en la versió en paper, en el *Chemical Substance Index* de *Chemical Abstracts*.
- Cap de les bases de dades, a excepció de la cerca per sinònims que ofereix *ArticleFinder*, semblen emprar cap tipus de llenguatge controlat per a indexar els documents, tan sols sembla un buidatge del text en la seva base de dades. Tan sols *TDX* i *Teseo*, tot i que amb alguns errors (com ara tesis de Química Inorgànica que apareixen sota la matèria Química Analítica).

^b Llenguatge documental que agrupa termes controlats segons el grau de profunditat de concreció que es vulgui emprar.

- Les bases de dades de patents i de tesis doctorals a text complet estan significat un canvi en la visió tradicional d'aquests dos tipus de documents com a literatura grisa^c. Tot i que les patents haguessin estat sempre documents de tipus públic, cal reconèixer que, diferentment del món empresarial, en el cas del món acadèmic la seva consulta era més aviat escassa comparat amb els articles científics.
- Les interfícies que permeten fer cerques en diverses bases de dades, com ara *TOXNET* i *MetaXChem Articles*, tot i poder ser més exhaustives perden, en general, capacitat en no poder aprofitar els operadors concrets de cadascuna d'elles, com ara el cas de *TOXNET* que no permet les mateixes opcions que sí permet *ChemID*, una de les bases de dades que inclou i que separatament, com s'ha esmentat anteriorment, té moltes més opcions de cerca.
- *Scirus* destaca per la seva gran cobertura i el fet que cobreix el món web de forma selectiva. *Beilstein Abstracts* es pot considerar una bona base de dades però només en el camp concret de la Química Orgànica, mentre *Article Finder* seria destacable per la gran quantitat d'operadors que inclou, fet que justament l'acosta a les bases de dades en línia, però que segurament per la dificultat de la construcció de les equacions de cerca l'allunyaria de l'usuari final que preferirà la cerca avançada amb menús desplegable.
- No hi ha cap base de dades que pugui destacar-se sobre les altres i que pugui contemplar-se com a alternativa real a bases de dades de pagament com ara *Scifinder Scholar* en el cas de la Química.

Com a conclusió final d'aquest capítol es podria dir que les bases de dades d'informació química a Internet ofereixen cada cop més informació i de

^c Segons el Termcat, conjunt de documents de tiratge limitat i circulació restringida que no es poden obtenir a través dels canals habituals de venda.

tipus més diferents, tot i que existeix una gran heterogeneïtat quant a la qualitat i la quantitat de registres que ofereixen.

És de preveure que noves bases de dades aniran apareixent a Internet, i que recolliran diferents tipus de documents. Un exemple del tipus de base de dades que es pot acabar imposant és el creat per *Scirus*, tot i que com més inetrdisciplinària sigui aquesta, menys capacitats de cerca específiques de tipus químic oferirà. El tipus de base de dades més útil serà aquell que combini encertadament el mateix concepte de barreja entre base de dades molecular i documental tal com es pot considerar que fa *Scifinder Scholar*.

Tanmateix, qualsevol opció continua restant lluny de la base de dades perfecta que esmentava Toht i l'estructura de la qual, de moment utòpica, es recull a la Fig. 11-26 com a meta de les bases de dades, tan comercials com de les gratuïtes, atès que es pot considerar que podria resoldre quasi al 100% de les necessitats informatives dels químics⁶¹.

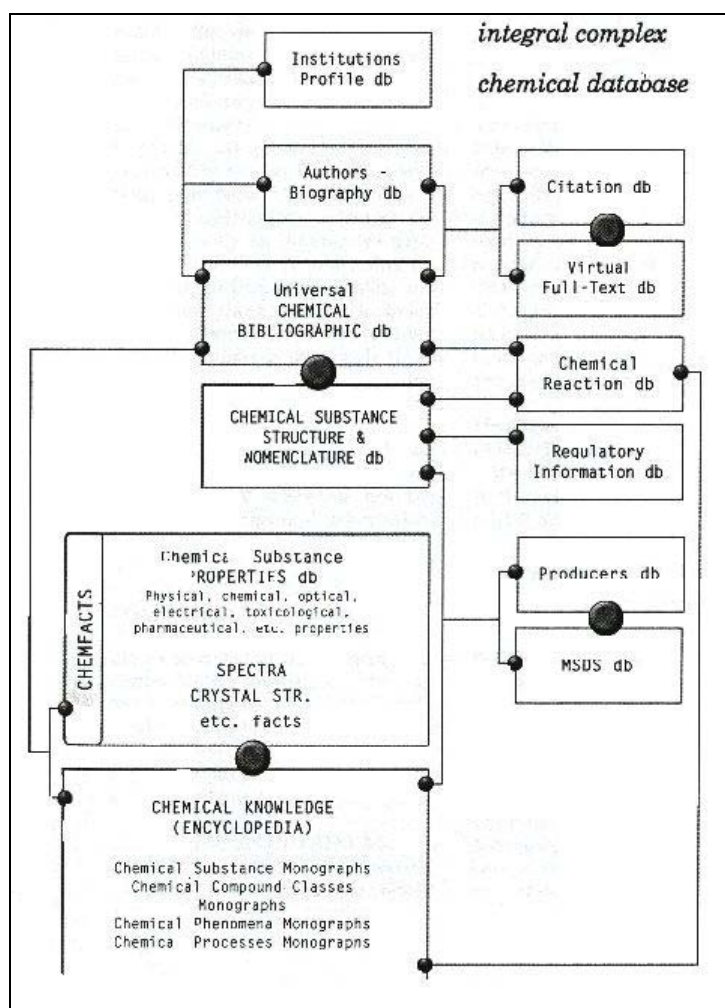


Fig. 11-26 Estructura de la base de dades ideal segons Toht

11.4 Bibliografia

¹ Abadal, E. *Els Serveis d'informació electrònica, què són i per a què serveixen*. Barcelona: Edicions de la Universitat de Barcelona, 1997. (Textos docents; 83). ISBN 84-89829-13-6.

² Codina, L. *Sistemes d'informació documental: concepció, anàlisi i disseny de gestió documental amb microordinadors*. Barcelona: Proa, 1993. (Pòrtic Mèdia; 9). ISBN 84-7306-999-4.

³ *Termcat, Centre de Terminologia* [en línia]. Barcelona: Termcat, cop 1999-2003. <http://www.termcat.net/cercaterm/> [Consulta: abril 2003].

⁴ Sziget, H. *The ISI Web of Knowledge Platform: Current and Future Directions* [en línia]. Philadelphia: ISI, 2001. <http://www.isinet.com/isi/hot/essays/isiplatform/8105138/index.html> [Consulta: abril 2003].

⁵ Maizell, R. E. *How to find chemical information: a guide for practicing chemists, educators, and students*. New York [etc.]: Wiley, 1998. ISBN 0-471-12579-2.

⁶ Wiggins, G. J. *Chem. Inf., Comput. Sci.*, 1996, vol. 36, p. 764-9.

⁷ Williams, Robert V.; Bowden, Mary Ellen (comp.). *Chronology of chemical information science* [en línia]. [s.l.]: Chemical Heritage Foundation, 11 agost 1999. <http://www.libsci.sc.edu/bob/chemnet/CHCHRON.HTM> [Consulta: abril 2003].

⁸ Oxley, H. *Database*, 1998, vol. 21, p. 37-41.

⁹ Atkins, H. *The ISI Web of Science - Links and Electronic Journals* [en línia]. D-Lib Magazine, vol. 5, n. 5. <http://www.dlib.org/dlib/september99/atkins/09atkins.html> [Consulta: abril 2003].

¹⁰ Fuentes, E. *Documentació, telecomunicacions i informàtica: la teledocumentació*. Barcelona: Pòrtic, 1990. (Pòrtic Mèdia; 2). ISBN 84-7306-423-2.

¹¹ Williams, J. *Online*, 1995, vol. 19, p. 60-66.

¹² Whitley, K. M. *J. Am. Soc. Inf. Sci. Tech.*, 2002, vol. 53, p. 1210-5.

¹³ Nitsche, C. I.; Buntrock, R. E. *Database*, 1996, vol. 19, p. 51-7.

- ¹⁴ Ridley, D. D. *Information Retrieval: Scifinder and Scifinder Scholar*. Chichester: John Wiley & Sons, 2002. ISBN 0-470-84351-9.
- ¹⁵ Ridley, D. D. *J. Chem. Inf., Comput. Sci.*, 2000, vol. 94, p. 768-71.
- ¹⁶ Cooke, F.; Schofield, H. *J. Chem. Inf., Comput. Sci.*, 2001, vol. 45, p. 1131-40.
- ¹⁷ Meehan, P.; Schofield, H. *Online Inf. Rev.*, 2001, vol. 25, p. 241-9.
- ¹⁸ Cheeseman, E. N. *Database*, 1998, vol. 21, p. 51-5.
- ¹⁹ Orpen, A. G. *Acta Cryst.*, 2002, vol. B58, p. 398-406.
- ²⁰ Allen, F.; Motherwell, W. D. S. *Acta Cryst.*, 2002, vol. B58, p. 407-22.
- ²¹ Taylor, R. *Acta Cryst.*, 2002, vol. D58, p. 879-88.
- ²² Redman, J.; et al. *J. Appl. Cryst.*, 2001, vol. 34, p. 375-80.
- ²³ Allen, F. H. *Acta Cryst.*, 2002, vol. B58, p. 380-88.
- ²⁴ Voigt, K.; Gasteiger, J.; Brüggermann, R. *J. Chem. Inf., Comput. Sci.*, 2000, vol. 40, p. 44-9.
- ²⁵ Oppenheim, C. *The legal and regulatory environment for electronic information*. Tetbury: Infonortics, 2001. ISBN 1-873699-53-0.
- ²⁶ CAS. *ChemPort(sm)* [en línia]. [s.l.]: CAS, [s. a.]. <http://chemport.cas.org/> [Consulta: abril 2003].
- ²⁷ PILA. *Crossref.org: the reference linking backbone* [en línia]. [s. l.]: PILA, © 2003. <http://www.crossref.org/index.html> [Consulta: abril 2003].
- ²⁸ Poynder, R. *Online & CD-ROM Rev.*, 1999, vol. 23, p. 143-6.
- ²⁹ Cheeseman, E. N. *Econtent*, 2000, vol. 23, p. 41-7.
- ³⁰ Carugo, O.; Pongor, S. *Trends in Biotechnology*, 2002, vol. 20, p. 498-501.
- ³¹ Westbrook, J.; et al. *Nucleic Acids Res.*, 2003, vol. 31, p. 489-91.
- ³² Berman, H. M.; et al. *Nucleic Acids Res.*, 2000, vol. 28, p. 235-42.
- ³³ Berman, H. M.; et al. *Acta Cryst.*, 2002, vol. D58, p. 899-907.
- ³⁴ *NIST Chemistry WebBook* [en línia]. [s. l.]: NIST, cop. 1991-2003. <http://webbook.nist.gov/chemistry/> [Consulta: abril 2003].
- ³⁵ *Chemfinder.com* [en línia]. Cambridge, MA: CambridgeSoft, cop 2003. <http://chemfinder.cambridgesoft.com/> [Consulta: abril 2003].
- ³⁶ *ChemIDplus – A searchable database of 360.000 + chemical substance records* [en línia]. Rockville Pike, Bethesda, MD: National Library of

Medicine, cop 2003. <http://chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus/> [Consulta: abril 2003].

³⁷ *ChemExper sprl* [en línia]. [Court-st-Etienne, Bèlgica]: ChemExper, [s. a.]. <http://www.chemexper.com/> [Consulta: abril 2003].

³⁸ *Enhanced NCI Database Browser* [en línia]. [s. l.]: CCC, cop 2003. <http://cactus.nci.nih.gov/ncidb2/> [Consulta: abril 2003].

³⁹ Sander, L. C.; Wise, S. A. *NIST Special Publication 922. Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Structure Index* [en línia]. Gaithersburg, MD: NIST, [s. a.]. <http://ois.nist.gov/pah/> [Consulta: abril 2003].

⁴⁰ *SDBS* [en línia]. Tsukuba, Ibaraki, Japó: National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, darrera actualització març 2001. <http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/menu-e.html> [Consulta: abril 2003].

⁴¹ *HSDB Search* [en línia]. Rockville Pike, Bethesda, MD: National Library of Medicine, darrera actualització maig 2002. <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/htmlgen?HSDB> [Consulta: abril 2003].

⁴² Hayamizu, K. *J. Comput. Aided Chem.*, 2001, vol. 2, p. 1-10.

⁴³ *NCMS Solvents* [en línia]. [s. l.]: NCMS, [s. a.]. <http://solvdb.ncms.org/> [Consulta: abril 2003].

⁴⁴ *Merck KgaA – ChemDat – The Merck Chemical Databases* [en línia]. [s. l.]: Merck, cop 2003. <http://chemdat.merck.de/> [Consulta: abril 2003].

⁴⁵ *Search Center* [en línia]. [s. l.]: Sigma-Aldrich, cop 2003. http://www.sigmaaldrich.com/cgi-bin/hsrun/Distributed/HahtShop/HahtShop.htx;start=HS_SearchCenter [Consulta: abril 2003].

⁴⁶ *WWW Chemicals* [en línia]. Atwood, CA: Chem.com, cop 1995-2003. <http://www.chem.com/> [Consulta: abril 2003].

⁴⁷ Borrman, P.; Harting, J.; Schröter, C. *MetaXChem: The Chemistry Metasearch Engine* [en línia]. [s. l.]: Chemie.DE Information Service GmbH, cop 1997-2003. <http://www.chemie.de/metaxchem/> [Consulta: abril 2003].

⁴⁸ *TheMSDS - Search Engine* [En línia]. [s. l.]: DSJ Enviro, cop 2000-2002. <http://www.themsds.com> [Consulta: abril 2003].

⁴⁹ *Scirus for Scientific Information* [en línia]. [s. l.]: Elsevier, cop 2003. <http://www.scirus.com/> [Consulta: abril 2003].

⁵⁰ *Toxnet* [en línia]. Rockville Pike, Bethesda, MD: National Library of Medicine, darrera modificació maig 2002. <http://toxnet.nlm.nih.gov/> [Consulta: abril 2003].

⁵¹ *Chemweb.com – Beilstein Abstracts* [en línia]. [s. l.]: Beilstein Institut für Literatur der Organischen Chemie, Elsevier, cop 2003. <http://www.chemweb.com/databases/belabs#> [Consulta: abril 2003]. Cal estar registrat per a accedir-hi.

⁵² *Infotrieve on line* [en línia]. [s. l.]: Infotrieve, cop 2001. <http://www4.infotrieve.com/ArticleFinder/search.asp> [Consulta: abril 2003].

⁵³ *B1 – Espacenet Your Gateway to patents* [en línia]. [s. l.]: European Patent Office, cop 2000. <http://ep.espacenet.com/> [Consulta: abril 2003].

⁵⁴ *Bases de datos de la Oficina Española de Patentes y Marcas* [en línia]. [s. l.]: OEPM, [s. a.]. http://www.oepm.es/internet/bases_datos/esp.htm [Consulta: abril 2003].

⁵⁵ *Tesis Doctorals en Xarxa (TDX)* [en línia]. [s. l.]: CBUC, [s. a.]. <http://www.tdx.cbuc.es/> [Consulta: abril 2003].

⁵⁶ *Base de datos TSEO* [en línia]. [s. l.]: Ministerio de Educación, Cultura y Deporte, [s. a.]. <http://www.mcu.es/TESEO/teseo.html> [Consulta: abril 2003].

⁵⁷ *NDLTD NetWorked Digital Library of Theses and Dissertations* [en línia]. [s. l.]: NDLTD, cop 2002, darrera modificació abril 2003. <http://www.ndltd.org/> [Consulta: abril 2003].

⁵⁸ *Acronyms and Abbreviations* [en línia]. [s. l.]: Institut für Chemie, Freie Universität Berlin, [s. a.]. <http://www.chemie.fu-berlin.de/cgi-bin/acronym> [Consulta: abril 2003].

⁵⁹ *(IUCr) World Database of Crystallographers general form* [en línia]. [s. l.]: IUCr, [s. a.]. <http://www.iucr.ac.uk/cgi-bin/wdcquery> [Consulta: abril 2003].

⁶⁰ Pretsch, E. *Tablas para la determinación estructural por métodos espectroscópicos*. 2ª ed. espanyola. [Barcelona] : Springer-Verlag Ibérica, cop. 1998. ISBN 84-07-00501-0.

⁶¹ Toth, T. *E-Content*, 2000, vol. 23, p.44-50.