

110  
2ej

Universidad Nacional Autónoma de México



Facultad de Química

PREPARACIÓN DE UN MANUAL PARA LA ENSEÑANZA DE LA  
INFORMACIÓN QUÍMICO TECNOLÓGICA EN BANCOS DE DATOS  
INTERNACIONALES (SISTEMA DIALOG).

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

INGENIERO QUÍMICO

P R E S E N T A

Popoca Cervantes Ramón

México, D.F.

1996

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

**JURADO ASIGNADO:**

**Presidente:**      **Profa. RODRÍGUEZ PÉREZ MARTHA**

**Vocal:**            **Prof. RIUZ ALONSO CARLOS**

**Secretario:**      **Prof. MONTAÑO AUBERT EDUARDO**

**1er. suplente**    **Prof. ROJO CALLEJAS FRANCISCO**

**2do. suplente**    **Profa. CASSAIGNE HERNÁNDEZ MARIA DEL ROCIO**

**SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:**

**Facultad de Química, Edificio B; Hemeroteca, planta baja,  
"Centro de Información Químico Tecnológica",  
Cd. Universitaria, D.F.**

**ASESOR DEL TEMA:**      **M. en C. MONTAÑO AUBERT EDUARDO**

**SUPERVISOR TECNICO:**    **M. en C. FEDERICO TURNBULL**

**SUSTENTANTE:**            **POPOCA CERVANTES RAMON**

Quando el ser integro sabe que no hay barreras que lo detengan, que la ilusión la esperanza y la fe se agigantan en algo que va más allá de un sueño o partiendo de la nada y que apesar de los grandes infortunios que agobian la agitada existencia en un mundo contradictorio, hay quien todavía se puede lanzar aun cual denodadas aves en rasante vuelo tras un ideal inquebrantable, aquí se empezó la trayectoria apesar de que el camino pudiera cambiar hacia un rumbo desconocido no se descansa y en una forma obsesiva se proyecto hacia el futuro para salir de la apatía para nunca vegetar en el conformismo y así entrar en un proceso de existencia consciente lo cual significa aprender a caminar y dejar algo valioso en cada paso, para volver a nacer nuevamente.

## DEDICATORIA

Agradezco a Dios que me a concedido la oportunidad y el privilegio de vivir y haber terminado la licenciatura para seguir adelante.

A mis padres

Deseo agradecer y expresar mi más profundo cariño a mi madre **Margarita Cervantes Bailón** y a mi padre **Gerardo Popoca Moreno**.

Y dar nuevamente gracias a Dios por haberme bendecido con unos padres maravillosos que siempre me brindaron su total apoyo de aliento, confianza, sabiduría, comprensión y compañía . Por el tiempo que pacientemente y cariñosamente han sabido esperar conmigo. Por todos esos momentos difíciles que en mi vida me supieron guiar y dejar salir adelante con el ejemplo y constancia al trabajo. Por su amor que siempre alimento mi fe y mi esperanza para llegar al final y avanzar a una de las etapas de mi vida.

A mis Hermanos

Que convivieron conmigo y apoyaron a cada instante y demostraron siempre estar presentes cuando los necesite por ser tan especiales como lo son su compañía, entusiasmo, alegrías , tristezas, angustias y aflicciones. Pero que siempre los llevo aquí en el corazón.

**Sara**

**Analy**

**Rocío**

**Homero**

A mis Tíos **Juan y Rosalio Cervantes B.** por sus consejos que me impulsaron para seguir adelante y firme en la vida.

A mi familia entera que son parte de mi vida y mi origen por que hemos aprendido juntos que la unión hace la fuerza y que el trabajo fructífero enaltece y forma a los hombres.

Un especial reconocimiento a mi asesor **M. en C. Eduardo Montaño Aubert** por su valioso apoyo brindado para la realización de esta útil tesis profesional y por sus conocimientos transmitidos en mi formación académica y el empuje de estar en su propósito el de preparar a profesionales con ese espíritu joven e inquieto que continua aportando a la Facultad de Química.

Agradezco al **M. en C. Federico Turnbull** por la revisión, forma y contenido de esta tesis, así como sus valiosos comentarios y aportaciones que tuvo para la elaboración de este manual.

También agradezco a la profesora **Q. Imelda Velázquez Montes** por su asesoría tan valiosa que me sirvió para realizar mejor mi trabajo

Agradezco al Profesor **Jaime Noriega Bernachea** por su apoyo solidario y colaboración.

Al Profesor **Jiménez Vela Luis del Rey** por su amistad y apoyo.

Al ingeniero **Miguel Ramírez Peralta** por su desinteresado y muy emotivo apoyo.

Finalmente doy gracias a mis amigos por su amistad y su solidaridad al compañerismo desinteresado que a lo largo de la carrera compartimos y que vivimos gratos momentos que nunca olvidare. En especial quiero agradecer al compañero **Javier Castrejón** muy conocido por mi cariñosamete como **Villaurrutia** por leal y saber entender el valor de la amistad.

Y a todas aquellas personas que me rodearon en mi vida como estudiante que me ayudaron y conté con su amistad desde los compañeros de el Centro de Información donde desarrolle la tesis hasta las personas que servían como laboratoristas, bibliotecarios, secretarias, intendencia etc.

## CONTENIDO

### Páginas

INTRODUCCIÓN.....	1
CAPITULO I: ENTRADA AL SISTEMA, PLANEACIÓN Y ESTRATEGIA DE BÚSQUEDA	
I.1 Introducción a las bases de datos (BD), entrada al sistema y consulta sencilla (Lecc.1).....	4
I.2 Planeación y estrategia de las consultas, técnicas y comandos básicos (Lecc.2).....	10
I.3 Inicio de una consulta en línea, palabras clave (Lecc.3) ...	17
I.4 Precisión en el enfoque(operadores de proximidad) (Lecc.4)..	23
I.5 Índices de las Bases de Datos con EXPAND (Lecc.5).....	32
CAPITULO II: BÚSQUEDA Y LOCALIZACIÓN DE INFORMACIÓN QUÍMICA	
II.1 Datos no bibliográficos, nombres, números de registro, fórmulas e información de anillos del CHEMSEARCH (Lecc.6).....	41
II.2 Localización de citas sobre preparación (síntesis) (Lecc.7).....	49
II.3 Localización de información de reacciones químicas (Lecc.8).....	57
II.4 Textos completos de patentes de los E.U. (BD 652-654) (Lecc.9).....	65
II.5 Enciclopedia química Kirk-Othmer en línea (Lecc.10).....	74
CAPITULO III: BÚSQUEDA SIMULTÁNEA Y PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS	
III.1 Búsqueda en BD múltiples: OneSearch (Lecc.11).....	82
III.2 Búsqueda de propiedades físicas con el Beilstein en Línea (Lecc.12).....	89
III.3 Búsqueda de propiedades físicas y químicas (Lecc.13).....	97

**Páginas**

**CAPITULO IV: INFORMACIÓN DE QUÍMICA ANALÍTICA, USO DEL  
DIALINDEX Y NOMENCLATURA SISTEMÁTICA**

IV.1 Información sobre química analítica (Lecc.14).....	109
IV.2 ¿Territorio desconocido?, utilice Dialindex (Lecc.15)...	115
IV.3 Trabajando con nomenclatura sistemática en el CHEMSEARCH (Lecc.16) .....	123

**CAPITULO V: INFORMACIÓN COMERCIAL, ESTADÍSTICA Y DE FABRICANTES  
DE PRODUCTOS QUÍMICOS**

V.1 Estadísticas del comercio químico internacional (Lecc.17).....	130
V.2 Noticias de negocios en la industria química (Lecc.18)...	134
V.3 Localización de fabricantes de sustancias químicas (Lecc.19).....	140
DISCUSIÓN .....	147
CONCLUSIONES .....	149
BIBLIOGRAFÍA .....	150

## INTRODUCCIÓN

La idea de crear este Manual surgió de la experiencia que se ha tenido en el Centro de Información Químico Tecnológica de la Facultad, con las consultas que realizan profesores y alumnos sobre temas relacionados con la química.

Dicha experiencia indica la necesidad de adaptar, simplificar y facilitar el uso de las bases de datos (en adelante BD) a los usuarios de habla Española. Para ello, además de traducir del Inglés el Manual titulado "Online Searching Curriculum for Chemistry" (Cook Ron C., 1993), se hicieron algunos cambios, se agregaron aclaraciones y se eliminaron las dos últimas lecciones que resultan ya obsoletas.

El Manual fue preparado como trabajo monográfico de actualización por el pasante de ingeniería química Ramón Popoca C., y describe las principales técnicas y los comandos más usados en el Sistema de Consulta a las BD, Dialog; para ello se agruparon las lecciones en cinco capítulos que se presentan adelante. Antes de mencionar el contenido de los capítulos, conviene hacer algunas aclaraciones:

De los sistemas o empresas que manejan las bases de datos internacionales, Dialog, de la empresa Knight Ridder Information, es sin duda el más completo y el que ofrece mayores facilidades a las universidades para que profesores y alumnos se familiaricen con la consulta a las BD.

Las BD reconocidas a nivel mundial las manejan varios sistemas o empresas, las que rentan a los productores las BD. Además de Dialog, existen otros sistemas, entre los que destaca el STN (Scientific and Technological Network), de la American Chemical Society. Esta Institución creó la BD del Chemical Abstracts en línea desde 1967 y la mantiene actualizada; el Sistema Dialog, el Sistema Questel y otros sistemas la rentan y la ofrecen a sus usuarios. En este Manual se trata solamente el Sistema Dialog, un sistema norteamericano que maneja numerosas BD. Conviene aclarar también que muchas de las dificultades y dudas que se presenta al consultar las bases de datos del Sistema Dialog, se resuelven en las 19 lecciones que se ofrecen en este Manual.

Sin embargo, nada sustituye a la práctica de la consulta, si se quiere obtener de las BD la información valiosa que buscamos y podemos obtener. Por eso en cada lección se ofrecen varios ejercicios para practicar los temas tratados.

Otra aclaración, es que durante este año de 1996, en el Centro de Información Químico Tecnológica de la Facultad se iniciará un Laboratorio de enseñanza de la información en línea, para alumnos de la Facultad y para otros auditorios. La enseñanza en ese Laboratorio se facilitará con las lecciones de este Manual, las que se han agrupado en cinco capítulos que se describen brevemente a continuación.

Los capítulos incluyen 19 lecciones con numerosos ejemplos de búsquedas, recomendaciones y consejos para facilitar las consultas.

En el primer capítulo, después de algunas explicaciones básicas sobre las bases de datos y la información en línea, se presentan los elementos para la preparación de una consulta, la entrada, el inicio y manejo de los comandos para un mejor aprovechamiento de las bases de datos, las que en el Sistema Dialog son cerca de 500. Próximamente, al unirse a Dialog el Sistema DataStar (Europeo), aumentará este número.

El segundo capítulo presenta la búsqueda de información química en varias BD que contienen información básica, como la Enciclopedia Química Kirk-Othmer, el ChemSearch, la información sobre síntesis, reacciones químicas y patentes.

En el tercero se trata el sistema de búsqueda simultánea en varias BD, llamado OneSearch, y la búsqueda de datos sobre propiedades físicas, químicas y otras en el Beilstein, una BD alemana de química orgánica, muy completa y conocida en el medio químico.

En el capítulo cuatro se muestra la forma de buscar en química analítica, el uso del Dialindex, para búsqueda en varias BD (un sistema diferente al OneSearch) y la búsqueda de nomenclatura química con el Chemsearch. Por último, el capítulo cinco trata de la información industrial y comercial; la estadística sobre la industria química, los fabricantes en el mundo, lo que producen y otras informaciones que ayudan en los negocios químicos.

**CAPITULO I**

**ENTRADA AL SISTEMA, PLANEACIÓN Y  
ESTRATEGIA DE BÚSQUEDA**

## Lección 1

### INTRODUCCIÓN A LAS BASES DE DATOS, ENTRADA AL SISTEMA Y CONSULTA SENCILLA

En esta primera lección se explica lo que es una BD, cuáles tipos de BD existen, según su uso y naturaleza. En las BD comerciales se mencionan los tipos de información que contienen, los registros, los comandos más importantes, para terminar con ejemplos de la entrada al sistema y de una consulta sencilla, usando los comandos mencionados.

¿Qué es una base de datos? Una BD es cualquier conjunto de datos ó citas que ha sido seleccionado, organizado y producido para consultarse con la ayuda de la computadora y las redes de comunicación internacionales de teleinformática.

La información en una BD Las BD se organizan en unidades llamadas registros (en Inglés: records). Un registro puede ser: una cita bibliográfica, con o sin resumen (abstract); el nombre de una empresa con su dirección, teléfonos y otros datos; una tabla con valores químicos o físicos; o bien el texto completo de un artículo. En una BD cada registro se identifica con uno o dos números de registro, que aparecen en la primera línea del mismo. El primer número es del Sistema y el segundo del Productor de la BD.

Tipos de bases de datos Hay muchos tipos de BD, p.ej.:

Personales Una agenda con los teléfonos y direcciones de amigos y personas con las que nos comunicamos frecuentemente, es una BD personal. La agenda puede estar en papel, o bien ser una agenda electrónica. De cualquier forma la BD así formada es personal.

Institucionales Son las BD que han creado y mantienen las empresas o instituciones para su trabajo, por ejemplo las fichas de su personal o de sus clientes, los proveedores, etc. También aquí puede ser un archivo en papel, o consultarse con un manejador de BD, en una computadora.

acceso a distancia a su BD, sin cobrar por ello, se dice que la BD es gratuita o de libre acceso. Con la difusión de la Red Internet han proliferado las BD de este tipo, principalmente las universitarias y las de difusión institucional, que pueden consultarse en todo el mundo.

Comerciales Son BD cuya consulta tiene un costo. Estas BD generalmente las manejan empresas de servicio, como la que se estudia en este Manual: el Sistema Dialog.

Naturaleza de las BD comerciales Hay cuatro grupos de BD comerciales, de acuerdo con el tipo de información que manejan: Bibliográficas, Numéricas, Directorio/diccionario, y de texto completo.

BD Bibliográficas Son las más comunes. Los registros de estas BD son citas bibliográficas (título, autor, fuente, descriptores, palabras clave, resumen) de libros, artículos de revistas, patentes, etc.; pueden contener un resumen, que describe brevemente el contenido del documento.

BD Numéricas Contienen como registros tablas con datos estadísticos, con frecuencia acompañados de texto.

BD Directorio/Diccionario Contienen información de compañías, organizaciones, productos, etc., con frecuencia en forma tabular.

BD Textuales Los registros contienen artículos completos de revistas, de agencias de noticias, o bien de enciclopedias. Cada uno de estos registros puede tener varias páginas. Las hay que contienen todo el texto de periódicos o revistas.

Después de consultar las BD bibliográficas se puede buscar el artículo, la patente o la publicación en la biblioteca o se manda pedir; en las BD numéricas y en las de texto completo, en cambio, se obtiene toda la información consultando la BD.

Entrada al Sistema. Hay dos formas de entrar al Sistema Dialog: mediante una red local ya conectada a Internet, como es el caso de la Red UNAM; o bien, si no se tiene acceso a una red ya conectada a Internet, puede hacerse una llamada local mediante un modem y un teléfono para conectarse a una red de

comunicación de datos privada como Spin, Compuserv, Dialnet, o Tymnet. Estas redes retransmiten su llamada telefónica local al Sistema DIALOG. Para esta comunicación es preferible usar el Programa Dialoglink del Sistema Dialog. Una vez que nuestra PC está conectada a la máquina del Sistema, aparece en la pantalla el letrero de bienvenida de la empresa y nos pide que pongamos las claves necesarias para entrar después de la señal de inicio (prompt) del Sistema, que nos indica que la máquina espera una orden o comando. Esta señal (prompt), en el Sistema Dialog, es un cierre de interrogación:

**DIALOG INFORMATION SERVICES**

**PLEASE LOGON: xxxxxx**

? (aquí ponemos la clave de identificación)

**ENTER PASSWORD: xxxxxxxx**

? (aquí ponemos la clave personal)

Al cabo de algunos segundos aparece en la pantalla la bienvenida: WELCOME TO DIALOG, junto con algunos datos y mensajes del Sistema, como se ve en la Figura 1-1.

A continuación aparece el Menú inicial (Homebase), que tiene 10 opciones, cada una de las cuales nos lleva a otros menús, que pueden consultarse poniendo el número deseado. En la Figura 1-2 se muestra el Menú inicial.

A continuación se muestran los comandos más importantes, en las lecciones 2 y 5 se explican con detalle:

<b>BEGIN</b>	(ó simplemente B) acompañado del número de la BD que vamos a consultar.
<b>SELECT</b>	(ó S) para que la computadora busque lo que queremos.
<b>EXPAND</b>	(ó E) para encontrar la palabra exacta que buscamos.
<b>TYPE</b>	(ó T) para que nos muestre el resultado de la búsqueda.
<b>LOGOFF</b>	(ó bien LOG, STOP, BYE, OFF) para terminar la consulta.

FIG. 1-1  
EJEMPLO DE ENTRADA AL SISTEMA

Welcome to DIALOG  
Dialog level 38.01.01B

Last logoff: 25jan95 20:49:24  
Logon file405 28jan95 12:20:47

\*\*\*\*\*  
As of 12:20 EST on 01/28/95 you had 1 DIALMAIL message(s)  
\*\*\*\*\*

ANNOUNCEMENT \*\*\*\* ANNOUNCEMENT \*\*\*\* ANNOUNCEMENT

\*\*\*New: Derwent Patents Citation Index (PCI) (File 342)  
The online Bluesheet is in File 415.

\*\*\*Beilstein Online (File 390) is now current through 12/94

\*\*\*The MEDLIT DIALORDER supplier has lowered prices - for more  
information, enter HELP OMEDLIT.

\*\*\*New: FROST & SULLIVAN MARKET INTELLIGENCE (File 765)  
DERWENT DRUG FILE (File 377)

\*\*\*Reload:HOPPENSTEDT DIRECTORY OF GERMAN COMPANIES(File 529)

\*\*\*Effective 1/1/95, the price within the U.S. for accessing DIALOG  
using MCI PDN (formerly BT Tymnet) is \$12. per hour.

>>> Enter BEGIN HOMEBASE for Dialog Announcements <<<  
>>> of new databases, price changes, etc. <<<  
>>> Announcements last updated for 15jan95 <<<

\* \* \* file 133 is not working. \* \* \*  
\* \* \* file 529 is not working. \* \* \*  
\* \* \* file 752 is not working. \* \* \*  
\* \* \* File 611 temporarily not updating. \* \* \*  
\* \* \* HEADLINES is temporarily unavailable \* \* \*  
\* \* \* New current year ranges have been installed \* \* \*

SYSTEM:HOME

Menu System II: D2 version 1.7.1 term=ASCII

FIG. 1-2

MENU INICIAL HOMEBASE

\*\*\* DIALOG HOMEBASE(SM) Main Menu \*\*\*

Information:

1. Announcements (new files, free connect time, price changes, etc.)
2. Database, Rates, & Command Descriptions
3. Help in Choosing Databases for Your Topic
4. Customer Services (telephone assistance, training, seminars, etc.)
5. Product Descriptions

Connections:

6. DIALOG Menus (SM)
7. DIALOG Business Connection(R), Headlines(SM), Medical Connection(SM)
8. DIALOG SourceOne(SM) Document Delivery
9. Data-Star
10. Other Online Menu Services & Files (MoneyCenter(R), OAG, TNT, etc.)

/H = Help

/L = Logoff

/NOMENU = Command Mode

Enter an option number to view information or to connect to an online service. Enter a BEGIN command plus a file number to search a database (e.g., B1 for ERIC).

?

Consulta sencilla

En la Figura 1-3 se muestra una consulta sencilla en la BD MAGAZINE DATABASE, que tiene el número 47 en Dialog. De las 7261 referencias del colesterol encontradas, se imprimieron las fichas de las dos más recientes. Por el título de estas dos fichas, puede considerarse que no se ha llegado a la información que se desea. En ese caso habrá que cerrar (hacer más específica) la consulta agregando otros términos, con los cuales se tendrán menos referencias, pero más específicas. En las siguientes lecciones se explicará cómo se afina una consulta.

Fig. 1-3

CONSULTA SENCILLA

?b47

File 47:Magazine Database(TM) 1959-1995/Sep 27

(c) 1995 INFORMATION ACCESS CO.

\*File 47: File 47 and 647 were consolidated on 4/22/95. To retrieve records use the AA= prefix to search the supplier accession number

Set	Items	Description
-----	-------	-------------

---	-----	-----
-----	-------	-------

?s cholesterol

S1	7261	CHOLESTEROL
----	------	-------------

?t s1

1/2/1

DIALOG(R)File 47:Magazine Database(TM)

(c) 1995 INFORMATION ACCESS CO. All rts. reserv.

04334971 SUPPLIER NUMBER: 17463849

Can you trust cholesterol tests?(includes related articles)

Hunter, Beatrice Trum Consumers' Research Magazine, v78, n9, p32(4)  
Sep, 1995

ISSN: 0095-2222 LANGUAGE: English RECORD TYPE: Abstract

SPECIAL FEATURES: illustration; other

DESCRIPTORS: Blood cholesterol --Measurement; Cholesterol , HDL--  
Measurement; Cholesterol , LDL--Measurement

FILE SEGMENT: MI File 47

?t

1/2/2

DIALOG(R)File 47:Magazine Database(TM)

(c) 1995 INFORMATION ACCESS CO. All rts. reserv.

04334806 SUPPLIER NUMBER: 17448677 (USE FORMAT 7 OR 9 FOR FULL  
TEXT)

Taking care of yourself.(Ramblin') Lane, Margaret

Trailer Life, v55, n9, p24(1) Sep, 1995

ISSN: 0041-0780 LANGUAGE: English RECORD TYPE: Fulltext; Abstract WORD

COUNT: 1148 LINE COUNT: 00091

DESCRIPTORS: Recreational vehicle drivers--Health aspects; Automobile  
driving--Health aspects; Exercise--Evaluation

FILE SEGMENT: MI File 47

?logoff

## Lección 2

### PLANEACIÓN Y ESTRATEGIA DE LAS CONSULTAS, TÉCNICAS Y COMANDOS BÁSICOS

Para que una consulta en las BD sea exitosa, es decir, para obtener la información más relevante que existe y resolver así el problema de información que tenemos, debemos considerar tres factores principales:

- 1.- Hacer una planeación cuidadosa de la consulta, incluyendo la estrategia más adecuada para esa consulta en particular.
- 2.- Seleccionar las palabras o términos de búsqueda que usaremos, de manera que describan lo mejor posible el tema de búsqueda, usando las palabras más usuales en el inglés de Estados Unidos (a menos que se trate de una BD británica).

Para ampliar o limitar el alcance de las palabras de búsqueda hay comandos y técnicas que se verán adelante en esta lección. Para estar seguros que las palabras son las indicadas y para verificar su ortografía, se puede usar el comando EXPAND, que mencionamos en la primera lección.

- 3.- La base o las bases de datos que se consulten deben ser las más indicadas para cada caso; para ello se analiza primero el Catálogo de BD del Sistema. Si hay duda entre dos o tres BD, podemos entrar a ellas, o bien entrar a todas las BD de una categoría, con objeto de seleccionar aquellas BD que nos proporcionan más respuestas, como se explicará adelante.

#### Análisis del tema y uso de la hoja de consulta

Lo primero que conviene hacer en la planeación de una consulta es preguntarnos:

- ¿Cuál es el tema o asunto que busco?
- ¿Cómo describiría el tema con una frase?
- ¿Cuál sería el mejor título para un artículo, tesis o trabajo escrito sobre este tema o asunto?

Para facilitar la planeación de la consulta se usan hojas de trabajo como la que se muestra en la Fig. 2-1, también llamadas formatos para la estrategia de la consulta.

Una vez que se ha definido el tema, el siguiente paso es escoger las palabras que deben encontrarse en los artículos o documentos que indiza la BD donde buscamos. Es usual que estas palabras aparezcan en el índice básico de la BD, el cual incluye normalmente el título, el resumen (abstract), los descriptores y las palabras clave.

Como ejemplo supondremos que el tema que nos interesa es: "dietas de bajo colesterol". Una vez seleccionadas las palabras por buscar, las anotamos en la hoja de consulta, comenzando por la de mayor cobertura o más importante y siguiendo con las otras que deben restringir al conjunto anterior, usando el operador **and** (y). En nuestro ejemplo, ponemos "cholesterol" (colesterol en Inglés), luego "lower" y después "diets". Estos son los términos iniciales para la consulta.

Podríamos hacer la consulta con esas tres palabras solamente, pero perderíamos muchas referencias por no incluir sinónimos, palabras similares y otros derivados, ya que no hemos truncado, como se explica a continuación.

#### Sinónimos y truncación de palabras

Cada una de las palabras puede tener sinónimos o palabras similares que conviene incluir en la consulta. En nuestro ejemplo, el concepto principal, "cholesterol", no tiene sinónimos, pero "lower" y "diets" tienen algunos; para lower ponemos: low, reduce, reduction, controls, controlling; y para diets: diet, nutrition.

Los sinónimos y palabras similares las anotamos hacia abajo en la hoja de consulta, o sea usando el operador **or** (o).

Fig. 2-1

**HOJA PARA PREPARAR LA ESTRATEGIA DE CONSULTA\***

FECHA (de la Consulta)\* : \_\_\_\_\_

PROF. \_\_\_\_\_ DEPARTAMENTO ACAD. \_\_\_\_\_

TELEFONOS \_\_\_\_\_ RED \_\_\_\_\_ ALUMNO(S) \_\_\_\_\_

TEMA DE LA CONSULTA O TITULO TESIS: \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

**NOTA MUY IMPORTANTE:** Si ya tiene algún artículo o documento cualquiera sobre el tema de la consulta, en inglés, favor de traerlo el día de la consulta.

**NOTA:** Favor de anotar las palabras o términos a usar para la consulta en inglés (revisando en el diccionario la ortografía) y con letra de molde.

Si se unen las palabras con EL OPERADOR AND se disminuye el número de referencias encontradas, ya que todas las palabras deben estar en el índice básico. Si su compuesto o elemento tiene número de registro del Chemical Abstracts, favor de anotarlo (RN= )

Con EL OPERADOR OR aumenta el número de referencias, ya que se obtienen las de una opción más las de otras opciones.

**PALABRAS IMPORTANTES SOBRE EL TEMA**

<u>CONCEPTO 1</u>	AND	<u>CONCEPTO 2</u>	AND	<u>CONCEPTO 3</u>
_____		_____		_____
_____		_____		_____
OR				
_____		_____		_____

**NOTA:** Anotar los años del periodo que desee buscar y si hay alguna restricción de lenguaje, ponerla.

AÑOS: \_\_\_\_\_

BASES DE DATOS (si tiene el nombre de la BD que quiere consultar favor de anotar): \_\_\_\_\_

ESTRATEGIA DETALLADA: Para llenarse por el personal del Centro el día de la Consulta:

- Favor de llamar al 622 3731 para hacer la cita para la consulta. Esta hoja hay que entregarla el día de la consulta.

Los géneros, plurales y tiempos de los verbos pueden incluirse si truncamos la palabra usando su raíz común, mediante el signo de interrogación. En el ejemplo, ponemos interrogación después de diet?. Es conveniente no usar una raíz muy pequeña, de tres o menos caracteres, ya que saldrían muchos registros irrelevantes. En el ejemplo, no conviene usar la raíz die?.

Si queremos limitar el número de caracteres que sigan a la raíz, después de la primera interrogación dejamos un espacio y ponemos tantas interrogaciones como caracteres queramos. Por ejemplo, si queremos buscar solamente diet y diets, ponemos: diet? ?. Con lo cual no saldrán los registros que contengan dietetic, dietitian o dietician.

Un signo de interrogación dentro de una palabra puede sustituir a un carácter, por ejemplo: si ponemos ALK?NE, obtendremos los registros que contienen ALKANE, ALKENE Y ALKYNE.

### Operadores lógicos

Hay tres operadores lógicos o booleanos, el **and**, el **or** y el **not**, o sea: y, o, no. De los tres, el **and** y el **or** se usan con frecuencia, pero el **not** se usa poco.

El **and** restringe la búsqueda considerablemente, ya que ambas palabras deben aparecer en el registro. El **or**, en cambio, aumenta el número de registros obtenidos. El **not** debe usarse con cuidado, ya que puede excluir registros que serían útiles. Debe usarse solamente cuando se está seguro de no querer los registros en los que aparezca cierta palabra que no deseamos.

En el siguiente ejemplo, se muestra la forma en que se reduce el número de registros usando los operadores **not** y **and** y la forma en que aumenta con **or**.

El número de registros que contienen la palabra "cation" en una BD es 70030 referencias; limitando los registros con el operador **not** y la palabra "calcium", se reduce a 64501, es decir se reduce 8%. Si ahora usamos el operador **and** y la palabra "chromatography", obtenemos solamente 2086 registros que contengan las dos palabras, es decir, reducimos en 97% el número de registros.

Por último, si usamos el operador **or** y la palabra "anion", aumenta el número de registros en 55% a 108280.

En resumen:

S cation	----->	70,030
S cation not calcium	---->	64,501
S cation and chromatography	----->	2,086
S cation or anion	----->	108,280

#### Comandos Begin, Select, Expand, Type y Logoff

##### **BEGIN: Orden de iniciar la o las BD seleccionadas**

Cada base de datos se identifica con un número. Para iniciar una consulta en una base de datos se escribe el comando **BEGIN** o simplemente **B**, agregando el número de la o de las BD deseadas, separándolas con una coma. Se pueden consultar simultáneamente hasta 60 BD de las 450 que contiene el Sistema Dialog.

Ejemplo: ?b399

**File 399:CA SEARCH(R) 1967-1995/UD=12222**

(c) 1995 American Chemical Society

##### **SELECT: Selección del término o términos deseados**

El comando **SELECT**, abreviado **S**, recupera los registros de los documentos que contienen el o los término(s) que solicitamos. En el ejemplo siguiente se solicita la palabra benceno, después de la señal de inicio( o prompt) del Sistema. En cuestión de segundos, la máquina responde con dos números, S1 es el número del conjunto respuesta (SET) y 23629 fue el número de registros (items) encontrados; a un lado imprime el término que buscamos: benceno (description). En el encabezado aparece automáticamente: Set, Items, Description:

Ejemplo:

<u>Set</u>	<u>Items</u>	<u>Description</u>
?Select benzene		
S1	23629	BENZENE

**EXPAND:** Para ver índices de la BD y encontrar los términos

El índice básico o cualquiera de los índices adicionales de una BD puede examinarse mediante el comando EXPAND. El sistema responde con doce líneas que muestran los términos del Índice en orden alfabético. A la izquierda están los números de referencia (E) que identifican la línea. Estos números pueden seleccionarse como si fueran los términos de búsqueda que representan. Una vez elegidos se pueden unir lógicamente o bien imprimir, con el comando TYPE que se describe adelante. En la Lección 5 se explica con más detalle el comando Expand y se muestran algunos ejemplos.

**TYPE:** Este comando, abreviado T, muestra los registros deseados en la pantalla de la terminal (PC)

Después de poner T o type, se pone el número del conjunto, por ejemplo: S1; a continuación una diagonal y el número del formato deseado; después otra diagonal y los números de los registros que se solicitan.

Ejemplo: ?t s1/2/1-5 (pedimos que nos despliegue las cinco referencias más recientes del conjunto S1, con el formato 2). Cada BD tiene sus propios formatos, pero en general el formato 6 despliega solamente el título y el 3 la referencia completa. Para saber exactamente los formatos de cada BD, es necesario consultar la hoja azul correspondiente.

**LOGOFF.** Para desconectarse del sistema y terminar la consulta.

En lugar de LOGOFF se puede poner también BYE, QUIT, o LOGOUT. El sistema interrumpe la conexión, dejando antes en la pantalla la relación del costo de la consulta.

#### Comando MAP

El comando MAP recupera los términos buscados en un campo específico de uno o varios registros y los guarda. Esta información se llama búsqueda salvada (SearchSave). MAP facilita la consulta buscando los registros correspondientes a los términos de interés buscados y los guarda para usarlos más tarde. Esto elimina la necesidad de reescribir los términos mientras se esté en línea.

**MAP** elimina términos duplicados dentro del grupo especificado y ordena los términos restantes en forma alfanumérica. Se puede ejecutar (**EXECUTE**) la Búsqueda salvada (**SearchSave**) creada por **MAP** en cualquier base de datos que incluya el campo usado en la consulta original.

**MAP** es particularmente importante en la búsqueda química. **MAP TEMP** se usa para guardar Números de Registro CAS (**MAP RN TEMP**); para nombres de sinónimos químicos (**MAP SY TEMP**); o bien una combinación de ambos (**MAP SYRN TEMP**) en dos BD. Una búsqueda típica sería en **CHEMSEARCH™** (BD 398) con **MAP RN TEMP** o **MAP SY TEMP** o **MAP SYRN TEMP** y luego iniciar con **BEGIN** al **CA Search<sup>R</sup>** (BD 399) y **EXECUTE STEPS (EXS)** para reusar la búsqueda guardada.

#### Búsqueda en Múltiples Bases de Datos (DIALOG OneSearch™)

Para usar One Search, sencillamente entre a más de una base de datos (separando los números con comas) al iniciar con el comando **BEGIN**. También se puede entrar a la categoría **DIALINDEX™** usando el acrónimo apropiado (Ver la lista de acrónimos en el catalogo de la base de datos Dialog). Desde este punto se puede buscar todos las BD indicados por el comando **BEGIN**. Cuando seleccione un término, podrá ver el número de registros recuperados por su grupo de BD. Similarmente, cuando **EXPANDA** un término, recibirá una de lista de términos que nos mostrarán el número de registros de su grupo de BD. El uso de OneSearch es tan fácil como buscar en una sola BD y muchas veces es más eficiente que la búsqueda en varias BD al mismo tiempo.

### Lección 3

#### INICIO DE UNA CONSULTA EN LÍNEA, PALABRAS CLAVE

**OBJETIVO:** Elegir los términos químicos en una BD y unirlos mediante el operador lógico **and**; ver el resultado de esta unión y observar la precisión de la búsqueda.

**CARACTERÍSTICAS:** Conexión: **Logon**; inicio de una BD: **BEGIN**; búsqueda: **SELECT**; operador lógico: **AND**; comando para mostrar en la pantalla: **TYPE**, y para desconectarse: **LOGOFF**.

**ANTECEDENTES:** Suponga que estamos interesados en dos proyectos de investigación. El primero involucra la producción de un producto químico llamado taxol, por células de una planta cultivada. El segundo es la investigación de la toxicidad del benceno. En ambos casos las referencias encontradas (hits) pueden recuperarse mediante la unión de términos usando el operador **AND**.

#### LA BÚSQUEDA:

Ver "Searching Dialog-Guia Completa" para las instrucciones. Una vez conectados al sistema, se solicita la Base de Datos (en inglés: file (archivo o BD)) deseada.

Con el comando **BEGIN 399**, se llama al Chemical Abstracts (CA Search). El término **BEGIN** puede escribirse con mayúsculas o minúsculas y puede abreviarse con la letra **B** o **b**.

**SELECCIÓN:** Para seleccionar los términos se usa **SELECT** y puede abreviarse con la letra (**S**) y escribirse con mayúscula o minúscula (**s**). Con este comando, la máquina que maneja la BD busca las referencias que contengan el término deseado, apareciendo en la pantalla el conjunto y el número de referencias por ej.:

S1 789 TAXOL (ver el ejemplo, Anexo 1).

Conecte los conjuntos correspondientes a los términos deseados con el operador **AND** y escojalos, para que la computadora busque el nuevo conjunto por ej.:

S4= 18 (S1 and S2 and S3, ver Anexo 1).

**MUESTRE** en la pantalla con **TYPE** o **t** los primeros seis títulos del conjunto S4 (ver Anexo 1).

Observe que la mayoría de las referencias nos son útiles. Ya que las primeras 6 referencias que contienen las palabras clave como Taxol, cell y culture; se encuentran en alguna parte de la referencia pero no el contexto que se necesita. Aun así la precisión en esta búsqueda puede considerarse como buena.

Seleccione los términos para la segunda investigación (toxicidad del benceno) y conecte los términos con el operador **AND**.

Vea el número de referencias obtenidas en este caso: S7=1839.

Luego se pide que muestre las seis referencias más recientes, usando el comando TYPE.

Fijese que es difícil de evaluar 1839 referencias (son demasiadas). De las 6 mostradas, ninguna es específica para lo que se busca, siendo estos registros muy pobres en precisión, por lo que es necesario rediseñar la consulta.

Termine la sesión con el comando **LOGOFF**. No continuará la consulta después de ordenar LOGOFF.

*? ¿Cuál fue el error en nuestra segunda búsqueda? ¿Qué puede hacerse para reducir el número de referencias obtenidas a una cifra más manejable?. ¿Cómo podemos aumentar la precisión de manera que la mayor parte de las referencias contengan información deseable?*

En algunos casos una simple búsqueda con palabras clave es suficiente. En la primera consulta hay solamente 789 referencias con la palabra taxol y ligándola con cell y culture se obtiene un número muy pequeño de resultados. Cualquier resultado irrelevante puede descartarse.

La búsqueda para toxicidad del benceno fue muy diferente. Cuando se busca un término común como benceno, se está seleccionando también cualquier otro uso de ese término en un compuesto químico. Esto significa que aparecerá en el diclorobenceno, hexaclorobenceno, bencensulfonato al seleccionarlo para benceno.

#### **PARA MÁS TARDE**

En consultas futuras encontraremos formas de aumentar la precisión y limitar la respuesta. A continuación se mencionan algunas sugerencias de ejercicios:

**Otros Términos:** Toxicidad en qué: ¿Ratas?, ¿Humanos?. Incluir términos nuevos en la búsqueda.

**Operadores:** Los operadores de proximidad dan una unión más precisa que **AND**.....Ver lecc. 4

**Término completo:** Limite al benceno como un término completo.....Ver lecc. 4

**Título solamente:** Limite los términos solo al título. ....Ver lecc.4

**Año:** Limite a referencias recientes. ....Ver lecc.11

**Inglés:** Limite sólo a registros en Inglés.....Ver lecc.11

En las próximas lecciones veremos con detalle algunas de estas posibilidades.

### TAREAS DE LA LECCION 3

La primera búsqueda es una simple consulta con palabras clave en la BD 399, uniendo los términos con el operador AND. Si es posible permita que los estudiantes diseñen su propia búsqueda con palabras clave que ellos consideren. ¡En estas búsquedas no hay respuestas erróneas!. Las búsquedas variaran en precisión y generarán discusión sobre la forma de incrementar su precisión y reducir su número de referencias obtenidas.

Esta es una buena oportunidad que tienen los estudiantes para imprimir sus resultados con el "formato escogido por ellos" tal como /TI(Título) y también para probar algunos de los "formatos predefinidos" tales como: /9 (completo) o bien: /3 (cita bibliográfica). El estudiante deberá adquirir el hábito de tener junto a él la hoja azul (Bluesheet: documento de consulta específico de cada BD, que contiene los comandos y ejemplos de consultas en esa Base de datos, además de otras informaciones sobre la misma.) apropiada, cuando se busca en una BD.

Como tarea se sugiere a los estudiantes buscar los siguientes temas de consulta como ejercicio:

- 1.----- ¿El geranial se considera un feromona?
- 2.----- Encontrar información sobre la síntesis de Taxol
- 3.----- ¿Qué se sabe sobre la nitroglicerina y los explosivos?
- 4.----- Investigar el control químico de algas (algae).
- 5.----- ¿Hay información acerca de la seguridad del "nerve gas" (gas de guerra)?
- 6.----- ¿Hay carcinógenos en el laboratorio químico.?
- 7.----- ¿Que catalizador se usa en la manufactura del papel?
- 8.----- ¿Existe una gasolina sintética?
- 9.----- ¿Qué información hay disponible en la toxicidad de los antihistamínicos?
- 10.----- ¿Qué puedes aprender acerca de bromo y su espectroscopía?
- 11.----- ¿Se pueden inhibir las algas con cobre?
- 12.----- ¿Cual es la relación entre las micorrizas y el fósforo?
- 13.----- ¿Existe algo importante sobre el olor del naftaleno?
- 14.----- Vea el uso del cloro en albercas.
- 15.----- ¿Puede ser la hidrazina un combustible para cohetes?
- 16.----- Encuentre información sobre inhalación de pegamentos (glue sniffing)
- 17.----- ¿Existe un shampoo con Ph balanceado?
- 18.----- ¿Qué gas podría encontrarse atrapado en el hielo?
- 19.----- ¿Qué información hay disponible acerca de Sherlock Holmes?
- 20.----- ¿Qué relación existe entre Ph e hiperventilación?

Fig. 3.1

Anexo 1: Ejemplo de consulta en línea

B399

File 399:CA SEARCH(R) 1967-1995/UD=12212

Set	Items	Description
---	-----	-----
? s taxol		
S1	789	TAXOL
? s cell		
S2	453485	CELL (SEE ?IGNOTE)
? s culture		
S3	70765	CULTURE
? s s1 and s2 and s3		
	789	S1
	453485	S2
	70765	S3
S4	18	S1 AND S2 AND S3

? t s4/ti/1-6

4/TI/1

Callus and cell suspension cultures of Taxus as a source of taxol and related taxanes

4/TI/2

Taxol production using yew cell culture

4/TI/3

Improved taxol yield by aromatic carboxylic acid and amino acid feeding to cell culture of Taxus cuspidata

4/TI/4

Taxus cell suspension cultures: optimizing growth and production of taxol

4/TI/5

Kinetics of taxol production, growth, and nutrient uptake in cell suspensions of Taxus cuspidata.

4/TI/6

Genetic transformation of mature Taxus: an approach to genetically control the in vitro production of the anticancer drug, taxol

? s benzene

S5 208334 BENZENE

? s toxicity

S6 133106 TOXICITY (SEE ?IGNOTE)

? s s5 and s6

208334 S5

133106 S6

S7 1839 S5 AND S6

? t s7/ti/1-4

7/TI/1

Cytogenetic study on peripheral blood lymphocytes of workers exposed to benzene

7/TI/2

Stereospecific synthesis of some new Z- and E-cyclopropyl benzyl sulfones and E,Z- and E,E-bis(cyclopropyl)sulfones by PTC method

7/TI/3

Biotransformation and toxicity of halogenated

7/TI/4

The carcinogenicity of methoxyl derivatives of 4-aminoazobenzene: correlation between DNA adducts and genotoxicity

? logoff

LECCIÓN 4  
**PRECISIÓN EN EL ENFOQUE-OPERADORES DE PROXIMIDAD**

**OBJETIVOS:** Restringir la recuperación de términos químicos a palabras completas en orden o lugar. Primero se verán los operadores para localizar registros donde aparecen palabras juntas o separadas, en distinta forma y lugar; luego, el operador que restringe la recuperación a una palabra completa; después se verá cómo restringir la recuperación a términos que se encuentran sólo en el título, o en otro campo. Además se verá cómo imprimir la consulta en formato completo.

En la Tabla siguiente se presentan los operadores de proximidad para localizar las referencias en línea donde aparecen palabras, juntas o separadas, en distinta forma y lugar.

<b>OPERADORES DE PROXIMIDAD</b>			
Operador	Función	Ejemplo	Resultados
(W)	Palabras adyacentes, en el orden especificado	gas(w)chromatography puede usarse sin la w. ( )	gas chromatography
(N)	Palabras adyacentes sin orden específico	donald(n)cram	donald cram; o bien cram donald
(L)	Palabras en la misma unidad, sin orden	radiation(l)monitoring	<u>Descriptores:</u> nuclear bombs.... offsite radiation; monitoring
(S)	Palabras en el mismo subcampo, sin orden	radiation(s)monitoring	<u>Identificadores:</u> book radiation monitoring
(F)	Palabras en cualquier parte del campo, sin orden	radiation(f)monitoring	<u>Descriptores:</u> laser radiation..... polarization studies, Compton effect..., polarization monitoring

Ejemplos de los operadores de proximidad mencionados

- (W) Palabras adyacentes, en el orden especificado  
? select gas (w) chromatography  
gas Chromatography
- Hasta n palabras en el orden especificado  
? select heat (1W) fusion  
heat of fusion

- (N) Palabras adyacentes; sin orden específico  
 ? select donald(n)cram  
 Donald Cram; Cram, Donald
- (nN) Hasta n palabras de por medio; sin orden específico  
 ? select charge(1n)mass  
 charge to mass; mass to charge;  
 charge/mass; charge-mass
- (L) Palabras en el mismo descriptor; sin orden específico  
 ? select radiation(1)monitoring  
 Descriptores:  
 Nuclear bombs...  
 offsite radiation monitoring
- (S) Palabras en el mismo subcampo; sin orden específico  
 ? select radiation(s)monitoring  
 Identificadores: book radiation monitoring
- (F) Palabras en el mismo campo; sin orden específico  
 ? select radiation(f)monitoring  
 Descriptores:  
 Laser radiation...  
 polarization studies  
 Compton effect...  
 polarization monitoring

**CARACTERÍSTICAS DE OTROS OPERADORES:** Súfijos con Códigos de campo: /TI y /FF, Operador de Proximidad (S); impresión con formato 9.

**ANTECEDENTES:** Supongamos que todavía estamos interesados en el proyecto de investigación que involucra la toxicidad de benceno. Observemos en la lección 3 que una búsqueda sencilla enlazada con dos palabras clave mediante el operador **AND** es muy amplia e imprecisa. Para reducir la búsqueda decidimos localizar información de la toxicidad en los humanos. Encontraremos referencias importantes.

Como se vera más adelante en el ejemplo de consulta, se hace notar que en la extensión de una palabra o palabras como **BENZENE**, **TOXICITY** o **HUMAN** se tendrá que ser más específico para reducir su obtención

**LA BÚSQUEDA:** El sufijo /FF limita la recuperación de la palabra benceno y elimina los nombres de los compuestos químicos que puedan incluir más términos benceno.

El sufijo /TI limita la recuperación de los términos que estén en el título.

Note que en este ejemplo hay 116 citas con las palabras benceno y toxicidad en el título. Varias de éstas no están relacionadas con el término humans, así que podemos limitar nuestra búsqueda con HUMAN/TI. Esta es una búsqueda muy reducida y podríamos omitir alguna referencias relevantes.

Para ser poco más específico, utilice el operador (S). El operador de proximidad (S) limita la recuperación a las palabras que estén en el mismo subcampo.

Observe que en esta búsqueda se encontraron las mismas referencias, más 4 adicionales.

Es conveniente hacer una evaluación inicial imprimiendo los títulos de una consulta en línea. Los títulos se aparecen en poco tiempo y pueden ser revisados para seleccionar los más importantes e imprimirse. La mayoría de los títulos en esta búsqueda, parecen relevantes. Enseguida podemos escribir uno ó más resultados en un formato que nos proporcione más información.

Imprima (TYPE) la primera cita del conjunto 8 con el formato 9. Los tipos de formatos varían según la base de datos, pero el formato 9 comúnmente es usado como "formato completo", con toda la información útil. Consulte la hoja azul de una base de datos en particular para obtener información completa sobre los formatos.

Los rectángulos (en la Fig.4-1, conjunto t s8/9/1; ficha 8/9/1) muestran una muy restringida búsqueda de títulos, encontrándose estas citas. Los óvalos muestran cómo que los términos Benceno, human y toxicidad se localizan en el mismo subcampo y pueden ser enlazados mediante el operador S. Este enlace entonces se conecta mediante AND con la palabra human localizado en cualquier otro sitio.

Imprima (TYPE) la cita 5 en el formato 9 (formato completo).

Este artículo esta en alemán.

?¿Hay otra palabra (¿mejor?) para toxicidad? ¿Cuál es el significado de "71-43-2, biological studies (estudios biológicos), SKIN toxicol( toxicología de la piel) e Immunol (Inmunología), responses to (respuestas a) in humans and lab. animals? (en humanos y animales de laboratorio)" ¿Olvidamos alguna cita con el plural humans?. No leo alemán, ¿hay alguna manera de eliminar las referencias bibliográficas que no estén en Inglés?

**PARA MÁS TARDE.** En búsquedas futuras aprenderemos métodos que nos permitirán encontrar respuestas a estas preguntas.

- **Número de registro (RN)**. Es un número único para cada sustancia, que puede buscarse.
- **Expand (E)**. Se expande un término para verificar la ortografía y encontrar términos relacionados.
- **Truncación**. Se usa la truncación (?) para encontrar variaciones de una palabra.
- **/ENG**. Restringe la recuperación a citas en inglés (ENGLISH).

#### TAREAS DE LA LECCIÓN 4

Esta estrategia de búsqueda para la BD 399 (Chemical Abstracts), está diseñada para aumentar la precisión y reducir la recuperación de artículos irrelevantes. Esto se obtiene con los siguientes Sufijos:

/FF	Se usa para limitar la recuperación de nombres químicos a palabras completas
S	Conecta los términos de búsqueda con el operador AND.
/TI	Se usa sólo para restringir los términos al título.

Es pedagógico hacer búsquedas secuenciales para comparar. Por ejemplo, si su tarea es investigar la toxicidad del Naftaleno, puede buscar S NAPHTHALENE, después S NAPHTHALENE/FF luego S TOXICITY y entonces S TOXICITY AND NAPHTHALENE/FF, después comparar, S TOXICITY/TI AND NAPHTHALENE/FF,TI (todo lo ejecutado en los números de los conjuntos no repetir los mismos términos). Algunas de las ejercicios siguientes requiere múltiples uniones, como se cita en el ejemplo: CALORIMETRY(s)OXYGEN(s)BOMB.

- 1.-----Investigar la toxicidad del naftaleno.
- 2.-----¿Puede ser catalizador el hierro?
- 3.-----¿Se considera peligroso el fenol?
- 4.-----¿Contribuye a la contaminación el polvo?
- 5.-----¿Puede el Aluminio formar una amalgama?
- 6.-----¿Hay humor en la química?
- 7.-----Investigar la espectroscopía láser.
- 8.-----Halle artículos sobre análisis de cadmio
- 9.-----¿Puede evaluarse con la espectroscopía el envejecimiento del papel?
- 10.-----¿Puede un cristal tetrahédrico ser responsable de una carga termocrónica?
- 11.-----Hallar información sobre la determinación del oxalato.
- 12.-----Investigar la cuantificación en picomoles.
- 13.-----Investigar la cuantificación en femtomoles.
- 14.-----Hallar algo sobre la bomba calorimétrica de oxígeno
- 15.-----Verifique las referencias de un calorímetro adiabático.
- 16.-----Busque presión de vapor por osmometría.
- 17.-----¿Cómo se usa el benzol en osmometría?
- 18.-----¿Cuántas referencias se pueden encontrar sobre fusión en frío?
- 19.-----Investigue el uso del cobre en la electrólisis.
- 20.-----¿Qué producto químico es responsable del envenenamiento de perros con sapos?

Los estudiantes deberán imprimir (TYPE) los títulos (TI) de hasta 20 de las citas encontradas, usando palabras clave. Conforme vean estos títulos, encontrarán algunas que parezcan relevantes.

Entonces deberán imprimir (TYPE) al menos una de estas referencias con formato 9 (formato completo para la BD 399), localizando y encerrando en un círculo las palabras clave, notando cómo fueron indizadas. El ejemplo 6 anterior, muestra a los estudiantes la forma literal cómo indiza la computadora. Varios de los aciertos se refiere al humor como un fluido del cuerpo, no al humor que se espera.

Fig. 4-1  
CONSULTA AL CHEMICAL ABSTRACTS

?b 399

File 399:CA SEARCH(R. 1967-1995/UD=12220

Set Items Description

-----

?s benzene

S1 209852 BENZENE

?s benzene/ff

S2 59301 BENZENE/FF

Compare números

?s s2/ti

S3 20457 S2/TI

?s toxicity/ti

S4 37207 TOXICITY/TI (SEE ?IGNOTE)

?s s3 and s4

20457 S3

37207 S4

S5 116 S3 AND S4

?s s5 and human/ti

116 S5

221379 HUMAN/TI

S6 3 S5 AND HUMAN/TI

?t s6/ti/all

6/TI/1

The toxicity of benzene and its metabolism and molecular pathology in human risk assessment

6/TI/2

Peroxidase activity in murine and human hematopoietic progenitor cells:  
potential relevance to benzene-induced toxicity

6/TI/3

Two benzene metabolites, catechol and hydroquinone, produce a synergistic induction of micronuclei and toxicity in cultured human lymphocytes

?s benzene/ff(s) toxicity

59301 BENZENE/FF

134032 TOXICITY (SEE ?IGNOTE)

S7 521 BENZENE/FF(S)TOXICITY

?s s7 and human

521 S7

373630 HUMAN

S8 7 S7 AND HUMAN

?t s8/ti/1-3

8/TI/1

The toxicity of benzene and its metabolism and molecular pathology in human risk assessment

8/TI/2

Peroxidase activity in murine and human hematopoietic progenitor cells:  
potential relevance to benzene-induced toxicity

8/TI/3

Two benzene metabolites, catechol and hydroquinone, produce a synergistic induction of micronuclei and toxicity in cultured human lymphocytes

?t s8/9/1

8/9/1

115165319 CA: 115(16)165319s JOURNAL

The toxicity of benzene and its metabolism and molecular pathology in human risk assessment

AUTHOR(S): Yardey-Jones, A.;Anderson,D.;Parke,D.V

LOCATION: Dep.Bichem., University Surrey, Guildford/Surrey, UK,  
GU25XH

JOURNAL: Br.J.Ind.Med. DATE: 1994 VOLUME: 48 NUMBER: 7  
PAGES:437-44 CODEN: BJIMAG ISSN: 0007-1072 LANGUAGE: English

SECTION:

CA259000 Air Pollution and industrial Hygiene

CA214XXX Mammalian Pathological Biochemistry

IDENTIFIERS: review benzene air pollutino. toxicity, health  
hazard benzene review.

DESCRIPTORS: Hygiene,Industrial...

benzene toxicity and metab. and pathol. in relation to

Air pollutino...

by benzene, exposure to, risk assessment of, toxicity and metab.  
and pathol. in

Health hazard...

from benzene exposure, assessment of

CAS REGISTRY NUMBERS:

71-43-2 biological studies, toxicity and metab. and pathol.of, in  
human risk assessment

?type s8/9/5

8/9/5

111110614 CA:111(13)110614w JOURNAL

Occupational Dermatological and immunological investigation of the  
harmul effect of benzene

AUTHOR(S): Wohlrab, Wolfgang; Schwartze, Beyer, Guenther Claus;  
Wozniak, Klaus Dieter

LOCATION:Ger.Dem.Rep.

JOURNAL:Wiss.Beitr.-Martin-Luther-Univ.Halle-Wittenberg

Date:1994

NUMBER:23,Beitr.Toxikol.Forsch. PAGES: 68-75 CODEN: MLWBBJ

ISSN:0440-1298

LANGUAGE: German

SECTION:

CA204003 Toxicology

CA259XXX Air Pollution and Industrial Hygiene

IDENTIFIERS: benzene skin penetration immunol

DESCRIPTORS:

Deoxyribonucleic acid formation..

benzene inhibition of, in skin

Skin toxic chemical and physical damage..  
benzene toxicity to, in humans and lab. animals

Leukocyte...

no. of, benzene decrease of of, in humans

Enzymes...

of skin, benzene effect on

Lymphocyte...

transformation of human, benzene inhibition of

CAS REGISTRY NUMBERS:

71-43-2 biological studies, skin toxicol. and immunol. responses  
to, in humans and lab. animals

9000-86-6 90001-45-0 9001-60-9 90001-77-8 of skin, benzene effect  
on

? logoff

**Lección 5**  
**ÍNDICES DE LA BASE DE DATOS CON EXPAND**

**OBJETIVOS:** Uso del comando EXPAND para ver el índice básico listado alfabéticamente del (título, resumen, descriptores, identificadores) o los índices adicionales (autor, fecha, título de la revista etc.) con el comando EXPAND. Seleccionar los términos del listado en lugar de teclearlos. Usar el comando **EXPAND** como ayuda ortográfica mostrada en el tesauros en línea, que además puede sugerir otros términos para la palabra buscada. Uso de la truncación en variación de terminación de palabra. Efectuar una consulta por autor.

**CARACTERISTICAS:** EXPAND para revisar la ortografía y el tesauros en línea; Campo de Autor(AU=), o Truncación(?).

**ANTECEDENTES:** Los químicos con frecuencia raspan las paredes de un vaso con un agitador, para inducir la cristalización. Estamos interesados en saber de que manera las vibraciones provocan la formación de cristales y queremos saber si hay autores que puedan considerarse expertos en este campo.

**LA BÚSQUEDA**

Entrar a la BD 399 del Chemical Abstracts con **BEGIN** (CA SEARCH, file 399)

**EXPAND** (Abreviado E) en la palabra cristalización, usar el tesauros en línea. La referencia (Ref) E3 muestra que hay 12 términos relacionados(RT) con el término cristalización.

**EXPAND E3** Para ver las palabras relacionadas (no todas se muestran aquí ). La relación es específica por el tipo. R es un término relacionado y N es un término más específico. "Crystal nucleation" es probablemente un buen término para nuestra búsqueda.

Seleccione (SELECT) R13 para crear un conjunto con la frase "Crystal nucleation" y guardarla como palabra clave.

Este conjunto (s1) puede ligarse con **AND** o con algún otro operador a la palabra vibration (vibración).

Seleccione (Select) ref.13 para crear un conjunto con la frase "Crystal nucleation" y evitar escribirla en el teclado. Este conjunto (s1) puede unirse con AND o con algún otro operador a la palabra vibration(vibración). Pensándolo mejor, ¿qué tal si usamos palabras como vibrations o vibrationally?, ya que de no usarlas podríamos perder referencias. Para evitar esta posibilidad, truncamos tecleando ? siguiendo la raíz de la palabra. Con TYPE pedimos el título y autor (TI, AU) de las primeras dos citas.

Estas parecen buenas; ahora busquemos algo sobre el autor Reents, Bert.

Si expandimos (EXPAND) el nombre del autor, aparece una lista alfabética de autores similares (algunos se eliminaron en este ejemplo). El conjunto E3 item \*1 indica que este autor se menciona en una cita de la base de datos CA Search (Chemical Abstracts).

Con el comando SELECT E3 para crear un conjunto (S4) que contiene la referencia.

Con TYPE pedimos el título del primer artículo. Este parece relevante para nuestra búsqueda. El mismo proceso puede ser utilizado para cualquier otro autor.

Con TYPE se imprime el artículo 1 con el formato 9 (Todo el formato).

Note cómo fue indizada esta cita.

? ¿Por qué una frase como "crystal nucleation" se indiza en una base de datos?

En muchas BD, los productores asignan términos relacionados con el tema, tomados del tesoro o del vocabulario controlado, a cada registro. Estos términos se les llama descriptores "**descriptors**" y muchos pueden ser una palabra o una frase con varias palabras. "Crystal nucleation" se indiza como crystal, nucleation, y como crystal nucleation. Algunas BD tienen términos llamados identificadores "**identifiers**". Estos están asignados a un registro, pero generalmente no forman parte de un vocabulario controlado.

#### **PARA MÁS TARDE**

**EXPAND NA=** Verifique si el Ácido Nitríco es una frase  
.....indizada.....lección 17.

## TAREAS DE LA LECCIÓN 5

Mientras estén en línea, los estudiantes buscarán con empeño palabras (particularmente palabras clave importantes). El comando Expand puede, ayudarlos a encontrar la palabra o frase correcta. Los estudiantes deberán "Expandir" la palabra o frase de la lista adjunta de la BD 399 (Chemical Abstracts), luego expandir el número E apropiado, para ver los términos relacionados. Pueden seleccionar con (S) uno de esos términos para crear un conjunto. Desde este conjunto pueden imprimir una lista de autores. Puede escogerse un autor y EXPANDIRLO. Después pueden verse los títulos de sus trabajos. Y como una alternativa, el estudiante puede EXPANDIR el nombre del autor de la lista adjunta. No hay una relación buscada entre el autor y el tema de los ejemplos.

Algunos de los ejemplos siguientes se presentan como frases indizadas (phrase indexing) aunque tengan dos palabras. Si, una frase es parte de un vocabulario controlado (Descriptores) se puede expandir y verificar.

- 1.----- Calorimetry. (Calorimetría)..... Norman L. Allinger
  - 2.----- Thermochemistry (Termoquímica) R.A. Kovar
  - 3.----- Fusion (Fusión) Don C. DeJongh
  - 4.----- Laser radiation (Radiación láser) Norman A. Lebel
  - 5.----- Osmometry (Osmometría) F. Albert Cotton
  - 6.----- Partition Function (Función de Partición) G. Morgan
  - 7.----- Thermocouples (Termopares) Michael P. Cava.
  - 8.----- Brass (Bronce) Samuel H. Maron
  - 9.----- Spectroscopy (Espectroscopía) E.O. Fischer
  - 10.----- Liquid crystals (Cristales líquidos) U. Giannini
  - 11.----- Diels-Alder reaction (Reacción Diels-Alder) J Krausse
  - 12.----- Electrochemistry (Electroquímica) R.B. Larrabee
  - 13.----- Chirality (Quiralidad) D.W.J. Cruickshank
  - 14.----- Carbocations (Carbocaciones) T.A. Geissman
  - 15.----- Diodes (Diodos) Marjorie C. Casario
  - 16.----- Disproportionation (Desproporcionamiento) Karl F.  
Kumli
  - 17.----- Expansion (Expansión) David Y. Curtin
  - 18.----- Hydrogenation (Hidrogenación) Reynold C. Fuson
  - 19.----- Alpha rays (Rayos alfa) Robert A. Alberty
  - 20.----- Molecular cloning (Clonación Molecular) Ralph L. Shriner
- ? logoff

Fig.5-1  
CONSULTA AL CHEMICAL ABSTRACTS

7b399

File 399:CA SEARCH(R) 1967-1995/UD=12222  
(c) 1995 American Chemical Society

Set Items Description  
--- -----

**?e crystallization**

Ref	Items	RT	Index-term
E1	3		CRYSTALLIZATIN
E2	1		CRYSTALLIZATIO
<u>E3</u>	<u>218314</u>	<u>12</u>	<u>*CRYSTALLIZATION (SEE ?IGNOTE)</u>
E4	177707	3	CRYSTALLIZATION AND CRYSTAL STRUCTURE
E5	1511	1	CRYSTALLIZATION APPARATUS
E6	2		CRYSTALLIZATION APPARATUS,
E7	1		CRYSTALLIZATION APPARATUS, AGITATED
E8	14		CRYSTALLIZATION APPARATUS, BATCH
E9	1		CRYSTALLIZATION APPARATUS, CASCADE
E10	21		CRYSTALLIZATION APPARATUS, COLUMN
E11	20		CRYSTALLIZATION APPARATUS, CONTINUOUS
E12	1		CRYSTALLIZATION APPARATUS, CONTINUOUS VACUUM

**?e e3**

Ref	Items	Type	RT	Index-term
R1	218314		12	*CRYSTALLIZATION (SEE ?IGNOTE)
R2	794	R		CATHODE SPUTTERING
R3	34651	R	5	CRYSTAL GROWTH
R4	50124	R		CRYSTN (CRYSTALLIZATION)
R5	48055	R	3	EPITAXY
R6	7097	R	2	GRANULATION
R7	518	R		POLYGONIZATION
R8	21846	R	5	PRECIPITATION
R9	17363	R	3	SOLIDIFICATION (SEE ?GENERAL)
R10	34882	R	1	SPUTTERING
R11	2384	R	1	WATER OF HYDRATION
R12	3274	R	2	ZONE MELTING

Enter P or PAGE for more

?p

Ref	Items	Type	Index-term
R13	6637	N	<u>CRYSTAL NUCLEATION</u>

?s r13

S1	6637	"CRYSTAL NUCLEATION"
----	------	----------------------

?s s1 and vibration

	6637	S1
	41256	VIBRATION
S2	9	S1 AND VIBRATION

S1 omitimos 2 de las citas por reducir la palabra vibration. El truncar puede ser una herramienta muy útil

?s s1 and vibration?

	6637	S1
	75624	VIBRATION?
S3	14	S1 AND VIBRATION?

?type s3/ti,au/1-2

3/TI,AU/1

DIALOG(R) File 399:(c) 1995 American Chemical Society. All rts. reserv.  
Nucleation in the electrocrystallization process studied by surface-enhanced Raman spectroscopy

AUTHOR(S): Reents, Bert; Lacconi, Gabriela; Plieth, Waldfried

3/TI,AU/2

DIALOG(R) File 399:(c) 1995 American Chemical Society. All rts. reserv.  
Vibrational spectroscopic study on the occurrence of stearic acid B and E forms: heterogeneous nucleation of the B form on the surface of E crystals and the topotactic phase transition from E to B

AUTHOR(S): Kaneko, Fumitoshi; Simofuku, Tetsuya; Miyamoto, Hideki; Kobayashi, Masamichi; Suzuki, Masao

?e au=Reents, Bert

Ref	Items	Index-term
E1	1	AU=REENTS, AUGUST C.
E2	1	AU=REENTS, B.
E3	1	*AU=REENTS, BERT

E4 1 AU=REENTS, D.  
E5 1 AU=REENTS, GARY  
E6 1 AU=REENTS, LISA L.  
E7 2 AU=REENTS, MARGARET J.  
E8 1 AU=REENTS, MARGARET JEAN  
E9 2 AU=REENTS, W D JR  
E10 1 AU=REENTS, W. D.  
E11 1 AU=REENTS, W. D. JR  
E12 39 AU=REENTS, W. D., JR.

?s e3

S4 1 AU="REENTS, BERT"

?t s4/ti/1

4/TI/1

Nucleation in the electrocrystallization process studied by  
surface-enhanced Raman spectroscopy

?t s4/9/1

114237860 CA:114(24)237860r JOURNAL

Nucleation in the electrocrystallization process studied by  
surface-enhanced Raman spectroscopy

AUTHOR(S):REENTS, BERT

LOCATION:Dokl. Akad.Nauk. USA.

DATE:1994 VOLUME:35

NUMBER:2

PAGES:116-18

CODEN: DBLRAC ISSN:0002-354X

LANGUAGE: English

SECTION:CA275001 Crystallography and Liquid Crystal

IDENTIFIERS: nucleation vibration potassium hydrogen  
phosphate, supercooling potassium hydrogen phosphate superstad. aq.  
solns., effect of mech. vibration on

Crystal nucleation, secondary..

of potassium dihydrogen phosphate, mech.-vibration-induced

CAS REGISTRY NUMBERS:

7778-77-0 crystal nucleation of, secondary, induced by low-frequency  
mech. vibrations

?logoff

OTRO EJEMPLO Y POSIBILIDADES ADICIONALES DEL COMANDO EXPAND

Ejemplo:

?expand aromaticity

Ref	Items	RT	Index-term
E1	16		AROMATICITIES
E2	1		AROMATICITY
E3	19271	<u>1</u>	*AROMATICITY
E4	1		AROMATICITY,
E12	2		AROMATICITY,DIATROPICITY

Existe un término relacionado con la palabra Aromaticity. Puede seleccionarse mejor con "E y el No" ej. E3

Para ver los términos relacionados con AROMATICITY, hacemos una segunda expansión del número E con el término relacionado, en este caso E3. El resultado que aparece en el ejemplo siguiente. Es la misma manera, EXPAND despliega otros números con R que nos muestran los términos relacionados (Se pueden eliminar los ejemplos desde E3 hasta E12).

Similar al anterior excepto que los números de entrada llevan R en lugar de E, para indicar que todos los términos de la lista están relacionados. Se eliminaron de la siguiente lista los términos de R3 a R12.

?expand e3

Ref	Items	Type	RT	Index-term
R1	19271			*AROMATICITY
R2	181812	R	<u>13</u>	RESONANCE

Para refinar la búsqueda del término en relación a otros términos, puede expandirse otra vez.

?expand r2

Ref	Items	Type	RT	Index-Term
R1	181812		13	*RESONANCE
R2	1927	R	1	AROMATICITY
R3	8514	R	2	CONJUGATION
R4	26033	R		ELECTRIC CIRCUITS
R5	38376	R	17	ELECTRON CONFIGURATION
R6	46217	R	6	ELECTRON SPIN RESONANCE
R7	967	R		FERMI RESONANCE
R8	624	R	1	HYPERCONJUGATION
R9	73888	R	6	NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE
R10	3541	R	5	NUCLEAR QUADRUPOLE RESONANCE
R11	2083	R	2	OPTICAL DOUBLE RESONANCE
R12	517	R	2	OPTICAL DOUBLE RESONANCE,LEVEL CROSS

La columna con el encabezado "Type" da la relación de los términos en la lista. La mayoría de la BD usan las siguiente abreviaturas:

F	Se usa el término EXPANDED en lugar de For
U	Usese el término expandido
N	Narrower, término más preciso
B	Broader, término más amplio
R	Término relacionado (ni más específico, ni más amplio).

#### EXPAND Indices Adicional

El ejemplo anterior fue una expresión del Índice Básico. Expand puede usarse también en campos adicionales (índices). La siguiente búsqueda ilustra los trabajos de un autor en particular. Es necesario conocer el nombre completo del autor en cuestión, de lo contrario pueden omitir algunas variantes.

Ejemplo:

?e au=korte,w

Ref	Items	Index-term
E1	1	AU=KORTE,W
E2	7	AU=KORTE,W.D.
E3	0	*AU=KORTE,W
E4	1	AU=KORTE,WILFRED
E5	6	AU=KORTE,WILLAM D.
E6	2	AU=KORTE,WULF
E7	1	AU=KORTEEV,M.P.
E8	1	AU=KORTEEV,V.A.
E9	2	AU=KORTEGAARD, BIRCHARD L.
E10	2	AU=KORTEGAS,K.E.
E11	2	AU=KORTEHISTO,ARIMO RANIER

?select e1,e2,e5

	1	AU=KORTE,W.
	7	AU=KORTE,W.D.
	6	AU=KORTE,WILLIAM D.
S1	14	E1,E2,E5

Si se escoje, de la lista anterior, Korte,William D., se perderan ocho referencias del autor. ;Prepárese para las diferentes ortografías de los nombres; así como para los distintos formatos de la BD; p.ej, SciSearch(34) no usa puntos y no requiere otro nombre que el familiar. Consulte siempre las hojas azules(Bluesheets) para más detalles sobre EXPAND.

**CAPITULO II**

**BUSQUEDA Y LOCALIZACION DE INFORMACION**

**QUIMICA**

## LECCION 6

### DATOS NO BIBLIOGRÁFICOS, NOMBRES, NUMEROS DE REGISTRO, FÓRMULAS Y INFORMACIÓN DE ANILLOS DEL CHEMSEARCH

**OBJETIVOS:** Obtener datos no bibliográficos de la base de datos CHEMSEARCH. Usar estos datos en otras BD. Descubrir el valor de los números de registro. Introducción a los datos del sistema de anillos.

**CARACTERÍSTICAS:** Número de registro (RN=), MAP SYRN TEMP, Nombre (NA=), orden ascendente, EXS, Datos del Sistema de Anillos

**ANTECEDENTES:** La nomenclatura química puede ser muy complicada. CHEMSEARCH traduce nombres triviales, nombres de la IUPAC, del Chemical Abstracts (C.A.), del Belstein, nombres comerciales, sinónimos y otros nombres, del campo=RN.

El número de registro(RN) se crea para evitar algunos de los problemas asociados con la gran variedad de nombres químicos. Existe un número de registro diferente para cada producto químico y el RN es un campo consultable en el C.A. Search (la BD del Chemical abstracts, que es la No. 399 en Dialog) y en otras bases de datos.

Supongamos que estamos interesados en encontrar información sobre el medicamento zovirax usado para tratar el herpes labial.

#### LA BÚSQUEDA

Inicie el archivo 398, CHEMSEARCH, que contiene el registro de más de 13 millones de sustancias químicas. Con el comando **S(SELECT)** seleccione el nombre, NA= Zovirax. Imprima el resultado (S1) con el formato 5. Con ello obtendrá:

Número de Registro del CAS= 59277-89-3  
Formula Molecular MF= C8H11N5O3

Datos de los anillos (Ring data). nr indica el número de anillos, gr indica el tamaño del anillo; ar es el arreglo de los anillos en orden ascendente, por ejemplo, C4O.01 significa 1 anillo que contiene 4 carbonos y un oxígeno; fr muestra la fórmula completa del anillo; ir es el número de identificación de los anillos.

El comando MAP SYRN TEMP almacena temporalmente los números de registro y los sinónimos que hay en el registro. A los datos almacenados se les dió el número TB004.

El comando EXECUTE STEPS (EXS) llama los datos guardados de la BD 398 y los usa en el archivo abierto.

Tenemos 1143 registros en el conjunto (s1) que contiene el número de registro y varios sinónimos.

Buscamos ahora el conjunto 1 con las palabras clave labial **AND** Herpes. Y el resultado fue cero.

Iniciemos la BD 155, con el MEDLINE . Esta es una de las mejores fuentes de la literatura biomédica y puede usarse números de registro y nombres.

Como anteriormente. **EXS** ejecuta siempre la última búsqueda almacenada. Si se quiere ejecutar otra búsqueda, use el número que le dió MAP. Por ejemplo **EXS TD004** ejecutaría los datos almacenados asociados con el registro del número TD004.

Observe el gran número de registros obtenidos de la BD 155.

Intentemos nuevamente nuestra estrategia de búsqueda, con las palabras clave labial y herpes.

Encontramos 8 registros en la BD 155. Ahora imprimamos los títulos de los artículos.

Todos estos 8 registros son relevantes. Esta búsqueda muestra la importancia de escoger cuidadosamente la BD.

? ¿Hay un camino más fácil para buscar en múltiples bases de datos?  
¿Puede haber redundancia entre registros recuperados en diferentes BD?  
¿Podría ser eliminada la redundancia? ¿Existe una forma para usar el  
Número de Registro para encontrar referencias de síntesis química? ¿Hay  
una forma para verificar que el nombre es correcto? ¿Como se usan los  
datos del anillo?.

### Para más tarde

RD ELIMINA (Remove) DUPLICADOS en una búsqueda de  
múltiples BD.  
P Para Preparación, se fija una P a los números de  
registro  
EXPAND Use el comando EXPAND para verificar los nombres

Ring Data Busca en el sistema de anillo.

### TAREAS DE LA LECCIÓN 6

Los alumnos pueden buscar los nombres químicos (NA) mostrados más adelante en la BD 398. Si hay respuestas múltiples, deben decidir si todas son relevantes o si algunas no lo son. Los artículos apropiados tienen número de registro y sinónimos almacenados (Search Save) con el comando MAP SYRN TEMP.

A continuación se abre una BD bibliográfica ( 399,155 o la de su elección) y la información almacenada se recupera con el comando EXS. Los conjuntos de datos obtenidos pueden ligarse a cualquier término (a elección del estudiante) mediante AND ó (S) para obtener resultados significativos. Estos resultados pueden limitarse de la forma usual, e imprimirse (TYPED) como se desee.

- 1.-----Babbit
- 2.-----Caffein
- 3.-----Ritalin
- 4.-----Alum
- 5.-----Cream of tartar
- 6.-----Acetic acid
- 7.-----Geraniol
- 8.-----Hypo
- 9.-----Bromine
- 10.-----Oil of vitriol
- 11.-----NAA
- 12.-----2,4-D
- 13.-----Phenobarbital
- 14.-----Guncotton
- 15.-----Butanol
- 16.-----Dextrometorphan
- 17.-----Hidrocortisone
- 18.-----Cocaine
- 19.-----Sal ammoniac
- 20.-----Corycavamine

Fig. 6-1  
CONSULTA EJEMPLO DE LA LECCION 6

?b398

File 398:CHEMSEARCH(TM) 1957-1995/Jul

Set Items Description  
-----

?select na=zovirax

S1 1 NA=ZOVIRAX

?type s1/5/1

1/5/1

CAS REGISTRY NUMBER: 59277-89-3

MOLECULAR FORMULA: C8H11N5O3

RING SYSTEM DATA:

(01) (nr=02;sr=5,6;ar=C3N2.01-C4N2.01;fr=NCNC2.01-NCNC3.01; ir=333-446-88)

"Nombres y sinónimos del Chemical Abstrac:"

CA NAME(S):

HP=6H-Purin-6-one (9CI)

SB=2-amino-1,9-dihydro-9-((2-hydroxyethoxy)methyl)-

SYNONYMS: Aciclovir; ACV; Acycloguanosine; Acyclovir; BW 248U; Zovirax;

9-(2-Hydroxyethoxymethyl)guanine

SUBFILE: CHEMNAME...1037 LITERATURE REFERNCE(S) IN FILE 399.

?map syrn temp

1 Select Statement(s), 8 Search Term(s)

Iniciamos en la BD 399

?b399

File 399:CA SEARCH(R) 1967-1995/UD=12308

Set Items Description

?exs

Executing TB004

18 ACICLOVIR

43 ACV

53 ACYCLOGUANOSINE  
 612 ACYCLOVIR  
 347 BW  
 2 248U  
 1 BW(W)248U  
 7 ZOVIRAX  
 53846 9  
 667425 2  
 111 HYDROXYETHOXYMETHYL  
 18486 GUANINE  
 35 9(W)2(W)HYDROXYETHOXYMETHYL(W)GUANINE  
 1043 RN=59277-89-3  
 S1 1143 ACICLOVIR + ACV + ACYCLOGUANOSINE + ACYCLOVIR +  
 BW()248U+ZOVIRAX 9()2()HYDROXYETHOXYMETHYL()GUANINE  
 + RN=59277-89-3

?s s1 and labial and herpes

1143 S1  
 110 LABIAL  
 9771 HERPES  
 S2 Q S1 AND LABIAL AND HERPES

El resultado fue cero (S2). Probablemente la BD 399 no es la mejor opción para esta consulta. Consulte el Catálogo de Bases de Datos para ver las descripciones de cada una.

?b155

File 155:MEDLINE(R) 1966-1995/OCT W2

Set Items Description

--- -----

?exs

Executing TB004

147 ACICLOVIR  
 395 ACV  
 104 ACYCLOGUANOSINE  
 3776 ACYCLOVIR  
 5418 BW

2 248U  
 0 BW(W) 248U  
 73 ZOVIRAX  
 366270 9  
 1325263 2  
 139 HYDROXYETHOXYMETHYL  
 18692 GUANINE  
 107 9(W) 2(W) HYDROXYETHOXYMETHYL(W) GUANINE  
 3201 RN=59277-89-3 (ACYCLOVIR)  
 S1 3961 ACICLOVIR + ACV + ACYCLOGUANOSINE +  
 ACYCLOVIR+BW() 248U+ZOVIRAX+  
 9() 2() HYDROXYETHOXYMETHYL() GUANINE +  
 RN=59277-89-3

**?s s1 and labial and herpes**

3961 S1  
 2254 LABIAL  
 25027 HERPES  
 S2 8 S1 AND LABIAL AND HERPES

**?t s2/ti/all**

2/TI/1

Clinical comparison of two topical antiviral ointments in herpes]  
 Lokalisieren ható ket antivirális kenócs klinikai ósszehasonlítás  
 herpesben.

2/TI/2

Prophylactic chemotherapy with acyclovir for recurrent herpes simplex  
 labialis.

2/TI/3

Concurrent oral cytomegalovirus and herpes simplex virus infection in  
 association with HIV infection. A case report.

2/TI/4

Treatment of labial herpes with acyclovir]  
 Zdravljenje herpesa ustnic z aciklovirom.

2/TI/5

Prevention of herpes simplex virus infections in susceptible patients.

2/TI/6

Topical acyclovir in the treatment of recurrent herpes simplex virus infections.

2/TI/7

Genital herpes simplex virus infections in adults.

2/TI/8

Acyclovir : mechanism of action, pharmacokinetics, safety and clinical applications.

?bye

## LECCION 7

### LOCALIZACION DE CITAS SOBRE PREPARACION (SINTESIS)

**OBJETIVOS:** Localizar síntesis de citas químicas mediante palabras clave y números de registro. Añadir la P (de preparación) mientras se guardan(MAPPING) los números de registro en la BD Chemsearch.

**CARACTERÍSTICAS:** MAP RN TEMP, "P", EXS, sufijo de patente (/PAT), NOT.

**ANTECEDENTES:** Una parte importante de la búsqueda en línea en bases de datos químicas es la localización de citas que traten de la preparación de un compuesto. Estas citas pueden localizarse mediante la búsqueda de palabras clave. También pueden encontrarse localizando el número de registro de la preparación. Este número es simplemente el número de registro del producto, seguido de una P. La "P" puede agregarse teclándolo o bien al aguardarla (MAPPED) temporalmente estando en una base de datos. Suponga que estamos interesados en localizar síntesis patentadas del camptothecin.

#### BÚSQUEDA:

BEGIN FILE 398.

Seleccione (SELECT) el nombre (NA=)

Existe 2 artículos que tienen el nombre camptothecin. La forma más rápida de evaluar es imprimir los nombres y examinarlos.

La única diferencia es en la estereoquímica y está búsqueda deberá incluirlas al mismo tiempo.

Con el comando: map rn temp s1/"p" , se agrega una P a los números de registro y se guarda temporalmente la orden.

Iniciamos (BEGIN) la BD 399.

**EXECUTE STEPS** llama los datos almacenados. Observe la P añadida para la preparación.

Seleccionemos artículos del conjunto (set1) que son patentes (/PAT).

Existen 9 patentes registradas. Imprimimos unos cuantos títulos y los números de patente. (/PN).

Imprima la referencia 3 en el formato 9 (formato completo) para observar toda la información disponible acerca de esta referencia.

Observe que se trata de una patente.

Fíjese en el número de patente PCT International USA:WO 9504736 A1

Note que la palabra preparation se repite abreviado como (prepn.).

Observe como preparation se indiza con un número de registro

Usando el número de registro de preparation es rápido y fácil, pero no garantiza la recuperación de todos los artículos relevantes, debido a la inconsistencias en indizar.

Para obtener una recuperación adicional, puede utilizarse otra estrategia. La búsqueda con palabras clave puede recuperar otras citas pero es menos específica. Observe el uso de la unión con (S) en la misma subunidad y el de OR para obtener otros sinónimos .

Seleccionemos (s) el renglón del conjunto (s3) para patentes. Observe que el número es grande de referencias (58) comparado con el número de registro de búsqueda de preparation (14).

Imprima (TYPE) el 9o registro del conjunto S5 en el formato 5. Aquí observamos las palabras dentro del contexto. Estas fueron localizados con el operador (S) porque cada par de términos aparecen en el mismo subcampo.

? He oído que Beilstein Online es la colección más extensa en el mundo de datos sobre compuesto orgánicos conocidos. ¿Como puedo buscar datos sobre preparaciones en dicha BD? Las patentes son desconocidas para mí. ¿Como puedo obtener información acerca de ellas? ¿Hay alguna forma para hacer destacar automáticamente las palabras clave?.

### Para más tarde

- **BD 390:** Beilstein Online-- Una fuente clásica para la preparación de datos -----Ver lecc.8
- **PATENTES:** U.S. PATENTS FULLTEXT (BD 653) -- Ver lecc.9
- **HIGHLIGHT&KWIC:** Comandos que hacen destacar las palabras claves ----- Ver lecc.18

### TAREAS DE LA LECCIÓN 7

En la BD 398 (CHEMSEARCH) los estudiantes seleccionarán (S) SELECT NA= (que incluya nombres y sinónimos) para los compuestos listados siguientes. Después, con MAP RN TEMP/"P" se guarda el número de registro y se agrega una P para la "preparación". Entren (BEGIN) a la BD 399 y con(EXS) la ejecutan. Después hacen una comparación usando el mismo compuesto y conectan con (S) las palabras preparation, prepn., y syntheses. Se deberán imprimir (TYPE) varios ejemplares de ambas búsquedas en el formato 5, para ver como fueron indizados los artículos.

Los estudiantes podrían separar los números de patente de los Estados Unidos (Para un uso futuro en la lección 9) mediante **SELECTING Sx /PAT AND PC=UNITED STATES** donde Sx es el número del conjunto X. Esto separaría las patentes de E.U.

Entonces se podría ordenar: **MAP PN TEMP**. Con lo cual se almacenara los números de patentes y además se creara un número clave que pueden recuperarse más tarde.

- 1.-----Azobenzene
- 2.-----Barbituric acid
- 3.-----Barium hypophosphite
- 4.-----Benomyl
- 5.-----Benzalkonium Chloride
- 6.-----Caffeine

7. -----Camphor
8. -----Cortisone
9. -----Digitalin
10. -----Dinitrobenzenoe
11. -----Emodin
12. -----Ergocryptine
13. -----Flurazepam
14. -----Fusidic acid
15. -----Gentisic acid
16. -----Hetacillin
17. -----Iodine trichloride
18. -----Lindane
19. -----Levodopa
20. -----Melamine

Fig. 7-1

CONSULTA EJEMPLO DE LA LECCIÓN 7

?b398

File 398:CHEMSEARCH(TM) 1957-1995/Jul  
(c) 1995 Amer.Chem.Soc.

Set	Items	Description
---	-----	-----

?s na=camptothecin

S1	2	NA=CAMPTOTHECIN
----	---	-----------------

?t s1/na/1-2

1/NA/1 CA NAME(S):

HP=1H-Pyrano(3',4':6,7)indolizino(1,2-b)quinoline-3,14(4H,12H)-dione  
(9CI)

SB=4-ethyl-4-hydroxy-

ST=(.PM.)-

...HP=Camptothecine (8CI)

ST=(.PM.)-

SYNONYMS: (.+.)-Camptothecin; (.-.-)-Camptothecine; dl-Camptothecin;  
20(RS)-Camptothecin

1/NA/2

CA NAME(S):

HP=1H-Pyrano(3',4':6,7)indolizino(1,2-b)quinoline-3,14(4H,12H)-  
dione

(9CI)

SB=4-ethyl-4-hydroxy-

ST=(S)-

...HP=Camptothecine (7CI)

SYNONYMS: (S)-Camptothecin; Camptothecin; d-Camptothecin; NSC  
94600; 20(S)-Camptothecin; 20(S)-Camptothecine

? map rn temp s1/"p"

1 Select Statement(s), 3 Search Term(s)  
Serial#TB005

?b399

File 399:CA SEARCH(R) 1967-1995/UD=12308

Set	Items	Description
-----	-------	-------------

---	-----	-----
-----	-------	-------

Con el comando EXS sin un número se ejecuta la última cita guardada. Para ejecutar otra búsqueda guardada use EXS seguido del número de serie.

?exs

Executing TB005

	35	RN=7689-03-4P
	0	RN=30628-51-4P
	16	RN=31456-25-4P
S1	50	RN=7689-03-4P + RN=30628-51-4P + RN=31456-25-4P

?s s1/pat

S2	14	S1/PAT
----	----	--------

?t s2/ti,pn/1-3

2/TI,PN/1

Method of making asymmetric the ring intermediates for the synthesis of

camptothecin and camptothecin analogs

PATENT: United States ; US 5395939 A

2/TI,PN/2

Methods of preparation of camptothecin analogs

PATENT: United States ; US 5391745 A

2/TI,PN/3

Process for the preparation of 9-aminocamptothecin

PATENT: PCT International ; WO 9504736 A1

?t s2/9/3

2/9/3

122265743 CA: 122(21)265743p PATENT  
Process for the preparation of 9-aminocamptothecin  
INVENTOR(AUTHOR): Bedeschi, Angelo; Cabri, Walter; Candiani,  
Ilaria;Zarini, Franco  
LOCATION: Italy  
ASSIGNEE: Pharmacia S.p.A.  
PATENT: PCT International USA ; WO 9504736 A1 DATE: 950216  
APPLICATION: WO 94EP2370 (940718) \*GB 9316352 (930806)  
PAGES: 35 pp. CODEN:PIXXD2  
LANGUAGE: English CLASS: C07D-491/22A  
DESIGNATED COUNTRIES: AU; CA; CN; FI; HU; JP; KR; RU  
DESIGNATED REGIONAL: AT; BE; CH; DE; DK; ES; FR; GB; GR; IE; SECTION:  
CA231005 Alkaloids  
IDENTIFIERS: aminocamptothecin prepn process, camptothecin amino  
CAS REGISTRY NUMBERS:  
58546-25-1P.58546-28-4Pprocessfor the prepn.of aminocam ptothecin  
7689-03-4P 58546-26-2P 162607-88-7P process for the prepn.  
51-64-9 156-34-3 529-237 2627-86-3 of 9-amino camptothecin

?s camptothecin(s) (preparation or prepn or synthes?s)

Note la truncación para obtener el singular y el plural

665 CAMPTOTHECIN  
867766 PREPARATION  
1302558 PREPN (PREPARATION)  
430260 SYNTHES?S  
S3 183 CAMPTOTHECIN(S) (PREPARATION OR PREPN OR SYNTHES?S)

?s s3/pat

S4 58 S3/PAT

?s s4 not s2

Seleccionamos los registros que no estén en el conjunto(s2)

58 S4  
14 S2  
S5 49 S4 NOT S2

Esta consulta encontró 49 registros que no encontraron en el conjunto (S2) con número de registro y preparación.

?t s5/5/9

5/5/9

121134541 CA: 121(11)134541c PATENT

Preparation of camptothecin derivatives as antitumor agents

INVENTOR(AUTHOR): Terasawa, Hirofumi; Sato, Keiki; Mitsui, Ikuo

LOCATION: Japan,

ASSIGNEE: Daiichi Seiyaku Co; Yakult Honsha Kk

PATENT: Japan Kokai Tokkyo Koho ; JP 9487746 A2 ; JP 0687746

DATE:940329

APPLICATION: JP 93177010 (930716) \*JP 92189654 (920716)

PAGES: 42 pp. CODEN: JKXXAF LANGUAGE: Japanese CLASS: A61K-031/47A;

C07D-495/22B; C07D-491/22

SECTION:

CA231005 Alkaloids

CA201XXX Pharmacology

IDENTIFIERS: benzopyrolizinoquinoline prepn antitumor agent, camptothecin prepn antitumor agent

DESCRIPTORS:

Neoplasm inhibitors...

camptothecin derivs.

CAS REGISTRY NUMBERS:

7689-03-4DP derivs., preparation rection. of, with camptothecin formaldehyde as antitumor agents

86639-52 124623-00-3 124623-03-6 138828-74-7 138828-75-8 138828-76-9 dimethylamine, ....

## LECCIÓN 8

### LOCALIZACIÓN DE INFORMACIÓN SOBRE REACCIONES QUÍMICAS

**OBJETIVOS:** Localizar información relacionada con reacciones químicas de sustancias.

**CARACTERÍSTICAS:** OR operador lógico, operador:  
(S) , ? , /PARTNER, /REAGENT, /START, /PR, SETHI, KWIC

**ANTECEDENTES:** En la BD del CA, las sustancias químicas se indexan por su Número de Registro. En el mismo subcampo del Número de Registro (RN), se encuentran los nombres de los reactivos y las palabras reacción ó reacciones. En la BD Beilstein se usan los sufijos /PARTNER, /REAG y /STAR.

Estamos interesados en las reacciones entre el etanol(ethanol) y el cloro (chlorine).

#### LA BÚSQUEDA

Empezar (Begin) la BD 399 (Chemical Abstracts).

Seleccione (SELECT) el número de registro del cloro y únalo con el operador (S) a todos los nombres posibles o abreviaciones del Etanol.

Seleccione el Número de Registro del etanol y únalo con el operador (S) al cloro.

Combine los dos conjuntos obtenidos antes con el operador lógico OR para obtener todas las combinaciones posibles de las dos sustancias.

Ahora una el conjunto S3 obtenido a la palabra **reaction?** (singular y plural) con el operador (S) (mismo subcampo)

Imprima el primer resultado con el formato 5

Observe la forma en que se localiza la información al utilizar el comando SELECT para esta referencia. Note el Número de Registro de la substancia, el nombre de la otra y la palabra reacciones.

Inicie (BEGIN) la BD 390 (Beiltein)

Seleccione (S) todos los nombres posibles para el cloro.

Seleccione el primer conjunto (S1) para el cloro (chlorine), reduciendolo a un componente de reacción (/partner), o con una materia prima inicial (/start), o un reactivo (/reagent)

Haga lo mismo para el etanol (ethanol).

Ahora combine los dos conjuntos con el operador (S).

El símbolo **HILIGHT** (realza) se indica con un asterisco.

Imprima los nombres (NA) de las dos primeras referencias del conjunto 5. También usemos el comando KWIC (k) para separar las palabras clave a un lado de esto con el símbolo HILIGHT "\*".

Note que el cloro y el etanol son reactivos en una reacción.

Otra forma de reunir las reacciones adicionales es con: SELECT NA=.

Después una el otro componente(s) de la reacción con (/CR).  
Utilice tantos sinónimos como sea posible.

Imprima (TYPE) el nombre (NA) (o sea el etanol) en el formato KWIC (k). El formato KWIC separa los casos en donde se encuentre alguna de las dos palabras clave.

El formato 2 en la BD 390 es una forma rápida para obtener toda la información disponible. En esta sección también tiene el uso de formato definido (UDF) que permiten extraer los datos que están definidos por la clave UDF. Esto nos da otra enorme forma para encontrar las referencias de preparaciones (síntesis)

El formato 2 muestra los datos útiles para el NA=Ethanol y los UDF que pueden utilizarse para recuperar información. Aquí vemos todos los datos preparativos disponibles.

Imprima (TYPE) el número del conjunto con los UDF para preparación de datos (/PR). Con esto se imprimirán **todos** los datos de la preparación disponibles. Para algunos productos químicos ésto es una gran cantidad de información.

Este formato muestra primero los datos para preparaciones, del etanol primero y después sigue con las referencias originales.

#### TAREAS DE LA LECCION 8

La búsqueda para reacciones químicas comienza localizando los números de registro para ambas sustancias, en pares de productos dados en la lista de abajo (ejemplo lección 6). En la BD 399, se une el número de uno de ellos (vía (S) para el mismo subcampo) al nombre (S) del otro producto. Se repite la misma búsqueda para el par inverso de nombres/números y todos se combinan por el operador lógico OR. Este conjunto después se une a la palabra reaction? (reacción) con (S). Algunas de las referencias resultantes deberán imprimirse con el formato 5 y localizar los términos indizados y encerrarlos en un círculo.

Los pares de sustancias químicas también pueden encontrarse en la BD 390, pero puede llevar más tiempo, debido a las diferencias de ortografía y nombres en el indizado. Utilice los números de registro para obtener los nombres químicos si tiene dificultades en la BD 390.

1. -----	acetic anhydride.....methylbutanol
2. -----	1,1,1-trichloroethane.....oxygen
3. -----	Chlorine.....ethylene
4. -----	1-butene.....ozone
5. -----	Lithium chloride.....butene
6. -----	Ozone.....polypropylene
7. -----	Benzene.....sulfuric acid
8. -----	Pyrene.....potassium permanganate
9. -----	Toluene.....potassium permanganate
10. -----	Phenol.....acetone

11.	-----	Benzene	.....	oxygen
12.	-----	Toluene	.....	oxygen
13.	-----	Methyl iodide	.....	magnesium
14.	-----	Cuprous iodide	.....	magnesium
15.	-----	Nitrobenzene	.....	methyl formate
16.	-----	Carbon monoxide	.....	water
17.	-----	Benzylamine	.....	urethane
18.	-----	Guaiacol	.....	acetic acid
19.	-----	Cinnamic acid	.....	ethanol
20.	-----	Nicotinic acid	.....	methanol

Fig. 8-1  
CONSULTA EJEMPLO DE LA LECCION 8

?b399

File 399:CA SEARCH(R) 1967-1995/UD=12309

(c) 1995 American Chemical Society

Set	Items	Description
---	---	-----

Para encontrar el número de registro revise la lección 6

?s rn=7782-50-5(s) (ethanol or ethyl(w)alcohol or etoh)

	33317	RN=7782-50-5
	104178	ETHANOL
	225924	ETHYL
	41979	ALCOHOL
	2275	ETHYL(W)ALCOHOL
	291	ETOH
S1	19	RN=7782-50-5(S) (ETHANOL OR ETHYL(W)ALCOHOL OR ETOH)

?s rn=64-17-5(s) chlorine

	89481	RN=64-17-5 (SEE ?IGNOTE)
	49333	CHLORINE
S2	87	RN=64-17-5(S)CHLORINE

?s s1 or s2

	19	S1
	87	S2
S3	103	S1 OR S2

?s s3(s)reaction?

103 S3  
1767103 REACTION?  
S4 62 S3(S)REACTION?

?t s4/5/1

4/5/1

121057799 CA: 121(5)57799p JOURNAL  
An easy route to methyl 6-O-alkyl glycosides  
AUTHOR(S): Bayle, Corinne; Gabelle, Andree  
LOCATION: CEA, Dep. Rech. Fondamentale Matiere Condensee, 38054,  
Grenoble, Fr.

JOURNAL: Tetrahedron Lett. DATE: 1994 VOLUME: 35  
NUMBER: 15 PAGES: 2335-6 CODEN: TELEAY ISSN: 0040-4039  
LANGUAGE: English

SECTION: CA233003 Carbohydrates  
IDENTIFIERS:alc nucleophilic  
substitution deoxyiodoglucopyranoside

DESCRIPTORS:

Substitution reaction,nucleophilic...  
of deoxyiodoglucopyranoside with alcs.

CAS REGISTRY NUMBERS:

5155-46-4 nucleophilic substitution of, with alcs. in presence of  
chlorine

5155-48-6P 23392-36-1P 142025-36-3P 155935-59-4P prepn. of, by  
nucleophilic substitution of alcs. with deoxyiodoglucopyranoside in  
presence of chlorine

64-17-5 67-56-1 111-27-3 111-87-5 reactions, nucleophilic  
substitution of, with deoxyiodoglucopyranoside in presence of chlorine  
7782-50-5 reactions, chlorination of ethanol-ethanal mixts. by oxygen-  
contg., choral hydrate manuf. by, safety in

?b390

File 390:Beilstein Online 6,546,266 subs

Set Items Description

--- ---- -

?s chlorine or chlorin or cl2

11383 CHLORINE (see also chlor, chlorin, Cl2)  
658 CHLORIN (see also chlor, chlorine, Cl, Cl2)  
222592 CL2 (see also chlor, chlorin, chlorine, Cl)  
S1 231066 CHLORINE OR CHLORIN OR CL2

?s s1/partner or s1/start or s1/reagent

3837 S1/PARTNER  
599 S1/START  
14757 S1/REAGENT  
S2 18653 S1/PARTNER OR S1/START OR S1/REAGENT

?s ethanol or aethanol or etoh or c2h5oh

1093294 ETHANOL (see also aethanol, A, C2H5OH, EtOH)  
25947 AETHANOL (see also 8 related terms)  
33664 ETOH (see also aethanol, ethanol, A, C2H5OH)  
1480 C2H5OH (see also aethanol, ethanol, A, EtOH) S3 1126061  
ETHANOL OR AETHANOL OR ETOH OR C2H5OH

?s s3/partner or s3/start or s3/reagent

23864 S3/PARTNER  
55507 S3/START  
307035 S3/REAGENT  
S4 376039 S3/PARTNER OR S3/START OR S3/REAGENT

?s s2(s)s4

18653 S2  
376039 S4  
S5 331 S2(S)S4

?set hi \*

HIGHLIGHT set on as '\*'

?t s5/na,k/6

5/NA,K/6

Preparative Data

Preparation

Starting Material: BN=2584701, C14H11NO3  
Reagent: \*Cl2\*  
Solvent: \*ethanol\*  
Temp: 50 - 60 C  
By-product: BN=7036088, C14H11C12NO3 (Ref. 1)

?s na=ethanol

S6 67 NA=ETHANOL

?s s6 and (chlorine or chlorin or cl2)/cr

67 S6

3638 CHLORINE/CR (see also chlor, chlorin, Cl2)

46 CHLORIN/CR (see also chlor, chlorine, Cl, Cl2)

672 CL2/CR (see also chlor, chlorin, chlorine, Cl)

S7 2 S6 AND (CHLORINE OR CHLORIN OR CL2)/CR

?t s7/na,k/1

7/NA,K/1

\*ethanol\*; magnesium ethylate

German Chem. Name: Aethanol Magnesiumaethylat

Synonym: Magnesiumaethylat

Chemical Reaction:

Partner:\*chlorine\*,hydrochloric acid

Reaction Product : BN = 1209355 , choral alcoholate  
(ref.3104,handbook)

\*\*\*\*ALGUNAS REFERENCIAS HAN SIDO ELIMINADAS\*\*\*\*

?t s7/2/1

Imprima la primera ficha del conjunto (s7) en el formato 2.

7/2/1

3678841

\*ethanol\*; magnesium ethylate

German Chem. Name: Aethanol Magnesiumaethylat

Synonym: Magnesiumaethylat

Molecular Formula: 2C2H5O.Mg

Component BN:1839415; Mol. Formula:C2H5O;

Mol Weight: 45.06;

\*\*\*\*ALGUNAS REACCIONES HAN SIDO ELIMINADAS\*\*\*\*

Data Present:

Data	Ref		Data Type
+Ref	Only	UDF	
10			.Related Structure
81	53		.PR Preparative Data
57	50		.Preparation
1379	844		.CR Chemical Reactions
1383	2179		.P Physical Properties

\*\*\*UDF CATEGORIAS HAN SIDO ELIMINADAS\*\*\*

?t s7/pr/1

Recuerde que estos datos de preparación son para el  
NA=ETHANOL con modificaciones para el formato s7.

7/PR/1

Preparative Data

Starting Material: BN=906677, acetylene

Reagent: ozone, hidrogen (Ref. 92, hanbook)

Preparation

Starting Material: BN=505933, ethylamine

Reagent: water ,nitrous acid (ref.94, handbook)

Refs.

92, Societe S Jay, DRP 149893

94, Linnemann, LACHDL, Liebigs Ann.Chem., 144 (1867) .132

99, Wurtz, LACHDL, Liebigs Ann.Chem., 123 (1862), 140

\*\*\*\*ALGUNA REFERENCIAS FUERON ELIMINADAS\*\*\*\*

?bye

## LECCIÓN 9

### TEXTOS COMPLETOS DE PATENTES DE LOS E.U. (BD 652-654)

**OBJETIVOS:** Localizar documentos de patentes de los E.U. así como Textos completos de Patentes.

**CARACTERÍSTICAS:** PN= (Número de patente)

**ANTECEDENTES:** Muchas referencias químicas son patentes. Muy pocas bibliotecas cuentan con patentes. Los BD del 652-654 hace más fácil observar el contenido de las patentes de los E.U. lo cual elimina la necesidad de ordenarlas en la Oficina de Patentes de los E.U. o por medio de un servicio de obtención de documentos. En la lección 7 encontramos una cita de una patente. Veámosla en detalle.

**LA BÚSQUEDA:** Empezar (B) en el BD 654. Note que la 653 es para los años 80 y la 652 es para los años 70.  
Seleccione (S) PN=(Número de Patente).

Imprima la referencia 2 en el formato 9 (formato completo en esta base de datos). Siempre consulte las "hojas azules" para la información del formato.

Esta es la forma en que la patente es indizada: Patente No.:5,053,512

Este registro de patente tiene cerca de 30 páginas de longitud. La mayor parte fue eliminada aquí. Por tal razón no es posible seguirla en detalle. El original es completo y tiene casi todos los datos de la patente. (sólo las estructuras fueron omitidas).

? No estoy familiarizado con estos términos.  
resolution, enantiomers, resolving mixtures, chiral.

La patente que acabamos de ver se localizó con el Número de Patente (PN). Hubo algunos términos difíciles de entender.

Puede ser una gran ayuda localizar patentes similares y examinarlos. Las BD de 652-654 también pueden buscarse con palabras clave. Seleccionamos los términos apropiados que aparecerán en un título (/TI).

Imprima (T) los títulos de todas las referencias el conjunto 2. Observe que nuestra primera patente es el registro 2 en este conjunto. Después se podría imprimir los otros registros en el formato 2 (Un vistazo rápido) y entonces imprimir en el formato 9 (formato completo) si se desea.

? *Aún no estoy familiarizado con esos términos técnicos. Patentes similares usan palabras semejantes que aun no han sido aclarados ¿Existe una base de datos que me pueda ayudar a entender términos técnicos?*

Para más tarde

BD 302: Kirk-Othmer Online (Enciclopedia Química en línea)  
Ver. Lecc. 10.

#### TAREAS DE LA LECCIÓN 9

En esta búsqueda los estudiantes verán cómo se obtiene una sustancia química aplicada a una referencia de patente. Los estudiantes inician la BD 399. Después seleccionarán su compuesto sólo para las referencias a una patente de los E.U. Por ejemplo: **S ISOPROTERENOL/PAT AND PC=US** (donde /PAT limita la recuperación a patentes y PC= US significa el país de la patente = E.U.). Si hay múltiples aciertos pueden ser evaluados rápidamente por el comando **TYPE Sx/TI,PD/y-z** (donde las citas y-z del conjunto número X se imprime con el título y la fecha de patente). Después el número de patente se guarda (MAPPED), ejemplo; **MAP PN TEMP Sx/1** (significa que guardamos temporalmente el número de patente de la referencia 1 del conjunto X.). Finalmente, los estudiantes podrán empezar las BD 652-654 (Dependiendo de la fecha de la patente, o las tres BD) y ejecutarlas (EXS).

Se sugiere que la patente sea impresa primero en el formato 2 para tener una idea de su tamaño antes de imprimirla en el formato 9 (formato completo). Más adelante se mostrará en la Fig.9.2 ANEXO 1 se da un ejemplo de búsqueda para el término No.12.

1. ----- Isoproterenol
2. ----- Phenylephrine
3. ----- Ephedrine
4. ----- Benzocaine
5. ----- Pilocarpine
6. ----- Physostigmine
7. ----- Parathion
8. ----- Malathion
9. ----- Nicotine
10. ----- Atropine
11. ----- Diazepam
12. ----- Promethazine
13. ----- Allopurinol
14. ----- Glutethimide
15. ----- Scopolamine
16. ----- Vinblastine
17. ----- Haloperidol
18. ----- Diphenhydramine
19. ----- Cyproheptadine
20. ----- Chlorpheniramine.

Fig.9.1  
CONSULTA EJEMPLO DE LA LECCIÓN 9

?b 654

File 654:US PAT.FULL. 1990-1995/Aug 22

\*File 653(1980s) AND 652(1970s) NOW AVAILABLE:

Set Items Description

-----

?s pn=us 5053512

S1 5 PN=US 5053512

?t s1/9/all

1/9/2

Utility

TOTAL SYNTHESIS OF 20(S) AND 20(R)-CAMPTOTHECIN AND COMPTHOTHECIN  
DERIVATIVES

PATENT NO.: 5,053,512

ISSUED: October 01, 1991 (19911001)

INVENTOR(s): Wani, Mansukh C., Durham, NC (North Carolina),  
US (United States of America) Nicholas, Allan  
W., Raleigh, NC (North Carolina), US (United  
States of America) Wall, Monroe E., Chapel  
Hill, NC (North Carolina), US (United States  
of America)

ASSIGNEE(s): Research Triangle Institute, (A U.S. Company  
or Corporation ), Research Triangle Park, NC  
(North Carolina), US (United States of America)  
[Assignee Code(s): 70949]

APPL. NO.: 7-511,953

FILED: April 17, 1990 (19900417)

References Cited

U.S. PATENT DOCUMENTS

4,031,098	6/1977	Sugasawa	546-48
4,473,692	9/1984	Miyasaka et al.	546-48
4,545,880	10/1985	Miyasaka et al.	04-158R

\*\*\* MUCHA INFORMACION ELIMINADA \*\*\*

NON-U.S. PATENT DOCUMENTS

74256 3/1983 EP (European Patent Office)  
220601 5/1987 EP (European Patent Office)  
321122 6/1989 EP (European Patent Office)

\*\*\* MUCHA INFORMACION ELIMINADA \*\*\*  
OTHER REFERENCES

Cancer Research, (1989) vol. 49, 4385-5489, "DNA Topoisomerase I-mediated DNA Cleavage and Cytotoxicity of Camptothecin Analogues", Lisang et al.

\*\*\* MUCHA INFORMACION ELIMINADA \*\*\*

PRIMARY EXAMINER: Rivers, Diana  
ATTORNEY, AGENT, OR FIRM: Oblon, Spivak, McClelland, Maier & Neustadt  
CLAIMS: 12  
INDEPENDENT CLAIM: 1,10  
DRAWING PAGES: 2  
DRAWING FIGURES: 2  
ART UNIT: 122  
FULL TEXT: 599 lines

ABSTRACT

The invention relates to a method of producing 20(S)-camptothecin, 20(R)-camptothecin and analogs thereof. The method involves the resolution of an mixture of enantiomers of an intermediate lactone.

BRIEF DESCRIPTION OF THE DRAWINGS

A more complete appreciation of the invention and many of the attendant advantages thereof will be readily obtained as the same becomes better

\*\*\* MUCHA INFORMACION ELIMINADA\*\*\*

BACKGROUND OF THE INVENTION

1. Field of the Invention

The invention relates to a method of resolving mixtures of camptothecin enantiomers and analogs thereof.

2. Discussion of the Background

\*\*\* MUCHA INFORMACION ELIMINADA \*\*\*

SUMMARY OF THE INVENTION

Accordingly, one object of the present invention is to provide a method of producing 20(R)-camptothecin and 20(S)-camptothecin separately.

\*\*single chiral carbon and R sup 1 is hydrogen or an achiral alkyl, aralkyl or aryl group to produce a mixture of diastereomeric amides with formula...

EXAMPLES

Melting points were taken on a Kofler hot-stage microscope and are uncorrected...as determined by HPLC analysis..

What is claimed as new and desired to be secured by Letters Patent of the United States is:

1. A method for producing substantially pure 20(S)-camptothecin, 20(R)-camptothecin or analogs thereof,

..\*\*\* MUCHA INFORMACION ELIMINADA \*\*\*

12. The 20(S)-camptothecin of claim 11, having an optical purity of 95-100%.

?s camptothecin/ti and (synthes?s or preparation)/ti

34 CAMPTOTHECIN/TI

1487 SYNTHES?S/TI

9377 PREPARATION/TI

S2 14 CAMPTOTHECIN/TI AND (SYNTHES?S OR PREPARATION)/TI

?s camptothecin/ti and (synthes?s or preparation)/ti

34 CAMPTOTHECIN/TI

1487 SYNTHES?S/TI

9377 PREPARATION/TI

S2 14 CAMPTOTHECIN/TI AND (SYNTHES?S OR PREPARATION)/TI

?t s2/ti/all

2/TI/1

METHOD OF MAKING ASYMMETRIC DE RING INTERMEDIATES FOR THE SYNTHESIS OF CAMPTOTHECIN AND CAMPTOTHECIN ANALOGS

2/TI/2

PROCESS FOR ASYMMETRIC TOTAL SYNTHESIS OF CAMPTOTHECIN ANALOGUES

2/TI/3

METHOD OF MAKING ASYMMETRIC DE RING INTERMEDIATES FOR THE SYNTHESIS OF CAMPTOTHECIN AND CAMPTOTHECIN ANALOGS

2/TI/4

METHODS OF PREPARATION OF CAMPTOTHECIN ANALOGS

2/TI/5

PREPARATION OF WATER SOLUBLE CAMPTOTHECIN DERIVATIVES

Fig.9-2  
CONSULTA 2 ANEXO 1: EJEMPLO DE LA LECCION 9

? begin 399

File 399:CA SEARCH(R) 1967-1995/UD=12311

Set	Items	Description
---	-----	-----

?s promethazine/pat and pc=us

	15	PROMETHAZINE/PAT
	276737	PC=US
S1	5	PROMETHAZINE/PAT AND PC=US

?t s1/ti,pd/1-2

1/TI,PD/1

Pseudoephedrine hydrochloride-promethazine hydrochloride mixtures for the treatment of motion sickness

DATE: 881011

1/TI,PD/2

Inhalation therapy for relieving bronchial spasm using quaternary salts of promethazine

DATE: 800115

?map pn temp s1/2

1 Select Statement(s), 1 Search Term(s)  
Serial#TB006

?b653

File 653:US Pat.Fulltext 1980-1989

Set	Items	Description
---	-----	-----

?exs tb006

S1	1	PN=US 4183912
----	---	---------------

?ts1/2/1  
1/2/1

01070401 DIALOG(R)File 653:US Pat.Fulltext format only 1995  
Utility  
INHALATION THERAPY FOR RELIEVING BRONCHIAL SPASM USING QUATERNARY  
SALTS OF PROMETHAZINE  
[QUATERNARY AMMONIUM PHENOTHIAZINE DERIVATIVES]

PATENT NO.: 4,183,912  
ISSUED: January 15, 1980 (19800115)  
INVENTOR(s): Rosenthale, Marvin E., Princeton, NJ (New Jersey), US  
(United States of America)  
ASSIGNEE(s): American Home Products Corporation, (A U.S. Company or  
Corporation ), New York, NY (New York), US (United States of America)  
[Assignee Code(s): 3096]  
APPL. NO.: 5-869,408  
FILED: January 16, 1978 (19780116)

References Cited  
U.S. PATENT DOCUMENTS

2,887,481	5/1959	Sherlock et al.	260-243
3,933,822	1/1976	Broughton	424-45
4,016,279	4/1977	auer et al.	424-45

NON-U.S. PATENT DOCUMENTS

881379	11/1961	GB (United Kingdom)	544-41
--------	---------	---------------------	--------

OTHER REFERENCES

Remington's Pharm. Sci., 13th ED., pp. 450 & 1208.

PRIMARY EXAMINER: Schenkman, Leonard  
CLAIMS: 5  
EXEMPLARY CLAIM: 1  
ART UNIT: 125  
FULL TEXT: 328 lines

## LECCION 10

### ENCICLOPEDIA QUIMICA KIRK-OTHEMER EN LINEA

**OBJETIVOS:** Localizar textos y tablas de información acerca de procesos químicos en la BD 302.

**CARACTERISTICAS:** /TI, /SH, /SUM, (W), ?, SN=, TN=

**ANTECEDENTES:** En la lección 9 encontramos algunos términos no muy familiares como parte de la descripción de una patente. Kirk-Othmer Online es un tratado exhaustivo aplicado a la ciencia química y tecnología industrial.

Es posible obtener algo de información acerca de la mayoría de los términos químicos de la BD. Supongamos que desconocemos el término saponificación.

#### LA BUSQUEDA.

/TI en la BD 302 significa título del capítulo.

No encontramos referencias.

/SH es el encabezado de la sección (Section Heading).

/SUM llama a un resumen (abstrac) de la referencia relacionado con el término de saponificación como encabezado de sección.

El capítulo trata de la manufactura de ácidos carboxílicos pero tiene una sección sobre saponificación de grasas naturales.

Observe que el resumen dice cómo llegar a donde se desee. Seleccione (S) SN= 30455S2.

Veremos la tabla 3 más tarde.

Seleccione (S) el número de sección dado antes (en el ejemplo)

Imprime (T) la sección en el formato 5.

Veamos ahora la tabla 3. Búscamos el número de tabla dado en el registro y lo imprimimos con el formato 5.

La información obtenida está en forma tabular.

En la BD 302 es también una excelente fuente de información sobre sustancias químicas. Seleccionemos (S) bromo(bromine) como título (/TI) lo cual significa título de capítulo en esta BD. Observe que existen varios capítulos relacionados con el bromo, pero sólo 4 son registros con resumen(/SUM). Vamos a imprimir los títulos con resumen de estos artículos.

Imprima (T) el primer registro en el formato 2. Este es un buen formato que le permite conocer toda la información disponible y da códigos para recuperar la información que se quiera.

Si quiere información sobre reacciones con otros "Haluros" sólo seleccione las; SN= 4042985

Estas tablas pueden ser seleccionadas si se desea.

? ¿Qué pasa si tengo datos físicos sobre un compuesto orgánico pero no conozco su identidad? ¿ Existe una base de datos que me pueda ayudar a encontrar información acerca de una sustancia química desconocida?

**Para más tarde**

**File 390:** Beilstein Online ..... Ver lecc.12.

#### **TAREA DE LA LECCION 10**

En la BD 302 (Kirk-Othmer en línea) los estudiantes pueden usar los términos de abajo para encontrar un artículo resumido. Estos artículos resumidos muestran toda la información disponible y dan los números del código que facilitan encontrar la secciones o tablas deseadas. Los estudiantes primero deben encontrar el artículo de resumen y después localizar ahí una sección o tabla e imprimirla en el formato 5. Deben tener a la mano la hoja azul (Bluesheets) para evitar una confusión.

Este es un buen momento para presentar la compilación de comando como un ahorrador de tiempo. La compilación es la introducción de varios comandos en una línea de comandos. Cada comando está separado por un punto y coma. Un ejemplo simple para esta búsqueda puede ser : ? **B302;SELECT HYDRAZINE/TI,SUM** que empezaria en la BD 302 y después recuperaría los registros de resumen los cuales la hidrazina fue un título de capítulo. Conforme los alumnos adquieran más confianza la compilación puede llegar a ser más compleja. Por ejemplo ? **B302;S HYDRAZINE/TI,SUM;TSI/2/1** comenzara la BD, seleccionando el registro de resumen con hidrazina como título de capítulo, e imprimir (T) el primer registro en el formato 2.

1. ----- Hydrazine
2. ----- Hydrogenation
3. ----- Ion exchange
4. ----- Fermentation
5. ----- Adsorption
6. ----- Laser
7. ----- Liquid crystals
8. ----- Crystallization
9. ----- Ethanol
10. ----- Bromine
11. ----- Distillation
12. ----- Calorimetry
13. ----- Nitric acid
14. ----- Acetic acid
15. ----- Chromatography
16. ----- Explosives
17. ----- Alkaloids
18. ----- Azo dyes
19. ----- Analytical methods
20. ----- Gold

Fig.10.1  
CONSULTA EJMPLO DE LA LECCIÓN 10

?b 302

File 302:Kirk-Othmer Online 1995/Ed4,Vol9

Set	Items	Description
---	-----	-----
?s saponification/ti		
S1	0	SAPONIFICATION/TI
?s saponification/sh		
S2	4	SAPONIFICATION/SH
?s s2/sum		
S3	2	S2/SUM

?t s3/2/2

Imprimir un resumen en el formato 2 es una buena elección.  
Este formato muestra toda la información disponible en una forma  
concisa.

3/2/2

304550000 Summary

Chapter Title: Carboxylic Acids--Manufacture

Number of Sections = 6 Tables = 2 Descriptors= 41

References = 25

Abstract:

The article covers general methods for the manufacture of carboxylic acids; it deals mainly with the recovery and purification of the carboxylic acids found in natural sources, ie,vegetable,animal and marine life. Many...

Section Headings:

Saponification of Natural Fats	<SELECT SN=30455S2>
Glycerol Recovery	<SELECT SN=30455S3>
Crystallization	<SELECT SN=30455S4>
Hydrogenation	<SELECT SN=30455S5>
Distillation	<SELECT SN=30455S6>

Tables:

Table 3. Average Fatty Acid Composition and Constants of Fats and Oils	<SELECT TN=30455T1>
--	---------------------

?select sn=30455S2

S4 1 SN=30455S2 (SAPONIFICATION OF NATURAL FATS)

?t s4/5/1

4/5/1

304551001 Text

Chapter Title: Carboxylic Acids--Manufacture

Section Heading: Saponification of Natural Fats

Text:

The first step in the manufacture of fatty acids from natural fats and oils, is the saponification or hydrolysis of the triglyceride shown by the following reaction: where R has various amounts of unsaturation. Many low-grade fats and oils require prior treatment with H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> or H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> for removal of impurities (2-3) (see Fats and fatty oils).

\*ILLUSTRATION NOT AVAILABLE ONLINE\*

Saponification of a fat is stepwise, ie, removal of one acid group forms a diglyceride, another acid removal leaves a monoglyceride, and finally free glycerol is produced as shown above (4-5). \*\*\* MUCHOS TEXTOS ELIMINADOS \*\*\*

?select tn=30455T1

S5 2 TN= 30455T1 (CARBOXYLIC ACIDS--MANUFACTURE)

t s5/5/1

5/5/1

3092282003 Table

Chapter Title: Fats and Fatty Oils

Table: Table 3. Properties and Composition of Commercially Significant Fats.

ESTE TEXTO NO DEBE  
SER DE LA BIBLIOTECA

Table Data:

Fat	Iodine value	Saponification value	Fatty acid composition wt% 12:0	Fat.ac comp. wt%14:0
<b>Vegetable</b>				
coconut	7.5-12	250-264	44-51	13-18.5
corn	116-140	188-198		
olive	76-90	186-196		1.3
palm	35-61	195-205		0.6-2.4
peanut	84-102	188-195		0.5
<b>Animal</b>				
butter	25-38	218-235	3	10
lard	53-77	190-202		0.9-2.1
tallow	35-48	193-202		3-6
<b>Marine</b>				
whale	110-130	183-198		4-8
herring	120-160	192		3-8
sardine	160-190	191		8

?select bromine/ti

S6 116 BROMINE/TI

?s s6/sum

S7 4 S6/SUM

?t s7/ti/all

7/TI/1

Chapter Title: BROMINE

7/TI/2

Chapter Title: BROMINE COMPOUNDS

7/TI/3

Chapter Title: Bromine

7/TI/4

Chapter Title: Bromine Compounds

?t s7/2/1

7/2/1

404290000 Summary

Chapter CH=40429

Type TY=404290

Unit UN=404290000

Chapter Title: BROMINE  
Author: JACKISCH PHILIP F.  
Institution: Ethyl Corporation  
Source: Encyclopedia of Chemical Technology, 4th Edition, Volume 4,  
Pages 536-560  
Number of Sections = 25    Tables = 5    Descriptors= 81    References =  
70

Abstract:

Bromine. Details of the atomic and molecular structure of bromine are given along with physical properties and solubility data for various solvents. Chemical reactions with hydrogen and metals, other halides, nonmetals, in water, and organic compounds are described. Charge-transfer compounds are discussed. Bromine's occurrence and both the traditional and modern methods of manufacture are covered. Prices and production figures are given as are specifications and analytical methods. Health, safety, and handling problems, including the consequences of exposure, detection of bromine vapor, protective equipment, reactivity, spills and disposal procedures, materials of construction, and storage and transportation are outlined. Uses for bromine in flame retardants, agricultural chemicals, ethylene dibromide, completion drilling fluids, inorganic bromides, and water treatment chemicals are discussed as is the use of smaller amounts of bromine in making dyes, medicinals, sanitizers, and photographic chemicals. Vol. 4, pp. 536-560, 69 refs. to July 1991.

Section Headings:

Untitled <SELECT SN=40429S1>  
Physical Properties <SELECT SN=40429S2>  
Chemical Properties <SELECT SN=40429S3>  
Reaction with Hydrogen and Metals <SELECT SN=40429S4>  
Reaction with Other Halides <SELECT SN=40429S5>  
Reaction with Nonmetals <SELECT SN=40429S6>  
Reactions in Water <SELECT SN=40429S7>  
Reactions with Organic Compounds <SELECT SN=40429S8>

Tables:

Table 1. Physical Properties of Bromine\*\*a <SELECT TN=40429T1>  
Table 2. Aqueous Solubility of Bromine\*\*a <SELECT TN=40429T2>  
Table 4. Bromine Specification <SELECT TN=40429T4>  
?LOGOFF

\*\*\*\*VARIAS SECCIONES Y TABLAS FUERON ELIMINADAS\*\*\*\*

**CAPITULO III**

**BUSQUEDA SIMULTANEA Y PROPIEDADES FISICAS  
Y QUIMICAS**

## LECCION 11

### BUSQUEDA BASE DE DATOS MULTIPLE-ONE SEARCH

**OBJETIVOS:** Consultar grupos de base de datos de información química. Eliminar información redundante en la búsqueda. Limitar la búsqueda con claves de sufijos.

**CARATRÍSTICAS:** /TI,/ENG,/NPT,/PY,RD,FROM EACH

**ANTECEDENTES:** Las bases de datos en grupos se encuentran organizadas en categorías por materia en el DIALINDEX/OneSearch. La categoría CHEMLIT combina 14 bases de datos. Estas pueden buscarse con las técnicas usuales. Supongamos que necesitamos conocer toda la literatura no patentada de 1995 sobre el camptothecin.

#### LA BÚSQUEDA

Inicie la BD 398

Seleccione el nombre camptothecin.

Con **MAP SYRN TEMP** almacena todos los sinónimos y los números de registro del conjunto S1 durante una semana.

Inicie en OneSearch categoría CHEMLIT. Consulte el catálogo de la BD para escoger las bases de datos disponibles.

Esas son las bases de datos contenidas en la categoría CHEMLIT, la cual tiene una cobertura mucho mayor, que solo la BD 399. Consulte el catálogo de la base de datos y particularmente la hoja azul de cada BD para informarse.

Con el comando EXS (Execute Steps) invoca el último número de registro y los sinónimos guardados con el comando MAP.

() Esto es una abreviatura para (W)

El comando RD S1 elimina duplicados del conjunto 1. Esto puede tomar varios minutos. Algunas BD no permiten la eliminación de duplicados. Observe la reducción del número de artículos de los conjuntos 2722(S1) a 2006(S2).

/ENG limita al idioma inglés. /NPT limita las referencias que no sean patentes. /1995 limita al año de publicación 1995.

La búsqueda se reduce aun más al limitar los términos de búsqueda con en el título (ti).

Para imprimir los títulos de cada BD usa el comando **FROM EACH**. Observe que se imprimen las dos primeras referencias de cada BD que contiene registros.

Imprimimos la cita 1 del conjunto 6 (S6) con el formato 5. El registro indica que provino de Pascal (BD 144).

El formato 5 en la BD, 144 contiene un resumen. Este resumen nos da una idea sobre el contenido del texto y nos puede ayudar a decidir si necesitamos el artículo completo.

? *¿Cuántas categorías de DIALINDEX/OneSearch existen?. Puedo consultar temas diferentes tales como Noticias, Gobierno, Idioma, Gente, Escuelas y Software?.*

**Para más tarde:**

**Dialindex:** Consulte la categoría deseada ..Ver catálogo de base de datos.

**Campo no familiar:** Utilize DIALINDEX .....Ver lección 15

### TAREAS DE LA LECCIÓN 11

Para una búsqueda de literatura en grupos de BD se usa la categoría CHEMLIT, es una forma para ilustrar la gran cantidad de literatura química existente. CHEMLIT nos da acceso hasta 12 bases de datos además del Chemical Abstracts (Ca Search).

Es conveniente que los estudiantes busquen los nombres con (NA) de la lista que se muestra a continuación en el CHEMLIT, luego eliminar los duplicados (RD) se dan cuenta de la cantidad de referencias cruzadas que se presentan.

Después los estudiantes separarán las referencias que no son patentes. (/NPT), en el idioma Inglés (/ENG), y las del año actual (/1995). Cada uno de estos pasos sucesivos da al estudiante una idea de la cantidad de literatura química existente. Con la impresión (TYPE) y el comando "FROM EACH" podrán ver si hay información en el grupo de bases de datos. Imprima con el formato completo de cada base de datos que esté representada.

1. ----- Bephenium
2. ----- Quassin
3. ----- Clorox
4. ----- Ampicillin
5. ----- Bisanthrene
6. ----- Eptazocine
7. ----- Neosynephrine
8. ----- Tabun
9. ----- Ferric bromide
10. ----- Methocarbamol
11. ----- Pellotine
12. ----- Gliquidone
13. ----- Terazosin
14. ----- Teniposide
15. ----- Advil
16. ----- Cupric nitrate
17. ----- Bornyl chloride
18. ----- Vidarabine
19. ----- Daphnoline
20. ----- Amitriptyline

Fig.11.1  
CONSULTA DE LA LECCIÓN 11

?b 398

File 398:CHEMSEARCH(TM) 1957-1995/Aug

Set	Items	Description
-----	-------	-------------

--- -----

?S NA=CAMPTOTHECIN

S1	2	NA=CAMPTOTHECIN
----	---	-----------------

?MAP SYRN TEMP

1 Select Statement(s), 11 Search Term(s)

Serial#TB007

?B CHEMLIT

SYSTEM:OS - DIALOG OneSearch

File 2:INSPEC 1969-1995/Sep W1

File 8:EI Compendex\*Plus(TM) 1970-1995/Oct W4

File 32:METADDEX(R) 1966-1995/Oct B2

File 33:Aluminium Industry Abs. 1968-1995/Sep

File 144:Pascal 1973-1995/Aug

File 302:Kirk-Othmer Online 1995/Ed4,Vol9

File 304:The Merck Index Online(SM) 1995/S1

File 305:Analytical Abstracts Online 1980-1995/Sep

File 315:ChemEng & Biotec Abs 1970-1995/Jul

File 317:Chemical Safety Newsbase 1981-1995/Sep

File 322:Polymer Online

File 323:RAPRA Abstracts 1972-1995/Sep B1

File 399:CA SEARCH(R) 1967-1995/UD=12311

File 434:SciSearch(R) 1974-1995/Aug W3

Set	Items	Description
-----	-------	-------------

--- -----

?exs

Executing TB007

3552688S

2481	CAMPTOTHECIN
------	--------------

142	S(W)CAMPTOTHECIN
-----	------------------

2481	CAMPTOTHECIN
------	--------------

6093260	D
---------	---

2481	CAMPTOTHECIN
------	--------------

7	D(W)CAMPTOTHECIN
---	------------------

46265 DL  
 2481 CAMPTOTHECIN  
 28 DL(W) CAMPTOTHECIN  
 5166 NSC  
 11 94600  
 3 NSC(W) 94600  
 2114684 20  
 26225 RS  
 2481 CAMPTOTHECIN  
 14 20(W) RS(W) CAMPTOTHECIN  
 2114684 20  
 3552688 S  
 2481 CAMPTOTHECIN  
 126 20(W) S(W) CAMPTOTHECIN  
 2114684 20  
 3552688 S  
 495 CAMPTOTHECINE  
 1 20(W) S(W) CAMPTOTHECINE  
 0 RN=30628-51-4  
 44 RN=31456-25-4  
 666 RN=7689-03-4  
 S1 2722 S() CAMPTOTHECIN + CAMPTOTHECIN  
 +D() CAMPTOTHECIN +DL() CAMPTOTHECIN  
 +NSC() 94600 + 20() RS() CAMPTOTHECIN  
 +20() S() CAMPTOTHECIN + 20() CAMPTOTHECINE  
 +RN=30628-51-4 + RN=31456-25-4 + RN=7689-03-4

?rd s1

S2 2006 RD S1 (unique items)

s s2/eng

S3 1715 S2/ENG

?s s3/npt

S4 1658 S3/NPT

?s s4/1995

1653 S4

1576591 PY=1995

S5 169 S4/1995

?s s5/ti

S6 66 S5/TI

?t s6/ti/1-2 from each

6/TI/1 (Item 1 from file: 125)

LACTONE STABLE FORMULATION OF 10-HYDROXY 7-ETHYL CAMPTOTHECIN AND METHODS FOR USES THEREOF

6/TI/2 (Item 2 from file: 125)

CAMPTOTHECIN ANALOGUES

6/TI/3 (Item 1 from file: 144)

Topoisomerase I-related parameters and camptothecin activity in the colon carcinoma cell lines from the national cancer institute anticancer screen

6/TI/13 (Item 1 from file: 144)

Translated Title: Fluorescence spectroscopy studies of camptothecin interactions with topoisomerase I

6/TI/19 (Item 1 from file: 348)

PROCESS FOR THE PREPARATION OF 9-AMINO CAMPTOTHECIN.

6/TI/20 (Item 2 from file: 348)

METHODS AND INTERMEDIATES FOR THE ASYMMETRIC SYNTHESIS OF CAMPTOTHECIN AND CAMPTOTHECIN ANALOGS.

6/TI/22 (Item 1 from file: 351)

10-hydroxy-7-ethyl- camptothecin lactone formulation - provides water soluble weakly acidic soln. suitable for admin. is more active than parent drug use in cancer inhibition

6/TI/23 (Item 1 from file: 351)

Inhibition of .beta.-glucuronidase by natural glucuronidase of Kampo medicines using glucuronide of SN-38(7-ethyl-10-hydroxycamptothecin) as a substrate

7t s6/5/1

6/5/1 (Item 1 from file: 125)

2641133 PASCAL No.:95-0522186

C/LACTONE STABLE FORMULATION OF 10-HYDROXY 7-ETHYL CAMPTOTHECIN  
AND METHODS FOR USES THEREOF

Document Type: UTILITY

Inventors: Haridas Kochat (US); Hausheer Frederick H (US)

Assignee: Bionumerik Pharmaceuticals Inc

	Patent Number	Issue Date	Applic Number	Applic Date
	-----	-----	-----	-----
Patent:	US 5447936	950905	US 172620	931222
Priority Applic:			US 172620	931222

Abstract:

10-hydroxy 7-ethyl camptothecin (HECPT), an active metabolite of the camptothecin analog CPT-11, is poorly soluble in water. Because of its poor water solubility, HECPT has not been directly administered by parenteral or oral routes in human patients for the purpose of inhibiting the growth of cancer cells. There is also unpredictable interpatient variability in the metabolic production of HECPT from CPT-11 which limits the utility of CPT11. This invention overcomes these limitations by teaching novel pharmaceutically acceptable lactone stable HECPT formulations for the direct administration of HECPT. The claimed invention also describes novel dosages, schedules, and routes of administration of the lactone stable HECPT formulations to patients with various forms of cancer.

Exemplary Claim:

1. A 10-hydroxy 7-ethyl camptothecin solution consisting essentially of 10-hydroxy 7-ethyl camptothecin dissolved in dimethylacetamide and a pharmaceutically acceptable acid wherein said acid is an organic carboxylic acid selected from the group consisting of citric acid, and taurocholic acid in an admixture with citric acid.

Class: 514283000

IPC: A61K-031/475

## LECCION 12

### BUSQUEDA DE PROPIEDADES FISICAS CON EL BEILSTEIN EN LINEA

**OBJETIVOS:** Buscar información química (identidad del nombre, información de reacción y de síntesis), utilizando datos físicos conocidos.

**CARACTERÍSTICAS:** BP=, BPP=, TEMP=, RI=, DN=, Formatos definidos por el usuario /DN,/SP,/RI,/PR.

**ANTECEDENTES:** La mayoría de los químicos orgánicos se enfrentan al problema de obtener información química, retrospectiva a partir de datos obtenidos en el laboratorio. Beilstein Online es la colección de datos sobre compuestos orgánicos más extensa del mundo. Los datos incluyen la configuración, ocurrencia natural y aislamiento, preparación y datos estructurales, termodinámica, de reacciones y físicos. Supongamos que tenemos los siguientes datos de un compuesto: punto de ebullición 127 +/- 1°C a 760 +/- 1 torr, índice de refracción 1.46 +/- 0.01 a 25 1°C, densidad 1.65 +/- 0.01 g/ml (temperatura desconocida). ¿Cuál es la identidad probable de este compuesto?

#### LA BÚSQUEDA

Inicie la BD 390.

Seleccione el intervalo del punto de ebullición (BP), y júntelo con (S) al intervalo de presión del punto de ebullición(BPP).

Seleccione el intervalo de la densidad (DN=). No nos da la temperatura.

Seleccione el intervalo del índice de refracción y únalo (S) con el intervalo de temperatura.

Ahora una los tres conjuntos con el comando lógico AND.

Imprima (TYPE) el registro del conjunto (s4) en el formato 2. Este formato muestra los detalles del registro completo en una forma concisa. También da una lista de formatos definidos de uso (UDF) que puede usarse para recuperar datos específicos.

La 1a. columna indica el número de referencias con un tipo particular de datos y las referencias asociadas.

La 2a. columna indica el número de referencias que no tiene datos pero tiene alguna referencia para el tipo de dato.

La 3a. columna enlista los UDF importantes. Por ejemplo, al imprimir S4/CR/1 se recuperarían las 41 reacciones químicas asociadas con este registro.

Veamos algunos de estos UDF. Imprima (type) densidad (/DN).

Esto muestra los datos y la referencia original.

Imprima el dato de espectro (/SP).

Imprima (type) los datos de índices de refracción.

Aquí hay otra forma de ver cómo se presenta un compuesto desglosado. Ahora imprima la preparación de los datos (/PR). Observe la referencia original (en este caso nos da patente alemana).

**?** *¿Si terminó con una sola referencia como en el primer ejemplo, significa que ha identificado el compuesto?.*

#### **Para más tarde:**

**Más pruebas:** Beilstein Online tiene mucho más campos de datos. Para una identificación completa probablemente sea necesario el peso molecular, un análisis elemental y el dato NMR. Beilstein Online tiene campos de datos para todo lo anterior y referencias al trabajo original donde se pueden comparar.....Consultar la Hoja Azul (Blusheet).

## TAREAS DE LA LECCIÓN 12

Una buena combinación es practicar esta lección al mismo tiempo que se hacen un análisis cualitativo de un curso de química orgánica. Si no es posible, es conveniente usar las sugerencias que se dan adelante en la BD 390. Los estudiantes necesitan conocer los siguientes campos adicionales:

VP= (presión de vapor), VPT= (temperatura de la presión de vapor) , ST (Tensión superficial), MF= (Formula molecular), MW= (Peso molecular), NE= (Numero de elementos), SUB= (Punto de sublimación), SUBPRES= (presión de sublimación), y CH= (Carga). Estos y muchos otros campos pueden encontrarse en forma detallada en la hoja azul (Bluesheet).

- 1.---- Encuentre componentes que hiervan entre 120-130°C a de 759-760 mm de Hg y tenga una densidad de 1.1-1.2 g.ml<sup>-1</sup>
- 2.---- ¿Cuántos compuestos hiervan a 210-211°C a 20-25 mmHg?
- 3.---- Encuentre sustancias que sublimen a 88-90°C y 758-760
- 4.---- Encuentre sustancias que se fundan a 100-110°C y tengan una densidad de 2.00-2.01 g.ml<sup>-1</sup>
- 5.---- ¿Qué sustancias tienen la formula molecular C9H12N2S.
- 6.---- ¿Cuántas sustancias tienen el peso molecular de 293.2 g.mole<sup>-1</sup>?
- 7.---- ¿Cuántas sustancias tienen el punto de ebullición normal al de 23-25°C?
- 8.---- Encuentre las sustancias de carga 4.
- 9.---- Encuentre sustancias de carga 2 que se fundan entre 50-60°C.
- 10.--- ¿Cuántas sustancias están compuestas de 5 elementos?.
- 11.--- ¿Ahora mencione 5 elementos con carga 3?
- 12.--- Encuentre sustancias que se fundan y hiervan (en condiciones normales) igual que el agua.
- 13.--- Encuentre los compuestos que tengan la fórmula molecular C9H12N2S y se fundan entre 80-85°C.
- 14.--- Encuentre la sustancia con el índice de refracción de 1.345-1.346 cuando es medido a 24-26°C.
- 15.--- ¿Cuántas sustancias tienen un peso molecular de 60-62 g.mole<sup>-1</sup> con punto de ebullición de rango 100-101 °C?.

- 16.--- ¿Cuántos compuestos tienen 10 elementos 9?8?7?6?5?.
- 17.--- Localice sustancias que tengan la presión de vapor de 800-801 mm de Hg a 25-26°C.
- 18.--- Encuentre sustancias con una tensión superficial de 26-27 g.s<sup>2</sup> y un punto de ebullición de rango 110-112°C.
- 19.--- Localice los componentes con peso molecular de 120-121 g.mole<sup>-1</sup> y que funda en el rango de 93-94°C.
- 20.--- Encuentre sustancias con punto de ebullición de 110-112°C y 20-25 mm de Hg y punto de fusión 100-105°C.

**CONSULTA DE LA LECCIÓN 12**

**Fig.12.1**

**?b390**

File 390:Beilstein Online 6,546,266 subs (c) 1995 Beilstein  
 Set Items Description  
 --- ---- -

Nos puede dar un simple valor para BP=, y BPP= pero un rango es más representativo y real " datos de laboratorio" y es más probable de localizar un compuesto actual

**?s bp=126:128(s)bpp=759:761**

31307	BP=126	BP=128
19656	BPP=759	BPP=761
S1 534	BP=126:128(S)	BPP=759:761

**?s dn=1.64:1.66**

S2	589	DN=1.64:1.66
----	-----	--------------

**?s ri=1.45:1.46(s)temp=24:26**

31634	RI=1.45	RI=1.46
327394	TEMP=24	TEMP=26
S3 6690	RI=1.45:1.46(S)	TEMP=24:26

**?s s1 and s2 and s3**

534	S1
589	S2
6690	S3
S4 1	S1 AND S2 AND S3

?t 84/2/1

4/2/1

970225

chlorocarbonic acid trichloromethyl ester

German Chem. Name: Chlorokohlensaure-trichlormethylester

Synonym: Perstoff

Diphosgen

Superpalit

Perchlormethylformiat

trichloromethyl chloroformate

Chlorameisensaure-trichlormethylester

Kohlensaure-chlorid-trichlormethylester

carbonochloridic acid, trichloromethyl ester

CAS RN: 503-38-8, 503-38-8\*

Molecular Formula: C2Cl4O2

Component Type: acyclic

Number of components: 1

Total No. of Rings: 0

Component data

Mol. Formula: C2Cl4O2; Mol. Weight: 197.83; Lawson No: 1763, 1762;

Data Present:

<u>Data</u>	<u>Ref</u>		<u>Data Type</u>
<u>+Ref</u>	<u>Only</u>	<u>UDF</u>	
		1	SD Constitutional Data
		1	.Related Structure
12	1	PR	Preparative Data
12	1		.Preparation
41			CR Chemical Reactions
32	5	PP	Physical Properties
3	1	SE	.Structure & Energy Parameters
		1	..Conformation
3			..Dipole Moment
29	4		.Physical Properties of Pure Compound
16		PS	..Physical State
16		PL	...Liquids
16		BP	....Boiling Point
5		PM	..Other Physical & Mechanical Properties
4		DN	...Density
1			...Surface Tension

1 TP ..Transport Phenomena  
 1     ...Viscosity  
 1     ....Dynamic  
 5 OP ..Optics  
 5 RI ...Refractive Index  
 2 4 SP ..Spectra  
 1 3 VI ...Vibrational Spectra  
 1 IR ....IR Spectrum  
 1 IR ....IR Bands  
    2     ....Raman Spectrum  
 1 1 ES ...Electronic Spectra  
 1 1     ....UV/VIS Spectrum

?t s4/dn/1

4/DN/1

Other Physical & Mechanical Properties

Density: 1 .6413 g/cm\*\*3; Ref Temp: 4 C; Measurement Temp: 20 C; (Ref. 14)

Density: 1 .644 g/cm\*\*3; Measurement Temp: 15 C; (Comment: g/cm\*\*3) (Ref. 20, handbook)

Density: 1 .6525 g/cm\*\*3; Measurement Temp: 14 C; (Comment: g/cm\*\*3) (Ref. 9, handbook)

Density: 1 .653 g/cm\*\*3; Measurement Temp: 15 C; (Comment: g/cm\*\*3) (Ref. 2, handbook)

Refs.

2, Kling, Florentin, Lassieur, Schmutz, COREAF, C. R. Hebd. Seances Acad.Sci., 169 (1919),1047, ANCPAC, Ann.Chim.(Paris), (9)13 (1920),52

9, Hentschel, JPCEAO, J.Prakt.Chem., (2)36 (1887),100

14, Laato, SUKBAJ, Suom.Kemistil.B, 41(1968)347

20, Grignard, Rivat, Urbain, COREAF, C.R.Hebd.Seances Acad.Sci., 169 (1919),1145, ANCPAC, Ann.Chim.(Paris), (9)13 (1920),251

?t s4/sp/1

4/SP/1

Vibrational Spectra

IR Spectrum

(Ref. 14)

Refs.

14, Laato, SUKBAJ, Suom.Kemistil.B, 41(1968)347

IR Bands

Wavenumber: 1900 - 900 cm<sup>-1</sup>; (Ref. 21, handbook)  
Refs.

- 21, Hales, et al, JCSOA9, J.Chem.Soc., 1957 618,620  
Raman-spectrum: (Ref. 22, handbook), (Ref. 23,  
handbook) Refs.  
22, Kohlrausch, Sabathy, MOCMB7, Monatsh.Chem., 72 (1939)  
307  
23, Joglekar, Phil.Mag., (7)24(1937)408 Electronic  
Spectra UV/VIS Spectrum  
Solvent: hexane; (Ref. 24, handbook)  
(Comment: Spektrum des Dampfes.) (Ref. 25, handbook)  
Refs.  
24, Mohler, Polya, HCACAV, Helv.Chim.Acta, 19 (1936)  
285,1236  
25, Imanishi, Kanda, JSRTAT, J.Sci.Res.Inst.Tokyo,  
43(1948/49)213, CA (1949)8885

?t s4/ri/1

4/RI/1

#### Optical Properties

- Refractive Index: 1 .456; Wavelength: 589 nm; Temp: 25 C; (Ref.  
16)  
Refractive Index: 1 .456; Wavelength: 589 nm; Temp: 25 C; (Ref.  
15)  
Refractive Index: 1 .456; Wavelength: 589 nm; Temp: 26 C; (Ref.  
12, handbook)  
Refractive Index: 1.4566; Wavelength: 589 nm; Temp: 22 C; (Ref.  
20, handbook)  
Refractive Index: 1.4584; Wavelength: 589 nm; Temp: 20 C; (Ref.  
14

#### Refs.

- 12, Hood, Murdock, JPCHAX, J.Phys.Chem., 23 (1919),509  
14, Laato, SUKBAJ, Suom.Kemistil.B, 41(1968)347  
15, Bredikhin, A. A., Kirillovich, V. A., Safin, I. A.,  
Vereshchagin, A. N., BACCAT, Bull.Acad.Sci.USSR Div. Chem. Sci.  
(Engl.Transl.), 40 2.2(1991)355-359, IASKA6, Izv. Akad. Nauk SSSR  
Ser.Khim.,

?t s4/pr/1

4/PR/1

Preparative Data

Preparation

Starting Material: BN=1734623, methyl formate

Other Conditions: bei der Chlorierung im UV-Licht; die  
Bildungsgeschwindigkeit waechst mit steigender Temperatur bis  
110-112grad (Ref. 2, handbook), (Ref. 3, handbook)

Preparation

Starting Material: BN=1734623, methyl formate

Reagent: chlorine

Other Conditions: im Licht einer Metallfadenlampe  
(Ref.4, handbook)

Preparation

Starting Material: BN=1734623, methyl formate

Reagent: diacetyl peroxide, chlorine

Temp: 60 C

Other Conditions: unter Ausschluss von Licht (Ref. 5, handbook)

Preparation

Starting Material: BN=1734623, methyl formate

Other Conditions: durch photochemische Chlorierung (Ref.  
6, handbook)

Preparation

Starting Material: BN=1734623, formic acid methyl ester

Other Conditions: beim Chlorieren im Sonnenlicht (Ref.  
7, handbook), (Ref. 8, handbook)

?logoff

## LECCIÓN 13

### BUSQUEDA DE PROPIEDADES FISICAS Y QUIMICAS

**OBJETIVOS:** Buscar datos Físicos y Químicos.

**CARACTERISTICAS:** Base de datos químico Chapman and Hall (BD 303), Merck Index Online<sup>SM</sup> (BD 304), Pesticide Fact File (BD 306).

**ANTECEDENTES:** Los químicos necesitan información de datos físicos y químicos, tales como punto de fusión, punto de ebullición, índice de refracción, derivados, información espectral y toxicidad. Las Bases de Datos 303, 304 y 306 ofrecen datos y referencias del trabajo original. Ofrecen la ventaja de una recuperación baja para un nombre químico dado, o el compuesto base. Vamos a comparar la información proveniente del Chapman and Hall con la del Merck Index Online<sup>SM</sup> para el producto taxol. Después, veremos los datos de toxicidad para el pesticida diazinon en el Manual de Agroquímicos.

#### LA BÚSQUEDA

Inicie la BD 303.

Escoja (SELECT) (NA) y el término. Ya que es una base de datos no-bibliográfica, esperamos un número pequeño de citas.

Imprima (TYPE) en formato completo para ver toda la información disponible.

Nombres  
Número de Registro  
Fórmula  
Peso Molecular  
Estructura disponible  
Toxicidad  
Fuente  
Uso  
Datos

Referencias

Iniciar la BD 304.

Seleccione taxol como antes.

Número de Registro.

Fórmula

Peso Molecular

Composición en %

Nombre en el Chemical Abstracts

Sinónimos

Referencias

Información de Patentes

Datos

Usos

Iniciar la BD 306

Seleccione el término Diazinon

Imprima el conjunto S1 en el formato 5.

Nombre

Actividad

Número de Registro

Fórmula

Peso Molecular

Nombres

Fabricantes

Datos

Referencias de análisis

Modo de actuar

Usos

Información Miscelánea

Toxicidad

Información Miscelánea.

? Estas bases de datos tuvieron poca información sobre química analítica: ¿Existe una base de datos mejor para citas analíticas? La BD 306 da los nombres de los fabricantes pero no ofrece detalles. ¿Existe una fuente mejor para empresas fabricantes y proveedores?

#### **Para más tarde:**

BD 305 Analytical Abstracts (File 305) se dedica a toda la química analítica . . . . . Ver lección 14.

### **TAREAS DE LA LECCIÓN 13**

Este ejercicio parece más fácil de lo que es. Parece sencillo introducir un nombre químico en tres diferentes bases de datos (BD 303,304,306) y obtener la información de cada uno. Pero ¿Qué pasa si aparecen 30 referencias? ¿Qué pasa si no hay ninguna?. Los estudiantes deben recordar algunas herramientas de búsqueda tales como NA=, CN=, SY= y /FF para reducir una recuperación grande de nombres químicos que son fragmentos de otros nombres químicos. Deben consultar las hojas azules para ver cómo están organizadas las tres BD y qué campos consultar (abajo se ve un ejemplo de búsqueda editada). Necesitan recordar que usualmente la última referencia es el compuesto principal. Las sustancias de la lista siguiente se encuentran al menos dos de las tres BD. Algunas tendrán muchas referencias de donde escoger la sustancia deseada.

Los estudiantes deben encontrar el compuesto en al menos una de las tres BD. Imprima (t) los resultados en el formato 5 y revíselos.

Las tareas podrían ser mucho más específicas. Por ejemplo " Quién fué el primero que aisló...", "Cuál es el punto de fusión de ...", "Cuál es la LD50 en ratas para..." todas son preguntas razonables que pueden ser contestadas en estas bases de datos. Para tareas como éstas el instructor debe verificar que halla respuestas a las preguntas dadas.

1. ----- Cyclohexane
2. ----- Ethylbenzene
3. ----- Glyceraldehyde
4. ----- Bromine
5. ----- Inositol
6. ----- Meprobamate
7. ----- Mercaptoethano
8. ----- 12,4-D
9. ----- Neodymium
10. ----- Nitrocellulose
11. ----- Parathion
12. ----- DDT
13. ----- Lindene
14. ----- Methoxychlor
15. ----- Dieldrin
16. ----- Mevinphos
17. ----- Carbaryl
18. ----- Baygon
19. ----- Malathion
20. ----- Aldrin

Fig.13.1  
CONSULTA EJEMPLO DE LA LECCION 9

?b 303

File 303:Chapman & Hall Chemical Database 1995/Aug

Set Items Description

--- -----

?s na= taxol

Consultando la Hoja Azul (Online [bluesheets](#) Status; CHCD 303) el comando na= nos aproxima más al término taxol con sólo tres referencias

S1 3 NA= TAXOL

?t s1/5/1

1/5/1

Subfile: Dictionary of Organic Compounds, 5th Edn., Suppl. 2, 1984

CHCD NAME: Taxol

Synonyms: NSC 125973; Taxol A; Paclitaxel

CAS Registry No: 33069-62-4

Molecular Formula: C<sub>47</sub>H<sub>51</sub>N<sub>0</sub>O<sub>14</sub>

Molecular Wt: 853.918

Structure: Available for display or see printed work.

Compound Type: KA1950; Natural Products - Taxane diterpenoids;

Natural Products - Miscellaneous diterpene alkaloids

Hazard: Toxic LD50 (mus, ipr) 128 mg/kg. LD50 (mus, ivn) 12 mg/kg

Source: Isol. from the stem bark of *Taxus brevifolia* and *Taxus cuspidata* (Taxaceae)

Use/Importance: Antileukaemic and antitumour agent, esp. against melanoma and ovarian tumours. Use limited by low solubility and scarce availability of *T. brevifolia* bark. Biochemical tool extensively used to study cellular shape and function. Also shown to be active against oomycete fungi

Physical State: Needles (MeOH aq.)

Miscellaneous: Taxol is a registered tradename (Bristol-Myers-Squibb)

Optical Rotation: -49 deg at 20 degC (MeOH) wavelength Na line

Melting Pt: Mp 213-216 deg C

DERIVATIVE: Taxol\form\10-De-Ac

Synonyms: 10-Deacetyltaxol

Compound Type: Natural Products - Taxane diterpenoids;

Natural Products -

Source: Constit. of *Taxomyces wallichiana* (Taxaceae)

Physical State: Amorph. powder

Molecular Formula: C45H49NO13

Molecular Wt: 811.881

References:

- 01 Wani MS et al., J.A.C.S. 1971 93 2325 (isol, nmr, ms, ir, uv)
- 02 McLaughlin JL et al., J. Nat. Prod. 1981 44 312  
(Cephalomannine, Deacetylcephalomannine)
- 03 Miller RW et al., J.O.C. 1981 46 1469 (Cephalomannine)
- 04 Blechert VSS et al., J. Nat. Prod. 1984 47 131 (xylosides)
- 05 Suffness M et al., Alkaloids (N.Y.) 1985 25 10 (rev, pharmacol)
- 06 Horwitz SB et al., Ann. N.Y. Acad. Sci. 1986 466 733  
(rev, pharmacol)
- 07 Huang CHO et al., J. Nat. Prod. 1986 49 665 (isol, deriv)  
(synth)

\*\*\* ALGUNAS REFERENCIAS FUERON ELIMINADAS\*\*\*

?b304

File 304:The Merck Index Online(SM) 1995/S1

Set	Items	Description
-----	-------	-------------

---	-----	-----
-----	-------	-------

?s taxol

S1	2	taxol
----	---	-------

?t s1/5/1-2

Por el término de taxol se eligió el conjunto 2 eliminando - el primero que contenía el registro 10220 Docetaxel.

1/5/2

DIALOG(R) File 304:The Merck Index Online(SM)

09049 Monograph Name: Paclitaxel

CAS REGISTRY NUMBER: 33069-62-4

MOLECULAR FORMULA: C47H51NO14

MOLECULAR WEIGHT: 853.92

MOLECULAR COMPOSITION: C 66.11%, H 6.02%, N 1.64%, O 26.23%

C.A.CHEMICAL NAME(s): (2aR-(2a.alpha.,4.beta.,4a.beta.

,6.beta.,9.alpha.(.alpha.R\*,.beta.\*),11.alpha.,12.alpha.,12a.alpha.

,12b.alpha.) )-.beta.-(Benzoylamino)-.alpha.-

hydroxybenzenepropanoic acid 6,12b-bis(a cetyloxy)-12-

(benzoyloxy)-2a,3,4,4a,5,6,9,10,11,12,12a,12b-dodecahydro-4,11-dihydroxy-4a,8,13,13-tetramethyl-5-oxo-7,11-methano-1H-cyclodeca(3,4)b enz(1,2-b)oxet-9-yl ester

SYNONYMS:

5.beta. ,20-epoxy-1,2.alpha.,4,7.beta. ,10.beta. ,13.alpha.-hexahydroxytax -11-en-9-one 4,10-diacetate 2-benzoate 13-ester with (2R,3S)-N-benzoyl-3-phenylisoserine; taxol A

DRUG CODES: NSC-125973

LITERATURE REFERENCES:

Antileukemic and antitumor agent first isolated, as the 1-form, from the bark of the Pacific yew tree, *Taxus brevifolia*, Taxaceae; promotes the assembly of microtubules and inhibits the tubulin disassembly process. Isoln and structure: M. C. Wani et al., J. Am. Chem. Soc. 93, 2325 (1971). In vitro promotion of microtubule assembly: P. B. Schiff et al., Nature 277, 665 (1979). Isoln from *Taxus baccata* L. and in vitro inhibition of depolymerization of microtubules into tubulin: G. Chauviere et al., C.R.

Acad. Sci. Paris Ser. II 293, 501 (1981). Total synthesis of taxusin, which contains the entire ring skeleton: R. A. Holton et al., J. Am. Chem. Soc. 110, 6558 (1988). Total stereosynthesis: R. A. Holton et al., ibid. 116, 1597, 1599 (1994); K. C. Nicolaou et al., Nature 367, 630 (1994).

Synthesis and anticancer activity of derivs: D. G. I. Kingston et al., Studies in Organic Chemistry vol. 26, entitled "New Trends in Natural Products Chemistry 1986", Atta-ur-Rahman, P. W. Le Quesne, Eds. (Elsevier, Amsterdam, 1986) pp 219-235. Production by *Taxomyces andreanae*, an

endophytic fungus associated with *T. brevifolia*: A. Stierle et al., Science 260, 214 (1993). Use in study of structure and function of microtubules: S. B. Horwitz et al., Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol. 46, 219 (1982). Review of mechanism of action: J. J. Manfredi, S. B. Horwitz, pharmacol. Ther. 25, 83-125 (1984); S. B. Horwitz et al., Ann. N.Y. Acad. Sci. 466, 733-744 (1986); S. B. Horwitz, Trends Pharmacol. Sci. 13, 134-136 (1992). Symposium on clinical toxicology, pharmacology and efficacy: Sem. Oncol. 20, Suppl. 3, 1-60 (1993). Review in ovarian cancer: C. D. Runowicz et al., Cancer 71, 1591-1596 (1993).

PATENT INFORMATION

EP 253739

PHYSICAL DATA:

Needles from aq methanol, mp 213-216 degrees (dec).

(.alpha.)D20 -49 degrees (methanol). uv max (methanol): 227, 273 nm  
(.epsilon. 29800, 1700).

PHYSICAL DATA:

MELTING POINT: 213-216 degrees (dec)

OPTICAL ROTATION: (.alpha. D): -49 degrees (methanol)

UV MAX: uv max (methanol): 227, 273 nm (.epsilon. 29800, 1700)

USE: Tool in study of structure and function of microtubules.

THERAPEUTIC CATEGORY: Antineoplastic.

REFERENCE KEYS PRESENT: Activity; In Vitro; Isoln; Pharmacology;  
Review;

?b306

File 306:Agrochemicals Handbook 1994/Jan S1

Set	Items	Description
-----	-------	-------------

---	-----	-----
-----	-------	-------

?s diazinon

S1	1	DIAZINON
----	---	----------

?t s1/5/1

1/5/1

000088

Common TAH Name: DIAZINON(BSI, ISO, ANSI, JMAF, ESA, BAN) ACTIVITY:

Insecticide; Acaricide

CAS REGISTRY NUMBER: 333-41-5

MOLECULAR FORMULA: C12H21N2O3PS

MOLECULAR WEIGHT: 304.35

CHEMICAL NAMES: O,O-diethyl O-2-isopropyl-6-methylpyrimidin-4-

yl phosphorothioate (IUPAC) O,O-diethyl O-(6-methyl-2-(1-  
methylethyl)-4-pyrimidinyl) phosphorothioate (CA) O,O-diethyl O-(2-  
isopropyl-6-methyl-4-pyrimidinyl) phosphorothioate

OTHER NAMES:

OMS 469

ENT 19507

TRADE NAME(S): Basudin; D-Z-N; Dazzel; Diazitol; Diazol; Disonex;

G 24480; Gardentox; Kayazinon; Kayazol; Knox-out; Neocidol;

Nipsan; Nucidol; Spectracide

MANUFACTURER: All-India Medical; Atochem; Ciba; Drexel;

Makhteshim-Agan; Nippon Kayaku; Elf Atochem; Wacker

PHYSICAL STATE: Clear colourless oil (technical 95%: yellow oil).

BOILING POINT: 83-84 DegC at 0.002 mm Hg; 125 Deg C at 1 mm Hg.

VAPOR PRESSURE: 0.097 mPa at 20 Deg C.

RELATIVE DENSITY: 1.116-1.118 at 20 Deg C.

REFRACTIVE INDEX: nD20 1.4978-1.4981.

SOLUBILITY: In water at 20 Deg C, 40 mg/l. Completely miscible with common organic solvents, e.g. ethers, alcohols, benzene, toluene, hexane, cyclohexane, dichloromethane, acetone, petroleum oils.

CORROSIVENESS: Non-corrosive.

STABILITY: Susceptible to oxidation above 100 Deg C. Stable in neutral media, but slowly hydrolyzed in alkaline media, and more rapidly in acidic media. Decomposes above 120 Deg C.

ANALYSIS OF PRODUCTS: By GLC with TCD (CIPAC Handbook 1980, 1A, 1199-1203; D. O. Eberle J. Assoc. Off. Anal. Chem. 1974, 57, 48; Anal. Methods Pestic. Plant Growth Regul. 1972, 6, 345).

ANALYSIS OF RESIDUES: By GLC with TID or MCD (Analyst (London) 1980, 105, 515; Anal. Methods Pestic. Plant Growth Regul. 1972, 6, 345-349; D. O. Eberle and D. Novak J. Assoc. Off. Anal. Chem. 1969, 52, 1067). See also D. O. Eberle (Residue Rev. 1974, 51, 1).

MODE OF ACTION: Non-systemic insecticide and acaricide with contact, stomach, and respiratory action. Cholinesterase inhibitor.

USES: Control of sucking and chewing insects and mites on a very wide range of crops, including deciduous fruit trees, citrus fruit, vines, olives, bananas, pineapples, vegetables, potatoes, beet, sugar cane, coffee, cocoa, tea, tobacco, maize, sorghum, lucerne, flax, cotton, rice, ornamentals, glasshouse crops, forestry, etc.; soil insects (by soil application); phorid and sciarid flies in mushroom cultivation; flies, lice, mites, fleas, cockroaches, bedbugs, ants, and other insect pests in animal houses and

household use. Seed treatment for maize, for control of frit flies and also conferring bird-repellent properties. Also used as a veterinary ectoparasiticide.

CROP TOLERANCE: Non-phytotoxic when used as directed. Russetting may occur on green and yellow apple varieties.

FORMULATIONS: Granules; Wettable powder; Emulsifiable concentrate; Dustable powder; Dry seed treatment; Aerosol; Smoke tablet; Capsule suspension; Coating agent; Microcapsule suspension; Cold fogging concentrate

COMPATABILITY WITH OTHER PRODUCTS: Compatible with many other pesticides, but incompatible with copper-containing compounds.

TOXICITY:

MAMMALS - Acute oral LD50 for rats 300-400, mice 80-135, guinea pigs 250-355 mg/kg. Acute percutaneous LD50 for rats >2150, rabbits 540-650mg/kg. Mild skin and eye irritant (rabbits). Acute inhalation LC50 (4 hours) for rats 3.5 mg/l air. In 90-day feeding trials, no-effect level for rats was 0.1 mg/kg/day, and for dogs 0.02 mg/kg/day. WHO Class II; EPA Toxicity Class II or III. ADI (man) 0.002 mg/kg.

BIRDS - Acute oral LD50 for mallard ducklings 3.5, young pheasants 4.3mg/kg.

FISH - LC50 (96 hours) for bluegill sunfish 16, rainbow trout 2.6-3.2mg/l.

BEES - Highly toxic to bees.

DEGRADATION AND METABOLISM: Degradation involves oxidation to the phosphate(diazoxon) and hydrolysis (J. Pardue et al. J. Agric. Food Chem. 1970, 18, 405-408). The principal metabolites are diethyl thiophosphate and diethyl phosphate.

ANTIDOTES AND MEDICAL TREATMENT: Atropine, possibly in conjunction with PAM, Toxogonin, or other cholinesterase reactivators.

ADDITIONAL INFORMATION: EEC MRL - cereals, shell fruits 0.05 ppm; other fruit and vegetables 0.5 ppm.

PESTICIDE RESIDUE LEVELS IN FOODS (ppm):

Austria: Fruit, vegetables 0.3; other 0.05.

Belgium: Cereal grains 0.1; fruit, vegetables 0.5.

Denmark: Olive oil 2; milk, meat fat, fruit, carrots, vegetables 0.5; grain (non-ground), nuts 0.1.

Finland: General 0.5.

France: Shelled fruit (e.g. nuts, coconut) 0.05; other fruit, vegetables 0.5.

Germany (FRG): Vegetables, fruit (except nuts) 0.5; other vegetable foodstuffs 0.05.

Italy: Fruit, vegetables 0.3; maize, sorghum 0.1; other cereals 0.05.

Luxembourg: Vegetables, fruit (except those with shells) 0.50; fruit with shells, other foodstuffs of vegetable origin 0.05.

Netherlands: Meat, sweet corn 0.7; other fruit, other vegetables 0.5; oil seeds, nuts, tea 0.1; milk, other 0.02.

Sweden: Fruit, vegetables (except potatoes) 0.3; potatoes 0.1; citrus fruit 0.5.

Switzerland: Cabbage, citrus fruit 0.7; fruit, vegetables  
(except cabbage) 0.5; meat 0.2; milk 0.05.  
CHEMICAL GROUP(S) OF PESTICIDE: organophosphorus; pyrimidine  
RECORD DATE: 930729

?logoff

---

FIG.13-2

Anexo 1: Ejemplo de consulta en linea

?b303

File 303:Chapman&Hall Chemical Database

?S CYCLOHEXANE

S1 2705 CYCLOHEXANE

?S CN=CYCLOHEXANE

S2 1 CN=CYCLOHEXANE

?b304

File 304:MERK INDEX ONLINE(SM)

?s cyclohexane

S1 124 CYCLOHEXANE

?s na=cyclohexane

S2 1 NA=CYCLOHEXANE

?b306

File 306:AGROCHEMICALS HANDBOOK

?s cyclohexane

S1 1 CYCLOHEXANE

?s lindane

S2 1 LINDANE

?s cn=lindane

S3 0 CN=LINDANE

**CAPITULO IV**

**INFORMACION DE QUIMICA ANALITICA, USO DEL  
DIALINDEX Y NOMENCLATURA SISTEMATICA**

LECCION 14  
INFORMACIÓN SOBRE QUÍMICA ANALÍTICA

**OBJETIVOS:** Obtener información sobre Química Analítica. Utilizar los conceptos de "analyte" y "matrix" para limitar la búsqueda en el Analytical Abstracts (BD 305).

**CARACTERÍSTICAS:** "-A" añadirle la letra A al término buscado analyte para indicar que se analizó; "-M" añadir la letra M al término matrix buscado para indicar cuál es la matriz.

**ANTECEDENTES:**

Analytical Abstracts esta indizada en una forma especial la categoriza **analyte** (la sustancia a buscar) y la **matriz** (El medio en el cual analyte existe). Esta característica es única de la BD 305. Suponga que estamos interesados en detectar cobre (analyte) en la piel (matrix).

**LA BÚSQUEDA**

Iniciar BD 305.

Expandemos (EXPAND) el término COPPER-A para ver si es parte del vocabulario controlado. Encontramos que sí lo es; y hay 5228 referencias asociados con el cobre como producto analizado (analyte).

Seleccionamos E3, lo cual crea el conjunto (S1) que contiene las referencias.

Repetimos el proceso de expansión (EXPAND) para piel como una matriz (skin-m).

Nuevamente seleccionamos E3 para obtener el conjunto s1 y meterlo en otro. Después el conjunto s1 y el conjunto s2 se conectan con el comando lógico AND.

Los títulos se imprimen (TYPED) para revisar si son útiles.

El primer registro se imprime con el formato 5.



1. ----- Encuentre la determinación del Naftaleno en aceites lubricantes.
2. ----- Encuentre la cuantificación de ampicilina en la linfa.
3. ----- Encuentre referencias de arsénico en el cabello.
4. ----- Localice referencias de cuantificación de Benzeno en el Aire.
5. ----- Encuentre la determinación del cadmio en el agua.
6. ----- Halle las referencias de la determinación del cobre en las uñas de los dedos.
7. ----- Cómo puede determinar el fluor en la uñas de los pies.
8. ----- Es posible encontrar metilamfetamina en las uñas de los dedos?.
9. ----- Encuentre la determinación de "dióxinas" en el papel.
10. ----- ¿Cómo puede encontrar si hay aspartame en los refrescos de cola?.
11. ----- Cómo cuantificar cafeína en el té.
12. ----- Localice referencias para encontrar formaldehído en madera.
13. ----- ¿Cómo se encuentra el porcentaje del manganeso en el acero?.
14. ----- ¿Cómo puede cuantificar el bario en el suéter de rayón?.
15. ----- ¿Localice referencias para determinar floruro en dentaduras?.
16. ----- ¿Sangran sus incrustaciones dentales?.  
Encuentre referencias para determinar mercurio en la saliva.
17. ----- ¿Cómo pueden determinar las cannabíneas en orina?.
18. ----- ¿Cómo pueden encontrarse trazas de elementos en el forraje?.
19. ----- Halle referencias sobre determinación de pesticidas en las hojas.
20. ----- ¿Encuentre referencias de análisis de antraquinona en la corteza de árboles?.

? b 305

File 305:Analytical Abstracts Online 1980-1995/Sep  
(c) 1995 Royal Soc Chemistry

Set Items Description

--- ---- -

?e copper-a

Ref	Items	Index-term
E1	2	COPPER(II)
E2	2	COPPER(II)-A
E3	5228	*COPPER-A
E4	309	COPPER-M
E5	1	COPPER-63
E6	1	COPPER-63-A
E7	1	COPPER-64
E8	1	COPPER-64-A
E9	1	COPPER-65
E10	1	COPPER-65-A
E11	1	COPPER-68
E12	1	COPPER-68-A

?s e3

S1 5228 "COPPER-A"

?e skin-m

Ref	Items	Index-term
E1	329	SKIN
E2	1	SKIN-A
E3	136	*SKIN-M
E4	1	SKINCARE
E5	4	SKINNED
E6	3	SKINNER
E7	20	SKINS
E8	1	SKIPJACK
E9	1	SKIPPED
E10	1	SKIVED
E11	1	SKLAD
E12	1	SKLADAL

?s e3

S2 136 "SKIN-M"

?s s1 and s2

5228 S1  
136 S2  
S3 2 S1 AND S2

?t s3/ti/1-2

3/TI/1

Determination of gunshot residues(GSR) in biological samples by means of Zeeman atomic-absorption spectrometry.

3/TI/2

Determination of metal chelates by inductively coupled plasma atomic-emission spectrometry and applications to biological materials.

?t s3/5/1

3/5/1

143627 AA Accession No.: 50-04-D-00049 DOC. TYPE: Journal  
Determination of gunshot residues (GSR) in biological samples by means of Zeeman atomic-absorption spectrometry.

AUTHOR: Lichtenberg, W.

CORPORATE SOURCE: Bundeskriminalamt, 6200 Wiesbaden, W. Germany

JOURNAL: Fresenius' Z. Anal. Chem., Volume: 328, Issue: 4-5, Page(s): 367-369

CODEN: ZACFAU ISSN: 0016-1152

PUBLICATION DATE: Sep 1987 (870900) LANGUAGE: English

ABSTRACT: Gunshot residue elements, e.g., Pb, Sb, Ba and Cu, were determined on skin samples by Zeeman AAS. Determinations for untreated (Pb) and pulverized and freeze-dried (Pb and Sb) skin samples were compared. The measured Pb values made it possible to distinguish between shooting distances of 50 and 60 cm for forensic analysis.

ANALYTE: gunshot --detmn. of, on skin, by Zeeman AAS

lead (7439-92-1) --detmn. of, on skin, by Zeeman AAS

antimony (7440-36-0) --detmn. of, on skin, by Zeeman AAS

barium (7440-39-3) --detmn. of, on skin, by Zeeman AAS

copper (7440-50-8) --detmn. of, on skin, by Zeeman AAS

**MATRIX:** skin --detmn. of gunshot residues on, by Zeeman AAS  
**SECTION:** D-24160 (Biochemistry)

?type s3/5/2

3/5/2

030815 AA Accession No.: 43-02-D-00014 DOC. TYPE: Journal  
Determination of metal chelates by inductively coupled plasma  
atomic-emission spectrometry and applications to biological  
materials.

**AUTHOR:** Black, M. S.; Thomas, M. B.; Browner, R. F.

**CORPORATE SOURCE:** 3304 Indian Valley Trail, Atlanta, GA 30341, USA

**JOURNAL:** Anal. Chem., Volume: 53, Issue: 14, Page(s): 2224-2228

**CODEN:** ANCHAM **ISSN:** 0003-2700

**PUBLICATION DATE:** 1981 (810000) **LANGUAGE:** English

**ANALYTE:** iron (7439-89-6) --detmn. of, in serum and skin, by ICP  
a.e.s., use of chelates in

copper (7440-50-8) --detmn. of, in serum and skin, by ICP  
a.e.s., use of chelates in

zinc (7440-66-6) --detmn. of, in serum and skin, by ICP a.e.s.,  
use of chelates in

manganese (7439-96-5) --detmn. of, in serum and skin, by ICP  
a.e.s., use of chelates in

aluminium (7429-90-5) --detmn. of, in serum and skin, by ICP  
a.e.s., use of chelates in

chromium (7440-47-3) --detmn. of, in serum and skin, by ICP  
a.e.s., use of chelates in

**MATRIX:** blood serum --detmn. of metals in, by ICP a.e.s.

skin --detmn. of metals in, by ICP a.e.s

**SECTION:** D-21000 (Biochemistry)

?logoff

## LECCION 15

### ¿TERRITORIO DESCONOCIDO? UTILICE DIALINDEX

**OBJETIVOS:** Accesar información no familiar mediante DIALINDEX. Seleccionar bases de datos apropiadas. Ordenar las bases de datos obtenidas y escogerlas según la cantidad de información relevante recuperada. Realizar una búsqueda eficiente, con un mínimo de datos.

**CARACTERÍSTICAS:** SET FILES(SF), SAVE TEMP, RANK FILES(RF) EXECUTE STEPS(EXS), REMOVE DUPLICATES(RD).

**ANTECEDENTES:** El DIALINDEX (BD 411) clasifica todas las BD de DIALOG según el tema en interés. Estas categorías son muy amplias (ALLSCIENCE, ALLHUMANITIES) ó más reducidas como (BIOCHEM, PSYCH). Cada categoría contiene varias bases de datos, que pueden consultarse simultáneamente. Estas categorías son una primera elección, cuando no se está familiarizado con el tema en cuestión. Suponga que necesita reunir todas las citas relevantes acerca de las fallas de transformación, a lo largo de la Falla de San Andrés.

#### LA BÚSQUEDA

Inicie la BD 411

SET FILES reúne todas las 138 bases de datos que están en la categoría "ALLSCIENCE" .  
SELECCIONE los términos.

El sistema muestra una tabla con el número de referencias en cada BD. Note que no se forman conjuntos.

De las 138 bases de datos incluidas en el "ALLSCIENCE", solo éstas tuvieron citas para nuestra selección de términos.

Para ser eficientes guardamos la estrategia de búsqueda para poder usarla más tarde.

Puede ser conveniente usar el (RANK FILES). Con esto nos da una jerarquía, con las BD que tienen más referencias al principio. También nos proporciona los números N que se pueden usar para iniciar la búsqueda.

Inicia cualquier combinación de BD que Ud. quiera. En este caso, se escogieron todas las BD que tenían referencias.

Con "EXECUTE STEPS" se llama a la estrategia de búsqueda guardada.

Siempre elimine los duplicados con REMOVE DUPLICATES (RD) en las bases de datos múltiples.

Imprima (TYPE) un título de cada BD, para revisar su importancia.

DIALINDEX facilita obtener información sobre un tema no familiar.

Imprima (TYPE) uno de los títulos en formato completo. Puede evaluarse el resumen (abstract) para ver su importancia.

#### **TAREAS DE LA LECCIÓN 15**

En este ejercicio los estudiantes deberán buscar un tema no muy conocido, usando el DIALINDEX (BD 411). Dependiendo de su experiencia, pueden necesitar categorías muy amplias como (ALL, ALLCIENCE, ALLHUMANITIES, ALLTEXT, ALLBUSINESS, ALLGENERAL, ALLGOVT, ALLLAW, ALLNEWS) ó podrán usar categorías más específicas. Deberán leer cuidadosamente las descripciones de las bases de datos y de las categorías del DIALINDEX. Deberán estar capacitados para obtener referencias para casi cualquier pregunta, sobre cualquier tema. Aquí se dan algunas sugerencias.

1. ----- Encuentre fabricantes de filtros HEPA.
2. ----- Encuentre comentarios al libro  
'Gerald's Game'.
3. ----- Encuentre comentarios al software  
Microsoft Excel.
4. ----- Encuentre información sobre Onomatopeya.
5. ----- Consiga referencias acerca del 'California  
Science Framework'. (Infraestructura  
Científica de California)
6. ----- Consiga comentarios de la película  
'Jurassic Park'.
7. ----- Encuentre algo acerca de la pesca de la  
trucha en Montana.
8. ----- ¿Qué hay de nuevo (1993) en acondiciona-  
miento de aire con energía solar?
9. ----- Encuentre fabricantes de giroscopios  
(gyroscopes).
10. ----- Consiga reseñas (reviews) de "Macintosh  
Powerbook".
11. ----- ¿Que dice Ross Perot acerca de los vales  
escolares?.
12. ----- Encuentre todas las marcas comerciales  
que usen su nombre.
13. ----- ¿Qué hay de nuevo en celdas solares  
usadas en la industria aeroespacial?.
14. ----- Encuentre algo relacionado a la historia  
del 'Empire Mine'.
15. ----- Encuentre algunas referencias acerca de  
casas subterráneas.
16. ----- ¿Cómo se usan los diagramas de Venn en un  
curso de filosofía?
17. ----- Consiga información acerca del procesa-  
miento por agua del café descafeinado.
18. ----- ¿Hay alguna tesis doctoral sobre la pesca  
de la trucha?.
19. ----- Encuentre información acerca de la cita  
"let them eat cake"
20. ----- ¿Hay información acerca de un poeta llamado  
Tolegian?

**Fig.15.1**  
**CONSULTA EJEMPLO DE LA LECCION 15**

**? b411**

File 411:DIALINDEX(tm)

**?set files allscience**

You have 172 files in your file list.

**?s transform(w) fault?(s) san(w) andreas**

Your SELECT statement is:

S transform(w) fault?(s) san(w) andreas

Items	File
20	2: INSPEC_1969-1995/Sep W3
4	6: NTIS_1964-1995/Nov B1
3	28: Oceanic Abst._1964-1995/Sep
6	35: Dissertation Abstracts Online_1861 -1995/Sep
7	44: Aquatic Sci&Fish Abs_1978-1995/Aug
4	58: GeoArchive_1974-1995/Jul
9	62: SPIN(R)_1975-1995/Aug
1	69: Energyline(R)_1970-1993/Dec
15	89: GeoRef_1785-1995/Oct B2
5	108: Aerospace Database_1962-1995/Sep
Examined	50 files
9	144: Pascal_1973-1995/Aug
7	149: IAC(SM) Health & Wellness DB(SM)_ 76-95/Aug W5
4	265: Fed. Res. in Progress_1995/Aug
20	292: GEOBASE(TM)_1980-1995/Aug
Examined	100 files
25	434: SciSearch(R)_1974-1995/Sep W1
17	440: Current Contents Search(R) _ 1990- 1995/Aug W4
Examined	150 files

16 files have one or more items; file list includes 172 files.

**?save temp**

Temp SearchSave "TB008" stored

?rank files

Your last SELECT statement was:

S TRANSFORM(W) FAULT? (S) SAN(W) ANDREAS

Ref	Items	File
N1	25	434: SciSearch(R)_1974-1995/Sep W1
N2	20	2: INSPEC_1969-1995/Sep W3
N3	20	292: GEOBASE(TM)_1980-1995/Aug
N4	17	440: Current Contents Search(R)_1990-1995 /Aug
W4		
N5	15	89: GeoRef_1785-1995/Oct B2
N6	9	62: SPIN(R)_1975-1995/Aug
N7	9	144: Pascal_1973-1995/Aug
N8	7	44: Aquatic Sci&Fish Abs_1978-1995/Aug
N9	7	149: IAC(SM) Health & Wellness DB(SM)_76-95 /Aug
W5		
N10	6	35: Dissertation Abstracts Online_1861-1995 /Sep

16 files have one or more items; file list includes 172 files.

?begin n1:n15

SYSTEM:OS- DIALOG OneSearch

File 2:INSPEC 1969-1995/Sep W3

(c) 1995 Institution of Electrical Engineers

File 292:GEOBASE(TM) 1980-1995/Aug

(c) 1995 Elsevier Science Ltd.

File 440:Current Contents Search(R) 1990-1995/Aug W4

(c) 1995 Inst for Sci Info

\*File 440: Use Format 19 for contents records (LIMIT /CONT)

Use Formats 2 - 9 for individual article records (LIMIT /NCONT)

File 89:GeoRef 1785-1995/Oct B2

(c) 1995 American Geological Institute

File 62:SPIN(R) 1975-1995/Aug

(c) 1995 American Institute of Physics

File 144:Pascal 1973-1995/Aug

(c) 1995 INIST/CNRS

File 44:Aquatic Sci&Fish Abs 1978-1995/Aug

(c) 1995 FAO (for ASFA Advisory Brd)

\*File 44: /ENG limit is not working correctly.

File 149:IAC(SM) Health & Wellness DB(SM) 76-95/Aug W5  
(c)1995 Inform Access Co  
\*File 149: This file has been reloaded.  
Please see HELP NEWS 149 for details.  
File 35:Dissertation Abstracts Online 1861-1995/Sep  
(c) 1995 UMI  
File 108:Aerospace Database 1962-1995/Sep  
(c) 1995 AIAA  
File 6:NTIS 1964-1995/Nov B1  
Comp. & distr. 1995 NTIS, US Dept of Commerce  
File 58:GeoArchive 1974-1995/Jul  
(c) 1995 Geosystems  
File 265:Fed. Res. in Progress 1995/Aug  
(c) format only 1995 Dialog Info.Svcs.  
\*File 265: CRISP, EPA, INTBM and NIOSH subfiles temporarily  
unavailable.  
File 28:Oceanic Abst. 1964-1995/Sep  
(c) 1995 Cambridge Scientific Abstracts

Set	Items	Description
---	-----	-----

**?exs**

	179524	TRANSFORM
	334703	FAULT?
	122489	SAN
	11654	ANDREAS
S1	155	TRANSFORM(W) FAULT? (S) SAN (W) ANDREAS

**?rd s1**

S2 86 RD S1 (unique items)

**?t s2/ti/1 from each**

2/TI/1 (Item 1 from file: 434)

Title: CONSTRAINTS ON PRESENT-DAY BASIN AND RANGE DEFORMATION FROM SPACE GEODESY

2/TI/26 (Item 1 from file: 2)

Title: evolving geographic patterns of Cenozoic magmatism in the North American Cordillera; the temporal and spatial association of magmatism and metamorphic core complexes

2/TI/38 (Item 1 from file: 292)

Erzincan, Turkey earthquake of March 13, 1992: reconnaissance report

2/TI/48 (Item 1 from file: 89)  
MONOGRAPH TITLE: Gravity and seismic refraction investigation of San Andreas System fault strands in the Mecca Hills area, Riverside County, California

2/TI/61 (Item 1 from file: 62)  
Heat flow and energetic of the San Andreas fault zone

2/TI/63 (Item 1 from file: 144)  
Mantle deformation and tectonics: constraints from seismic anisotropy in the western United States

2/TI/65 (Item 1 from file: 44)  
Evolution comparee des bassins franciscains de Californie (Etats-Unis et Mexique) Franciscan basins of California, Oregon and Baja California (USA and Mexico): A comparison. Geologie des Cordilleres Nord-Amerilaines Paris (France) 22 Apr 1985

2/TI/67 (Item 1 from file: 149)  
Geology of Western Gondwana (2000-500 Ma): Pan-African-Brasiliano Aggregation of South America and Africa. (book reviews)

2/TI/74 (Item 1 from file: 35)  
THE CONTINENTAL MARGIN OF WESTERN COTE D'IVOIRE: STRUCTURAL FRAMEWORK INHERITED FROM INTRA-CONTINENTAL SHEARING

2/TI/78 (Item 1 from file: 108)  
Fault intersections and hybrid transform faults in the southern Salton Trough geothermal area, Baja California, Mexico

2/TI/80 (Item 1 from file: 6)  
Neotectonic Studies of Northern Baja California, Mexico, with Landsat Thematic Mapper and Spot Panchromatic Imagery: Partitioning of Dextral and Extensional Strain at the Pacific-North America Plate Boundary

2/TI/81 (Item 1 from file: 58)  
Late Neogene and Quaternary tectonics associated with northward growth of the San Andreas transform fault, northern California

?t s2/9/1

2/9/1 (Item 1 from file: 434)

14087962 Genuine Article#: RN833 Number of References: 85

Title: CONSTRAINTS ON PRESENT-DAY BASIN AND RANGE DEFORMATION FROM SPACE GEODESY

Author(s): DIXON TH; ROBAUDO S; LEE J; REHEIS MC

Corporate Source: UNIV MIAMI, ROSENSTIEL SCH MARINE & ATMOSPHER

SCI/MIAMI//FL/33149; CALTECH, DIV GEOL & PLANETARY

SCI/PASADENA//CA/91125; US GEOL SURVEY/LAKEWOOD//CO/80225

Journal: TECTONICS, 1995, V14, N4 (AUG), P755-772

ISSN: 0278-7407

Language: ENGLISH Document Type: ARTICLE

Geographic Location: USA

Subfile: SciSearch; CC PHYS--Current Contents, Physical, Chemical & Earth Sciences

Journal Subject Category: GEOSCIENCES

Abstract: We use new space geodetic data from very long baseline interferometry and satellite laser ranging combined with other geodetic and geologic data to study contemporary deformation in the Basin and Range province of the western United States. Northwest motion of the central Sierra Nevada block relative to stable North America, a measure of integrated Basin and Range deformation, is  $12.1 \pm 1.2$  mm/yr oriented  $N38$  degrees  $W \pm 5$  degrees (one standard error), in agreement with previous geological estimates within uncertainties. This velocity reflects both east-west extension concentrated in the eastern Basin and Range and north-northwest directed right lateral shear concentrated in the western Basin and Range. Fly, Nevada is moving west at  $4.9 \pm 1.3$  mm/yr relative to stable North America, consistent with dip-slip motion on the north striking Wasatch fault and other north striking normal faults. Comparison with ground-based geodetic data suggests that most of this motion is accommodated within similar to 50 km of the Wasatch fault zone. Paleoseismic data for the Wasatch fault zone and slip rates based on seismic energy release in the region both suggest much lower slip rates. The discrepancy may be explained by some combination of additional deformation away from the Wasatch fault itself, aseismic slip, or a seismic rate that is anomalously low with respect to longer time averages.

? logoff

## LECCIÓN 16

### TRABAJANDO CON NOMENCLATURA SISTEMÁTICA EN EL CHEMSEARCH

**Objetivos:** Verificar un nombre químico sistemático, con el comando EXPAND. Encontrar datos de una sustancia química cuando el nombre sistemático no pueda verificarse.

**CARACTERÍSTICAS:** Nombre del campo (NA=), Seleccione la cadena localizadora que contenga comas.

**ANTECEDENTES:** El nombre del campo en la BD 398 contiene nombres sistemáticos y comunes de las sustancias. Expandemos (EXPAND) el nombre sistemático y aparecerá la información, entonces seleccionamos la sustancia y podemos obtener más información. Si el compuesto no aparece, entonces será necesario dividirlo en segmentos y buscarlos con el comando lógico AND. La tarea es encontrar los números de registro del 2,4-dicloro-2-metilhexano y del 2,4-epoxi-2-metilhexano.

#### LA BÚSQUEDA

Inicie en la BD 398.

Expanda el nombre sistemático con el nombre del campo (Name Field NA=). Se eliminaron las referencias de E6 hasta E12.

En E3 aparece el compuesto enlistado en la base de datos.

Con SELECT E3 se crea el conjunto S1 que contiene una referencia a dicho compuesto.

Ahora podemos imprimir (TYPE) el conjunto S1 con formato 5.

Este es el número de registro.

Note la forma del nombre del compuesto en el C.A. (Chemical Abstrac), que es: Hexane,2,4-dichloro-2-methyl-.

El nombre que usamos no es el del C.A., es un sinónimo que está incluido en el campo NA.

Repetimos el proceso con el segundo nombre. También se eliminaron del E6 al E12.

La referencia E3 tiene cero registros. Esto significa que el nombre no está contenido en la BD como se había escrito.

Seleccione los fragmentos del nombre sistemático y únalos mediante el comando lógico AND.

El conjunto S2 contiene 3 referencias con los fragmentos. Imprima los nombres del conjunto S2 y después revise para ver cuál es el compuesto.

Observe que las tres referencias tienen los fragmentos, pero sólo la número 1 es el compuesto correcto. Las otras 2 tienen fragmentos adicionales.

Imprima el artículo correcto con el formato 5.

Aquí está el número de registro buscado.

Observe que la lista tiene sólo el nombre del Chemical Abstracts. No hay ningún sinónimo en la referencia.

**?** *¿ Existe alguna base de datos químicas orientada a los negocios?  
¿Existe alguna base de datos de texto completo sobre tecnología?.*

### **Para más tarde**

**BD 328:** Chemstats proporciona datos sobre producción y comercio .....Ver lecc. 17.

**BD 16:** PTS PROMT es una Base de Datos de texto completo con información multindustrial. .Ver lecc.18.

## TAREAS DE LA LECCION 16

Este ejercicio ilustra la complejidad de los nombres sistemáticos. Esto le da confianza al estudiante cuando es capaz de localizar un nombre sistemático, que no está indizado con el mismo nombre dentro de la BD. Los nombres subrayados darán cero referencias cuando se expandan (EXPANDED). Deben dividirse en partes y buscarse con el comando lógico AND. Los estudiantes expandirán (EXPAND) el compuesto dado con (NA=) en la BD 398. Si el nombre aparece en la lista "E" entonces se seleccionará e imprimirá (TYPED) con el formato 5. Los estudiantes examinarán **todos** los nombres presentes con el formato 5 y observar sus similitudes.

Si el comando EXPAND nos da cero referencias entonces se seleccionarán los segmentos del nombre como localizadores. El siguiente ejemplo es una búsqueda para el número 19.

1. ----- 3,7-dimethyl-1-octen-1-ol
2. ----- 4-(2-aminoethyl)-1,2-benzenediol
3. ----- pentaamminechlorocobalt(III) chloride
4. ----- 1-methoxy-4-(2-propenyl)benzene
5. ----- 2-ethyl-1-hexanol
6. ----- 1,2-ethanediol
7. ----- 1-ethyl-1H-pyrrole-2,5-dione
8. ----- hexacyanoferrate (II)
9. ----- 4-hydroxybenzoic acid ethyl ester
10. ----- potassium amminedichloronitroplatinate
11. ----- 3-ethyl-4-picoline
12. ----- 4-ethyl-2-methylpyridine
13. ----- 3-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-2-propenoic acid
14. ----- tris(ethylenediamine)cobalt(II) chloride
15. ----- 5-hydroxy-6,8,11,14-eicosatetraenoic acid
16. ----- 2,4-dihydroxy-6-methylbenzoic acid
17. ----- 3-amino-4-hydroxybenzoic acid
18. ----- 1-phenylazo-2-naphthalenepropanoic acid
19. ----- 6-hydroxy-2-naphthalenepropanoic acid
20. ----- ammonium tris(oxalato)ferrate(III)

Fig. 16-1  
CONSULTA EJEMPLO DE LA LECCION 16

?b398

File 398:CHEMSEARCH(TM) 19 57-1995/Oct

Set Items Description  
--- ---- -

?e na=2,4-dichloro-2-methylhexane

Ref Items Index-term

E1 1 NA=2,4-DICHLORO-2-METHYL-3-PENTANONE  
E2 1 NA=2,4-DICHLORO-2-METHYLBUTANE  
E3 1 \*NA=2,4-DICHLORO-2-METHYLHEXANE  
E4 1 NA=2,4-DICHLORO-2-METHYLPENTANE  
E5 1 NA=2,4-DICHLORO-2-PENTENE

\*\*\* ALGUNAS REFERENCIAS FUERON ELIMINADAS\*\*\*

?select a3

S1 1 NA="2,4-DICHLORO-2-METHYLHEXANE"

?t a1/5/1

1/5/1

CAS REGISTRY NUMBER: 84189-23-1

MOLECULAR FORMULA: C7H14Cl2

CA NAME(S):

HP=Hexane (9CI)

SB=2,4-dichloro-2-methyl-

SYNONYMS: 2,4-Dichloro-2-methylhexane

SUBFILE: CHEMSIS IICI 1 LITERATURE REFERENCE(S) IN FILE 399.

?e na=2,4-epoxy-2-methylhexane

Ref Items Index-term

E1 1 NA=2,4-EPOXY-10CH-PHENANTHRO(10,1-BC) FURAN  
E2 3 NA=2,4-EPOXY-10CH-PHENANTHRO(10,1-BC) FURAN-10C-CA  
E3 0 \*NA=2,4-EPOXY-2-METHYLHEXANE  
E4 1 NA=2,4-EPOXY-2H-CYCLOPENTA(1,2-B:3,4-C') DIFURAN  
E5 1 NA=2,4-EPOXY-2H-CYCLOPENTA(1,2-B:3,4-C') DIFURAN-7  
E6 1 NA=2,4-EPOXY-2H-1,5-DIOXACYCLOPROP(CD) INDENE

?s 2,4(W)epoxy and 2(W)methyl and hexane

596500 2,4  
101556 EPOXY  
167 2,4(W)EPOXY  
6922607 2  
7093953 METHYL  
866943 2(W)METHYL  
179517 HEXANE  
S2 3 2,4(W)EPOXY AND 2(W)METHYL AND HEXANE

Una búsqueda con terminos muy comunes como "2" y "methyl" puede tomar minutos para completar.

?t s2/na/1-3

2/NA/1

CA NAME(S):

HP=Hexane (6CI)

SB=2,4-epoxy-2-methyl-

2/NA/2

CA NAME(S):

HP=Hexane (8CI)

SB=2,4-epoxy-3-methoxy-2-methyl-

ST=trans-

2/NA/3

CA NAME(S):

HP=Hexane (8CI)

SB=2,4-epoxy-3-methoxy-2-methyl-

ST=cis-

?t s2/5/1

2/5/1

CAS REGISTRY NUMBER: 101084-23-5

MOLECULAR FORMULA: C7H14O

RING SYSTEM DATA:

(01) (nr=01; sr=4; ar=C30.01; fr=OC3.01; ir=4-214-1)

CA NAME(S):

HP=Hexane (6CI)

SB=2,4-epoxy-2-methyl-

SUBFILE: CHEMZERO 1 LITERATURE REFERENCE(S) IN FILE 399.

ANEXO II Fig.16.2  
2da. CONSULTA DE LA LECCION 16

?s 6(W)hydroxy and 2(W)naphthalenepropanoic(w) acid

1546289 6  
1775130 HYDROXY  
60977 6(W)HYDROXY  
6922607 2  
1756 NAPHTHALENEPROPANOIC  
3699757 ACID  
734 2(W)NAPHTHALENEPROPANOIC(W)ACID  
S1 17 6(W)HYDROXY AND 2(W)NAPHTHALENEPROPANOIC(W)ACID

Recuerde que la última referencia es normalmente el compuesto original (S1).

?t s1/na/17

1/NA/17

CA NAME(S):

HP=2-Naphthalenepropanoic acid (9CI)

SB=6-hydroxy-

HP=2-Naphthalenepropionic acid (6CI 8CI)

SB=6-hydroxy-

SYNONYMS: Allenolic acid; 2-Hydroxy-6-naphthalenepropionic acid; 6-Hydroxy-2-naphthalenepropionic acid

**CAPITULO V**

**INFORMACION COMERCIAL, ESTADISTICA Y DE  
FABRICANTES  
DE PRODUCTOS QUIMICOS**

**FALTA PAGINA**

**No.** 130

### TAREAS DE LA LECCIÓN 17

Esta búsqueda es muy fácil; haga que los estudiantes seleccionen (s) el nombre Químico (ej. NITRIC ACID/NA or NA=NITRIC ACID) y lo combinen con USA como país (ej. USA/CN o CN= USA) y después imprima la tabla, resultado de la búsqueda. Sin embargo los estudiantes encontrarán que un compuesto como SULFURIC ACID nos da cero información. Para encontrar la razón de esta discrepancia los estudiantes expandirán (EXPAND) el nombre. Luego encontrarán algunas diferencias en la ortografía debido a que la BD 328 es británica.

Las siguientes sustancias subrayadas deberán expandirse (EXPANDED) para ver sus diferencias ortográficas.

Otra tarea posible sería utilizar diferentes países y que los estudiantes los expandan (EXPANDED) y en el /CN para encontrar el código correcto (El instructor verificará la disponibilidad de las referencias).

1. \_\_\_\_\_ Aluminum
2. \_\_\_\_\_ Ethylene glycol
3. \_\_\_\_\_ Phenol
4. \_\_\_\_\_ Ammonium sulfate
5. \_\_\_\_\_ Benzene
6. \_\_\_\_\_ Naphthalene
7. \_\_\_\_\_ Aniline
8. \_\_\_\_\_ Toluene
9. \_\_\_\_\_ Chlorine
10. \_\_\_\_\_ Acetic acid
11. \_\_\_\_\_ Ethanol
12. \_\_\_\_\_ Acetone
13. \_\_\_\_\_ Calcium carbide
14. \_\_\_\_\_ Carbon tetrachloride
15. \_\_\_\_\_ Propylene
16. \_\_\_\_\_ Bromine
17. \_\_\_\_\_ Benzoic acid
18. \_\_\_\_\_ Citric acid
19. \_\_\_\_\_ Cyclohexane
20. \_\_\_\_\_ Cyclohexanol

Fig. 17-1  
CONSULTA EJEMPLO DE LA LECCION 17

?b328

File 328:Chemstats 1995/Feb

Set Items Description  
--- -----

?e na=nitric acid

Ref	Items	Index-term
E1	52	NA=MONOCHLOROACETIC ACID
E2	61	NA=NAPHTHALENE
E3	125	*NA=NITRIC ACID
E4	50	NA=NITRILE RUBBER
E5	94	NA=NORMAL & ISO-BUTANOLS
E6	1	NA=OXO ALCOHOLS
E7	51	NA=PENTAERYTHRITOL
E8	80	NA=PERCHLOROETHYLENE
E9	107	NA=PHENOL
E10	6	NA=PHOSGENE
E11	127	NA=PHOSPHORIC ACID
E12	77	NA=PHTHALIC ANHYDRIDE

?s e3

S1 125 NA="NITRIC ACID"

?s s1 and usa/cn

125 S1  
129 USA/CN  
S2 1 S1 AND USA/CN

Si no conoce la clave del nombre del país (/CN), puede expandir. Por ej. E CN=US, mostrará que USA es la forma correcta.

?t s2/9/1

2/9/1

PRODUCT: Nitric acid (055)

PRODUCT CLASS: INORGANICS

REPORTING COUNTRY: USA (NORTH AMERICA)

YEAR: 1993

NOTES: Imp:'92 val is custom val for consumption Exp:exc re-exp val=FAS

Production:inc that for captive use,as 100%,quoted in short  
 tons,multiplication factor 0 90718474  
 Trade:to 1988 quoted in lbs,conversion factor 2204 624  
 Exports:not rept before 1989, 1992,93 inc sulphonic acid

Annual Year	I M P O R T S		E X P O R T S		Exchange	
	Production	Quantity	Value	Quantity	Value	Rate
1984	7074091	11939	1438			1.0000
1985	6935518	11326	1411			1.0000
1986	6111068	10534	1396			1.0000
1987	6554500	10009	1200			1.0000
1988	7249222	9396	1544			1.0000
1989	7573722	9663	1741	32414	19150	1.0000
1990		9897	1662	13126	3980	1.0000
1991		10103	2145	15099	4469	1.0000
1992		10045	2368	13287	4657	1.0000
1993		9912	2636	15226	5282	1.0000

TRADE BREAKDOWN

IMPORTS 1992

Country	Quantity	%	Value
CANADA	9952	99	2092
MEXICO	6	0	14
SWEDEN	0		11
NETHERLANDS	62	1	18
SPAIN	0		4
JAPAN	25	0	229

IMPORTS 1993

Country	Quantity	%	Value
CANADA	9802	99	2208
MEXICO	9	0	24
SWEDEN	1	0	25
NETHERLANDS	46	0	18
GERMAN FED	1	0	15
JAPAN	55	1	346

EXPORTS 1992

Country	Quantity	%	Value
CANADA	11915	90	3242
MEXICO	927	7	454
BAHAMAS	15	0	12
FRANCE	79	1	130
THAILAND	9	0	19
MALAYSIA FE	108	1	162

EXPORTS 1993

Country	Quantity	%	Value
CANADA	13217	87	3506
MEXICO	1162	8	267
FRANCE	76	0	147
ISRAEL	23	0	41
JORDAN	17	0	89
MALAYSIA FE	41	0	74

QUANTITIES IN METRIC TONS, VALUES IN THOUSAND US DOLLARS

?logoff

**LECCION 18**  
**NOTICIAS DE NEGOCIOS EN LA INDUSTRIA QUIMICA**

**OBJETIVOS:** Localizar noticias sobre negocios en la Industria Química. Utilizar una BD de texto completo. Ver los términos de búsqueda poniendo palabras clave en el contexto (KWIC) y resaltar éstas (HI).

**CARACTERÍSTICAS:** SET HI KWIC (K) Operador de proximidad (W).

**ANTECEDENTES:** /AC PROMT™ (BD 16) proporciona cobertura internacional de: compañías, productos, mercados y tecnología aplicada a todas las industrias. La BD 16 tiene referencias en texto completo, de manera que pueda verse el documento completo en línea. Suponga que está interesado en una tecnología nueva : diodos de cristal líquido, usados para proyección de video.

**La BÚSQUEDA**

Inicie la BD 16

Ponga "SET HI\*", con lo cual se verán entre comillas ""

El operador de proximidad (W) asegura que los términos sean adyacentes y estén en el orden listado.

Los dos conceptos se asocian. Observe la truncación.

Imprima los títulos y las palabras clave en el contexto (K).  
En el primer título, se observan las palabras clave resaltadas.

Enseguida el artículo aparece con el formato KWIC.  
El comando KWIC encontrará las palabras clave y las separará con 15 palabras antes y 15 palabras después.

KWIC tiene una característica muy útil. Permite obtener información sin tener que imprimir(TYPE) el artículo completo. Si la información es deseable, entonces se podrá imprimir todo el artículo.

Después de revisar los títulos, y las palabras clave en contexto (KWIC's), imprimimos el artículo 3 con el formato 5 para ver el texto completo.

Aquí se muestra el texto completo de la referencia, así que no será necesario ir a la biblioteca para mirar la revista.

Imprimamos el texto completo del artículo 2.

La BD 16 puede mantenerlo en contacto con las aplicaciones más recientes de ciencia y tecnología.

### TAREAS DE LA LECCIÓN 18

Buscando en la BD 16, se da a los estudiantes la oportunidad de ver cómo se pone en acción la química en el mundo de los negocios. También ilustra el uso de una herramienta poderosa en línea, la combinación de palabras clave en el contexto (KWIC) y resaltarlas (HI). Los alumnos escogerán cuidadosamente sus palabras clave y los operadores con los cuales enlazarlas. Por ejemplo (No.2) unirán **artificial and (W)joint?** (o quizás **artificial (2n) joint?**) Evidentemente **artificial and joint?** recuperará mucha información irrelevante. Permite que los estudiantes impriman (TYPE) algunas referencias en formato KWIC y después impriman un artículo importante con el formato 5.

1. ---- ¿Cómo se usa el láser quirúrgico en odontología?
2. ---- Explore el uso del titanio en articulaciones artificiales.
3. ---- ¿Existe un substituto de la hemoglobina en la sangre sintética?
4. ---- ¿Se usan los plásticos en la fabricación de órganos artificiales?
5. ---- ¿Se considera la pimienta una arma química?
6. ---- Explore el cabello humano como prueba del DNA.
7. ---- Considere la exactitud del reconocimiento óptico de ...caracteres.
8. ---- Encuentre el equipo de secado en frío para el papel mojado.
9. ---- ¿Qué anticongelante se usa en la preservación por congelamiento?
10. ---- ¿Existe un tratamiento térmico para la sangre en los pacientes con SIDA?

11. ---- Encuentre cámaras de oxígeno móviles e hiperbáricas.
12. ---- ¿Pueden usarse diamantes sintéticos en joyería?.
13. ---- ¿Qué hacen la NASA con los cojinetes de aire?
14. ---- Encuentre el tratamiento de ozonización para drenaje y tratamiento de aguas.
15. ---- Recoja información acerca de televisores en miniatura con energía solar.
16. ---- ¿Usan los militares rayos laser de Xenón?.
17. ---- ¿Puede el láser de CO2 cortar un metal?.
18. ---- ¿Cómo se relaciona la luz química adherida a la luciérnaga?.
19. ---- ¿Qué es una computadora de cristal líquido óptico?.
20. ---- Encuentre una compañía que produzca un sustituto del plomo para la gasolina.

**Fig. 18-1**  
**CONSULTA EJEMPLO DE LA LECCION 18**

**?b16**

File 16:IAC PROMT(R) 1972-1995/Nov 17  
Set Items Description  
--- -----

**?set hi\***

HILIGHT set on as '\*'

**?s liquid(w)crystal(W)diode?**

	64095	LIQUID
	27822	CRYSTAL
	8521	DIODE?
S1	149	LIQUID(W) CRYSTAL(W) DIODE?

**?s s1 and project?**

	149	S1
	452559	PROJECT?
S2	17	S1 AND PROJECT?

?t s2/ti,k/1-3

2/TI,KWIC/1

DRESDEN TECHNISCHE HOCHSCHULE CREATES THREE-DIMENSIONAL MONITOR

...Developers at Technical University of Dresden have finished work on 3D computer monitor and received state funding to continue development. The monitor, which uses common components and ordinary "liquid" "crystal" "diode" display technology, is 10.4" in diagonal. Heidrich and a handful of technicians have so far spent two years on the "project" and have patented their results. The monitor produces the same type of three-dimensional effects...

2/TI,KWIC/2

TEXAS DIGITAL MICROMIRROR DEVICES TO GO INTO VIDEO HOME "PROJECTOR"  
TEXAS DIGITAL MICROMIRROR DEVICES TO GO INTO VIDEO HOME "PROJECTOR"  
leader in high quality home theatre video products - that seems to mean that it makes "projection" television sets. The company has an alliance with Texas Instruments Inc and plans to bring the Digital Light

Processing system, which uses the micromirrors, to the consumer "projection" display market.

The "projection" technology is said to offer size, weight, and portability advantages over "liquid" "crystal" "diodes", and more importantly to deliver a better picture, and offer longer illumination life and semiconductor...

PRODUCT NAME: Video "Projection" Systems

2/TI,KWIC/3

FLAT PANELS: FED STARTS "PROJECT" TO INTEGRATE COMPUTER, SCREEN IN ONE MODULE

FLAT PANELS: FED STARTS "PROJECT" TO INTEGRATE COMPUTER, SCREEN IN ONE MODULE

companies rush to try to be first to market with a convincing alternative to the "liquid" "crystal" "diode", but Hopewell Junction, New York-based FED Corp

is seeking to go one further by flat-panel displays into a single compact unit it has dubbed the Smart Display. The "project" will receive funding under the Advanced Technology Programme of the US National Institute of Technology...

?t s2/5/3

2/5/3

FLAT PANELS: FED STARTS "PROJECT" TO INTEGRATE COMPUTER, SCREEN IN ONE MODULE

Computergram International July 24, 1995 p. N/A

ISSN: 0268-716X

There is growing activity in the field of flat panel displays as companies rush to try to be first to market with a convincing alternative to the "liquid" "crystal" "diode", but Hopewell Junction, New York-based FED Corp is seeking to go one further by integrating the computer and display into a single unit. It has rallied a multi-disciplinary team of component suppliers and end-users to develop core technologies to integrate computer functions and high-performance flat-panel displays into a single compact unit it has dubbed the Smart Display. The "project" will receive funding under the Advanced Technology Programme of the US National Institute of Technology, and it aims to revolutionise display technology by developing a multi-layer ceramic module with the FED display on one side and flip-chip integrated circuits on the other, integrating both the display and computer functions

in a single component. Analog Devices Inc, ceramic substrate supplier Cetek Technology Inc, and three display users - B F GoodrichAvionics Systems, InfiMed Inc and Kaiser Electronics Inc make up the team. The heart of the new display will be FED Corp's recently developed field emission display in which the three colour electron guns are replaced by an array of electron emitters, each handling a single pixel on the screen. The field emission display provides highly energy-efficient light generation, is extremely fast, with high resolution, uses low-power drivers, and is very bright, with colour reproduction of today's cathode ray tubes. Technical goals include showing mono and colour versions of a 1,280 by

1,024 head-mounted display for medical and portable workstation applications, and a small colour direct-view instruments display for avionics.

**THIS IS THE FULL TEXT:** Copyright 1995 Apt Data Services Ltd.

WORD COUNT: 269

?t s2/5/2

2/5/2

TEXAS DIGITAL MICROMIRROR DEVICES TO GO INTO VIDEO HOME **"PROJECTOR"**  
Computergram International August 9, 1995 p. N/A  
ISSN: 0268-716X

Texas Instruments Inc's Digital Micromirror Device -400,000 tiny aluminium mirrors, each mounted on a static RAM and rotated by electrostatics to turn them on and off, are to be exploited in the consumer market by Hayward, California-based Runco International Inc, which describes itself as an industry leader in high quality home theatre video products -that seems to mean that it makes **"projection"** television

sets. The company has an alliance with Texas Instruments Inc and plans to bring the Digital Light Processing system, which uses the micromirrors, to the consumer **"projection"** display market. The **"projection"** technology is said to offer size, weight, and portability advantages over **"liquid"** **"crystal"** **"diodes"**, and more importantly to deliver a better picture, and offer longer illumination life and semiconductor reliability. Runco says its current prototype delivers a very bright image with clarity, high contrast and well-balanced colour. The colour system combines the Digital Micromirror Device with signal processing, memory, software, optical components and an illumination source.

**THIS IS THE FULL TEXT:** Copyright 1995 Apt Data Services Ltd.

WORD COUNT: 161

COMPANY:

\*Texas Instrument  
Runco International

PRODUCT: \*Video Projection Systems (3651203)

EVENT: \*Licensee & Sales Agreements (38)

COUNTRY: \*United States (1USA)

logoff

**LECCION 19**  
**LOCALIZACION DE FABRICANTES DE SUBSTANCIAS QUIMICAS**

**OBJETIVOS:** Localizar Fabricantes de una substancia química dada.

**CARACTERISTICAS:** Nombre del campo(PN=), EXPAND.

**ANTECEDENTES:** Los fabricantes de productos químicos se pueden encontrar en el Merk Index Online<sup>SM</sup> (BD 304) el Pesticide Fact File (BD 306) y el Thomas Register Online (BD 535); esta última además contiene información de aproximadamente 148,000 compañías tanto de gobierno como privadas y más de 500 clases de productos, en esta precisamente buscaremos el cloruro de potasio.

**LA BUSQUEDA.**

Iniciar la BD 535.

Usemos el comando EXPAND, junto con el nombre de campo, PN= Nombre del campo (Product Name) y luego el compuesto deseado (potassium chloride). El resultado es una lista en orden alfabético con los términos relacionados que forman parte del vocabulario controlado. Ahora veamos en la lista y encontraremos la palabra correcta del cloruro de potasio en E3.

Al expandirlo (EXPAND) nos da siempre las primeras 12 referencias en orden alfabético y luego, nos pregunta si queremos continuar. Si es así teclearemos **P** o **PAGE** para continuar.

Seleccionamos E3 para crear el conjunto S1 que contenga la información deseada.

Luego con TYPE y el formato 6 imprimimos los títulos del conjunto S1.

Esto nos muestra todas las compañías donde podemos conseguirlo.

A continuación elegimos la empresa que más nos interese y la imprimimos con el formato 9(formato completo).

Con este formato se desplegarán los datos más relevantes que conforman dicha Compañía, como serían: Nombre de la Cía., Teléfonos, Fax, Localización, Posición del Negocio, Descripción del negocio (Importación, Exportación, Distribución etc.), Número de empleados, Mercado, Administrador, Productos y sus códigos, Distribuidores así como alguna información adicional y referencias de fuentes de investigación.

#### TAREAS DE LA LECCION 19

Existen muchos derivados y clasificaciones de una sustancia química. El mejor camino para evaluar dicha clasificación es expandiendo el nombre de la sustancia para ver si nos es útil. Los estudiantes expandirán el compuesto químico en la BD 535 y luego seleccionarán la estrategia de búsqueda apropiada. Imprimirán el registro correcto con el formato indicado. A continuación se muestra el ejemplo de la Fig.19.2 de un nombre común como silver chloride (cloruro de plata, N° 19) que se expandirá; asimismo se presentará la lista donde el enunciado de la referencia E3 indicará expandirlo una vez más y verlo detalladamente como un ejercicio necesario en las tareas de la lección 19.

Fig.19.2

#### Anexo I: Número 19 de la Tarea

```
?e pn=silver chloride
Ref  Items  Index-term
E1      20  PN=SILVER BULLION
E2       6  PN=SILVER CARBONATE
E3      11  *PN=SILVER CHLORIDE
E4       1  PN=SILVER CLOTH
E5       5  PN=SILVER COINS
E6       9  PN=SILVER CYANIDE
E7       3  PN=SILVER FLUOBORATE
E8       8  PN=SILVER FLUORIDE
E9      12  PN=SILVER IODIDE
E10     13  PN=SILVER NITRATE
E11     1  PN=SILVER NUCLEINATE
E12     20  PN=SILVER OXIDE
        Enter P or PAGE for more

?s e3
S2      11  PN="SILVER CHLORIDE"
```

1. \_\_\_\_\_ COPPER NITRATE
2. \_\_\_\_\_ silver oxide
3. \_\_\_\_\_ cobalt chloride
4. \_\_\_\_\_ calcium choride.
5. \_\_\_\_\_ oxalato de sodio.
6. \_\_\_\_\_ aluminum nitrate
7. \_\_\_\_\_ Aluminum oxide
8. \_\_\_\_\_ potassium periodiate
9. \_\_\_\_\_ potassium permanganate
10. \_\_\_\_\_ Sodium carbonate
11. \_\_\_\_\_ Terpin hydrate
12. \_\_\_\_\_ Barium choride
13. \_\_\_\_\_ nickel nitrate
14. \_\_\_\_\_ sulfur hexafluoride
15. \_\_\_\_\_ Sulfur powder
16. \_\_\_\_\_ Copper foil
17. \_\_\_\_\_ Tomatine
18. \_\_\_\_\_ Warfarin
19. \_\_\_\_\_ Silver chloride
20. \_\_\_\_\_ Niobium chloride

---

**Fig.19.1**  
**CONSULTA EJEMPLO DE LA LECCION 19**

**?b535**

File 535:Thomas Register Online(R) 1995/Oct Q4

Set Items Description

-----

**?e pn=potassium chloride**

Ref	Items	Index-term
E1	12	PN=POTASSIUM CARBONATE
E2	7	PN=POTASSIUM CHLORATE
E3	15	*PN=POTASSIUM CHLORIDE
E4	6	PN=POTASSIUM CHROMATE
E5	8	PN=POTASSIUM CITRATE
E6	1	PN=POTASSIUM COLUMBIUM FLUORIDE
E7	7	PN=POTASSIUM CYANATE

E8 13 PN=POTASSIUM CYANIDE  
E9 10 PN=POTASSIUM FERRICYANIDE  
E10 1 PN=POTASSIUM FERROCYANIDE  
E11 4 PN=POTASSIUM FLUOBORATE  
E12 8 PN=POTASSIUM FLUORIDE  
Enter P or PAGE for more

?s e3

S1 15 PN="POTASSIUM CHLORIDE"

?t s1/6/all

1/6/1  
08999029  
GFS Chemicals, Inc.

1/6/2  
08995860  
All-Chemie, Ltd.

1/6/3  
08983800  
Alfa Chemical Corp.

1/6/4  
08980613  
Alfa Aesar Johnson Matthey

1/6/5  
08974358  
Ashland Chemical Co., Div. of Ashland Oil Inc., Industrial  
Chemicals & Solvents Div.

1/6/6  
08972663  
Morton International, Inc., Morton Salt Div.

1/6/7  
08970786  
Baker, H. J., & Bro., Inc.

1/6/8  
08967586  
Abbott Laboratories

1/6/9  
08964138  
SPI Pharmaceuticals Inc.

1/6/10  
08958559  
American International Chemical, Inc.

1/6/11  
08948048  
Mallinckrodt, Inc.

1/6/12  
08936422  
Kerr-McGee Chemical Corp.

**\*\*ALGUNAS REFERENCIAS FUERON ELIMINADAS\*\***

?t S1/9/7

1/9/7  
08970786  
Baker, H. J., & Bro., Inc.  
595 Summer St. Stamford, CT 06901 USA

TELEPHONE: 213-328-9200  
212-867-0200  
FAX: 203-967-8142 FAX  
212-370-1639

OTHER: BAKERBRO CABLE

LOCATION: U.S.-NORTHEAST

COUNTY: FAIRFIELD

CMSA: 5602 NEW YORK-NORTHERN NEW JERSEY-LONG ISLAND, NY-NJ-CT

ADI: 009 NEW YORK (KINGSTON & POUGHKEEPSIE)

TRADE STATUS:

DISTRIBUTOR

EXPORTER

IMPORTER

DESCRIPTION OF BUSINESS:

THOMAS REGISTER OF AMERICAN MANUFACTURERS

Mfrs., Importers, Exporters, Distributors Of Agricultural Industrial  
Products.

ASSETS: NR (Not Rated)  
NUMBER OF EMPLOYEES: 200

MANAGEMENT:

Mathis, A.L. MARKETING  
Chaitow, Michael A. Mgr. Food Div.

PRODUCTS AND SIC CODES:

ABRASIVES 3291 Mgrs., Importers, Exporters Distributors Of  
Agricultural Industrial Products  
ACID--HYDROFLUORIC 2819 Mfrs., Importers, Exporters Distributors  
Of  
Agricultural Industrial Products  
ACID--PHOSPHORIC 2874  
AMMONIA--AQUA 2842, 2873  
AMMONIUM BICARBONATE 2819  
AMMONIUM NITRATE 2873  
AMMONIUM PHOSPHATE 2874  
AMMONIUM SULFATE 2873  
ASH--SODA 1474, 2812  
BLOOD--DRIED 3841  
CALCIUM PHOSPHATE 2819  
CHEMICALS--AGRICULTURAL 2879  
COPPER SULFATE 2819  
DEODORIZERS--INDUSTRIAL 2842, 3564  
FISH--CANNED, SMOKED, ETC. 2091 (Canned tuna)  
FISH--FROZEN 2092 (Tuna)  
FRUITS--CANNED, DRIED, FROZEN 2033, 2037, 2037 (Canned & frozen)  
MEAT & MEAT PRODUCTS 2011, 2013, 2015, 2032, 2038  
NITROGEN SOLUTIONS 2873  
OILS--CASTOR 2076 Mfrs., Importers, Exporters & Distributors Of  
Agricultural Industrial Products  
OILS--ESSENTIAL 2899  
OILS--FISH 2077  
OILS--HYDROGENATED 2079, 2911  
OILS--SYNTHETIC 2899, 2992  
OILS--TUNG 2076  
POTASSIUM CHLORIDE 2819  
POTASSIUM NITRATE 2819  
POTASSIUM SULFATE 2819  
SODA--CAUSTIC 2812

SODIUM SULFATE 2819  
SODIUM SULFIDE 2819  
SULFUR 2819  
TALLOW--ANIMAL 2077  
UREAS 2873  
VEGETABLES--CANNED, DRIED, FROZEN 2033, 2034, 2037

ADDITIONAL INFORMATION:

FACTORY/PLANT LOCATIONS: (Brs. at Fort Smith & Little Rock, AR;  
Fresno, Laguna Hills, Los Angeles & Stockton, CA; Tampa, FL;  
Atlanta, GA; Chicago, IL; Albertville; Trawick; Sandford)  
YEAR ESTABLISHED: 1950

SOURCE: Thomas Register of American Manufacturers 1995  
( 06548051 ) (TR)  
Thomas Food Industry Register 1995  
( 0400716 ) (TFIR)

**logoff**

## DISCUSIÓN

Este manual describe el lenguaje básico de consulta y los procedimientos de obtención de la información en cada lección. El documento se preparó con minuciosidad, cuidando los detalles originales del manual en inglés, actualizando las citas que se presentan y cubriendo la escénica del contenido. Se trató de ser lo más claro y entendible en el idioma español. El manual tiene la ventaja, entre otras cosas, de ir comparando la consulta con la explicación, dando a conocer los comandos presentados y su utilidad en las diferentes bases de datos. Algunas lecciones incluyen también un resumen del contenido y estructura de las bases de datos.

Ahora bien, cada capítulo lleva un orden secuencial que permite al usuario adentrarse desde una búsqueda sencilla hasta una más completa. En el primer capítulo con el título de "Entrada al sistema, planeación y estrategia de búsqueda" se presentan cinco lecciones que nos muestran una introducción de lo que son las bases de datos, y de cómo se prepara una estrategia de búsqueda con el tema, la frase, el artículo etc.. y una explicación de los comandos principales así como el inicio de una consulta en línea con las palabras clave.

Se explica también en el capítulo primero como restringir los términos de búsqueda, esto es, como ser más precisos en la consulta mediante un conjunto de operadores de proximidad, luego nos muestra los comandos de EXPAND para ver el índice básico listado con los términos ordenados alfabéticamente.

El segundo capítulo con cinco lecciones, y con el título: "Búsqueda y localización de información química" nos enseña cómo obtener datos no bibliográficos, números de registro, fórmulas e información de anillos; esto extraído de la base de datos CHEMSEARCH.

También podemos localizar síntesis y reacciones químicas usando el número de registro y palabras clave, como son los reactivos y las palabras de reacción. Conocimos cómo manejar patentes norteamericanas para obtener una sustancia química, apoyándonos en las referencias ya obtenidas. Luego podemos consultar la enciclopedia química Kirk-Othmer en línea, localizando tablas de información acerca de procesos químicos.

El capítulo tres que se compone de tres lecciones, tiene el título: "Búsqueda simultánea y propiedades físicas y químicas", nos prepara para utilizar bases de datos múltiples, es decir consultar en grupos las BD limitando la cantidad de información con ayuda de sufijos. El Beilstein en línea nos proporciona una valiosa información ya que es específica en reacciones y síntesis orgánicas, empleando datos físicos conocidos. Otra forma de localizar información relacionada con datos físicos y químicos es con las BD Chapman and Hall y el Merck Index Online, que nos da más datos físicos y químicos.

El capítulo cuatro lleva por título: "Información de química analítica, uso del Dialindex y nomenclatura sistemática". Nos explica cómo obtener información sobre Química analítica con los conceptos de analizado (analyte) y matriz (matrix) esta característica es única en el Analytical Abstracts Online. El Dialindex se usa para conocer temas muy variados que no sean familiares a la química y que puedan ayudarnos a escoger las BD según su importancia para el tema con un mínimo de datos. También se verifica un nombre sistemático con el comando expand, para encontrar más datos cuando el nombre sistemático no pueda localizarse.

En el capítulo quinto, compuesto también por tres lecciones, y con el título: "Información comercial, estadística y de fabricantes de productos químicos", nos orienta a obtener información estadística de los últimos dos años de producción y comercio de sustancias químicas, que contiene importación y exportación. Con una cobertura internacional, el IC PROMT da información de las compañías, productos, mercados, y tecnologías. En la BD Thomas Register Online se puede encontrar noticias sobre empresas en la industria química así como su localización y la ubicación de los fabricantes de sustancias químicas.

La gran mayoría de los capítulos contienen ejemplos, que permiten seguir los pasos para una mejor comprensión de cada estrategia, según el tema o la base de datos. Existen también ejercicios como tareas, para obtener habilidad al encontrar la información deseada. Todas las citas vienen en inglés pero su instrucción está en español; esto quiere decir que existe la ventaja de entender mejor los ejemplos.

## CONCLUSIONES

Con el objeto de explicar con detalle y precisión el manejo de la gran cantidad de información química existente en bases de datos internacionales en este Manual, se puede concluir:

El Manual ahorrará trabajo y tiempo al estudiante evitándole hojear docenas de publicaciones para obtener la información necesaria en la consulta a las bases de datos internacionales.

La información obtenida le ayudará al estudiante, tesista, profesor o investigador a tomar mejores decisiones, para la preparación de sus consultas.

La información que obtenga será más completa y específica y algo importante: aumentará la calidad del trabajo.

Dada la diversidad de información relacionada con la química existente en bancos de datos, se puede ampliar o complementar un tema dado.

El Chemical Abstracts y otras fuentes bibliográficas importantes de uso constante en el área química, permiten mantener actualizado al usuario en nuevos desarrollos de su área.

Con las instrucciones dadas en el manual, se resolverán dudas que se le presenten al estudiante durante la búsqueda de información.

Este documento le será útil a todo aquél que busque información relacionada con la química en bancos de datos, en especial a la comunidad académica de la Facultad de Química.

Creemos que despertará interés en el estudiante para el manejo de información del área química, en las bases de datos internacionales.

## BIBLIOGRAFÍA

- 1.- Cooke Ron C., California State University-Chico, Online Searching Curriculum for Chemistry; (Dialog's Classroom Intruccion Program for Chemical Education). 1993 DIALOG Information Services, Inc. A Knight-Ridder Company Worldwide Headquarters; 3460 Hillview Avenue P.O. Box 10010, Palo Alto, CA 94303-0993. U.S.A.
- 2.- Bluesheets Tomo I: Searching DIALOG (The Complete Guide) Files:1-299, Años 1989,1990,1991,1992,1993,1994,1995.
- 3.- Bluesheets Tomo II: Searching DIALOG (The Complete Guide); Files:300-988, Años 1989, 1990, 1991, 1992, 1993, 1994, 1995.
- 4.- DIALOGLINK; (For The Windows Operating System) User's Guide, Vol.I Mayo 1995 Version 2.1
- 5.- Database Catalogue 1995 (DIALOG) Knight-Ridder Information, Inc January 1995
- 6.- Chemical Abstracts (Published by the AMERICAN CHEMICAL SOCIETY); Index Guide 1990, Tomo I A-M (Part 1 of 2 Parts) The Index Guide will be reissued in March 1992
- 7.- Chemical Abstracts (Published by the AMERICAN CHEMICAL SOCIETY); Index Guide 1990, Tomo II N-Z (Part 2 of 2 Parts) The Index Guide will be reissued in March 1992
- 8.- Thesaurus of Engineering and Scientific Terms prepared for United States Department of Defense Office of Naval Research, Project LEX ; in joint operation with Engineers Joint Council 1967

- 9.- Thesaurus of Metallurgical Terms (MATERIALS INFORMATION)  
A-Z, Eighth Edition 1988 ; Institute of Metals, 1  
Carlton House Terrace, London SW1Y5DB, England
  
- 10.- Thesaurus (Food Science and Technology Abstracts);  
INTERNATIONAL FOOD INFORMATION SERVICE, (IFIS) SEPTEMBER  
1981.
  
- 11.- Davies Peter, (edition) THE AMERICAN HERITAGE DICTIONARY  
of the English Language; Based on the hardcover edition,  
William Morris, Edit. Published by DELL PUBLISHING CO.,  
INC. Dag Hammarskjöld ,plaza, New York, N.Y.10017  
Copyright c 1980.