

GONDOLATOK A KÉMIA SZAKTERÜLETÉN FELMERÜLŐ INFORMÁCIÓS PROBLÉMÁHOZ

Margot Becke

Frankfurt/Main

A művelődéspolitikai kérdésekkel foglalkozó számtalan publikációt olvasva gyakran bukkanhatunk olyan nyilatkozatokra, amelyek szerint az emberi társadalom számára hasznos és szükséges kutatás, a társadalom továbbfejlesztésének tulajdonképpeni mozgató rugója. Kijelentések találhatók ismereteink explozív növekedéséről és arról, hogy "a kutatási lehetőségek fája egyre jobban szétágazik" /1/. Hasonló nyilatkozatokat tesznek azok a politikusok is, akiknek a tudomány és a művelődés problémáival kell foglalkozniuk /2/. A tudomány optimista hangú elismerésén kívül mindenekelőtt tervezésével kapcsolatos elgondolásokkal találkozunk. Olvashatunk továbbá a prognózis művészetéről és szükségességéről, valamint olyan jövőkutatásról is, amely a tudomány és a társadalom kölcsönhatásának vizsgálata útján akarja segíteni az ember jobb jövőjének biztosítását /4/.

A természettudomány területén különösképpen megvan a reális alapja a kutatásba, a kutatáspolitikába, a kutatás tervezésébe és a prognózis művészetébe vetett hitnek. Itt mindenekelőtt azt kísérlük meg, hogy módszeresen tegyenek szert széles körű empirikus ismeretekre. Olyan modelleket terveznek, amelyek megfelelnek ezeknek az empirikus ismereteknek, és megkísérlük, hogy a modelleken belül ható törvényeket megismerjék. Ezekkel a törvényszerűségekkal pedig nemcsak azt vizsgálják, nem találhatók-e a modelleken belül belső ellentmondások, hanem azt is, hogy azok milyen mértékben egyeznek az empirikus valósággal. Ezt követi a modell finomabb illesztése a vizsgált valósághoz /5/. A modell tanulmányozásából alakulhat ki a prognózis, a fejlesztés és a technológia. Ahhoz, hogy használható modelleket és a tapasztalatnak megfelelő törvényeket kapjanak, sokszor hatalmas terjedelmű empirikus anyagra van szükség. A világon szerteszét keletkező vizsgálati eredményeket pedig a kutatóknak és technikusnak, a tervezőnek és prognóziskészítő szakembernek egyaránt tudomására kell hozni. Mindehhez szükségszerűen meg kell oldani az ennek kapcsán felmerülő információs problémákat. Itt most csak a szerzetlen kémia részterületén nézzük meg közelebbről a tájékoztatás kérdését.

Az információt a legrövidebb formában úgy lehetne meghatározni,

hogy az az újdonság közlése. Megjegyzendő, hogy definíciókat általában meghatározott céllal, probléma-orientáltan alakítják ki, nem tekinthetők abszolút igazságnak, éppen ezért idézhetünk itt egy másik, közérthetőbb definíciót is: Rolf RODENSTOCK /6/ szerint az információk "a legkülönbözőbb tényekről és folyamatokról szóló hírek vagy közlemények, amelyeknek megállapításához, továbbításához és átvételéhez céltudatos szándék kapcsolódik". További követelmény, hogy az információ újdonságot tartalmazzon és ezenkívül érthető legyen. Ha az újdonság-tartalom növekszik, az érthetőség csökken. Az információelmélet szerint az információ fokot egy valószínűségi tér, az információ értékét viszont komplex feltételek határozzák meg: magára az információelméletre itt egyébként nem térünk ki /7/.

A vegyészeten már régóta foglalkoznak az információk szervezett közlésével. 1830-ban ebből a célból alapították meg Németországban a Chemisches Zentralblatt-ot, amelyet akkoriban Pharmaceutisches Central-Blatt-nak neveztek. Ez a lap félhaviként egy iv /16 oldal/ terjedelemben jelent meg. A Zentralblatt bevált. 1855-ben új elnevezése Chemisch-Pharmaceutischen Central-Blatt lett, 1856 óta pedig mint Chemisches Zentralblatt-ot adják ki. 1939-ig az egész világon a legfontosabb kémiai tájékoztató lap volt, a második világháború után azonban már nem nyerte vissza többé régi jelentőségét és 1970-ben meg is szűnt. Napjainkban világviszonylatban a legátfogóbb információs anyagot a Chemical Abstracts, az American Chemical Society kiadványa bocsátja rendelkezésre. A vegyészeten felmerülő tájékoztatási problémavizsgálatokhoz a legjobb és legmegbízhatóbb adatokat is a Chemical Abstracts Service hozta nyilvánosságra. Már 1966-ban /8/ utalt a vegyészeti irodalom exponenciális bővülési tendenciáira, és ez az exponenciális növekedés 1970-ig tovább folytatódott. Ez nem meglepő, ha arra gondolunk, hogy a világon kb. 500 000 - 700 000 vegyész és vegyészmérnök dolgozik /10/. 1960-ban a Chemical Abstracts /8/ kb. 145 000 cikket, szabadalmat, reportot dolgozott fel és közölt kivonat formájában. 1970-ben ez a szám már 300 000 volt /9/. Ennek oka, hogy a vegyészeti primer irodalma évente kb. 5-6%-kal növekszik. Ebben a növekedésben jelentős része van a szabadalom-irodalomnak. A ma feldolgozott dokumentumoknak mintegy 25%-át a szabadalmak adják; 1960-ban ez 21% volt, míg 1955-ben csak 12%.

A kémiai irodalmat a Chemical Abstracts heti kiadványaiban ismerteti. Egy-egy füzet ma átlagban 6000 kivonatot tartalmaz, az 1960. évi 2600 kivonattal szemben. Különösen jól kitűnik a szakirodalom terjedelme és növekedése az éves indexekből vagy a Chemical Abstracts több évi kumulációból. Az 1962-66 közötti időszakra szóló kumuláció 24 kötetből áll, 41 626 oldallal. Az 1967-1971 időszak kumulációja kb. 80 000 oldalt fog tartalmazni. Ehhez a Chemical Abstracts-nak több mint 1100 kivonatot és több mint 15 000 index-adatot kell munkanaponként feldolgozni. Ezek a számok is mutatják, hogy az irodalom a vegyészeti területén exponenciálisan növekszik.

A Chemical Abstracts kb. 8500 folyóiratcímét dolgoz fel. Szem előtt kell viszont tartani, hogy 2000 folyóiratban már megtalálható a felhasználható irodalomnak mintegy 85%-a, 1212 folyóiratban pedig 75%-a. Elmondhatjuk, hogy a legfontosabb cikkek hozzávetőleg 1500 folyóiratban jelennek meg. Ha megelégszünk csupán 50%-os hatásfokkal, akkor ezt kb. 340 folyóirat tanulmányozásával elérhetjük /9/. 1970-

ben 106 országban, míg 1960-ban csak 97 országban jelentek meg vegyészeti kiadványok. A 100%-ot készítő 106 ország közül csak 9 ország munkáinak volt valóban jelentősége. Az irodalom 27-28,5%-a az USA-ból, 23%-a a Szovjetunióból származott. A harmadik legnagyobb százalékos arányt, 7%-ot Japán érte el. A két Németország hozzájárulása 1960-ban 8-9% volt, ez 1970-ben 7% alá csökkent. Anglia is jelenleg 7% alatt marad. Még kisebb a százalékos hányada Franciaországnak; 2% feletti eredményt csupán még Olaszország, India, Kanada, Csehszlovákia és Lengyelország ért el. Százalékos értékben a cikkek legnagyobb részét készítő kilenc ország a vegyészeti irodalomnak 83%-át adja.

1965-ben az összes cikk 50%-át angol nyelven szövegezték. 1970-ben a folyóiratcikkek 56%-a volt már angol nyelvű. Ennek elsősorban nem az az oka, hogy az angol nyelvterületről érkező cikkek száma igen erősen növekedett. Az angolszász országok az angol nyelvű irodalomnak csak 40%-át tennék ki, viszont erősen növekszik a japán hányad. Japánban a cikkeknek csak a fele jelenik meg japánul; a többi cikket angolul adják ki. Ez néhány más országra is áll. Az orosz, német, francia nyelvet lényegében csak azokban az országokban használják, ahol ezeket a nyelveket beszélik. Az angol tehát lassan világnyelvvé fejlődik a vegyészetben, bár ma még nem számít "a" világnyelvnek.

Manapság még egy olyan szakember is, mint Dale B. BAKER - a Chemical Abstracts Service igazgatója - tartózkodik attól, hogy az elkövetkezendő 10 évre a szakirodalom növekedését illetően jóslásokba bocsátkozzék. Feltételezi, hogy mennyisége 9 évenként bizonyára megkétszereződik, így tehát 1980-ban évente 600 000 kivonattal kellene számolni, máttól 1980-ig pedig összesen 7 000 000-val.

Ezzel az irodalomtömeggel már csak úgy lehetne megbirkózni, ha azt referáló-kötetekben adnák ki, ezeket azonban az olvasók már nem lennének képesek elolvasni. Az információ viszont csak akkor nevezhető valóban információnak, ha azt átveszik.

Ezért itt olyan új módszerekre van szükség, melyek az egyes kutatók tudományos cikkeiben közzétett állításokat más szakembereknek közvetítik. Tájékoztatástechnikára, azaz olyan eljárás technikára van szükség, amely alkalmas az állítások közvetítésére, kommunikációjára.

Gondoljuk végig, hogy a vegyészet, mint tudomány kialakulásának kezdetén hogyan ment végbe a tájékoztatás. Elsősorban a közvetlen kommunikációnak volt fontos szerepe, személyes találkozásoknál, kongresszusokon, előadásokon, beszélgetések során. Az információtechnikának ezt a formáját a tudomány a legrégebbi idők óta napjainkig használta és alkalmazni fogja a jövőben is. Nagy innovációs értéke van. Fontosabb azonban a kommunikáció írásos formájának kérdése. Annak bemutatására, hogyan jött létre az a vegyészet kezdetén, szeretnék egy személyes megfigyelést elmondani. Amikor 1946-ban, mint főiskolai tanár Helldelbergbe mentem, az íróasztalomban találtam egy kis csövet néhány milligramm ezüstös csillogású anyaggal megtöltve. A csövecskén egy címke volt "Gallium" felirattal. Egy másik papíron, amelybe be volt burkolva, a "Lecoq de Boisbaudran pour M. Robert Bunsen" felirat állt. A gallium felfedezője, Lecoq de Boisbaudran, aki az elemet a pireneusi szfaleritben találta meg, 1875-ben tájékoztatta ily módon kollegáját, BUNSEN-t a felfedezéséről. 100 évvel ez-

előtt tehát ilyen közvetlenül, tudóstól tudósig, levelezés útján bonyolódott le a kommunikáció. WÖHLER és LIEBIG ismert levélváltása ennek a kommunikációs formának másik példája.

Később a tájékoztatás már személytelenné vált. A kommunikáció a folyóirat közbeiktatásával történt. Az érdekelt és a publikációkon keresztül tájékoztatott tudós a folyóirat szövegével vitakozott és a lap hasábjain fejtette ki véleményét, ezzel egyszersmind nagyobb kört tájékoztatva saját eredményeiről és álláspontjairól. Ezekben a folyóiratokban tudományos véleménycsere folyt. Ez a folyóiratok felhasználásával zajló közvetlen kommunikációs forma a folyóiratok számának növekedésével egyre nehezkesebbé vált. Ezután szekunder irodalom kísérelte meg a tovább személytelenített közlés átvételét. Ide tartoznak a bibliográfiák vagy a referáló lapok, mint például az előbb említett Chemisches Zentralblatt vagy a Chemical Abstracts, továbbá az információs szolgáltatások /10/, amelyek főleg a legújabb dokumentumokról készített gyors tájékoztatásra törekedtek. Ide tartoznak még a nagy vegyészeti kézikönyvek is.

Mint már említettük, a referáló lapok az információk közlésére a kommunikáció eredeti értelmében - a publikált tudományos irodalom terjedelme és az egyre fokozódó növekedés következtében - nagyon gyorsan alkalmatlanná váltak. De nemcsak ez a növekedés az egyetlen oka a kommunikáció kudarcának. Komolyabb oka inkább - amire Robert FUGMANN is nyomatékosan utalt /11/ - hogy a tudomány bizonyos rendszertelenséget tüntet el eredményei között. Az irodalom elsődlegesen kronológikusan rendezett. Ehhez jön valamelyes rendben az országok szerinti megosztás és a bővebb tárgykör szerinti nagyon durva felosztás, amelyet az egyes folyóiratok súlypontja határoz meg. A szakirodalmat azonban nem azon fogalmak és fogalom-kapcsolatok szerint rendezik, amelyek megfelelnek bármely kérdésfeltevő kutatási céljának. Sőt a kémiai adatok - a potenciális heurisztikus érték bármely tetszőleges szempontja szerinti - új elrendezésének elvi lehetőségeit is még csak nagyon csekély mértékben fejlesztették ki. Hozzátehetjük még azt is, hogy annak, aki tájékozódni akar, rendszerint két kívánsága van. Először ösztönzést szeretne kapni az adott probléma önálló megoldására azoknak a munkáknak megismerésével, amelyekben előtte vagy vele egyidejűleg a vonatkozó problémával foglalkoztak. Másodszorban azonban arról akar tájékozódni, hogy számára és a tudományos haladás számára mely problémák lennének érdekesek. Tehát segítséget keres ahhoz, hogy a problémákat felismerje.

A tudományos haladás lényegéből fakad, hogy annak részleteit senki sem láthatja meg előre /11/. Tehát az irodalomban nem lehet céltudatosan olyan adatok után kutatni, amelyeknek csak a jövőbeni felfedezések számára lesz heurisztikus értéke. Ehhez egy példa: csak nagyon kevés vegyész hitte a nemesgáz-vegyületek felfedezése előtt, hogy értelme lenne ezek után a ma már minden vonatkozásban érdekes vegyületek után kutatni. BARTLETT találmánya és felfedezése - azaz 1962 - után rövid idő alatt azonban több mint 400 munka jelent meg ebben a tárgykörben /12/. Ugyanaz mondható el a molekuláris nitrogén komplex vegyületekben történő beépítésének lehetőségeiről, új szintézis-eljárásokról, új anyagok alkalmazásáról. Az átlagos vegyész csak azután végezhetett információkeresést ezekben az irányokban, amikor egyes

zseniális kutatók már rávilágítottak ezekre a problémákra. Ez a kijelentés általánosan érvényes a valóban alapvetően új felfedezésekre; ezekhez ösztönzésül csak a rendszeres, de nem meghatározott célú szakirodalomolvasás marad, a kollegiális kapcsolatok megteremtése és a bönghészes egy könyvtárban. Főleg az olyan szakirodalom olvasásának van értelme, amely meghatározott terület széles keresztmetszetét tárja fel.

Egyszerűbb probléma, ha a tájékozódni kívánó szakember a témát közelről meg tudja határozni és csak azt kívánja tudni, hogy azzal mások már foglalkoztak-e és hogy számára segítséget nyújtanak-e a régebbi vagy egyidejű munkák a feladata megoldásához. Itt a meghatározott célú tájékoztatás elvileg lehetséges. Az irodalomtárolás ősi alapota, kronológikus sorrendje azonban erre nem nyújt igazi lehetőséget. Az irodalmat a meghatározott tárgykörű tájékoztatáshoz elő kell készíteni.

Robert FUGMANN /11/ a rendezetlen és egyre növekvő irodalom okozta nehézségeket, valamint a tudományos munka ebből fakadó eredménytelenségét olyan termelőüzemhez hasonlította, melyben raktárra termelnek, az egyes gyártmányok megkeresése a raktárban azonban annyi vesződéssel jár, hogy vevő jelentkezése esetén a keresett terméket inkább újra legyártják. Így a vegyészek a sok ráfordítást igénylő irodalomkutatástól visszariadva, nem egyszer inkább anélkül, kísérletezéssel kezdtek dolgozni. Kézenfekvő, hogy ezzel dupla munkát végeztek, kevés eredménnyel kecsegtető kísérletekbe fogtak, vagy olyanokba, melyek eredményeit mások már régebben, őket megelőzve megállapítottak. Ennek elkerülésére néhány kutató bevezette kollégái között az előre sokszorosított cikkek cseréjét vagy rövid közlemények publikálását. Így ugyan gyorsan, de csak egy szűk és válogatott körön belül terjedt el az új eredmény, a rövid közlemények információs értéke pedig korlátozott, mert nehéz az információkat ellenőrizni, az eredményeket felülvizsgálni. Ez nem helyes, a természettudományok egész területét csak teljesen nyilvános, kísérletileg alátámasztott és vizsgálattal ellenőrzött információ szolgálhatja, amellyel kiváltja a kutatók, munkatársaik és elődeik közötti közvetlen, szűkkörű kölcsönhatást és segít abban, hogy a természettudomány bármely területe érintkezésben maradjon tudományos alapon más területekkel /13/.

A körülmények szerencsés találkozása folytán ugyanakkor, amikor sürgőssé vált a vegyészetben is a dokumentációs és kommunikációs probléma megoldása, olyan elektronikus adatfeldolgozó berendezéseket és mágnesszalagos tárológységeket fejlesztettek ki, amelyek adott kérdésszerű meghatározott információt szolgáltató rendszerek felépítésében alkalmazhatók. Éppen a vegyészetben vannak gyakran nagyon hosszú életű eredmények és ennek megfelelően itt van értelme annak, hogy ezeket az el nem evülő adatokat, vagyis egyes anyagok mennyiségileg meghatározható fizikai tulajdonságaira vonatkozó adatokat tárolják és visszakeressék. Technikai nehézségek tehát nincsenek. Egy ismert anyag és adatai utáni keresés a vegyészetben egyszerű, mivel a tudomány nemzetközileg elismert nyelveként a képletek szolgálnak és ezenkívül ehhez jól ismert nemzetközi nomenklatura áll rendelkezésre. Nehezebb a helyzet, ha nem a fizikai adatok, hanem meghatározott anyag vegyi viselkedési módjai után vagy szerkezeti felépítések, esetleg a részleges felépítés iránt érdeklődnek. Gyakran nem egy meghatározott vegyü-

let érdekli a kutatót, hanem egy vegyületcsoport. Ezen a területen csak úgy lehet információkeresést végezni, ha az irodalmat megfelelően feltárják, kémiai szerkezet és tárgykör szerint rendszerezik. Az NSZK-ban ezen a téren mindenekelőtt az IDC /Internationale Dokumentationsgesellschaft für Chemie = Nemzetközi Vegyészeti Dokumentációs Társaság, Frankfurt/ szerzett érdemeket /14/. Az ott alkalmazott rendszerezési eljárás egész röviden azon alapul, hogy a kémiai szerkezeti képletet szerkezeti fragmentumokra bontották és ezeket kódolták. Ilyen kódrendszer az un. GREMAS-rendszer /Genealogische Recherche mit Magnetband-Speichern = Genelógiai információkereső rendszer mágnesszalagos tárolással /15/, amelyet az IDC fejlesztett ki. Ez a rendszer a vegyész számára megkönnyíti a keresést a kémiai szerkezet leírásának további lehetőségével, a topológiai módszerrel. Elvileg azon alapul, hogy a kémiai szerkezet leírásához megszámozzák a molekulában lévő atomokat és számokkal jelzik összefüggéseiket is. Az eredmény egy számsor, egy mátrix. Ez a mátrix az elektronikus számítógépbe betáplálható, mégpedig automatikusan /16/. A röviden ismertett rendszereket az IDC összekapcsolta. Az elektronikus számítógépbe a topológikus adatok betáplálhatók, majd a GREMAS-rendszer "fragment"-kódjává való gépi átalakítás következik. A kutatások során e kód felhasználásával lehet kérdezni. Így ezzel a segítséggel gyors és a célnak megfelelő információt kaphatunk a kémiai szerkezetekről, a vegyületek viselkedéséről és alkalmazásukról. Például a Chemical Abstracts-ban található anyag ilyen feldolgozása, akár a topológikus eljárásnak, akár a "fragment" kódolásnak megfelelően hajtják azt végre, nagy szellemi munkaráfordítást igényel. Ennek ellenére a vegyészet nagy részterületei erre az utra tértek. Erősebb nemzetközi összefogásra van azonban szükség.

Kevesebb ráfordítással járó, de ugyanakkor kevésbé hatékony megoldás a szelektív információterjesztéshez a következő: a Chemical Abstracts Service jelenleg mágnesszalagokat készít, a Chemical Abstracts Condensates-t, amelyen évente kb. 250 000 címet lehet tárgyszókkal együttlé tárolni, illetve visszakérdezni. A szalagok a referátum címből - és részben a szövegből - kiemelt tárgyszavakat tartalmaznak. Ezeknek a tárgyszavaknak a kialakítása csekély szellemi munkaráfordítást igényel. A vegyész, aki egy bizonyos problémakörrel foglalkozik, ezekből a szalagokból megkaphatja a kitűzött feladathoz szükséges információt. Hasonló megoldást nyújt például az Institute for Scientific Information Philadelphiában az ASCA /Automatic Subject Citation Alert = automatikus hivatkozásfigyelő szolgálat/ útján. A legnehezebb feladat az érdeklődési profilok - a kérdés - megfelelő kialakítása és ennek a profilnak programozása. Sokszoros nehézségek adódnak a terminológia és a fogalmak ködösségéből, a terminusoknak egyrészt az elsődleges /primer/ irodalomban, másrészt pedig a kérdésfeltevésnél tapasztalható szubjektív értelmezéséből. A szövelemzések nehézségei is problémákat okoznak.

A szerkezeti képletek fragmentumairól és viselkedésükről a Chemical Abstracts Condensates szalagok csak akkor tudnak felvilágosítókat adni, ha ezeket a szerkezeti elemeket a mű címében kulcsszavakkal is megemlítették.

A vegyészet területén végzett meghatározott célú irodalomkutatás terén ugyan még elég messze vagyunk az ideális viszonyoktól, de a jö-

vőben rejlő lehetőségekkel minden bizonnyal meg tudjuk oldani a problémát.

De mi a helyzet a cél nélküli, általános irodalomkereséssel, amelynek a legnagyobb heurisztikus értéke lehetne? A számítógépnek nincs olyan értelemben intelligenciája, hogy az igazság keresésénél problémákat vessen fel és ellenvetéseket tegyen. A gép adott kapacitással képes egy adott probléma megoldására, ha ahhoz programozható szabályokat, stratégiákat és módszereket már kifejlesztettek. Ez azonban rendszerint nem jelent segítséget ahhoz, hogy új problémákat keressenek és egyáltalában felismerjenek. Robert JUNGK a legutóbb ezzel kapcsolatban kijelentette /18/, hogy a jövő információs szakemberének horizontálisan, azaz - akár a megfelelő mélység rovására is - széles körben kell áttekinteni egy tudományos területet. A továbbadott átfogó tudás olyan információt hozhat létre, amely az egyes zseniális kutatókat a tudományt előrevivő váratlan asszociációkra ösztönzi.

A vegyészeten a futurologusoktól szinte észrevétlenül próbálják a nagy kézikönyvek ezt a széles áttekintést biztosító szerepet átvenni anélkül, hogy az a mélység rovására menne. Már több mint 150 évvel ezelőtt, 1817-ben, Leopold GMELIN /19/ olyan kézikönyvet állított össze, amelynek címlapján a következő szavak álltak: "Előadásai céljából összeállítva". Vagyis GMELIN-nek ez a dokumentációs feldolgozása annak idején összefogta a vegyészeti ismereteket, hogy lehetővé tegye a további mélyebb behatolást a tudományba és ezt a tudást előadásaiiban továbbadja. Ez pedig ösztönözzön további kutatásokra. Leopold GMELIN terve sikerült. A kézikönyv gyors egymásutánban 7 kiadásban jelent meg. Az 5. kiadás megkezdésekor különvált a szerves kémia és azt, mint Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie folytatták. 1922-ben kezdték meg a Gmelins Handbuch der Anorganischen Chemie 8. kiadásának összeállítását, amelyben a tudomány akkori állásának megfelelően még egyszer feldolgozták a XVIII. század közepétől a szervesetlen kémia és határterületei teljes ismeretanyagát valamennyi eredeti publikáció alapján. Még ma is dolgoznak ezen a 8. kiadáson. Több mint 75 000 szöveges oldal jelent meg és a 8. kiadás befejezését kb. 1976-ra tervezik /20/. Az irodalomból összeválogatott ismereteket a kézikönyvben a kémiai elemek és vegyületeik szerint rendezték. A feldolgozás jelenlegi helyzetét az ábra szemlélteti. Az ábra az elemek periodikus rendszerét tükrözi és jelzi, hogy a kézikönyvben mely elemek szerepelnek vegyületeikkel, illetve vannak ez idő szerint feldolgozás alatt.

A nagy anyagbőség mellett a kézikönyvet összeállító Gmelin-Intézet az aktuális dokumentumok segítségével a szervesetlen kémiának mindenkor csak meghatározott részterületét tudja megragadni. Ezeken a részterületeken folyamatosan dolgoznak, irodalmat gyűjtenek, kritikusán elemzik és értékelik az adatokat. Erre épül fel azután az összefoglaló ismertetés a Gmelin-kézikönyvben, amelyben a kísérleti és elméleti kutatási eredményeket a tudomány mai állásának szemszögéből közlik. Mindent elkövetnek, hogy mindazt az irodalmat még feldolgozzák, mely a munkában lévő kötet megjelenése előtt fél vagy egy évvel vált ismertté. Az információforrásként kiadott kézikönyv-kötetek abban különböznek mind az eredeti publikációktól, mind a folyóiratszemléktől és referátumoktól, hogy a kézikönyv az anyagot nem egy időben és tárgykörben elszigetelt formában közli. A kézikönyvben a tények a

maguk teljességében, de egyszersmind kritikusan értékelve és nagyobb összefüggéseikben rendszerezve találhatók, ami abból ered, hogy egy kémiai elemet mindig sajátosságaival együtt írnak le.

A kézikönyv-kötetek aktualitása különböző. Egy adott évben mintegy 10 kötet teljesen időszerű.

Közbevetőleg jegyzem meg, hogy a Beilsteins Handbuch alapos okokból más utat járt és mindig meghatározott végső határidővel dolgozik. A kifejlesztett rendszer beosztása megfelel annak a ténynek, hogy egyes részterületek erősen fejlődnek és tovább fognak fejlődni a jövőben is. Ezek a területeken a lehető leggyorsabban kell kézikönyvszerűen feldolgozni az irodalmat, úgy, hogy az a következő évek kísérleti kutatásaihoz idejében rendelkezésre álljon.

Másrészt a szerves kémia van olyan területei is, ahol a lassu fejlődés következtében a kísérletező szakember még könnyen áttekintheti az irodalmat akkor is, ha a legújabb műveket még nem dolgozták fel kézikönyv formában. A szerves kémia aktuális és elhanyagolt területeket ismer. A Gmelin-kézikönyv 8. kötetében valamennyi részterületről meg kell hogy legyen az információs bázis, de a kézikönyv összeállításánál mindenképpen alkalmazkodni kell a fejlődés mértékéhez /21/.

Ezt néhány példával világítom meg: jellemző módon a cink-elem volt az, amelynek leírásával 1924-ben, a 8. kiadás kezdődött. Olyan elemről volt szó, amelynek a kémiajáról akkoriban nagyon sokat tudtak. A cink kémiajának fejlődése a 20-as években bizonyos fókig lezárult, ezért értelemes volt, hogy irodalmát kézikönyvben is feldolgozzák és információs anyagként közreadják.

A nióbiáról és tantálról viszont századunk 20-as és 30-as éveiben még nagyon keveset tudtak. Ezen a területen az irodalom áradata csak 1950-ben indult meg. Így magától értetődő, hogy éppen most, azaz a 60-as évek végétől kezdődően kell a nióbiom és a tantál elemeket feldolgozni és kézikönyvben ismertetni.

Másik példa a bór-kémia. A hatékony rakétahajtóanyagok utáni kutatások során jött lendületbe a bór-hidrogén vegyületek és a bór-hidrogén elemi szénvegyületeinek kémiaja. Annak érdekében, hogy gyorsan és jó polimer anyagokat állítsanak elő, fejlesztették ki a bór-nitrogén kémiaját. Így ma már időszerű ezeknek a területeknek dokumentációs feldolgozása és irodalmuk kézikönyvben való közreadása. Ha a dokumentáció és tájékoztatás képes ennyire naprakészen dolgozni, akkor remélhető, hogy ezek az információk odavezetnek, hogy a rutinmunkák felesleges megismétlése helyett impulzusokat adnak váratlan ötletekhez, illetve asszociációkhoz. Ezek a példák egyre szaporodnak. Így megemlíthetném például a nemesgáz-vegyületeket, ahol hasonló volt a helyzet, mint a bór kémiajánál.

Természetesen egyetlen kutató sem olvashatja végig a több mint 80 000 oldalas kézikönyvet. A kutató egy kötetben lapozgathat, és abból ötleteket meríthet. Elolvashatja egy meghatározott kötet egy nagyobb fejezetét, hogy információt kapjon a célul kitűzött feladatáról. Meghatározott célú információhoz természetesen megfelel egy ké-

zikönyv is, főleg akkor, ha jó tárgymutatója van. A szervetlen kémia kézikönyvéhez most állítanak össze tárgymutatót.

A kémiában megkönnyíti a tárgymutató elkészítését a képletek nemzetközi "nyelve", amely a tárgymutató fő elrendezési elvét képezheti. Kétségtelen, hogy egy tárgymutató az információ eszközeként hatékonyabbá válik, ha azt megfelelő módon elektronikus adatfeldolgozó berendezés segítségével tárolják.

A cél: a szelektív információszolgáltatás számára olyan, számítógépben tárolt tárgymutató, amely lekérdezhető és információ forrásként a kézikönyvre utal. Mivel tudjuk, hogy a kézikönyvben milyen időhatárok között dolgoztak fel irodalmat, megtakaríthatjuk a fáradságot, hogy addig az időpontig a Chemical Abstracts-Condensates szalagjain keressünk.

Természetesen nyitott kérdés, hogy mindezek képesek-e a természettudóst helyettesíteni, akinek a könyv lapjai felett álmódzva olyan ötlete támad, amely talán az egész világot megmozgatja, mint ahogy tovább fejlődött a világ a szervetlen kémia nagyjai: Robert BUNSEN, Alfred WERNER, Madame CURIE, Otto HAHN, Linus PAULING eszméitől. A gépek csak akkor tudják a munkát átvenni, ha ehhez az ember a kezdő lökést megadja.



M E G J E G Y Z É S E K

- /1/ C. BRESCH: Kolloquium über Forschungsplanung. Deutsche Forschungsgemeinschaft. Franz Steiner Verlag Wiesbaden, 1971. S. 59 ff.
- /2/ H. LEUSSINK: Umschau in Wissenschaft und Technik, 71, 763 /1971/.
- /3/ H. LENK: Kolloquium über Forschungsplanung l.c., S. 13 ff.
- /4/ Vgl. G.-F. von WEIZSÄCKER: Vortrag anlässlich der Jahresversammlung 1968 des Stifterverbandes für die Deutsche Wissenschaft.
- /5/ Ein Beispiel vgl. bei H. HARTMANN, Experientia, Supplementum IX, 94 /1964/.
- /6/ R. RODENSTOCK: Management International 1965, 55 ff.
- /7/ Als Einführung dazu vgl. I. Bar-Hillel in "Informationen über Information" v. H. v. Dittfurth, Fischer-Taschenbuch 1971.

- /8/ Dale B. BAKER: Chem. and Eng. News 44, /1966/, 23, S.84.
- /9/ Dale B. BAKER: Chem. and Eng. News 49, /1971/, 28, S.37.
- /10/ Vgl. G. KRESZE: Z. angew.Chem. 82, 563 /1970/.
- /11/ R. FUGMANN: Z. angew. Chem. 82, 574 /1970/.
- /12/ Vgl. Gmelins Handbuch der Anorganischen Chemie, Ergänzungswerk zur 8. Aufl. Bd.1, Verlag Chemie, Weinheim 1970.
- /13/ Vgl. Science, Government and Information. A Report of the President's Science Advisory Committee. The White House, Washington, D.C. 1963.
- /14/ Vgl. M.A. LOBECK: Z. angew. Chem. 82, 598 /1970/.
- /15/ Zu GREMAS vgl. Anmerkung 5/ u. 14/. Ein anderes Notationssystem, das international viel gebraucht wird, ist. z.B. des WISWESSER-System.
- /16/ E. MEYER: Z. angew. Chem. 82, 605 /1970/, R. Fugmann, H. Nickelsen, J. Nickelsen, J.H. Winter, Z. angew. Chem. 82, 611 /1970/.
- /17/ W. STUMPF: Chemiker Zeitung 96, 301 ff.
- /18/ Aslib-Jahrestagung 1971 in Darmstadt.
- /19/ Vgl. E. PIETSCH u. E. BEYER: Ber.Dtsch.Chem.Ges. 72 A, 1 /1939/, W. Lippert Chemiker Zeitung 94, 47 /1970/.
- /20/ Vgl. W. LIPPERT: Vortrag im III. Fortbildungskurs der GDCh in Deidesheim am 15. 11. 1971 "Information und Dokumentation in der Chemie".
- /21/ Vgl. M. BECKE, Jahrbuch der Max-Planck-Gesellschaft 1971.



Mrs. BECKE, M.: Reflections on information problems in chemistry

In the field of chemistry information dissemination has a long past: the first abstract journal - the *Chemisches Zentralblatt* - started publication already in 1830. Nowadays the most comprehensive world-wide information coverage is published in *Chemical Abstracts*. Due to the exponential growth of literature, however, it will be shortly unable to carry on its activities with today's means. Difficulties are increased by the unmethodical character of published literature. Needs of users are to be considered in two alternative ways: in addition to documentation services used for solving concrete problems there would be an information need also to help the recognition of problems and to stimulate the forming of new associations of ideas.

Parallel with the more and more urgent need for solving information problems different EDP devices were developed. Mechanical data processing in chemistry is facilitated by the international language of formula, the processing is, however, very laboursome. The use of subject headings is easier but not so efficient. In the field of chemistry both ways are used by mechanized information systems primarily for IR.

Information services, stimulating the summing up of new problems are difficult to handle by mechanical devices. For this purpose comprehensive surveys are needed according to subject fields. Without jeopardizing the deepness, this goal is served by handbooks, e.g. the *Gmelins Handbuch der anorganischen Chemie* started in 1817. The preparation of its 8th edition started in 1922 but not yet finished. Its aim is to give information basis for chemistry on actual as well as on neglected areas. In the same time it has to take into consideration the scale of uneven development as to the various fields. It means that everything has to be done for processing the most up-to-date literature into the new volumes, while - due to slower development - the same is not so urgent in other subject fields.

Subject indexes of the handbook are also in preparation. Their efficiency would be increased if storage would be made possible by EDP devices.



БЕККЕ, М.: Размышления по вопросу информационных проблем в области химии

В химии издавна занимаются информацией; первый реферативный журнал начал издаваться по химии уже в 1830 г. (Chemisches Zentralblatt). Наиболее полный материал по химии в настоящее время в мировом масштабе сообщает Chemical Abstracts, однако ввиду экспоненциального увеличения количества литературы, этот журнал вскоре не сможет выполнить своих задач традиционными методами. Большим затруднением является и несистематизированность издающихся материалов. Необходимо принять во внимание две информационные потребности специалиста: наряду с библиографическим поиском литературы для решения конкретных проблем, требуется и информация служащая выявлению проблем, образованию новых ассоциаций.

В то же время, когда решение проблемы осведомления становится все более насущным, разработаны и различные электронные машины и запоминающие устройства. Машинная обработка в области химии облегчается международным символическим языком формул, хотя обработка подобных данных весьма трудоемка. Меньше трудовых затрат требует обработка предметных слов, хотя таковая и менее эффективна. В настоящее время в химии пользуются обоими методами, действуют информационные системы, которые служат прежде всего для выдачи информации, необходимой для решения конкретных проблем.

Выявление новых проблем с помощью машинных методов решается трудно. Для таких задач необходимо полное обозрение нужной профессиональной области. Этой цели служат справочники, без ущерба в отношении глубины. Примером может служить издаваемый с 1817 г. Gmelins Handbuch der anorganischen Chemie. В 1922 г. приступили к составлению 8. издания этого справочника и работы поныне не закончены. Целью является создание информационной базы по актуальным и мало охваченным областям химии, принимая во внимание неравномерность развития отдельных частных областей. Это значит, что в отдельных областях необходимо сделать все возможное, чтобы по возможности обработать и самую свежую литературу, включив ее в очередной том справочника, в то время как по другим, менее стремительно развивающимся областям такой необходимости нет.

Готовится также предметный указатель этого справочника, эффективности которого в значительной мере способствовала бы обработка и хранение в памяти ЭВМ.



Frau BECKE, M.: Einige Gedanken über Probleme der Information

In der Chemie befasst man sich schon seit langem mit der Veröffentlichung der Informationen: bereits in 1830 wurde das erste Referateblatt, das "Chemische Zentralblatt", ins Leben gerufen. Heute wird das umfassendste Informationsmaterial durch das "Chemical Abstracts" vermittelt, das jedoch zufolge des voraussehbar exponentiellen Wachstums der Fachliteratur bald nicht mehr in der Lage sein wird, diese Aufgabe mit seinen gegenwärtigen Mitteln zu bewältigen. Zu den Schwierigkeiten trägt noch bei, dass das Material nicht systematisch geordnet ist. Es ist zu berücksichtigen, dass der Orientierungsanspruch der Fachleute zweierlei ist: ausser der die Lösung von konkreten Problemen bezweckenden Literaturrecherche besteht nämlich auch ein Bedarf für Informationen, welche das Erkennen von neuen Problemen sowie die Bildung neuer Assoziationen fördern sollten. Gleichzeitig damit, dass die Lösung der mit der Orientierung verbundenen Schwierigkeiten dringende Aktualität bekam, wurden mannigfaltige elektronische Datenverarbeitungsvorrichtungen und Magnetbandspeicher ausgearbeitet. In der Chemie erleichtert die internationale Formelsprache zwar die elektronische Datenverarbeitung, aber die darauf aufgebaute Verarbeitung erfordert einen grossen Arbeitsaufwand. Eine auf Sachworten beruhende Bearbeitung ist zwar weniger arbeitsaufwendig, aber auch weniger effektiv. Auf dem Gebiet der Chemie sind gegenwärtig mit beiden Systemen funktionierende maschinelle Informationssysteme in Gebrauch, die vor allem für die Literaturrecherche zwecks Lösung von bestimmten Problemen dienen. Eine die Erkenntnis neuer Probleme fördernde Information ist mit maschinellen Mitteln bloss schwierig zu verwirklichen. Um hierin vorwärtszukommen, ist eine umfassende Kenntnis des Fachgebiets nötig. Dies wird - ohne die Tiefe der Information zu beeinträchtigen - durch die Handbücher gewährleistet, wie durch das in 1817 begonnene "Gmelins Handbuch der anorganischen Chemie". Die Zusammenstellung seiner 8. Ausgabe wurde in 1922 begonnen und die Arbeit daran dauert noch immer an. Es wird dabei das Ziel verfolgt, sowohl auf den aktuellen als auch auf den vernachlässigteren Teilgebieten der Chemie die Informationsbasis zu schaffen, wobei auch das Ausmass der ungleichen Entwicklung der einzelnen Teilgebiete in Betracht gezogen werden soll. Dies bedeutet, dass auf gewissen Gebieten alles unternommen werden muss, um in dem gegenwärtig bearbeiteten Band womöglich auch das allerneueste Schrifttum zu verarbeiten, während auf anderen Gebieten dies wegen der weniger raschen Entwicklung nicht so brennend notwendig ist. Auch das Sachregister des Handbuchs ist in Arbeit. Zu seiner Nützlichkeit könnte die Speicherung seiner Daten mit Hilfe einer EDV-Vorrichtung sehr viel beitragen.