

KONEC DVOU CHEMICKÝCH LEGEND – TIŠTĚNÝCH CHEMICAL ABSTRACTS A BÁZÍ DAT BEILSTEIN A GMELIN

JAROSLAV ŠILHÁNEK

*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
jaroslav.silhanek@vscht.cz*

Především lehce naznačuji, že hlavně v druhém případě se zatím jedná o ukončení oněch po století existujících chemických pojmů a už spíše legend a nikoliv o ukončení možností pracovat s nashromážděnými daty. Ale i tak jde o ukončení něčeho, co znali generace chemiků na celém světě. Před krátkou dobou jsem na tomto místě připomněl stoleté výročí referátového časopisu a dnes informační služby, Chemical Abstracts¹ a dnes informuji chemickou veřejnost, že onen referátový časopis, který vycházel nejdříve každý měsíc a nakonec každý týden v prakticky neměnné grafické podobě (viz obr. 1) více než oněch 100 let, přesně 103 let, snad jen v postupně větším formátu, v dvousloupcovém uspořádání, s menším typem písma a na výrazně tenčím papíru, definitivně skončil svou existencí a v prosinci roku 2009 vyšlo jeho poslední číslo. Je pravdou, že tištěná verze byla už v devadesátých letech na našich univerzitách a ústavech nahrazena elektronickou verzí a tak při příležitosti nedávného Publika organické chemie na VŠCHT jsem pro jistotu vzal jedno starší číslo na ukázkou, protože už řada mladších kolegů jej nikdy neviděla, natož aby v něm něco hledala.

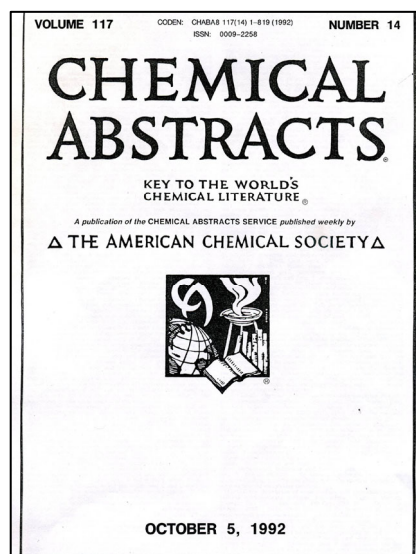
S velkou pravděpodobností CAS zpracuje a zveřejní detailní statistické údaje za oněch uplynulých 103 letech existence tištěných sešitů, obdobně, jako jsou zveřejněny statistiky za 100 let existence². Předběžně ale můžeme uvést, že za celé období bylo zpracováno více než 28 milionů abstraktů vědeckých článků a patentů, ale protože v případě patentů jsou evidovány i všechny patenty a přihlášky v dalších zemích, tedy členy patentových rodin, je celkový počet zpracovaných a tím evidovaných a tudíž naležitelných dokumentů v tištěných svazcích cca 36 milionů. Celkové počty stránek jdou pochopitelně do astronomických čísel, pro ilustraci ale uvedme, že ve „stoletém roce“ 2007, měly všechny vydané tištěné svazky jednotlivých čísel a samostatných svazků rejstříků v tomto roce celkem 391 079 stránek. A ještě více šokující je fakt, že z tohoto počtu bylo jen 120 036, tedy 30,7% stránek abstraktů, ale 271 043 stránek rejstříků, což představuje 69,3%. Rozsah rejstříků je ještě názornější na příkladu tzv. Collective Indexes, tedy 5tiletých rejstříků, jinak mimořádně užitečném nástroji rešeršní práce v tištěných svazcích. Poslední vydaný 5tiletý rejstřík zahrnuje období 1997 až 2001 a obsahuje odkazy na celkem 4 419 141 citovaných dokumentů na 431 642 stránkách v téměř 150 svazcích. Je tedy zcela evidentní, proč další Collective Index pro léta 2002–2006 už nevyšel a nikdy nevyjde. Jen doplň-

me, že Collective Indexes jsou k dispozici jako verze na CD, a to od 5-ti letého rejstříku za léta 1977–1981, přičemž ten poslední je na 14 CD discích. Takže můžeme sice uronit slzu za touto odešlou legendou, ale buďme rádi, že vývoj nabídl daleko efektivnější nástroj, protože bychom už jen s velkými obtížemi a sebezapřením s tak rozsáhlým tištěným zdrojem byli ochotni pracovat.

Legendární pojmy „Beilstein“ a „Gmelin“

I když pro současnou nastupující generaci chemiků jsou to asi už opravdu jen pojmy a jen málokterý má reálnou představu nebo dokonce i zkušenost s jejich využíváním, stále v mysli chemiků setrvává povědomí o existenci mnohosvazkových děl stojících kdesi na regálech knihoven, jejichž důležitost byla vždy velice zdůrazňována. Jak je to tedy dnes doopravdy a co vlastně končí?

Připomínám, že význam obou těchto děl byl a stále je opravdu mimořádný a důležitý, a to nejenom z historického hlediska. Myšlenka, že by bylo užitečné stále průběžně sumarizovat nově objeované chemické látky a sloučeniny napadla v 19. století asi více chemiků, ale jen dva tuto myšlenku realizovali a nepochybně tak velmi přispěli k rozvoji chemie. Prvním byl profesor chemie na Univerzitě v Heidelbergu Leopold Gmelin, který již v letech 1817–1819 vydal ve třech svazcích knihu *Handbuch der theoretischen Chemie*, na kterou pak navázala nová rozšířená vydání³. V 5. vydání v letech 1852–1853



Obr. 1. Chemical Abstracts v grafické podobě

byl rozsah omezen jen na anorganické sloučeniny pod názvem Handbuch der anorganischen Chemie a nakonec jako Gmelins Handbuch der anorganischen Chemie. Na dalších vydáních se později podíleli další spolupracovníci a následovníci (L.Gmelin zemřel v r. 1851), až do tzv. 8. vydání, které v podobě volných svazků organizovaných podle systémů prvků a jejich sloučenin vycházelo do nedávné doby. V r. 1946 byl pro vydávání díla byl založen Gmelin Institut für anorganischen Chemie ve Frankfurtu nad Mohanem jako součást Max-Planck-Gesellschaft. Koncepce sumarizace informací do podoby tištěných svazků věnovaných jednotlivým prvkům a jejich sloučeninám vedla pochopitelně ke stále většímu zaostávání dat a není překvapující, že vydávání tištěných svazků bylo v r. 1998 ukončeno stejně jako existence Gmelin Institutu. Další osud díla je těsně spjat s osudem druhého podobného díla, „Beilsteina“.

Obdobný Handbuch der organischen Chemie vydal profesor Friedrich Konrad Beilstein, takto profesor chemie na univerzitě v Petrohradu, až v r. 1881 po dvacetileté práci ve dvou svazcích. Sám ještě vydal rozšířené třisvazkové vydání v r. 1885 až 1889 a další vydání v letech 1892 až 1906, které mělo už 8 svazků. Ty se ještě tu a tam najdou v našich knihovnách. Dále převzala péči o pokračování Deutsche Chemischen Gesellschaft a pod redakcí F. Richtera bylo zahájeno vydávání tzv. 4. vydání v podobě 27 svazků s koncepcí, že nadále budou vydávány jen dodatky (Ergänzungswerk) vždy po 10 letech, tedy stále jako 4.vydání. A stejně jako v případě Gmelinova kompendia byl založen Beilstein Institut für Literatur der Organischen Chemie po 2. světové válce ve Frankfurtu nad Mohanem, který se musel vyrovnávat s nesmírně rychlým tempem nárůstu nových sloučenin a omezením daným *de facto* „ručním“ zpracovávání informací do podoby tištěné knihy. Podrobnosti o struktuře obou děl i jejich využití lze najít v několika souborných přehledech⁴⁻⁶.

Následující vývoj je velmi zajímavý. V osmdesátých letech prosadil tehdejší ředitel Beilstein Institutu, prof. Clemens Jochum, státem podporovaný projekt kompletního převodu celého díla do elektronické podoby včetně systematického doplnění chybějícího nezpracovaného období, které v té době představovalo cca 20 let. Za významné spoluúčasti externích spolupracovníků včetně řady českých a slovenských organických chemiků, se tento úkol podařil a budiž řečeno, že jedině díky této aktivitě a podpoře koncepce Beilsteinova díle stále pokračuje. Elektronická verze byla dokončena v r. 1994, ale testovací přístup byl možný už od konce osmdesátých let. Připomínám, že už v r. 1995 byla elektronická verze zpřístupněna na VŠCHT Praha a za dva roky pak díky konsorciu a podpoře z programů MŠMT i na ostatních chemických a přírodovědeckých fakultách a ústavech AV ČR.

Co ale pak vlastně končí? Zmíněný „Beilstein Institut“ byl financován z nadace a hlavně z výtěžku prodeje tištěných svazků, které vydávalo nakladatelství Springer-Verlag. Státem subvencovaná digitalizace předpokládala další finanční soběstačnost, což se celkem pochopitelně nestalo. Proto došlo nejdříve k vytvoření privátní Beilstein

Informations Systeme GmbH, vedle původní nadace, ale ani toto řešení nestačilo pro financování tvorby báze a tak v dalším kroku převzal produkci elektronické verze americký investor, Information Handling Systems (IHS). A protože výnos evidentně nebyl podle očekávání, skončilo nakonec toto dílo v rukách největšího vydavatele vědecké literatury a dnes vědeckých informací, nakladatelství Elsevier. Báze dat Gmelin v podstatě kopirovala tento proces s tím rozdílem, že s ohledem na participaci Max-Planck-Institutu měl jako vlastník práv možnost jednání ovlivňovat německý stát. Zdá se, že převzetí obou děl pod křídla nakladatelství Elsevier, které by mělo být dostatečně kapitálově silné, aby činnost finančně utáhlo, je snad skutečným řešením a naději, že obě díla budou v budoucnu pokračovat.

Řešení má ale právní zádrhel, kvůli kterému stojí v názvu tohoto příspěvku onen konec legend Beilstein a Gmelin. Nakladatelství Elsevier nedostalo totiž práva na používání těchto názvů, které určitě mají svou marketingovou hodnotu a nesmí je tudíž pro pokračování v jejich produkce využívat. Nepřevzalo ani databázový systém CrossFire, na který si už možná dvě generace našich chemiků zvykli, a muselo připravit jiný databázový nástroj. Ten už byl zprovozněn a uveden na trh pod označením Reaxys, který je formálně obdobný systému CrossFire, tedy prázdný databázový systém. Obě báze dat Beilstein i Gmelin jsou v tomto prostředí zpřístupněny, ale s ohledem na výše uvedené právní podmínky, nesmí být zpřístupňovány pod svými názvy Beilstein a Gmelin. Nakladatelství Elsevier doplnilo data z obou bází svou bází Patent Chemistry Database, kterou začalo vytvářet kolem r. 2002, mimo jiné i jako kompenzaci ukončení zpracovávání patentů v „Beilsteinu“ v r. 1980 v důsledku přílišné nákladnosti. Takže místo bází dat Beilstein a Gmelin budeme mít od 1.1.2011 jen bázi Reaxys jako chemický informační zdroj zahrnující původní báze Beilstein a Gmelin spolu s bází Patent Chemistry Database, ovšem bez možnosti zvolit tu či onu původní bázi. Databázový systém CrossFire tedy definitivně skončí 31.12.2010, a tím také skončí používání termínů báze Beilstein nebo Gmelin a tyto pojmy zákonitě postupně upadnou v zapomenutí. Celá historie je zajímavým příkladem skutečnosti, že vytváření vědeckých informačních zdrojů je nákladná činnost a řídí se ekonomickými zákonitostmi jako produkce jakéhokoliv jiného produktu.

Jedná se opravdu jen o nostalgickou vzpomínku na klasická díla?

Tato stručná historie děl Beilstein a Gmelin ilustruje skutečnost, že žádný informační zdroj, na který jsme byli po dlouhá léta zvyklí, nemá zajištěno, že bude stále k dispozici jakkoliv bude jeho důležitost nepochybná. Jsou ale ještě další aspekty, na které stojí za to upozornit.

Není sebemenších pochyb o tom, že elektronické verze těchto informačních zdrojů jsou daleko dokonalejší a užitečnější nehledě již k téměř nesrovnatelně vyšší efek-

tivitě práce. Nelze proto očekávat, že výše popsané změny vyvolají cokoli jiného než povzdech starších chemiků nad mizejícím světem, ve kterém začínali svoji profesní kariéru. Konec tištěných Chemical Abstract byl také očekáván a tištěná verze Beilsteinova kompendia byla nahrazena elektronickou verzí již před více než patnácti lety a organičtí chemici si už nedovedou návrat k tištěné verzi představit, nehledě již na skutečnost, že časové pokrytí tištěné verze je rovněž nesrovnatelné s bází dat Beilstein. Ten nejdůležitější aspekt spočívá v tom, že zatímco tištěné verze byly nějakým způsobem předpláceny a jako skutečný fyzický majetek instituce (v minulosti i jednotlivce, je známo, že např. prof. Wichterle měl vlastního Beilsteina, stejně jako prof. Ettel) umístěny na regálech knihoven, kde byly přístupné buď komukoli nebo alespoň pracovníků dané instituce. Neboli vztah mezi úhradou a získaným majetkem byl viditelný a nepochybnitelný a hlavně trvalý.

V případě elektronických verzí je ale situace zásadně odlišná. To, co jako úhradu licenčních poplatků, platíme, je jen právo po dobu, po kterou byly poplatky uhrazeny, do báze vstupovat a využívat k vlastní práci. Jakmile zaplacené období skončí a není dále uhrazeno, přístup rovněž končí a zpravidla instituci nezůstávají žádná práva na přístup do období, po které byl přístup hrazen. V případě zdrojů, které jsou průběžně doplňovány, je to celkem logické. Tyto zdroje jsou tak v nevýhodném postavení oproti elektronickým verzím periodik, kde lze dojednat trvalý přístup k jednou uhrazeným licenčním přístupům. Název tohoto článku tak může mít další, daleko závažnější význam, že totiž při případném katastrofálním nedostatku finančních prostředků pro nás uvedené „legendy“ skončí nejenom jako legendy, ale jako skutečné informační zdroje.

Tento spíše katastrofický závěr by neměl v žádném případě evokovat názor, že by bylo užitečné „pro jistotu“ pokračovat v odběru tištěných zdrojů. Především to už nejde, viz skutečnosti uvedené výše, ale spíše jako otázka co s tištěnými zdroji, které jsou teď výhradně k dispozici v elektronické verzi? To je otázka vskutku hamletovská, zahrnující jak emoce a nostalgii, až po přísnou racionalitu a vidění jen do budoucnosti. Domnívám se, že v každém případě by stálo za to o těchto otázkách mezi chemiky mluvit a snažit se o jistou koordinaci, snad i s cílem, alespoň na jednom místě udržet co možno ucelené soubory tištěných zdrojů s možností volného přístupu. Existují i rozumné důvody, stále se vyskytnou případy, kdy stojí za to jít do tištěných Chemical Abstracts, a to nejenom při studiu historie, ale pro možnost využití tehdejší struktury indexového zpracování, které v zájmu zjednodušení bylo v elektronické verzi potlačeno a najdou se i jiné důvody. Připomeňme, že tištěné svazky Gmelina jsou stále ve více případech praktičtější, než elektronická verze tohoto díla,

a to přesto, že už nejsou aktuální. Zpracování materiálu je v tištěné verzi daleko přehlednější a ucelenější, než možnost vyhledat jednotlivost v elektronické verzi. V současné době je udržován kompletní soubor tištěných CA včetně kumulativních rejstříků volně dostupný v Ústřední knihovně VŠCHT Praha, stejně jako kompletní tištěné soubory svazků Beilstein Handbuch i Gmelin Handbuch.

LITERATURA

1. Šilhánek J.: Chem. Listy 101, 595 (2007).
2. <http://www.cas.org/ASSET-S/836E3804111B49BFA28B95BD1B40CD0F/casstats.pdf>, staženo 5.6.2010.
3. Gmelin L.: *Handbuch der theoretischen Chemie*, 1817, přetištěné originální vydání, Springer-Verlag, 4, sv. 1988.
4. Hanč O., Hlavica B., Hummel V., Jelínek J.: *Chemická literatura a její využití v praxi*, 2. přep. vydání, SNTL Praha 1961.
5. Heller S.R. (ed.): *The Beilstein System*, American Chemical Society, Washington, DC, 1997.
6. Šilhánek J.: *Chemická informatika*, Vydavatelství VŠCHT Praha 2002.

J.Šilhánek (*Department of Organic Technology, Institute of Chemical Technology, Prague*): **The End of Two Chemical Legends – Printed Chemical Abstracts and Beilstein and Gmelin Databases**

Article comments definite end of printed Chemical Abstracts after 103 years of existence as indispensable information source for all chemistry branches. Of course, it does not mean end of this service as such, it continues in electronic forms e.g. CAonCD or SciFinder, but only the end of its printed version. In any case, the total amount of 28 millions abstracts summarizing chemical knowledge harvested during whole 20th century is worth of mentioning anyway. The case of Beilstein and Gmelin is different in respect that it is result of changing ownership and to some extent of keeping valuable “trade marks” and not allowing to new owner to use it. But history of these two names is even greater and it is an example as the names of two chemists became the names of two multivolume sets of “Handbucher” known to many generation of practicing chemists. Also in this case both sources continue but under the name of Reaxys database and officially terms Beilstein and Gmelin are part of chemical history.