

A INTERNET COMO FONTE DE INFORMAÇÃO BIBLIOGRÁFICA EM QUÍMICA

Anderson Rouge dos Santos, Caio Lima Firme* e José Celestino Barros

Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 21941-972 Rio de Janeiro – RJ, Brasil

Recebido em 29/5/07; aceito em 10/8/07; publicado na web em 26/2/08

INTERNET AS A SOURCE OF BIBLIOGRAPHIC INFORMATION IN CHEMISTRY. The internet is an important tool for obtaining information. It offers vast amounts of information ranging from basic to advanced, from general to specific. Nevertheless, its quality cannot be classified or graded. Furthermore, some technical and/or specific information may not be available for free. This work primarily shows the great utility of the internet for getting suitable information in Chemistry and emphasizes open access and quality sites in Chemistry. It directs the reader towards many useful sites within some branches of Chemistry that provide powerful tools of research and study that may not be obtained easily at a library.

Keywords: chemists' education; e-learning; bibliographical research.

INTRODUÇÃO

O acelerado avanço da ciência e tecnologia nas últimas décadas promoveu um enorme crescimento da quantidade de informação disponível. Este crescimento, aliado ao surgimento e à popularização da rede mundial de computadores ou internet, demandou ferramentas eficientes de busca destas informações geradas¹. Entretanto, a internet, por si só, não é capaz de atribuir qualidade aos materiais obtidos durante uma pesquisa bibliográfica². Portanto, cabe ao usuário ter a habilidade de escolher os materiais mais pertinentes à informação requerida.

Um estudo da Comunidade Européia (CE) mostrou que o custo das revistas científicas aumentou 200-300% no período entre 1975-1995³, o que tem intensificado o debate ao acesso livre à informação científica (“Open-Access Initiative”)⁴. Em uma primeira manifestação, os Institutos Nacionais de Saúde (NIH) dos EUA pretendem disponibilizar livre acesso a todas as publicações das pesquisas providas pelo seu fundo⁴. Amparados pelo estudo da CE, mais de 12.000 acadêmicos, incluindo dois vencedores do prêmio Nobel e 163 pesquisadores brasileiros, assinaram uma petição exigindo que a Comunidade Européia disponibilizasse via internet os resultados de pesquisas acadêmicas custeadas por verba pública⁵. Na medicina, outro exemplo desta manifestação é a revista científica de livre acesso e alto índice de impacto “Public Library of Science” (PLOS), uma biblioteca de livre acesso ao público^{6,7}.

Há uma tendência de aumento da disponibilidade dos artigos de livre acesso⁴, visto que eles são mais imediatamente reconhecidos e citados que os artigos de acesso restrito⁸. Wren⁴ observou que um terço dos artigos científicos publicados em revistas de alto fator de impacto podem ser encontrados usando programas de busca pela internet.

Alguns artigos sobre a utilização da internet no ensino e na prática das ciências são encontrados na literatura, entretanto, o assunto foi sempre abordado de forma e natureza diferentes a do presente trabalho. Por exemplo, no artigo de Pellizon e colaboradores⁹, são encontradas citações de alguns sítios e bases de dados na área da saúde. Rzepa comentou sobre a evolução histórica da internet como ferramenta para química computacional¹⁰. Geldenhuys e colabora-

dores listaram uma tabela de programas para modelagem molecular que estão disponíveis livremente na internet¹¹. Shirokova e Kolotov citaram importantes sítios na área de Eletroquímica¹², entre eles, o “Electrochemical Science and Technology Information Resource”¹³, que contém um dicionário e uma enciclopédia de tópicos relacionados à eletroquímica e que são de livre acesso. Heller traçou um breve histórico da internet e recursos da informação e discutiu as perspectivas da internet no mundo acadêmico¹⁴. Wiggins¹⁵ e Bachrach¹⁶ citaram as ferramentas da internet que são importantes para a Química, enquanto Schranz relacionou os sítios mais importantes de Química¹⁷, sem dar importância aos sítios de livre acesso. Lancashire comentou sobre sítios de Química Analítica que podem ser usados no ensino da Química¹⁸. No Brasil, Ferreira tratou das questões envolvendo internet e o ensino da Química¹⁹, enquanto Ribeiro elaborou um sítio *web* para apoio à disciplina de laboratório de química analítica²⁰. A abordagem mais próxima ao presente trabalho foi relatada por Murov²¹, porém com uma lista reduzida de 5 sítios, considerados pelo autor os mais importantes no aprendizado da química.

Este trabalho teve como objetivo apresentar aos estudantes de Química e áreas afins, tanto de graduação quanto de pós-graduação, as fontes de aquisição de informação via internet como ferramenta complementar à pesquisa. Além de fornecer uma lista de sítios importantes, este trabalho visa incentivar a pesquisa bibliográfica utilizando a internet. Os autores não defendem a substituição dos meios convencionais e incentivam o investimento em bibliotecas tradicionais como caminho ao desenvolvimento. Este trabalho ainda alerta que nem toda informação disponível na internet é confiável.

O USO DE PERIÓDICOS COMO FONTE PRINCIPAL DE INFORMAÇÃO

Dentre todos os meios de informação disponíveis, os periódicos indexados apresentam-se como o meio de informação mais utilizado no meio acadêmico²². Este tipo de material apresenta as informações mais específicas e detalhadas sobre um determinado assunto. Os livros acadêmicos, por sua vez, abordam geralmente apenas a informação básica sobre um determinado assunto.

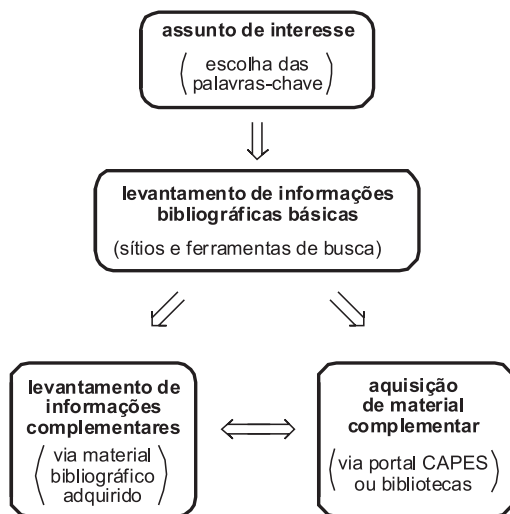
Nem todo este material é disponível via internet, mas atualmente mais de 180 instituições pertencentes a todos os estados do

*e-mail:cfirme@iq.ufrj.br

país possuem acesso on-line aos serviços promovidos pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), através do sítio chamado **Portal Periódicos** (<http://www.periodicos.capes.gov.br/>)²³. Este portal possui vários links referentes às mais diversas bases de dados, dividindo-se em links para acesso a “textos completos”, “resumos” e “patentes, estatísticas, livros e outras fontes”. Dentre estes, o link de acesso aos resumos traz importantes bases de dados para a pesquisa científica, que serão discutidas no item a seguir.

A ABORDAGEM SISTEMÁTICA NA BUSCA DE INFORMAÇÕES

A busca sistemática de informações científicas é uma atividade indispensável à realização da pesquisa. Esta atividade fornece uma visão global sobre o estado da arte referente ao campo de atuação abordado. Permite ao pesquisador obter uma noção clara sobre a influência de sua pesquisa no desenvolvimento do referido campo. Além disso, evita a realização de atividades de pesquisa já desenvolvidas. O Esquema 1 apresenta uma abordagem passível de ser adotada em atividades de levantamento bibliográfico.



Esquema 1. Etapas sistemáticas envolvidas no processo de levantamento bibliográfico

A escolha correta das palavras-chave constitui uma parte fundamental do processo. O uso de palavras-chave muito abrangentes pode dificultar o levantamento bibliográfico (*e.g.* biodiesel), com exceção de áreas de pesquisa pouco exploradas. Faz-se necessário então o uso de operadores *booleanos* (*e*, *ou*) aliado a palavras mais restritivas (*e.g.* biodiesel e catalisadores; biodiesel e catálise heterogênea) e a utilização de frases exatas. O conhecimento dos termos técnicos em inglês é fundamental, visto que as informações científicas são divulgadas principalmente em língua inglesa.

Um outro fator que afeta a qualidade da pesquisa bibliográfica é a escolha da base de dados a ser utilizada na busca de material básico de leitura. A eficácia desta busca inicial depende da base de dados utilizada. O **Portal Periódicos** oferece uma ampla lista de bases de dados, através do link “resumos”, organizada por áreas do conhecimento. A Tabela 1 mostra os endereços de importantes sítios de busca utilizados em Química e áreas afins.

O sítio **Web of Science**²⁴, fornecido pela “ISI Web of Knowledge”, contém cinco bases de dados que reúnem informações de milhares de jornais especializados em todas as áreas da

Tabela 1. Importantes bases de dados utilizadas para pesquisa na área de Química e afins

nome	endereço
Web of Science*	http://www.isiknowledge.com
Scopus*	http://www.scopus.com/
Engineering Village*	http://www.engineeringvillage2.org
Science Direct*	http://www.sciencedirect.com/
PUBMED (via national library of medicine)	http://www.ncbi.nlm.nih.gov/entrez/query.fcgi?DB=pubmed
Scirus	http://www.scirus.com/
Scholar Google	http://scholar.google.com.br/
ChemWeb	http://www.chemweb.com/

* Bases de dados de acesso permitido somente via **Portal Periódicos**

pesquisa (três dessas especializadas na área da Química). Este sítio somente pode ser acessado pelas instituições com acesso ao **Portal Periódicos**, através do link “Web of Science” dentro do sítio da “ISI Web of Knowledge”.

A base de dados **Scopus** contém mais de 15.000 periódicos de mais de 4.000 editoras, incluindo 500 jornais de acesso livre, 28 milhões de “abstracts”, 13 milhões de patentes, 250 milhões de páginas da web relacionadas à informação científica, até a presente data. Assim como a Web of Science, esta base é de acesso restrito às instituições participantes do **Portal Periódicos**, ou então, via assinatura particular.

O sítio **Engineering Village** é uma ferramenta de busca de referências em Química e Engenharia Química. Também é de acesso restrito às instituições participantes do **Portal Periódicos**.

A base de dados **Science Direct** possui, até a presente data, mais de 8 milhões de artigos completos das revistas científicas da Editora Elsevier. Por apresentar apenas os artigos desta editora, faz-se necessário complementar as pesquisas em outras bases de dados. Além disso, certas bases de dados, como a “Web of Science”, já englobam os artigos da “Science Direct”.

Existem bases de dados alternativas para aqueles que não possuem acesso ao **Portal Periódicos**. Com essas bases é possível obter informações científicas através de qualquer computador conectado à internet. Destaca-se o banco de dados **PubMed**, um serviço da U.S. National Library of Medicine, que inclui mais de 16 milhões de publicações da **MEDLINE** e de outros periódicos relacionados à área de saúde, desde a década de 50.

O **Scirus** é outra base que permite acesso gratuito aos abstracts da “Science Direct” e outras fontes. Porém, apesar de incluir links para acesso a artigos completos, estes só podem ser acessados pelas instituições participantes do **Portal Periódicos**.

A base **Scholar Google** também se mostra uma boa fonte de busca de informação científica, permitindo, por exemplo, acesso a resumos de artigos publicados pela “Royal Society of Chemistry” da Inglaterra. O sítio **ChemWeb** é um portal de informações em química que disponibiliza um banco dados de “abstracts”, também englobando informações da “Science Direct”.

A busca de informações científicas nas bases de dados pode permitir o acesso ao artigo completo ou somente ao abstract. Como critério sistemático de busca bibliográfica ou na falta de disponibilidade de uma base de dados abrangente, é recomendado que o usuário retire informações bibliográficas a partir de material preliminar disponível (como revisões, livros, ou artigos). O cruzamento das referências obtidas em fontes diferentes pode, a princípio,

mostrar a relevância daqueles artigos.

A BUSCA POR ARTIGOS COMPLETOS EM PERIÓDICOS

Após a busca básica de informações, feita através das bases de dados, o interessado precisa obter o material completo (o artigo inteiro) para que sua pesquisa bibliográfica possa se completar. Existem duas maneiras de obter os artigos: via eletrônica ou via bibliotecas.

Há tempos que alguns pesquisadores defendem o livre acesso à informação científica (“Open Access Initiative”). Por conseguinte, algumas editoras como a “Royal Society of Chemistry” (RSC) (<http://pubs.rsc.org>) disponibilizam gratuitamente parte de seu conteúdo de suas publicações. A Tabela 2 mostra importantes sítios relacionados à busca de artigos científicos completos de acesso on-line livre ou restrito.

Tabela 2. Sítios relacionados à busca de artigos completos de periódicos de acesso on-line livre e restrito

Nome (acesso)	endereço
Portal Periódicos – CAPES (restrito) ^a	http://www.periodicos.capes.gov.br/
Portal de acesso livre – CAPES (livre)	http://acessolivre.capes.gov.br/
Directory of Open Access Journals (livre)	http://www.doaj.org/
Scientific Electronic Library Online – SciELO (livre)	http://www.scielo.br/
Instituto Brasileiro de Informação em Ciência e Tecnologia – IBICT (livre) ^b	http://www.ibict.br/
Catálogo Coletivo Nacional – CCN / IBICT	http://www.cen.ibict.br/ccn_consulta
Programa de Comutação Bibliográfica – COMUT / IBICT (restrito) ^c	http://www.ibict.br/secao.php?cat=comut

(a) Acesso a artigos completos somente por meio de assinatura; (b) clicar em “Programas” e depois em “Acesso livre à informação científica”; (c) obtenção de artigos completos, por meio de pagamento

O **Portal Periódicos** traz uma ampla lista de periódicos, com mais de 10 mil títulos, abrangendo todas as áreas do conhecimento. Além disso, o **Portal Periódicos** reuniu informações sobre fontes bibliográficas de acesso gratuito na internet e elaborou o **Portal de Acesso Livre**, que disponibiliza uma lista de todos os periódicos de acesso livre, bases de dados referenciais com resumos, patentes, teses e dissertações, estatísticas e outras publicações de acesso gratuito na internet.

Uma lista completa de periódicos de acesso livre é disponibilizada também no **Directory of Open Access Journals**. O DOAJ permite o acesso a jornais de sociedades químicas da América Latina, Ásia e Leste Europeu, expandindo o horizonte das pesquisas além do circuito tradicional EUA - Europa Ocidental.

O portal **SciELO** é uma biblioteca eletrônica contendo uma coleção selecionada de periódicos científicos brasileiros. Permite acesso gratuito aos artigos dos periódicos cadastrados nesta biblioteca, incluindo a *Química Nova* e o *Journal of the Brazilian Chemical Society*.

Na falta de acesso eletrônico aos artigos completos, as biblio-

otecas tornam-se uma importante alternativa. O sítio do **Instituto Brasileiro de Informação em Ciência e Tecnologia** permite o acesso a duas importantes fontes de acesso a artigos completos, o **Catálogo Coletivo Nacional (CCN/IBICT)**²⁵ e o **Programa de Comutação Bibliográfica (COMUT/IBICT)**²⁶. O CCN informa sobre a disponibilidade do periódico de interesse nas bibliotecas nacionais, assim como os volumes e números disponíveis dos mesmos. Assim, o usuário pode saber onde encontrar o artigo de interesse. Já o COMUT é uma ferramenta que disponibiliza artigos localizados em regiões distantes da região do usuário. Com este serviço, o usuário pode dispor do artigo de interesse por meio de postagem e/ou por correio eletrônico, feito pela biblioteca de sua instituição. Para isso, basta o usuário se cadastrar e comprar bônus do COMUT.

INFORMAÇÕES GERAIS EM QUÍMICA

O conhecimento das fórmulas, nomenclatura, propriedades físicas e físico-químicas das substâncias é de extrema importância no aprendizado dos estudantes de graduação e de pós-graduação. Na falta de obras de referência (“Handbooks”) ou livros especializados, a lista de sítios apresentada na Tabela 3 pode ser útil na obtenção de informações gerais em Química.

Notas de aula de universidades

Algumas universidades e grupos de pesquisa disponibilizam materiais de suas aulas para a comunidade. Isso representa uma valiosa complementação aos livros didáticos e uma excelente ferramenta de estudo.

Destaque para o grupo de David Evans (<http://www2.lsddiv.harvard.edu/labs/evans/>) e outros cursos disponibilizados pela Universidade de Harvard (<http://webdocs.registrar.fas.harvard.edu/courses/ChemistryandChemicalBiology.html>), Química Virtual da Universidade de Oxford (<http://neon.chem.ox.ac.uk/vrchemistry/>) e os cursos disponibilizados pelo MIT (<http://www.ocw.cn/CowWeb/index.htm>). O sítio **Organic Chemistry Info** (<http://www.chem.wisc.edu/areas/organic/index-chem.htm>) do Departamento de Química da **Universidade de Wisconsin-Madison**, citado anteriormente, também se mostra uma fonte valiosa de informação, compilando informações sobre reações, dados físicos, físico-químicos e espec-troscópicos, entre outras.

No Brasil, destaque para o Núcleo de Apoio ao Ensino de Química da Universidade de Caxias do Sul (<http://hermes.uces.br/ccet/defq/naeq/>) e para o Laboratório de Produtos Naturais do Instituto de Química da UFRJ (PiLAB: <http://server2.iq.ufrj.br/~angelo/pilab>), que disponibilizou gratuitamente os artigos publicados por membros do laboratório, o que condiz com as iniciativas mundiais de livre acesso à informação científica.

Busca de informações de patentes

Patentes representam uma valiosa fonte de informação científica, raramente explorada nos meios acadêmicos. Os sítios de busca mais conhecidos são o **United States Patent and Trademark Office** (USPTO: <http://www.uspto.gov/>) e o **European Patent Office** (espacenet: <http://ep.espacenet.com/>), permitindo acesso ao documento original. O sítio do **Instituto Nacional da Propriedade industrial** (INPI: <http://www.inpi.gov.br/>) também permite buscas, porém não permite acesso ao documento original. A forma de apresentação das patentes (uma página em formato pdf por vez) torna difícil sua leitura, entretanto, alguns sítios como o **FreePatentsOnline** (<http://www.freepatentsonline.com/>), **Patent**

Tabela 3. Informações gerais em Química

Nome	Endereço eletrônico	Comentário
Tabelas Periódicas		
ACS Periodic Table	http://center.acs.org/periodic/tools/PT.html	Interativa, contém gráficos de propriedades físico-químicas.
CRC Press Periodic Table	http://www.chemnetbase.com/periodic_table/per_table.html	Série de informações textualizadas.
Web Elements	http://www.webelements.com/	Fotos, vídeos e informações textualizadas.
Biological Periodic Table	http://umbbd.ahc.umn.edu/periodic/spiral.html	Descrição dos elementos de importância biológica.
Nuclear Periodic Table	http://www.radiochemistry.org/periodictable/NuclearPeriodicTable.html	Informações sobre radioquímica dos elementos.
Fórmulas, Terminologia e Nomenclatura em Química		
The Golden Book IUPAC	http://goldbook.iupac.org	Compêndio de Terminologia Química da IUPAC.
Cheminfo Indiana University (SIRCh)	http://www.indiana.edu/~cheminfo/ca_cnfs.html	Recomendações da IUPAC segundo classes de compostos. Seleção de links sobre regras de nomenclatura.
Chemical Acronyms Database e-compound	http://www.oscar.chem.indiana.edu/cfdocs/libchem/acronyms/acronymsearch.html http://www.ecompound.com/Reaction%20reference/reaction_index.htm	Identificação de fórmulas estruturais a partir de abreviaturas químicas.
University of Wisconsin-Madison IUPAC e ACD Labs	http://www.chem.wisc.edu/areas/organic/index-chem.htm http://www.iupac.org/nomenclature/index.html	Nomenclatura oficial para uma estrutura desenhada.
MDL AutoNom	http://www.mdli.com/downloads/downloadable/index.jsp	Ferramenta de nomenclatura IUPAC. É oferecido gratuitamente no site da Elsevier MDL.
Informações via Fornecedores de Produtos Químicos		
Aldrich	http://www.aldrich.com	Propriedades físicas e químicas dos compostos, fórmula estrutural ou nomenclatura IUPAC além do preço dos produtos. Possuem ainda ferramentas de busca por estruturas.
Acros	http://www.acros.be	
Lancaster	http://www.lancastersynthesis.com	
ChemExper	http://www.chemexper.com/	Portal para buscas de produtos químicos comerciais.
ICIS Search	http://www.icis.com/Search	
Cheminfo Indiana University	http://www.indiana.edu/~cheminfo/ca_prsu.html	Lista de fornecedores de produtos químicos.
Propriedades Físico-Químicas		
NIST Webbook	http://webbook.nist.gov/chemistry/	Ferramenta para busca de propriedades físicas de substâncias.
NIST e IUPAC Organic-Chemistry.org	http://srdata.nist.gov/solubility/ http://www.organic-chemistry.org/prog/peo/index.html	Informações de solubilidade dos compostos. Cálculo de propriedades moleculares como LogP e toxicidade.
Pubchem	http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/	Contém propriedades químicas e toxicidade dos compostos químicos.
SOLV-DB	http://solvdb.ncms.org/solvdb.htm	Propriedades físicas de solventes.
NIST Webbook	http://webbook.nist.gov/chemistry/acid-ser.html	Pesquisa de dados de uma espécie pelo seu valor de acidez.
IUPAC Kinetics Data	http://www.iupac-kinetic.ch.cam.ac.uk/	Dados cinéticos de reações na atmosfera terrestre.
Protein Data Bank (PDB)	http://www.rcsb.org/	Estruturas cristalográficas de proteínas.
Heterocycles web edition	http://data.heterocycles.jp/	Produtos naturais e heterociclos.
University of Wisconsin-Madison	http://www.chem.wisc.edu/areas/organic/index-chem.htm	Dados de pKa em água e DMSO de uma série de compostos.
SPARC	http://ibmlc2.chem.uga.edu/sparc/	Simulação de pKa.
Mark Earll's Analytical Chemistry Site	http://www.raell.demon.co.uk/chem/calcs/index.htm	Cálculos como logP, pKa ou CHN.

Tabela 3. continuação

Nome	Endereço eletrônico	Comentário
Propriedades Físico-Químicas		
Chemexper	http://www.chemexper.com/	Propriedades físicas de um composto a partir da sua nomenclatura.
Chemfinder	http://chemfinder.cambridgesoft.com/	Propriedades físicas e químicas além de base de dados de procedimentos de reações químicas.
Cheminfo	http://www.cheminfo.org/	Propriedades físicas, químicas e espectros de algumas substâncias.
Dados Espectroscópicos e Espectrométricos		
Introduction to Spectroscopy (Michigan State University)	http://www.cem.msu.edu/%7Ereusch/VirtualText/Spectrpy/spectro.htm#contnt	Textos introdutórios sobre as principais técnicas espectroscópicas utilizadas em química orgânica, acompanhados de ilustrações e tabelas didáticas.
WebSepetra	http://www.chem.ucla.edu/%7Ewebspectra/	Explicações das técnicas de RMN e de IV, além de exercícios de determinação estrutural, todos com respostas e acompanhados por espectros de RMN.
Spectral Database for Organic Compounds (SDBS)	http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_index.cgi?lang=eng	Base de dados espectroscópicos e espectrométricos.
The Sadtler Spectral Handbooks (Bio-Rad Laboratories)	http://www.knowitall.com/academic/welcome.asp	Handbook on-line de espectros de IV, RMN ¹ H e ¹³ C de compostos orgânicos. As substâncias são agrupadas por grupos funcionais, e os espectros são acompanhados de interpretação.
IR correlations	http://www.vidrine.com/vcorr.htm	Série de tabelas contendo as bandas de absorção na região do IV de vários grupos funcionais; também informam os tipos de estiramento, axial ou angular.
Mass Spectrometry (Organic Chemistry Resources Worldwide)	http://www.organicworldwide.net/mass.html	Textos sobre teoria e interpretação de espectros de massas. Possui fragmentações dos principais grupos funcionais e tabela de íons e fragmentos usualmente observados.
The Basics of NMR NMR Spectroscopy	http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/ http://bouman.chem.georgetown.edu/nmr/syllabus.htm	Cursos básicos de espectroscopia de RMN.
Proton and C-13 Chemical Shifts	http://www.chem.wisc.edu/areas/reich/Handouts/nmr-h/hdata.htm	Banco de dados contendo deslocamentos químicos em RMN ¹ H e/ou ¹³ C de diversos grupos funcionais.
NMR Solvents	http://www.chem.wisc.edu/areas/reich/Handouts/nmr/NMR-Solvents.htm	Tabela contendo os deslocamentos químicos em espectros de RMN ¹ H e ¹³ C dos solventes utilizados em RMN.
NMR Shift DB	http://www.nmrshiftdb.org	Banco de dados de espectros de RMN submetidos pelos próprios usuários das técnicas.
www NMR Resources	http://www.chem.ucsb.edu/~gerig/chem154a-254a-2004/resources.htm	Lista vários sítios relativos à RMN, como tutoriais e bancos de espectros, entre outros.
Modelagem Molecular e Química Quântica		
John Von Neumann Institut ür Computing	http://www.fz-juelich.de/nic-series/	Conjunto de informações sobre modelagem molecular provenientes de palestras na área de química e física computacional.
Gaussian 03W (Gaussian)	http://www.gaussian.com/g_ur/g03mantop.htm	Contém uma série de informações básicas sobre vários tópicos da química computacional com citações de referências bibliográficas.
Overview of Topics in "Computational Chemistry" (LMU München)	http://www.cup.uni-muenchen.de/oc/zipse/compchem/topics.html	Tutorial simplificado do programa Gaussian 03W, bem como informações básicas de química computacional. Encontram-se informações sobre arquivos de entrada para os mais diversos cálculos.
Shodor Education Foundation	http://www.shodor.org/succeed/compchem/	Informações e slides de palestras sobre química computacional.
Computational Chemistry for Chemistry Educators	http://www.computationalscience.org/ccce/	Slides sobre vários tópicos de química quântica.
A Brief Review of Elementary Quantum Chemistry	http://vergil.chemistry.gatech.edu/notes/quantrev/quantrev.html	Contém breve revisão da química quântica elementar.

Tabela 3. continuação

Nome	Endereço eletrônico	Comentário
Modelagem Molecular e Química Quântica		
Center for Computational Chemistry at the University of Georgia	http://www.ccc.uga.edu/lec_top/	
Computational Chemistry Comparison and Benchmark Database	http://srdata.nist.gov/cccbdb/	Encontram-se dados experimentais e calculados de várias moléculas.
Reações e Metodologias de Síntese ^a		
Organic Syntheses	http://www.orgsyn.org/	Ferramenta para a busca de reações orgânicas e metodologia de síntese.
Synthetic Pages	http://www.syntheticpages.org/	Base de dados sobre síntese orgânica.
Spresi	http://www.spresi.com/	Valioso instrumento de busca de reações. Pode utilizar a estrutura de reagentes e produtos como método de busca. Apesar de ser restrito aos assinantes, permite teste gratuito durante curto período.
Web Reactions	http://www.webreactions.net/	Busca por reações utilizando estruturas.
Synthesis Reviews	http://www.thieme-chemistry.com/thieme-chemistry/journals/info/freedata/index.shtml	Base de dados de revisões em síntese orgânica publicada em diversos jornais.
McGarvey Lab Organic Synthesis Group (University of Virginia)	http://www.faculty.virginia.edu/mcgarveylab/Carbsyn/	Banco de dados de procedimentos experimentais utilizando carboidratos ou aminoácidos.
Al's Notebook	http://www.alsnotebook.com/	Metodologias de síntese segundo a função orgânica modificada.
e-compound	http://www.ecompound.com/Reaction%20reference/Lab%20rat%20procedures.htm	
Not Voodoo Chemistry (University of Rochester)	http://www.chem.rochester.edu/~nvd/	Possui vários protocolos de síntese e técnicas de laboratório.
ChemLin (Schutzgruppen)	http://www.chemlin.de/chemie/schutzgruppen.htm	Sítios sobre grupos de proteção utilizados em síntese orgânica.
Organic Chemistry Portal	http://www.organic-chemistry.org/protectivegroups/	
e-compound	http://www.ecompound.com/Reaction%20reference/common_protection_group.htm	
Classic Organic Reactions	http://www.chempensoftware.com/organicreactions.htm	Reações por nome.
Reaction Index	http://www.pmf.ukim.edu.mk/PMF/Chemistry/reactions/rindex.htm	

a) Alguns dos sítios citados exigem um registro, que pode ser feito sem problemas, outros exigem um plug-in **Java**²⁷, ou então, o plug-in para desenho de estruturas **ChemDraw Net**²⁸. Os plug-in's também são necessários para outros sítios, e não somente para os relacionados à síntese. Embora sejam apresentados alguns protocolos de síntese, aconselha-se recorrer às publicações originais para conduzir uma determinada reação química.

Fetcher (<http://free.patentfetcher.com/Patent-Fetcher-Form.php>) e o **Pat2pdf** (<http://www.pat2pdf.org/>) permitem o acesso de todo o arquivo da patente e, até mesmo, o download no formato pdf. Uma recente publicação trata com detalhes da importância e formas de aquisição de patentes (impresso ou digital), e por isso, o presente artigo não se alonga neste tópico²⁹.

A continuidade do acesso à informação frente ao dinamismo da Internet

Nas últimas seções foram apresentadas ferramentas úteis ao aprendizado e ao exercício da química. Entretanto, o dinamismo da internet e sua constante evolução podem frustrar seu usuário devido à retirada de alguns sítios ou à mudança de seus endereços.

Uma boa solução para este problema é a utilização dos conceitos apresentados no tópico "Abordagem Sistemática na Busca de Informações". Assim, o usuário pode encontrar sítios que não foram citados neste texto, além de buscar sítios que porventura tenham mudado de endereço na Internet.

Por exemplo, o sítio de Química Nova pode facilmente ser encontrado pelo Google colocando-se "Química Nova" (é facultativa a utilização de letras maiúsculas e do acento) em sua busca. Colocando-se "reduction Myers" encontra-se a apostila de reduções em síntese orgânica do curso de Andrew Myers, da Universidade de Harvard; as patentes em pdf podem ser encontradas buscando "patent pdf" e, por fim, colocando-se "dimethylamine pKb" encontra-se o sítio http://home.planet.nl/~skok/techniques/laboratory/pka_pkb.html que confere o valor de 10,73 para o pKb solicitado.

CONCLUSÃO

A internet contém uma enorme quantidade de informação relacionada à Química. Contudo, ela possui problemas de confiabilidade da informação disponibilizada ou mudança de endereços dos sítios. Por outro lado, foi possível reunir uma família de endereços eletrônicos que contribuem para facilitar a busca de informações em Química. Além disso, foi ressaltada a importância da formação de uma cultura de pesquisa pela internet complementar ao processo tradicional de pesquisa bibliográfica.

A internet permite maior acesso dos indivíduos à informação científica, sendo seu conteúdo disponível a todos os estudantes e profissionais a qualquer momento. O domínio da pesquisa bibliográfica complementar via internet diminui o tempo necessário para se obter informação relacionada à Química e amplia a quantidade de informação disponível.

REFERÊNCIAS E NOTAS

1. Moran, J. M.; *Ci. Inf.* **1997**, *26*, 146.
2. Butler, D.; *Nature* **2006**, *439*, 516.
3. http://ec.europa.eu/research/science-society/pdf/scientific-publication-study_en.pdf, acessada em Janeiro 2007.
4. Russo, G.; *Nature* **2006**, *441*, 915; Wren, J. D.; *BMJ* **2005**, *330*, 1128.
5. Wray, R.; "Nobel prize winners join calls to open research to all", *The Guardian*, 30 janeiro de 2007, <http://business.guardian.co.uk/story/0,,2001554,00.html>, acessada em Janeiro 2007.
6. Butler, D.; *Nature* **2006**, *441*, 914.
7. <http://www.plos.org/>, acessada em Dezembro 2006.
8. MacCallum, C. J.; Parthasarathy, H.; *PLoS Biol.* **2006**, *4*, 661.
9. Pellizon, R. F.; Población, D. A.; Goldenberg, S.; *Acta Cir. Bras.* **2003**, *18*, 493.
10. Rzepa, H. S.; *J. Mol. Struct. (Theochem)* **1997**, *27*, 398.
11. Geldenhuys, W. J.; Gaasch, K. E.; Watson, M.; Allen, D. D.; der Schyf, C. J. V.; *Drug Disc. Today* **2006**, *11*, 127.
12. Shirokova, V. I.; Kolotov, V. P.; *J. Anal. Chem.* **2001**, *56*, 602.
13. <http://electrochem.cwru.edu/estir/>, acessada em Janeiro 2007.
14. Heller, S. R.; *J. Chem. Inf. Model.* **1996**, *36*, 205.
15. Wiggins, G.; *J. Chem. Inf. Model.* **1998**, *38*, 956.
16. Bachrach, S. M.; *Quim. Nova* **1999**, *22*, 273.
17. Schranz, H. W.; *Chem. Aust.* **1998**, *9*.
18. Lancashire, R. J.; *Anal. Chim. Acta* **2000**, *420*, 239.
19. Ferreira, V. F.; *Quim. Nova* **1998**, *21*, 780.
20. <http://www4.fc.unesp.br/abrapec/venpec/atas/conteudo/artigos/3/pdf/p162.pdf>, acessada em Janeiro 2007.
21. Murov, S.; *J. Chem. Educ.* **2001**, *78*, 1429.
22. Kuramoto, H.; *Ci. Inf.* **2006**, *35*, 91.
23. <http://www.periodicos.capes.gov.br/portugues/documentos/ies/iesAlfa.xls>, acessada em Dezembro 2006.
24. <http://portal.isiknowledge.com/portal.cgi?DestApp=WOS&Func=Frame>, acessada em Dezembro 2006.
25. http://www.ct.ibict.br:82/ccn/owa/ccn_consulta, acessada em Dezembro 2006.
26. <http://comut.ibict.br/comut/do/index?op=filtroForm>, acessada em Dezembro 2006.
27. <http://www.java.com/en/download/index.jsp>, acessada em Janeiro 2007.
28. <http://scistore.cambridgesoft.com/software/product.cfm?pid=4011>, acessada em Janeiro 2007.
29. Oliveira, L. G.; Suster, R.; Pinto, A. C.; Ribeiro, N. M.; Silva, R. B.; *Quim. Nova* **2005**, *28*, S36.