

Breu introducció a la digitalització de la informació química

Brief introduction to the digitalization of chemical information

Roger Estrada-Tejedor i Jordi Cuadros / IQS Universitat Ramon Llull



resum

La informació química, que tradicionalment s'havia gestionat a través de llibres, paradigmàticament, a través del Chemical Abstracts Service i dels diversos *handbooks*, ha migrat progressivament a la xarxa. Actualment, a la xarxa hi ha grans bases de dades, tant comercials com d'accés gratuït, que contenen molta més informació de la que mai hem tingut a l'abast. Però accedir-hi requereix assolir algunes destreses que fins ara no han trobat un lloc en els estudis oficials de l'àmbit de la química. Aquest article presenta una breu introducció a les notacions i codis que s'usen per identificar les espècies químiques en entorns informàtics, al mateix temps que s'hi mostren algunes de les bases de dades d'informació química que són accessibles de forma gratuïta.

paraules clau

Informació química, bases de dades químiques, notació lineal, SMILES, InChI.

abstract

Chemical information, once managed in books, paradigmatically in Chemical Abstracts Service and several handbooks, has now migrated to the Internet. Nowadays, many large databases, both commercial and freely available, have much more information than we have ever had. But accessing them requires some skills that are not yet taught in the official chemistry degrees. This paper presents a brief introduction to the notations and codes that are currently used to identify the chemical species in computer environments. At the same time, some freely available chemistry databases are presented.

keywords

Chemical information, chemistry databases, line notation, SMILES, InChI.

Introducció

Si heu buscat mai una substància química a la *Viquipèdia*, haureu observat que en el ChemBox («Wikipedia:Chemical infobox», 2016) apareix tot un reguitzell d'identificadors que s'usen per identificar la substància en el món digital (fig. 1). Perquè, com ha anat passant amb altres tipus de dades (llibres, imatges, vídeos, mapes, etc.), la informació química s'emmagatzema i es processa cada vegada més en entorns i formats digitals.

Explicar què signifiquen aquests identificadors i, de forma més general, com es pot treballar

digitalment amb la informació química disponible a la xarxa, una habilitat que de ben segur serà fonamental per als qui es dediquin a la química en els propers anys, ha estat l'objectiu del darrer OLCC (OnLine Chemistry Course) (Belford, 2016) i també és el de la breu introducció que presentem en aquest article.

En aquest article, es discutiran, d'una banda, les notacions lineals més usades per a la descripció d'estructures químiques i, de l'altra, els identificadors de registre més usats i les bases de dades químiques que en són l'origen.

Notació lineal de les estructures químiques

La necessitat d'expressar i emmagatzemar la informació estructural d'una substància química de forma que aquesta es pugui processar informàticament apareix a mitjan segle xx, quan els primers ordinadors comencen a trobar el seu lloc en empreses i centres de recerca. Des de llavors, s'han generat diferents alternatives per representar aquesta informació de forma compacta (Heller *et al.*, 2013), entre les quals hi ha les notacions lineals, que destaquen per la facilitat de processament i d'interpretació

Identifiers	
CAS Number	67-64-1 ✓
3D model (Jmol)	Interactive image
3DMet	B00058
Abbreviations	DMK
Beilstein Reference	635680
ChEBI	CHEBI:15347 ✓
ChEMBL	ChEMBL14253 ✓
ChemSpider	175 ✓
ECHA InfoCard	100.000.602
EC Number	200-662-2
Gmelin Reference	1466
KEGG	D02311 ✓
MeSH	Acetone
PubChem	180
RTECS number	AL3150000
UNII	1364PS73AF ✓
UN number	1090
InChI	[hide]
InChI=1S/C3H6O/c1-3(2)4/h1-2H3	✓
Key: CSCPPACGZOOCGX-UHFFFAOYSA-N	✓
InChI=1/C3H6O/c1-3(2)4/h1-2H3	
Key: CSCPPACGZOOCGX-UHFFFAOYAF	
SMILES	[hide]
CC(=O)C	

Figura 1. Identificadors digitals de l'acetona segons la Wikipedia en anglès («Acetone», 2016).

tant pels humans com per part d'ordinadors. Entre les notacions lineals sorgides al llarg dels anys, dues són actualment les més reconegudes i utilitzades: SMILES (*simplified molecular input line entry system*) i InChI (*international chemical identifier*).

SMILES i OpenSMILES

La notació SMILES (Weininger, 1988) va suposar un punt d'inflexió en els sistemes de notació lineal. Si bé les notacions anteriors ja permetien codificar la connectivitat molecular, ho feien a partir de la codificació dels elements i grups funcionals enllaçats (*Wiswesser line notation*, WLN) (Wiswesser, 1954) o a partir de la numeració dels àtoms implicats (*representation of organic structures description arranged linearly*, ROSDAL) (Barnard, Jochum i Welford, 1989). A diferència de les anteriors, els SMILES fan possible que tothom pugui, amb unes poques regles

bàsiques, interpretar i expressar fàcilment la major part de les molècules orgàniques habituals.

A la fig. 2 es representa la molècula de l'acetat d'etil per mitjà dels tres tipus de notacions lineals comentats fins al moment. Encara que no tinguem cap coneixement previ dels SMILES, hom pot adonar-se de seguida de la seva utilitat.

Tal com es pot observar a l'exemple de la figura, la notació SMILES representa els àtoms pel seu símbol. Els àtoms corresponents a dos símbols consecutius poden estar enllaçats mitjançant un enllaç senzill (-), doble (=) o triple (#), segons el símbol emprat. Tanmateix, els enllaços senzills es poden obviar i, normalment, no s'indiquen en la notació SMILES. Una de les característiques que facilita més la lectura dels SMILES és el fet d'indicar les ramificacions entre parèntesis.

A partir d'aquí, hom pot trobar expressions més complexes que permeten descriure característiques específiques. Per exemple, l'aromaticitat s'indica amb els símbols químics en minúscules, i els símbols @@ i @ informen si els substituents d'un centre quiral s'indiquen en sentit horari o antihorari, o s'empren números per indicar substitucions isotòpiques en àtoms específics de l'entitat química.

Un dels avantatges dels SMILES és que es poden crear a partir de gairebé qualsevol punt de la molècula i obtenir, independentment del camí recorregut, una notació correcta. Per exemple, la propan-2-amina està representada com a CC(N)C a la taula 2, però també es podria expressar com a CC(C)N o C(C)(C)(N). Però aquest avantatge també facilita que cada programa pugui emprar un algorisme

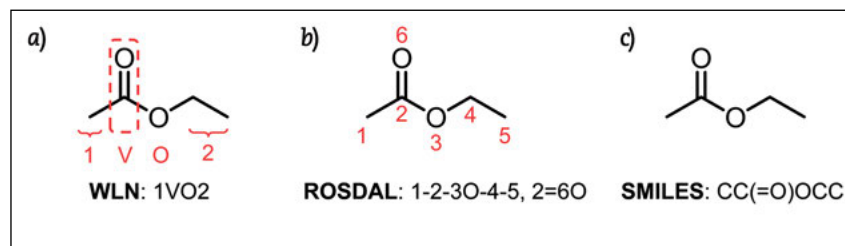


Figura 2. Representació en notació WLN, ROSDAL i SMILES de la molècula d'acetat d'etil: a) WLN, b) ROSDAL, c) SMILES.

Taula 1. Llista d'algunes de les regles bàsiques que ens poden ajudar a interpretar fàcilment la notació SMILES amb un exemple de cada tipus

1. Els àtoms més comuns són representats pel seu símbol químic (B, C, N, O, F, P, S, Cl, Br i I), sempre que el seu estat d'oxidació sigui el més baix compatible amb el nombre d'enllaços entre els estats d'oxidació comuns de l'element. Els símbols corresponents a altres àtoms o estats d'oxidació, entre claudàtors. Els hidrògens s'ometen, excepte aquells lligats a un àtom expressat entre claudàtors.
2. Els enllaços simples, dobles i triples es representen mitjançant els símbols -, = i #, respectivament. Els enllaços simples es poden ometre.
3. Les ramificacions es representen entre parèntesis.
4. S'empren números per indicar els àtoms que defineixen un anell. Els números apareixen duplicats i indiquen que els àtoms que els precedeixen estan units per un enllaç simple.

Taula 2. Exemples de la utilització dels SMILES

Compost	SMILES
2-etilhexà	CC(CC)CCCC
propan-2-amina	CC(N)C
1,4-diaminobenzè	c1(N)ccc(N)cc1
biciclo[5.3.0]decapentaè	c1ccc2cccc2cc1

L'InChI va ser presentat públicament el 2005, després de cinc anys de treballs d'una comissió mixta de la IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) i el NIST (National Institute of Standards and Technology)

de construcció diferent, cosa que en dificulta la interrelació. Els SMILES creats per programes informàtics s'anomenen canònics, en el sentit que són únics per a cada estructura química. Malgrat això, els SMILES canònics de diferents programes solen ser diferents.

Per aquest motiu, la comunitat Blue Obelisk ha publicat l'estàndard OpenSMILES (<http://open.smiles.org/>), que posa a l'abast de la comunitat científica un dialecte obert dels SMILES, alhora que ofereix una plataforma interactiva per debatre i establir uns criteris que s'adeqüin a les necessitats actuals (James, 2016).

Per les seves característiques, els SMILES constitueixen un dels formats comunament emprats per realitzar cerques en les bases de dades d'estructures químiques. Aquesta finalitat requereix adaptar els SMILES a una notació molt més flexible que permeti cercar fragments estructurals concrets. Els SMARTS (SMILES arbitrary target specification) permeten descriure

patrons i facilitar la cerca de subestructures. A més, incorporen operadors lògics i caràcters comodí per admetre, per exemple, diferents àtoms en una mateixa posició.

Una altra extensió dels SMILES són els SMIRKS, utilitzats per descriure reaccions químiques. Tal com succeïa també en els casos anteriors, cada implementació de SMIRKS utilitza una estratègia diferent per representar la reacció química. Normalment, els reactius i productes s'expressen en notació SMILES o SMARTS, amb la mateixa numeració i separats pel símbol >>.

InChI i InChIKey

L'InChI va ser presentat públicament el 2005 (Coles et al., 2005), després de cinc anys de treballs d'una comissió mixta de la IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) i el NIST (National Institute of Standards and Technology). L'objectiu que es persegueix amb la seva elaboració és crear un identificador que pugui ser usat de forma consistent en qualsevol base de dades o programa informàtic. Això implica que l'algorisme usat per crear un identificador estàndard ha de ser obert (Heller et al., 2013). A més, es tracta d'un identificador pensat per ser codificat amb el suport d'algorismes automàtics, encara que la interpretació pot fer-se sense suport computacional.

Actualment, la gestió i el control de l'InChI està a les mans de l'InChI Trust i la documentació

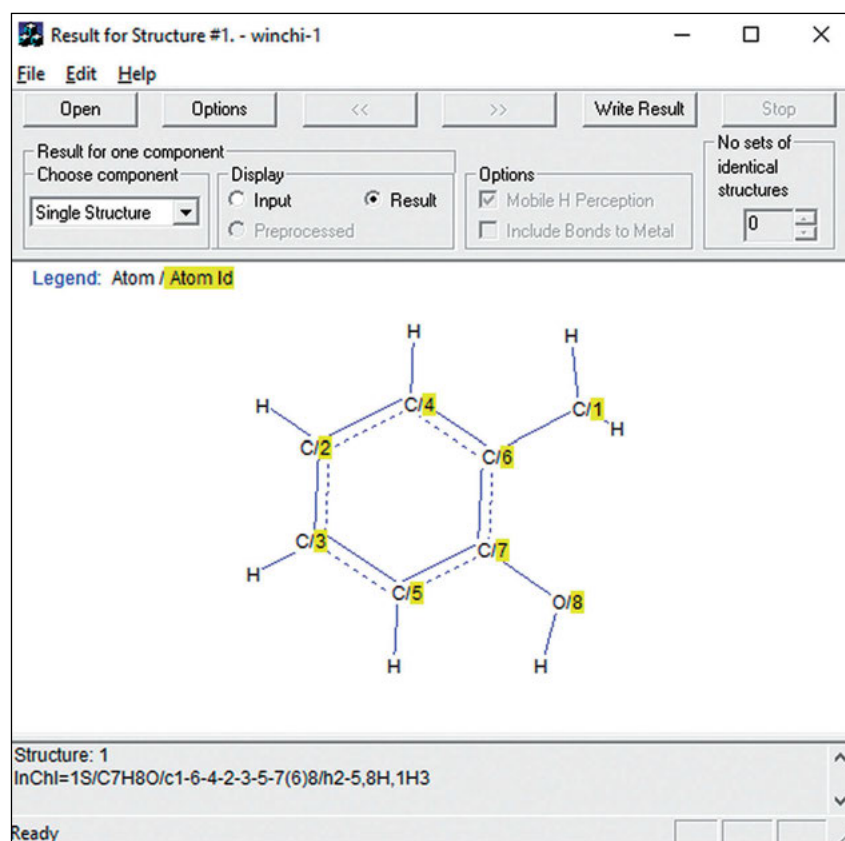


Figura 3. InChI del 2-metilfenol obtingut amb la versió actual per a Windows del programa de l'InChI Trust.

actualitzada pot trobar-se al web <http://www.inchi-trust.org/> (InChI Trust, 2016). La versió actual és la 1.04 i data del 2011. La fig. 3 mostra l'InChI del 2-metilfenol obtingut amb aquesta versió del programari oficial, InChI=1S/C7H8O/c1-6-4-2-3-5-7(6)8/h2-5,8H,1H3.

Com es pot veure i pel fet de ser una notació lineal, l'InChI és una cadena de text. Està constituït per un prefix i fins a sis capes diferents d'informació. Només es presentarà en aquesta breu introducció el prefix i l'estructura de la capa principal.

El prefix indica la versió de l'identificador; en el cas de l'InChI estàndard (el més recomanat des de la versió 1.02 de l'algorisme), és InChI=1S.

La capa principal, que és la primera que apareix a l'InChI i l'única que s'usa en el cas d'estructures senzilles, està formada per tres elements:

— La fórmula, com a fórmula molecular escrita en l'ordre de Hill. En el cas del 2-metilfenol, és /C7H6O.

— La subcapa de connectivitat, que indica quins àtoms (excloent-ne hidrògens) estan connectats entre si. En el cas del 2-metilfenol, aquesta subcapa correspon al fragment /c1-6-4-2-3-5-7(6)8. Per a la interpretació de la capa, cal tenir present que els àtoms es numeren començant pels carbonis i continuant pels heteroàtoms seguint l'ordre alfabètic dels símbols químics; a l'exemple que s'està seguint, l'àtom 8 correspon a l'oxigen.

— La subcapa d'hidrògens, que indica a quins àtoms hi ha hidrògens enllaçats. Per al 2-metilfenol, aquesta subcapa és /h2-5,8H,1H3 i indica que el carboni 1 té tres hidrògens i que els àtoms 2, 3, 4, 5 i 8 tenen un hidrogen enllaçat. El carboni 6, el que té el grup metil, i el carboni 7, el que té el grup hidroxil, no tenen hidrògens.

Paral·lelament a les notacions lineals, l'altra estratègia que s'ha usat i s'usa per identificar entitats químiques són els identificadors de registre. De forma simple, un identificador de registre és un codi únic, normalment breu, que permet identificar unívocament un registre en una taula de dades

La resta de les capes de l'InChI permet indicar, opcionalment, la càrrega i l'estat de protonació, la isomeria geomètrica, la presència d'isòtops, la tautomeria i les interaccions entre tautomeria i substitucions isotòpiques.

Paral·lelament a l'InChI, se sol trobar un altre identificador derivat d'aquest, l'InChIKey, una cadena de longitud fixa (vint-i-set caràcters) que s'obté a través d'una funció resum (*hash*) aplicada a l'InChI. No és interpretable, però presenta com a avantatges que és més compacte i que es pot usar com a paraula de cerca en cercadors d'Internet per localitzar informació sobre compostos químics. Per exemple, per trobar informació de la substància química *aigua*, es pot usar la crida següent: <https://www.google.es/search?q=XLYOFNOQVPJNP-UHFFFAOYSA-N>.

Identificadors de registre i bases de dades d'estructures químiques

Paral·lelament a les notacions lineals, l'altra estratègia que s'ha usat i s'usa per identificar entitats químiques són els identificadors de registre. De forma simple, un identificador de registre és un codi únic, normalment breu, que

permet identificar unívocament un registre en una taula de dades. Aquests identificadors no contenen informació química i, per tant, la conversió entre una espècie química i el seu codi només es pot fer a través de la taula de dades on apareixen ambdues informacions. Aquest és el motiu pel qual parlar d'un identificador implica parlar d'una base de dades i viceversa.

Hi ha gairebé tants identificadors com bases de dades d'informació química. Si bé, per definició, la relació entre identificador i base de dades hauria de fer que els identificadors no tinguessin sentit més enllà d'aquesta, l'existència de bases de dades que incorporen més d'un identificador i la possibilitat de creuar els registres a través de les notacions lineals permeten que alguns esdevinguin identificadors comuns. Entre aquests, destaquen, per la seva utilització, el CAS RN (*chemical abstract service registry number*), el CID (*compound identifier*) i el SID (*substance identifier*), de PubChem, i el CSID (*ChemSpider identifier*), de ChemSpider. Altres identificadors es poden veure a la fig. 1.

En qualsevol cas, hi ha un aspecte fonamental que cal tenir en compte quan s'usen aquests identificadors: quines són les entitats de la taula de dades a què es refereixen?

CAS RN

En la data d'escriptura d'aquest article, gener de 2016, el Chemical Abstracts Service ha atorgat més de dos-cents milions de CAS RN. L'identificador correspon a una seqüència de fins a deu dígits separada en tres blocs, el darrer dels quals és un dígit de control. Cada CAS RN correspon a una entitat química diferent, i la taula de dades inclou els tipus d'entitats següents: compostos orgànics i inorgànics, metalls,

PubChem és una base de dades desenvolupada pel National Institute of Health que conté molta informació sobre compostos químics. Inclou informació química, estructural, bioquímica i bibliogràfica de més de vuitanta-nou milions d'espècies químiques

aliatges, minerals, compostos de coordinació, compostos organometàl·lics, substàncies elementals, isòtops, ions, partícules subatòmiques, proteïnes i àcids nucleics, polímers, materials de composició variable... («CAS REGISTRY and CAS RN FAQs», 2016). Conté referències a les entitats químiques citades en la literatura científica des del 1957.

A més de ser l'identificador principal per a entitats químiques de les bases de dades de l'American Chemical Society, com l'SciFinder (<http://www.cas.org/products/scifinder>) (SciFinder..., 2016), diverses bases de dades d'accés gratuït també usen el CAS RN com a identificador. Alguns exemples són el NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov/chemistry/>) («Libro del web de química del NIST», 2016) (fig. 4) o el ChemIDplus (<https://chem.nlm.nih.gov/chemidplus/>) («ChemIDplus Advanced...», 2013) (fig. 5).

PubChem: CID i SID

PubChem és una base de dades desenvolupada pel National Institute of Health que conté molta informació sobre compostos químics (Kim et al., 2016). Inclou informació química, estructural, bioquímica i bibliogràfica de més de vuitanta-nou milions d'espècies químiques. Entre altres opcions, s'hi pot

Figura 4. Pàgina corresponent a l'hexan-1-ol al NIST Chemistry WebBook.

Figura 5. Pàgina corresponent a l'hexan-1-ol al ChemIDplus.

cercar per nom, mitjançant les notacions lineals esmentades anteriorment o emprant l'identificador propi de la base de dades, el CID, un número enter que identifica, de forma inequívoca, una estructura química continguda a PubChem. Se'n mostra un exemple a la fig. 6.

PubChem és, funcionalment, un agregador d'informació, és a dir, es basa a reunir i relacionar informacions aportades des d'altres proveïdors. De fet, PubChem permet traçar l'origen de cada informació. Per a cada parella de compost i proveïdor,

s'assigna un identificador anomenat SID, que és l'identificador de l'entitat química en el context del proveïdor. Per exemple, l'aspirina disposa d'un CID, el 2244, i correspon a múltiples SID, un per cada proveïdor d'informació: per exemple, la informació proveïda per Sigma-Aldrich té el SID 24890623 i la proporcionada per Life Chemicals, el 315361071.

ChemSpider: CSID

El darrer identificador i base de dades que es presenten en aquest article és ChemSpider.

Hexyl alcohol | C6H14O - ... x +
 https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/

NIH NLM National Center for Biotechnology Information

PubChem OPEN CHEMISTRY DATABASE

Search Compounds

Compound Summary for CID 8103

Hexyl Alcohol

STRUCTURE VENDORS DRUG INFO PHARMACOLOGY LITERATURE PATENTS BIOACTIVITIES

PubChem CID: 8103

Chemical Names: Hexyl alcohol; 1-Hexanol; Hexan-1-ol; HEXANOL; N-Hexanol; 111-27-3

Molecular Formula: $C_6H_{14}O$ or $CH_3(CH_2)_4CH_2OH$

Molecular Weight: 102.177 g/mol

InChI Key: ZSIAUFGUXINUGDI-UHFFFAOYSA-N

Figura 6. Pàgina corresponent a l'hexan-1-ol a PubChem.

hexanol | C6H14O | Chem... x +
 www.chemspider.com/Chemical-Structure.7812.h

ChemSpider Search and share chemistry

Simple Structure Advanced History

Found 1 result

Search term: hexanol (Found by approved synonym)

hexanol

Molecular Formula: $C_6H_{14}O$

Average mass: 102.175 Da

Monoisotopic mass: 102.104462 Da

ChemSpider ID: 7812

COMMENT ON THIS RECORD

Featured data source: The Merck Index Online has more data on this compound

Give Feedback

Generate Leads

Figura 7. Pàgina corresponent a l'hexan-1-ol a ChemSpider.

Creat el 2008 (Williams, 2008), fou adquirit per la Royal Society of Chemistry el 2009. Conté més de cinquanta-vuit milions d'estructures moleculars i, de forma anàloga a l'anterior, cada compost contingut en aquesta base de dades té assignat un identificador únic, el CSID. Per exemple, a l'aspirina li correspon el CSID 2157 i a l'hexan-1-ol, el 7812 (fig. 7).

Com PubChem, ChemSpider és un agregador de continguts de fonts diverses que manté les referències degudes a les fonts d'origen de la informació. Com a diferències principals, cal esmentar el model de curació que usa ChemSpider, amb la participació d'usuaris i experts, l'ús d'un nombre més gran de fonts d'informació i una vinculació al món biomèdic menys destacada.

Com PubChem, ChemSpider és un agregador de continguts de fonts diverses que manté les referències degudes a les fonts d'origen de la informació

Conclusions

Com s'ha dit al començament, la informació química que sempre havíem cercat en llibres ara està disponible a través de diferents bases de dades. Conèixer-les i saber com s'hi pot accedir obre les portes a un volum d'informació que anirà creixent.

S'han presentat en aquest article dues de les notacions lineals més usades, SMILES i InChI, i els identificadors més comuns, CAS RN, CID i CSID. Són les claus que donen accés a aquest creixent volum d'informació estructurada.

S'hi han citat també, a tall d'exemple, algunes bases de dades d'accés gratuït, com són PubChem, ChemSpider, el NIST Chemistry WebBook i el ChemIDplus. Només són alguns exemples per tal d'introduir els lectors en el món que la política de dades obertes està obrint en l'àmbit de la química.

Referències

- «Acetone» (2016). A: Wikipedia [en línia]: *The free encyclopedia*. San Francisco: Wikimedia Foundation. <https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Acetone&oldid=755212721> [Consulta: 15 octubre 2016].
- BARNARD, J. M.; JOCHUM, C. J.; WELFORD, S. M. (1989). «RODAL: a universal structure/sub-structure representation for

- PC-host communication». *Chemical Structure and Information Systems: Interfaces, Communication, and Standards*, núm. 400, p. 76-81.
- BELFORD, R. E. (2016). «IUPAC OLCC talk». A: YouTube [en línia]. San Bruno: YouTube. <<https://www.youtube.com/watch?v=dSOmbBsmbjY>> [Consulta: 15 octubre 2016].
- «CAS REGISTRY and CAS RN FAQs» (2016). A: CAS [en línia]: A division of the American Chemical Society. Columbus: American Chemical Society. CAS. <<https://www.cas.org/content/chemical-substances/faqs>> [Consulta: 20 octubre 2016].
- «ChemIDplus Advanced: chemical information with searchable synonyms, structures, and formulas» (2013). A: ChemIDplus [en línia]: A Toxnet database. Bethesda: US National Library of Medicine. <<https://chem.nlm.nih.gov/chemidplus/>> [Consulta: 20 octubre 2016].
- COLES, S. J.; DAY, N. E.; MURRAY-RUST, P.; RZEPA, H. S.; ZHANG, Y. (2005). «Enhancement of the chemical semantic web through the use of InChI identifiers». *Organic & Biomolecular Chemistry*, núm. 3, p. 1832-1834.
- HELLER, S.; McNAUGHT, A.; STEIN, S.; TCHEKHOVSKOI, D.; PLETNEV, I. (2013). «InChI: the worldwide chemical structure identifier standard». *Journal of Cheminformatics* [en línia], vol. 5, núm. 7, s. p. <<https://jcheminf.springeropen.com/articles/10.1186/1758-2946-5-7>> [Consulta: 20 octubre 2016].
- InChI Trust [recurs electrònic] (2016). Cambridge: InChI Trust. <<http://www.inchi-trust.org/>> [Consulta: 7 gener 2016].
- JAMES, C. A. (2016). «OpenSMILES specification». A: OpenSMILES [recurs electrònic]. [S. ll.: s. n.]. <<http://opensmiles.org/opensmiles.html>> [Consulta: 25 octubre 2016].
- KIM, S.; THIESSEN, P. A.; BOLTON, E. E.; CHEN, J.; FU, G.; GINDULYTE, A.; HAN, L.; HE, J.; HE, S.; SHOEMAKER, B. A.; WANG, J.; YU, B.; ZHANG, J.; BRYANT, S. H. (2016). «PubChem substance and compound databases». *Nucleic Acids Research*, vol. 44, núm. D1, p. D1202-D1213.
- «Libro del web de química del NIST» (2016). A: NIST [en línia]: National Institute of Standards and Technology. Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology. <<http://webbook.nist.gov/chemistry/>> [Consulta: 17 gener 2016].
- SciFinder [recurs electrònic]: A CAS solution (2016). Columbus: CAS. <<https://scifinder.cas.org/>> [Consulta: 17 gener 2016].
- WEININGER, D. (1988). «SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules». *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, núm. 28, p. 31-36.
- «Wikipedia:Chemical infobox» (2016). A: Wikipedia [en línia]: The free encyclopedia. San Francisco: Wikimedia Foundation. <https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Wikipedia:Chemical_infobox&oldid=745874507> [Consulta: 20 octubre 2016].
- WILLIAMS, A. (2008). «ChemSpider and its expanding web: building a structure-centric community for chemists». *Chemistry International* [en línia], vol. 30, núm. 1, s. p. <https://www.iupac.org/publications/ci/2008/3001/ic_chemspider.html> [Consulta: 20 octubre 2016].
- WISWESSER, W. J. (1954). *A line-formula chemical notation*. Nova York: Thomas Crowell.



Roger Estrada-Tejedor

És llicenciat en química per la IQS School of Engineering de la Universitat Ramon Llull (URL) i doctor per la mateixa Universitat, així com màster en estadística per la UNED. Actualment és professor a l'Institut Químic de Sarrià de la URL i desenvolupa la recerca al Departament de Química Orgànica i Farmacèutica. Ha participat en diversos projectes de recerca i innovació docent i en cursos per a docents en l'àmbit de la física i la química. A/e: roger.estrada@iqs.edu.



Jordi Cuadros

És professor titular a l'Institut Químic de Sarrià (IQS) de la Universitat Ramon Llull (URL), dins del Departament de Mètodes Quantitatius. És doctor en química per la URL i llicenciat en pedagogia per la UNED. Ha estat treballant durant dos anys en el projecte ChemCollective de la Universitat Carnegie Mellon (Pittsburgh, EUA) i actualment és l'investigador principal del grup de recerca ASISTEMBE (Analytics, Simulations and Inquiry in STEM and Business Education). Col·labora en la coordinació dels cursos de formació per a docents de batxillerat que s'ofereixen a l'IQS en l'àmbit de les ciències. A/e: jordi.cuadros@iqs.edu.