1 Εισαγωγή

Για αρκετά χρόνια το Διαδίκτυο αποτελούσε "μυστικό" προνόμιο διάφορων στρατιωτικών και πανεπιστημιακών φορέων της Αμερικής (USA). Η καινοτομία αυτή, όμως, της διασύνδεσης πολλών Η/Υ, που βρισκόταν σε διαφορετικές τοποθεσίες, σε ενιαίο δίκτυο έμελλε να αλλάξει θεαματικά, και μάλιστα σε σύντομο χρονικό διάστημα, τον τρόπο με τον οποίο η γνώση έφτανε σε κάθε ενδιαφερόμενο [1,2].

Η εξέλιξη των Η/Υ και η δυνατότητα απόκτησης ενός προσωπικού υπολογιστή [3] (Personal Computer, PC) με αρκετά χαμηλό κόστος ώθησε το Internet να μετατραπεί ταχύτατα σε μία "δημόσια βιβλιοθήκη όλου του κόσμου" [4,4]. Οι χημικοί, αν και συγκαταλέγονται στους πρώτους χρήστες των Η/Υ, κυρίως για την τέλεση πολύπλοκων και χρονοβόρων υπολογισμών, άργησαν αρκετά να αξιοποιήσουν όλες τις δυνατότητες του Internet.

Στη Χημεία, όπως άλλωστε και σε άλλες συγγενείς επιστήμες, υπήρχε ανέκαθεν η ιδιαιτερότητα της ανταλλαγής δεδομένων (π.χ. δομές μορίων), τα οποία δεν μπορούσαν να απεικονισθούν με τις συνήθεις μορφές (π.χ. κείμενο). Η επινόηση αρτιότερων προτύπων μεταβίβασης πληροφοριών στο Internet (αρχεία ΜΙΜΕ, CML, VRML, Java κ.ά.) έδωσε στους ειδικούς την ώθηση να οργανώσουν καλύτερα την χημική γνώση που κυκλοφορούσε έως τότε φτωχή και "άτακτα ερριμμένη" στο Internet.

Η χημική κοινότητα άρχισε να αξιοποιεί τις ιδιότητες του Διαδικτύου και πέρασε από τις ακίνητες δισδιάστατες (2-Dimensional, 2-D) απεικονίσεις μορίων στις κινούμενες τρισδιάστατες (3-D), από την τετριμμένη γνωστοποίηση ερευνητικών αποτελεσμάτων σε ηλεκτρονικούς πίνακες ανακοινώσεων (Bulletin Boards) στη δημιουργία εξολοκλήρου ηλεκτρονικών περιοδικών (e-journals), και από την απλή χρήση του ηλεκτρονικού ταχυδρομείου (EMAIL) στην οργάνωση πλήρως ηλεκτρονικών συνεδρίων (e-conferences) [1,4,2].

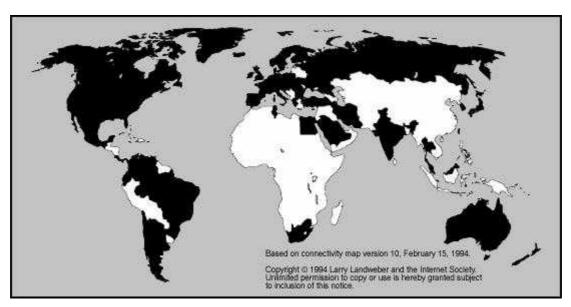
Σήμερα, το Διαδίκτυο σφύζει από χημικές πληροφορίες, οι οποίες προσφέρονται, στην πλειοψηφία τους, δωρεάν στους χρήστες του. Εντούτοις, η ποιότητα αυτών των πληροφοριών μπορεί να κριθεί αμφίβολη, αφού ο καθένας έχει το δικαίωμα να δημοσιοποιεί σχεδόν ελεύθερα οποιαδήποτε δεδομένα στο Internet.

2 Κύριο μέρος

2.1 Γενικά στοιχεία για το Διαδίκτυο

2.1.1 Τι είναι το Διαδίκτυο

Η λέξη Διαδίκτυο [5] (Internet) χρησιμοποιείται για να περιγράψει το μαζικό, παγκόσμιο δίκτυο Ηλεκτρονικών Υπολογιστών (Η/Υ) [6]. Στην ουσία Διαδίκτυο σημαίνει "δίκτυο των δικτύων" και δίκαια, αφού αποτελείται από χιλιάδες μικρότερα, τοπικά δίκτυα διασκορπισμένα σε περισσότερα από 50 κράτη της υφηλίου. Μοιάζει με ένα "γιγαντιαίο διεθνές σύστημα σωληνώσεων", όπου οι πληροφορίες ρέουν σχεδόν ανεξέλεγκτα και ακατάπαυτα διαμέσου του [7]. Στην εικόνα 2.1.1-1, που ακολουθεί, δίνεται μια γενική άποψη των χωρών της γης που συνδέονταν με το Internet για το έτος 1994 [7]. Φυσικά, η εικόνα αυτή έχει αλλάξει εν έτει 2005, δεδομένου ότι ακόμη περισσότερες χώρες συνδέονται μέσω Internet.



Εικόνα 2.1.1-1 Παγκόσμιος χάρτης παροχής Internet για το έτος 1994. Οι χώρες με μαύρο συνδέονται μέσω Internet ενώ οι υπόλοιπες (άσπρο χρώμα) μπορεί να έχουν πρόσβαση σε ΕΜΑΙΙ ή τοπικά απομονωμένα δίκτυα ή να μη συνδέονται καθόλου [7].

Πολλές φορές επικρατεί σύγχυση μεταξύ των όρων Internet και **World Wide Web** [8] (**WWW** ή απλά **Web**). Οι δύο έννοιες, αν και συχνά ταυτίζονται, δε σημαίνουν το ίδιο πράγμα. Το Internet αναφέρεται μόνο στο τεχνικό δίκτυο των Η/Υ, αυτό με τα καλώδια (ή τους δορυφόρους) και τα τερματικά. Το WWW χρησιμοποιείται για να περιγράψει το σύνολο των πληροφοριών (κάθε μορφής) και των πηγών τους, που

- 2.1 Γενικά στοιχεία για το Διαδίκτυο
- 2.1.2 Παρεχόμενες υπηρεσίες και τρόπος λειτουργίας του Διαδικτύου

διακινούνται με τη βοήθεια του Internet. Με άλλα λόγια, το WWW είναι η γνώση που εμπεριέχεται στο "Υπερδίκτυο των Η/Υ", το Internet.

Η χαρακτηριστικότερη και ίσως η σημαντικότερη ιδιότητα του Internet είναι ότι δεν υπάρχει κάποιος κρατικός ή άλλος μηχανισμός, που να διεκδικεί την κυριότητά του. Παρότι υπάρχουν διάφορες εταιρίες, που βοηθούν στην διαχείριση των τοπικών δικτύων και στην επικοινωνία μεταξύ τους, εντούτοις, κανένας οργανισμός δεν ελέγχει αυτά, που συμβαίνουν στο Internet. Το ίδιο ισχύει και για το WWW. Οι πληροφορίες, επομένως, δημοσιοποιούνται ελεύθερα και οι μόνοι υπεύθυνοι για το περιεχόμενό τους είναι οι ίδιοι οι δημιουργοί τους. Σε αρκετές περιπτώσεις ωστόσο, έχουν θεσπιστεί ιδιαίτεροι κανονισμοί οργάνωσης των τοπικών δικτύων συνήθως σε κρατικό επίπεδο [7].

2.1.2 Παρεχόμενες υπηρεσίες και τρόπος λειτουργίας του Διαδικτύου

Το Internet παρέχει στους χρήστες του πολύ ενδιαφέρουσες υπηρεσίες, οι οποίες συνοψίζονται παρακάτω [9].

- <u>WWW</u> [8]: επιτρέπει την εξερεύνηση και αναζήτηση πληροφοριών κάθε τύπου (κείμενο, ήχος, εικόνα, video κ.ά.)
- <u>Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο</u> [10] (*Electronic MAIL*, *EMAIL*): επιτρέπει την ανταλλαγή μηνυμάτων ηλεκτρονικής μορφής καθώς και την πρόσβαση σε λίστες μηνυμάτων [11] (mailing lists) και ομάδες συζητήσεων [12] (discussion groups ή newsgroups).
- <u>Σύνδεση απομακρυσμένης επιφάνειας εργασίας</u> [13] (Remote login ή Telnet): πρόγραμμα δικτύου που προσφέρει έναν τρόπο άμεσης (online [i-14]) σύνδεσης με έναν απομακρυσμένο Η/Υ και τη δυνατότητα απευθείας εργασίας σε αυτόν.
- <u>Πρωτόκολλα μεταφοράς αρχείων</u> (File Transport Protocol, FTP [15], Gopher [16]): χρησιμοποιούνται για τη μεταφορά αρχείων μεταξύ Η/Υ του Internet.

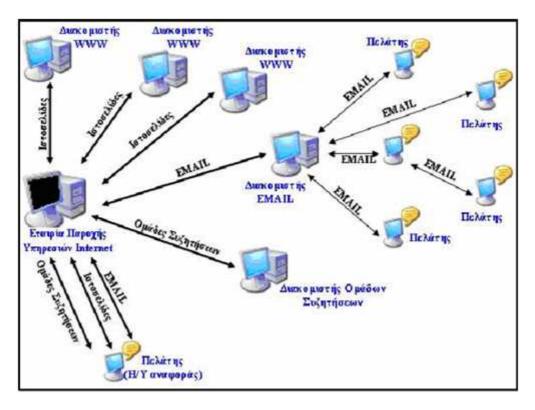
Η λειτουργία του Internet είναι απλή και στηρίζεται στην αμφίδρομη σχέση "διακομιστών" [17] (servers) και "πελατών" [18] (clients). Οι πρώτοι είναι Η/Υ του Internet που αποθηκεύουν πληροφορίες τις οποίες χρησιμοποιούν οι δεύτεροι. Διακομιστής μπορεί να είναι ένας οποιοσδήποτε Η/Υ στο Internet αλλά αυτό που τον

3

[[]i]: *On-line* (ή *online*, σε επικοινωνία): αναφέρεται σε οποιοδήποτε βοηθητικό όργανο που είναι συνδεδεμένο άμεσα με έναν Η/Υ, έναν εκτυπωτή, ένα καταγραφικό, έναν άλλον Η/Υ κτλ.

- 2.1 Γενικά στοιχεία για το Διαδίκτυο
- 2.1.2 Παρεχόμενες υπηρεσίες και τρόπος λειτουργίας του Διαδικτύου

καθιστά διακομιστή είναι ο ρόλος που παίζει. Είναι κάτι σαν μεσολαβητής, που συγκεντρώνει δεδομένα από άλλους Η/Υ, τα οργανώνει και στη συνέχεια τα "προσφέρει" σε απλούς Η/Υ - δέκτες πληροφοριών, τους πελάτες. Για κάθε τύπου δραστηριότητα στο Internet απαιτείται η χρήση ενός διαφορετικού τύπου πελάτη και διακομιστή. Άλλος τύπος για την χρήση του WWW, άλλος για το ΕΜΑΙΙ, άλλος για σύνδεση Telnet κτλ. Στην πραγματικότητα, ένας πελάτης δεν είναι ένας Η/Υ αλλά ένα συγκεκριμένο πρόγραμμα Η/Υ, το οποίο "γνωρίζει" πώς να επικοινωνεί με ένα συγκεκριμένο τύπο διακομιστή και να ανταλλάσσει πληροφορίες με αυτόν. Για την καλύτερη εξυπηρέτηση των πελατών έχουν δημιουργηθεί οι λεγόμενες "Εταιρίες Παροχής Υπηρεσιών Internet" (ΕΠΥΙ) [19] (Internet Service Providers, ISPs) που είναι οι "διακομιστές των διακομιστών". Ο ι ΕΠΥΙ επικοινωνούν με κάθε είδους διακομιστές του Internet, συγκεντρώνουν τις πληροφορίες τους και προσφέρουν στους πελάτες (έναντι οικονομικού οφέλους) συγκεντρωτικές πλέον παροχές (ΕΜΑΙΙ, WWW, ομάδες συζητήσεων κτλ) [20]. Μία σχηματική παράσταση της σχέσης διακομιστών - πελατών και ΕΠΥΙ για μερικές διαδικτυακές παροχές φαίνεται στην εικόνα 2.1.2-1 παρακάτω.



Εικόνα 2.1.2-1 Απλουστευμένη σχηματική παράσταση λειτουργίας του Internet. Διακρίνεται η αλληλεπίδραση μεταξύ Διακομιστών, Πελατών και Εταιρίας Παροχής Υπηρεσιών Internet [20].

- 2.1 Γενικά στοιχεία για το Διαδίκτυο
- 2.1.2 Παρεχόμενες υπηρεσίες και τρόπος λειτουργίας του Διαδικτύου

Για τη σύνδεση στο Internet απαιτούνται ένα modem [21] (MOdulator - DEModulator) ή άλλη τηλεπικοινωνιακή σύνδεση (π.χ. δορυφορική σύνδεση), ένα πρόγραμμα περιήγησης ή πλοήγησης στο WWW (ή στο Internet) [22] (web browser ή απλά browser) και φυσικά ένας Η/Υ. Το modem είναι μία συσκευή που επιτρέπει στους Η/Υ να ανταλλάσσουν ψηφιακά δεδομένα μεταξύ τους μέσω τηλεφωνικών γραμμών (αναλογικό κύκλωμα). Το browser (π.χ. Netscape Navigator [23], Microsoft's Internet Explorer [24], Mozilla [25], Opera [26], HotJava Browser [27], Mosaic [28], Hytelnet [29], Maxthon [30]) είναι μία εφαρμογή που δίνει στο χρήστη του WWW τη δυνατότητα να "διαβάζει" (read) τις διάφορες ιστοσελίδες [31] (web pages) που βρίσκονται στις λεγόμενες τοποθεσίες [32] (web sites ή απλά sites) του WWW [33].

Μία ιστοσελίδα μπορεί να αποτελείται από απλό κείμενο, υπερκείμενο [34] (hypertext), γραφικά, αρχεία ήχου και video, διάφορες φόρμες ή άλλες εφαρμογές. Το υπερκείμενο είναι ένα ειδικά διαμορφωμένο είδος κειμένου (ή εικόνας) με την "επιλογή" του οποίου (π.χ. με κλικ του ποντικιού) είναι δυνατή η μετάβαση σε μια άλλη ιστοσελίδα του WWW (υπερσύνδεση [35], hyperlink) ή ακόμη και σε ένα συγκεκριμένο σημείο της ίδιας ιστοσελίδας. Η γλώσσα που καθιέρωσε το υπερκείμενο είναι η HTML [36] (Hyper Text Markup Language) και για το λόγο αυτό η συντριπτική πλειοψηφία των ιστοσελίδων είναι γραμμένη κατά το πρωτόκολλο HTML. Οι τοποθεσίες, γενικά, δεν είναι τίποτε άλλο παρά συλλογές ιστοσελίδων (του ίδιου οργανισμού ή θέματος) αποθηκευμένες σε έναν συγκεκριμένο διακομιστή του WWW ή σε ένα τμήμα αυτού. Πολλές φορές, ωστόσο, στη γλώσσα των Η/Υ οι όροι ιστοσελίδα και τοποθεσία είναι ταυτόσημοι [20].

Κάθε μορφής δεδομένα σε μία τοποθεσία του WWW έχουν μία και μοναδική "διεύθυνση" (address) στο WWW, την Ενιαία Θέση Πόρου [37] (Uniform Resource Locator, URL), η οποία καταδεικνύει το όνομα του διακομιστή - Η/Υ, όπου είναι αποθηκευμένα τα δεδομένα, τη διαδρομή καταλόγου των δεδομένων μέσα στον Η/Υ (φάκελοι που τα περιέχουν) και τέλος το όνομα των αρχείων. Όλα τα παραπάνω διαχωρίζονται μεταξύ τους με πλάγιες παύλες ενώ ανάλογα με το είδος του διακομιστή (δηλ. το πρωτόκολλο που χρησιμοποιείται για τη μεταφορά αρχείων)διακρίνονται διευθύνεις WWW, Gopher και FTP. Παραδείγματα τέτοιων διευθύνσεων δίνονται στην εικόνα 2.1.2-2 παρακάτω, όπου οι διευθύνσεις είναι πλασματικές.

Η ΧΗΜΕΙΑ ΣΤΟ ΔΙΑΔΙΚΤΥΟ

- 2.1 Γενικά στοιχεία για το Διαδίκτυο
- 2.1.2 Παρεχόμενες υπηρεσίες και τρόπος λειτουργίας του Διαδικτύου



Εικόνα 2.1.2-2 Παράδειγμα (πλασματικών) διευθύνσεων URL για διακομιστές WWW, ftp και Gopher

Ο τρόπος με τον οποίον οι παραπάνω δυνατότητες χρησιμοποιούνται στον τομέα της Χημείας περιγράφεται διεξοδικά στις σελίδες που ακολουθούν.

2.2 Πρωτόκολλα επικοινωνίας και γλώσσες προγραμματισμού στο Διαδίκτυο

2.2.1 **HyperText Markup Language (HTML)**

Στα τέλη του **1989** μία νέα γλώσσα προγραμματισμού [38] (programming language) στο Internet έμελλε να αλλάξει τους μέχρι τότε τρόπους επικοινωνίας. Η νέα διαδικτυακή γλώσσα ονομάστηκε **HyperText Markup Language** [36] (**HTML**) και το καινούριο πρωτόκολλο [ii-14] για τη μεταφορά αρχείων, που εισήγαγε, **HyperText Transform Protocol** [39] (**HTTP**). Είναι η γλώσσα που εδραίωσε το μηχανισμό Ενιαίας Θέσης Πόρου [37] (Uniform Resource Locator, URL), το υπερκείμενο [34] (hypertext) και την υπερσύνδεση [35] (hyperlink) στο Internet και για το λόγο αυτό ήταν η εφαρμογή που ώθησε, όσο τίποτε άλλο, τους χημικούς να διεισδύσουν στο Internet [40].

Η HTML συγκέντρωσε όλες εκείνες τις ιδέες που βρισκόταν, έως τότε, αιωρούμενες στο Internet βασιζόμενη κυρίως στη μορφή της "μετα - γλώσσας" [41] (meta - language) Standard Generalized Markup Language [42] (SGML). Η SGML, ως μετα - γλώσσα, είναι ένα μέσο για τη δημιουργία άλλων γλωσσών, π.χ. της ΗΤΜL, καθορίζοντας τον τρόπο οργάνωσης των εντολών [43] (commands ή tags) και γενικά όλους τους κανόνες διάρθρωσης των δεδομένων σε διάφορες γλώσσες. Η ΗΤΜL χρησιμοποιεί μια αυστηρά δομημένη φόρμα, όπου το περιεχόμενο της πληροφορίας διαχωρίζεται σαφώς από τον τρόπο με τον οποίον αυτό παρουσιάζεται στην οθόνη του Η/Υ. Έτσι, το περιεχόμενο αποτελεί, κυρίως, μέλημα του δημιουργού ενός δεδομένου (π.χ. κείμενο ιστοσελίδας), ενώ ο τρόπος παρουσίασής του (π.χ. στυλ, μέγεθος και χρώμα γραμματοσειράς) αφορά, ως επί το πλείστον, τον χρήστη της πληροφορίας.

Η συντριπτική πλειοψηφία των ιστοσελίδων είναι γραμμένη στην HTML. Το γεγονός αυτό δεν είναι τυχαίο. Η HTML αποτελείται από μία σειρά απλών, λογικών εντολών γραμμένων αυστηρά στην αγγλική γλώσσα (ASCII [44]) σε διάφορα προγράμματα κειμενογράφου (Notepad [45], WordPad [45], Simple Text [46] κτλ). Με τη βοήθεια αυτών των εντολών ένα πρόγραμμα περιήγησης στο Internet [22] (browser), το οποίο αναγνωρίζει μόνο τέτοιο, απλό κείμενο (ASCII), προβάλλει το περιεχόμενο μιας ιστοσελίδας κατά τον τρόπο που επιθυμεί ο αναγνώστης της. Ωστόσο, η χρήση απλού κειμένου δεν είναι συχνά αρκετή για να περιγράψει χημικές πληροφορίες και έτσι οι

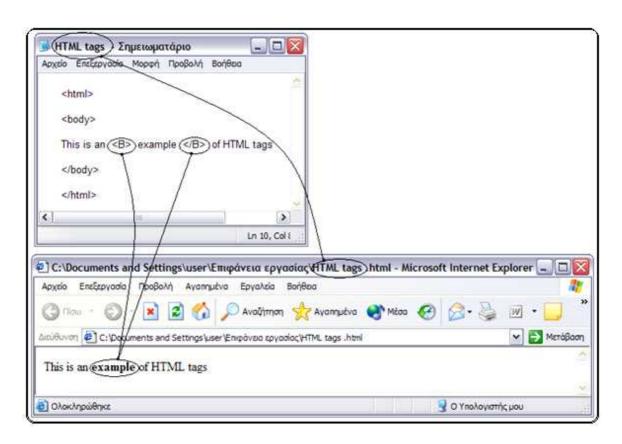
7

[[]ii]: *Πρωτόκολλο επικοινωνίας*: γενικός κανόνας/μηχανισμός που εφαρμόζεται σε ένα σύστημα Η/Υ και επιτρέπει σε οποιονδήποτε Η/Υ τον χρησιμοποιεί να συνδεθεί με το σύστημα και να αλληλεπιδράσει.

- 2.2 Πρωτόκολλα επικοινωνίας και γλώσσες προγραμματισμού στο Διαδίκτυο
- 2.2.1 HyperText Markup Language (HTML)

ειδικοί αναγκάστηκαν να εισάγουν νέες παραμέτρους στην HTML ή να καταφύγουν σε άλλες λύσεις (π.χ. μορφές JPEG [47], GIF [48] κτλ).

Οι εντολές (tags) της HTML βρίσκονται μέσα σε αγκύλες. Για παράδειγμα, η εντολή που κάνει έντονη (bold) τη γραμματοσειρά είναι η "". Το περιεχόμενο μιας ιστοσελίδας, όπου πρόκειται να εφαρμοσθεί μια εντολή, π.χ. η παραπάνω, εσωκλείεται μεταξύ της αρχικής ("") και τελικής εντολής (""), όπως ένα κομμάτι κειμένου βρίσκεται μεταξύ δύο κομμάτων. Στην εικόνα 2.2.1-1 παρουσιάζεται η αντιστοιχία μεταξύ εντολών (σε πρόγραμμα κειμενογράφου) και αποτελέσματος στην οθόνη του Η/Υ από το πρόγραμμα πλοήγησης στο WWW. Οι βασικές εντολές της HTML είναι πλέον πάρα πολλές (πάνω από 40) και μία ιστοσελίδα έχει τη δυνατότητα, σήμερα, να συνδυάζει κείμενο, ήχο, εικόνα και συνδυασμό των τριών [49].



Εικόνα 2.2.1-1 Παράδειγμα εντολών (tags) της HTML. Η εντολή , γραμμένη στον κειμενογράφο (Σημειωματάριο), κάνει έντονη τη γραμματοσειρά του κειμένου ("example") όπως αυτή εμφανίζεται στην οθόνη του H/Y με τη βοήθεια του προγράμματος πλοήγησης (Internet Explorer).

Λόγω της διαφοροποίησης του περιεχομένου της πληροφορίας από την οπτικοποίησή της στον Η/Υ, η HTML αποτελεί ένα ισχυρό μέσο ταξινόμησης και αρχειοθέτησης των δεδομένων στο Internet. Πρόσθετα στοιχεία που αφορούν π.χ. το

- 2.2 Πρωτόκολλα επικοινωνίας και γλώσσες προγραμματισμού στο Διαδίκτυο
- 2.2.2 Αντικειμενοστραφείς γλώσσες προγραμματισμού Java

δημιουργό, την πνευματική ιδιοκτησία ή τις λέξεις κλειδιά μιας επιστημονικής εργασίας, που εκδίδεται στο Internet, είναι δυνατόν με τη χρήση ορισμένων εντολών (<meta> [41]) να επισημανθούν και να δοθεί έμφαση σε αυτά σε περίπτωση αναζήτησης πληροφοριών στο Internet [50].

Οι δύο, τεράστιου ενδιαφέροντος, καινοτομίες του WWW και συγκεκριμένα η ικανότητα να καθορισθεί το ακριβές διαδικτυακό σημείο, όπου βρίσκεται μία πηγή δεδομένων (URL) και η γρήση "σημαδεμένου" (marked up) κειμένου (hypertext) για τον γαρακτηρισμό της πηγής, συνδυάστηκαν στην HTML δημιουργώντας μία περίφημη εφαρμογή, την "υπερσύνδεση". Ο χειρισμός των υπερσυνδέσεων γίνεται από το πρόγραμμα περιήγησης στο Internet που, όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, αποκωδικοποιεί το γραμμένο σε HTML περιεχόμενο μιας ιστοσελίδας. Επομένως, ένα αρχείο HTML μπορεί να αποτελέσει έναν κατάλογο γνώσεων, που βρίσκονται σε διάφορα σημεία του Internet ακόμη και στο ίδιο το κείμενο. Είναι δυνατό, επιπρόσθετα, να συγκεντρώσει "ατάκτως ερριμμένες" πληροφορίες και να τις συνδέσει προς όφελος του χρήστη που τις αναζητεί. Σε τελική ανάλυση, με την HTML μια δομημένη συλλογή γημικών ή άλλων επιστημονικών πληροφοριών δεν περιορίζεται από τα φυσικά όρια ενός φύλλου γαρτιού ή ενός έντυπου αργείου (π.γ. βιβλίο ή περιοδικό).

2.2.2 Αντικειμενοστραφείς γλώσσες προγραμματισμού - Java

Το **1996** η εταιρία **Sun Microsystems** [51] έφερε στο προσκήνιο μια νέα αντικειμενοστραφή γλώσσα προγραμματισμού [iii-14,52] (object-oriented language) την **Java** [53]. Η Java ωφέλησε αρκετά το έργο των χημικών δίνοντας τη δυνατότητα μεταφοράς χημικών δεδομένων χωρίς απώλειες και άλλα προβλήματα, που οφείλονται στην ανυπαρξία (έως τότε) οργανωμένων και αξιόπιστων προτύπων για την ανταλλαγή τέτοιων πληροφοριών. Ένας μεγάλος αριθμός εφαρμογών Java στη Χημεία, μεταξύ των οποίων οπτικοποιητές (visualizers), επεξεργαστές μοριακών δομών (molecular editors) και

[[]iii]: Αντικειμενοστραφής γλώσσα προγραμματισμού: γλώσσα προγραμματισμού υψηλού επιπέδου, όπου ο προγραμματιστής καθορίζει όχι μόνο το είδος των δεδομένων (π.χ. ακέραιοι, δεκαδικοί, χαρακτήρες ASCII) μιας δομημένης ομάδας δεδομένων (π.χ. αρχεία, λίστες, σειρές, πίνακες) άλλα και το είδος των "λειτουργιών" (functions) που μπορούν να εφαρμοσθούν στην ομάδα δεδομένων. Με αυτό τον τρόπο η ομάδα δεδομένων μετατρέπεται σε "αντικείμενο" (object), το οποίο περιέχει και δεδομένα και λειτουργίες. Επιπρόσθετα, είναι δυνατόν να δημιουργηθούν αλληλεπιδράσεις μεταξύ δύο "αντικειμένων" (π.χ. αντικείμενα μπορούν να δανειστούν χαρακτηριστικά από άλλα αντικείμενα).

- 2.2 Πρωτόκολλα επικοινωνίας και γλώσσες προγραμματισμού στο Διαδίκτυο
- 2.2.2 Αντικειμενοστραφείς γλώσσες προγραμματισμού Java

αναλυτές μοριακών ιδιοτήτων (molecular analyzers) έγινε διαθέσιμος από διάφορες πηγές του Internet [40,50,54].

Η σπουδαία καινοτομία της Java είναι ότι κάθε πρόγραμμα γραμμένο σε αυτήν εκτελείται ("τρέχει" [55], run ή be executed) ανεξάρτητα από το λειτουργικό σύστημα [56] (operating system) του Η/Υ (Unix [57], Macintosh OS [58], Windows [45]), επειδή την εργασία της μετάφρασης σε γλώσσα μηχανής [iv-14,59] (compiling) μιας εφαρμογής Java αναλαμβάνει η Java Virtual Machine [60] (JVM). Η JVM είναι ενσωματωμένη σε όλα τα προγράμματα browser και συνήθως και στο ίδιο το λογισμικό [61] (software) των Η/Υ. Ο χρήστης μιας εφαρμογής Java δεν χρειάζεται, επομένως, να εγκαθιστά διαρκώς νέα προγράμματα στον Η/Υ του προκειμένου να εκτελέσει την εφαρμογή [54].

Οι κώδικες Java απαντούν σε δύο εκδοχές: τους αυτόνομους κώδικες που λειτουργούν σε έναν μόνο, μη διαδικτυακό Η/Υ (Java applications [62]) και τους μικρού μεγέθους κώδικες, που διακινούνται στο Internet και χρησιμοποιούνται για την on-line [i-14] τέλεση συγκεκριμένων αλλά πολυάριθμων εργασιών (Java applets [63]). Λόγω της χρήσης τους στο Internet οι Java applets έχουν πιο αυστηρούς κανόνες προστασίας από τις Java applications. Επίσης, όλες οι πληροφορίες σχετικά με τη δομή και την τεχνογνωσία της Java είναι στη διάθεση του καθενός, ενώ δεν υπάρχουν περιορισμοί στη χρήση, τη δημιουργία και τη διακίνηση προγραμμάτων Java [54].

Ως γλώσσα προγραμματισμού η Java παρουσιάζει πολλές ομοιότητες με την C++ [64] αλλά είναι πολύ πιο απλή και οργανωμένη. Σε αντίθεση με άλλες γλώσσες, η Java επιτρέπει την ταυτόχρονη τέλεση διάφορων τμημάτων της ίδιας εφαρμογής. Επιπλέον, λόγω της αντικειμενοστραφούς δομής της, κάθε τέτοια εφαρμογή μπορεί αυτόματα (χωρίς να ζητήσει από το χρήστη να το κάνει) να χρησιμοποιήσει μία άλλη εφαρμογή που βρίσκεται στο Internet ή στο εσωτερικό του H/Y στις λεγόμενες "βιβλιοθήκες επιπέδων" [65] (class libraries). Οι τελευταίες είναι κατηγορίες αντικειμένων [66] (objects) και καθορίζουν όλες τις κοινές ιδιότητες της ομάδας των ομοειδών αυτών αντικειμένων. Μία εφαρμογή Java, ωστόσο, δεν επιτρέπεται να διαγράψει αρχεία του H/Y χωρίς τη συγκατάθεση του χρήστη και αυτό την καθιστά ιδιαίτερα ασφαλή γλώσσα [40].

Για όλους τους παραπάνω λόγους και κυρίως για την εγκαθίδρυση βασικών πρότυπων στον τομέα της ανάπτυξης εφαρμογών, που αφορούν τη Χημεία (π.χ. δομές

[[]iv]: *Compiling (μετάφραση σε γλώσσα προγραμματισμού)*: αυτόματη μετατροπή, με το κατάλληλο λογισμικό, ενός κώδικα, γραμμένου σε γλώσσα προγραμματισμού (που είναι κατανοητή στους ανθρώπους),

- 2.2 Πρωτόκολλα επικοινωνίας και γλώσσες προγραμματισμού στο Διαδίκτυο
- 2.2.3 EXtensible Markup Language (XML) кал Chemical Markup Language (CML)

μορίων και χημικές βάσεις δεδομένων), δημιουργήθηκε στα τέλη του 1996 ο οργανισμός **Open Molecular Foundation (OMF)** [67].

2.2.3 EXtensible Markup Language (XML) και Chemical Markup Language (CML)

Η eXtensible Markup Language [68] (XML) έκανε την εμφάνισή της γύρω στα 1998 όταν η World Wide Web Consortium [69] (W3C) αποφάσισε να δημιουργήσει ένα ισχυρό εργαλείο για τον χειρισμό εξαιρετικά σύνθετων αρχείων, που αποτελούνται από διάφορα είδη δεδομένων. Η ΧΜL ακολουθεί πιστά το πρότυπο της SGML [42] και εμφανίζεται σήμερα σχεδόν σε όλες τις περιοχές των εφαρμογών των Η/Υ. Παρά το όνομά της η ΧΜL δεν είναι γλώσσα (language) αλλά "μετα - γλώσσα" [41] (meta - language) δηλαδή εργαλείο για την κατασκευή άλλων γλωσσών. Η ΧΜL διαθέτει ένα ευρύ φάσμα κανόνων και αυστηρά ορισμένων πρωτοκόλλων, που επιτρέπουν τη δημιουργία ιδιαίτερα εύπλαστων γλωσσών "με σημάδια" (marked up) [4,50]

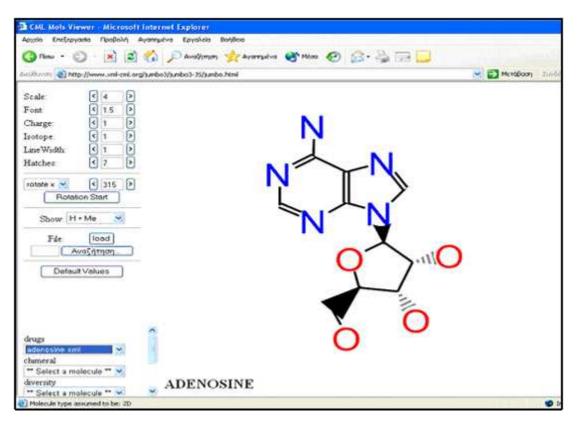
Μία από τις πρώτες γλώσσες που εμφανίστηκαν με τη βοήθεια της ΧΜL είναι και η Chemical Markup Language [70] (CML), προϊόν επίπονης εργασίας του Peter Murray - Rust [71] και των συνεργατών του (1999). Είναι επομένως αναμενόμενο, η CML, ο πρώτος "κλώνος" της ΧΜL, να συγκεντρώνει όλα εκείνα τα βασικά χαρακτηριστικά και τις ιδιότητες της τελευταίας. Η CML είναι η νέα εφαρμογή που υποστηρίζει χημικές - μοριακές πληροφορίες: από μακροσκελείς μοριακές αλυσίδες έως ανόργανα μόρια και Κβαντική Χημεία. Έχει χαρακτηρισθεί η "HTML των μορίων" αν και διέπεται από πολύ πιο αυστηρούς κανόνες από την HTML, που όμως έχει ως συνέπεια την καλύτερη οργάνωση των δεδομένων και συνάμα την ευκολότερη γραφή προγραμμάτων υποστήριξης και πλοήγησης (browsers [22]) για την CML [72,73].

Η CML μπορεί, στην απλούστερη μορφή της, να γραφεί ή να υποστεί επεξεργασία σε έναν κατάλληλο κειμενογράφο (CML - JME [74], JChemPaint [75], EMACS [76], XML Notepad [77], BBEdit [78] κ.ά.) Αρχεία CML μπορούν, επίσης, να προκύψουν ως αποτελέσματα εξόδου [79] (output) ορισμένων υπολογιστικών προγραμμάτων ή εργαστηριακών συσκευών [80]. Χαρακτηριστικό γνώρισμα της CML είναι η δυνατότητά της να διαχωρίζει τα διαφορετικά μέρη μιας πληροφορίας και να τα

σε γλώσσα μηχανής (δυσνόητη από τους ανθρώπους σειρά πολύπλοκων συμβόλων) για την ακόλουθη εκτέλεση του προγράμματος στον H/Y.

- 2.2 Πρωτόκολλα επικοινωνίας και γλώσσες προγραμματισμού στο Διαδίκτυο
- 2.2.3 EXtensible Markup Language (XML) кал Chemical Markup Language (CML)

χειρίζεται ανεξάρτητα το ένα από το άλλο. Για παράδειγμα, η "σύνταζη" (syntax) των δεδομένων - οι κανόνες με τους οποίους διευθετούνται αυτά στο αρχείο - διαφοροποιείται σαφώς από τη "σημασιολογία" (semantics), δηλαδή την έννοια που αποδίδεται σε κάθε στοιχείο του αρχείου και τη λειτουργία (π.χ. εμφάνιση στην οθόνη σε 3-D μορφή) που αναμένεται να εκτελέσει μία μηχανή όταν "διαβάζει" (read) το κάθε στοιχείο. Με τον όρο "στοιχείο" ορίζεται κάθε συστατικό του αρχείου που φέρει μια πληροφορία (π.χ. μία λέξη, το άτομο ενός μορίου, ένας χημικός δεσμός κτλ.) Λόγω της παραπάνω διαφοροποίησης, ο τρόπος με τον οποίον τα δεδομένα εμφανίζονται στην οθόνη του Η/Υ μπορεί να μεταβάλλεται, ανάλογα με τις εκάστοτε ανάγκες, από το δημιουργό ή το χρήστη τους, όπως και στην ΗΤΜL [80].



Εικόνα 2.2.3-1 Οπτικοποίηση του μορίου της αδενοσίνης (3-D μορφή) στον Java Universal Molecular BrOwser (JUMBO). Πάνω αριστερά διακρίνονται διάφορες επιλογές για τον τρόπο παρουσίασης του μορίου [83].

Άλλο πλεονέκτημα της CML είναι ότι είναι ανεξάρτητη από κάθε λειτουργικό σύστημα [56] (Unix [57], Macintosh OS [58], Windows [45]), άλλη γλώσσα προγραμματισμού ή ηλεκτρομηχανολογικό υλικό [81] (hardware) του Η/Υ. Λογισμικό [61] (software) σχετικά με την CML [browsers, γραμματικοί αναλυτές κειμένου [82]

- 2.2 Πρωτόκολλα επικοινωνίας και γλώσσες προγραμματισμού στο Διαδίκτυο
- 2.2.3 EXtensible Markup Language (XML) και Chemical Markup Language (CML)

(parsers), μετα-επεξεργαστές (postprocessors)] μπορεί να γραφεί σε διάφορες γλώσσες, αλλά έχει επικρατήσει η χρήση της Java εξαιτίας του επίσης ανεξάρτητου από λειτουργικά συστήματα χαρακτήρα της. Ο P.M. Rust και οι συνεργάτες του ανέπτυξαν τον Java Universal Molecular BrOwser [83] (JUMBO) ένα σετ από "επίπεδα" Java (Java classes [65]) που εμφανίζονται είτε ως "μεγάλες εφαρμογές" (applications [62]) είτε ως "μικρές εφαρμογές Διαδικτύου" (applets [63]). Ο JUMBO (εικόνα 2.2.3-1 παραπάνω) δύναται να μετατρέπει πληθώρα αρχείων σε CML και μαζί με την ίδια την CML αποτελούν ένα πανίσχυρο μέσο για την ανταλλαγή κάθε είδους πληροφοριών χωρίς απώλειες [80].

Η ευρεία αποδοχή της CML από την επιστημονική κοινότητα και ιδιαίτερα τις μοριακές επιστήμες οφείλεται στη μεγάλη άνεση με την οποία η CML χειρίζεται πολυσύνθετα σύνολα πληροφοριών. Εξέχουσας σημασίας χαρακτηρίζεται η χρήση "γλωσσάριων" (glossaries) στην CML [84]. Μία ομάδα επιστημόνων μπορεί να δημιουργήσει το δικό της γλωσσάριο με όρους που χρησιμοποιεί η ίδια ή να επεξεργαστεί ένα ήδη υπάρχον. Τα γλωσσάρια είναι δημόσια διαθέσιμα, βοηθούν στην καλύτερη αρχειοθέτηση των CML - αρχείων και αποτελούν κύριο στοιχείο της επεκτασιμότητας (extensibility) και διαλειτουργικότητας (interoperability) των τελευταίων [85].

Λόγω της αυστηρής οργάνωσης και της εξαιρετικής δόμησης των CML - αρχείων [τα CML - αρχεία χαρακτηρίζονται ως "καλής - δομής" (well - formed) αρχεία] η δυνατότητα της αναζήτησης (searching) πληροφοριών σε τέτοιου είδους αρχεία είναι ιδιαίτερα αναπτυγμένη [72]. Η αναζήτηση δεν περιορίζεται μόνο σε δεδομένα του αρχείου (π.χ. μια λέξη ή ένα 3 - D μόριο) αλλά ακόμη και σε τιμές (values) μεταβλητών, επιθετικούς προσδιορισμούς [attributes, λέξεις που μπαίνουν μπροστά από ένα δεδομένο με σκοπό να του προσδώσουν μια ιδιότητα και δεν χρειάζονται καταληκτική εντολή (end tag)], λειτουργίες (functions) που μπορεί να εκτελέσει το αρχείο κ.ά. Επιπρόσθετα, η αυστηρή οργάνωση της CML την καθιστά κατάλληλη για αρκετές εφαρμογές ιδιαίτερα στο Internet. Μια βάση (χημικών) δεδομένων [86] (database), για παράδειγμα, μπορεί να οργανωθεί εύκολα με την CML, επειδή η τελευταία παρέχει τη δυνατότητα σύνδεσης πολλών και διαφορετικού είδους πληροφοριών (αριθμοί, τιμές μεταβλητών, εικόνες, μαθηματικές εξισώσεις, 2-D και 3-D σχήματα κ.ά.) σε ένα ενιαίο σύνολο. Με την CML δεδομένα μπορούν να εισάγονται οποιαδήποτε στιγμή στη βάση δεδομένων και από διαφορετικούς διακομιστές [17] (servers) του Διαδικτύου, να ανακτώνται από αυτήν

- 2.2 Πρωτόκολλα επικοινωνίας και γλώσσες προγραμματισμού στο Διαδίκτυο
- 2.2.4 Virtual Reality Modeling Language (VRML)

όποτε χρειάζεται και να μετατρέπονται αυτόματα σε διάφορες άλλες μορφές αρχείων [72,73,80].

Σημαντικό πλεονέκτημα της CML αποτελεί η δυνατότητα της ταυτόχρονης απεικόνισης 2 - D και 3 - D μορφών. Η CML, μαζί με την SGML, θεωρούνται σήμερα οι πλέον καθιερωμένες γλώσσες στη βιομηχανία ηλεκτρονικών εκδόσεων της Χημείας (βλ. κεφάλαιο 2.5) καθώς και στην επεξεργασία και αποθήκευση χημικών/μοριακών δεδομένων (δομές και ιδιότητες μορίων, φάσματα, οργανική και Κβαντική Χημεία, ανόργανη κρυσταλλογραφία, χημικές ορολογίες κ.ά.). Αποτελέσματα εξόδου [79] (output) υπολογιστικών προγραμμάτων και εργαστηριακών συσκευών διατηρούνται σε CML μορφή, αφού με την ίδια μορφή μπορούν άνετα να επαναχρησιμοποιηθούν ως δεδομένα εισόδου [87] (input) σε άλλες εφαρμογές [80]. Σαφέστατα, η CML από μόνη της δεν μπορεί να ενεργήσει. Είναι απλά μία γλώσσα προγραμματισμού όχι πρόγραμμα εκτέλεσης εργασιών.

Για την CML ισχύουν οι ίδιοι κανόνες που διέπουν και τις άλλες γλώσσες προγραμματισμού στο Internet. Εντούτοις, είναι "ανοιχτό" [88] (open source) στους χρήστες λογισμικό σύμφωνα με τις οδηγίες πιστοποίησης του οργανισμού Open Source Initiative [89] (OSI), αλλά προστατεύεται από δικαιώματα πνευματικής ιδιοκτησίας (copyright) και εμπορικά σήματα (trademarks) που καλύπτουν όρους (words) και λογότυπα (logos). Επομένως, κάθε αρχείο CML μπορεί να δημιουργηθεί ή να υποστεί επεξεργασία χωρίς χρέωση πρέπει όμως κανείς να ακολουθεί τις γενικές οδηγίες της γλώσσας και βέβαια, είναι αδύνατη η μετατροπή του ίδιου του λογισμικού ή των εφαρμογών που το συνοδεύουν (π.χ. JUMBO) [73].

Διάφοροι οργανισμοί ανά τον κόσμο έχουν υιοθετήσει ή είναι διατεθειμένοι να υιοθετήσουν την CML για τις ανάγκες τους. Κυβερνητικές και διεθνείς οργανώσεις, ερευνητικού κυρίως ενδιαφέροντος, χρησιμοποιούν την CML ως βασική γλώσσα προγραμματισμού των δεδομένων που χειρίζονται μέσα σε ένα ευρύ φάσμα εφαρμογών [73].

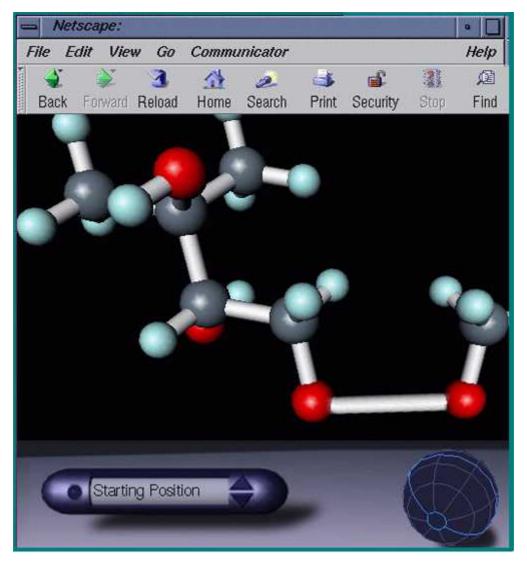
2.2.4 <u>Virtual Reality Modeling Language (VRML)</u>

Μόλις το **1995** μία γλώσσα απόδοσης εικονικής πραγματικότητας (virtual reality) έδωσε νέα ώθηση στην επιστημονική κοινότητα. Η **Virtual Reality Modeling Language** [90] (**VRML**) δημιουργήθηκε για να περιγράφει και να εμφανίζει στην οθόνη του Η/Υ

- 2.2 Πρωτόκολλα επικοινωνίας και γλώσσες προγραμματισμού στο Διαδίκτυο
- 2.2.4 Virtual Reality Modeling Language (VRML)

τρισδιάστατα (3-D) σχήματα, όπως γραμμές, σφαίρες, κυλίνδρους, πολύεδρα κ.ά. και είναι κάτι ανάλογο της HTML (2-D μορφή) στις τρεις διαστάσεις. Για τους χημικούς η καθιέρωσή της ήταν γεγονός εξαιρετικής σημασίας, αφού μπορούσαν, πλέον, να απεικονιστούν δομές και ιδιότητες μορίων και μακρομορίων (π.χ. περιοχές ηλεκτροστατικής τάσης) στους Η/Υ με αξιοσημείωτη ευκολία [40,50,91].

Για τη λειτουργία της VRML απαιτείται είτε ένα ειδικά σχεδιασμένο πρόγραμμα **browser** [22] για VRML (π.χ. Cortona® VRML Client [92], Cosmo Player [93], OpenVRML [94], Viscape Universal [95]) είτε μια εφαρμογή προσθήκης [96] (plug-in, π.χ. blaxxun Contact [97], 3D ObjectViewer [98], DpIV [99], GLView [100]) σε συνηθισμένο πρόγραμμα browser [40].



Εικόνα 2.2.4-1 Τμήμα από την επιφάνεια εργασίας VRML εφαρμογή προσθήκης στο πρόγραμμα περιήγησης Netscape για τον Enhanced NCI Database Browser [101].

- 2.2 Πρωτόκολλα επικοινωνίας και γλώσσες προγραμματισμού στο Διαδίκτυο
- 2.2.4 Virtual Reality Modeling Language (VRML)

Η VRML είναι αντικειμενοστραφής γλώσσα [iii-14,52] (object-oriented language), όπως και η Java, άλλα δεν απαιτεί "διεργασία συμβολομετάφρασης" [iv] (compiling). Κατ' αναλογία με την HTML κάθε 3-D αντικείμενο κατασκευασμένο από την VRML μπορεί να περιέχει υπερσυνδέσεις [35] (hyperlinks) URL [37] σε άλλους διαδικτυακούς πόρους όπως π.χ. αντικείμενα VRML, αρχεία HTML, εφαρμογές Java κτλ [50].

Από τα παραπάνω γίνεται φανερό ότι η χρήση της VRML σε πολυσύνθετα προβλήματα απεικόνισης χημικών δομών αποτελεί τεράστιο βήμα για την εισχώρηση της Χημείας στο Internet. Με την VRML δύο ή περισσότερες απομακρυσμένες ομάδες επιστημόνων μπορούν να μελετούν ταυτόχρονα τις ιδιότητες πολύπλοκων μορίων. Κάθε μόριο ή άτομο σε ένα μακρομόριο μπορεί να έχει υπερσυνδέσεις με αρχεία στο Internet για πρόσθετες πληροφορίες σχετικά με αυτό. Με εφαρμογές Java (Java applets [63]) είναι δυνατό να υπολογιστούν π.χ. το ηλεκτροστατικό και μαγνητικό δυναμικό γύρω από μια συγκεκριμένη περιοχή του μορίου. Ο συνδυασμός της VRML με την CML και την Java σήμανε την αρχή για την ανάπτυξη μιας νέας γενιάς εργαλείων της Χημείας στους Η/Υ και ιδιαίτερα στους διαδικτυακούς [40].

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του
- 2.3.1 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο (Electronic MAIL)

2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του

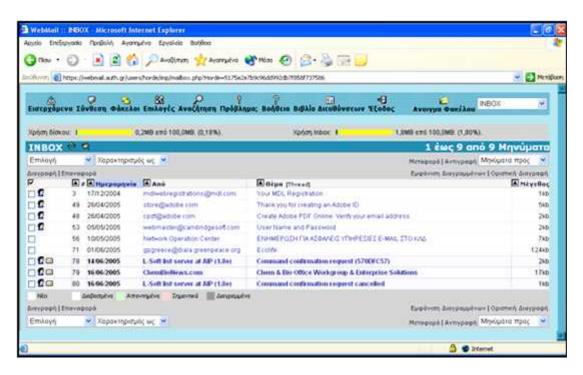
2.3.1 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο (Electronic MAIL)

Το ηλεκτρονικό ταχυδρομείο [10] (Electronic MAIL - EMAIL) αποτελεί σήμερα τον ταχύτερο και πιο αξιόπιστο τρόπο επικοινωνίας, ανταλλαγής ιδεών, απόψεων αλλά και δεδομένων μεταξύ των χημικών. Με το EMAIL δίνεται η δυνατότητα αποστολής μηνυμάτων (messages) ηλεκτρονικής μορφής (γραμμένων από το πληκτρολόγιο) ή/και ηλεκτρονικών αρχείων άλλων ειδών. Η αποστολή μπορεί να γίνει οποιαδήποτε στιγμή του εικοσιτετράωρου και η παράδοσή του συμβαίνει μέσα σε λίγα λεπτά, συνήθως όμως, σε ελάχιστα δευτερόλεπτα [102].

Πρόγραμμα διαχείρισης (ή ανάγνωσης) EMAIL (π.χ. Microsoft Outlook [45], Microsoft Outlook Express [45], Netscape Messenger [23], Lotus Notes [103] και Eudora [104] για Windows, Pine για Unix [105], Eudora για Macintosh OS [106] και WebMail για κάθε browser [107]) υπάρχει σε όλα τα λειτουργικά συστήματα Η/Υ [56] (operating systems, Unix [57], Macintosh OS [58], Windows [45]), ενώ πολλά από αυτά υποστηρίζουν την επεξεργασία του κειμένου του μηνύματος με οποιοδήποτε κειμενογράφο επιθυμεί ο χρήστης. Το πρόγραμμα ανάγνωσης ΕΜΑΙΙ επιτρέπει τη σύνθεση, την αποστολή και παραλαβή ΕΜΑΙΙ καθώς και την οπτικοποίηση μηνυμάτων στην οθόνη του Η/Υ, τη διαγραφή των εισερχομένων και εξερχομένων ΕΜΑΙΙ, την αποθήκευση στη μνήμη του Η/Υ, καθώς επίσης και την εκτύπωση. Όταν ένας χρήστης "ανοίξει" ένα ΕΜΑΙΙ στον Η/Υ έχει τη δυνατότητα να "απαντήσει" (reply) απευθείας στον αποστολέα του εισερχόμενου ΕΜΑΙL ή να το "προωθήσει" (forward), δηλαδή να το στείλει αυτούσιο ή, αφού το επεξεργαστεί, σε άλλο χρήστη. Ιδιαίτερα σημαντικές για τους χημικούς κρίνονται οι δυνατότητες της "ταυτόχρονης αποστολής" (broadcasting) του ίδιου ΕΜΑΙL σε πολλού χρήστες καθώς και της "επισύναψης" (attachment) στο μήνυμα αρχείων άλλου είδους (εκτός από κείμενο), που βρίσκονται εντός του Η/Υ ή σε εξωτερικές μονάδες μνήμης [μαγνητικοί συμπιεσμένοι δίσκοι [108] (Compact Discs Read-Only-Memory ή CDs ROM), μαγνητικές ταινίες [109] (floppy disks) κ.ά.] [10,102]. Στην εικόνα 2.3.1-1, διακρίνονται οι διαθέσιμες ενέργειες στην επιφάνεια εργασίας ενός τυπικού προγράμματος διαχείρισης ΕΜΑΙΙ.

Η ΧΗΜΕΙΑ ΣΤΟ ΔΙΑΔΙΚΤΥΟ

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του
- 2.3.1 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο (Electronic MAIL)



Εικόνα 2.3.1-1 Επιφάνεια εργασίας ενός τυπικού προγράμματος διαχείρισης EMAIL (webmail, http://www.webmail.auth.gr/)

Σύστημα ανταλλαγής ΕΜΑΙΙ (ΕΜΑΙΙ system) μπορεί να υπάρχει και σε ένα εσωτερικό - τοπικό δίκτυο Η/Υ [110] (Local Area Network, LAN), όπως είναι για παράδειγμα το δίκτυο των Η/Υ μιας εταιρίας, οι οποίοι στεγάζονται στο ίδιο κτίριο. Ωστόσο, τις περισσότερες φορές χρησιμοποιούνται συστήματα ΕΜΑΙΙ ευρείας διαλειτουργικότητας (Wide Area Network, WAN [111]) από τις "Εταιρίες Παροχής Υπηρεσιών Internet" [19] (Internet Service Providers, ISPs), που επιτρέπουν την ανταλλαγή μηνυμάτων μεταξύ οποιωνδήποτε χρηστών του WWW μέσω των λεγόμενων διαδικτυακών πυλών [ν-112] (gateways) [10]. Οι ίδιες εταιρίες ασχολούνται και με την παροχή άλλων υπηρεσιών του Internet όπως είναι το WWW και το Telnet (βλ. κεφάλαιο 2.1.2).

Το **κόστος** της **αποστολής ενός ΕΜΑΙL** είναι μηδαμινό αποτελούμενο μόνο από αυτό της τηλεφωνικής σύνδεσης (μέσω modem [21] ή δορυφόρου) με την εταιρία ISP (συνήθως μηνιαία χρέωση). Επίσης, δεν εξαρτάται από το μέγεθος του αρχείου που αποστέλλεται ή από άλλους παράγοντες όπως την απόσταση ή την ώρα αποστολής [102].

[[]v]: Πόλη (Διαδικτύου): μετατροπέας πρωτοκόλλων. Ένας κόμβος για συγκεκριμένη εφαρμογή που συνδέει μεταξύ τους δίκτυα που χωρίς αυτόν θα ήταν ασύμβατα. Μετατρέπει κωδικούς δεδομένων και πρωτόκολλα μετάδοσης και κάνει δυνατή τη διαλειτουργικότητα.

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του
- 2.3.2 Πρότυπα ανταλλαγής πληροφοριών μέσω EMAIL Multipurpose Internet Mail Extensions (MIME)

Για την αποστολή και παραλαβή ΕΜΑΙΙ χρειάζεται η δημιουργία ενός λογαριασμού ΕΜΑΙΙ (ΕΜΑΙΙ account) σε μία εταιρία ISP προκειμένου να αποκτηθεί μία διεύθυνση ΕΜΑΙΙ (ΕΜΑΙΙ address) η οποία είναι μοναδική για κάθε χρήστη στο WWW. Μοναδικός είναι, επίσης, και ο "κωδικός πρόσβασης" [113] (password) στην προσωπική διεύθυνση ΕΜΑΙΙ, που παρέχεται στον κάτοχο της διεύθυνσης από την εταιρία ISP. Τα γενικά χαρακτηριστικά μιας διεύθυνσης, π.χ. του συνσυγγραφέα "thploumi@auth.gr", αναφέρονται σύντομα παρακάτω [102]:

- **thploumi**: προσδιορισμός ταυτότητας "ονόματος του χρήστη" [114] (username)
- @: καθιερωμένο σύμβολο μετά το οποίο ακολουθεί ο προσδιορισμός της διαδικτυακής τοποθεσίας του χρήστη
- **auth**: το όνομα του οργανισμού, εταιρίας, ιδρύματος κτλ στο οποίο ανήκει ο Η/Υ (τομέας [115], domain) που δέχεται και διαχειρίζεται τα ΕΜΑΙL (εδώ **auth** από το **A**ristotle's University of **Th**essaloniki). Πολλές φορές μπορεί να έπεται του ονόματος αυτού και ένας χαρακτηρισμός του τύπου του οργανισμού (π.χ. **edu** για **edu**cation, **gov** για **gov**ernment κτλ)
- gr: γενικότερος τοπογραφικός προσδιορισμός που αφορά τη χώρα, όπου βρίσκεται ο οργανισμός, εταιρία, ίδρυμα κτλ (εδώ gr από το Greece). Μερικές φορές μπορεί και να παραλείπεται

Αν και διαφορετικά συστήματα ΕΜΑΙΙ χρησιμοποιούν διαφορετικούς κανόνες για τη δημιουργία μηνυμάτων, ωστόσο, έχουν θεσπιστεί ορισμένα γενικευμένα πρότυπα που επιτρέπουν την ανταλλαγή ΕΜΑΙΙ μεταξύ κάθε συστήματος χωρίς προβλήματα (ΜΑΡΙ [116], Χ.400 [117,118] κ.ά.) [102].

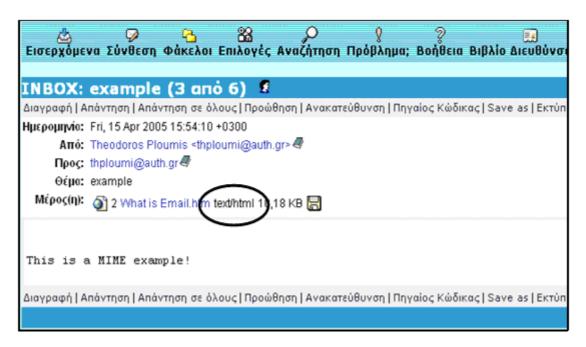
2.3.2 <u>Πρότυπα ανταλλαγής πληροφοριών μέσω EMAIL - Multipurpose Internet</u> Mail Extensions (MIME)

Το **1992** θεσπίστηκε από την **Internet Engineering Task Force** (**IETF**) [119] ένα νέο πρότυπο για τη δημιουργία μηνυμάτων ΕΜΑΙL διάφορων ειδών, όχι μόνο ASCII [44], όπως γινόταν έως τότε. Ο νέος μηχανισμός ονομάστηκε **Multipurpose Internet Mail Extensions** [120] (**MIME**) και έδωσε τη δυνατότητα της επισύναψης ψηφιακών δεδομένων [ήχος, εικόνα, video, εμπλουτισμένο κείμενο (enriched text), κείμενο σε μη

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμοχές του
- 2.3.2 Πρότυπα ανταλλαγής πληροφοριών μέσω EMAIL Multipurpose Internet Mail Extensions (MIME)

ASCII μορφή κτλ] σε ένα μήνυμα ΕΜΑΙΙ [10] ή σε μια ιστοσελίδα [31] (web page) [120].

Το χαρακτηριστικό που διαφοροποιεί ένα ΜΙΜΕ – ΕΜΑΙL από τα απλά ΕΜΑΙL είναι η ύπαρξη σύντομης επικεφαλίδας (header) στο πάνω μέρος κάθε επισυναπτόμενου αργείου, η οποία δίνει στο σύστημα διαγείρισης ΕΜΑΙΙ τις απαραίτητες πληροφορίες για το χειρισμό του αρχείου, όπως π.χ. ποιο πρόγραμμα να χρησιμοποιήσει για να το "ανοίξει". Η κεφαλίδα ακολουθεί καθορισμένη ιεραργία με πρώτο σε σειρά το γενικό γαρακτηρισμό του αργείου (text, message, application, image, audio, video, multipart) και ακολούθως έναν πιο συγκεκριμένο και λεπτομερή προσδιορισμό (π.χ JPEG [47], GIF [21], BMP [121], TIFF [122], PNG [123] της κατηγορίας "image") [50]. Για παράδειγμα, ένα "text" αρχείο "HTML" μορφής και κωδικοποιημένο με το πρότυπο ΜΙΜΕ θα συνοδεύεται από τον τίτλο "text/html", όπως φαίνεται στην εικόνα 2.3.2-1 που **EMAIL** ακολουθεί. Ένας γρήστης λογισμικού μπορεί να γρησιμοποιήσει προκαθορισμένους τύπους ΜΙΜΕ ή να δημιουργήσει νέες υποκατηγορίες, ελεύθερα και χωρίς κόστος [50].



Εικόνα 2.3.2-1 Εισερχόμενο μήνυμα MIME - ΕΜΑΙL σε τυπικό πρόγραμμα διαχείρισης ΕΜΑΙL (webmail), όπου μέσα σε κύκλο φαίνεται ο τύπος του επισυναπτόμενου ΜΙΜΕ αρχείου, "text/html". (http://www.webmail.auth.gr/)

Ο μηχανισμός που εφαρμόζεται στα αρχεία ΜΙΜΕ για την περιγραφή του είδους των δεδομένων σε ειδική επικεφαλίδα οικειοποιήθηκε γρήγορα και από άλλες

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του
- 2.3.2 Πρότυπα ανταλλαγής πληροφοριών μέσω EMAIL Multipurpose Internet Mail Extensions (MIME)

εφαρμογές του WWW και κυρίως από τα διάφορα προγράμματα πλοήγησης στο Internet [22] (browsers). Συγκεκριμένα, όταν ένας χρήστης διαδικτυακού Η/Υ "επιλέγει" (π.χ. με κλικ του ποντικιού) μια υπερσύνδεση [35] (hyperlink) σε μία ιστοσελίδα ή σε μία τοποθεσία του WWW [32] (web site) το πρόγραμμα πλοήγησης "αποστέλλει" (posts) το "αίτημα" (request) του χρήστη στον κατάλληλο διακομιστή [17] (server). Εάν ο διακομιστής αποδεχτεί το αίτημα προσδιορίζει την ακριβή θέση της ζητούμενης πληροφορίας και στέλνει την τελευταία πίσω στον χρήστη με την σχετική κεφαλίδα ΜΙΜΕ προσκολλημένη στο αρχείο. Όταν το πρόγραμμα πλοήγησης λάβει το αρχείο ελέγχει τον τύπο του ΜΙΜΕ στην κεφαλίδα για να ορίσει τις ενέργειες που πρέπει να ακολουθήσει, προκειμένου να ανοίξει σωστά το αρχείο. Για μερικούς τύπους ΜΙΜΕ (text/html, image/gif κ.ά.) οι διάφοροι WWW - πλοηγοί δύνανται να αποδώσουν κατευθείαν στην οθόνη του Η/Υ τα δεδομένα χωρίς να απαιτούν τη βοήθεια άλλου προγράμματος. Όμως, τις περισσότερες, φορές ο πλοηγός χρειάζεται να χρησιμοποιήσει μία άλλη βοηθητική εφαρμογή [96] (helper program ή plug - in) για να ανοίξει το MIME αργείο. Η απαραίτητη αυτή εφαρμογή είτε βρίσκεται ήδη μέσα στον Η/Υ είτε "καθελκύεται" (launched) μαζί με τη ζητούμενη πληροφορία από κατάλληλο διακομιστή. Τα δεδομένα, τελικά, εμφανίζονται στην οθόνη του Η/Υ σε νέο "παράθυρο" [124] (window). Με τον τρόπο αυτό σχεδόν κάθε είδους αρχεία είναι διαθέσιμα στους χρήστες του Internet και μάλιστα οι τελευταίοι έχουν το δικαίωμα της επιλογής του προγράμματος της αρεσκείας τους για να ανοίξουν αυτά τα αρχεία [40,50].

Ανάμεσα στα νέα πρότυπα ΜΙΜΕ, που εμφανίστηκαν την τελευταία δεκαετία, αναφέρονται ως σημαντικότερα τα πρότυπα Multipurpose HTML [125,126] (MHTML) και Secure/MIME [127] (S/MIME) που καθιερώθηκαν από την ΙΕΤΕ. Το πρώτο επιτρέπει ολόκληρες ιστοσελίδες να επισυνάπτονται σε ένα μήνυμα ΕΜΑΙL, ενώ το δεύτερο, του οποίου τα δικαιώματα ανήκουν στην εταιρία RSA security [128], προωθεί μεθόδους προστασίας του περιεχομένου, της εγκυρότητας, της γνησιότητας καταγωγής και του απόρρητου ενός μηνύματος ΕΜΑΙL από φαινόμενα πλαστογράφησης και υποκλοπής. Το S/ΜΙΜΕ αναμένεται να αποτελέσει, σύντομα, το ισχυρότερο σύστημα προστασίας ηλεκτρονικών δεδομένων για βιομηχανίες, οργανισμούς κτλ [4,40].

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του
- 2.3.3 Chemical Multipurpose Internet Mail Extensions (CMIME)

2.3.3 Chemical Multipurpose Internet Mail Extensions (CMIME)

Οι Βρετανοί ερευνητές H.S. Rzepa [129], P. Murray - Rust [71] και Β.J. Whitaker [130], το 1994, υπέβαλαν στην αρχή Internet Engineering Task Force [119] (IETF) σχέδιο επέκτασης του πρότυπου ΜΙΜΕ που χρησιμοποιούνταν, όπως περιγράφηκε παραπάνω, για τη μεταβίβαση πληροφοριών μέσω ΕΜΑΙL και ιστοσελίδων [31] (web pages), ώστε να επιτρέπει και την ανταλλαγή καθαρά χημικών πληροφοριών, όπως είναι κατά κύριο λόγο οι δομές των χημικών μορίων. Αν και το σχέδιο αυτό, που ονομάστηκε "χημικό" ΜΙΜΕ (Chemical MIME, CMIME [131]), απορρίφθηκε επίσημα, εντούτοις, συνέχισε να χρησιμοποιείται ολοένα και περισσότερο καταλήγοντας να γίνει τελικά αποδεκτό από την πλειονότητα της επιστημονικής κοινότητας [1].

Το νέο είδος, υιοθετώντας το μηχανισμό των αρχείων ΜΙΜΕ, έχει ως γενική κεφαλίδα τον όρο "chemical" κατά αναλογία με τους γενικούς χαρακτηρισμούς "text, message, application, image, audio, video, multipart". Αρχικά, οι δευτερεύουσες κεφαλίδες του CMIME αντιπροσώπευαν ήδη καθιερωμένους στο Internet τύπους αρχείων (Portable Document Format, PDF [132] της Adobe [133] κ.ά.) Λόγω της ιδιαιτερότητας, όμως, των χημικών δεδομένων (δομές μορίων, φάσματα, αλληλουχίες μορίων κτλ) δημιουργήθηκαν πολλές νέες μορφές αρχείων προκειμένου να χειριστούν τον εξαιρετικά πολύπλοκο αυτό όγκο δεδομένων. Αυτοί οι ανερχόμενοι, "μη καθιερωμένοι" (non - standard) τύποι αρχείων διαχωρίζονται από όλους τους υπόλοιπους με χρήση του προθέματος "x-" πριν από το όνομά τους. Το πρόθεμα αυτό δηλώνει μεταβατικότητα και απομακρύνεται μόλις οι κατάλληλες αρχές πιστοποίησης προτύπων στο Internet (συνήθως η IETF) αναγνωρίσουν επίσημα τη νέα μορφή αρχείου [134]. Σύμφωνα με τα παραπάνω, ένα αρχείο CML (Chemical Markup Language, βλ. κεφάλαιο 2.2.3) κωδικοποιημένο με το πρότυπο CMIME συνοδεύεται από την αναγνωριστική κεφαλίδα "chemical/x-cml" [135].

Νέοι τύποι "χημικών" αρχείων επινοούνται από διάφορους χρήστες και εταιρίες του Internet και ανάλογα με την εγκυρότητα και τη χρησιμότητά τους χαρακτηρίζονται ως CMIME, εύκολα και γρήγορα, χωρίς να απαιτούνται γραφειοκρατικές διαδικασίες και κυρίως ανέξοδα. Έτσι, το "ανοιχτό" [88] (open source) στους χρήστες πρότυπο CMIME επεκτάθηκε ταχύτατα στο Internet προς όφελος των μοριακών επιστημών. Οι δευτερεύοντες τύποι του μπορούν να ταξινομηθούν σε διάφορες περιγραφικές κατηγορίες όπως [50]:

Η ΧΗΜΕΙΑ ΣΤΟ ΔΙΑΔΙΚΤΥΟ

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του
- 2.3.3 Chemical Multipurpose Internet Mail Extensions (CMIME)
 - i. μοριακά σύμπλοκα (molecular coordinates), συνδεσιμότητα μορίων (molecular connectivity) και μορφές αλληλουχίας (sequence formats)
 - ii. μοριακά μοντέλα (molecular modeling formats)
 - iii. φασματοσκοπικά δεδομένα (spectroscopic data)
 - iv. γενικευμένοι "αυτο-καθοριζόμενοι" σύγχρονοι τύποι (generic "self-defining" modern formats)

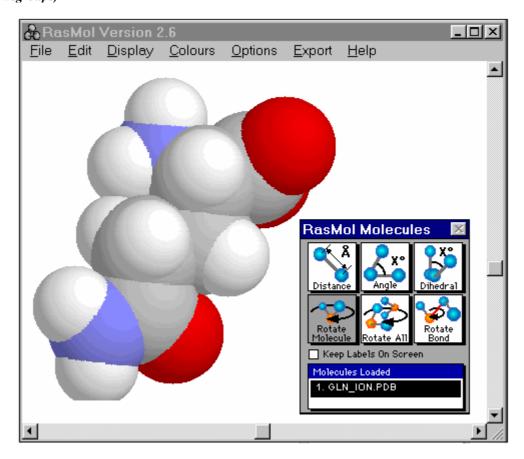
Πλήρης λίστα των CMIME αρχείων συνοδευόμενη από on-line παραδείγματα και περιγραφή των αρχείων **βρίσκεται στη διεύθυνση**:

• http://www.ch.ic.ac.uk/chemime/

(The Chemical MIME Home Page)

Ο συνδυασμός του CMIME με τις υπόλοιπες δυνατότητες του WWW (HTML, URL) επέτρεψε στις χημικές πληροφορίες να αποκτήσουν "ζωντανή" (live) μορφή εντός των ιστοσελίδων. Τα αρχεία οργάνωσης μοριακών δομών απέκτησαν πιο διαδραστικό (interactive) χαρακτήρα με πρωτοποριακές δυνατότητες χρήσης των δεδομένων τους. Το καθαρά "χημικό" περιεχόμενο των πληροφοριών διαχωρίστηκε πλήρως από το στυλ που αυτό παρουσιάζεται στην οθόνη του Η/Υ και έτσι ο χρήστης μπορεί να επιλέξει το πρόγραμμα, που θα εκτελέσει το "άνοιγμά" του. Εξάλλου, τις περισσότερες φορές οι διάφοροι εμπορικοί πλοηγοί στο WWW [22] (browsers) κάνουν χρήση βοηθητικών εφαρμογών προσθήκης [96] (helper plug-ins) από το Internet προκειμένου να αποδώσουν CMIME τύπους. Ανάμεσα σε αυτές τις διαδικτυακές εφαρμογές προσθήκης αναφέρονται ως σημαντικότερες οι RasMol [136], Chime [137] της Elsevier - MDL [138], ChemDraw [139] και Chem3D [140] της CambridgeSoft [141], ChemSymphony της CherWell Scientific - FamilyGenetix Ltd. [142] κ.ά. [91,143,144].

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του
- 2.3.4 Λίστες Μηνυμάτων ηλεκτρονικού ταχυδρομείου (EMAIL Lists) και Ομάδες Συζητήσεων (Newsgroups)



Εικόνα 2.3.3-1 Επιφάνεια εργασίας της εφαρμογής προσθήκης RasMol V 2.6 για τον χειρισμό CMIME αρχείου τύπου PDB [145].

2.3.4 <u>Λίστες Μηνυμάτων ηλεκτρονικού ταχυδρομείου (EMAIL Lists) και Ομάδες</u> Συζητήσεων (Newsgroups)

Για τους χημικούς μία από τις πιο χρήσιμες εφαρμογές του ΕΜΑΙΙ [10] αποτελεί η δυνατότητα ανταλλαγής απόψεων και πληροφοριών μέσω των λεγόμενων "λιστών ηλεκτρονικού ταχυδρομείου" [11] ή απλά "λιστών μηνυμάτων" (Electronic MAILing Lists, EMAIL-L ή mailing lists). Οι πρώτες χημικές λίστες μηνυμάτων έκαναν την εμφάνισή τους στις αρχές του 1990. Σήμερα, ο αριθμός των λιστών αυτών είναι πολλαπλάσιος, καλύπτοντας σχεδόν όλα τα πεδία στον τομέα της Χημείας, ενώ αρκετές λίστες συντηρούνται πια από χορηγούς [1,20].

Ο τρόπος λειτουργίας των Λιστών Μηνυμάτων (ΛΜ) είναι σχετικά απλός. Κάθε λίστα έχει τη δική της "διαχειριστική διεύθυνση ΕΜΑΙΙ." (ΕΜΑΙΙ. administrative address). Όποιο μέλος της λίστας στείλει μήνυμα (ΕΜΑΙΙ.) στη διεύθυνση αυτή, τούτο αυτόματα διανέμεται σε όλα τα μέλη της από τη λεγόμενη "διεύθυνση διανομής ΕΜΑΙΙ." (ΕΜΑΙΙ. distribution address). Η εγγραφή σε μια ΛΜ ενδείκνυται να γίνεται μέσω του

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του
- 2.3.4 Λίστες Μηνυμάτων ηλεκτρονικού ταχυδρομείου (EMAIL Lists) και Ομάδες Συζητήσεων (Newsgroups)

WWW (στην ιστοσελίδα της ΛΜ) αλλά μπορεί να επιτευχθεί και με αποστολή ενός μηνύματος σε μια ειδική για κάθε λίστα διεύθυνση ΕΜΑΙL (συνήθως στη διαχειριστική διεύθυνση). Στις περισσότερες περιπτώσεις, όλες οι προαναφερθείσες διαδικασίες εκτελούνται δίχως ανθρώπινη παρέμβαση και διαχειρίζονται από έναν H/Y - διακομιστή (list server) και το πρόγραμμα διαχείρισης αλληλογραφίας, που χρησιμοποιεί (LISTSERV [146], LISTPROC [147], MAJORDOMO [148], MAILBASE [149] κ.ά.) Σε ορισμένες λίστες είναι δυνατόν να επιτρέπεται η αποστολή μηνυμάτων μόνο από συγκεκριμένα μέλη ή και να διενεργείται έλεγχος των περιεχομένων κάθε μηνύματος, προτού αυτό σταλεί στα υπόλοιπα μέλη (εποπτευόμενες, moderated mailing lists) [1,20].

Ορισμένες από τις πιο δημοφιλείς λίστες Χημείας αναφέρονται ενδεικτικά παρακάτω [1]:

- CHMINF-L (Chemical Information Sources List) [150]
- CCL (Computational Chemistry List) [151]
- CHEMED-L (Chemical Education List) [152]
- CHEMWEB (Chemistry and the Web) [153]
- CHEM-HIST (Chemical History) [154]
- CHEME-L (Chemistry Engineering List) [155]

Αξιόλογοι κατάλογοι με χημικές λίστες μηνυμάτων (ορισμένοι συμπεριλαμβάνουν περιγραφή της κάθε λίστας και των θεμάτων που παρουσιάζονται, στοιχεία που αφορούν τους δημιουργούς της λίστας, στατιστικά δεδομένα, οδηγίες εγγραφής, σχόλια κτλ) μπορούν να βρεθούν στις παρακάτω τοποθεσίες [32] (sites) και ιστοσελίδες [31] (web pages) του WWW:

• http://tccc.iesl.forth.gr/chemistry/lists/

(Index of /chemistry/lists)

http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/links.html

(Virtual Library: Science: Chemistry: Chemical Mailing Lists)

• http://www.indiana.edu/~cheminfo/listserv.html

(Listserves, Discussion Lists and Newsgroups for Chemistry)

• http://tccc.iesl.forth.gr/chemistry/chem lists.html

Η ΧΗΜΕΙΑ ΣΤΟ ΔΙΑΔΙΚΤΥΟ

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του
- 2.3.4 Λίστες Μηνυμάτων ηλεκτρονικού ταχυδρομείου (EMAIL Lists) και Ομάδες Συζητήσεων (Newsgroups)

(Overview of chemical mailing lists)

• http://www.jiscmail.ac.uk/mailinglists/category/F1.htm (JiscMail, Mailing Lists)

Παρόμοιες με τις λίστες μηνυμάτων είναι και οι "ομάδες συζητήσεων" [12] (Newsgroups ή Discussion Lists ή Forums). Οι τελευταίες αποτελούν τον απόγονο των λεγόμενων ηλεκτρονικών πινάκων ανακοινώσεων [156] (Bulletin Boards, BBs), που εμφανίστηκαν σχεδόν μαζί με τον ερχομό του WWW. Οι ηλεκτρονικοί πίνακες ανακοινώσεων είναι συστήματα ΕΜΑΙΙ, όπου οι διάφοροι χρήστες μπορούν να αποστέλλουν ΕΜΑΙΙ ή να διαβάζουν τα ΕΜΑΙΙ που ανακοινώνονται σε αυτούς. Επειδή οι περισσότερες (περίπου 10.000 από το 1981) από τις ομάδες συζητήσεων δημιουργήθηκαν και διαχειρίζονται από το δίκτυο του USENET [157] (USEr NETwork) πολλές φορές αναφέρονται και ως ομάδες συζητήσεων του USENET [1,20].

Τα θέματα στις Ομάδες Συζητήσεων (ΟΣ) κατηγοριοποιούνται με βάση τις λεγόμενες "*ιεραρχίες*" (*hierarchies*) οι σπουδαιότερες από τις οποίες συνοψίζονται παρακάτω [20,158,159]:

- **comp.*** (computers) Επιστήμες των Η/Υ (π.χ. comp.os. linux)
- news.* Νέα σχετικά με το ίδιο το USENET
- rec.* (recreation) Ψυχαγωγία, τέχνη, hobbies (π.χ. rec.bicycles)
- sci.* (scientific) Επιστημονική έρευνα και εφαρμογές (π.χ. sci.chem)
- soc.* (social) Κοινωνικά θέματα (π.χ. soc.religion)
- **biz.*** (business) Θέματα σχετικά με την εργασία, επάγγελμα κτλ (π.χ. biz.jobs)
- **alt.*** (alternative) Εναλλακτικοί τρόποι αντιμετώπισης των πραγμάτων (π.χ. alt.horror)
- misc.* (miscellaneous) Θέματα που δεν μπορούν να κατηγοριοποιηθούν παραπάνω

Οι ΟΣ της Χημείας κατατάσσονται στην ιεραρχία sci. (science) και ειδικότερα στην υποκατηγορία sci.chem. Εκτός από την ομώνυμη ΟΣ (sci.chem.) υπάρχουν πάρα πολλές υποκατηγορίες όπως sci.chem.analytical [160] (Αναλυτικής Χημείας), sci.chem.electrochem [161] (Ηλεκτροχημείας), sci.chem.organic.synthesis [162]

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του
- 2.3.4 Λίστες Μηνυμάτων ηλεκτρονικού ταχυδρομείου (EMAIL Lists) και Ομάδες Συζητήσεων (Newsgroups)

(Οργανικών συνθέσεων), sci.chem.organomet [163] (Οργανομεταλλικής Χημείας) κ.ά. [1]. Ενδιαφέρουσες ΟΣ σχετικές με τη Χημεία, που δεν ανήκουν απαραίτητα στην ιεραρχία sci.chem., παρατίθενται στις διευθύνσεις:

- http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/links.html
 (Chemistry Links for Chemists Information Chemical Newsgroups)
- http://www.chemlin.de/chemistry/science_newsgroups.htm (ChemLin)
- http://chemistry.about.com/od/newsgroupsusenet/
 (About Chemistry Newsgroups / Usenet)
- http://www.indiana.edu/~cheminfo/ca_cndl.html

(DSIRCh: Chemistry Newsgroups and Discussion Lists)

• http://www.faculty.sfasu.edu/chengs/chem.htm

(Chemistry Resources)

Επί της ουσίας, δεν υπάρχουν διαφορές των ΟΣ από τις ΛΜ, στην πράξη όμως τα πράγματα εδώ είναι λίγο πιο ακατάστατα. Στις ΟΣ δεν υπάρχει κάποιος κεντρικός διακομιστής, σε αναλογία με τον list server, με αποτέλεσμα να ανταλλάσσονται τα μηνύματα σε πραγματικό χρόνο μεταξύ των διάφορων τοπικών διακομιστών (local newsgroup servers), σ τους οποίους πρέπει να συνδεθεί ο χρήστης προκειμένου να αναγνώσει ή/και να αποστείλει ΕΜΑΙΙ. Η λεγόμενη "ακαταστασία" προκύπτει από την πληθώρα των μηνυμάτων, τα οποία κατακλύζουν συνήθως την ΟΣ, καθότι η αποστολή ΕΜΑΙΙ επιτρέπεται εν γένει από οποιονδήποτε και συνάμα τα ΕΜΑΙΙ αυτά δεν καταλαμβάνουν χώρο στον Η/Υ του χρήστη. Για την ανάγνωση ΕΜΑΙΙ, που στέλνονται στην ΟΣ, καθώς και για την αποστολή ΕΜΑΙΙ σε αυτήν απαιτείται ένα "πρόγραμμα ανάγνωσης μηνυμάτων σε ΟΣ" [164] (news reader), το οποίο συνδέει το χρήστη με τον τοπικό διακομιστή. Ο news reader μπορεί να είναι είτε αυτόνομο πρόγραμμα είτε εφαρμογή προσθήκης [96] (plug-in) σε πρόγραμμα πλοήγησης στο WWW [22] (browser) [1,20].

Τόσο στις ΛΜ όσο και στις ΟΣ το πλήθος των συνδρομητών ποικίλει από λίγες δεκάδες έως και μερικές χιλιάδες ανά την υφήλιο. Βασιζόμενοι στο ότι οι περισσότεροι άνθρωποι αρέσκονται στο να απαντούν σε ερωτήματα, τα οποία γνωρίζουν, έχουμε

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμοχές του
- 2.3.5 Συνέδρια ηλεκτρονικής μορφής (Electronic conferences)

αυξημένες πιθανότητες να λάβουμε απάντηση απευθυνόμενοι στη λίστα (ή ομάδα) για κάποιο θέμα. Ο άτυπος "κώδικας καλής συμπεριφοράς" [165] (netiquette) συνιστά την ανταπόδοση της βοήθειας εάν τυχόν γνωρίζει κανείς απαντήσεις σε ερωτήματα, τα οποία τίθενται ενώπιον της λίστας (ή ομάδας), όπως και το να αποφεύγει να γίνεται κουραστικός στους υπόλοιπους συνδρομητές υποβάλλοντας το ένα ερώτημα πίσω από το άλλο [1,20]. Εκτός από την καθιερωμένη ανταλλαγή μηνυμάτων για τα θέματα που εξετάζονται στις ΛΜ και τις ΟΣ αρκετές φορές εμφανίζονται μηνύματα επαγγελματικών ευκαιριών, ανακοινώσεις συνεδρίων, έκτακτες επικλήσεις για βοήθεια στην αναζήτηση πληροφοριών κτλ. Επιπρόσθετα, τα αρχεία που αποστέλλονται στις ΛΜ είναι αυστηρά αρχειοθετημένα και οργανωμένα αποτελώντας βάσεις δεδομένων με αντικειμενικά και αξιοποιήσιμα δεδομένα [4].

2.3.5 Συνέδρια ηλεκτρονικής μορφής (Electronic conferences)

Η οργάνωση επιστημονικών συνεδρίων αποτελεί γεγονός ύψιστης σημασίας για την προώθηση της γνώσης στις διάφορες κοινωνικές ομάδες και για την ίδια την επιστημονική κοινότητα. Σε τέτοιου είδους συναντήσεις πληροφορίες ανταλλάσσονται και παρουσιάζονται σε πραγματικό χρόνο, αποτελέσματα έρευνας γίνονται διαθέσιμα σε ένα ευρύ κοινό και μπαίνουν οι βάσεις για διεθνείς συμφωνίες συνεργασίας μεταξύ ακαδημαϊκών ή άλλων φορέων.

Μετά το 1993 έκαναν την εμφάνισή τους, στα πεδία της Χημείας, τα πρώτα "συνέδρια ηλεκτρονικής μορφής" (electronic conferences, e-conferences) δηλαδή συνέδρια, που πραγματοποιούνται αποκλειστικά στο WWW. Τα χημικά "Ηλεκτρονικά" Συνέδρια (ΗΣ) αποτέλεσαν για τους χημικούς ένα νέο τρόπο ανταλλαγής ιδεών και πληροφοριών κάνοντας χρήση των διάφορων δυνατοτήτων του Internet όπως τα πρωτόκολλα επικοινωνίας (HTML [36], Java [54], VRML [90], ΜΙΜΕ [120]), οι πλοηγοί στο WWW [22] (browsers), οι υπερσυνδέσεις [35] (hyperlinks) κ.ά., οι οποίες, όσο περνούσε ο καιρός, βελτιωνόταν αισθητά [50,166].

Τα πρώτα χημικά ΗΣ (ECCC-1 1994 (1st Electronic Computational Chemistry Conference) [167], INCINC'94 1994 (1st Chemometrics On-line Conference) [168]) χαρακτηρίζονται από πολύ υψηλά ποσοστά συμμετοχής, ερευνητών και σπουδαστών ακόμη και απλών χρηστών του WWW (περισσότεροι από 10.000 επισκέπτες σε διάστημα 2 μηνών) [50]. Οι ταχύτητες σύνδεσης στο Internet ήταν πολύ χαμηλές συγκρινόμενες με

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του
- 2.3.5 Συνέδρια ηλεκτρονικής μορφής (Electronic conferences)

τις σημερινές, ενώ η εφαρμογή που χρησιμοποιήθηκε κατά κόρον ήταν το **EMAIL** [10][166].

Στο ECCC-1 1994 δημιουργήθηκε μία Λίστα Μηνυμάτων [11] (Mailing List) και μία Ομάδα Συζητήσεων [12] (Newsgroup) ειδικά για τις ανάγκες του συνεδρίου. Οι προς παρουσίαση μελέτες υποβάλλονταν στους διοργανωτές του συνεδρίου μέσω ΕΜΑΙΙ σε μορφή HTML κάνοντας επίσημα χρήση του πρωτοκόλλου ΜΙΜΕ. Οι επιλεχθείσες μελέτες τοποθετήθηκαν σε κατάλληλη τοποθεσία [32] (site) του WWW, ενώ η συζήτηση, οι ερωτήσεις και οι γενικότερες τοποθετήσεις επί των μελετών έγιναν μέσω της Ομάδας Συζητήσεων του συνεδρίου. Η συμμετοχή στο συνέδριο (όπως και στα περισσότερα ηλεκτρονικά συνέδρια εκείνης της εποχής) ήταν, για λόγους προσέλκυσης συμμετεχόντων, χωρίς χρέωση [50,166,169,170].

Στα επόμενα έτη η πρόοδος των χημικών ΗΣ ήταν αξιοσημείωτη συμβαδίζοντας με αυτήν των εφαρμογών του Internet. Οι "τετριμμένες" Ομάδες Συζητήσεων (ΟΣ) αντικαταστάθηκαν από τα λεγόμενα "Multi-user definition Objects Oriented" [171] (MOO), που επέτρεπαν την on-line [i-14] πλοήγηση από τα αρχεία - μελέτες στο WWW στις ΟΣ και ανάποδα (MGMS EC1 1996 (1st Molecular Graphics and Molecular Modeling Society Electronic Conference) [172]) [50,166]. Το MOO είναι ένας 3-D "χώρος" στην οθόνη του Η/Υ, που υποστηρίζει το γειρισμό 3-D αντικειμένων (π.γ. 3-D "δωμάτια επικοινωνίας" και "αίθουσες προβολής παρουσιάσεων") και τη χρήση ποικίλων εφαρμογών (video players κ.ά.) Επίσης, για πρώτη φορά, τη ροή των παρουσιάσεων καθώς και των ερωτήσεων από το κοινό καθόριζε ένας "συντονιστής" (moderator) μέσω του ΜΟΟ. Τα πρακτικά των συνεδρίων άρχισαν να συγκεντρώνονται σε αρχεία ψηφιακής μορφής και να διανέμονται σε μαγνητικούς συμπιεσμένους δίσκους [108] (Compact Discs Read-Only-Memory ή CDs ROM) από αναγνωρισμένους εκδοτικούς οίκους. Μάλιστα, στο ΕССС-4 1997 [167] η φόρμα παρουσίασης των μελετών έγινε το πρότυπο για τη δημιουργία του πρώτου, πλήρως διαδικτυακού, χημικού περιοδικού, του Internet Journal of Chemistry [173,166].

Άλλα ΗΣ (ECTOC-1 1996 (1st Electronic Conference on Trends in Organic Chemistry) [174]) εισήγαγαν "μοριακά υπερ-γλωσσάρια" (molecular hyperglossaries) τα οποία περιείχαν 3-D δομές μορίων και αποτελούσαν ομάδες αρχειοθετημένων δεδομένων τα οποία μπορούσαν εύκολα να ανακτηθούν και να επεξεργαστούν μέσω Internet [175]. Στο ECHET96 1996 (1st Electronic Conference on Heterocyclic Chemistry) [176] τα πράγματα εξελίχθηκαν ακόμη περισσότερο. Οι ερευνητές

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του
- 2.3.5 Συνέδρια ηλεκτρονικής μορφής (Electronic conferences)

μπορούσαν, πλέον, να επεξεργαστούν τις μελέτες, που επρόκειτο να καταθέσουν, μέσω μιας ειδικής "διασυνδετικής διάταζης" [177] (interface) στο WWW. Ένα "πρόγραμμα εύρεσης όμοιων εργασιών" [178] (molecular similarity clustering) πρόσφερε στους δημιουργούς εναλλακτικούς τρόπους παρουσίασης των εργασιών τους σύμφωνα με άλλες, παραπλήσιου θέματος, εργασίες. Κατά τη διάρκεια του ECG-1 1996 (1st Electronic Conference in Glycoscience) [179] κάθε θεματική ενότητα του συνεδρίου είχε τη δική της τοποθεσία (web site) και οι συζητήσεις τελούνταν σε πραγματικό χρόνο μεταξύ των συμμετεχόντων. Στο ίδιο συνέδριο τα πρακτικά εκδόθηκαν σε έντυπο επιστημονικό περιοδικό και όχι σε CD-ROM, όπως είχε καθιερωθεί, και η τάση αυτή συνεχίζεται μέχρι σήμερα για τα ΗΣ των ίδιων οργανισμών (ECG-2, e-MGMS). Αναμενόμενο ήταν, επίσης, να τεθούν τέλη συμμετοχής σε ορισμένα ΗΣ, να εμφανιστούν οικονομικοί χορηγοί για την οργάνωσή τους και ακόμη, να πραγματοποιηθούν συνέδρια από μη ακαδημαϊκούς φορείς (MGMS EC1 1996 [172]) [50,166].

Έως τις αρχές του 2005 έχουν πραγματοποιηθεί πάμπολλα ΗΣ σε συγκεκριμένους όμως τομείς της Χημείας (Υπολογιστική Χημεία, Εφαρμοσμένη Οργανική Χημεία, Μοριακή Προσομοίωση κτλ). Τα ΗΣ θα συνεχίσουν να υφίστανται λόγω των ασύγκριτων πλεονεκτημάτων τους. Το σημαντικότερο από αυτά είναι το χαμηλό κόστος συμμετοχής σε σχέση με τα "πραγματικά" συνέδρια και φυσικά η απουσία εξόδων μετακίνησης και διαμονής. Τα ΗΣ δίνουν σε ακαδημαϊκούς, σπουδαστές και άλλου είδους ερευνητές τη δυνατότητα παρακολούθησής τους χωρίς να χρειάζεται να παραμελήσουν τα καθήκοντά τους και διαθέτοντας όσο χρόνο επιθυμούν από το καθημερινό τους ωράριο, καθότι διαρκούν πολύ περισσότερο (έως και ένα εξάμηνο) από τα κανονικά συνέδρια. Συνάμα, στα ΗΣ μπορούν, εύκολα, να συμμετέχουν άτομα που αντιμετωπίζουν δυσκολίες παρακολούθησης σε πραγματικά συνέδρια (π.χ. άτομα με κινητικά προβλήματα), επιστήμονες από φτωχές χώρες της υφηλίου ή από ιδρύματα περιορισμένων οικονομικών δυνατοτήτων [135,166,169,170,180].

Εκτός από τα σημαντικά πλεονεκτήματα των ΗΣ μπορεί κανείς να διακρίνει και αρκετά μειονεκτήματα. Η έλλειψη του στοιχείου της προσωπικής επαφής μεταξύ των συνέδρων αποτελεί την αχίλλειο πτέρνα των ΗΣ. Οι άνθρωποι έχουν την ανάγκη της δημιουργίας στενότερων διαπροσωπικών σχέσεων, της επαφής πρόσωπο με πρόσωπο, της συζήτησης σε μη επιστημονικό επίπεδο, αλλά όλα αυτά δεν μπορεί να τα προσφέρει ένα ΗΣ. Για μερικούς, ωστόσο, αυτή η απουσία της διαδραστικότητας με άλλους συνέδρους δεν αποτελεί κατά ανάγκη μειονέκτημα καθότι επιτρέπει την αφοσίωση στις

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του
- 2.3.5 Συνέδρια ηλεκτρονικής μορφής (Electronic conferences)

επιστημονικές εργασίες και δίνει σε έναν σύνεδρο το χρόνο να οργανώσει τους προβληματισμούς του πάνω σε μία παρουσίαση ή να απαντήσει ολοκληρωμένα σε παρατηρήσεις άλλων συνέδρων [166].

Το δεύτερο κύριο **μειονέκτημα** περιορίζεται στα χημικά ΗΣ και αφορά στην καθυστέρηση με την οποία οι χημικοί ενστερνίζονται αυτό το νέο είδος επικοινωνίας. Η χημική κοινότητα δείχνει γενικά απροθυμία να δεχτεί τις καινοτομίες, που καθιερώνει το Διαδίκτυο με εξαίρεση ορισμένους μεμονωμένους κλάδους της (π.χ. Υπολογιστική Χημεία και Μοριακή Προσομοίωση) και αυτό την καθιστά ιδιαίτερα "οπισθοδρομική" σε σχέση με άλλες, συναφείς επιστημονικές κοινότητες [166].

Ένα άλλο ελάττωμα, όχι τόσο σημαντικό αλλά εξίσου ουσιαστικό, είναι ότι καθώς στα ΗΣ συμμετέχουν άνθρωποι από κάθε γωνιά της γης (με διαφορά ώρας που φτάνει ακόμη και τη μισή μέρα) δημιουργούνται προβλήματα, που αφορούν στο καθημερινό χρονοδιάγραμμα των συνεδρίων. Έτσι, πολλοί σύνεδροι είναι αναγκασμένοι να μείνουν άυπνοι προκειμένου να παρακολουθήσουν το γεγονός, ιδιαίτερα όταν αυτό πραγματοποιείται σε άμεσο χρόνο [166].

Όσο η τεχνολογία κάνει προόδους στις διαδικτυακές εφαρμογές τόσο πιο εύκολα διοργανώνονται ΗΣ και τόσο πιο επιτυχή είναι. Τα ΗΣ δεν πρόκειται σε καμία περίπτωση να αντικαταστήσουν τα τυπικά συνέδρια αναμένεται όμως να αποτελέσουν βασικότατες εφαρμογές υποστήριξης των τελευταίων πριν ή/και μετά την πραγματοποίησή τους. Γεγονός είναι ότι στις αρχές του 21^{ov} αιώνα δε νοείται αξιόλογο συνέδριο χωρίς διαδικτυακή βοήθεια (εικόνα 2.3.5-1). Πολλές από τις διαδικασίες των σύγχρονων συνεδρίων όπως η προώθηση - διαφήμιση του συνεδρίου, η υποβολή των αιτήσεων συμμετοχής και η διανομή των μελετών - παρουσιάσεων πριν την έναρξη του συνεδρίου, η παροχή τουριστικών και ταξιδιωτικών πληροφοριών για τον τόπο που φιλοξενεί το συνέδριο κ.ά. γίνονται μέσω του Internet [166,181].

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του
- 2.3.5 Συνέδρια ηλεκτρονικής μορφής (Electronic conferences)



Εικόνα 2.3.5-1 Η αρχική σελίδα του "11th International Conference of the Applications of DFT in Chemistry and Physics -2005" [182]. Κάθε είδους επιστημονικό συνέδριο χρησιμοποιεί το Internet για την καλύτερη διοργάνωσή του.

Η ιδέα των ΗΣ είναι ιδανική για τη "φυσική συνέχιση" των πραγματικών συνεδρίων επιτρέποντας στους συμμετέχοντες να παρατείνουν τη συζήτηση επί των παρουσιάσεων και μετά τη λήξη των συνεδρίων ακόμη και μέχρι το επόμενο συνέδριο του ίδιου θέματος [50,166,181]. Η αξιοποίηση σύγχρονων μεθόδων ψηφιακής μετάδοσης εικόνας με σκοπό την απευθείας κάλυψη των πραγματικών συνεδρίων στο WWW (ChemInt 1998-2003, Chemistry and the Internet Conferences [183]) είναι ο συνδετικός κρίκος μεταξύ "ηλεκτρονικών" και "μη ηλεκτρονικών" συνεδρίων. Επιστήμονες που δεν δύνανται, για διάφορους λόγους, να παραβρεθούν σε πραγματικά συνέδρια έχουν πλέον το δικαίωμα της "τηλε-παρουσίας" (remote attendance) σε αυτά [166]. Ενδιαφέρουσες συλλογές ηλεκτρονικών, και όχι μόνο, χημικών συνεδρίων, που περατώθηκαν ή έχουν προγραμματιστεί για το μέλλον, βρίσκονται στις παρακάτω διευθύνσεις του WWW.

- http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/conferences.html
- (Virtual Library: Science: Chemistry: Chemical Conferences)
- http://www.ch.ic.ac.uk/ectoc/

(Electronic Conferences on Trends in Organic Chemistry)

Η ΧΗΜΕΙΑ ΣΤΟ ΔΙΑΔΙΚΤΥΟ

- 2.3 Ηλεκτρονικό ταχυδρομείο και εφαρμογές του
- 2.3.5 Συνέδρια ηλεκτρονικής μορφής (Electronic conferences)
 - http://hackberry.chem.trinity.edu/econf.html
 (Electronic Conferences hosted by the Trinity University
 Cheminformatics Site)
 - http://www.chemistry-conferences.com/
 (Chemistry Conferences.com, Worldwide Conferences, Exhibitions and Trade Fairs)
 - http://www.konference.wz.cz/index.php?lang=en (Chemistry Conferences and Events)

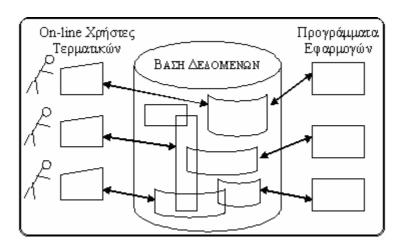
2.4 Αναζήτηση πληροφοριών στο Διαδίκτυο – Χημικές Βάσεις Δεδομένων και Μηχανές Αναζήτησης

2.4.1 Τι είναι οι Βάσεις Δεδομένων (Data Bases)

2.4 Αναζήτηση πληροφοριών στο Διαδίκτυο – Χημικές Βάσεις Δεδομένων και Μηχανές Αναζήτησης

2.4.1 <u>Τι είναι οι Βάσεις Δεδομένων (Data Bases)</u>

Μία Βάση Δεδο μένων (Data Base) [184] ή Τράπεζα Πληροφοριών (Data Bank) θα μπορούσε να χαρακτηρισθεί ως μια συλλογή από δεδομένα επί του Η/Υ, οργανωμένη κατά τέτοιο τρόπο, ώστε οι διάφορες εφαρμογές μπορούν μεν εύκολα να την χρησιμοποιούν και να την ενημερώνουν, αλλά που οι ίδιες δεν καθορίζουν αναγκαστικά το σχεδιασμό ή το περιεχόμενό της. Πιο ελεύθερα, θα μπορούσε να χαρακτηρισθεί σαν μια "δεξαμενή" χρήσιμων κοινών πληροφοριών με υψηλό βαθμό οργάνωσης (data integration), που μπορούν να χρησιμοποιούν και να ενημερώνουν σύμφωνα με τις ανάγκες τους οι διάφορες εφαρμογές του οργανισμού ή επιχείρησης, ή οποία όμως υπάρχει ανεξάρτητα από αυτές (data independence). Σε μία Βάση Δεδομένων (ΒΔ) τα δεδομένα υπάρχουν στον υπολογιστή (ή τους υπολογιστές) μία μόνο φορά [σε μαγνητικούς δίσκους [108] (CDs-ROM), μαγνητικές ταινίες [109] (floppy disks) ή άλλης μορφής μαγνητικά μέσα], ανεξάρτητα αν χρησιμοποιούνται σε περισσότερες από μία εφαρμογές (data integrity). Διάφορα προγράμματα εφαρμογών επεξεργάζονται τα δεδομένα αυτά με όλους τους δυνατούς τρόπους (ενημερώσεις, τροποποιήσεις, αναζητήσεις κτλ), ενώ μια ομάδα από on-line [i-14] χρήστες επικοινωνούν με τη ΒΔ με τη βοήθεια τερματικών σταθμών και έχουν ανάλογες δυνατότητες [185,186,187]. Στην εικόνα 2.4.1-1, που ακολουθεί, δίνεται η απλοποιημένη δομή μιας ΒΔ.



Εικόνα 2.4.1-1 Απλοποιημένη δομή της έννοιας ενός συστήματος Βάσης Δεδομένων [185].

2.4 Αναζήτηση πληροφοριών στο Διαδίκτυο – Χημικές Βάσεις Δεδομένων και Μηχανές Αναζήτησης 2.4.1 Τι είναι οι Βάσεις Δεδομένων (Data Bases)

Στην απλούστερη μορφή της μια ΒΔ αποτελείται από αρχεία (files), καταγραφές (records) και πεδία (fields). Οι τρεις παραπάνω οντότητες συνδέονται ιεραρχικά, δηλαδή ένα αρχείο μπορεί να περιέχει πολλές καταγραφές και αυτές με τη σειρά τους πολλά πεδία [184,187]. Για παράδειγμα, σε μία ΒΔ που περιέχει έναν κατάλογο διευθύνσεων και τηλεφώνων οι παραπάνω ομάδες παρουσιάζονται στην εικόνα 2.4.1-2.

αταγραφή Ηλιάδου Χριστίνα Δημοκρίτου 20 3238080		
/Ηλιάδου Χριστίνα	Δημοκρίτου 20	32380800
Ηλιάδου Φωτεινή	Ισαύρων 4	41204516
Ηλιάδου Μαρία	Αγ. Σοφίας 88	32349744
Ηλιάδης Κίμωνας	Δαμιανού 11	24613556
Ηλιάδης Γεώργιος	Κασσάνδρου 45	54658899

Εικόνα 2.4.1-2 Η απλούστερη μορφή μιας Βάσης Δεδομένων με αρχεία, καταγραφές και πεδία.

Ολόκληρη η αρχιτεκτονική μιας ΒΔ στηρίζεται στο Σύστημα Διαχείρισης Βάσεως Δεδομένων (ΣΔΒΔ) [188] (Data Base Management System), όπου περιλαμβάνεται όλο το απαραίτητο λογισμικό [61] (software). Σε συνεργασία με το λειτουργικό σύστημα [56] (operating system) (Unix [57], Macintosh OS [58], Windows [45]) και το υπόλοιπο βασικό software του Η/Υ (ή των Η/Υ) το ΣΔΒΔ είναι υπεύθυνο για την πρόσβαση στα δεδομένα, την ασφάλεια, την αποθήκευση και επεξεργασία τους καθώς και γενικότερες διεργασίες που αφορούν την επικοινωνία της ΒΔ με εξωτερικούς χρήστες ή/και προγράμματα. Το ΣΔΒΔ μπορεί είτε να κατασκευασθεί από τον ίδιο τον οργανισμό/επιχείρηση, που διατηρεί τη ΒΔ (πράγμα δύσκολο), είτε να αγορασθεί έτοιμο και να προσαρμοστεί στις συγκεκριμένες ανάγκες (όπως γίνεται συνήθως). Το πρόσωπο

2.4 Αναζήτηση πληροφοριών στο Διαδίκτυο – Χημικές Βάσεις Δεδομένων και Μηχανές Αναζήτησης 2.4.2 On - Line Βάσεις Χημικών Δεδομένων στο Διαδίκτυο

(ή πρόσωπα) που είναι υπεύθυνο για το σχεδιασμό και τη χρήση της ΒΔ αποτελεί το λεγόμενο Δ*ιαχειριστή της Β*Δ (Data Base Administrator) [185,187].

Στο Internet οι περισσότερες ΒΔ είναι πολύ πιο πολύπλοκες και συνήθως είναι οργανωμένες σύμφωνα με τη δομή δικτύου (network) ή υπερκειμένου [34] (hypertext) [189]. Σε αυτή τη δομή όλα τα αντικείμενα [66] (objects) της ΒΔ (κείμενο, εικόνα, video κτλ) συνδέονται μεταξύ τους και αλληλοεπηρεάζονται μέσω υπερσυνδέσεων [35] (hyperlinks). Τέτοιου είδους ΒΔ αποτελούν χρήσιμα εργαλεία για την οργάνωση τεράστιου μεγέθους εντελώς ανόμοιων πληροφοριών, αλλά δεν ενδείκνυνται για υπολογισμούς και αριθμητική ανάλυση (numerical analysis) [184].

2.4.2 On - Line Βάσεις Χημικών Δεδομένων στο Διαδίκτυο

Οι χημικές ΒΔ εμφανίστηκαν στο Internet μετά το 1993 περίπου αλλά από τότε αυξήθηκαν αισθητά, φτάνοντας σήμερα να αποτελούν ένα πολύ σημαντικό εργαλείο στην αναζήτηση χημικών δεδομένων. Σε τέτοιου είδους ΒΔ ένας χρήστης του Διαδικτύου μπορεί να εντοπίσει τάχιστα πολλές χημικές και φυσικές ιδιότητες χημικών ουσιών ακόμη και εξειδικευμένες πληροφορίες. Η χρήση των βάσεων αυτών παρέχεται πολλές φορές δίχως χρέωση, αν και είναι δυνατόν ορισμένες πολύ εξειδικευμένες ή πού μεγάλες ΒΔ να προσφέρονται επί πληρωμή. Οι δημοφιλέστερες πάντως χημικές ΒΔ είναι αυτές οι οποίες παρέχουν, άνευ οικονομικής επιβάρυνσης, συγκεντρωτικές πληροφορίες για κάθε χημική ουσία [1]. Παρακάτω παρουσιάζονται οι σημαντικότερες τοποθεσίες [32] (web sites) με χημικές ΒΔ, μεταξύ των οποίων, βάσεις με γενικές μοριακές ιδιότητες, φάσματα, πληροφορίες επικινδυνότητας, στερεοχημικούς τύπους, περιοδικούς πίνακες κ.ά.

ChemFinder (http://chemfinder.com/)

Στον ChemFinder, της εταιρίας **CambridgeSoft** [141], προσφέρεται η δωρεάν δυνατότητα αναζήτησης πληροφοριών βάσει της ονομασίας της ένωσης (εμπειρική ή μη) ή των αρχικών της, του μοριακού ή συντακτικού της τύπου, του μοριακού βάρους της ακόμη και του αριθμού κατάταξης της ουσίας στα Chemical Abstracts [190] (CAS Registry Number ή CASRN). Για τη χρήση της βάσης απαιτείται η εγγραφή (registration) στη βάση με χρήση της διεύθυνσης ΕΜΑΙL του χρήστη. Μετά την αναζήτηση εμφανίζονται σε νέο παράθυρο [124] (window) πληθώρα δεδομένων για την ένωση, όπως

συνώνυμοι όροι, συντακτικός τύπος και στερεοχημική δομή, φυσικοχημικές ιδιότητες και σταθερές (σημεία τήξεως και βρασμού, μοριακό βάρος, διαλυτότητα στο νερό κ.ά.), αριθμοί κατάταξης της ένωσης (CASRN, ACX [191], DOT [192]), οπτικά χαρακτηριστικά (ορατή ή όχι, χρώμα κτλ), πληροφορίες επικινδυνότητας (εύφλεκτο ή όχι, τοξικό κτλ). Ο ChemFinder παρέχει, επίσης, κατάλογο διάφορων διευθύνσεων στο WWW, όπου υπάρχουν επιπρόσθετες πληροφορίες για την εν λόγω ουσία. Για παράδειγμα, εμφανίζονται διευθύνσεις που σχετίζονται με τομείς όπως Βιοχημεία, Υγεία, Φαρμακευτική, Σελίδες Δεδομένων Ασφαλείας Υλικών (Material Safety Data Sheets, MSDS), αποθήκευση και χρήση ουσιών, περιβαλλοντικές επιπτώσεις, κανονισμοί ελέγχου (regulations), εμπορικές πληροφορίες (π.χ. εταιρίες παραγωγής, σημεία και τιμές πώλησης κτλ) και βέβαια, φυσικοχημικές ιδιότητες.

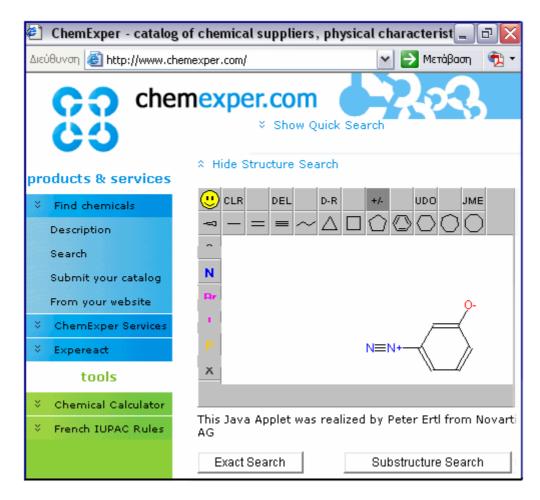
Εκτός από τη βάση του ChemFinder η ίδια εταιρία διατηρεί αρκετές, πιο εξειδικευμένες ΒΔ, οι οποίες όμως δεν προσφέρονται δωρεάν. Μεταξύ αυτών συγκαταλέγονται Βάσεις Σχετικών Δεδομένων (Reference Databases), δηλαδή βάσεις που συγκεντρώνουν διευθύνσεις άλλων βάσεων και παραπέμπουν αλλού για την αναζήτηση συγκεκριμένων πληροφοριών (ChemINDEX, NCI, The Merck Index, Ashgate Drugs), αυτόνομες Βάσεις Χημικών Δεδομένων (Chemical Databases), όπως η σειρά προϊόντων ChemACX, Βάσεις Δεδομένων Χημικών Αντιδράσεων (Reaction Databases), όπως οι Organic Syntheses, ChemReact, ChemSynth και τέλος Βάσεις με Κανονισμούς Ασφαλείας (Safety Databases) όπως η ChemMSDX.

ChemExper

(http://www.chemexper.com/)

Η ομάδα επιστημόνων της ChemExper έχει δρομολογήσει μια αξιόλογη προσπάθεια για την οργάνωση μιας αξιόπιστης, εντελώς δωρεάν, χημικής ΒΔ στο WWW. Κάθε χρήστης του WWW έχει δικαίωμα πρόσβασης στη βάση δωρεών και κυρίως μπορεί να υποβάλλει νέες ή πιο βελτιωμένες πληροφορίες σε αυτήν μέσω ΕΜΑΙL με τη βοήθεια της εφαρμογής Expereact WEB [193]. Όλες οι πληροφορίες που υποβάλλονται στη βάση διατηρούνται σε αυτήν, ακόμη κι αν αφορούν στο ίδιο χαρακτηριστικό μιας συγκεκριμένης ένωσης, ενώ ως πηγή αναφοράς προβάλλεται η διεύθυνση ΕΜΑΙL του εκάστοτε υποβάλλοντα. Περίπου 40.000 χημικές δομές, 16.000 Σελίδες Δεδομένων Ασφαλείας Υλικών (Material Safety Data Sheets, MSDS) και περισσότερα από 100.000

χημικά και όχι μόνο προϊόντα 250 χημικών εταιριών συγκαταλέγονται στα περιεχόμενα της βάσης. Η αναζήτηση μπορεί να γίνει με βάση τον αριθμό υποβολής ή κατάταζης (registry number) στη ΒΔ, την ονομασία (εμπειρική ή μη) ή συνώνυμους όρους, το μοριακό τύπο, φυσικοχημικές ιδιότητες (μοριακό βάρος, σημεία βρασμού και τήξεως, πυκνότητα, ειδική γωνία στροφής, μέγιστο στο ΙR) ή με συνδυασμό όλων των παραπάνω. Επίσης, μία διαδικτυακή εφαρμογή Java [63] (Java applet) παρέχει τη δυνατότητα on-line δημιουργίας του συντακτικού τύπου (2-D μορφή) της ένωσης ή ενός τμήματος αυτής με χρήση δεσμών και βασικών ατόμων, εάν ο χρήστης δεν γνωρίζει άλλες πληροφορίες για αυτήν (εικόνα 2.4.2-1). Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται, όπως και στον ChemFinder, σε λίστα υπερσυνδέσεων [35] (hyperlinks) στις διάφορες πηγές της βάσης (εταιρίες παροχής), όπου με επιλογή κάθε υπερσύνδεσης εμφανίζονται σε νέο παράθυρο τα δεδομένα της πηγής.



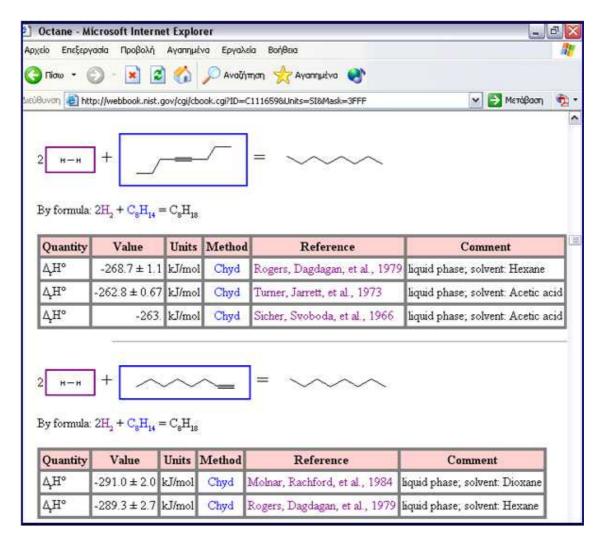
Εικόνα 2.4.2-1 Αναζήτηση χημικών δεδομένων στην ChemExper όπου παρέχεται η δυνατότητα της αναζήτησης με βάση την on-line κατασκευή του (2-D) συντακτικού τύπου της ένωσης (http://www.chemexper.com/)

NIST Chemistry WebBook

(http://webbook.nist.gov/chemistry/)

To Chemistry WebBook του National Institute of Standards and Technology (NIST) [194] αποτελεί ίσως τη σημαντικότερη και πληρέστερη δωρεάν ΒΔ στο WWW όσο αφορά συντελεστές φυσικοχημικών ιδιοτήτων και αντιδράσεων. Η αναζήτηση γίνεται και εδώ, όπως στις βάσεις που περιγράφηκαν παραπάνω, αλλά εδώ υπάρχει και η δυνατότητα της αναζήτησης πληροφοριών σε συγκεκριμένες επιστημονικές μελέτες ενός ή μιας ομάδας επιστημόνων. Συνάμα, πληροφορίες δύναται να αντληθούν με βάση όρους αναζήτησης τύπου ενέργειας ιοντισμού ή δονήσεως μορίου, ενθαλπίες μεταβολής φάσεων, θερμοχωρητικότητες, διατομικές σταθερές κ.ά. Στα αποτελέσματα συγκαταλέγονται θερμοχημικά δεδομένα φάσεων, δεδομένα αλλαγής φάσης, ενθαλπίες και εντροπίες συγκεκριμένου είδους αντιδράσεων, στις οποίες μετέγει μία ένωση, σταθερές του Νόμου Henry, δυναμικά ιόντων και συμπλόκων, ενέργειες ιοντισμού κ.ά. Αίσθηση προκαλεί, από την άλλη, η προβολή φασμάτων αέριας φάσης υπέρυθρου (ΙR), υπεριώδους/ορατού (UV/Vis) και μάζας (MS) με δυνατότητα μεγέθυνσης ενός συγκεκριμένου τμήματος, αποθήκευσης στον Η/Υ σε διάφορες μορφές (JCAMP-DX [195], SVG [196]) και εκτύπωσής του. Τα δεδομένα της βάσης δημιουργήθηκαν από αξιόπιστες έντυπες συλλογές χημικών πληροφοριών (π.χ Journal of Physical and Chemical Reference Data [197], Molecular Spectra and Molecular Structure, IV, Constants of Diatomic Molecules [198] κ.ά.), οι οποίες μετατράπηκαν σε μια καλά οργανωμένη, ηλεκτρονικής μορφής, βιβλιοθήκη.

Το πρωτοποριακό χαρακτηριστικό του Chemistry WebBook είναι ότι δίπλα σε κάθε δεδομένο παρέχεται η πηγή προέλευσής του, η μέθοδος υπολογισμού του και διάφορα άλλα κατατοπιστικά σχόλια καθώς και η δυνατότητα μετατροπής από ένα σύστημα μονάδων σε άλλο (SI και calorie-based). Στην αρχική σελίδα της βάσης μπορεί κανείς να βρει γενικά στοιχεία για τις βιβλιογραφικές πηγές και τον τρόπο οργάνωσης και δημιουργίας των δεδομένων της (εικόνα 2.4.2-2).



Εικόνα 2.4.2-2 Αποτελέσματα αναζήτησης στο NIST WebBook για το n-οκτάνιο. Δίπλα σε κάθε δεδομένο παρέχεται η πηγή προέλευσής του, η μέθοδο υπολογισμού του και διάφορα άλλα κατατοπιστικά σχόλια (http://webbook.nist.gov/chemistry/).

Το NIST προσφέρει δωρεάν πρόσβαση και σε άλλες ΒΔ του οργανισμού μεταξύ των οποίων η βάση CODATA [199] με τις παγκόσμιες σταθερές και τους συντελεστές μετατροπής μονάδων, η NIST Atomic Spectra Database [200] (ASD), που περιέχει ακριβείς θέσεις των φασμάτων για όλα σχεδόν τα χημικά στοιχεία, η NIST Chemical Kinetics Database on the Web [201] με δεδομένα κινητικής χημικών αντιδράσεων, η IUPAC - NIST Solubility Database [202] με δεδομένα διαλυτότητας για τους περισσότερους διαλύτες και ακόμη περισσότερες, που βρίσκονται συγκεντρωμένες στη διεύθυνση:

• http://www.nist.gov/srd/online.htm

(NIST Scientific and Technical Databases - Online Scientific Databases)

Spectral Database for Organic Compounds, SDBS

(http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/cgi-bin/cre index.cgi)

Η βάση SDBS του National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST) [203] στην Τsukuba της Ιαπωνίας αποτελεί την πληρέστερη συλλογή φασματοσκοπικών δεδομένων οργανικών ουσιών σε ολόκληρο το WWW. Η προσπάθεια αυτή ξεκίνησε από το 1970 και ολοκληρώθηκε το 1999 με τη βοήθεια του National Metrology Institute of Japan [204] (NMIJ) και του Tsukuba Advanced Computing Center [205] (TACC), ενώ αξιοσημείωτο είναι το γεγονός ότι οι περισσότερες μετρήσεις πραγματοποιήθηκαν στα ιδρύματα αυτά. Σήμερα η SDBS παρέχει δωρεάν φασματοσκοπικές πληροφορίες για περισσότερα από 32.200 οργανικές ενώσεις (στην υγρή κυρίως φάση) και πιο συγκεκριμένα διατηρεί 22.900 φάσματα μάζας (MS), 14.000 πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού ¹H (¹H NMR), 12.300 πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού ¹²C (¹²C NMR), 49.800 υπερύθρου (IR), 3.500 Raman και 2.500 ηλεκτρονικού spin συντονισμού (ESR). Η βάση δίνει, επίσης και λεπτομέρειες σχετικά με τον τρόπο δημιουργίας των φασμάτων, τις μεθόδους που ακολουθήθηκαν, τις συνθήκες εκτέλεσης των πειραμάτων, τα υλικά που χρησιμοποιήθηκαν κτλ.

• The RCSB Protein Data Bank

(http://www.rcsb.org/pdb/)

Η Research Collaboratory for Structural Bioinformatics [206] (RCSB) διατηρεί εδώ και χρόνια τη γνωστή συλλογή περισσότερων από 17.000 τρισδιάστατων (3-Dimensional, 3-D) δομών βιομακρομορίων, την Protein Data Bank (PDB). Η τελευταία διαχειρίζεται από το Rutgers – The State University of New Jersey [207] και το San Diego Supercomputer Center (SDSC) at USCD [208], ενώ συνεργάζονται και άλλοι φορείς από κάθε γωνιά της γης όπως το European Bioinformatics Institute (EBI) Macromolecular Structure Database group [209] (United Kingdom) και το Institute for Protein Research at Osaka University [210] (Japan) με σκοπό την καλύτερη οργάνωση και ενημέρωση της ΒΔ. Η PDB προσφέρεται με χρέωση (παρότι χρηματοδοτείται από χορηγούς) και παρέχει πληροφορίες από έρευνες επιστημόνων πάνω σε δομές μεγάλων μορίων, πρωτεϊνών και νουκλεϊκών οξέων. Η βάση ανανεώνεται κάθε βδομάδα και διατηρεί τις δομές αυτές σε μία ειδική μορφή Chemical ΜΙΜΕ [131] αρχείου (βλ. κεφάλαιο 2.3.3) το "chemical/x-pdb", που επίσης δεν προσφέρεται δωρεάν. Πρέπει να σημειωθεί εδώ ότι η PDB έχει

εξελιχθεί σε "μεγαθήριο" των χημικών ΒΔ και αποτελεί κάτι περισσότερο από μια απλή βάση διατηρώντας μεταξύ των άλλων ακόμη και δική της λίστα μηνυμάτων [11] (mailing list) και ομάδα συζητήσεων [12] (newsgroup).

Cambridge Structural Database (CSD)

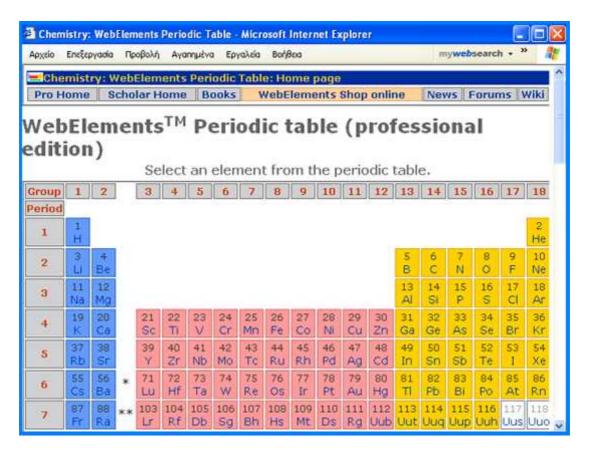
(http://www.ccdc.cam.ac.uk/products/csd/)

Η Cambridge Structural Database αποτελεί το κύριο δημιούργημα του Cambridge Crystallographic Data Centre [211] και επίκεντρο του CSD System, το οποίο, εκτός των άλλων, εμπεριέχει λογισμικό [61] (software) για τη δημιουργία ΒΔ, την πρόσβαση και αναζήτηση σε διάφορες ΒΔ, την οπτικοποίηση δομών (structure visualization) και την ανάλυση δεδομένων (data analysis). Διατηρεί περισσότερες από 245.000 αποθηκευμένες κρυσταλλικές δομές οργανικών και οργανομεταλλικών, ενώσεων μικρού μεγέθους. Τα δεδομένα αυτά συγκεντρώνονται από το 1965 περίπου και παρέχονται στους χρήστες του WWW με χρέωση. Ορισμένα από αυτά σταχυολογήθηκαν από τη σχετική βιβλιογραφία, όμως, τα περισσότερα δημιουργήθηκαν από το ίδιο το Κρυσταλλογραφικό Κέντρο. Η CSD φροντίζει, επίσης, να μη διατηρεί δεδομένα που υπάρχουν (καλύτερα οργανωμένα) σε άλλες, ανάλογες ΒΔ.

• Chemistry WebElementsTM Periodic Table

(http://www.webelements.com/)

Ο ηλεκτρονικής μορφής περιοδικός πίνακας WebElementsTM αποτελεί τον σημαντικότερο και αρχαιότερο περιοδικό πίνακα του WWW. Δημιουργήθηκε το 1993 από τον Mark Winter [212] του Department of Chemistry, University of Sheffield [213] και επισκέπτεται καθημερινά από 35.000 περίπου χρήστες του WWW. Περιέχει φυσικοχημικές ιδιότητες για κάθε χημικό στοιχείο καθώς και άλλες πληροφορίες σχετικά με τη διαθεσιμότητα, την ασφαλή αποθήκευση των στοιχείων κτλ. Ιδιαίτερα πρωτοποριακή είναι, οπωσδήποτε, και η δυνατότητα ηχητικής περιγραφής του εκάστοτε στοιχείου με τη βοήθεια ενός προγράμματος αναπαραγωγής πολυμέσων. Δεν είναι τυχαίο το γεγονός ότι έχει βραβευτεί κατά καιρούς ως η καλύτερη, επιστημονικού ενδιαφέροντος, ιστοσελίδα [31] (web page) από διάφορους διαδικτυακούς φορείς.



Εικόνα 2.4.2-3 Απόσπασμα από την αρχική σελίδα του WebElementsTM, του σημαντικότερου και παλαιότερου περιοδικού πίνακα στο WWW (http://www.webelements.com/)

MSDSSEARCH - The National MSDS Repository

(http://www.msdssearch.com/)

Οι πληροφορίες επικινδυνότητας των χημικών ουσιών βρίσκονται σε διάφορες τοποθεσίες του WWW στις λεγόμενες Σελίδες Δεδομένων Ασφαλείας Υλικών (Material Safety Data Sheets, MSDSs). Μία τέτοια, αξιόπιστη τοποθεσία αποτελεί και αυτή της εταιρίας MSDSSEARCH, η οποία διατηρεί υπερσυνδέσεις σε 1.250.000 MSDSs από περισσότερους από 5.000 βιομηχανικούς παραγωγούς και σε 1.250.000 MSDSs από δωρεάν, παγκόσμιες ΒΔ. Παρέχει, επίσης, συνδέσεις σε MSDS λογισμικό και υπηρεσίες, διατηρεί ομάδα συζητήσεων για θέματα MSDS κ.ά. Το αξιοσημείωτο είναι ότι τα δεδομένα ασφαλείας παρέχονται από τις ίδιες τις εταιρίες που ασχολούνται (παράγουν, επεξεργάζονται, διακινούν κτλ) με τα υλικά. Ένας χρήστης έχει, ακόμη, το δικαίωμα να προτείνει έναν κατασκευαστή για την παροχή πληροφοριών ή να αναζητήσει οδηγίες ασφαλείας από μία συγκεκριμένη εταιρία χημικών προϊόντων.

2.4 Αναζήτηση πληροφοριών στο Διαδίκτυο – Χημικές Βάσεις Δεδομένων και Μηχανές Αναζήτησης 2.4.3 Μηχανές αναζήτησης (Search Engines) και Τοποθεσίες Διεξαγωγής Αναζητήσεων (Search Sites)

Οι παραπάνω τοποθεσίες με ΒΔ αποτελούν μόνο ένα μικρό, αλλά επάξια αντιπροσωπευτικό, δείγμα από την πληθώρα των ΒΔ που βρίσκονται στο WWW και ενδιαφέρουν τους χημικούς. Αυτό που τις κάνει περισσότερο δημοφιλείς από κάποιες άλλες τοποθεσίες είναι το γεγονός ότι οι χρήστες αισθάνονται ασφάλεια αντλώντας τις πληροφορίες που διατηρούν και αυτό διαφαίνεται από τον υπερβολικό αριθμό επισκεπτών που εξυπηρετούν καθημερινά. Παρακάτω δίνονται ορισμένες διευθύνσεις με συγκεντρωτικούς καταλόγους για χημικές ΒΔ διάφορων ειδών στο WWW.

- http://directory.google.com/Top/Science/Chemistry/Chemical_Databases/
 (Google Directory Science Chemistry/Chemical Databases)
- http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/links.html
 (Links for Chemists Virtual Library Chemistry Section)
- http://www.rmis.com/frames/frmchemi.php?mcat=Chemicals (rmis.com Library Category: Chemicals Databases)
- http://www.chemistrycoach.com/periodic_tables.htm
 (Periodic Tables, collection of Web Periodic Tables)
- http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/refperiodic.html
 (Chemistry Links for Chemists Information Periodic Tables)
- http://www.ilpi.com/msds/
 (Where to find MSDS on the Internet)

2.4.3 Μηχανές αναζήτησης (Search Engines) και Τοποθεσίες Διεξαγωγής Αναζητήσεων (Search Sites)

Οι διάφορες πληροφορίες, προγράμματα, ηλεκτρονικές διευθύνσεις προσώπων κ.ά. του Internet βρίσκονται "άτακτα ριγμένες" στις διάφορες τοποθεσίες [32] (web sites) και ιστοσελίδες [31] (web pages) του. Στο WWW μπορεί κανείς να βρει σχεδόν τα πάντα, άλλοτε με χρέωση τις περισσότερες, όμως, φορές δωρεάν. Λόγω του τεράστιου αυτού όγκου δεδομένων και εφαρμογών επινοήθηκαν εργαλεία ταξινόμησης και αρχειοθέτησης των παραπάνω, που βοηθούν τους χρήστες του WWW να πραγματοποιούν όσο το δυνατόν "καλύτερες" αναζητήσεις. Ένα τέτοιο εργαλείο αποτελούν και οι λεγόμενες "Μηχανές Διεξαγωγής Αναζητήσεων" ή απλά "Μηχανές Αναζήτησης" [214] (Search

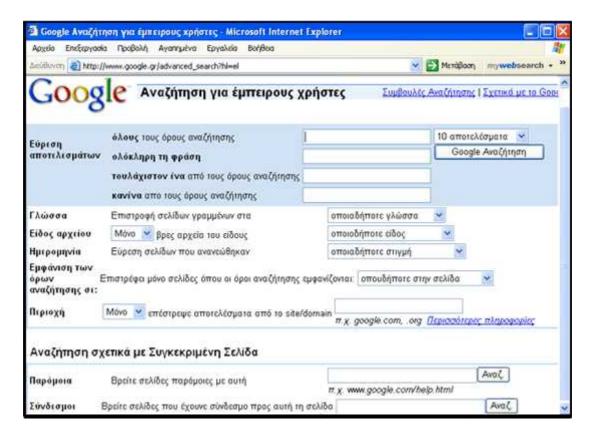
- 2.4 Αναζήτηση πληροφοριών στο Δ ιαδίκτυο Χημικές Βάσεις Δ εδομένων και Μηχανές Αναζήτησης
- 2.4.3 Μηχανές αναζήτησης (Search Engines) και Τοποθεσίες Διεξαγωγής Αναζητήσεων (Search Sites)

Engines ή Search Machines), οι οποίες συγκαταλέγονται στις πιο σημαντικές εφευρέσεις στην ιστορία του Internet [4,20].

Οι Μηχανές Αναζήτησης (ΜΑ) είναι πανίσχυρα προγράμματα που χρησιμοποιούν οι "Τοποθεσίες Διεξαγωγής Αναζητήσεων" (ΤΔΑ) (Search Sites) προκειμένου να σαρώσουν το περιεχόμενο [λέξεις που απαρτίζουν το κείμενο, υπερσυνδέσεις [35] hyperlinks), στοιχεία που αφορούν το δημιουργό, την ημερομηνία δημιουργίας κτλ] των διάφορων τοποθεσιών ή ιστοσελίδων και να το εντάξουν στις οργανωμένες βάσεις δεδομένων [184] (databases) των τελευταίων. Κάθε ΤΔΑ έχει το δικό της μηχανισμό αναζητήσεων και τη δική της βάση δεδομένων. Όσο μεγαλύτερος είναι ο όγκος της βάσης και όσο πιο οργανωμένα είναι τα δεδομένα της τόσο πιο αξιόπιστη και πλήρης γίνεται η αναζήτηση [20].

Όλες οι ΤΔΑ έχουν μία φόρμα εισαγωγής του όρου ή των όρων αναζήτησης (search terms), δηλαδή της λέξης ή φράσης για την οποία αναζητά ο χρήστης πληροφορίες στο WWW. Αφού ολοκληρωθεί η αναζήτηση, εμφανίζονται στο "παράθυρο" [124] (window) το υ προγράμματος πλοήγησης [22] (browser) τα αποτελέσματα της αναζήτησης στη λίστα ανευρέσεων (hit list), η οποία περιέχει υπερσυνδέσεις στις διάφορες ιστοσελίδες που "ταίριαζαν", σύμφωνα με την έρευνα της ΜΑ, με τους όρους αναζήτησης [20]. Οι περισσότερες ΤΔΑ προσφέρουν τη δυνατότητα σύνθετων αναζητήσεων περιορίζοντας την αναζήτηση, π.χ. σε συγκεκριμένα σημεία των ιστοσελίδων (τίτλος, κυρίως κείμενο κτλ), σε καθορισμένη τοποθεσία, σε ορισμένα είδη αρχείων (HTML, PDF [132], εικόνες κτλ), σε ιστοσελίδες που ανανεώθηκαν πρόσφατα ή που είναι γραμμένες σε μία μόνο γλώσσα κτλ. Στην εικόνα 2.4.3-1, που ακολουθεί, φαίνεται η φόρμα εισαγωγής των όρων αναζήτησης σύνθετης μορφής από τη δημοφιλέστερη ΤΔΑ παγκοσμίως, τον Google [215,216].

- 2.4 Αναζήτηση πληροφοριών στο Διαδίκτυο Χημικές Βάσεις Δεδομένων και Μηχανές Αναζήτησης
- 2.4.3 Μηχανές αναζήτησης (Search Engines) και Τοποθεσίες Διεξαγωγής Αναζητήσεων (Search Sites)



Εικόνα 2.4.3-1 Φόρμα εισαγωγής των όρων αναζήτησης σε αναζήτηση σύνθετης μορφής από την Τοποθεσία Διεξαγωγής Αναζητήσεων Google (http://www.google.com.gr/)

Οι βασικοί τύποι ΜΑ είναι δύο: "Μηχανές που σαρώνουν το WWW" (spiders ή worms ή crawlers) και "Κατάλογοι" ή "Κατηγορίες" (Directories). Όλες οι σύγχρονες ΤΔΑ αποτελούν υβρίδια αυτών των τεχνολογιών και μεταφέρουν τον φόρτο τους (επισκέπτες που τις χρησιμοποιούν) ή τα δεδομένα των βάσεών τους η μία στην άλλη, ακριβώς όπως ανταλλάσσονται τα εμπορεύματα. Οι τύποι των ΜΑ καθώς και οι σημαντικότερες ΤΔΑ κάθε τέτοιου τύπου περιγράφονται συνοπτικά παρακάτω [215].

Κατηγορίες (Directories)

Οι Κατηγορίες είναι περιορισμένου μεγέθους λίστες ιστοσελίδων κατασκευασμένες "χειρονακτικά" από τους ίδιους τους χρήστες του WWW ή τους δημιουργούς των ιστοσελίδων. Κάθε Κατηγορία πραγματεύεται ένα γενικό θέμα (π.χ. κατηγορία Science), αποτελείται από άλλες υποκατηγορίες (Science/Chemistry), αυτές από άλλες (Science/Chemistry/Newsgroups) κοκ. Λόγω της μεθόδου εισαγωγής των ιστοσελίδων στις Κατηγορίες, οι τελευταίες συνήθως περιέχουν πιο λογική κατηγοριοποίηση των δεδομένων και πιο περιγραφικές πληροφορίες για τα δεδομένα από

2.4 Αναζήτηση πληροφοριών στο Διαδίκτυο – Χημικές Βάσεις Δεδομένων και Μηχανές Αναζήτησης 2.4.3 Μηχανές αναζήτησης (Search Engines) και Τοποθεσίες Διεξαγωγής Αναζητήσεων (Search Sites)

τις άλλες ΜΑ. Εντούτοις, οι Κατηγορίες, δεν ενδείκνυνται για γενικές αναζητήσεις μεγάλου εύρους στο WWW [20,215]. Οι σημαντικότερες ΤΔΑ με Κατηγορίες στο WWW είναι οι εξής [215].

- Yahoo! (http://www.yahoo.com/)
- American Online (http://www.aol.com/)
- Microsoft's MSN (http://www.msn.com/)
- Cnet (http://www.cnet.com/)
- Northern Lights Search (http://www.northernlights.com/)

Μηχανές που σαρώνουν το WWW (spiders ή worms ή crawlers)

Τα πανίσχυρα αυτά προγράμματα επικοινωνούν συστηματικά με διακομιστές [17] (servers) του WWW και, αφού εξετάσουν το περιεχόμενο των ιστοσελίδων ή τοποθεσιών τους, προσθέτουν πληροφορίες (το κάθε πρόγραμμα με το δικό του ξεχωριστό, "μυστικό" τρόπο) για τα παραπάνω στη βάση δεδομένων μιας ΤΔΑ [20,215]. Ένα τέτοιο σύστημα συνήθως χρειάζεται λίγες βδομάδες για να ολοκληρώσει κάθε "ταξίδι" συλλογής πληροφοριών, που κάνει στο WWW. Οι "αράχνες" (spiders) έχουν πολύ περισσότερους επισκέπτες από τις Κατηγορίες και δίνουν πληρέστερα αποτελέσματα και πιο ενημερωμένα από τις τελευταίες. Υπάρχουν, επίσης, ΜΑ τέτοιου είδους, που αναζητούν πληροφορίες σε βάσεις δεδομένων άλλων ΤΔΑ (meta - search engines) και προβάλλουν ως αποτελέσματα αναζήτησης τα κοινά αποτελέσματα αυτών των ΤΔΑ (περιορίζεται έτσι ο αριθμός των αποτελεσμάτων). Ενδεικτικά, αναφέρονται εδώ οι δημοφιλέστερες ΤΔΑ που χρησιμοποιούν σαρωτικές ΜΑ [215], ενώ στον πίνακα 2.4.3-1 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα (δηλαδή ο αριθμός των ευρέσεων - διευθύνσεων) των αναζητήσεων αυτών των ΤΔΑ με βάση τον όρο αναζήτησης "Chemistry on the Internet" (απλή αναζήτηση).

- Google (http://www.google.com/)
- Yahoo! (http://www.yahoo.com/)
- Altavista (http://www.altavista.com/)
- Lycos (ίδιο με Ask Jeeves, http://www.askjeeves.com/)

(http://www.lycos.com/)

- 2.4 Αναζήτηση πληροφοριών στο Διαδίκτυο Χημικές Βάσεις Δεδομένων και Μηχανές Αναζήτησης 2.4.3 Μηχανές αναζήτησης (Search Engines) και Τοποθεσίες Διεξαγωγής Αναζητήσεων (Search Sites)
 - About (http://www.about.com/)
 - HotBot (meta search engine, http://www.hotbot.com/)
 - MetaCrawler (meta search engine, http://www.metacrawler.com/)
 - Excite (meta search engine, http://www.excite.com/)
 - WebCrawler (meta search engine, http://www.webcrawler.com/)

Πίνακας 2.4.3-1 Αριθμός ευρέσεων με βάση τον όρο αναζήτησης "Chemistry on the Internet" από 9 Τοποθεσίες Διεξαγωγής Αναζητήσεων που χρησιμοποιούν "σαρωτικές" Μηχανές Αναζήτησης (Spider Search Engines)

Τοποθεσία Διεξαγωγής Αναζητήσεων	Αριθμός ευρέσεων με βάση τον όρο "Chemistry on the Internet" (20/5/2005)
Google	14.200.000
Yahoo!	10.300.000
Altavista	10.100.000
Lycos (Ask Jeeves)	2.848.000
About	266
HotBot	10.727.000 (Google - Ask Jeeves)
MetaCrawler	76 (Google - Yahoo! - Ask Jeeves - About - LookSmart - Overture - FindWhat)
Excite	75 (Google - Yahoo! - Ask Jeeves - About - Overture - FindWhat)
WebCrawler	76 (Google - Yahoo! - Ask Jeeves)

Κατάλογους με διάφορες ΤΔΑ κάθε είδους και άλλες ενδιαφέρουσες υποδείξεις για την πραγματοποίηση αποδοτικών αναζητήσεων μπορεί κανείς να βρει στις διευθύνσεις:

• http://www.journalismnet.com/search/

(JournalismNet - Finding web pages)

• http://ezlife.s5.com/enginee.htm

(Ezlife - Search Enginee)

http://www.astro.uni-bonn.de/~webstw/w3 smach.html

(WWW search machines)

• http://www.searchenginewatch.com/

(Search Engine Watch)

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.1 Έντυπες και παράλληλα ηλεκτρονικές εκδόσεις χημικών περιοδικών (parallel printed and electronic chemistry journals)

2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο

2.5.1 Έντυπες και παράλληλα ηλεκτρονικές εκδόσεις χημικών περιοδικών (parallel printed and electronic chemistry journals)

Η χρήση του Internet στον τομέα της έκδοσης και προώθησης επιστημονικών συγγραμμάτων αποτελεί ένα τεράστιο θέμα για την χημική και την παγκόσμια επιστημονική κοινότητα γενικότερα. Για περισσότερα από 200 χρόνια η φήμη των πανεπιστημιακών, και όχι μόνο, φορέων, η αναγνώριση των ακαδημαϊκών, η τεχνολογική πρόοδος, η εκπαιδευτική διαδικασία και φυσικά η διάδοση της γνώσης βασίζονται κατά πολύ στις έντυπες (printed) εκδόσεις άρθρων (documents ή articles) σε περιοδικά (journals ή periodicals) "αντικειμενικής κριτικής" (peer reviewed ή refereed). Τα τελευταία αποτελούσαν και συνεχίζουν να αποτελούν την πλέον κοινωνικά αποδεκτή μορφή επικοινωνίας και ανταλλαγής επιστημονικών απόψεων [2]. Είναι γεγονός ότι περίπου πάνω από 50.000 τέτοια (αντικειμενικής κριτικής) περιοδικά εκδίδονται συστηματικά καλύπτοντας πληθώρα επιστημονικών και τεχνικών γνώσεων [217].

Η εμφάνιση του Internet και των καινοτομιών που το συνόδευαν δεν άφησε αδιάφορους τους εκδότες επιστημονικών περιοδικών. Οι περισσότεροι θεώρησαν σκόπιμο να προωθήσουν τα προϊόντα - περιοδικά τους και στο WWW δημιουργώντας μία νέα γενιά "παράλληλα έντυπων και ηλεκτρονικών περιοδικών" (parallel printed and electronic journals) [218]. Πιο συγκεκριμένα, εκδοτικοί οίκοι αναγνωρισμένου κύρους και με καθιερωμένο αναγνωστικό κοινό δεν άργησαν να προχωρήσουν στην δημιουργία αυτών των "δυαδικής υπόστασης" περιοδικών μιας και οι ηλεκτρονικές εκδόσεις θα τύγχαναν της αυτής αναγνώρισης και αποτελούσαν κινήσεις χωρίς ιδιαίτερο οικονομικό ρίσκο. Σε αυτήν την περίπτωση, ένα έντυπο περιοδικό υπάρχει και σε ηλεκτρονική μορφή στο WWW, ως ακριβές αντίγραφο του έντυπου, επιτρέποντας στο χρήστη που το αναζητεί, να το αποκτήσει εύκολα, μέσω του WWW, χωρίς να εμπλέκεται σε ανιαρές διαδικασίες αναζήτησης και φωτοεκτύπωσης σε απαρχαιωμένες βιβλιοθήκες έντυπου υλικού [2].

Πολλές από τις τυπικές διαδικασίες, όχι μόνο για την απόκτηση και χρήση των άρθρων αλλά και για την υποβολή τους στο περιοδικό ή την αξιολόγησή τους από εντεταλμένους κριτές γίνονται πλέον μέσω του Internet. Τα πρωτότυπα (manuscripts), αφού μετατραπούν σε ψηφιακή μορφή, χρησιμοποιώντας ένα από τα πολλά προγράμματα κειμενογράφου (συνήθως Word [45]), υποβάλλονται προς δημοσίευση, κυρίως, μέσω

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.1 Έντυπες και παράλληλα ηλεκτρονικές εκδόσεις χημικών περιοδικών (parallel printed and electronic chemistry journals)

ΕΜΑΙΙ [10]. Έτσι, ο χρόνος μεταξύ της υποβολής της εργασίας και της κριτικής της ελαττώνεται δραματικά. Ομοίως, ελαττώνεται και ο χρόνος από την έγκριση της εργασίας έως τη δημοσίευσή της από μήνες, που ήταν στην προ-Internet εποχή, σε μερικές μόνο εβδομάδες. Μέσω Internet, φυσικά, αυτοματοποιείται και η πρόσβαση στις ηλεκτρονικές εκδόσεις, αφού τις περισσότερες φορές, απλά, απαιτείται "ηλεκτρονική εγγραφή" (electronic registration) στην τοποθεσία [32] (web site) του εκδοτικού οίκου ή καταβολή χρηματικής συνδρομής (subscription) προκειμένου ένας χρήστης να αποκτήσει ένα άρθρο αυτού του οργανισμού [2,218].

Τα ηλεκτρονικά αρχεία συνιστούν δεδομένα στις μεγάλες, καλά οργανωμένες βάσεις δεδομένων των εκδοτικών οργανισμών ακόμη και στις μικρές, ιδιωτικές συλλογές των μεμονωμένων χρηστών. Συνάμα, άρθρα δύναται να μεταφραστούν, σχεδόν αυτόματα, από μία γλώσσα σε άλλη με χρήση προηγμένων εμπορικών προγραμμάτων μετάφρασης. Η διεργασία της μετάφρασης αποτελεί μείζον πρόβλημα για τις έντυπες εκδόσεις, επειδή απαιτεί την απασχόληση εξειδικευμένου προσωπικού και είναι αρκετά γρονοβόρα [2]. Η ηλεκτρονική μορφή βοηθάει, επίσης, στο γειρισμό στατιστικών και λογιστικών ζητημάτων, που αφορούν την πρόσβαση στα αρχεία, τη χρήση τους, ποιος και πότε τα εκμεταλλεύτηκε κτλ. Η "ζήτηση" ενός άρθρου, για παράδειγμα, μπορεί κάλλιστα να προσδιορίζεται έμμεσα από το πόσες φορές αυτό αναζητήθηκε στο WWW και κατόπιν χρησιμοποιήθηκε, δηλαδή αποθηκεύτηκε στον Η/Υ του χρήστη (download [219]) ή εκτυπώθηκε ή λειτούργησε ως αναφορά για άλλη εργασία. Το τελευταίο είναι αυτό που προσδίδει, ενδεικτικά, κύρος σε ένα άρθρο και αναφέρεται ως "συντελεστής απήχησης" (impact factor) του άρθρου. Τέτοιοι συντελεστές βρίσκονται στο WWW στους λεγόμενους "καταλόγους αναφορών" (citation indexes), όπως είναι οι Science Citation Index [220] και Journal Citation Reports [221] του Institute of Scientific Information (ISI) [1,2].

Πολλές άλλες καινοτομίες του Internet έχουν εμφανιστεί σε τέτοιου είδους διεργασίες. Για παράδειγμα, είναι εφικτό ένας χρήστης του WWW να παρακολουθεί την τρέχουσα βιβλιογραφία (έντυπη και ηλεκτρονική) με την χρήση της λεγόμενης "ειδοποίησης μέσω ΕΜΑΙΙΙ" (ΕΜΑΙΙ alerting). Ειδικότερα, είναι δυνατή η λήψη στο ΕΜΑΙΙ του χρήστη των περιερχομένων των τευχών, που μόλις εκδίδονται και τα οποία τον ενδιαφέρουν. Πρωτοπόρος στο είδος, η American Chemical Society (ACS) [222] παρέχει, μέσω ΕΜΑΙΙ, τα περίφημα "As - Soon - As - Publishable" (ASAP) [223], δηλαδή τα περιεχόμενα εργασιών, αρκετές βδομάδες προτού αυτές εισαχθούν στην

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.1 Έντυπες και παράλληλα ηλεκτρονικές εκδόσεις χημικών περιοδικών (parallel printed and electronic chemistry journals)

έντυπη έκδοση. Στην περίπτωση αυτή, η επίσημη ημερομηνία δημοσίευσης της εργασίας θεωρείται, πλέον, αυτή στο Διαδίκτυο. Την ίδια τακτική έχουν ακολουθήσει και άλλοι οίκοι, όπως ο Elsevier Science B.V. [224], ο Royal Society of Chemistry (RSC) [225] και ο Springer-Verlag [226] με την αντίστοιχη εφαρμογή του, "Online FirstTM" [227] [1,4,218].

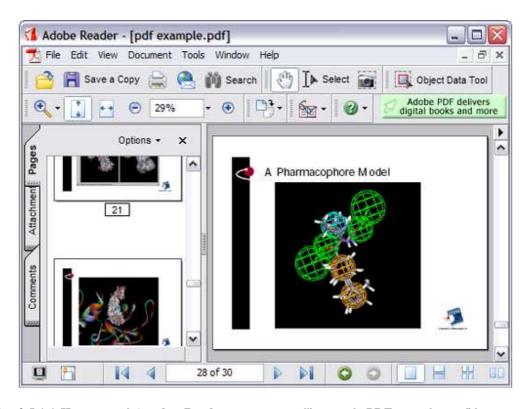
Μία άλλη ενδιαφέρουσα αλλά αμφισβητήσιμη δυνατότητα ήρθε πρόσφατα στο προσκήνιο και αφορά στην προδημοσίευση εργασιών. Στη διεύθυνση του Chemistry Preprint Server [228], που τελεί υπό την εποπτεία της ScienceDirect [229] του εκδοτικού οίκου Elsevier Science B.V. [224], μπορεί οποιοσδήποτε να κάνει προδημοσίευση της εργασίας του, όπως αυτή υφίσταται, προτού αυτή τεθεί υπό κρίση σε κάποιο περιοδικό. Το πλεονέκτημα είναι ότι γίνονται διαθέσιμα στο κοινό καινούργια επιστημονικά αποτελέσματα χωρίς χρονοτριβή. Ο αντίλογος, όμως, υποστηρίζει ότι σήμερα κατακλυζόμαστε ήδη από πληθώρα εγκεκριμένων δημοσιεύσεων και άρα οι μη κριθείσες εργασίες δυσχεραίνουν την κατάσταση αυτή. Εντούτοις, ο Chemistry Preprint Server φιλοξενεί επί του παρόντος σεβαστό αριθμό προδημοσιεύσεων (preprints) από διάφορα πεδία της Χημείας [1]. Ακόμη πιο προχωρημένα, ορισμένα επιστημονικά περιοδικά (Journal of Chemical Education, Internet edition [230]), προδημοσιεύουν τις μελέτες στο WWW καλώντας οποιονδήποτε "επώνυμο" χρήστη του να τις κρίνει και να τις εξετάσει, όπως ακριβώς θα έκανε και ένας ειδικός [4].

Το ζήτημα της αντιπροσωπευτικής διάθεσης των άρθρων στο Internet αποτέλεσε έναν από τους μεγαλύτερους φόβους των οργανισμών επιστημονικών εκδόσεων, από τότε που άρχισαν να διεισδύουν στο Internet. Η ηλεκτρονική φόρμα των περιοδικών πρέπει να είναι τέτοια, ώστε να μη διαφέρει σημαντικά από την έντυπη, αλλά ταυτόχρονα να οικειοποιείται των δυνατοτήτων του WWW και να παρουσιάζεται πιο διαδραστική (interactive) και πιο ελκυστική από την τελευταία. Έτσι, μία χημική ηλεκτρονική έκδοση, εκτός από απλό κείμενο και δισδιάστατες εικόνες, περιέχει υπερσυνδέσεις [35] (hyperlinks) σε άλλες διαδικτυακές θέσεις (π.χ. βιβλιογραφικές αναφορές) ή σε διάφορα σημεία του αυτού κειμένου (εισαγωγή, κυρίως μέρος, βιβλιογραφία κτλ). Παρέχονται, επίσης, δυνατότητες αναζήτησης λέξεων εντός του κειμένου και σύνδεσης του άρθρου με εξωτερικές διαδικτυακές εφαρμογές προβολής τρισδιάστατων μορίων (Java [53], VRML [90] κ.ά.) Στην ηλεκτρονική μορφή δεν υπάρχει ο περιορισμός, που επιβάλλεται από το μέγεθος του χαρτιού, όπως στην έντυπη, και έτσι πολλές ψηφιακές εργασίες

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.1 Έντυπες και παράλληλα ηλεκτρονικές εκδόσεις χημικών περιοδικών (parallel printed and electronic chemistry journals)

συνοδεύονται από τα επίσης ψηφιακά πειραματικά αποτελέσματα, που χρησιμοποιήθηκαν για τη δημιουργία τους [4,217].

Ως επί το πλείστον, τα διαθέσιμα επιστημονικά κείμενα στο Internet προσφέρονται στη μορφή "PDF" (Portable Document Format) [132], που αποτελεί και είδος του CMIME (Chemical Multipurpose Mail Extensions) [131], το οποίο περιγράφηκε στο κεφάλαιο 2.3.3. Η μορφή PDF (εικόνα 2.5.1-1) αποτελεί πατέντα της εταιρείας Adobe Systems [133] και διανέμεται δωρεάν για διαδικτυακή ή όχι χρήση. Χρησιμοποιείται ευρέως για τη δημιουργία και αποθήκευση τεχνικών και επιστημονικών κειμένων και επειδή οι γραμματοσειρές ενσωματώνονται στο ίδιο το αρχείο είναι (πρακτικά) ανεξάρτητη τόσο του λειτουργικού συστήματος [56] (operating system) όσο και του μηχανολογικού υλικού [81] (hardware) κάθε H/Y. Έτσι, διασφαλίζεται το αμετάβλητο του κειμένου από υπολογιστή σε υπολογιστή και από εκτυπωτή σε εκτυπωτή. Στη μορφή PDF μπορούν να διατηρηθούν και υπερσυνδέσεις, δεν γίνεται όμως να ενσωματωθούν εξωτερικές εφαρμογές, όπως με την HTML. Η ίδια η HTML [36] ή οι "απόγονοί" της (CML [70] κ.ά.) καθώς και η Postscript (ps) [231], επίσης της Adobe, χρησιμοποιούνται αρκετά συχνά για να αποδώσουν την ηλεκτρονική μορφή χημικών άρθρων [1].



Εικόνα 2.5.1-1 Η εφαρμογή Acrobat Reader που υποστηρίζει αρχεία PDF μορφής, ανεξάρτητα από το λειτουργικό και ηλεκτρομηχανολογικό του Η/Υ [132].

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.2 Πλήρως ηλεκτρονικά χημικά περιοδικά (Electronic chemistry journals)

Τα άρθρα των περισσότερων περιοδικών ακολουθούν το πρότυπο του "Αναγνωριστικού Ψηφιακών Αντικειμένων" ή **Digital Object Identifier** (**DOI**) [232]. Σύμφωνα με το πρότυπο αυτό, κάθε ηλεκτρονικό αντικείμενο διατηρεί μια μόνιμη διεύθυνση στο Internet ανεξάρτητα της προέλευσης και της ακριβούς διαδικτυακής τοποθεσίας του, ακόμη και εάν αυτή μεταβάλλεται. Μπορεί επομένως να αποκτήσει ταυτότητα DOI όχι μόνο ένα ολόκληρο άρθρο, αλλά και ένα συγκεκριμένο τμήμα αυτού ή μια οποιαδήποτε εφαρμογή στο WWW, έναντι χρέωσης φυσικά [4,218]. Σε έναν χώρο όπου πολλές διευθύνσεις αλλάζουν, νέες εμφανίζονται και άλλες καταργούνται, η ιδέα της μόνιμης διεύθυνσης ηλεκτρονικών αντικειμένων, όπως τα επιστημονικά άρθρα, αποτελεί σπουδαία υπόθεση. Η μόνιμη αυτή διεύθυνση έχει τη μορφή "http://dx.doi.org/10.1000/654321", όπου το πρόθεμα "10.000" είναι ο κωδικός του φορέα (π.χ. ο εκδοτικός οίκος) και το πρόσφυμα "654321" ο κωδικός του αντικειμένου (π.χ. το άρθρο). Πληκτρολογώντας μια τέτοια διεύθυνση στο πρόγραμμα πλοήγησης του WWW [22] (browser) αυτόματα "ανακατευθυνόμαστε" (redirect) στην ακριβή ιστοσελίδα [31] (web page) με το άρθρο που αναζητούμε [1]. Το DOI, που ανήκει στο γενικότερο πλαίσιο προτύπων International Standard Digital Identifier (ISDI) του National Information Standards Organization (NISO) [233], αποτελεί συνάμα και ένα εργαλείο εμπορικών συναλλαγών, αφού συνδέει τους χρήστες των διαδικτυακών αντικειμένων με τους κατόχους των δικαιωμάτων χρήσης τους [4,218].

2.5.2 Πλήρως ηλεκτρονικά χημικά περιοδικά (Electronic chemistry journals)

Η διάδοση πληροφοριών των μοριακών επιστημών έθεσε νέα ζητήματα για την έκδοση επιστημονικών περιοδικών από το 1995 και έπειτα. Η ραγδαία εξέλιξη των διαδυκτυακών εφαρμογών έδινε πλέον το δικαίωμα στους χημικούς να ανταλλάσσουν μοριακά και αριθμητικά δεδομένα μέσω του Internet με ιδιαίτερη ευκολία. Τα επιστημονικά περιοδικά, που αποτελούν τον κυρίαρχο, αν όχι αποκλειστικό, φορέα γνωστοποίησης ερευνητικών πορισμάτων επηρεάστηκαν από τις νέες τάσεις που εμφανίστηκαν στο Internet [234]. Παράλληλα έντυπες και ηλεκτρονικές εκδόσεις άρχισαν δειλά να εμφανίζονται, όπως περιγράφηκε στις προηγούμενες σελίδες. Ωστόσο, οι παροχές του Internet ήταν τόσο εντυπωσιακές ώστε δεν άργησε και ο ερχομός των λεγόμενων "πλήρως ηλεκτρονικών περιοδικών" (electronic journals, e-journals), που

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.2 Πλήρως ηλεκτρονικά χημικά περιοδικά (Electronic chemistry journals)

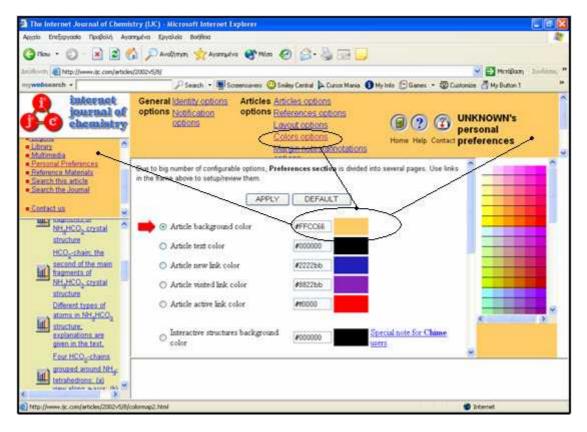
εμφανίστηκαν και στους τομείς της Χημείας. Τα ηλεκτρονικά "χημικά" περιοδικά κάνουν χρήση πληθώρας διαδικτυακών δυνατοτήτων σε σημείο που όλες σχεδόν οι διαδικασίες να περατώνονται μέσω του Internet. Μάλιστα, το περιεχόμενό τους διατίθεται **μόνο σε ψηφιακή μορφή** [on-line [i-14] στο WWW ή σε μαγνητικούς συμπιεσμένους δίσκους [108] (Compact Discs Read-Only-Memory ή CDs ROM)] και όχι σε έντυπη, όπως συμβαίνει με τα παράλληλα έντυπα και ηλεκτρονικά περιοδικά. Για το λόγο αυτό ελάχιστες ομοιότητες, ως προς τη παρουσίαση των πληροφοριών, κυρίως, παρουσιάζουν με τα τελευταία [50,235].

Προσπάθειες στο χώρο των αποκλειστικά ηλεκτρονικών εκδόσεων ξεκίνησαν από το 1995 όταν στο ηλεκτρονικό συνέδριο (electronic conference) ECTOC-1 [174] (1st Electronic Conference on Trends in Organic Chemistry) επιδιώχθηκε να μεταφερθεί το περιεχόμενο του ήδη καθιερωμένου, έντυπου περιοδικού Chemical Communications [236] της Royal Society of Chemistry (RSC) [225] σε ηλεκτρονική μόνο μορφή. Αμέσως μετά εμφανίστηκαν και άλλα δύο χημικά Ηλεκτρονικά Περιοδικά (ΗΠ) το Journal of Molecular Modeling [237] (1995) και το Internet Journal of Chemistry (IJC) [173] (1998), ενώ λίγο αργότερα ήρθαν και άλλα στο προσκήνιο, όπως π.χ. το Chemical Educator [238], το Journal of Physical and Chemical Reference Data (JPCRD) [197], το Molecules Online [239] και το PhysChemComm [240]. Χαρακτηριστικό όλων των παραπάνω "νέου τύπου" περιοδικών είναι ότι διαρκώς εξελίσσονται και ανανεώνονται, όπως συμβαίνει και με τις διαδικτυακές εφαρμογές που χρησιμοποιούν. Ανάμεσά τους, πάντως, ξεχωρίζει το Internet Journal of Chemistry, όχι μόνο γιατί ήταν από τους πρωτοπόρους, αλλά, κυρίως, επειδή προσπαθεί να καθιερώσει το καινούργιο μέσο (Internet) και τις δυνατότητές του σε ένα ευρύ φάσμα χημικών θεμάτων [217,234].

Οι περισσότερες από τις διαδικασίες, που αναφέρθηκαν προηγουμένως για τα παράλληλα έντυπα και ηλεκτρονικά περιοδικά και έχουν σχέση με το Διαδίκτυο, εφαρμόζονται και στα ΗΠ. Ωστόσο, στα τελευταία, επειδή δεν υπάρχει αντίστοιχη έντυπη μορφή δίνεται η "ελευθερία" της διατήρησης δεδομένων, που δεν μπορούν σε καμία περίπτωση να φιλοξενηθούν σε ένα κομμάτι χαρτιού. Τα ηλεκτρονικά άρθρα υποστηρίζουν κάθε είδους πολυμέσα [241] (multimedia), ήχο, εικόνα και video. Έτσι, δεδομένα από μακροσκελείς πίνακες μπορούν εύκολα να αντιγραφούν σε άλλα αρχεία ηλεκτρονικής μορφής ή να χρησιμοποιηθούν από υπολογιστικά προγράμματα. Διαγράμματα (plots ή diagrams) δύναται να εκδοθούν ως "εκτεταμένα φύλλα εργασίας" [242] (spreadsheets), όπου οι χρήστες μπορούν να προσαρμόσουν τις διαστάσεις και τη

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.2 Πλήρως ηλεκτρονικά χημικά περιοδικά (Electronic chemistry journals)

μορφή τους και να εκτελέσουν επί τόπου on-line [i-14] υπολογισμούς κτλ, προκειμένου να τα συγκρίνουν με άλλα αντίστοιχα διαγράμματα (π.χ. φάσματα). Μόρια κάθε μεγέθους μπορούν να εμπεριέχονται στο περιεχόμενο των άρθρων, ως αυτόνομες τρισδιάστατες οντότητες, έτσι ώστε να επιτρέπεται στον "αναγνώστη" να χειρίζεται τη δομή τους, να τα περιστρέφει προς κάθε κατεύθυνση ή να μεγεθύνει μια συγκεκριμένη περιοχή που τον ενδιαφέρει. Εντυπωσιακές καινοτομίες εισήγαγε το Internet Journal of Chemistry (εικόνα 2.5.2-1) επιτρέποντας στον χρήστη να αλλάζει το χρώμα του φόντου (background) του άρθρου (χρήσιμο για ανθρώπους με προβλήματα όρασης), να μετατρέπει τις μονάδες από ένα σύστημα (SI, calorie-based κτλ) σε άλλο και κυρίως, να επιλέγει, ποιες πληροφορίες μιας εργασίας επιθυμεί να εμφανίζονται στην οθόνη του Η/Υ του (π.χ. μπορεί να αποκρύψει όλους τους πίνακες με νούμερα) [243]. Για τους χημικούς, κρίνεται ιδιαίτερα σημαντική η δυνατότητα δημοσίευσης όλων των πειραματικών αποτελεσμάτων μιας εργασίας μαζί με το κείμενο αυτής επιτρέποντας, συνακόλουθα, την ορθότερη κριτική και έλεγγό της και την αποδοτικότερη χρησιμοποίησή της [50,217,234,244].



Εικόνα 2.5.2-1 Εικόνα από ηλεκτρονικό άρθρο του Internet Journal of Chemistry (IJC). Στο πάνω μέρος φαίνονται οι δυνατότητες που έχει ο χρήστης μεταξύ των οποίων και η επιλογή του φόντου του άρθρου [173].

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.2 Πλήρως ηλεκτρονικά χημικά περιοδικά (Electronic chemistry journals)

Τα πρότυπα επικοινωνίας, που αναλύθηκαν στα κεφάλαια 2.2 και 2.3, ωφέλησαν όσο τίποτε άλλο τις ηλεκτρονικές εκδόσεις. Η ΗΤΜΙ και η CMI (κεφ. 2.2.3) αποτελούν τις καθαυτό δομές των ΗΠ, ενώ δυναμικά εισχωρεί στο πεδίο και η VRMI [245] (κεφ. 2.2.4). Η προσθήκη υπολογιστικών και όχι μόνο, εφαρμογών τύπου Java (κεφ. 2.2.2) έκανε ακόμη πιο διαδραστικές (interactive) τέτοιες εκδόσεις, ενώ τα πρότυπα ΜΙΜΕ (κεφ. 2.3.2) και CMIME (κεφ. 2.3.3) αποτέλεσαν σημαντικά εξελικτικά εργαλεία για το είδος. Ο τρόπος που όλοι οι παραπάνω μηχανισμοί εφαρμόστηκαν στα ΗΠ ξεπερνά τους σκοπούς αυτής της παρουσίασης μολονότι ένα μέρος περιγράφηκε έμμεσα στα κεφάλαια αυτά [50,135,235].

Εκτός από τα εμφανή πλεονεκτήματα των ΗΠ, που αφορούν κυρίως στον τρόπο παρουσίασης των δεδομένων στην οθόνη του Η/Υ, υπάρχουν και πολλά άλλα, που σχετίζονται με τους εκδότες αλλά και τους ακαδημαϊκούς - ερευνητές, τους ίδιους τους δημιουργούς της γνώσης. Για τους εκδότες, τους οποίους το κόστος ενδιαφέρει περισσότερο από οποιονδήποτε άλλο, πολλές διαδικασίες είναι σημαντικά ολιγοδάπανες στον ηλεκτρονικό κόσμο. Η έκδοση, η διάθεση, η διαφήμιση και το marketing των ΗΠ μπορούν να γίνονται μέσω του Internet ελαττώνοντας δραματικά τις σχετικές δαπάνες [218]. Το ίδιο συμβαίνει και με την αποθήκευση των περιοδικών. Σε ένα ΗΠ απαιτείται, το πολύ, ένα πρωτότυπο έντυπο (αν το περιοδικό δύναται να εκδοθεί και σε έντυπη μορφή) για κάθε άρθρο στα αρχεία της εταιρίας έκδοσης ή μιας βιβλιοθήκης, κυρίως για λόγους ασφάλειας, ενώ η χρήση του περιοδικού μπορεί να γίνεται αποκλειστικά μέσω του WWW [2]. Λόγω του μειωμένου κόστους η αποκλειστικά ηλεκτρονική διάθεση πληροφοριών ωφελεί σαφώς και τους δημιουργούς των άρθρων. Στα ΗΠ η υποβολή ενός άρθρου γίνεται συνήθως δωρεάν, ενώ σε μερικές περιπτώσεις ο δημιουργός χρηματοδοτείται από το περιοδικό (Internet Journal of Chemistry), χωρίς, ωστόσο, να απαιτείται να μεταφέρει τα πνευματικά δικαιώματα (copyright) στο τελευταίο, όπως συμβαίνει με τα έντυπα περιοδικά και βιβλία [218]. Δίνεται, επιπλέον, η δυνατότητα σε μελετητές και ινστιτούτα με πενιχρά έσοδα (π.χ. τριτοκοσμικών ή υποανάπτυκτων χωρών) να διαδώσουν τα επιστημονικά τους επιτεύγματα και να αναγνωρισθούν παγκόσμια [218,234]. Συνάμα, κατά το ενδεχόμενο που ένα άρθρο, αφού εκδοθεί, κριθεί εκ των υστέρων μη ορθό επιστημονικά ή αποδειχτούν λάθη μπορεί πολύ εύκολα να απομακρυνθεί από το WWW (απλά αν καταργηθεί η διεύθυνση URL αυτού), να διορθωθεί και να επανεμφανισθεί στην ίδια διεύθυνση [2]. Η παραπάνω διεργασία για μία έντυπη μελέτη είναι ιδιαίτερα κοπιώδης και πολυέξοδη και συνήθως το "ακατάλληλο"

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.2 Πλήρως ηλεκτρονικά χημικά περιοδικά (Electronic chemistry journals)

άρθρο δεν απομακρύνεται ποτέ από την αγορά. Άλλωστε, είναι γεγονός, σύμφωνα με τον Stephen R. Heller [246], ότι "περίπου μισές από τις έντυπες μελέτες σε θέματα Χημείας κρίνονται αμφισβητήσιμες" [2].

Παρά τα απαράμιλλης ωφελιμότητας χαρακτηριστικά των ΗΠ σε καμία περίπτωση δεν αποτελούν τον τέλειο τρόπο διάδοσης γνώσεων. Αρκετά είναι τα σημεία που μειονεκτούν για εκδότες, συγγραφείς αλλά και χρήστες. Η οργάνωση και διαχείριση διαδικασιών απαιτεί εξειδικευμένο προσωπικό, ηλεκτρονικών προγραμματιστές, υψηλής ταχύτητας διαδικτυακές συνδέσεις και σύγχρονο ηλεκτρομηχανολογικό υλικό [81] (hardware). Όσο περισσότερα άρθρα εκδίδονται σε ηλεκτρονική μορφή τόσο αυξάνονται οι δαπάνες για τα παραπάνω και επακόλουθα αυξάνονται οι απαραίτητες χρηματικές συνδρομές είτε για την υποβολή εργασιών (από τους δημιουργούς) είτε για τη χρήση των δεδομένων [218,234]. Τα ΗΠ είναι κατάλληλα για εκπαιδευτικούς σκοπούς, λόγω της διαδραστικότητάς τους, αλλά όταν το κόστος πρόσβασης σε αυτά μεγαλώνει χάνεται αυτή η πολύτιμη ιδιότητά τους για αυτούς που δεν μπορούν να ανταπεξέλθουν οικονομικά (σπουδαστές, μαθητές και μέλη φτωχών ακαδημαϊκών ιδρυμάτων) [217]. Άλλωστε, η επιστημονική κοινότητα αντιμετωπίζει συγνά με καχυποψία και περιθωριοποιεί υπηρεσίες που προσφέρονται δωρεάν στο WWW θεωρώντας τις τελευταίες λιγότερο "επιστημονικές" και αναξιόπιστες [234]. Προβλήματα αντιμετωπίζουν και οι χρήστες με σημαντικότερο όλων την αδυναμία εκτύπωσης των ηλεκτρονικών άρθρων πράγμα αναγκαίο για τη μελέτη τους. Παρότι η ψηφιακή μορφή προσφέρει πληθώρα δυνατοτήτων εντούτοις "σπάνια κάθεται κανείς μπροστά στην οθόνη του Η/Υ του για να διαβάσει μια ολόκληρη εργασία ούτε έχει πάντα το δικαίωμα να μεταφέρει τον Η/Υ του μακριά από το σπίτι του, στο λεωφορείο, στο τρένο ή σε μία καφετερία και κυρίως δε θέλει να το κάνει!" [2]. Άλλες φορές, ηκακή αρχειοθέτηση και η έλλειψη προκαθορισμένων προτύπων αναζήτησης πληροφοριών μπορεί να δυσχεράνει την έρευνα ενός χρήστη του WWW, κάνοντας τον τελευταίο να πελαγοδρομεί ανάμεσα σε άσχετες και άχρηστες πληροφορίες, ιδιαίτερα όταν αυτός είναι χημικός και μάλιστα μη ένθερμος υποστηρικτής του Διαδικτύου [2].

Τα χημικά ΗΠ αποτελούν, αναμφισβήτητα, ένα πολλά υποσχόμενο μέσο για την ανταλλαγή επιστημονικών αποτελεσμάτων και ιδεών στο μέλλον. Κύριο μέλημα γύρω από την ηλεκτρονικές εκδόσεις είναι το πώς θα διασφαλισθεί η ακεραιότητα του περιεχομένου τους για τις επόμενες γενιές, αφού η τεχνολογία στο Internet εξελίσσεται με ραγδαίους ρυθμούς [217]. Πολύ μακροπρόθεσμα, τέτοιες μέθοδοι αναμένεται να

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.3 On Line Βιβλιογραφικές Βάσεις Δεδομένων στο Διαδίκτυο

ενστερνισθούν από ερευνητικά και ακαδημαϊκά ιδρύματα οδηγώντας τα στην αυτονομία τους από εκδοτικούς οίκους και εξωτερικές επιχορηγήσεις, που σήμερα έχουν ανάγκη [2,218]. Τα ΗΠ μπορούν να ωθήσουν περισσότερους αρθρογράφους - επιστήμονες να παρουσιάζουν τις μελέτες τους σε ηλεκτρονική μορφή, έχοντας, σαφώς, πολλά να αποκομίσουν από τη συμμετοχή τους σε ένα τέτοιο σύστημα. Σύμφωνα με τον Ι. Κερκινέ [247], "δεν υπάρχει αμφιβολία ότι τα επόμενα χρόνια θα βρεθούμε, ενώπιον σημαντικών αλλαγών στο χώρο της έκδοσης επιστημονικών κειμένων" [1].

2.5.3 On - Line Βιβλιογραφικές Βάσεις Δεδομένων στο Διαδίκτυο

Οι περισσότεροι, πλέον, εκδοτικοί οίκοι προσφέρουν, μέσω του Internet, ηλεκτρονική πρόσβαση στις επιστημονικές τους εκδόσεις και ειδικότερα στα περιοδικά τους. Στα περισσότερα από αυτά προσφέρεται δωρεάν η ανάγνωση του πίνακα των περιεχομένων (Table of Contents, ToC) κάθε τεύχους και μερικές φορές και των περιλήψεων (abstracts) κάθε άρθρου. Η ηλεκτρονική πρόσβαση στο κύριο μέρος απαιτεί, ως επί το πλείστον, χρηματική συνδρομή, υπάρχουν όμως και ορισμένες περιπτώσεις περιοδικών, που, για δικούς τους λόγους, προσφέρουν δωρεάν και εξ ολοκλήρου την έντυπη έκδοσή τους στο Internet [1,218]. Κάθε εκδοτικός οίκος με τέτοιου είδους δραστηριότητα διατηρεί τα άρθρα των περιοδικών του σε καλά οργανωμένες Βάσεις Δεδομένων (ΒΔ) στο Internet, όμοιες με αυτές που περιγράφηκαν στο κεφ. 2.4.2. Όπως προαναφέρθηκε, άλλες προσφέρουν τα δεδομένα τους δωρεάν και άλλες επί πληρωμή. Εδώ, όμως, σε αντίθεση με τις χημικές ΒΔ (βλ. κεφ. 2.4.2) πιο αξιόπιστες και σίγουρα πιο μαζικές θεωρούνται οι τελευταίες. Παρακάτω παρουσιάζονται οι σπουδαιότερες Βιβλιογραφικές Βάσεις Δεδομένων χημικού ενδιαφέροντος στο WWW, δωρεάν και μη, καθώς και ορισμένες πολύ χρήσιμες υπηρεσίες του ΑΠΘ [248] και άλλων φορέων για την αναζήτηση βιβλιογραφικών πληροφοριών.

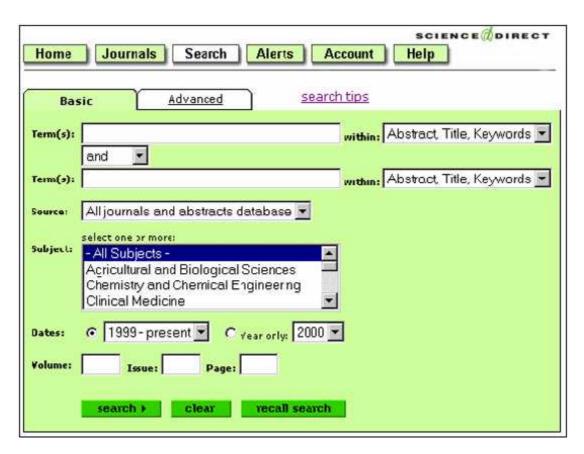
Elsevier's ScienceDirect®

(http://www.sciencedirect.com/)

Ο εκδοτικός οίκος **Elsevier Science B.V.** [224] προσφέρει, με χρέωση, μέσω της τοποθεσίας του, ScienceDirect, την δυνατότητα αναζήτησης στις ΒΔ του οίκου (EMBASE, Elsevier BIOBASE, ScienceDirect Navigator, FLUIDEX, World Textiles κ.ά.) καθώς και σε ΒΔ άλλων εταιριών (**ACS** [222], AIP [249], **MEDLINE** [250] της

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.3 On Line Βιβλιογραφικές Βάσεις Δεδομένων στο Διαδίκτυο

National Library of Medicine (NLM) [251], Compendex [252] της Engineering Information Inc. [253] κ.ά.) Αποτελεί τη μεγαλύτερη ηλεκτρονική συλλογή επιστημονικών, τεχνικών και ιατρικών άρθρων κάθε είδους καθώς και άλλων βιβλιογραφικών πληροφοριών. Διατηρεί (online [i-14]) την πρόσβαση σε περισσότερα από 1.800 ηλεκτρονικά περιοδικά ή βιβλία, που περιέχουν συνολικά πάνω από 6.945.000 άρθρα από το 1823 έως και σήμερα. Για τη χρήση της βάσης απαιτείται εγγραφή (registration) μέσω Internet, έναντι χρημάτων, η οποία επιτρέπει, εκτός της αναζήτησης δεδομένων, τη δυνατότητα αποθήκευσης [254] (save) αναζητήσεων και ειδοποίησης μέσω ΕΜΑΙΙ (ΕΜΑΙΙ alerting) για άρθρα που αναμένονται σε ένα περιοδικό (π.χ. στο Internet Journal of Chemistry) ή σε μια ειδική περιοχή ενδιαφέροντος (π.χ. Αναλυτική Χημεία), για εμφάνιση βιβλιογραφικών αναφορών (citations) σε νεοεκδοθείς μελέτες κτλ.



Εικόνα 2.5.3-1 Η φόρμα αναζήτησης στη βιβλιογραφική βάση δεδομένων του ScienceDirect (http://www.sciencedirect.com/).

Η αναζήτηση στο ScienceDirect είναι πραγματικά εντυπωσιακή (εικόνα 2.5.3-1). Μπορεί να πραγματοποιηθεί σε ένα μόνο ηλεκτρονικό περιοδικό, βιβλίο, εγκυκλοπαίδεια ή επιστημονικό πεδίο (π.χ. Αναλυτική Χημεία) ή και σε συνδυασμό αυτών (συνολική

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.3 On Line Βιβλιογραφικές Βάσεις Δεδομένων στο Διαδίκτυο

αναζήτηση). Οι όροι αναζήτησης μπορεί να αφορούν στον τίτλο του άρθρου (ή βιβλίου), τους συγγραφείς, την περίληψη, τις λέξεις κλειδιά [255] (keywords), τις βιβλιογραφικές αναφορές, τον κωδικό αναγνώρισης ISSN (International Standard Serials Number [256]), τη χρονολογία έκδοσης (ή χρονική περίοδο, π.χ. από το 1999 έως το 2005) ακόμη και λέξεις μέσα στο κείμενο. Μάλιστα, η αναζήτηση γίνεται και σε περιοδικά άλλων εταιριών (ή σε ολόκληρο το WWW μέσω της μηχανής αναζήτησης **Scirus** [257]), οπότε, τα αποτελέσματα της αναζήτησης παρέχονται με μορφή υπερσυνδέσεων [35] (hyperlinks) στις ΒΔ αυτών των εταιριών (cross - referencing).

MEDLINE® (http://www.nlm.nih.gov)

Το MEDLINE[®] (Medical Literature Analysis and Retrieval System Online) είναι μία από τις σημαντικότερες ηλεκτρονικές βιβλιογραφικές ΒΔ της Αμερικής. Είναι προϊόν της National Library of Medicine (NLM) [251] και περιέχει περίπου 13 εκατομμύρια παραπομπές σε επιστημονικά άρθρα επιστημών υγείας καθώς και φυσικών επιστημών.

Η επιλογή των δημοσιευόμενων άρθρων γίνεται από μια ειδική επιτροπή και συγκεκριμένα την Literature Selection Technical Review Committee (LSTRC). Οι επιστήμες που καλύπτονται είναι η Ιατρική και όλοι οι επιμέρους κλάδοι της, η Φαρμακευτική, η Βιολογία, η Βιοχημεία, η Χημεία, η Φυσική και ένα πλήθος άλλων φυσικών επιστημών. Το 48% περίπου των δημοσιευμένων εργασιών εκδίδονται στις Η.Π.Α. Επιπλέον το 88% εκδίδεται στην Αγγλική γλώσσα, ενώ περίπου το 75% των εργασιών, που εμφανίζονται στο ΜΕDLINE®, έχουν και αγγλική περίληψη (abstract).

Το MEDLINE[®] καλύπτει τα έτη από το 1966 και έπειτα, ενώ σε ειδικές περιπτώσεις, μπορεί κάποιος να εντοπίσει και παλαιότερα άρθρα. Αυτή τη στιγμή, το MEDLINE[®] συνεργάζεται με 4.800 επιστημονικά περιοδικά, παγκοσμίως, σε 30 διαφορετικές γλώσσες. Από το 2002 και ύστερα, μετά από κατάλληλη αναβάθμιση του όλου συστήματος, προστίθενται 1.500 - 3.500 άρθρα κάθε εβδομάδα. Αρκεί να σημειωθεί ότι μόνο το 2004 προστέθηκαν στη βάση 571.000 νέα άρθρα.

Το MEDLINE[®] αποτελεί το σημαντικότερο εργαλείο του **PubMed**[®] [258], το οποίο με τη σειρά του είναι μέλος των βιβλιογραφικών ΒΔ **Entrez [259]**, που διατίθενται από το National Centre for Biotechnology Information (NCBI) [260].

Η ΧΗΜΕΙΑ ΣΤΟ ΔΙΑΔΙΚΤΥΟ

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.3 On Line Βιβλιογραφικές Βάσεις Δεδομένων στο Διαδίκτυο

SpringerLink

(http://www.springerlink.com/)

Η βιβλιογραφική ΒΔ του SpringerLink παρέχει online πληροφορίες για περισσότερα από 1.250 "αντικειμενικής κριτικής" (peer reviewed) περιοδικά (πάνω από 1 εκατομμύριο άρθρα) και περισσότερα από 3.000 βιβλία. Εκτείνεται σε όλα τα είδη εκδόσεων: γενικά επιστημονικές, τεχνικές και ιατρικές. Παρέχει πληροφορίες για άρθρα από το 1843 έως και σήμερα από διάφορους εκδοτικούς οίκους (Urban, Vogel, Steinkopff, Birkhäuser), κυρίως όμως από την ίδια εταιρία **Springer - Verlag** [226]. Ωστόσο, για αυτά που εκδόθηκαν πριν το 1996 διατίθεται μόνο η περίληψη. Σε οποιονδήποτε χρήστη του WWW παρέχονται δωρεάν οι δυνατότητες ανάγνωσης του πίνακα των περιεχομένων όλων των περιοδικών και βιβλίων και απόκτησης ειδοποιήσεως μέσω ΕΜΑΙΙ (ΕΜΑΙΙ alerting) για την "διαθεσιμότητα" νέου υλικού με βάση λέζεις κλειδιά [255] (keywords), θέματα, εκδοτικούς οίκους κτλ. Ενώ, όμως, η αναζήτηση ενός άρθρου ή βιβλίου γίνεται δωρεάν η απόκτησή του (σε μορφή HTML και κυρίως PDF) απαιτεί καταβολή χρηματικού ποσού μέσω Internet. Με τη βάση SpringerLink συνεργάζονται (δηλαδή έχουν πρόσβαση σε αυτή) πολλοί ακαδημαϊκοί φορείς και ερευνητικά κέντρα μεταξύ των οποίων και το ΑΠΘ.

CARL UnCover (ingenta)

(http://www.ingenta.com/)

Το 2000, περίπου, η εταιρεία **ingenta** [261] αγόρασε το αυτοματοποιημένο δίκτυο υπηρεσιών βιβλιοθήκης (κατάλογος επιστημονικών και όχι μόνο περιοδικών) του **CARL UnCover** (Colorado Alliance of Research Libraries [262]). Στην τοποθεσία της ingenta παρέχεται και η δυνατότητα αναζήτησης στη ΒΔ της **MEDLINE** [250] δημιουργώντας, έτσι, μια χρήσιμη τοποθεσία για την εύρεση βιβλιογραφικών δεδομένων. Η εταιρία, πλέον, προσφέρει δωρεάν αναζήτηση άρθρων (περισσότερα από 11.000) σε πάνω από 25.000 επιστημονικές εκδόσεις. Τα παρεχόμενα άρθρα (μερικά φτάνουν πίσω μέχρι και τη δεκαετία του '60) μπορεί να είναι κατά περίπτωση είτε άμεσα διαθέσιμα προς εμφάνιση στην οθόνη του Η/Υ (σε ΗΤΜL ή PDF) ή στο FAX [263], με ή χωρίς οικονομική επιβάρυνση, ή μη διαθέσιμα.

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.3 On Line Βιβλιογραφικές Βάσεις Δεδομένων στο Διαδίκτυο

CrossFire Beilstein

(http://www.mdl.com/products/knowledge/crossfire beilstein/index.jsp)

H BΔ CrossFire Beilstein της Elsevier - MDL Information Systems GmbH [138] αποτελεί (κατά τους δημιουργούς της) τη μεγαλύτερη συλλογή πληροφοριών για τη Χημεία και κυρίως την Οργανική Χημεία. Το CrossFire Beilstein αποτελεί πολυμορφική ΒΔ διατηρώντας στοιχεία για τρεις διαφορετικές "περιοχές": χημικές ουσίες, αντιδράσεις και βιβλιογραφία. Στην πρώτη κατηγορία παρέχονται πληροφορίες για τη δομή, τις φυσικές και χημικές ιδιότητες καθώς και για τη βιοδραστικότητα ουσιών συμπεριλαμβανομένων των ανάλογων βιβλιογραφικών πηγών. Στη δεύτερη κατηγορία παρέχονται λεπτομέρειες για την προπαρασκευή ουσιών, που πρόκειται να χρησιμοποιηθούν σε χημικές αντιδράσεις, υποδεικνύοντας στους επιστήμονες εναλλακτικές πορείες αντιδράσεων. Τέλος, το τμήμα της βιβλιογραφίας περιλαμβάνει παραπομπές, περιλήψεις άρθρων και ολόκληρα άρθρα (πάνω από 175 επιστημονικά περιοδικά). Η πρόσβαση στη βάση παρέχεται με χρέωση μέσω της διαδικτυακής πύλης [ν-112] (gateway) DiscoveryGate [264] και ακολούθως, μέσω της εφαρμογής MDL Database Browser ή της διασυνδετικής διάταξης [177] (interface) MDL CrossFire Commander [265]. Πρόσβαση παρέχεται, επίσης, και από τρίτες, on-line υπηρεσίες, όπως or STN International [266], Dialog [267] και ChemVillage [268].

Royal Society of Chemistry (RSC)

(http://www.rsc.org/)

Η Royal Society of Chemistry (RSC) αποτελεί τη μεγαλύτερη οργάνωση στην Ευρώπη για την προώθηση των επιστημών της Χημείας. Υποστηριζόμενη από ένα παγκόσμιο δίκτυο μελών και μια επιχείρηση διεθνών εκδόσεων, η RSC διευρύνει τις δραστηριότητες της σε τομείς όπως η εκπαίδευση, τα επιστημονικά συνέδρια, κανόνες επιστημονικής δεοντολογίας κτλ με σκοπό την προώθηση της Χημείας στο ευρύ κοινό. Μέσω της ίδιας τοποθεσίας παρέχεται η δυνατότητα εξερεύνησης - αναζήτησης προσώπων, ερευνητικών ομάδων, συνεδρίων ή άλλων δρώμενων, πληροφοριών σε ΒΔ (βιβλιογραφικές ή μη) και πολλά άλλα έναντι χρημάτων. Το εκδοτικό της τμήμα δραστηριοποιείται από το 1840 διατηρώντας σήμερα την επιμέλεια για περισσότερα από 20 επιστημονικά περιοδικά μεταξύ των οποίων το Chemical Communications [236] και το Chemical Society Reviews [269].

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.3 On Line Βιβλιογραφικές Βάσεις Δεδομένων στο Διαδίκτυο

American Chemical Society (ACS) Publications

(http://pubs.acs.org/)

Η ACS Publications αποτελεί το σπουδαιότερο τμήμα (Τμήμα Δημοσιεύσεων) της American Chemical Society (ACS) [222]. Η ACS ιδρύθηκε το 1876 και είναι η μεγαλύτερη παγκόσμια επιστημονική οργάνωση με περισσότερα από 158.000 μέλη. Προωθεί τη γνώση και την έρευνα μέσω ακαδημαϊκών εκδόσεων, επιστημονικών συνεδρίων, παροχή πληροφοριών για την εκπαίδευση και την επιχειρηματική δραστηριότητα. Διαδραματίζει, επίσης, έναν ηγετικό ρόλο στην εκπαίδευση και ενημέρωση σπουδαστών, ακαδημαϊκών, δημόσιων ηγετικών προσώπων ακόμη και απλών πολιτών σχετικά με το σημαντικό ρόλο που παίζει η Χημεία στην εξεύρεση νέων λύσεων για τη βελτίωση της δημόσιας υγείας, την προστασία του περιβάλλοντος, την οικονομική ανάπτυξη κτλ. Το Τμήμα Δημοσιεύσεων της ACS προσπαθεί, με οποιοδήποτε μέσο, να παρέχει στα μέλη του και στην παγκόσμια επιστημονική κοινότητα γενικότερα μια περιεκτική συλλογή υψηλής ποιότητας προϊόντων και υπηρεσιών, που προωθούν την πρακτική εφαρμογή των χημικών και άλλων σχετικών επιστημών. Πάνω από 30 αντικειμενικής κριτικής περιοδικά δημοσιεύονται ή συν-δημοσιεύονται από την ACS σε έντυπη ή/και ηλεκτρονική μορφή, ενώ ηλεκτρονικά (μέσω του WWW) διατίθενται και συμπληρωματικές πληροφορίες για κάθε άρθρο (π.χ. υπολογισμοί και πειραματικές μέθοδοι). Με την καθιέρωση της εφαρμογής ACS Journal Archives [270] το 2002 παρέγεται από την τοποθεσία και η δυνατότητα δωρεάν αναζήτησης άρθρων της Χημείας από το 1879 έως και σήμερα. Ανέξοδα, γίνεται, επίσης, και η αναζήτηση βιβλιογραφικών αναφορών για κάθε μελέτη και η ανάγνωση του πίνακα περιεχομένων κάθε τεύχους ή της πρώτης σελίδας, ενώ η απόκτηση ενός άρθρου απαιτεί χρηματική συνδρομή. Υπό την εποπτεία της ACS και ειδικότερα της Chemical Abstracts Service (CAS) [190] λειτουργεί (επί μισθώσει, σε ξεχωριστή τοποθεσία) και η μηχανή βιβλιογραφικών, και όχι μόνο, αναζητήσεων SciFinder [271].

STN International

(http://www.stn-international.de/)

Στην τοποθεσία της STN International παρέχονται διάφορες δυνατότητες αναζήτησης σε πάνω από 220 ΒΔ διάφορων επιστημονικών πεδίων. Την ευθύνη για τη λειτουργία της STN International έχουν από κοινού το επιστημονικό κέντρο **FIZ**

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.3 On Line Βιβλιογραφικές Βάσεις Δεδομένων στο Διαδίκτυο

Karlsruhe [272], η American Chemical Society (ACS) [222] και το The Japan Science and Technology (JST) Agency [273]. Στην πραγματικότητα, πρόκειται για μία μεγάλη συλλογή υπερσυνδέσεων σε αυτές τις βάσεις, όπου ένας χρήστης μπορεί να διενεργήσει βιβλιογραφική έρευνα ή έρευνα για ευρεσιτεχνίες (patents) ή να ψάξει για συγκεκριμένες πληροφορίες για χημικές ουσίες. Στο τελευταίο, οι όροι αναζήτησης μπορεί να είναι το όνομα, η δομή ή ο αριθμός κατάταξης της ουσίας στα Chemical Abstracts [190] (CAS Registry Number ή CASRN). Η απόκτηση, ωστόσο, όπως και η αναζήτηση μιας πληροφορίας (κάθε είδους) είναι δυνατή μόνο έναντι χρηματικού ποσού. Πλήρης κατάλογος ευρωπαϊκών ευρεσιτεχνιών παρέχεται από το Europe's Network of Patent Databases [274], ενώ οι αμερικάνικες παρέχονται από το Delphion Intellectual Property Network [275].

Σύστημα Βιβλιοθηκών ΑΠΘ - Μέντωρ (http://web.lib.auth.gr/portal/)

Εκτός από τις τοποθεσίες - ΒΔ, που περιγράφηκαν παραπάνω, χρήσιμες δυνατότητες αναζήτησης προσφέρει και το ΑΠΘ μέσω του WWW. Το "Σύστημα Βιβλιοθηκών ΑΠΘ - Μέντωρ" συγκεντρώνει πληροφορίες για τα περιεχόμενα των βιβλιοθηκών όλων των τμημάτων του ΑΠΘ. Μέσω της ιστοσελίδας του πραγματοποιείται αναζήτηση για διδακτορικές διατριβές, λεξικά και εγκυκλοπαίδειες, ηλεκτρονικά βιβλία και περιοδικά σε βιβλιογραφικές ΒΔ του ΑΠΘ και άλλων φορέων. Ο Μέντωρ, εκτός των άλλων, υποστηρίζει ηλεκτρονικής μορφής μαθήματα (electronic courses, e-courses) και σεμινάρια για φοιτητές και εκπαιδευτικό προσωπικό και παρέχει πληροφορίες για δανεισμό υλικού μέσω WWW. Στην ίδια ιστοσελίδα βρίσκονται, συνάμα, υπερσυνδέσεις προς τις δύο σημαντικότατες υπηρεσίες αναζήτησης βιβλιογραφικών πηγών, του Ιχνηλάτη και του HEAL - Link.

Ιχνηλάτης(http://muse.lib.auth.gr:8000/muse/servlet/MusePeer)

Ο Ιχνηλάτης αποτελεί αρκετά πρόσφατη εφαρμογή και δίνει τη δυνατότητα ταυτόχρονης, επομένως και γρήγορης, αναζήτησης βιβλιογραφικών δεδομένων (ποικίλων ειδών) στο σύνολο των ηλεκτρονικών πηγών του ΑΠΘ (κατάλογοι ελληνικών

Η ΧΗΜΕΙΑ ΣΤΟ ΔΙΑΔΙΚΤΥΟ

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.3 On Line Βιβλιογραφικές Βάσεις Δεδομένων στο Διαδίκτυο

βιβλιοθηκών, βιβλιογραφικές ΒΔ, ηλεκτρονικά περιοδικά και βιβλία, πηγές αναφοράς κ.ά.)

HEAL - Link

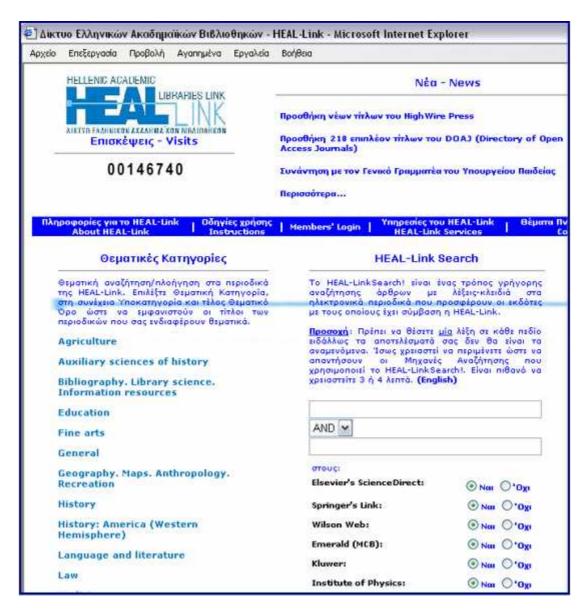
(http://www.heal-link.gr/oroi.php)

Το HEAL-Link (Hellenic Academic Libraries-Link, Δίκτυο Ελληνικών Ακαδημαϊκών Βιβλιοθηκών) λειτουργεί υπό μορφή κοινοπραξίας, που αποτελείται από 37 Ελληνικά Ιδρύματα Τριτοβάθμιας Εκπαίδευσης (22 ΑΕΙ και 15 ΑΤΕΙ), την Ακαδημία Αθηνών [276], την Εθνική Βιβλιοθήκη της Ελλάδος [277] και άλλα 18 ερευνητικά κέντρα της Ελλάδας. Κύριοι στόχοι του δικτύου αυτού είναι η δημιουργία και λειτουργία Συλλογικού Καταλόγου (Union Catalogue) βιβλιογραφικών εγγραφών των ελληνικών ακαδημαϊκών βιβλιοθηκών, η χρήση των εγγραφών του Συλλογικού αυτού Καταλόγου από κάθε μέλος της κοινοπραξίας και η από κοινού συνδρομή ηλεκτρονικών πηγών και υπηρεσιών πληροφόρησης, καθώς και δικαιωμάτων απομακρυσμένης πρόσβασης σε ηλεκτρονικές πηγές και υπηρεσίες πληροφόρησης, συμπεριλαμβανομένων των ηλεκτρονικών επιστημονικών περιοδικών.

Η μηχανή μετα-αναζήτησης [41] (meta-search engine) **HEAL-Link Search**, που είναι ενσωματωμένη στο σύστημα, παρέχει έναν τρόπο γρήγορης αναζήτησης άρθρων με λέξεις-κλειδιά [255] (keywords) στα ηλεκτρονικά περιοδικά που προσφέρουν οι εκδότες με τους οποίους έχει σύμβαση το HEAL-Link (εικόνα 2.5.3-2). Ανάλογη αναζήτηση μπορεί να πραγματοποιηθεί και με βάση τις "**Θεματικές Κατηγορίες**", όπου επιτρέπεται η πλοήγηση στα περιοδικά του HEAL-Link σε μία Θεματική Κατηγορία, στη συνέχεια Υποκατηγορία και τέλος Θεματικό Όρο για την εύρεση ενός συγκεκριμένου περιοδικού. Ο "**Αλφαβητικός Κατάλογος**" περιέχει πλήρη λίστα των προσβάσιμων περιοδικών όλων των εκδοτικών εταιριών με τις οποίες συνεργάζεται το HEAL-Link, οι οποίες συνοψίζονται παρακάτω.

- Elsevier Science B.V [224]
- OCLC FirstSearch [278]
- Wilson's OMNI Megafile [279]
- Springer-Verlag [226]
- Kluwer [280]
- Academic Press [281]
- Emerald (πρώην MCB) [282]
- American Chemical Society (ACS) [222]

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.3 On Line Βιβλιογραφικές Βάσεις Δεδομένων στο Διαδίκτυο



Εικόνα 2.5.3-2 Απόσπασμα από τη σελίδα του HEAL-LINK, του Δικτύου Ελληνικών Ακαδημαϊκών Βιβλιοθηκών, η οποία προσφέρει δυνατότητες αναζήτησης βιβλιογραφικών δεδομένων κ.ά. (http://www.heal-link.gr/oroi.php).

Εθνικό Κέντρο Τεκμηρίωσης (ΕΚΤ)

(http://www.ekt.gr/)

Αρκετά ενδιαφέρουσα για κάθε επιστήμονα είναι και η τοποθεσία του Εθνικού Κέντρου Τεκμηρίωσης (ΕΚΤ). Το ΕΚΤ είναι ο εθνικός οργανισμός για την τεκμηρίωση, την πληροφόρηση και την υποστήριξη σε θέματα έρευνας, επιστήμης και τεχνολογίας. Λειτουργεί από το 1980 στο Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών (ΕΙΕ) [283] με κύριο σκοπό τη δημιουργία και online διάθεση ελληνικών ΒΔ επιστήμης και τεχνολογίας και την ανάπτυξη και παροχή λογισμικού για την αυτοματοποίηση των λειτουργιών των

Η ΧΗΜΕΙΑ ΣΤΟ ΔΙΑΔΙΚΤΥΟ

- 2.5 Χημική Βιβλιογραφία στο Διαδίκτυο
- 2.5.3 On Line Βιβλιογραφικές Βάσεις Δεδομένων στο Διαδίκτυο

ελληνικών βιβλιοθηκών και τη διασφάλιση της πρόσβασης και διασύνδεσής τους με ΒΔ ελληνικού και διεθνούς περιεχομένου επιστήμης και τεχνολογίας. Στην τοποθεσία του ΕΚΤ παρέχεται η δυνατότητα πρόσβασης, με χρέωση, σε αρκετές βιβλιογραφικές ΒΔ (CAS [190], Dissertation Abstracts [284], Polymer Encyclopedia [285] κ.ά.), ενώ ιδιαίτερα ενδιαφέρουσες κρίνονται οι υπηρεσίες των λεγόμενων "καταλόγων αναφορών" (citation indexes), όπως είναι οι Science Citation Index [220] και Journal Citation Reports [221] με τους "συντελεστές απήχησης" (impact factors) των διάφορων επιστημονικών περιοδικών.

- 2.6 Χημική Εκπαίδευση και Τηλεκπαίδευση μέσω Διαδικτύου
- 2.6.1 Εκπαιδευτικά Ιδρύματα και Χημικές Οργανώσεις στο Διαδίκτυο

2.6 Χημική Εκπαίδευση και Τηλεκπαίδευση μέσω ∆ιαδικτύου

2.6.1 Εκπαιδευτικά Ιδρύματα και Χημικές Οργανώσεις στο Διαδίκτυο

Η καθιέρωση του Internet ως παγκόσμιου μέσου επικοινωνίας και ανταλλαγής δεδομένων οδήγησε την πλειονότητα των ακαδημαϊκών - επιστημονικών ιδρυμάτων να αξιοποιήσουν στο χώρο προκειμένου να προβάλουν τις δραστηριότητές τους, να ενημερώσουν για το έργο τους και να διευκολύνουν τα μέλη τους. Ο ερχομός του 21°υ αιώνα βρήκε σχεδόν όλα τα ιδρύματα τριτοβάθμιας εκπαίδευσης από κάθε γωνιά της γης να διαθέτουν ιστοσελίδες [31] (web pages) στο WWW, άλλα απλοϊκές και άλλα σύνθετες και εντυπωσιακές. Παρουσία στο Internet έχουν και τα ελληνικά τμήματα Χημείας (Αθηνών [286], Θεσσαλονίκης [287], Πατρών [288], Κρήτης [289] και Ιωαννίνων [290]) αλλά και τα τμήματα Χημικών Μηχανικών (Αθηνών [291], Θεσσαλονίκης [292] και Πατρών [293]), τα οποία μέσω του WWW παρουσιάζουν διάφορα στοιχεία για την ιστορική τους πορεία, τις δράσεις τους, το πρόγραμμα σπουδών, την υλικοτεχνική υποδομή, το ανθρώπινο δυναμικό τους κτλ.



Εικόνα 2.6.1-1 Η αρχική ιστοσελίδα του Τμήματος Χημικών Μηχανικών του ΑΠΘ (http://www.cheng.auth.gr/).

Διεθνείς χημικές οργανώσεις και σύλλογοι διατηρούν, όπως προαναφέρθηκε, διευθύνσεις στο WWW, ενισχύοντας την προσπάθεια για παγκοσμιοποίηση της χημικής γνώσης. Ανάμεσα σε αυτές εξέχουν οι American Chemical Society (ACS) [222], η Royal Society of Chemistry (RSC) [225] και η Chemical Abstracts Service (CAS) [190], που δραστηριοποιούνται στο χώρο της Χημείας παρέχοντας πληροφορίες για την εκπαίδευση και τη επιχειρηματική δραστηριότητα, οργανώνοντας επιστημονικά συνέδρια και κυρίως εκδίδοντας ακαδημαϊκά βιβλία και περιοδικά. Άλλες οργανώσεις ασχολούνται με διεργασίες προτυποποίησης (standardization), όπως η International Organization for Standardization (ISO) [294], η National Institute of Standards and Technology (NIST) [194], η International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) [295], η Internet Engineering Task Force (IETF) [119] και η European Patent Office [296]. Σύλλογοι χημικών (Ενωση Ελλήνων Χημικών (ΕΕΧ) [297]) και χημικών μηχανικών (Πανελλήνια Ένωση Χημικών Μηχανικών (ΠΣΧΜ) [298]) οργανώνονται στο WWW σε διεθνές ή κρατικό επίπεδο.

Συγκεντρωτικοί κατάλογοι με ιστοσελίδες οργανισμών της Χημείας διάφορων τύπων βρίσκονται στις παρακάτω διευθύνσεις του WWW.

- http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/organisations.html
 (Virtual Library: Science: Chemistry: Organisations Allied to Chemistry)
- http://www.ch.cam.ac.uk/ChemSitesIndex.html

(Chemistry Sites and Journals)

- http://lem.ch.unito.it/chemistry/organizations.html (Chemistry: Organizations)
- http://www.chemistry.ccsu.edu/chemsrc/orgs.html (Chemistry, CCSU, Chemistry Organizations)
- http://www.indiana.edu/~cheminfo/ca_dcco.html
 (SIRCh Directories of Chemists and Chemical Organizations)

- 2.6 Χημική Εκπαίδευση και Τηλεκπαίδευση μέσω Διαδικτύου
- 2.6.2 Από την Εκπαίδευση στην Τηλεκπαίδευση

2.6.2 Από την Εκπαίδευση στην Τηλεκπαίδευση

Μετά την εμφάνιση του Internet και κυρίως του WWW [8] στα μέσα της δεκαετίας του 1990 η εκπαιδευτική διαδικασία όφειλε να δοκιμάσει τις νέες αυτές δυνατότητες και να δημιουργήσει καινούργιους τρόπους για τη μετάδοση της γνώσης. Οι Η/Υ έφεραν την επανάσταση σχεδόν σε όλους τους τομείς που εφαρμόσθηκαν εκτός από την εκπαίδευση. Το WWW με τις καινοτομίες που υποστηρίζει [ιστοσελίδες [31] (web pages), υπερσυνδέσεις [35] (hyperlinks), ΕΜΑΙΙ [10], πολυμέσα [241] (multimedia), FTP [15], Java [53], ΜΙΜΕ [120], PowerPoint [299] κ.ά.] μπορούσε να δώσει στη μάθηση πιο διαδραστικό (interactive) χαρακτήρα και να την απαλλάξει πλήρως ή εν μέρει από την παραδοσιακή διαδικασία, όπου ο διδασκόμενος έχει ανάγκη της βοήθειας του διδάσκοντα [300]. Η χρήση Η/Υ στην εκπαίδευση είναι επιτακτική, αφού, πλέον, ο "ψηφιακός" ή "ηλεκτρονικός αλφαβητισμός" (computer literacy) είναι το ίδιο σημαντικός όπως ήταν ο "κλασσικός" αλφαβητισμός και η αριθμητική πριν από 100 χρόνια. Χωρίς αυτόν ένας ("ψηφιακά αγράμματος") πολίτης δεν μπορεί να συμμετέχει πλήρως στην κοινωνία ούτε να αποκτήσει τις απαραίτητες ικανότητες και γνώσεις για τον 21° αιώνα [301,302].

Όπως και σε άλλους τομείς (π.χ. ηλεκτρονικά συνέδρια και εκδόσεις στο Internet) έτσι και στην εκπαίδευση μέσω Internet οι χημικοί άργησαν να προχωρήσουν σε σχέση με άλλες συγγενείς επιστήμες. Στην αρχή οι Η/Υ χρησιμοποιούνταν από τους χημικούς και τους μαθητευομένους χημικούς ως βοηθήματα για την περάτωση διάφορων επίπονων εργασιών (υπολογισμοί, αναλύσεις κ.ά.), για το σχεδιασμό και την προσομοίωση τρισδιάστατων (3-D) χημικών δομών καθώς και για διάφορα, φροντιστηριακού τύπου, μαθήματα, όπως εικονικά χημικά πειράματα. Αργότερα, έγιναν προσπάθειες για την χρήση διαδικτυακών Η/Υ στην εκπαίδευτική διαδικασία με διάφορους πιο εξελιγμένους τρόπους, όπου διδάσκοντες και διδασκόμενοι αλληλεπιδρούν αποδεσμευμένοι από περιορισμούς χρόνου και τόπου. Η λεγόμενη "εκπαίδευση εξ' αποστάσεως" ή "τηλεκπαίδευση" (distance ή electronic learning, e-learning) έμελλε να μετατρέψει τους Η/Υ και το Internet σε πολύτιμα εργαλεία για την μετάδοση της χημικής και όχι μόνο γνώσης [302].

- 2.6 Χημική Εκπαίδευση και Τηλεκπαίδευση μέσω Διαδικτύου
- 2.6.3 Σύγχρονη και Ασύγχρονη Τηλεκπαίδευση

2.6.3 Σύγχρονη και Ασύγχρονη Τηλεκπαίδευση

Το κύριο χαρακτηριστικό στην εκπαίδευση εξ' αποστάσεως είναι το γεγονός ότι εκπαιδευόμενος/οι (μαθητές σχολείων, σπουδαστές τριτοβάθμιας εκπαίδευσης, εργαζόμενοι, καθηγητές κάθε βαθμίδας κτλ) και εκπαιδευτής/ές βρίσκονται σε διαφορετικούς (συνήθως πολύ απομακρυσμένους) χώρους, ενώ υπάρχει αλληλεπίδραση μεταξύ τους με χρήση τηλεπικοινωνιακής υποδομής Internet ή άλλων παρόμοιων συνδέσεων [303]. Ανάλογα με τη μορφή αλληλεπίδρασης, η τηλεκπαίδευση διακρίνεται σε σύγχρονη και ασύγχρονη. Τα βασικά γνωρίσματα της διδασκαλίας ακολουθούνται και εδώ άλλοτε πιστά και άλλοτε με τροποποιήσεις: παρουσίαση του περιεχομένου (παραδόσεις, σημειώσεις κτλ), αλληλεπίδραση με το εκπαιδευτικό ίδρυμα, τους καθηγητές και τις πηγές (π.χ. ιστοσελίδες, ηλεκτρονικού τύπου επιστημονικά άρθρα, διαδικτυακές βάσεις δεδομένων), πρακτική εφαρμογή και βέβαια αξιολόγηση [304].

Στη σύγχρονη τηλεκπαίδευση οι εκπαιδευτές και οι εκπαιδευόμενοι επικοινωνούν στον ίδιο χρόνο από απομακρυσμένα γεωγραφικά σημεία μέσω κατάλληλης τηλεπικοινωνιακής σύνδεσης (Internet [5], POTS [vi-305], ISDN [vii-306] κτλ). Κατά τη διάρκεια της επικοινωνίας υπάρχει αμφίδρομη ανταλλαγή ήχου, εικόνας και δεδομένων με τη χρήση συστημάτων τηλεδιάσκεψης [ηλεκτρονικός πίνακας [viii-307] (whiteboard), κάμερα εγγράφων, βίντεο, προβολέας, ασύρματο μικρόφωνο, τηλεχειριζόμενες κάμερες κλπ.] Με τον τρόπο αυτό προσομοιώνεται η κλασσική εκπαιδευτική διαδικασία, όπου ο μαθητής βλέπει και ακούει ζωντανά τον εκπαιδευτικό, ενώ ταυτόχρονα γίνεται παρουσίαση εκπαιδευτικού υλικού (διαφάνειες, σημειώσεις, επεξηγήσεις στον πίνακα κτλ) [301].

Στην ασύγχρονη τηλεκπαίδευση αίρεται ο περιορισμός τόπου και χρόνου στην επικοινωνία εκπαιδευτικού - εκπαιδευομένων. Οι εκπαιδευόμενοι έχουν ανά πάσα στιγμή πρόσβαση στο εκπαιδευτικό υλικό και στο υλικό αξιολόγησης (εργασίες, ασκήσεις, διαγωνίσματα) και μπορούν να διαμορφώνουν μόνοι τους το χρονικό πλαίσιο μελέτης. Συνήθως δεν υπάρχει αμφίδρομη οπτικο-ακουστική επικοινωνία με τον εκπαιδευτικό και

[[]vi]: **POTS**: Το μη ψηφιακό δίκτυο τηλεφωνικών γραμμών, όπου τα δεδομένα μεταφέρονται με αρκετά χαμηλότερες ταχύτητες σε σχέση με ψηφιακά δίκτυα.

[[]vii]: *ISDN*: Ένα δίκτυο το οποίο παρέχει ψηφιακή διασύνδεση από άκρο σε άκρο και υποστηρίζει ένα εύρος υπηρεσιών, συμπεριλαμβανομένων υπηρεσιών φωνής και δεδομένων στις οποίες οι χρήστες έχουν πρόσβαση με καθορισμένες διεπαφές.

[[]viii]: whiteboard (ηλεκτρονικός ασπροπίνακας): ειδικό σύστημα με επιφάνεια αφής, έτσι ώστε οτιδήποτε γραφεί στην επιφάνει ά του από τον διδάσκοντα να εμφανίζεται ταυτόχρονα στην οθόνη του απομακρυσμένου ακροατηρίου.

- 2.6 Χημική Εκπαίδευση και Τηλεκπαίδευση μέσω Διαδικτύου
- 2.6.4 Οργανισμοί (Χημικής) Εκπαίδευσης από Απόσταση

η επικοινωνία γίνεται μέσω ΕΜΑΙΙ, ομάδων συζητήσεων [12] (newsgroups), λιστών μηνυμάτων [11] (mailing lists) κτλ. Εκτός από τις δύο αυτές μορφές υπάρχουν και πολλές υβριδικές μορφές, που συνδυάζουν χαρακτηριστικά τόσο από τις παραπάνω αναφερθείσες όσο και από την καθιερωμένη, παραδοσιακή εκπαιδευτική διαδικασία [301,308].



Εικόνα 2.6.3-1 Αίθουσα τηλεκπαίδευσης Τμήματος Ηλεκτρολόγων Μηχανικών & Μηχανικών Υπολογιστών του ΑΠΘ [323].

2.6.4 Οργανισμοί (Χημικής) Εκπαίδευσης από Απόσταση

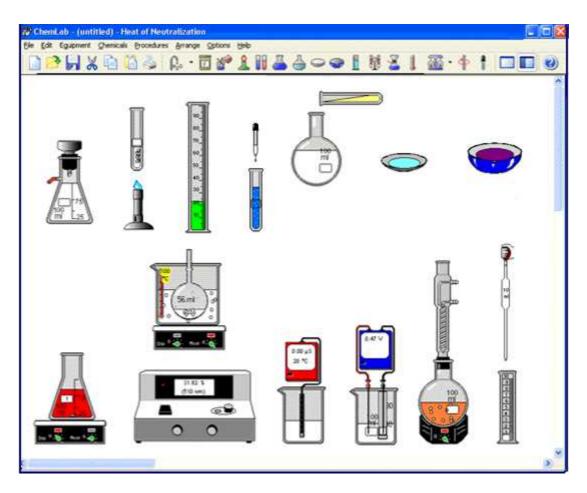
Στον τομέα της Χημείας πολλά εκπαιδευτικά ιδρύματα δραστηριοποιήθηκαν προκειμένου να παράσχουν μία ιδιαίτερη χημική εκπαίδευση σε ανθρώπους που, για διάφορους λόγους, δεν μπορούσαν να παρακολουθήσουν από κοντά τα μαθήματα. Άλλα παρέχουν τηλεκπαίδευση, μη συστηματικά, σαν συμπληρωματικό ή υποβοηθητικό μέσο της παραδοσιακής εκπαίδευσης, άλλα διατηρούν ξεχωριστά τμήματα τηλεκπαίδευσης ανεξάρτητα των παραδοσιακών τμημάτων τους και άλλα παρέχουν αποκλειστικά τηλεκπαίδευση [301]. Τα τελευταία αποτελούν τα λεγόμενα "Πανεπιστήμια Εκπαίδευσης από Απόσταση" (Distance Learning Universities) [300], όπως π.χ. το University of New England, Australia [309]. Τα ιδρύματα αυτά προσφέρουν σε

- 2.6 Χημική Εκπαίδευση και Τηλεκπαίδευση μέσω Διαδικτύου
- 2.6.4 Οργανισμοί (Χημικής) Εκπαίδευσης από Απόσταση

εκπαιδευτικούς και φοιτητές τη δυνατότητα απόκτησης εξειδικευμένων γνώσεων μέσω ηλεκτρονικών μαθημάτων ή σεμιναρίων (electronic courses, e-courses) ακόμη και μεταπτυχιακών διπλωμάτων σε διάφορους τομείς της Χημείας. Χρησιμοποιείται κυρίως η ασύγχρονη μορφή τηλεκπαίδευσης μέσω Internet μια και σε τέτοια προγράμματα, συνήθως, λαμβάνουν μέρος άτομα από κάθε γωνιά της γης. Στην ασύγχρονη τηλεκπαίδευση, εκτός των άλλων, δίδεται έμφαση και στην αυτο-διδασκαλία και την αυτόνομη αναζήτηση γνώσεων, όπου οι διδάσκοντες μεριμνούν μόνο για σημαντικούς προβληματισμούς και απορίες των μαθητών [301].

Η τηλεκπαίδευση σε θέματα που σχετίζονται με τη Χημεία, καθώς και άλλες μοριακές επιστήμες, αντιμετωπίζει πολλά προβλήματα, που προκύπτουν κυρίως από την ανάγκη πρακτικής εξάσκησης των τηλε-σπουδαστών. Τα εργαστηριακά πειράματα είναι απαραίτητα για την ολοκληρωμένη επιμόρφωση του χημικού, οπότε στην τηλεκπαίδευση αναζητούνται έξυπνες μέθοδοι περάτωσης πειραμάτων, που διαρκώς εξελίσσονται όσο αναπτύσσεται η τεχνολογία. Στην προ-Internet εποχή τα Πανεπιστήμια Εκπαίδευσης από Απόσταση (ΠΕΑ, εδώ ο όρος χρησιμοποιείται γενικότερα για να περιγράψει όλα τα ακαδημαϊκά ιδρύματα που προσφέρουν τηλεκπαίδευση είτε συμπληρωματικά είτε αποκλειστικά) προμήθευαν, μέσω ταχυδρομείου, τους τηλεσπουδαστές με εργαστηριακά πακέτα (lab kits), που περιείχαν τον απαραίτητο εξοπλισμό και τις οδηγίες για την εκτέλεση πειραμάτων μικρής κλίμακας. Άλλες φορές οι σπουδαστές έπρεπε να μεταβούν σε ένα κοντινό μέρος, όπου υπήρχαν εργαστηριακές εγκαταστάσεις για να ασκηθούν. Πιο πρόσφατα ακόμη, τεχνολογίες τηλεδιάσκεψης επέτρεψαν την παρακολούθηση μαθημάτων και πειραμάτων μέσω του Internet ή άλλων τηλεπικοινωνιακών συνδέσεων. Με την ευρεία εξάπλωση του Διαδικτύου και τη δυνατότητα απόκτησης δυναμικών συστημάτων πολυμέσων σε προσιτές τιμές η εργαστηριακή εξάσκηση μεταφέρθηκε στην οθόνη του Η/Υ. Εικονικά πειράματα μπορούν, πλέον, να πραγματοποιηθούν με τη βοήθεια κατάλληλων προσομοιωτών εργαστηρίου (lab simulators, π.χ ChemLab [310] της Model Science Software Inc [311], εικόνα 2.6.4-1) ή άλλων εφαρμογών μέσω του WWW. Τότε όμως πρακτική άσκηση ουσιαστικά δεν υφίσταται, διότι η οθόνη του Η/Υ καμία σχέση δεν έχει με τις ιδιαίτερες συνθήκες ενός πραγματικού εργαστηριακού χώρου [304].

- 2.6 Χημική Εκπαίδευση και Τηλεκπαίδευση μέσω Διαδικτύου
- 2.6.4 Οργανισμοί (Χημικής) Εκπαίδευσης από Απόσταση



Εικόνα 2.6.4-1 Επιφάνεια εργασίας του προσομοιωτή χημικού εργαστηρίου ChemLab της εταιρίας Model Science Software Inc [310].

Παρακάτω δίνονται ορισμένες διευθύνσεις με συγκεντρωτικούς καταλόγους οργανισμών παροχής τηλεκπαίδευσης διάφορων ειδών στο WWW (οι τέσσερις πρώτες αφορούν σε χημική τηλεκπαίδευση).

- http://www.anachem.umu.se/cgi-bin/pointer.exe?Courses
 (UMEA University Chemistry Teaching Resources Courses and Tutorials
 Texts on the Web)
- http://wwwrohan.sdsu.edu/staff/drjackm/chemistry/chemlink/teach/teach1.html
 (SDSU Chemistry Teaching Resources Courses and Tutorials Texts on the Web)
- http://people.morehead-st.edu/fs/h.hedgec/sciteach.html (Chemistry Teaching Web Sites)

- 2.6 Χημική Εκπαίδευση και Τηλεκπαίδευση μέσω Διαδικτύου
- 2.6.5 Εφαρμογές της Τηλεκπαίδευσης Πλεονεκτήματα και Μειονεκτήματα
- http://www.wiley.com/college/webercises/#X.%20CHEMISTRY%20TEACHIN
 G%20RESOURCES%20-%20EXERCISES.

(Chemistry Webercises Directory)

• http://www.worldwidelearn.com/

(WorldWideLearn - The World's Directory of Online Courses, Online Learning and Online Education)

2.6.5 Εφαρμογές της Τηλεκπαίδευσης - Πλεονεκτήματα και Μειονεκτήματα

Τα πλεονεκτήματα της τηλεκπαίδευσης για διδάσκοντες, διδασκομένους και εκπαιδευτικά ιδρύματα είναι πολλά. Στην ασύγχρονη τηλεκπαίδευση, ειδικότερα, η ελευθερία του χρόνου (εφόσον δεν υπάρχει αμεσότητα στην ανταλλαγή πληροφοριών) διευκολύνει τόσο τους εκπαιδευτές όσο και τους μαθητές, διότι επιτρέπει, στους μεν πρώτους, την ενασχόληση με τη διδακτική διαδικασία (π.χ. την παρουσίαση της διδακτέας ύλης, την αξιολόγηση των μαθητών κ.ά.) οποιαδήποτε ώρα της ημέρας χωρίς καθιερωμένα ωράρια, στους δε δεύτερους, τη δυνατότητα να ρυθμίζουν το χρονοδιάγραμμα της μελέτης (ανάγνωση κειμένων, ασκήσεις, εκθέσεις, εργασίες κτλ) ανάλογα με τη δυσκολίες που συναντούν ή τις ώρες που έχουν ελεύθερο χρόνο [300,312]. Ομοίως, επειδή τα μαθήματα και η αξιολόγηση γίνονται μέσω ενιαίου δικτύου ο εκπαιδευτής είναι διαρκώς και πλήρως ενημερωμένος για την πρόοδο των μαθητών, τα προβλήματα που αντιμετωπίζουν και τον τρόπο που αλληλεπιδρούν με τα δεδομένα. Μπορεί, επομένως, να προσαρμόσει τη διδακτέα ύλη ανάλογα και να ακολουθήσει έναν πιο γρήγορο ή αργό ρυθμό [313].

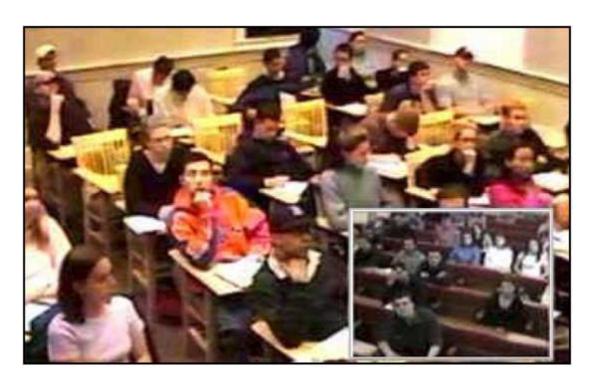
Στην τηλεκπαίδευση, επίσης, ο εκπαιδευτής ή καλύτερα εδώ, ο χορηγός της γνώσης, μπορεί να απαλλαγεί από ανιαρές διαδικασίες συγγραφής σημειώσεων ή αναζήτησης πληροφοριών χρήσιμων για τους μαθητές, αφού οι μαθητές έχουν τη δυνατότητα να κάνουν το ίδιο χρησιμοποιώντας εργαλεία της τηλεκπαίδευσης [WWW, EMAIL, υπεργλωσσάρια (hyperglossaries), υπερσυνδέσεις, μηχανές αναζήτησης [214] (search engines) κ.ά.] [300]. Τα ηλεκτρονικά μαθήματα προσαρμόζονται εύκολα και γρήγορα στις ανάγκες των μαθητών και της αγοράς σε αντίθεση με τα συμβατικά μαθήματα. Είναι γεγονός ότι σε τέτοιου είδους μορφές μάθησης μετατρέπουν το διδάσκοντα από ειδικό σε καθοδηγητή και το διδασκόμενο από αποδέκτη της γνώσης σε αυτόνομο "θηρευτή" της [301]. Σε αντίθεση με τις συνήθεις εκπαιδευτικές - διδακτικές

- 2.6 Χημική Εκπαίδευση και Τηλεκπαίδευση μέσω Διαδικτύου
- 2.6.5 Εφαρμογές της Τηλεκπαίδευσης Πλεονεκτήματα και Μειονεκτήματα

μεθόδους, στην τηλεκπαίδευση δίνεται μεγαλύτερη **έμφαση στο μαθητή** και τη διαδικασία της μάθησης παρά στον εκπαιδευτή και τη διεργασία της διδασκαλίας [301,302,314].

Για τους εκπαιδευόμενους τα οφέλη είναι ακόμη πιο σπουδαία. Αρχικά, η ενασχόληση με το Internet και τις παροχές του βελτιώνει το λεγόμενο "ηλεκτρονικό αλφαβητισμό" των χρηστών, οι οποίοι, έτσι, οικειοποιούνται άμεσα των παροχών της σύγγρονης τεχνολογίας. Το κυριότερο πλεονέκτημα της τηλεκπαίδευσης είναι ότι επιτρέπει σε άτομα κάθε ηλικίας να ξεπεράσουν τους γεωγραφικούς ή άλλου είδους περιορισμούς (π.χ. άτομα με δυσκολίες μετακίνησης, με χαμηλό εισόδημα ή από υποανάπτυκτες χώρες) και να διεισδύσουν στις πληροφορίες, που χαρακτηρίζουν τον 21° αιώνα. Η μορφή της τηλεκπαίδευσης, τόσο της σύγχρονης όσο και της ασύγχρονης, μεταφέρει το επίκεντρο της διδασκαλίας από τον καθηγητή στο σπουδαστή. Η χρήση των H/Y του Internet ενισχύει την αυτοπεποίθηση, την αυτογνωσία και την πρωτοβουλία των μαθητών σε σημείο που να μπορούν, με ελάχιστη καθοδήγηση, να αναζητούν και να ελέγχουν μόνοι τους τη γνώση (μέσα στο WWW), να κάνουν εξάσκηση των όσων μαθαίνουν, να επικοινωνούν και να συνεργάζονται με άλλους μαθητές, να ενημερώνονται κτλ. Με την τηλεκπαίδευση, συνάμα, είναι δυνατή και η συνεχής επιμόρφωση εργαζομένων, που δεν μπορούν να μετακινούνται, λόγω των υπογρεώσεών τους, από ένα μέρος σε άλλο [301,302,307,312,314].

Ακόμη, εξοικονομούνται χρήματα και χρόνος, τόσο από τους εκπαιδευόμενους όσο και από τα ΠΕΑ, τα οποία μπορούν να έλκουν, κατ' αυτόν τον τρόπο, περισσότερους τηλε-σπουδαστές από διάφορες περιοχές της γης. Πολυ-ιδρυματικές συνεργασίες μεταξύ καθηγητών και σπουδαστών, αλλά και μεταξύ μόνο καθηγητών ή μόνο σπουδαστών είναι εφικτές μέσα από προγράμματα τηλεκπαίδευσης [300]. Η τεχνολογία που χρησιμοποιείται, άλλωστε, στη σύγχρονη τηλεκπαίδευση μπορεί κάλλιστα ν α χρησιμοποιηθεί και σε άλλες δραστηριότητες, όπως π.χ. επιμορφωτικά σεμινάρια, τηλεδιασκέψεις (εικόνα 2.6.5-1), τηλε-συνεργασίες, ηλεκτρονικά συνέδρια, τηλε-ιατρική και τηλε-διάγνωση, διαφημιστικά-εμπορικά προγράμματα, τηλε-εργασία κτλ [301,303].



Εικόνα 2.6.5-1 Στιγμιότυπο από τηλεδιάσκεψη με θέμα την ολική έκλειψη ηλίου μεταζύ του τμήματος Φυσικής του ΑΠΘ και του κολλεγίου Williams των ΗΠΑ [301].

Τα μαθήματα από απόσταση, ως προς την αντιμετώπισή τους από τους επιστήμονες, θυμίζουν αρκετά τα ηλεκτρονικά συνέδρια, που πραγματοποιούνται στο Internet. Αυτό που χαρακτηρίζει και τις δύο διαδικασίες είναι η αίσθηση της απώλειας της αυθόρμητης προσωπικής επαφής. Ιδιαίτερα στην ασύγχρονη τηλεκπαίδευση το στοιχείο αυτό αποτελεί το μείζον πρόβλημα. Η επαφή τόσο με τον εκπαιδευτή όσο και με τους άλλους μαθητές περιορίζεται στις παραδόσεις της ύλης και στην γραπτή-ηλεκτρονική επικοινωνία μεταξύ τους. Η μεταδοτικότητα της γλώσσας του σώματος και η αμεσότητα της επικοινωνίας δεν μπορούν σε καμία περίπτωση να αποτυπωθούν στην οθόνη ενός Η/Υ. Ακόμη και η σύγχρονη τηλεκπαίδευση τύπου τηλεδιάσκεψης, όπου υπάρχει αμφίδρομη ανταλλαγή εικόνας και ήχου, υπολείπεται, συγκρινόμενη με την παραδοσιακή, πρόσωπο με πρόσωπο, εκπαίδευση [307,312,314].

Άλλα παιδαγωγικά ζητήματα που προκύπτουν έχουν να κάνουν με την αποξένωση και την χαμηλότερη κοινωνικοποίηση μέσα από τέτοιου είδους μαθήματα. Πολλοί εκπαιδευόμενοι και εκπαιδευτές δεν αισθάνονται άνετα να χρησιμοποιούν συνεχώς τον Η/Υ για να μελετήσουν, ούτε είναι σε θέση να πληκτρολογούν ο,τιδήποτε προκειμένου να επικοινωνήσουν (ιδίως στην ασύγχρονη τηλεκπαίδευση). Όταν το εκπαιδευτικό υλικό είναι χαμηλής ποιότητας και η διδασκαλία μέσω Internet γίνεται με

- 2.6 Χημική Εκπαίδευση και Τηλεκπαίδευση μέσω Διαδικτύου
- 2.6.5 Εφαρμογές της Τηλεκπαίδευσης Πλεονεκτήματα και Μειονεκτήματα

λάθος τρόπο, όπως π.χ. δημιουργία μη διαδραστικών υλικών (έντυπα κείμενα απλά σε ψηφιακή μορφή), υπερσυνδέσεις σε ιστοσελίδες με άσχετα θέματα ή ιστοσελίδες που έχουν λήξει, έλλειψη σωστής καθοδήγησης κτλ, οι εκπαιδευόμενοι δυσανασχετούν, αποστασιοποιούνται και προσπαθούν να μετατρέψουν την τηλεκπαίδευση σε παραδοσιακή εκπαίδευση [π.χ. απλά "κατεβάζοντας" [219] (downloading) και εκτυπώνοντας κείμενα ιστοσελίδων] [300,307,312,315].

Εκτός από τα παιδαγωγικά προβλήματα, που είναι και τα σημαντικότερα, δυσκολίες εμφανίζονται και σε πρακτικά θέματα όσο αφορά στις τεχνολογίες και στον τρόπο διδασκαλίας. Το ζήτημα των δικαιωμάτων πρόσβασης και της πνευματικής ιδιοκτησίας (copyright) των δεδομένων του WWW ιδιαίτερα σοβαρό στην τηλεκπαίδευση. Η εντύπωση ότι όλα τα αντικείμενα που διατίθενται στο WWW μπορούν ελεύθερα να χρησιμοποιηθούν από οποιονδήποτε είναι τελείως λανθασμένη. Οι εκπαιδευτές και τα ιδρύματα τηλεκπαίδευσης είναι υποχρεωμένοι να ζητούν την άδεια των δημιουργών αυτών των πληροφοριών ή να κάνουν "δίκαιη χρήση" τους (fair use) [316,317].

Λοιπά τεχνολογικά προβλήματα αφορούν στο τηλεπικοινωνιακό σύστημα ενός προγράμματος τηλεκπαίδευσης, που μπορεί να τεθεί, για διάφορους λόγους, εκτός λειτουργίας ή να υπολειτουργεί. Ακόμη, όμως, και όταν λειτουργεί σωστά, το λογισμικό [61] (software) και το ηλεκτρομηχανολογικό υλικό [81] (hardware) που απαιτούνται είτε είναι οικονομικά δύσκολο να αποκτηθούν (από μεμονωμένους χρήστες) είτε μπορεί να παρουσιάζουν δυσκολίες στη χρήση τους. Εξάλλου, οι χημικοί, ή τουλάχιστον οι παλαιότερες γενιές αυτών, δεν νοιώθουν γενικά άνετα να χρησιμοποιούν τις δυνατότητες του Internet (WWW, EMAIL, λογισμικό, γλώσσες προγραμματισμού, πρότυπα ανταλλαγής πληροφοριών κ.ά.) και επομένως συμμετέχουν επιφυλακτικότερα στις διάφορες μορφές τηλεκπαίδευσης [301,302,312,314].

Η διεργασία της τηλεκπαίδευσης βρίσκεται ακόμη σε πρόωρο στάδιο και απαιτούνται επίπονες προσπάθειες από κάθε πλευρά για την καθιέρωσή της ως νέου μέσου της μάθησης. Η σταδιακή ενσωμάτωσή της στην παραδοσιακή διδακτική διαδικασία πρέπει να ξεκινά από τις μικρότερες ηλικίες και την πρωτοβάθμια εκπαίδευση [312]. Μέρος του μαθήματος μπορεί να μεταφέρεται στο Διαδίκτυο, όπου ηλεκτρονικό υλικό του WWW μπορεί να συμπληρώνει το έντυπο και γενικότερα, διάφοροι πειραματισμοί με νέες στρατηγικές μπορούν να λάβουν χώρα προκειμένου να αξιοποιηθούν στο έπακρο οι δυνατότητες τόσο της παραδοσιακής όσο και της από

- 2.6 Χημική Εκπαίδευση και Τηλεκπαίδευση μέσω Διαδικτύου
- 2.6.6 Δράσεις Τηλεκπαίδευσης και Προηγμένες Τηλεματικές Υπηρεσίες στο ΑΠΘ

απόσταση εκπαίδευσης. Οι εκπαιδευτικοί οφείλουν να ενημερώνονται διαρκώς για τις τεχνολογικές εξελίξεις έτσι ώστε να είναι σε θέση να εφαρμόζουν την κατάλληλη εναλλακτική μέθοδο μάθησης [301,307,314]. Διεθνείς κανόνες και πρότυπα τηλεκπαίδευσης και τηλεδιάσκεψης χρειάζεται να θεσπιστούν από αναγνωρισμένους φορείς προτυποποίησης και ανάπτυξης προδιαγραφών, όπως είναι οι ΙΕΕΕ LTSC (Learning Technology Standards Committee) [318], CEN/ISSS/WS-LT (Learning Technology Workshop) [319], ADL (Advanced Distributed Learning) [320], IMS Global Learning Consortium [321], DCMI (Dublin Core Metadata Initiative) [322] κ.ά. [301,307].

2.6.6 Δράσεις Τηλεκπαίδευσης και Προηγμένες Τηλεματικές Υπηρεσίες στο ΑΠΘ

Το Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, με βάση την αξιόλογη υποδομή που δημιουργήθηκε με τη σύμπραξη διάφορων φορέων, πρωτοπορεί στον ελληνικό χώρο, σε θέματα εφαρμογής και αξιοποίησης νέων τεχνολογιών στην εκπαίδευση, αφού παρέχει από το 1995 πιλοτικές, και από το 1997 οργανωμένες υπηρεσίες τηλεδιάσκεψης και τηλεκπαίδευσης,. Τα ομαδικά συστήματα τηλεδιάσκεψης, που έχουν εγκατασταθεί, στηρίζονται στην τεχνολογία ISDN [306] και υποστηρίζουν αμφίδρομη οπτική και ηχητική επικοινωνία, ενώ παρέχουν τη δυνατότητα ταυτόχρονης μεταφοράς δεδομένων με αντίστοιχα απομακρυσμένα συστήματα της Ελλάδας και του εξωτερικού (εικόνα 2.6.6-1). Με τον τρόπο αυτό διευκολύνεται σε μεγάλο βαθμό η συνεργασία και η επικοινωνία από απόσταση και καλύπτονται οι συνεχώς αυξανόμενες ανάγκες για εναλλακτικές μορφές εκπαίδευσης [323].

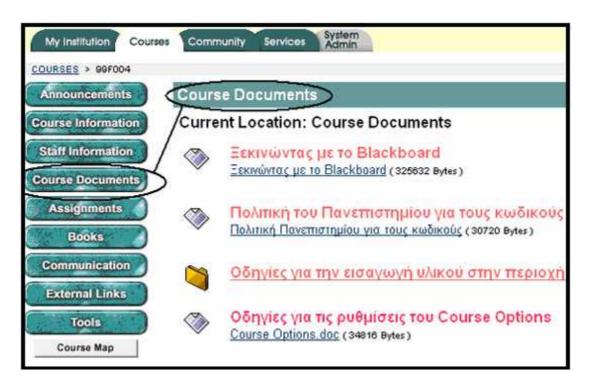


Εικόνα 2.6.6-1 Σημεία του ελλαδικού χώρου όπου βρίσκεται εγκατεστημένη υποδομή τηλεκπαίδευσης (Πανελλήνιο Δίκτυο για την Εκπαίδευση, EDUnet) [324].

Διάφοροι κεντρικοί φορείς του ΑΠΘ (Τηλεπικοινωνιακό Κέντρο [308], Κεντρική Βιβλιοθήκη [325], Κέντρο Υποστήριξης Τεχνολογιών Πληροφορικής [326] και Κέντρο Υποστήριξης της Εκπαίδευσης [327]) δημιούργησαν με τη βοήθεια ευρωπαϊκής αρωγής ένα ενιαίο σύνολο υποδομών και υπηρεσιών τηλεκπαίδευσης, που φιλοξενούνται στην υπό κατασκευή διαδικτυακή διεύθυνση του "teledu" [328]. Οι παρεχόμενες υπηρεσίες τηλεκπαίδευσης στο ΑΠΘ συνοψίζονται παρακάτω [323].

- Διενέργεια μαθήματος με εκ του μακρόθεν συμμετοχή, είτε ακροατηρίου, είτε ομιλητή μέσω τηλεδιάσκεψης (σύγχρονη τηλεκπαίδευση, π.χ. CENTRA [329,330] και Master Eye [331]).
- Ψηφιοποίηση οπτικοακουστικού υλικού κατά τη διάρκεια της διδασκαλίας για χρήση από τους εκπαιδευόμενους σε μεταγενέστερο χρόνο (ασύγχρονη τηλεκπαίδευση).

- 2.6 Χημική Εκπαίδευση και Τηλεκπαίδευση μέσω Διαδικτύου
- 2.6.6 Δράσεις Τηλεκπαίδευσης και Προηγμένες Τηλεματικές Υπηρεσίες στο ΑΠΘ
 - Προγραμματισμένη ψηφιοποίηση οπτικοακουστικού υλικού διδασκαλίας, άνευ ακροατηρίου, για τη μετέπειτα χρήση τους από τους εκπαιδευόμενους (ασύγχρονη τηλεκπαίδευση).
 - Τοποθέτηση υλικού σε ιστοσελίδες μαθήματος (ασύγχρονη τηλεκπαίδευση). Χρησιμοποιούνται, προς το παρόν, δύο εμπορικές, ανοιχτού λογισμικού πλατφόρμες ηλεκτρονικών μαθημάτων, οι **BlackBoard** [332] και **e-Class** [333] (εικόνα 2.6.6-2).
 - Διενέργεια εκπαιδευτικών δράσεων εξοικείωσης διδασκόντων και λοιπού προσωπικού με υποδομές τηλεκπαίδευσης του ΑΠΘ.
 - Δημιουργία κεντρικού, διαδικτυακού σημείου επαφής (Helpdesk [334]) για την υποβολή αιτημάτων και την επίλυση αποριών σχετικά με όλες τις δράσεις τηλεκπαίδευσης στο ΑΠΘ.



Εικόνα 2.6.6-2 Η πλατφόρμα ηλεκτρονικών μαθημάτων ασύγχρονης εκπαίδευσης BlackBoard [332].

- 2.7 Κερδοσκοπικές εταιρίες χημικών εφαρμογών στο Διαδίκτυο
- 2.7.1 Κερδοσκοπικές εταιρίες χημικών εφαρμογών στο Διαδίκτυο

2.7 Κερδοσκοπικές εταιρίες χημικών εφαρμογών στο Διαδίκτυο

2.7.1 Κερδοσκοπικές εταιρίες χημικών εφαρμογών στο Διαδίκτυο

Είναι γνωστό ότι το Internet αποτελούσε αρχικά ένα καλά οργανωμένο κλειστό κύκλωμα Η/Υ στα πλαίσια του αμυντικού στρατιωτικού συστήματος των ΗΠΑ. Σε σύντομο χρονικό διάστημα, ορισμένοι ακαδημαϊκοί φορείς των ΗΠΑ (και άλλων κρατών αργότερα) θεώρησαν πολύ ενδιαφέροντα και χρήσιμο αυτόν τον τρόπο επικοινωνίας και προσπάθησαν να οικειοποιηθούν των δυνατοτήτων του και μάλιστα επιτυχώς.. Η επιστημονική κοινότητα ανέλαβε ηγετικό ρόλο προκειμένου το Internet να αποκτήσει τη μορφή που γνωρίζουμε σήμερα. Η μεγάλη έξαρση στη χρήση του Internet έγινε περίπου στα μέσα της δεκαετίας του '90 με την εμφάνιση του WWW και κυρίως με τη δυναμική εμπλοκή στο χώρο του εμπορίου και της βιομηχανίας [335].

Αρχικά, τόσο το εμπόριο όσο και η βιομηχανία, είχαν έντονη συνεργασία με τα ακαδημαϊκά ιδρύματα για την απόκτηση τεχνογνωσίας και εμπειρίας, όμως, με την πάροδο του χρόνου ανεξαρτητοποιήθηκαν, χωρίς να έχουν την πλήρη αποδέσμευση από αυτά [335]. Αυτή η αλλαγή στην επικοινωνιακή πολιτική των κερδοσκοπικών οργανισμών δεν άφησε αδιάφορες τις ποικίλες χημικές βιομηχανίες και εταιρίες που αποφάσισαν να ασχοληθούν με το νέο μέσο αμφίδρομης επικοινωνίας (Internet) και να το χρησιμοποιήσουν προς όφελός τους. Επί του παρόντος (2005) σχεδόν όλες οι αξιόλογες "χημικές" (και όχι μόνο) εταιρίες διατηρούν ιστοσελίδες [31] (web page) στο WWW, στις οποίες παρέχουν πληροφορίες σχετικά με τις δραστηριότητες, την οργάνωση και τον τρόπο λειτουργίας τους, το επιστημονικό δυναμικό τους και κυρίως τα προϊόντα τους.

Ανάμεσα στους κερδοσκοπικούς οργανισμούς, που σχετίζονται με τη Χημεία, συγκαταλέγονται εταιρίες εμπορίας χημικών υλών (chemical suppliers), εμπορίας και κατασκευής εξοπλισμού και οργάνων χημικών εργαστηρίων (chemical equipment and lab instrument suppliers), παρασκευής και μεταποίησης χημικών ουσιών (chemical companies, π.χ. χρώματα, υφάσματα, τρόφιμα, καύσιμα, πλαστικά, μέταλλα κτλ), χημικής τεχνογνωσίας και τεχνολογίας (chemical know-how and technology companies), παροχής λογισμικού για Χημικούς (chemistry software suppliers) και τέλος εταιρίες επιστημονικών εκδόσεων της Χημείας στο WWW (chemistry W W W publishing companies). Όλες οι παραπάνω κατηγορίες "χημικών" εταιριών δραστηριοποιούνται στο Internet, σε μεγαλύτερο ή μικρότερο βαθμό η καθεμία. Εκτός από τις δύο τελευταίες (παροχής λογισμικού και επιστημονικών εκδόσεων) οι υπόλοιπες, κατά βάση,

- 2.7 Κερδοσκοπικές εταιρίες χημικών εφαρμογών στο Διαδίκτυο
- 2.7.2 Εταιρίες παροχής λογισμικού χημικών εφαρμογών στο Διαδίκτυο

χρησιμοποιούν το WWW απλά για να διαφημίσουν τις υπηρεσίες και τα προϊόντα τους και να διευκολύνουν τους πελάτες τους. Όμως, οι εταιρίες "χημικού" λογισμικού και επιστημονικών εκδόσεων επιβάλλεται, εκτός από την προβολή των "προϊόντων" τους, να μεριμνούν και για την μεταβίβασή τους στους χρήστες μέσω του Διαδικτύου, πράγμα που δε συμβαίνει με τις άλλες κατηγορίες χημικών εταιριών. Μία επιχείρηση επιστημονικών εκδόσεων π.χ. πρέπει να είναι σε θέση να παρέχει τα άρθρα της σε ηλεκτρονική μορφή στους χρήστες - αγοραστές, όπως περιγράφηκε στο κεφάλαιο 2.5. Οι διεργασίες, που σχετίζονται με τις επιστημονικές εκδόσεις στο Internet, αναφέρθηκαν περιληπτικά στο κεφάλαιο 2.5 και δεν κρίνεται σκόπιμο να παρουσιασθούν και εδώ.

Κατάλογοι με λίστες εταιριών χημικών δραστηριοτήτων βρίσκονται στις παρακάτω διευθύνσεις του WWW.

- http://www.chemconnect.com/index.html (ChemConnect)
- http://pbl.unipv.it/beppe/suppliers.htm

(ON-LINE CHEMICAL CATALOGUES)

- http://www.chemlin.de/market/chemical_catalogues.htm (Chemical catalogues)
- http://www.chem.com/catalogs/
 (Catalogs Search)
- http://www.buyersguidechem.de/

(BuyersGuideChem - the directory of chemical suppliers)

2.7.2 Εταιρίες παροχής λογισμικού χημικών εφαρμογών στο Διαδίκτυο

Οι εταιρίες λογισμικού [61] (software) χημικών εφαρμογών κατέχουν κυρίαρχη θέση ανάμεσα στις άλλες χημικές επιχειρήσεις ως προς τη διαδικτυακή τους υπόσταση. Στην πραγματικότητα, οι περισσότερες από αυτές, δραστηριοποιούνται μόνο μέσω του Internet, παρέχουν δε τα προϊόντα τους συνήθως με χρέωση. Στην πρώιμη μορφή των εταιριών αυτών, οι χρήστες παραλάμβαναν τα προγράμματα καιτις εφαρμογές καταχωρημένα σε μαγνητικούς συμπιεσμένους δίσκους [108] (Compact Discs Read-Only-Memory ή CDs ROM) μέσω ταχυδρομείου ή αυτοπροσώπως προκειμένου να τα χρησιμοποιήσουν στον Η/Υ τους. Σήμερα, η διαδικασία αυτή έχει αλλάξει αρκετά, αφού

- 2.7 Κερδοσκοπικές εταιρίες χημικών εφαρμογών στο Διαδίκτυο
- 2.7.2 Εταιρίες παροχής λογισμικού χημικών εφαρμογών στο Διαδίκτυο

η μεταβίβαση του ηλεκτρονικού υλικού μπορεί να γίνει μέσω Internet, όπου ο χρήστης δεν έχει παρά να "κατεβάσει" [219] (download) τις εφαρμογές, που επιθυμεί, στον Η/Υ του.

Οι εφαρμογές που χρησιμοποιούν οι χημικοί στο Internet αφορούν κυρίως στην οπτικοποίηση, το γειρισμό και την επεξεργασία πολύπλοκων τρισδιάστατων γημικών δομών, την εκτέλεση μαθηματικών υπολογισμών επί των μορίων (π.χ. την εκτίμηση του ηλεκτροστατικού δυναμικού γύρω από ένα μόριο), την ανάλυση ιδιοτήτων και την αναζήτηση χημικών δεδομένων. Μεγάλη απήχηση έχουν στη χημική κοινότητα τα ειδικά προγράμματα πλοήγησης στο WWW [22] (browsers) γραμμένα σε μορφή VRML (Virtual Reality Modeling Language) [90] $(\pi.\chi)$. Cortona[®] VRML Client [92], Cosmo Player [93], OpenVRML [94], Viscape Universal [95]), Java [53] και CML (Chemical Markup Language) [70] (π.χ. JUMBO [83]), που επιτρέπουν το χειρισμό μοριακών δομών στην οθόνη του Η/Υ. Επιπλέον, η καθιέρωση του πρότυπου CMIME (Chemical Multipurpose Internet Mail Extensions) [131] για την ανταλλαγή χημικών πληροφοριών μέσω EMAIL και WWW έγινε με γρήση λογισμικού, που εμπορεύονται μεγάλες εταιρίες λογισμικού χημικών εφαρμογών, όπως η MDL [138] (Chime [137]), η CambridgeSoft [141] (ChemDraw [139], Chem3D [140]), n **Accelrys Inc**. [336] (Materials Studio [337] και DS ViewerPro (εικόνα 2.7.2-1) [338]) και η CherWell Scientific - FamilyGenetix Ltd. [142] (ChemSymphony).

Άλλες αξιόλογες εταιρίες λογισμικού για χημικούς είναι οι **ACD Labs** [339] (ChemSketch [340]), **Tripos Inc.** [341] (sibyl), **SoftShell** [342] (ChemWindow Edition [343]) και **Wavefunction Inc.** [344] (spartan [345]), των οποίων τα προϊόντα εφαρμόζονται κυρίως για την απεικόνιση και επεξεργασία μοριακών δομών και για υπολογισμούς Κβαντικής Χημείας (Wavefunction Inc). Στην ίδια κατηγορία εταιριών ανήκουν και αυτές που χειρίζονται βάσεις χημικών δεδομένων και παρέχουν χρήσιμες εφαρμογές για την πραγματοποίηση αναζητήσεων.

Αξιόλογοι κατάλογοι με λίστες εταιριών λογισμικού για χημικούς και λογισμικά Χημείας ελεύθερης χρήσης (τελευταία διεύθυνση) βρίσκονται στις παρακάτω διευθύνσεις του WWW.

• http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/softwarecomp.html

(Virtual Library: Science: Chemistry: Chemistry Software Houses)

- 2.7 Κερδοσκοπικές εταιρίες χημικών εφαρμογών στο Διαδίκτυο
- 2.7.2 Εταιρίες παροχής λογισμικού χημικών εφαρμογών στο Διαδίκτυο
 - http://dmoz.org/Science/Chemistry/Software/Companies/

(Open Directory - Science: Chemistry: Software: Companies)

http://www.sciencecentral.com/category/26725

(Science Central : Science - Chemistry - Software - Companies)

• http://bubl.ac.uk/link/c/chemistrysoftware.htm

(BUBL LINK: Chemistry software)

• http://chem.etown.edu/chemhome/Links/software.htm

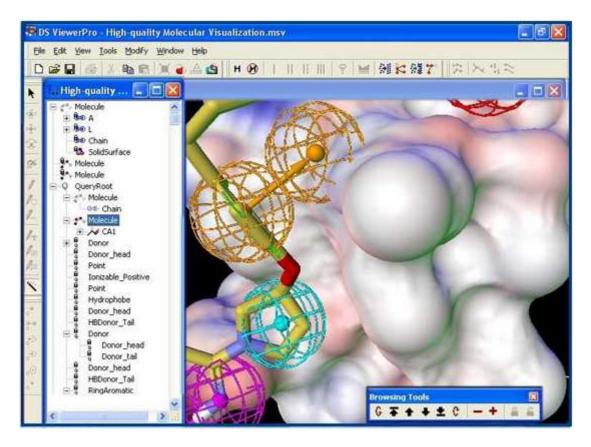
(Chemical Software Sources)

http://www.bioscreening.com/software_and_database_services.htm

(Chemical Software, Online calculations, Predictions LogP, LogD, Database Search)

• http://allserv.rug.ac.be/~tkuppens/chem.shtml

(Tom's Free Chemistry Software)



Εικόνα 2.7.2-1 Η επιφάνεια εργασίας του μοριακού οπτικοποιητή (molecular vizualizator) DS Viewer Pro της εταιρίας Accelrys [338].

- 2.8 Συγκεντρωτικοί κατάλογοι με χημικού και γενικότερου ενδιαφέροντος πληροφορίες
- 2.8.1 Συγκεντρωτικοί κατάλογοι με χημικές πληροφορίες

2.8 Συγκεντρωτικοί κατάλογοι με χημικού και γενικότερου ενδιαφέροντος πληροφορίες

2.8.1 Συγκεντρωτικοί κατάλογοι με χημικές πληροφορίες

Το Internet στις μέρες μας σφύζει από χημικές πληροφορίες, αλλά η αναζήτηση και κυρίως η ταξινόμησή τους είναι πολύ επίπονη διαδικασία. Προς αυτήν την κατεύθυνση πολύ χρήσιμες αποδείχτηκαν οι μηχανές αναζήτησης [214] (search engines) που περιγράφηκαν στο κεφάλαιο 2.4.3. Με τη βοήθεια αυτών των εργαλείων οι διάφορες ιστοσελίδες [31] (web pages) και τοποθεσίες [32] (web sites) του WWW ταξινομούνται ανάλογα με το θέμα που διαπραγματεύονται, το δημιουργό τους, την ημερομηνία δημιουργίας, τις λέζεις κλειδιά [255] (keywords) του περιεχομένου τους κτλ. Ακόμη και τότε, όμως, η διαδικασία της αναζήτησης πληροφοριών είναι ιδιαίτερα χρονοβόρα για το χρήστη, ο οποίος πρέπει να ελέγχει κάθε φορά, εάν το περιεχόμενο της εκάστοτε ιστοσελίδας ανταποκρίνεται σε αυτό που ψάχνει. Έτσι, πολλοί οργανισμοί (κυρίως ακαδημαϊκοί) αλλά και μεμονωμένοι χρήστες του WWW επιχείρησαν να κάνουν όλη αυτή την δύσκολη διεργασία (της αναζήτησης και ελέγχου του περιεχομένουτων ιστοσελίδων) και να δημιουργήσουν "συγκεντρωτικούς καταλόγους διευθύνσεων του WWW" (indexes ή collections of WWW resources) προκειμένου να εξυπηρετήσουν τους "πελαγωμένους" χρήστες του.

Στον τομέα της Χημείας και των συγγενών μοριακών επιστημών έχουν γίνει αρκετές αξιόλογες προσπάθειες για τη δημιουργία Συγκεντρωτικών Καταλόγων (ΣΚ) στο WWW και μάλιστα, από το 1990 υπάρχει και ελληνική παρουσία στο χώρο από το ΕΚΕΦΕ "Δημόκριτος" [346] με τη διεθνούς αναγνώρισης ιστοσελίδα "The Information Retrieval in Chemistry". Οι πιο διάσημοι, πάντως, ΣΚ για επιστήμονες που ασχολούνται με τη Χημεία (Χημικοί, Χημικοί Μηχανικοί, Βιολόγοι, Φυσικοί, Γιατροί κτλ) είναι ο "Links for Chemists" του Μ.Η. Barker [347] του University of Liverpool [348] (περιέχει πάνω από 8.000 χρήσιμες διευθύνσεις για περισσότερες από 75 υποκατηγορίες της Χημείας), ο "Chemdex" του Μ. Winter [212] του Department of Chemistry - University of Sheffield [213] (πάνω από 7.000 διευθύνσεις και δυνατότητα ανάγνωσης της ιστοσελίδας σε 12 διαφορετικές γλώσσες), ο "Rolf Claessen's Chemistry Index", ο "Chemie DE" κ.ά

- 2.8 Συγκεντρωτικοί κατάλογοι με χημικού και γενικότερου ενδιαφέροντος πληροφορίες
- 2.8.2 Λοιπές ενδιαφέρουσες διευθύνσεις της Χημείας

Οι δημοφιλέστερες διευθύνσεις με συγκεντρωτικούς καταλόγους "διαδικτυακών" πληροφοριών για τη Χημεία (συμπεριλαμβανομένων και των παραπάνω) παρατίθενται εδώ.

• http://macedonia.chem.demokritos.gr/

(The Information Retrieval in Chemistry)

• http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/links.html

(Links for Chemists / Virtual Library Chemistry Section)

• http://www.chemdex.org/

(Sheffield Chemdex)

• http://www.claessen.net/

(Rolf Claessen's Chemistry Index)

• http://www.chemie.de/index.php3?language=e

(Chemie.DE - The Chemistry Information Service)

• http://www.chemweb.com/

(ChemWeb.com)

• http://directory.google.com/Top/Science/Chemistry/

(Google Directory – Science > Chemistry)

http://www.morechemistry.com/

(more chemistry on the web)

• http://www.ch.cam.ac.uk/ChemSitesIndex.html

(Chemistry Sites and Journals)

• http://www.lib.duke.edu/chem/infolist.htm

(WWW Chemistry Resources)

2.8.2 Λοιπές ενδιαφέρουσες διευθύνσεις της Χημείας

Υπάρχουν πολλές χημικές οργανώσεις που ασχολούνται με γενικότερου ενδιαφέροντος χημικά θέματα. Πληροφορίες για την ιστορία της Χημείας μπορεί κανείς να αναζητήσει π.χ. στις ιστοσελίδες του "Nobel Foundation" [349] και της "Carmen Giunta" [350]. Πλούσιοι κατάλογοι με διαδικτυακές πηγές ιστορικών στοιχείων για τη Χημεία καθώς και βιογραφίες των επιστημόνων που τη υπηρέτησαν βρίσκονται,

2.8 Συγκεντρωτικοί κατάλογοι με χημικού και γενικότερου ενδιαφέροντος πληροφορίες

2.8.2 Λοιπές ενδιαφέρουσες διευθύνσεις της Χημείας

επιπρόσθετα, στις τοποθεσίες "Links for Chemists" [351], "Chemistry Biology Information Center of ETH Zórich" [352] και "Chemistry Coach" [353].

Στο WWW μπορεί κανείς να αναζητήσει, μεταξύ των άλλων πληροφορίες για μεταπτυχιακές σπουδές ή επαγγελματική απασχόληση σε τοπικό ή διεθνές επίπεδο. Υπάρχουν οργανισμοί που συλλέγουν ανακοινώσεις προσφοράς εργασίας από διάφορες εταιρίες και τις γνωστοποιούν μέσα από τις ιστοσελίδες τους, δωρεάν ή με χρέωση, σε κάθε χρήστη του WWW ή επιλεκτικά στα εγγεγραμμένα μέλη τους. Οι σημαντικότερες διευθύνσεις, όπου μπορεί κάποιος να αναζητήσει ευκαιρίες εργασίας ή μεταπτυχιακών στον τομέα της Χημείας παρατίθενται σε αυτό το σημείο.

• http://www.chemjobs.net/

(Chemjobs.net: biochemist, pharmaceutical and chemist jobs)

• http://chemistryjobs.acs.org/apply/profile.cfm

(Chemical & Engineering News-chemjobs: Quality Jobs, Quality Chemists)

• http://www.chemistry.org/portal/a/c/s/1/acsdisplay.html?DOC=chemjobs%5Ci ndex.html

(Careers and Jobs: chemistry.org - American Chemical Society)

• http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/chemcareers.html

(Virtual Library: Science: Chemistry: Careers, Jobs and Employment)

• http://www.qooljobs.com/

(Qool Jobs)

Τέλος, υπάρχουν στο WWW και αρκετές χιουμοριστικές-σατυρικές ιστοσελίδες με θέμα τη Χημεία, όπως η "ACS Joke-a-Rama Chemistry Humor Page" [354], η "MDeA's Chemistry Fun Page" [355], η "Science Jokes" [356], η "Chemistry Jokes and Humor" [357] και η "ChemHumor.Com" [358], η οποία παρέχει ορισμένες μοριακές δομές με αλληγορική σημασία.

3 Βιβλιογραφία

[1]: Κερκινές Ι.Σ., 2002, "Η ΧΗΜΕΙΑ ΣΤΟ ΔΙΑΔΙΚΤΥΟ (INTERNET)", Χημικά Χρονικά, τεύχος 3, σελ. 87-91

[2]: Heller S.R., 1995, "Chemistry on the Internet – The Road to Everywhere and Nowhere", http://www.hellers.com/steve/resume/p140.html

[3]: "What is PC - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/P/PC.html

[4]: Wiggins G., 1998, "Chemistry on the Internet: The Library on Your Computer", J. Chem. Inf. Comput. Sci., 38, pages 956-965 (http://pubs.acs.org/cgi-bin/archive.cgi/jcisd8/1998/38/i06/pdf/ci980125b.pdf)

[5]: "What is INTERNET - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webobedia.com/TERM/I/INTERNET.html

[6]: "What is computer - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary". http://www.webopedia.com/TERM/c/computer.html

[7]: "What is the Internet?", http://www.kevcom.com/words/guide/guide.03.html

[8]: "What is World Wide Web - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/W/World Wide Web.html

[9]: "What is the Internet, the WWW and Netscape",

http://www.lib.berkeley.edu/TeachingLib/Guides/Internet/WhatIs.html

[10]: "What is email - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/E/e_mail.html

[11]: "What is mailing list - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/m/mailing_list.html

[12]: "What is newsgroup - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/N/newsgroup.htm

[13]: "What is Telnet - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/T/Telnet.html

[14]: "Λεξικό Τεχνολογίας και Επιστημών, ελληνοαγγλικό – αγγλοελληνικό", Εκδόσεις Δ. Σταφυλίδη, Αθήνα

[15]: "What is FTP - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/F/FTP.html

[16]: "What is gopher - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/g/gopher.html

[17]: "What is server - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/s/server.html

[18]: "What is client - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/c/client.html

[19]: "What is ISP - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/I/ISP.html

[20]: Snell N. (απόδοση στα ελληνικά: Γκαγκάτσιος Ε.), 1999, "Μάθετε το Internet σε 24 ώρες", 3^{η} έκδοση, Εκδόσεις Γκιούρδα Μ., Αθήνα

[21]: "What is modem - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/m/modem.html

[22]: "What is browser - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/b/browser.html

[23]: http://home.netscape.com/

```
[24]: http://www.microsoft.com/
```

[25]: http://www.mozilla.org/

[26]: http://www.opera.com/

[27]: http://java.sun.com/products/archive/hotjava/index.html

[28]: http://archive.ncsa.uiuc.edu/SDG/Software/Mosaic/

[29]: http://www.lights.com/hytelnet/

[30]: http://www.maxthon.com/

[31]: "What is web page - A Word Definition From the Webopedia Computer

Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/W/web page.html

[32]: "What is web site - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/W/web_SITE.html

[33]: "What is the Internet?", http://www.eslnetworld.com/start.html

[34]: "What is hypertext - A Word Definition From the Webopedia Computer

Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/h/hypertext.html

[35]: "What is hyperlink - A Word Definition From the Webopedia Computer

Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/h/hyperlink.html

[36]: "What is HTML - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/H/HTML.html

[37]: "What is URL - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/U/URL.html

[38]: "What is programming language - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary",

http://www.webopedia.com/TERM/p/programming language.html

[39]: "What is HTTP - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/H/HTTP.html

[40]: Rzepa H. S. 1997, "The Internet as a computational chemistry tool", Journal of Molecular Structure (Theochem), pages 398-399

(http://www.ch.ic.ac.uk/rzepa/watoc96/article.html)

[41]: "What is meta - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/m/meta.html

[42]: "What is SGML - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/S/SGML.html

[43]: "What is tag - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/t/tag.html

[44]: "What is ASCII - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/A/ASCII.html

[45]: http://www.microsoft.com/windows/default.mspx

[46]: http://www.handyarchive.com/free/simple-text-editor/

[47]: "What is JPEG - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/J/JPEG.html

[48]: "What is GIF - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/G/GIF.html

[49]: "What is HTML?", http://www.hypergurl.com/whatishtml.html

[50]: Murray-Rust P., Rzepa H. S., Whitaker B. J., 1996, "The World-Wide-Web as a Chemical Information Tool", Chemical Society Reviews

(http://www.ch.ic.uk./rzepa/RSC/chemsocrer)

[51]: http://www.sun.com/

```
[52]: "What is Object Oriented Language - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary",
```

http://www.webopedia.com/TERM/O/ObjectOrientedLanguage.html

- [53]: http://java.com/en/
- [54]: "What is Java?", http://kb.indiana.edu/data/acwo.html?cust=635619.79198.30
- [55]: "What is run A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/R/run.html
- [56]: "What is operating system A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/o/operating_system.html
- [57]: http://www.unix.org/
- [58]: http://www.apple.com/macosx/
- [59]: "What is compile A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/c/compile.html
- [60]: "What is JVM A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/J/JVM.html
- [61]: "What is software A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/s/software.html
- [62]: "What is application A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/a/application.html
- [63]: "What is applet A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/a/applet.html
- [64]: "What is C++ A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/C/C_plus_plus.html
- [65]: "What is class A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/c/class.html
- [66]: "What is object A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/o/object.html
- [67]: http://www.ch.ic.ac.uk/omf/
- [68]: W3C, Extensible Markup Language (XML), http://www.w3.org/XML/
- [69]: http://www.w3.org/
- [70]: http://www.xml-cml.org/
- [71]: Dr Peter Murray-Rust, Cambridge University, Chemistry Laboratory,
- http://www.ch.cam.ac.uk/CUCL/staff/pm.html
- [72]: Murray-Rust P., "Chemical Markup Language, A Simple introduction to Structured Documents", http://www.xml.com/pub/a/w3j/s3.rustintro.html
- [73]: Murray-Rust P., Rzepa H. S., 2001, "Chemical Markup Language. A Position Paper",

http://www.xml-cml.org/information/position.html

- [74]: http://www.xml-cml.org/downloads/jme/
- [75]: http://jchempaint.sourceforge.net/
- [76]: http://www.gnu.org/software/emacs/windows/ntemacs.html
- [77]: http://www.xml.com/pub/p/99
- [78]: http://www.apple.com/downloads/macosx/productivity_tools/bbedit.html
- [79]: "What is output A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/o/output.html
- [80]: "CML Frequently Asked Questions", http://www.xml-cml.org/faq/
- [81]: "What is hardware A Word Definition From the Webopedia Computer

Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/h/hardware.html

```
[82]: "What is parser - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary",
http://www.webopedia.com/TERM/P/parser.html
[83]: http://www.xml-cml.org/jumbo3/
[84]: A CML Glossary entry, http://www.ch.ic.ac.uk/omf/cml/demos/termentry.html
[85]: Rust P.M., Rzepa H. S., Wright M., 2000, "Development of Chemical Markup
Language (CML) as a System for Handling Complex Chemical Content",
http://www.chemsoc.org/exemplarchem/entries/wright/writeup.html#ref JME
[86]: "What is database - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary".
http://www.webopedia.com/TERM/d/database.html
[87]: "What is input - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary",
http://www.webopedia.com/TERM/i/input.html
[88]: "What is open source - A Word Definition From the Webopedia Computer
Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/o/open source.html
[89]: http://www.opensource.org/
[90]: "What is VRML - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary",
http://www.webopedia.com/TERM/V/VRML.html
[91]: Rzepa H. S., 1998, "A History of Hyperactive Chemistry on the Web: From Text
and Images to Objects, Models and Molecular Components", Chimia, 52
( http://www.ch.ic.ac.uk/rzepa/chimia/)
[92]: http://www.parallelgraphics.com/products/cortona/
[93]: http://www.karmanaut.com/cosmo/player/
[94]: http://sourceforge.net/projects/openvrml/
[95]: http://www.superscape.com/
[96]: "What is plug-in - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary",
http://www.webopedia.com/TERM/p/plug_in.html
[97]: http://www.blaxxun.com/en/products/contact/
[98]: http://www.intel.com/cpc/webapplets/vrml/vrml.htm
[99]: http://www.fbbt.co.uk/index.html
[100]: http://www.snafu.de/~hg/
[101]: Ihlenfeldt W., 1998, "Pushing the State of the Art in Internet Chemistry Databases:
The Enhanced NCI Database Browser", Proc. 13th CIC Workshop New Methods in
Computer Chemistry: From Combinatorial Chemistry to the Internet, Bad Dürkheim,
Germany (http://www2.chemie.uni-erlangen.de/people/Wolf Ihlenfeldt/papers/cic98/)
[102]: "Courses for the Koori Community, Introduction to Electronic Mail",
http://online.nmit.vic.edu.au/Koori/emailintro.htm
[103]: http://www.ibm.com/us/
[104]: http://www.uic.edu/depts/accc/software/eudora/eudora.win.html
[105]: http://www.uic.edu/depts/accc/software/pine/
[106]: http://www.uic.edu/depts/accc/software/eudora/eudora.mac.html
[107]: http://www.uic.edu/depts/accc/software/webmail/
[108]: "What is CD ROM - A Word Definition From the Webopedia Computer
Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/C/CD ROM.html
[109]: "What is floppy disk - A Word Definition From the Webopedia Computer
Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/F/floppy_disk.html
[110]: "What is local-area network - A Word Definition From the Webopedia Computer
Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/l/local area network LAN.html
```

[111]: "What is wide-area network - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/w/wide area network WAN.html

```
[112]: "What is gateway - A Word Definition From the Webopedia Computer
```

Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/g/gateway.html

[113]: "What is password - A Word Definition From the Webopedia Computer

Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/p/password.html

[114]: "What is username - A Word Definition From the Webopedia Computer

Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/u/username.html

[115]: "What is domain - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/d/domain.html

[116]: "What is MAPI - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/M/MAPI.html

[117]: "What is X-400- A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/X/X 400.html

[118]: International Telecommunication Union - Data networks and open system communication, http://www.itu.int/rec/recommendation.asp?type=products&parent=T-REC-X

[119]: http://www.ietf.org/

[120]: "What is MIME - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/M/MIME.html

[121]: "What is BMB - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/B/BMP.html

[122]: "What is TIFF - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/T/TIFF.html

[123]: "What is PNG - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/P/PNG.html

[124]: "What is window - A Word Definition From the Webopedia Computer

Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/w/window.html

[125]: http://www.ietf.org/ids.by.wg/mhtml.html

[126]: "What is MHTML - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/M/MHTML.html

[127]: "What is S/MIME - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/S/S_MIME.html

[128]: http://www.rsasecurity.com/

[129]: Henry S. Rzepa, London's Imperial College of Science, Chemistry Department, http://www.ch.ic.ac.uk/rzepa/

[130]: Ben Whitaker, Chemistry University of Leeds,

http://www.chem.leeds.ac.uk/People/Whitaker.html

[131]: "MIME types for Chemistry", http://www.chem.leeds.ac.uk/Project/MIME.html

[132]: http://www.adobe.com/products/acrobat/

[133]: http://www.adobe.com/

[134]: Casher O., Chandramohan G.K., Hargreaves M.J., Leach C., Murray-Rust P.,

Rzepa H.S., Sayle R., Whitaker B.J., 1995, "Hyperactive Molecules and the World-Wide-Web Information System", J. Chem. Soc., Perkin Transactions 2, 7

(http://www.ch.ic.ac.uk/rzepa/RSC/P2/4 05970K.html)

[135]: Bachrach S.M., Murray-Rust P., Rzepa H.S., Whitaker B.J., "Publishing Chemistry on the Internet", http://www.netsci.org/Science/Special/feature07.html

[136]: http://www.umass.edu/microbio/rasmol/

[137]: http://www.mdli.com/products/framework/chemscape/

[138]: http://www.mdli.com/

```
[141]: http://www.camsoft.com, http://www.cambridgesoft.com/
[142]: http://www.cherwell.com/
[143]: "Chemical MIME types",
http://dtpsearch.ncifcrf.gov/docs/misc/common files/tech server.html
[144]: "MIME types for Chemistry", http://www.chem.leeds.ac.uk/Project/MIME.html
[145]: http://www.oberschulamt-stuttgart.de/gym/chemie/einfuehr/rasmol.gif
[146]: http://www.lsoft.com/
[147]: http://www.listproc.net/
[148]: http://www.greatcircle.com/majordomo/
[149]: http://mailbase.ac.uk/
[150]: http://listserv.indiana.edu/archives/chminf-1.html
[151]: http://www.ccl.net/
[152]: http://mailer.uwf.edu/archives/chemed-l.html
[153]: http://www.lists.ic.ac.uk/hypermail/chemweb
[154]: http://www.uni-
resensburg.de/Fakultaeten/phil Fak I/Philosophie/Wissenschaftsgeschichte/philch.htm
[155]: http://www.tile.net/lists/showlists.php?list_id=5825
[156]: "What is bulletin board system - A Word Definition From the Webopedia
Computer Dictionary".
http://www.webopedia.com/TERM/b/bulletin board system BBS.html
[157]: "What is USENET - A Word Definition From the Webopedia Computer
Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/U/USENET.html
[158]: Chemistry Newsgroups and Discussion Lists, Indiana University, Wiggins G.,
http://www.indiana.edu/~cheminfo/C471/471cndl.html#4
[159]: Chemistry Daily – The Chemistry encyclopedia, Newsgroups
( http://www.chemistrydaily.com/chemistry/Newsgroup)
[160]: Διεύθυνση URL news:sci.chem.analytical
[161]: Διεύθυνση URL news:sci.chem.electrochem
[162]: Διεύθυνση URL news:sci.chem.organic.synthesis
[163]: Διεύθυνση URL news:sci.chem.organomet
[164]: "What is news reader - A Word Definition From the Webopedia Computer
Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/n/news_reader.html
[165]: "What is netiquette - A Word Definition From the Webopedia Computer
Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/n/netiquette.html
[166]: Bachrach S.M., Electronic Conferences,
http://www.amacad.org/publications/trans9.aspx
[167]: "Electronic Conferences hosted by the Trinity University Cheminformatics Site",
http://hackberry.chem.trinity.edu/econf.html
[168]: http://www.emsl.pnl.gov:2080/docs/incinc/homepage.html
[169]: Bachrach S.M., 1995, "Chemistry on the Internet: The Northern Illinois University
Chemistry WWW/Gopher Site", trends in analytical chemistry, vol. 14, no 5, pages 182-
185 (http://www.sciencedirect.com/science? ob=MImg& imagekey=B6V5H-3Y5FF1F-
1D-
1& cdi=5787& user=604493& orig=browse& coverDate=05%2F31%2F1995& sk=99
9859994&view=c& wchp=dGLbVlz-
zSkWW&md5=142cc31319b3d979a89a2ffe91087375&ie=/sdarticle.pdf)
```

[139]: http://products.cambridgesoft.com/family.cfm?FID=2 [140]: http://products.cambridgesoft.com/family.cfm?FID=3

```
[170]: Bachrach S.M., 1995, "Electronic Conferencing on the Internet: The First
Electronic Computational Chemistry Conference", J. Chem. Inf. Comput. Sci., 35, pages
431-441 (http://pubs.acs.org/cgi-bin/archive.cgi/jcisd8/1995/35/i03/pdf/ci00025a011.pdf)
[171]: "What is MOO - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary",
http://www.webopedia.com/TERM/M/MOO.html
[172]: Hardy B.J., Doughty S.W., Parretti M.F., Richards W.G., Tennison J., 1997, "First
Molecular Graphics and Modelling Society Electronic Conference", J. Mol. Graph.
Modeling, Vol. 15, Issue 2, pages 141-144
( http://www.sciencedirect.com/science? ob=MImg& imagekey=B6TGP-3ST28WD-8-
1& cdi=5260& user=604493& orig=browse& coverDate=04%2F30%2F1997& sk=99
9849997&view=c&wchp=dGLbVlz-
zSkWW&md5=546e154b66c822672cd3a87893fd6212&ie=/sdarticle.pdf)
[173]: "Internet Journal of Chemistry", http://www.ijc.com/
[174]: "Electronic Conference on Trends in Organic Chemistry",
http://www.ch.ic.ac.uk/ectoc/ectoc-1.html
[175]: "ECTOC Hyperglossary", http://www.ch.ic.ac.uk/ectoc/glossary/
[176]: "Electronic Conference on Trends in Heterocyclic Chemistry",
http://www.ch.ic.ac.uk/ectoc/echet96/
[177]: "What is interface - A Word Definition From the Webopedia Computer
Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/i/interface.html
[178]: Leach Cr., Rzepa H.S., "Similarity analysis of chemical content within ECHET96
contributions", http://www.ch.ic.ac.uk/ectoc/echet96/papers/121/
[179]: Wilson, I.B., Hardy B.J., 1996, "Glycoscience and the Internet", Vol. 8, No 42,
Trends In Glycoscience and Glycotechnology (TIGG)
( http://www.gak.co.jp/TIGG/TIGG42/42GOe.html)
[180]: Rzepa H.S., 1995, "Electronic chemistry conferences", trends in analytical
chemistry, vol. 14, no 6, pages 240-242
(http://www.sciencedirect.com/science? ob=MImg& imagekey=B6V5H-3Y5FF13-15-
1& cdi=5787& user=604493& orig=browse& coverDate=07%2F31%2F1995& sk=99
9859993&view=c&wchp=dGLbVlz-
zSkWW&md5=39b106411aa57c7a559b893fb903594f&ie=/sdarticle.pdf)
[181]: Schranz H.W., December 1998, "Chemistry and the World Wide Web", Chemistry
in Australia (http://rsc.anu.edu.au/~harry/POST/cia www 9811.pdf)
[182]: http://dft2005.unige.ch/
[183]: "Chemistry and the Internet Conferences", http://www.chemint.com/
[184]: "What is database - A Word Definition From the Webopedia Computer
Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/d/database.html
[185]: Πάγκαλος Γ., 1999, "ΒΑΣΕΙΣ ΔΕΔΟΜΕΝΩΝ (ΤΡΑΠΕΖΕΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΩΝ)",
Εκδόσεις Αφοί Κυριακίδη Α.Ε., Έκδοση 7<sup>η</sup>, Θεσσαλονίκη
[186]: "Database, From Wikipedia, the free encyclopedia",
http://en.wikipedia.org/wiki/Database
[187]: "CERN DB Group, What is a Database?",
http://wwwdb.web.cern.ch/wwwdb/aboutdbs/faqs/what is a database.html
[188]: "What is DBMS - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary",
http://www.webopedia.com/TERM/d/database management system DBMS.html
[189]: "THE UK WEB DESIGN COMPANY, What is a Database?",
http://www.theukwebdesigncompany.com/articles/database.php
[190]: "Chemical Abstracts", http://www.cas.org/
```

```
[194]: "National Institute of Standards and Technology", http://www.nist.gov/
[195]: "IUPAC-Committee on Printed and Electronic Publications-Subcommittee on
Electronic Data Standards" (Joint Committee on Atomic and Molecular Physical Data-
JCAMP-DX), http://www.jcamp.org/
[196]: "W3C, Scalable Vector Graphics (SVG)", http://www.w3.org/Graphics/SVG/
[197]: "Journal of Physical and Chemical Reference Data", http://jpcrd.aip.org/
[198]: Herzberg G., 1979, "Molecular Spectra and Molecular Structure. IV. Constants of
Diatomic Molecules", Van Nostrand Reinhold Company Editions, New York, 716
[199]: "Fundamental Physical Constants from NIST",
http://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html
[200]: "NIST Atomic Spectra Database", http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main asd
[201]: "NIST Chemical Kinetics Database on the Web", http://kinetics.nist.gov/index.php
[202]: "IUPAC – NIST Solubility Database", http://srdata.nist.gov/solubility/
[203]: "National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)",
http://www.aist.go.jp/index en.html
[204]: "National Metrology Institute of Japan", http://www.nmij.jp/newenglish/
[205]: "Tsukuba Advanced Computing Center", http://unit.aist.go.jp/tacc/en/
[206]: "Research Collaboratory for Structural Bioinformatics, RCSB",
http://www.rcsb.org/index.html
[207]: "Rutgers – The State University of New Jersey". http://www.rutgers.edu/index-
flash.html
[208]: "SDSC-San Diego Supercomputer Center at USCD", http://www.sdsc.edu/
[209]: "EMBL-EBI, European Bioinformatics Institute-Macromolecular Structure
Database", http://www.ebi.ac.uk/msd/
[210]: "Institute for Protein Research at Osaka University", http://www.protein.osaka-
u.ac.jp/home e/index e.html
[211]: "Cambridge Crystallographic Data Centre", http://www.ccdc.cam.ac.uk/
[212]: "Dr Mark J Winter-Department of Chemistry-The University of Sheffield",
http://www.shef.ac.uk/chemistry/staff/mjw/mark-winter.html
[213]: Department of Chemistry-The University of Sheffield",
http://www.shef.ac.uk/chemistry/
[214]: "What is search engine - A Word Definition From the Webopedia Computer
Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/s/search_engine.html
[215]: "Okiesurf.com – Search Engine Review",
http://www.okiesurf.com/directory/search enginees.htm
[216]: "BOUTELL.COM, WWW FAQs: What is a search engine?",
http://www.boutell.com/newfaq/definitions/search.html
[217]: Rzepa H.S., 1995, "The Future of Electronic Journals in Chemistry", Trends in
Analytical Chemistry, 14, 464 (http://www.ch.ic.ac.uk/rzepa/TrAC/e-journal.html)
[218]: Heller S.R., 1998, "Databases? The Journals of the 21st Century", Internet Journal
of Chemistry, Vol. 1, 32 (http://www.ijc.com/articles/1998v1/32/)
[219]: "What is download - A Word Definition From the Webopedia Computer
Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/d/download.html
[220]: "THOMSON - Products-Science Citation Index®",
http://www.isinet.com/products/citation/sci/
```

[191]: http://chemfinder.cambridgesoft.com/about/chemfinder/glossary.asp

[193]: "chemexper.com - expereactInfo", http://www.chemexper.com/xt/index.html

[192]: http://www.dot.gov/

```
http://www.isinet.com/products/evaltools/jcr/
[222]: "chemistry.org - THE WEB SITE OF THE AMERICAN CHEMICAL
SOCIETY", http://www.chemistry.org/portal/a/c/s/1/home.html
[223]: http://pubs.acs.org/journals/asap/form.html
[224]: "Elsevier", http://www.elsevier.com/wps/find/homepage.cws home
[225]: "Royal Society of Chemistry (RSC) - Advancing the Chemical Sciences",
http://www.rsc.org/
[226]: "springeronline.com - International",
http://www.springeronline.com/sgw/cda/frontpage/0,0,0-0-0-0-EAST,0.html
[227]: "springer - Online First",
http://www.springeronline.com/sgw/cda/frontpage/0,11855,4-113-2-99044-0,00.html
[228]: "Chemistry Preprint Server", http://www.sciencedirect.com/preprintarchive
[229]: http://www.sciencedirect.com/
[230]: "Journal of Chemical Education -Online", http://jchemed.chem.wisc.edu/
[231]: "Adobe PostScript3<sup>TM</sup>", http://www.adobe.com/products/postscript/main.html
[232]: "The Digital Object Identifier (DOI) System", http://www.doi.org/
[233]: "National Information Standards Organization", http://www.niso.org/
[234]: Bachrach S.M., Heller S.R., 2000, "The Internet Journal of Chemistry: A Case
Study of an Electronic Chemistry Journal", Serials Review, Vol. 26, No 2, 3-14
( http://www.hellers.com/steve/resume/p156.html)
[235]: Whitaker B.J., Rzepa H.S., "Chemical Publishing via the Internet"
( http://www.chem.leeds.ac.uk/papers/html/Nimes/nimes.html)
[236]: "RCS Publishing - Chemical Communications (ChemComm)",
http://www.rsc.org/Publishing/Journals/cc/index.asp
[237]: "Journal of Molecular Modeling", http://www.ccc.uni-erlangen.de/jmolmod/
[238]: "The Chemical Educator", http://chemeducator.org/
[239]: "Molecules Online", http://link.springer.de/link/service/journals/00783/index.htm
[240]: "RCS Publishing - PhysChemComm",
http://www.rsc.org/publishing/journals/qu/index.asp
[241]: "What is multimedia - A Word Definition From the Webopedia Computer
Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/m/multimedia.html
[242]: "What is spreadsheet - A Word Definition From the Webopedia Computer
Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/s/spreadsheet.html
[243]: Chamberlain C. K., 2003, "An interview with Steven Bachrach, Editor-in-Chief
and Co-Founder of the Internet Journal of Chemistry", Library Collections,
Acquisitions, & Technical Services, Vol. 27, pages 449-458
( http://www.sciencedirect.com/science? ob=MImg& imagekey=B6VSH-49SFFM4-2-
1& cdi=6263& user=604493& orig=browse& coverDate=02%2F29%2F2004& sk=99
9729995&view=c&wchp=dGLbVzb-
zSkzV&md5=7da3b3f3cd439e122e19418df1dde29e&ie=/sdarticle.pdf)
[244]: Bachrach S.M., Burleigh D.C., Krassivine A., 1998, "Designing the Next-
Generation Chemistry Journal: The Internet Journal of Chemistry, Issues in Science and
Technology Librarianship, No 17, (http://www.library.ucsb.edu/istl/98-
winter/article1.html)
[245]: Casher O., Rzepa H.S., 1996, "The Molecular Object Toolkit: A New Generation
of VRML Visualization tools for use in Electronic Journals", Proceedings of the 14<sup>th</sup>
Eurographics UK Conference 1996, (http://www.ch.ic.ac.uk/rzepa/eg/)
```

[221]: "THOMSON - Products- Journal Citation Reports®".

```
[246]: http://www.hellers.com/steve/
[247]: Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Τμήμα Χημείας, Εργαστήριο Φυσικογημείας, ΕΜΑΙL: kerkines@chem.uoa.gr
```

[248]: "Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης", http://www.auth.gr

[249]: "American Institute of Physics (AIP)", http://www.aip.org/

[250]: http://research.bmn.com/medline/

[251]: "United States, National Library of Medicine - National Institutes of Health", http://www.nlm.nih.gov/

[252]: "Engineering Information, Compendex", http://www.ei.org/compendex.html

[253]: "Engineering Information", http://www.ei.org/

[254]: "What is save - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/S/save.html

[255]: "What is keyword - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/K/keyword.html

[256]: "International Standard Serials Number", http://www.issn.org:8080/English/pub

[257]: "Scirus", http://www.scirus.com/

[258]: "PubMed Central Homepage", http://www.pubmedcentral.nih.gov/

[259]: "Entrez cross – database search", www.ncbi.nlm.nih.gov/Entrez/

[260]: "NCBI - National Centre for Biotechnology Information",

http://www.ncbi.nlm.nih.gov/

[261]: "ingenta", http://www.ingenta.com/

[262]: "The Colorado Alliance of Research Libraries", http://www.coalliance.org/

[263]: "What is fax machine - A Word Definition From the Webopedia Computer

Dictionary", http://www.webopedia.com/TERM/f/fax machine.html

[264]: "DiscoveryGate", http://www.discoverygate.com/

[265]: "MDL CrossFire Commander",

http://www.mdl.com/products/knowledge/crossfire commander/

[266]: "STN International", http://www.stn-international.de/

[267]: "Dialog", http://www.dialog.com/

[268]: "ChemVillage", http://www.chemvillage.org/

[269]: "RCS Publishing, ChemSocRev",

http://www.rsc.org/Publishing/Journals/cs/index.asp

[270]: "ACS Journal Archives", http://pubs.acs.org/archives/index.html

[271]: "SciFinder', http://www.cas.org/SCIFINDER/

[272]: "FIZ Karlsruhe", http://www.fiz-karlsruhe.de/

[273]: "The Japan Science and Technology (JST) Agency, Information Center for Science and Technology", http://www.jst.go.jp/EN/

[274]: "Europe's Network of Patent Databases", http://ep.espacenet.com/

[275]: "Delphion Intellectual Property Network", http://www.delphion.com/

[276]: http://www.academyofathens.gr/

[277]: http://www.nlg.gr/

[278]: "OCLC FirstSearch", http://www.oclc.org/

[279]: "Wilson's OMNI Megafile", http://www.hwwilson.com/

[280]: http://www.wkap.nl/

[281]: "Academic Press", http://www.academicpress.com/

[282]: "Emerald", http://www.emerald-library.com/

[283]: http://www.eie.gr/

```
[285]: "Thomson, Dialog OnDisc Content", http://www.dialog.com/sources/ondisc/
[286]: Τμήμα Χημείας, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών,
http://www.chem.uoa.gr/
[287]: Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης,
http://www.chem.auth.gr/
[288]: Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Πατρών, http://www.chemistry.upatras.gr/
[289]: Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης, http://www.chemistry.uoc.gr/
[290]: Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων,
http://www.uoi.gr/schools/scmath/chemistry/chemistry.html
[291]: Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Τμήμα Χημικών Μηχανικών,
http://www.chemeng.ntua.gr/
[292]: http://www.cheng.auth.gr/
[293]: http://www.upatras.gr/education/departments/chemeng.php?lang=el
[294]: http://www.iso.ch/welcome.html
[295]: http://www.iupac.org/
[296]: http://www.european-patent-office.org/
[297]: http://www.eex.gr/
[298]: http://www.psxm.gr/
[299]: http://www.microsoft.com/downloads/details.aspx?FamilyID=7C404E8E-5513-
46C4-AA4F-058A84A37DF1&displaylang=EN
[300]: Lancashire R.J., 2000, "The use of the Internet for teaching Chemistry", Analytica
Chemica Acta, Vol. 420, pages 239-244
(http://www.sciencedirect.com/science? ob=MImg& imagekey=B6TF4-4136CC1-C-
7& cdi=5216& user=604493& orig=browse& coverDate=09%2F14%2F2000& sk=99
5799997&view=c&wchp=dGLbVtb-
zSkWA&md5=a40d5fa0af94ba02b0324e5d83b08254&ie=/sdarticle.pdf)
[301]: Γκότσης Κ., 2005, "Νέες Μαθησιακές Τεχνολογίες - Εισαγωγή στην
Τηλεκπαίδευση", Εισαγωγή στις Νέες Τεχνολογίες Πληροφορικής & Επικοινωνιών για
Τηλεκπαίδευση" στο πλαίσιο του προγράμματος "Προηγμένες τηλεματικές υπηρεσίες και
δράσεις τηλεκπαίδευσης στο δίκτυο AUTHNET του ΑΠΘ" Θεσσαλονίκη,
http://www.tcom.auth.gr/isdn/services/Distance%20Learning%20-%201st%20day.pdf
[302]: Sherry L., 1996, "Issues in Distance Learning. International Journal of Educational
Telecommunications", Vol. 1 (4), pages 337-365
( http://carbon.cudenver.edu/~lsherry/pubs/issues.html)
[303]: Γούδος Σ., 2005, "Σύγχρονη Τηλεκπαίδευση - Τεχνολογίες", Εισαγωγή στις Νέες
Τεχνολογίες Πληροφορικής & Επικοινωνιών για Τηλεκπαίδευση" στο πλαίσιο του
προγράμματος "Προηγμένες τηλεματικές υπηρεσίες και δράσεις τηλεκπαίδευσης στο
δίκτυο ΑUTHNΕΤ του ΑΠΘ" Θεσσαλονίκη,
http://www.tcom.auth.gr/isdn/services/Distance%20Learning%20-%203nd%20day.pdf
[304]: "Models of Distance Education", http://www.umuc.edu/ide/modlmenu.html
[305]: "What is POTS - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary",
http://www.webopedia.com/TERM/P/POTS.html
[306]: "What is ISDN - A Word Definition From the Webopedia Computer Dictionary",
http://www.pcwebopedia.com/TERM/I/ISDN.html
[307]: Αγορογιάννη Α., 2005, "Η Ασύγχρονη Τηλεκπαίδευση στην υπηρεσία της
Σύγγρονης Εκπαίδευσης", Εισαγωγή στις Νέες Τεχνολογίες Πληροφορικής &
```

[284]: "Dissertation Abstracts Online",

http://library.dialog.com/bluesheets/html/bl0035.html

```
Επικοινωνιών για Τηλεκπαίδευση" στο πλαίσιο του προγράμματος "Προηγμένες
τηλεματικές υπηρεσίες και δράσεις τηλεκπαίδευσης στο δίκτυο AUTHNET του ΑΠΘ"
Θεσσαλονίκη, http://www.tcom.auth.gr/isdn/services/Distance%20Learning%20-
%202nd%20day.pdf
[308]: "Τηλεπικοινωνιακό Κέντρο ΑΠΘ", http://www.tcom.auth.gr/
[309]: "UNE, The University of New England", http://www.une.edu.au/
[310]: http://modelscience.com/products.html?ref=home&link=chemlab
[311]: http://www.modelscience.com/
[312]: Ward M., Newlands D., 1998, "Use of the Web in undergraduate teaching",
Computers & Education, Vol. 31, pages 171-184
(http://www.sciencedirect.com/science? ob=MImg& imagekey=B6VCJ-3V2FG1B-3-
1& cdi=5956& user=604493& orig=browse& coverDate=09%2F30%2F1998& sk=99
9689997&view=c&wchp=dGLbVzz-
zSkzS&md5=7ee9a903716c625c63378af78e725f36&ie=/sdarticle.pdf)
[313]: Stone B., 2000, "Using the WWW in Teaching. Is it worth or effort?", CDTL Brief
(Centre of Development of Teaching and Learning), Vol. 3, pages 1-2
( http://www.cdtl.nus.edu.sg/brief/Pdf/v3n6.pdf)
[314]: Daonian L., Brooks D. W., Walter J. L., 1995, "Teaching Chemistry on the
Internet", http://horizon.unc.edu/projects/monograph/CD/Science Mathematics/Liu.asp
[315]: Komaran R., 2000, "Use of the World Wide Web in Teaching: A Personal
Experience", CDTL Brief (Centre of Development of Teaching and Learning), Vol. 3,
pages 7-8 (http://www.cdtl.nus.edu.sg/brief/Pdf/v3n6.pdf)
[316]: "Web Teaching, Copyright and Web teaching",
http://www.dartmouth.edu/~webteach/articles/copyright.html
[317]: "Web Teaching, How to stay legal",
http://www.dartmouth.edu/~webteach/articles/legal.html
[318]: http://ltsc.ieee.org/
[319]: http://www.cenorm.be/isss/Workshop/lt/
[320]: http://www.adlnet.org/
[321]: http://www.imsproject.org/
[322]: http://dublincore.org/
[323]: "Τηλεκπαίδευση στο ΑΠΘ",
http://www.tcom.auth.gr/isdn/services/InformationLeaftletGr.pdf
[324]: http://www.tcom.auth.gr/isdn/services/DistanceLearningMapOfGreece.html
[325]: http://www.lib.auth.gr/
[326]: http://www.itc.auth.gr/
[327]: http://www.kype.auth.gr/
[328]: http://www.teledu.auth.gr/
[329]: http://www.centra.com/
[330]: http://www.itc.auth.gr/services/centra.htm
[331]: http://www.mastereye.com/
[332]: https://blackboard.lib.auth.gr/bin/index.pl
[333]: http://www.auth.gr/eclass
[334]: http://www.tcom.auth.gr/isdn/comments.html
[335]: Βαρβέρη Φ., 2000, "ΔΙΚΤΥΩΜΕΝΗ ΠΛΗΡΟΦΟΡΗΣΗ ΣΤΗ ΧΗΜΕΙΑ", Χημικά
Χρονικά, τεύχος 12, σελ. 338-340
[336]: http://www.accelrys.com/
```

[337]: http://www.accelrys.com/products/mstudio/

```
[338]: http://www.accelrys.com/products/dstudio/viewerpro/index.html
```

- [339]: http://www.acdlabs.com/
- [340]: http://www.acdlabs.com/products/chemsketch/cs10.htm
- [341]: http://www.tripos.com/
- [342]: http://www.softshell.com/
- [343]: http://www.softshell.com/SSO_HTML/Commercial/Catalog/cw.html
- [344]: http://www.wavefun.com/
- [345]: http://www.wavefun.com/products/spartan.html
- [346]: Εθνικό Κέντρο Έρευνας Φυσικών Επιστημών (ΕΚΕΦΕ) "Δημόκριτος", Ινστιτούτο Φυσικογημείας, http://macedonia.chem.demokritos.gr/institute
- [347]: Michael H. Barker, University of Liverpool,
- http://www.liv.ac.uk/~mhbarker/mhb.html
- [348]: http://www.liv.ac.uk/
- [349]: http://nobelprize.org/
- [350]: "Classic Chemistry", http://web.lemoyne.edu/~giunta/
- [351]: "Virtual Library: Science: Chemistry: History of Chemistry",
- http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/refhistory.html
- [352]: "History of Chemistry",
- http://www.infochembio.ethz.ch/links/en/history_chem.html
- [353]: http://www.chemistrycoach.com/history_of_chemistry.htm
- [354]:
- http://www.chemistry.org/portal/Chemistry?PID=acsdisplay.html&DOC=jokes1.html
- [355]: http://www.angelfire.com/md2/chmfunpage/index.html
- [356]: http://members.aol.com/WES425/index.html
- [357]: http://www.geocities.com/SunsetStrip/Alley/9966/jokes.htm
- [358]: http://chemclub.cambridgesoft.com/chemhumor/