



راهنمای استفاده از:



تهیه و تنظیم:

موسسه نسیم ایمان

ویرایش ۲۰۱۷

تلفن: ۲۲۶۴۶۷۱۵ فکس: ۲۲۶۴۶۷۲



فهرست مطالب

۶.....	فصل اول (معرفی ابزار جستجو سایفایندر)
۹.....	فصل دوم (جستجوی رفرنس ها)
۱۰.....	۱-۲ جستجو با استفاده از نام سند (Research Topic)
۱۱.....	۱-۱-۲ Quick View
۱۲.....	۲-۱-۲ Other Resource
۱۳.....	۳-۱-۲ Remove Duplicate
۱۴.....	۴-۱-۲ مشاهده سند
۱۷.....	۲-۲ جستجو با استفاده از نام نویسنده (Author Name)
۱۸.....	۳-۲ جستجو با استفاده از نام شرکت (Company Name)
۱۹.....	۴-۲ جستجو با استفاده از شناسه سند (Document Identifier)
۱۹.....	۵-۲ جستجو با استفاده از نام ژورنال (Journal Name)
۲۱.....	۶-۲ جستجو با استفاده از شماره پتنت (Patent Number)
۲۳.....	۷-۲ برچسب ها (Tags)
۲۴.....	فصل سوم (جستجوی ترکیبات)
۲۵.....	۱-۳ جستجو با استفاده از ساختار شیمیایی (Chemical Structure)
۲۶.....	۱-۱-۳ ابزار های رسم ساختار
۳۶.....	۲-۱-۳ روش های جستجو ترکیبات



۳۷ Import CXF -۳-۱-۳
۳۷ Advanced Search -۴-۱-۳
۳۹Exact Structure جستجوی ساختار به صورت -۵-۱-۳
۴۵انتخاب یک ترکیب و بررسی ویژگی های آن -۶-۱-۳
۵۱ SubStructure جستجوی ساختار به صورت -۷-۱-۳
۵۲ Similarity جستجوی ساختار به صورت -۸-۱-۳
۵۲رسم ساختار و استفاده از ابزار ها به منظور مقایسه نتیجه -۹-۱-۳
۵۷ Markush -۲-۳
۵۸رسم ساختار ناشناخته به عنوان ساختار Markush و جستجو به صورت کلی -۱-۲-۳
۶۰ PatentPak -۲-۲-۳
۶۲Molecular Formula -۳-۳
۶۲Property -۴-۳
۶۳Substance Identifier -۵-۳
۶۴جستجو ساختار میدازولام در Substance Identifier و ابزار های مربوطه -۱-۵-۳
۶۷ فصل چهارم (جستجوی واکنش ها)
۶۸۱-۴ جستجو واکنش با رسم ساختار شیمیایی (Reaction Structure)
۷۱۲-۴ جستجوی یک واکنش مورد نظر
۷۲۳-۴ جستجوی پیشرفته واکنش ها
۷۵۴-۴ استفاده از ابزار های مفید Tools، Group و Sort در واکنش ها



۷۸Synthesis This -۵-۴
۸۰ فصل پنجم (جستجوی پلیمرها)
۸۲۱-۵-جستجو پلیمرها با استفاده از رسم ساختار
۸۳۲-۵- جستجو پلیمرها با استفاده از فرمول مولکولی (Molecular Formula)
۸۴۱-۲-۵-جستجو با استفاده از فرمول مولکولی مونومر
۸۵۲-۲-۵-جستجو با استفاده از واحد های تکرار شونده در ساختار پلیمر (SRU)
۸۶۳-۲-۵-جستجو پلیمرها با گروه های انتهایی
۸۷۳-۵-جستجو بر اساس CAS Registry No. منحصر به فرد ماده
۸۸۴-۵- جستجو بر اساس نام ترکیب
۸۸۵-۵-جستجو بر اساس موضوع
۹۰ فصل ششم (رسم توالی واکنش ها)
۹۱۱-۶- معرفی SciPlanner
۹۲۲-۶- بررسی سنتز دارو در SciPlanner
۱۰۲ فصل هفتم (آنالیز ، بهبود و اصلاح مجدد نتایج)
۱۰۳۱-۷-Analyze
۱۰۴۱-۱-۷-آنالیز اسناد و مراجع (References)
۱۰۵۲-۱-۷- آنالیز ترکیبات (Substances)
۱۰۶۳-۱-۷- آنالیز واکنش ها (Reactions)
۱۰۹۲-۷-Refine



- ۱۰۹..... (References) اصلاح مجدد اسناد و مراجع (۱-۲-۷)
- ۱۱۰..... (Substances) اصلاح مجدد ترکیبات (۲-۲-۷)
- ۱۱۲..... (Reactions) اصلاح مجدد واکنش ها (۳-۲-۷)
- ۱۱۵..... Categorize-۳-۷



فصل اول

معرفی ابزار جستجو سایفایندر **Introduction to SciFinder**



SciFinder کامل ترین ابزار جستجو و معتبرترین مجموعه از ترکیبات شیمیایی (شامل تمام ترکیبات شیمیایی ساده، ترکیبات دارویی، پلیمرها، کمپلکسها و مخلوط واکنشها)، واکنشهای شیمیایی، مراجع مقالات ژورنالهای تخصصی و Patent ها می باشد که توسط انجمن شیمی امریکا (ACS) ارائه می شود. این مجموعه بر پایه کامل ترین اطلاعات علمی با استفاده از مشخصات مواد شیمیایی، واکنشها، Patent ها و مراجع که به صورت روزانه به روزرسانی می شود، به جستجو می پردازد.

SciFinder در کوتاه ترین زمان ممکن، کامل ترین مجموعه از اطلاعات را به صورت یکپارچه در اختیار کاربران قرار می دهد.

اطلاعاتی که موتور جستجوی قدرتمند SciFinder ارائه می دهد عبارتند از :

اطلاعات مواد شیمیایی

- شامل بیش از ۱۱۷ میلیون عنوان ترکیب آلی و معدنی
- بیش از ۶۶ میلیون ترکیبات پروتئین و DNA
- میلیون ها عنوان شاخصهای تجربی و بلیون ها رکورد از شاخصهای پیش بینی شده (از جمله طیفهای IR و CNMR, HNMR, X-ray)
- دسترسی جامع و کامل به اطلاعات تجاری و قیمت واکنش دهندهها، واکنشگرها، کاتالیزورها و حلالها
- امکان بررسی هر ترکیب در Patent های موجود در سراسر جهان
- اطلاعات کامل ترکیبات موجود در Patent ها، ژورنالها و وب سایت های معتبر سراسر دنیا
- معرفی نزدیک به ۱۵۰۰۰ ترکیب شیمیایی جدید بصورت روزانه

اطلاعات مربوط به واکنش های شیمیایی

- شامل بیش از ۷۶ میلیون واکنش شیمیایی یک مرحله ای و چند مرحله ای ژورنالها و Patent ها
- امکان جستجوی واکنشهای پلیمری و تجزیه و تحلیل آنها
- بهینه سازی شرایط واکنشهای شیمیایی (زمان، دما، فشار، بازده و ...)، کاتالیزورها و حلالها



- پوشش دهی واکنش‌های شیمیایی از سال ۱۸۴۰ میلادی تا حال حاضر
- معرفی نزدیک به ۳۰۰۰۰ واکنش شیمیایی یک یا چند مرحله‌ای بصورت روزانه

اطلاعات مربوط به مراجع علمی

- شامل هزاران عنوان ژورنال نمایه شده از CAplus (یکی از دیتابیس‌های CAS با محتوای مراجع ژورنال‌ها) و MEDLINE
- اطلاعات جمع آوری شده از Patent ها، ژورنال‌ها، پایان نامه‌ها، چکیده‌های مقالات، بازبینی‌های علمی، کتاب‌ها، وب سایت‌های معتبر و ...
- محتویات با پوشش موضوعی شیمی آلی و معدنی، تجزیه، بیوشیمی، شیمی کاربردی، شیمی فیزیک، زیست‌شناسی، شیمی دارویی، داروسازی، مهندسی شیمی، علم مواد و ...
- در بردارنده اطلاعات کتابشناختی از سال ۱۸۰۰ میلادی
- ارائه بیش از ۵۰۰۰ مرجع جدید بصورت روزانه

این مجموعه شامل محیطی فوق العاده پویا و هوشمند برای رسم توالی واکنش و Total Synthesis ترکیبات شیمیایی می‌باشد. همچنین SciFinder با استفاده از ابزارهای تخصصی جستجو امکان طبقه‌بندی اطلاعات بازیابی شده را فراهم می‌آورد.



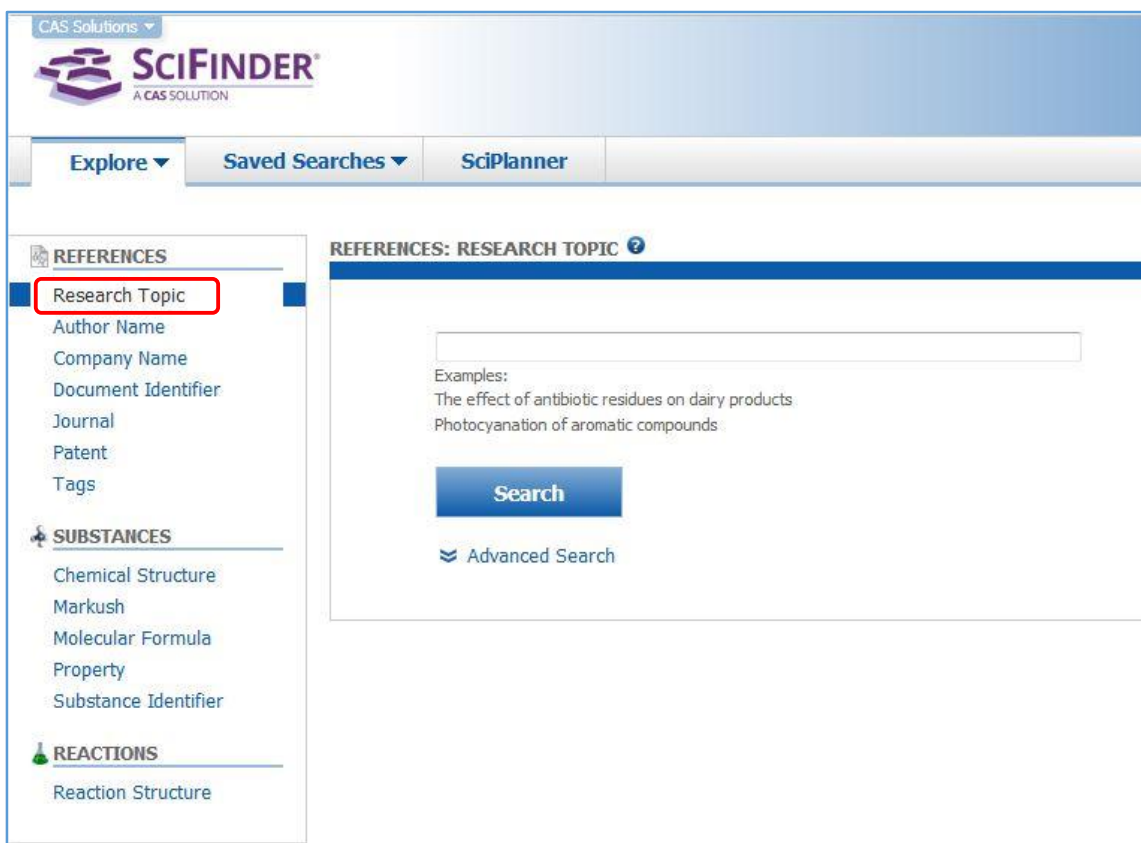
فصل دوم

جستجوی رفرنس ها

References Searching

۱-۲ جستجو با استفاده از نام سند (Research Topic)

با استفاده از این ابزار جستجو می توان با ذکر نام سند (Reference) به جستجو پرداخت. همانطور که مشخص است در قسمت تعیین شده نام سند مورد نظرتایپ شده و با کلیک روی Search جستجو را انجام دهید.



شکل ۱-۲

به عنوان مثال Nano sponge in noble metal جستجو شده است.

Select All Deselect All	
0 of 4 Research Topic Candidates Selected	
<input type="checkbox"/>	13 references were found containing the two concepts "nano sponge" and "noble metal" closely associated with one another.
<input type="checkbox"/>	27 references were found where the two concepts "nano sponge" and "noble metal" were present anywhere in the reference.
<input type="checkbox"/>	2709 references were found containing the concept "nano sponge".
<input type="checkbox"/>	60703 references were found containing the concept "noble metal".
<input type="button" value="Get References"/>	

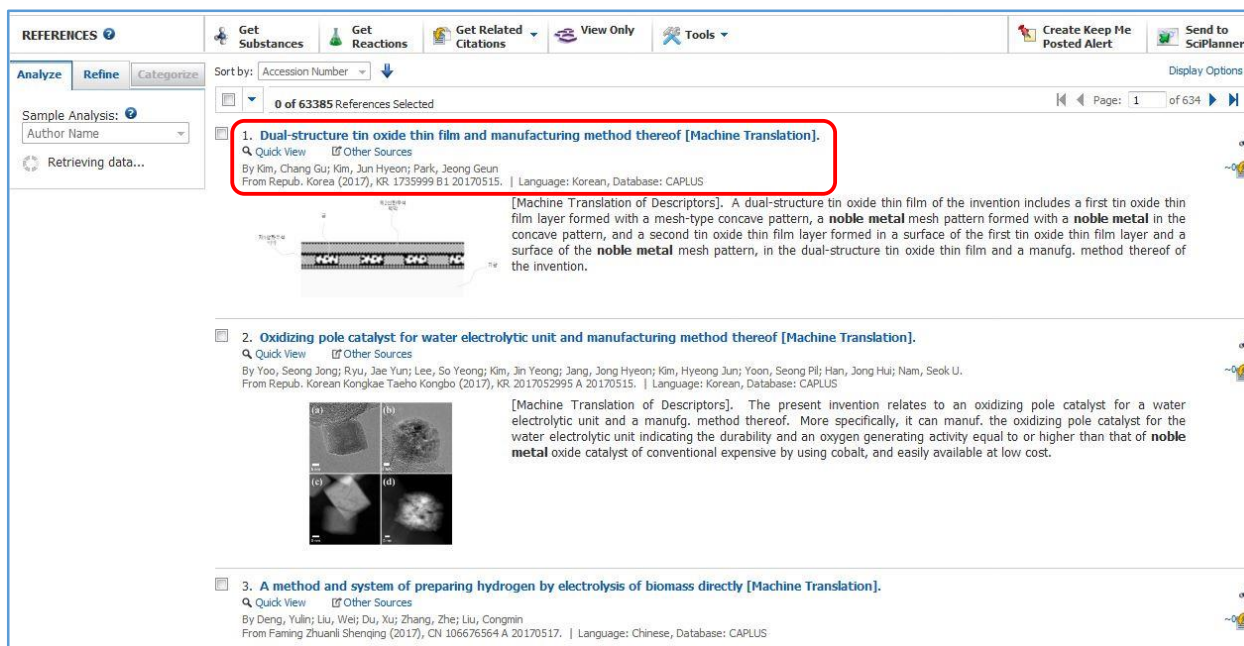
شکل ۲-۲

همانطور که در شکل ۲-۲ مشاهده می کنید در این جستجو هر دو مفهوم Nano sponge و Nobel Metal در ۱۳ سند ارتباط تنگاتنگی با یکدیگر دارند.

در ۲۷ سند مفهوم Nano Sponge و Noble Metal در هر جایی از سند یافت می شود.

در ۲۷۰۹ سند مفهوم Nano Sponge به تنهایی و در ۶۰۷۰۳ سند مفهوم Noble Metal وجود دارد.

و در نتیجه رفرنس ها مطابق شکل ۲-۳ به نمایش در می آیند.



شکل ۲-۳

در هر مورد در بالا ابتدا نام سند و در زیر آن نام نویسنده یا نویسندگان سند ثبت شده است و در پایین آن نیز دیگر مشخصات ثبت شده در سند، زبان و دیتابیس که سند در آن ثبت شده، ذکر شده است.

Quick View ۱-۱-۲

با کلیک بر روی Quick view می توان سند را به صورت سریع و اجمالی در صفحه ای که به صورت مجزا باز می شود مشاهده کرد که این کار سرعت بررسی آن منبع را برای دستیابی به اطلاعات مفید ممکن می سازد.

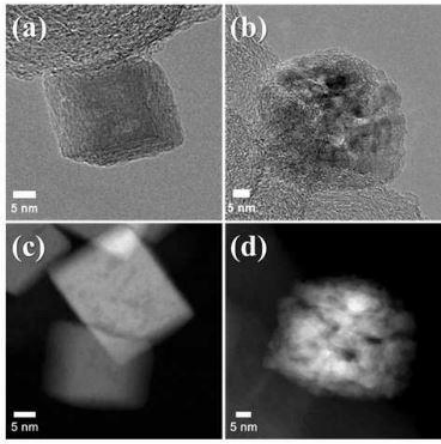
Quick View ✕

Oxidizing pole catalyst for water electrolytic unit and manufacturing method thereof [Machine Translation].

Other Sources
 By Yoo, Seong Jong; Ryu, Jae Yun; Lee, So Yeong; Kim, Jin Yeong; Jang, Jong Hyeon; Kim, Hyeon Jun; Yoon, Seong Pil; Han, Jong Hui; Nam, Seok U.
 From Repub. Korean Kongkae Taeho Kongbo (2017), KR 2017052995 A May 15, 2017. | Language: Korean, Database: CAPLUS

[Machine Translation of Descriptors]. The present invention relates to an oxidizing pole catalyst for a water electrolytic unit and a manuf. method thereof. More specifically, it can manuf. the oxidizing pole catalyst for the water electrolytic unit indicating the durability and an oxygen generating activity equal to or higher than that of noble metal oxide catalyst of conventional expensive by using cobalt, and easily available at low cost.

Reference Images



شکل ۲-۴

Other Resource ۲-۱-۲

با کلیک بر روی **Other Sources** می توان در صورت اشتراک به دیتابیس مورد نظر به سند دسترسی پیدا کرد و در غیر این صورت لینک دسترسی به صورت تمام متن در اختیار قرار داده می شود.

در هر مورد از اسناد نیز چکیده و **Graphical Abstract** نمایش داده شده که به منظور سرعت بیشتر در امر جستجو خدمت بسیار ویژه ای است. همان طور که مستحضرید ۳۵ درصد از علم شیمی به زبان انگلیسی ثبت نشده اند که این نیز خدمت ویژه ای از سایفایندر است که در این قسمت تمام چکیده ها به زبان انگلیسی قابل مشاهده است.

می توان با استفاده از ابزارهای قدرتمند سایفایندر نتایج عمیق حاصل از جستجو را محدود کرد تا هر چه بیشتر به هدف مورد نظر نزدیک شوید که در قسمت مربوط به **Refine & Analyze** به طور مفصل به آن خواهیم پرداخت.



به عنوان مثال محدود کردن سند ها فقط به زبان انگلیسی و محدود کردن آنها بین سالهای ۲۰۱۰ تا ۲۰۱۵ است.

Research Topic "nano sponge in noble metal" > references (63385) > refine "English" (34644) > refine "2010-2015" (11927)

REFERENCES

Get Substances Get Reactions Get Related Citations Tools

Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

Analyze Refine Categorize Sort by: Accession Number

0 of 11927 References Selected

Refine by:

- Research Topic
- Author
- Company Name
- Document Type
- Publication Year
- Language
- Database

Publication Year(s)

2010-2015

Examples: 1995, 1995-1999, 1995-, -1995

Refine

1. Design and synthesis of metallic nanoparticle-ceramic support interfaces for enhancing thermal stability

By Driscoll, D.; Law, C.; Sofie, S. W.
From Ceramic Transactions (2015), 252(Processing and Properties of Advanced Ceramics and Composites VIII), 369-380. | Language: English, Database: CAPLUS

Nickel based catalysts yield important electrochem. benchmarks in high temp. solid oxide electrochem. While fine metal nanoparticles are achieved by soln. precursor infiltration, rapid coarsening of high surface area nanoparticles readily degrades both catalysis and percolation. The stabilization of fine scale nickel particulate at high temps. provides an opportunity to enhance the performance and operational temps. of non-noble metals. The application Al2TiO5 to bind nickel particles to zirconia supports was investigated to establish a methodol. for improving thermal stability. The decompn. of Al2TiO5 and chem. interaction with nickel/zirconia components may provide a viable mechanism. Transmission electron microscopy was utilized to investigate the morphol. by which the Al2TiO5 induced chem. phases that bind the nickel metal to the support. Further, behavior of anchored nickel catalysts in electrochem. cells will be reported.

2. Characterization of high level nuclear waste glass samples following extended melter idling

By Peeler, David K.; Fox, Kevin M.
From Ceramic Transactions (2015), 253(Advances in Materials Science for Environmental and Energy Technologies IV), 59-72. | Language: English, Database: CAPLUS

The Savannah River Site Defense Waste Processing Facility (DWPF) melter was recently idled with glass remaining in the melt pool and riser for approx. three months. This situation presented a unique opportunity to collect and analyze glass samples since outages of this duration are uncommon. The objective of this study was to obtain insight into the potential for crystal formation in the glass resulting from an extended idling period. The results will be used to support development of a crystal-tolerant approach for operation of the high level waste melter at the Hanford Tank Waste Treatment and Immobilization Plant (WTP). Two glass pour stream samples were collected from DWPF when the melter was restarted after idling for three months. The samples did not contain crystn. that was detectable by X-ray diffraction. Electron microscopy identified occasional spinel and noble metal crystals of no practical significance. Occasional platinum particles were obsd. by microscopy as an artifact of the sample collection method. Redn./oxidn. measurements showed that the pour stream glasses were fully oxidized, which was expected after the extended idling period. Chem. anal. of the pour stream glasses revealed slight differences in the concns. of some oxides relative to analyses of the melter feed compn. prior to the idling period. While these differences may be within the anal. error of the labs., the trends indicate that there may have been some amt. of volatility assocd. with some of the glass components, and that there may have been interaction of the glass with the refractory components of the melter. These changes in compn., although small, can be attributed to the idling of the melter for an extended period. The changes in glass compn. resulted in a 70-100 °C increase in the predicted spinel liquidus temp. (TL) for the pour stream glass samples relative to the anal. of the melter feed prior to the outage. This indicates that the potential for spinel crystn. increased as a result of idling for an extended period. However, the predicted TL of the pour

شکل ۲-۵

همانطور که در شکل ۲-۵ ملاحظه می کنید رفرنس ها با استفاده از Refine از تعداد ۶۳۳۸۵ به تعداد ۳۴۶۴۴ در انتخاب زبان انگلیسی و به تعداد ۱۱۹۲۷ در محدود کردن آن به سال های ۲۰۱۰ تا ۲۰۱۵ رسیده است.

۲-۱-۳ Remove Duplicate

در قسمت بالا در نوار ابزاری که تهیه شده، با استفاده از گزینه Tools می توان با انتخاب Remove Duplicate موارد مشابه در سند ها را باز هم محدودتر کرد.

REFERENCES

Get Substances Get Reactions Get Related Citations Tools

Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

Analyze Refine Categorize Sort by: Accession Number

0 of 2976 References Selected

Analyze by:

Document Type

Journal 2066

Online Computer File 1379

Patent 851

Article 152

JOURNAL ARTICLE 152

Remove Duplicates

Combine Answer Sets

Add Tag

1. Development of free-metal electrocatalyst from inexpensive sources of carbon: a novel electrode material for cathode reaction in PEM fuel cells

By Alonso-Lemus, I. L.; Lardizabal-Gutierrez, D.; de la Torre-Saenz, L.; Sanchez-Castro, M. E.; Rodriguez-Varela, F. J.
From ECS Transactions (2015), 69(17, Polymer Electrolyte Fuel Cells 15), 637-642. | Language: English, Database: CAPLUS

Recently, free noble metal electrocatalysts have been obtained, which are capable of carrying out the oxygen redn. reaction (ORR) with comparable performance to Pt. These novel electrocatalysts are doped nanostructured carbon (e.g. nitrogen doped carbon nanotubes N-NTC and nitrogen doped reduced graphene, N-rG). Nowadays, the synthesis of these nanostructured materials has several technol. challenges, because it prodn. is still expensive and has a significant environmental impact. In this work, we have obtained novel metal-free electrocatalysts from two different inexpensive carbon source: (i) an org. waste and (ii) mineral coal from Sabinas region in Coahuila Mexico. These electrocatalysts have a significantly lower cost than conventional platinum-based electrocatalysts or than nanostructured carbon free-metal catalyst. The results show that these electrocatalysts are an inexpensive, environmental friendly and promising alternative for use as cathodes in PEMFC.

شکل ۲-۶

۲-۱-۴ مشاهده سند

با کلیک بر روی نام سند کلیه اطلاعات آن قابل مشاهده است و Noble Metal و Nano Sponge در هر جای متن و نام سند که ذکر شده، نشان دار شده است.

مطابق شکل ۲-۷ در قسمت بالا نام سند به صورت درشت و نویسندگان و در زیر آن ها چکیده مقاله آورده شده است. Graphical Abstract ارائه شده در سند نیز در صورت وجود، نمایش داده می شود. کلماتی که با استفاده از آنها جستجو انجام شده نیز در هر قسمت قابل مشاهده است.

در سمت راست باکس مربوط به اطلاعات کتابشناختی از قبیل نام ژورنال یا محل ثبت سند و دیگر اطلاعات مهم از قبیل DOI قابل مشاهده است.

در باکس پایین نام ارگان یا سازمانی که این مطالعه را انجام داده نشان داده شده و در باکس زیرین آن اطلاعات مربوط به دستیابی سند و دیتابیس ثبت شده سند، قابل مشاهده است.

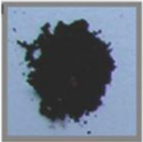


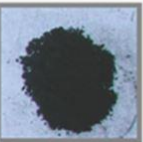




REFERENCE DETAIL | Get Substances | Get Related Citations | Link to Other Sources | Send to SciPlanner

Return | Previous | Next

18. Mixing Does the Magic: A Rapid Synthesis of High Surface Area Noble Metal Nanosponges Showing Broadband Nonlinear Optical Response

By: Krishna, Katta Sai; Sandeep, C. S. Suchand; Philip, Reji; Eswaramoorthy, Muthusamy

Here we report an instantaneous formation of high surface area **metal nanosponges** through a one-step inexpensive method in a completely green solvent, water. Merely by optimizing the concn. of the precursors and the reducing agent, we were able to generate a three-dimensional porous structure made up of **nanowire** networks. This is a general process, involves a simple, room temp. redn. of **metal** salts with sodium borohydride, and is therefore scalable to any amt. Further, these **nanoporous metals** because of their network structures show optical limiting behavior of a true broadband nature that would find applications in optoelectronic **nanodevices**.

			
41 m ² /g	16 m ² /g	51 m ² /g	81 m ² /g
			
Au	Ag	Pt	Pd

QUICK LINKS
0 Tags, 0 Comments

SOURCE
ACS Nano
Volume4
Issue5
Pages2681-2688
Journal
2010
CODEN:ANAC3
ISSN:1936-0851
DOI:10.1021/nn100320s

COMPANY/ORGANIZATION
Nanomaterials and Catalysis Lab, Chemistry and Physics of Materials Unit, DST Unit on Nanoscience
Jawaharlal Nehru Centre for Advanced Scientific Research Bangalore, India 560064

ACCESSION NUMBER
2010:556612
CAN152:556952
CAPLUS

شکل ۲-۷

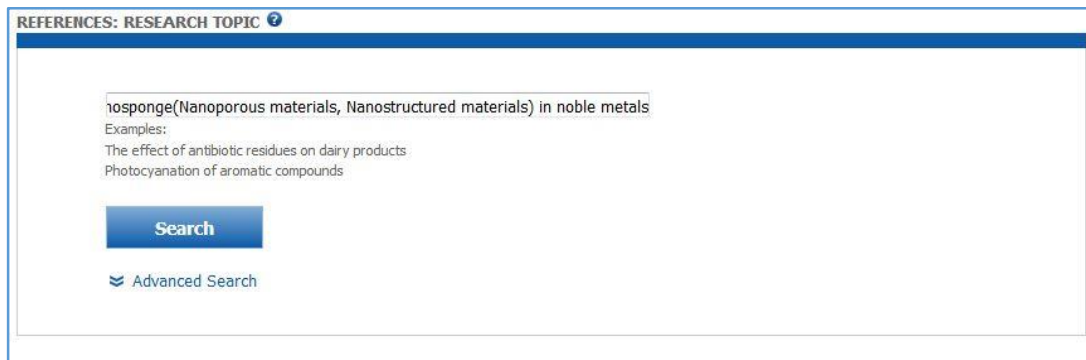
۲ باکس مشاهده شده در شکل ۲-۸ در قسمت انتهایی وجود دارد که یکی مربوط به Concept و دیگری مربوط به ترکیبات موجود در آن سند است که در قسمت اول همانطور که مشاهده می کنید، اطلاعات و تعاریف مربوط به اصطلاحات موجود در سند و قسمت دوم مربوط به ترکیباتی است که در سند مورد استفاده قرار گرفته است. در هر مورد اطلاعات مربوط به دستیابی آن ترکیب (CAS Registry NO.) و نقش ترکیب ذکر شده است و در قسمت پایینی آن اطلاعات جامع تر آن نمایش داده شده است. با کلیک بر روی علامت ذره بین آن ترکیب نیز قابل بررسی است.

Concepts	Substances
Energy level excitation Laser radiation Nanoparticles Nonlinear optical properties Polycrystalline materials Reduction Surface-enhanced Raman spectroscopy X-ray diffraction Green chemistry Mixing Nonlinear optical materials Particle size distribution Porous materials Surface area UV and visible spectra	7440-22-4P Silver, properties 🔍 mixing does the magic and rapid synthesis of high surface area noble metal nanosponges showing broadband nonlinear optical response Biological study, unclassified; Physical, engineering or chemical process; Properties; Synthetic preparation; Technical or engineered material use; Biological study; Preparation; Process; Uses
mixing does the magic and rapid synthesis of high surface area noble metal nanosponges showing broadband nonlinear optical response Noble metals mixing does the magic and rapid synthesis of high surface area noble metal nanosponges showing broadband nonlinear optical response Physical, engineering or chemical process; Properties; Synthetic preparation; Technical or engineered material use; Preparation; Process; Uses	7440-05-3P Palladium, properties 🔍 7440-06-4P Platinum, properties 🔍 7440-57-5P Gold, properties 🔍 mixing does the magic and rapid synthesis of high surface area noble metal nanosponges showing broadband nonlinear optical response Physical, engineering or chemical process; Properties; Synthetic preparation; Technical or engineered material use; Preparation; Process; Uses
Nanoporous materials Sponges(artificial) Nanostructured materials nanosponges; mixing does the magic and rapid synthesis of high surface area noble metal nanosponges showing broadband nonlinear optical response	7732-18-5 Water, properties 🔍 mixing does the magic and rapid synthesis of high surface area noble metal nanosponges showing broadband nonlinear optical response Physical, engineering or chemical process; Properties; Process
Electrooptical instruments Optoelectronic semiconductor devices Optoelectronic apparatus Photoelectric devices optoelectronic nanodevices; mixing does the magic and rapid synthesis of high surface area noble metal nanosponges showing broadband nonlinear optical response	989-38-8 Rhodamine 6G 🔍 mixing does the magic and rapid synthesis of high surface area noble metal nanosponges showing broadband nonlinear optical response Physical, engineering or chemical process; Properties; Technical or engineered material use; Process; Uses
Crystallinity	16940-66-2 Sodium borohydride 🔍

شکل ۲-۸

به منظور جستجو دقیق و بهینه تر با استفاده از Concept می توان جستجو را جامع تر کرد. به عنوان مثال با توجه به جستجو قبلی و نتایج حاصله همانطور که در شکل ۲-۹ مشاهده می کنید دو واژه مشابه دیگر (مفهوم یکسان از

آن ترکیب (و همچنین S در Metal اضافه شده است تا همانطور که بیان شد اطلاعات به صورت جامع تر و دقیق تر بازایی شود.



REFERENCES: RESEARCH TOPIC ⓘ

nanosponge(Nanoporous materials, Nanostructured materials) in noble metals

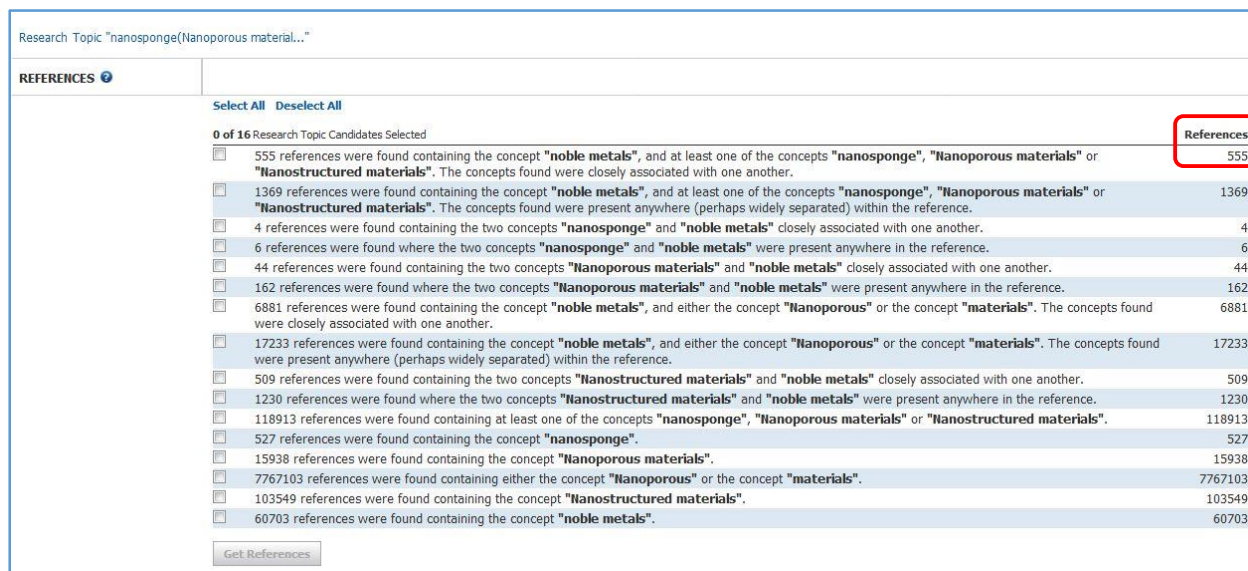
Examples:
The effect of antibiotic residues on dairy products
Photocyanation of aromatic compounds

Search

Advanced Search

شکل ۹-۲

مطابق شکل ۱۰-۲ مشاهده می کنید نتایج جستجو بسیار کامل تر و دقیق تر شد و اسناد زیادتری در موضوع مورد نظر یافت شد.



Research Topic "nanosponge(Nanoporous material..."

REFERENCES ⓘ

Select All Deselect All

0 of 16 Research Topic Candidates Selected

	References
<input type="checkbox"/> 555 references were found containing the concept "noble metals", and at least one of the concepts "nanosponge", "Nanoporous materials" or "Nanostructured materials". The concepts found were closely associated with one another.	555
<input type="checkbox"/> 1369 references were found containing the concept "noble metals", and at least one of the concepts "nanosponge", "Nanoporous materials" or "Nanostructured materials". The concepts found were present anywhere (perhaps widely separated) within the reference.	1369
<input type="checkbox"/> 4 references were found containing the two concepts "nanosponge" and "noble metals" closely associated with one another.	4
<input type="checkbox"/> 6 references were found where the two concepts "nanosponge" and "noble metals" were present anywhere in the reference.	6
<input type="checkbox"/> 44 references were found containing the two concepts "Nanoporous materials" and "noble metals" closely associated with one another.	44
<input type="checkbox"/> 162 references were found where the two concepts "Nanoporous materials" and "noble metals" were present anywhere in the reference.	162
<input type="checkbox"/> 6881 references were found containing the concept "noble metals", and either the concept "Nanoporous" or the concept "materials". The concepts found were closely associated with one another.	6881
<input type="checkbox"/> 17233 references were found containing the concept "noble metals", and either the concept "Nanoporous" or the concept "materials". The concepts found were present anywhere (perhaps widely separated) within the reference.	17233
<input type="checkbox"/> 509 references were found containing the two concepts "Nanostructured materials" and "noble metals" closely associated with one another.	509
<input type="checkbox"/> 1230 references were found where the two concepts "Nanostructured materials" and "noble metals" were present anywhere in the reference.	1230
<input type="checkbox"/> 118913 references were found containing at least one of the concepts "nanosponge", "Nanoporous materials" or "Nanostructured materials".	118913
<input type="checkbox"/> 527 references were found containing the concept "nanosponge".	527
<input type="checkbox"/> 15938 references were found containing the concept "Nanoporous materials".	15938
<input type="checkbox"/> 7767103 references were found containing either the concept "Nanoporous" or the concept "materials".	7767103
<input type="checkbox"/> 103549 references were found containing the concept "Nanostructured materials".	103549
<input type="checkbox"/> 60703 references were found containing the concept "noble metals".	60703

Get References

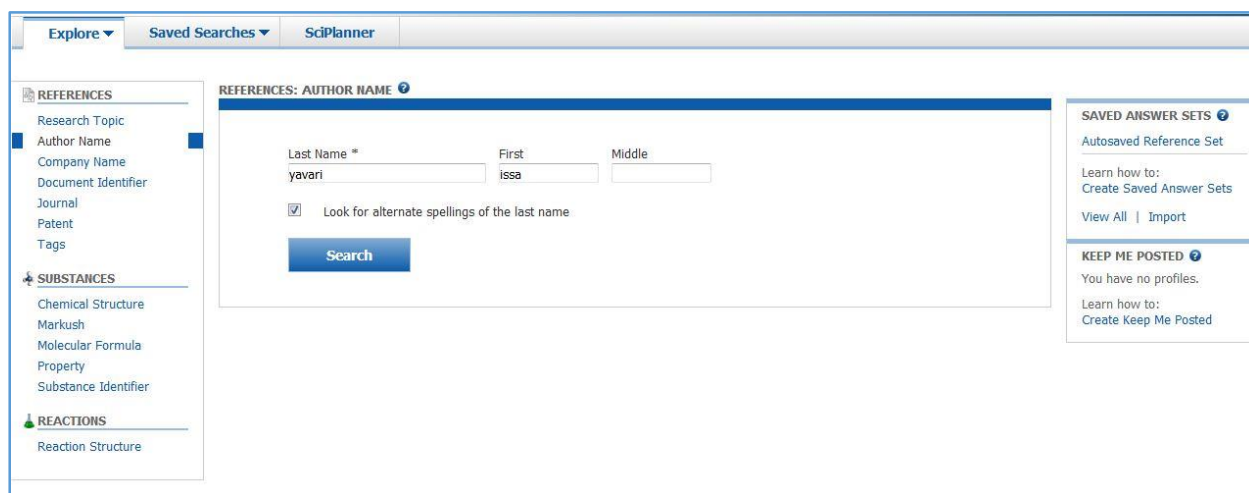
شکل ۱۰-۲

که به عنوان مثال در مورد اول که مفهوم تمام واژه های جستجو شده در ارتباط نزدیک با هم وجود دارند، تعداد ۵۵۵ تا بازایی شده است.

در این شیوه از جستجو نیز میتوان با استفاده از Advanced Search به صورت پیشرفته به جستجو پرداخت. جستجو پیشرفته در قسمت اسناد و رفرنس ها شامل: سال انتشار سند، نوع سند، زبان، نویسنده و شرکت مربوطه است که در ابتدای جستجو میتواند باز یابی را به سمت هدفی مطلوب تر، محدود کند.

۲-۲ جستجو با استفاده از نام نویسنده (Author Name)

در قسمت دوم در جستجوی سند، می توان با استفاده از نام و نام خانوادگی نویسنده به جستجو پرداخت. به عنوان مثال پروفسور عیسی یآوری جستجو شده است و نتایج همانند شکل ۲-۱۱ قابل مشاهده است.



شکل ۲-۱۱

نتایج با توجه به عنوان ثبت نام شده در سند نمایش داده می شود.

Select All Deselect All		References
4 of 4 Author Name Candidates Selected		
<input checked="" type="checkbox"/>	YAVARI	6
<input checked="" type="checkbox"/>	YAVARI I	34
<input checked="" type="checkbox"/>	YAVARI ISSA	499
<input checked="" type="checkbox"/>	YAVARY ISSA	1

Get References

شکل ۲-۱۲



همانگونه که در شکل ۱۳-۲ مشاهده می کنید، اسناد به ترتیب سال مرتب شده اند و می توان با استفاده از **Sort by** بر اساس بازده یا بقیه موارد نیز آن ها را مرتب کرد. و با استفاده از جهت فلش آنها را از اول به آخر و برعکس مرتب کرد.

Author Name "yavari, issa" > references (540)

REFERENCES

Get Substances Get Reactions Get Related Citations Tools

Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

Analyze Refine Categorize Sort by: Accession Number

0 of 540 References Selected

Page: 1 of 6

Analyze by: Author Name

Author Name	Count
Yavari Issa	499
Hossaini Zinatossadat	47
Nematpour Manijeh	38
Yavari I	34
Sabbaghan Maryam	31
Djahaniani Hoorieh	29
Souri Sanaz	27
Moradi Loghman	26
Alizadeh Abdolali	24
Anary Abbasinejad Mohammad	21

1. A Synthesis of Novel Dioxopropellanes from the Knoevenagel Adducts of Acenaphthoquinone and 3-Oxo-3-arypropionitriles in Aqueous Methanol

By Yavari, Issa; Khajeh-Khezri, Aliyeh; Bahemmat, Samira; Halvagar, Mohammad Reza

2. Tandem synthesis of thiazolidine derivatives from primary amines, isothiocyanates, and bis(imidoyl) chlorides

By Yavari, Issa; Zahedi, Nooshin; Skoulka, Stavroula

3. A tandem synthesis of 4,5-bis(arylimino)-2-(alkylimino)imidazolidines

By Yavari, Issa; Zahedi, Nooshin; Halvagar, Mohammad Reza

شکل ۱۳-۲

۳-۲ جستجو با استفاده از نام شرکت (Company Name)

در این قسمت می توان با استفاده از نام منابع تجاری برای دستیابی به ترکیب مورد نظر به جستجو پرداخت.

REFERENCES

Research Topic

Author Name

Company Name

Document Identifier

Journal

Patent

Tags

SUBSTANCES

Chemical Structure

Markush

Molecular Formula

Property

Substance Identifier

REACTIONS

Reaction Structure

REFERENCES: COMPANY NAME

Examples: 3M, DuPont

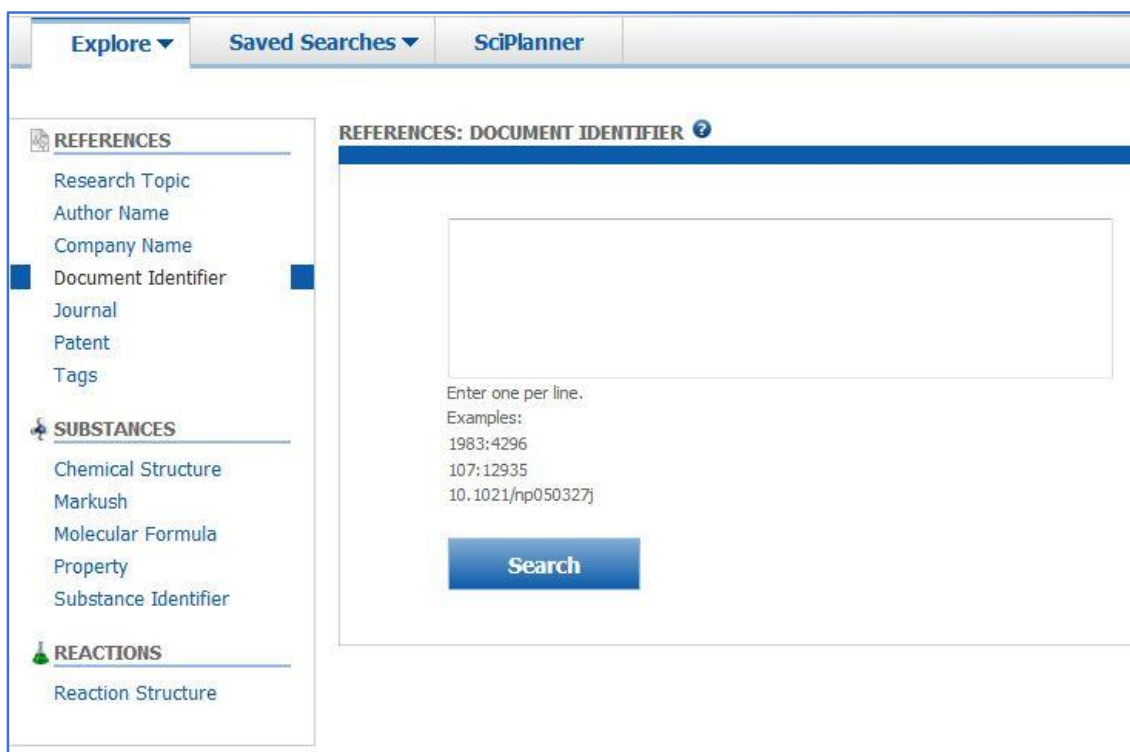
Search

شکل ۱۴-۲

به عنوان مثال با تایپ کمپانی های بزرگی همچون DuPont می توان جستجو کاملی در مورد کلیه محصولات آن و تجزیه و تحلیل روی محصولات داشت.

۲-۴ جستجو با استفاده از شناسه سند (Document Identifier)

همانطور که در شکل ۲-۱۵ مشاهده می کنید در این قسمت میتوان با استفاده از اطلاعات شناسایی سند به عنوان مثال DOI، سال، صفحه و یا دیگر شناسه های موجود در سند به جستجو پرداخت.

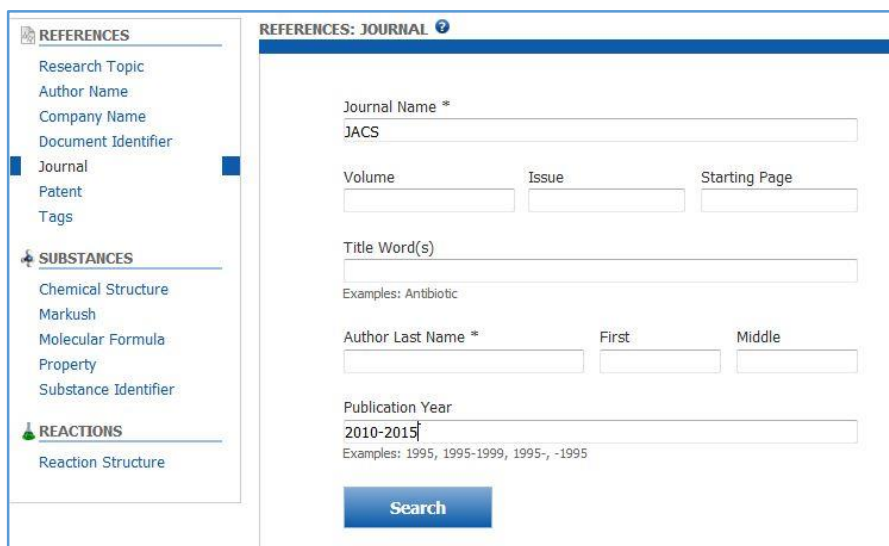


شکل ۲-۱۵

۲-۵ جستجو با استفاده از نام ژورنال (Journal Name)

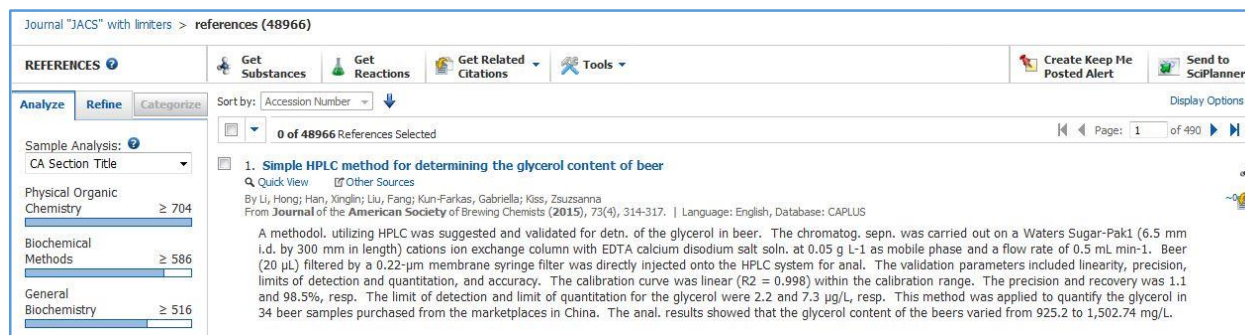
در جستجو با استفاده از نام ژورنال می توان با استفاده از Issue، Volume و شماره صفحه، جستجو را محدود تر کرد. به این منظور می توان از کلمات کلیدی که در ژورنال مد نظر است و یا نام نویسنده نیز برای جستجو دقیق تر بهره گرفت.

همانطور که در شکل ۱۶-۲ مشاهده می کنید می توان با استفاده از سال نیز جستجو را هر چه بیشتر و بهتر به سمت هدف مورد نظر هدایت کرد.



شکل ۱۶-۲

به عنوان مثال ژورنال Journal of American Chemical Society یا به اختصار (JACS) را در بین سال های ۲۰۱۰ تا ۲۰۱۵ مورد بررسی قرار دادیم که تعداد ۴۸۹۶۶ سند بازیابی شد.

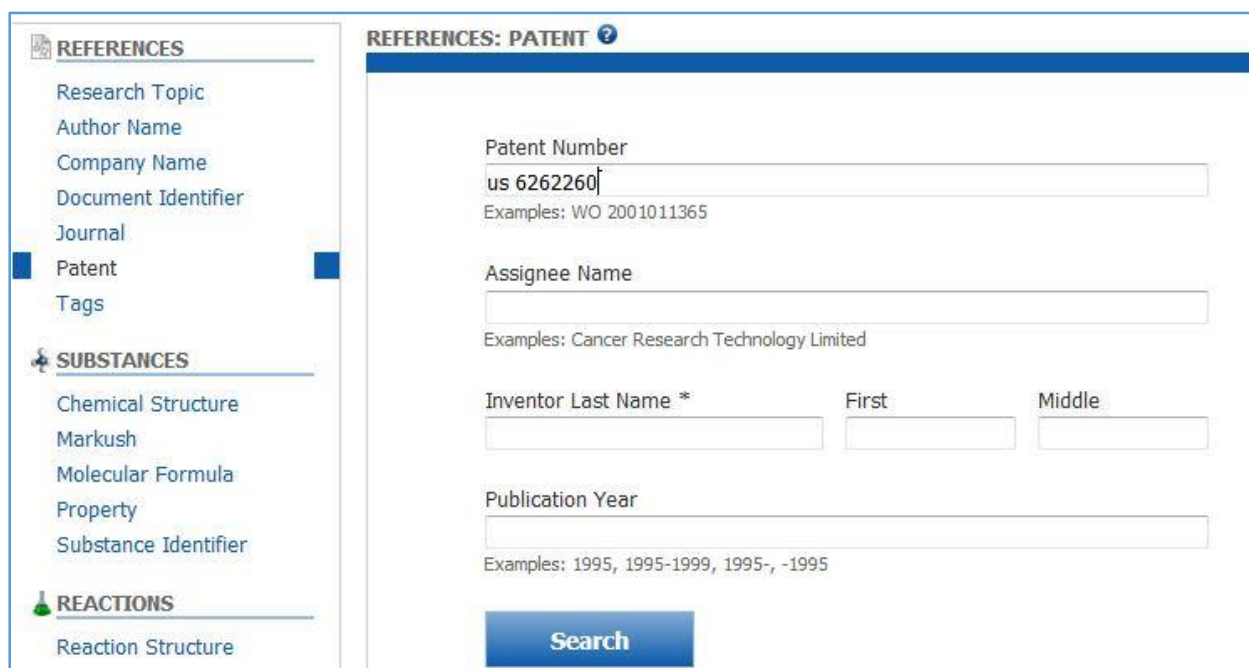


شکل ۱۷-۲

۲-۶ جستجو با استفاده از شماره پتنت (Patent Number)

همچنین می توان با استفاده از شماره پتنت، نام شرکت و یا نام مخترع به جستجو پرداخت و این امر می تواند با استفاده از سال نیز به منظور دقت بهتر جستجو، محدود تر شود.

به عنوان مثال US Patent مورد نظر که مربوط به ماده میدازولام است، جستجو شد که نتیجه را در شکل ۲-۱۸ مشاهده می کنید.



REFERENCES

- Research Topic
- Author Name
- Company Name
- Document Identifier
- Journal
- Patent**
- Tags

SUBSTANCES

- Chemical Structure
- Markush
- Molecular Formula
- Property
- Substance Identifier

REACTIONS

- Reaction Structure

REFERENCES: PATENT

Patent Number

 Examples: WO 2001011365

Assignee Name

 Examples: Cancer Research Technology Limited

Inventor Last Name * First Middle

Publication Year

 Examples: 1995, 1995-1999, 1995-, -1995

Search

شکل ۲-۱۸

در مورد پتنت ها گزینه ای به نام Patent Pak وجود دارد که با کلیک بر روی آن می توان به صورت سریع به متن کامل پتنت، همانند شکل ۲-۱۹ دسترسی پیدا کرد.



Patent "us 6262260" > references (1)

REFERENCES

Get Substances Get Reactions Get Related Citations Tools

Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

Analyze Refine Categorize

Sort by: Accession Number

0 of 1 Reference Selected

Analyze by: Author Name

Dhaon Madhup K 1

Show More

1. Thermal decarboxylation and crystallization process for the preparation of midazolam

Quick View PATENTPAK

By Dhaon, Madhup K.
From U.S. (2001), US 6262260 B1 20010717. | Language: English, Database: CAPLUS

Imidazobenzodiazepines (I; R¹ = H, alkyl; R²-R⁵ = H, halogen, alkyl, nitro) [e.g., 8-chloro-6-(2-fluorophenyl)-1-methyl-4H-imidazo[1,5-a][1,4]benzodiazepine] are prep. in high yield and selectivity by the thermal decarboxylation of the corresponding carboxylic acids (II; 8-chloro-6-(2-fluorophenyl)-1-methyl-4H-imidazo[1,5-a][1,4]benzodiazepine-3-carboxylic acid) in a 1,3-dialkyl-2-imidazolidinone solvent (e.g., 1,3-dimethyl-2-imidazolidinone) followed by reacting the product recovered from the decarboxylation step with a base (e.g., sodium hydroxide).

I

شکل ۲-۱۹

همانگونه که شکل ۲-۲۰ مشخص است با استفاده از Download می توان به پتنت به صورت تمام متن به صورت فایل PDF دسترسی پیدا کرد که به صورت کامل در فصل سوم به آن میپردازیم.

PATENTPAK A CAS SOLUTION

PAGE 1 / 5 ZOOM DOWNLOAD PDF

Key Substances in Patent

CAS RN 59468-44-9

Search in SciFinder | View Detail

Analyst Markup Locations (1) page 4

CAS RN 59467-70-8

Search in SciFinder | View Detail

(12) United States Patent
Dhaon

(10) Patent No.: US 6,262,260 B1
(45) Date of Patent: Jul. 17, 2001

(54) PROCESS FOR THE PREPARATION OF MIDAZOLAM

(75) Inventor: Madhup K. Dhaon, Mundelein, IL (US)

(73) Assignee: Abbott Laboratories, Abbott Park, IL (US)

(*) Notice: Subject to any disclaimer, the term of this patent is extended or adjusted under 35 U.S.C. 154(b) by 0 days.

(21) Appl. No.: 09/533,160
(22) Filed: Mar. 23, 2000
(51) Int. Cl.⁷ C07D 487/04
(52) U.S. Cl. 540/562
(58) Field of Search 540/562

(56) References Cited

OTHER PUBLICATIONS

Tilley and Sayigh, J.Org.Chem., 28, 1963, 2076-2079.*
* cited by examiner

Primary Examiner—Mark I. Berch
Assistant Examiner—Thomas McKenzie
(74) Attorney, Agent, or Firm—B. Gregory Donner, Dugal S. Sickert

ABSTRACT

(57) The present invention provides a process for the synthesis of compounds of formula (II)

(II)

شکل ۲-۲۰



۷-۲ برچسب ها (Tags)

برچسب ها عبارتند از کلمات کلیدی تعریف شده توسط کاربر یا اصطلاحات که شما می توانید با آن سند مرتبط کنید. شما می توانید برچسب ها را از هر دو مجموعه پاسخ سند و جزئیات سند مدیریت کنید که خود به نوعی کمک به دستیابی سریع سند مورد نظر است.

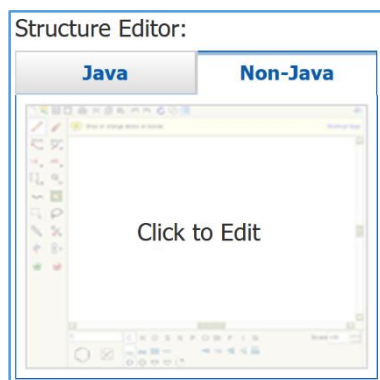


فصل سوم

جستجوی ترکیبات **Substance Searching**

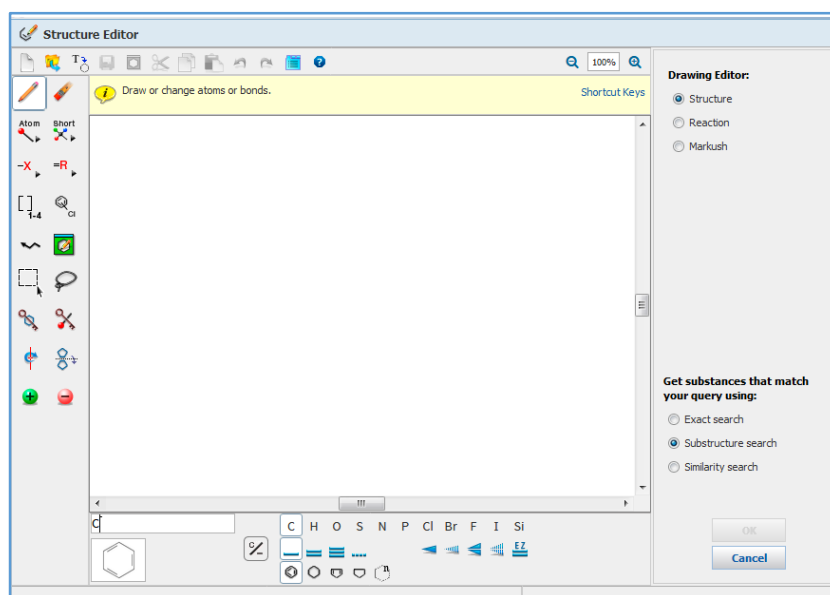
۳-۱- جستجو با استفاده از ساختار شیمیایی (Chemical Structure)

در این قسمت می توان با رسم ساختار مورد نظر به جستجو پرداخت. همانگونه که در شکل ۳-۱ نیز مشخص است برای رسم ساختار دو محیط یکی در جاوا و دیگری در محیط غیر جاواست که بیشتر به علت نصب نبودن پلتفرم جاوا روی سیستم ها از Non-Java استفاده می شود.



شکل ۳-۱

با کلیک بر روی **Click to Edit** صفحه **Structure Editor** باز می شود که مطابق شکل ۳-۲ است.



شکل ۳-۲

۳-۱-۱- ابزار های رسم ساختار :

- باکس شماره ۱



۱ ۲ ۳ ۴ ۵ ۶ ۷ ۸ ۹ ۱۰ ۱۱ ۱۲ ۱۳

۱. NEW: باز کردن پروژه جدید برای رسم ساختار
۲. Import: وارد کردن ساختار که از قبل توسط نرم افزارهای ترسیم ساختار با پسوند . mol و . cxF نوشته شده است.
۳. Add to Editor: افزودن ساختار با استفاده از شناسه ترکیب (CAS Registry Number), SMILES و یا InChI
۴. Export: ذخیره ساختار به صورت . cxf و . mol
۵. Save as Template: به منظور سرعت بخشیدن به رسم ساختار برای ترکیب نامی انتخاب شده که در قسمت Template ذخیره و قابل استفاده است.
۶. Cut: برداشتن و انتقال ساختار مورد نظر
۷. Copy ساختار مورد نظر
۸. Paste ساختار مورد نظر
۹. Undo: برگشت به حالت قبلی
۱۰. Redo: رفتن به حالت بعدی
۱۱. Preferences: در این قسمت می توان طول پیوند و زاویه پیوند را به شیوه دلخواه تغییر داد.

۱۲. Help: با استفاده از این قسمت می توان با ورود خودکار به سایت کلیه اطلاعات را در همه موارد از این ابزار جستجو به دست آورد.

۱۳. Zoom: بزرگنمایی و کوچک کردن ساختار ترسیم شده به منظور دسترسی بهتر به ساختار و واکنش ترسیم شده

• باکس شماره ۲



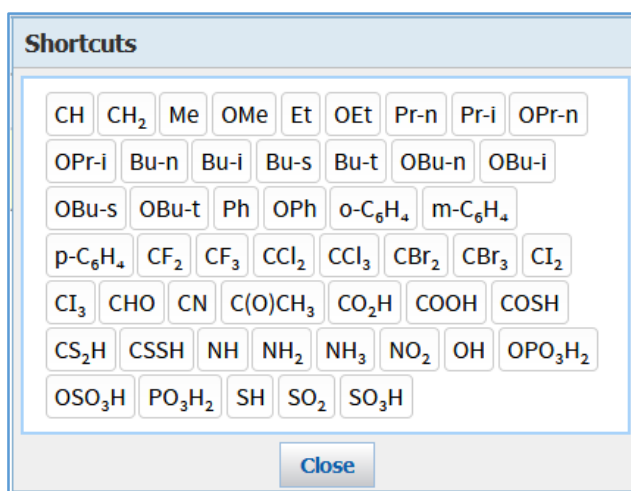
۱. Pencil: رسم اتم مورد نظر با زدن کلیک بر بروی صفحه و کشیدن موس برای رسم پیوند (به صورت پیش فرض اتم کربن و پیوند یگانه رسم می شود).

با یک کلیک دیگر بر روی همان پیوند، پیوند دوگانه و کلیک مجدد بر روی آن، پیوند سه گانه رسم خواهد شد. با یک کلیک و تغییر جهت موس می توان زاویه پیوند و همچنین جایگاه اتم بعدی را نیز تغییر داد. با رسم هر قسمت با قرار گرفتن موس روی اتم مورد نظر، اتم به صورت مارک شده نمایش داده شده و می توانید به ترسیم ادامه ساختار پردازید.

۲. Eraser: با استفاده از این قسمت می توان اتم مورد نظر و یا پیوند های متصل به آن را پاک کرد. به منظور پاک کردن سریع تر با کلیک روی یک قسمت و نگه داشتن آن و مارک کردن ساختار، هم یا جزئی از ساختار را پاک کنید.

۳. Atoms: با کلیک بر روی این قسمت جدول تناوبی عناصر نمایش داده می شود که می توان با انتخاب آن از اتم مورد نظر برای رسم ساختار استفاده کرد. با نگه داشتن موس روی اتمهای جدول تناوبی، اطلاعات شامل عدد اتمی، نام عنصر، جرم مولی، گروه و دوره اتم نمایش داد می شود.

۴. Shortcuts: در این قسمت ساختار ها و یا استخلافهای رایج نمایش داده شده است که به منظور سرعت بخشیدن در امر ترسیم و همچنین جستجو دقیق تر می توان از آن ها استفاده کرد. در اینجا نیز با نگه داشتن موس روی هر کدام، ساختار باز هر کدام نمایش داده می شود.



شکل ۳-۳

۵. Variables: این قسمت شامل موارد کلی تر در مورد استخلافها و گروه های متصل است که به شرح زیر است.

Variables		
X	Any halogen	۱
M	Any metal	۲
A	Any atom except H	۳
Q	Any atom except C or H	۴
Ak	Any carbon chain	۵
Cy	Any cycle	۶
Cb	Any carbocycle	۷
Hy	Any heterocycle	۸

[Close](#)

۱- همه اتم های هالوژن

۲- همه فلزات

۳- همه اتم ها به جز هیدروژن

۴- همه اتم ها به جز کربن و هیدروژن

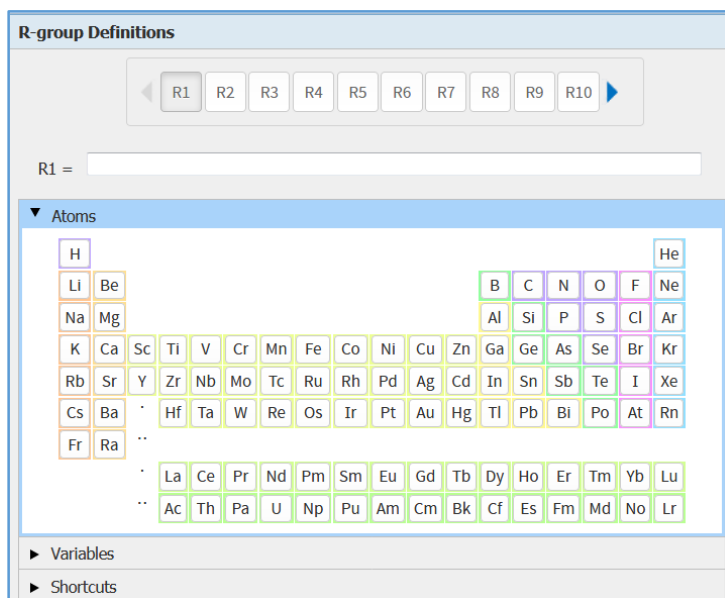
۵- همه زنجیره های باز کربنی (توالی اتم های کربن به صورت خطی)

۶- همه حلقه ها

۷- همه حلقه های کربنی (توالی اتم های کربن به صورت حلقه بسته شده)

۸- همه هتروسیکل ها (حلقه های شامل هترو اتم)

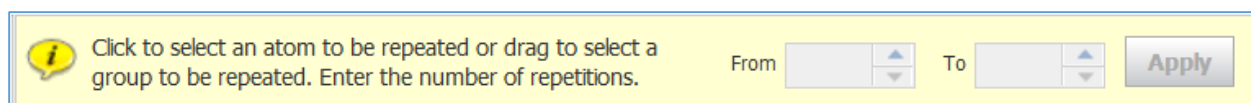
۶. R-Group definition: تعیین گروه R با تعیین اتمها در جدول تناوبی (Atoms)، (Shortcuts)، (Variables) که در بالا به تعریف هر کدام به صورت جداگانه پرداخته شده است.



شکل ۳-۴

با انتخاب گروه های R می توان جستجو جامع تری داشت و این در حالی است که به علت جامعیت زیاد و عمق مطالب در نتایج جستجو ها، باید تعداد گروه های انتخاب شده برای گروه R بین ۴ تا ۲۰ باشد.

۷. **Repeating Group**: با انتخاب این گزینه می توان اتم یا اتم های تکرار شونده را به تعداد دلخواه در ساختار مشخص کرد که این مورد برای رسم پلیمر ها با واحد های تکرار شونده و دارو ها که قسمتی از آن تکرار می شود هم بسیار مفید است.



شکل ۳-۵

تعداد تکرار در قسمت تعیین شده قابل تغییر بوده و با زدن گزینه Apply روی قسمتی از ساختار که انتخاب شده، اعمال می شود.

۸. **Variable attachment points**: این گزینه برای قرار گرفتن استخلاف روی حلقه است. به این صورت که با انتخاب استخلاف مورد نظر به صورت اتمی خاص یا گروه های R با کلیک موس و کشیدن آن روی

هریک از اتمهای حلقه، می توان آن استخلاف را به آن اختصاص داد. این گزینه با تخصیص استخلاف روی هر یک از موقعیت های حلقه، انجام جستجو بهتر و دقیق تر را ممکن می سازد.

۹. Chain: با انتخاب این گزینه میتوان زنجیره کربنی خود را به تعداد دلخواه ادامه داد و رسم زنجیره های طولانی بدون نیاز به شمارش آنها امکان پذیر می شود.

۱۰. Templates: ساختار های از پیش ترسیم شده می تواند کمک بسیار بزرگی در ترسیم ساختار باشد. می توان با استفاده از این گزینه که به دو صورت قابل نمایش است به رسم ساختار های پیچیده پرداخت. همانطور که در شکل مشخص است این موارد به شرح زیر است:

<input type="text" value="Enter 3 or more characters..."/>	
▶ Alkaloid (9)	۱
▶ Amino Acid (25)	۲
▶ Bicarboyclic (8)	۳
▶ Carbohydrate (7)	۴
▶ Coordination (14)	۵
▶ Cycloalkane (13)	۶
▶ Miscellaneous (6)	۷
▶ Monocarboyclic (19)	۸
▶ N-containing (19)	۹
▶ NOS-containing (10)	۱۰
▶ Nucleic Acid (5)	۱۱
▶ O-containing (11)	۱۲
▶ Polycarboyclic (13)	۱۳
▶ Rings (4)	۱۴
▶ S-containing (6)	۱۵
▶ Steroid (7)	۱۶
▶ User-Defined (0)	۱۷

- ۱- Alkaloids (۹ مورد): به هریک از ترکیبات آلی شیمیایی گفته می شود که دست کم دارای یک اتم نیتروژن در حلقه هتروسیکلیک هستند. (مشخصه آکالوئیدها داشتن ترکیبات نیتروژنی هستند).
- ۲- Amino acids (۲۵ مورد): به ساختارهایی شامل گروه عاملی آمین و کربوکسیلیک اسید گفته می شود که به دو دسته ضروری و غیرضروری تقسیم می شوند.
- ۳- Bicarboyclic (۸ مورد): به ترکیباتی شامل دو حلقه گفته می شود که به هم از طریق دو اتم متصل اند.
- ۴- کربوهیدرات ها (۷ مورد): ساختارهایی هستند که از اتم کربن، هیدروژن و اکسیژن تشکیل شده اند.
- ۵- Coordination (۱۴ مورد): ترکیبات کئوردینانسیونی از اتم هایی تشکیل شده اند که حول فلز مرکزی کئوردینه شده اند.
- ۶- Cycloalkane (۱۳ مورد): آلکان های حلقوی شامل حلقه هایی ۳ عضوی و بیشتر که فقط از کربن و هیدروژن تشکیل شده که بین آنها پیوند یگانه است.
- ۷- Miscellaneous (۶ مورد): ترکیبات که در دسته متفرقه طبقه بندی شده اند.
- ۸- Monocarboyclic (۱۹ مورد): ترکیباتی رایج که شامل یک حلقه به صورت اشباع شده یا نشده است که فقط شامل کربن و هیدروژن است.
- ۹- N-containing (۱۹ مورد): شامل ترکیبات حلقوی نیتروژن دار است. (تعداد حلقه ۱ یا دو تا است).
- ۱۰- NOS-containing (۱۰ مورد): ترکیباتی شامل یک یا دو حلقه که در ساختار خود علاوه بر کربن و هیدروژن، از اتم های نیتروژن، اکسیژن و یا گوگرد استفاده شده است.
- ۱۱- Nucleic acid (۵ مورد): زنجیره های طولانی یا به اصطلاح پلیمر های خطی که از واحد های تکرار شونده نوکلئوتید تشکیل شده اند.



۱۲- O-containing (۱۱ مورد): ترکیباتی که در ساختار خود علاوه بر کربن و هیدروژن، اتم اکسیژن نیز به کار رفته است.

۱۳- Polycarbocyclic (۱۳ مورد): ترکیبات رایج حلقوی که شامل دو تا ۵ حلقه هستند که همگی از کربن و هیدروژن تشکیل شده اند.

۱۴- Rings (۴ مورد): شمل حلقه ۵ و ۶ عضوی اشباع شده و اشباع نشده.

۱۵- S-containing (۶ مورد): شامل حلقه های هتروسیکل شامل اتم گوگرد که به صورت تک حلقه و دو حلقه هستند.

۱۶- Steroids (۷ مورد): به نوعی لیپید (چربی) گفته می شود که از ساختار های حلقوی کربنی تشکیل شده است.

۱۷- User-defined : این مورد مربوط به مواردی است که ساختار را به عنوان template با پسوند .cxf ذخیره میکنیم و تعداد آن به موارد ذخیره شده بستگی دارد.

به طور کلی می توان با نوشتن تنها سه حرف یا بیشتر از نام ترکیب مورد نظر، آن را در بین Templates جستجو کرد.

۱۱. Marquee : برای انتخاب قسمتی از ساختار یا همه آن و انتقال ساختار استفاده می شود

۱۲. Lasso : برای انتخاب قسمتی از ساختار به صورت بدون قاعده و نظم به کار برده می شود.

۱۳. Lack Ring : به منظور قفل کردن حلقه برای جلوگیری از قرار گرفتن استخلاف روی حلقه، مورد استفاده قرار می گیرد. پس از استفاده از این مورد و قفل کردن حلقه مورد نظر، در نتایج حاصل از جستجو هیچ استخلافی روی حلقه قرار نمیگیرد (به اصطلاح قفل می شود)، مگر اینکه استخلافی را برای آن تعیین کنیم.

۱۴. Lack Atoms : قفل کردن هر اتم نیز به منظور قرار نگرفتن استخلاف روی آن صورت میگیرد، مگر اینکه استخلاف خاصی را برای آن تعریف کرده باشیم.

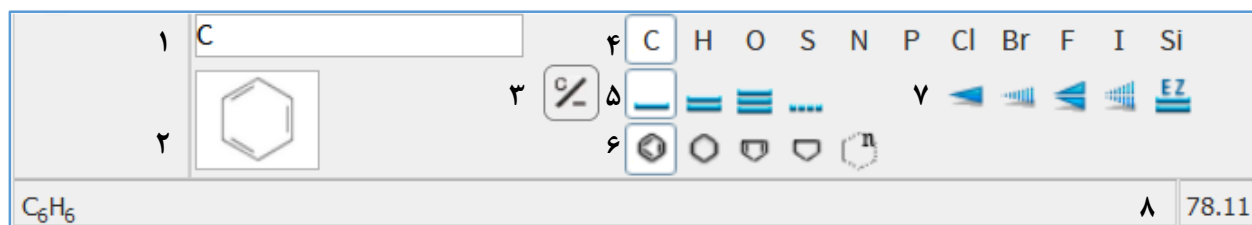
۱۵. Rotate fragment : به منظور چرخش ساختار روی صفحه در جهت مورد نظر است که این کار با کلیک کردن و چرخش موس در جهت مورد نظر صورت میگیرد.

۱۶. Flip fragment : این گزینه به منظور چرخش مولکول در ۴ جهت است که در هر مورد چرخش روبه رو، تصویر آینه ای ساختار مورد نظر است.

۱۷. Positive charge : جهت باردار کردن اتم مورد نظر به صورت بار مثبت استفاده می شود.

۱۸. Negative charge : جهت باردار کردن اتم مورد نظر به صورت بار منفی استفاده می شود.

• باکس شماره ۳



۱. در اینجا می توان نام استخلاف یا گروه مورد نظر را نوشت و در روی ساختار مورد نظر قرار داد. به عنوان مثال با نوشتن NH_2 گروه آمینی روی ساختار قرار می گیرد.

۲. ساختار مربوط به Template که انتخاب شده، نشان داده می شود که در اینجا پیش فرض حلقه بنزن است.

۳. برای تبدیل باند دوگانه به یگانه و تبدیل تمام اتم ها به کربن استفاده می شود که با یک کلیک روی اتم یا پیوند مورد نظر، تغییر انجام می شود.

۴. اتمهایی به صورت پیش فرض قرار گرفتند که بیشترین استفاده را در رسم ساختار داشته اند.

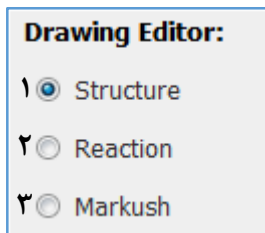
۵. پیوند ها به صورت یگانه، دوگانه، سه انه و خط چین نیز برای رسم ساختار در شکل قابل مشاهده هستند.

۶. حلقه های پر کاربرد نیز مشخص شده اند که برای رسم حلقه مورد نظر با تعداد عضو دلخواه می توان با علامت حلقه خط چین با تعیین تعداد n استفاده کرد.

۷. پیوند ها به صورت یگانه و دو گانه با آرایش فضایی نیز قابل مشاهده هستند.

۸. فرمول مولکولی و جرم مولی هر ترکیب در این دو قسمت قابل مشاهده است.

• باکس شماره ۴



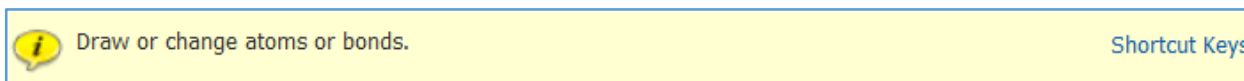
۱. Structure : مربوط به جستجوی ساختار مورد نظر است که مربوط به همین بخش از توضیحات است.

۲. Reaction : مربوط به جستجوی واکنش مورد نظر است که در فصل بعدی به آن خواهیم پرداخت.

۳. Markush : مربوط به ساختار های کلی است که نتیجه جستجو شامل اسکلت اصلی مشابهی با ترکیب مورد نظر است.

• باکس شماره ۵

قسمت سفید برای رسم ساختار است که برای اتصال اتم یا پیوند، آن اتم یا پیوند به صورت قرمز رنگ مشخص می شوند. گزینه Shortcut Key مربوط به راهنمایی در مورد رسم ساختار است که می توان با استفاده از نوشتن کلید واژه ها و حروف مشخص شده نیز، ساختار مورد نظر را ترسیم کرد.



شکل ۳-۶

با زدن کلمه OK صفحه رسم ساختار به صورت اتوماتیک بسته می شود و محیط برای جستجو فراهم می شود.



۳-۱-۲- روش های جستجو ترکیبات

سه شیوه کلی برای جستجو وجود دارد:

Search Type:

- ۱ Exact Structure
- ۲ Substructure
- ۳ Similarity

Show precision analysis

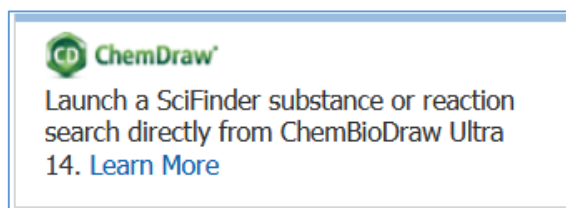
۱- Exact Structure: در این شیوه جستجو فقط ترکیب مورد نظر جستجو می شود و تنها تغییر در ساختار در نتایج جستجو شامل موارد زیر خواهد بود:

- بار ترکیب
- ایزومرهای فضایی
- رادیکال ها
- ایزوتوپ ها
- ترکیبات هیدراته
- ترکیبات کئوردینانسیون
- مونومرها
- نمکها و مخلوط ها

۲- Substructure: در این شیوه از جستجو نه تنها نتایج حاصل از جستجو Exact Structure (دقیقا ساختار ترسیم شده) نمایش داده می شود بلکه استخلاف های گوناگون و ساختار های حلقوی نیز به آن اضافه می شود.

۳- Similarity: در این شیوه ساختار های مشابه با ترکیب مورد نظر نمایش داده می شود و تنها تفاوت در سایز حلقه، استخلاف ها و پیوند ها، در ساختار ترسیم شده، است.

همچنین می توان با کلیک بر روی Show Precision analysis برای دو شیوه جستجو Exact Search و Substructure نتایج را به صورت طبقه بندی شده براساس میزان مشابهت با ساختار ترسیم شده، مشاهده کرد. ابزار جستجو SciFinder با ابزار رسم مرسوم ChemDraw نیز اجازه دسترسی و رسم ساختار داده است و می توان با رسم ساختار و یا واکنش مورد نظر در ChemDraw نیز آن را در SciFinder جستجو کرد که اطلاعات بیشتر در قسمت Learn More نشان داده شده است.



شکل ۳-۷

۳-۱-۳ Import CXF

با استفاده از این قسمت نیز می توان ساختار مورد نظر که پسوند .cxf دارد را در SciFinder وارد کرد.

۳-۱-۴ Advanced Search

این قسمت نیز برای جستجو پیشرفته و محدود کردن هرچه بیشتر جستجو در نظر گرفته شده است که می توان با کلیک بر روی Always Show همیشه آن به صورت کامل مشاهده کرد.

این قسمت شامل سه قسمت است:



Characteristics

۱

- Single component
- Commercially available
- Included in references

۱- Characteristics: این قسمت مربوط به مشخصات مربوط به نوع واکنش و شرایط آن است که خود شامل سه قسمت است.

- **Single Component**: جستجو فقط در واکنش های یک مرحله انجام شود.
- **Commercially available**: جستجو در واکنش هایی انجام شود که مواد واکنش دهنده آن ها به صورت تجاری موجود باشند.
- **Included in references**: جستجو فقط در ترکیباتی است که در لیترچر به آن ها رفرنس داده شده است.

Classes

۲

- Alloys
- Coordination compounds
- Incompletely defined
- Mixtures
- Polymers
- Organics, and others not listed

۲- Classes: جستجو می تواند به صورت زیر نیز دسته بندی شود.

- **Alloys**: مربوط به آلیاژ ها است و ترکیباتی که به صورت آلیاژ وجود دارند.
- **Coordination Compounds**: مربوط به ترکیبات کئوردیناسیونی است که در آن فلز مرکزی توسط لیگاند کئوردینه شده است.
- **Incompletely Defined**: مربوط به ترکیباتی هستند که به طور کامل در لیترچر تعریف نشده اند و اطلاعات اندکی از آنها موجود است.
- **Mixtures**: مربوط به ترکیباتی است که به صورت مخلوط وجود دارند.



• Polymers: مربوط به ترکیبات پلیمری است.

• Organics, and others not to listed: مربوط به ترکیبات آلی و ترکیباتی است که در این

لیست به صورت طبقه بندی شده موجود نبوده اند.

Studies

۳

- Analytical
- Biological
- Preparation
- Reactant or reagent

۳- Studies: به صورت کلی می توان جستجو را در حوزه های متفاوت علم شیمی نیز جستجو کرد. به همین

منظور به ۴ دسته تقسیم بندی شده اند:

• Analytical: با جستجو در این بخش ترکیباتی که در دسته شیمی تجزیه قرار میگیرند نمایش

داده می شود و به عنوان مثال با جستجو در این بخش، کاربرد های تجزیه ای ترکیب مورد نظر به

نمایش در می آید.

• Biochemical: این بخش مربوط به علم بیو شیمی و موضوعات مرتبط به آن است.

• Preparation: مربوط به آماده سازی نمونه است و فقط ترکیباتی را نمایش میدهد که بتوان به

کمک آن ترکیب مورد نظر را سنتز کرد.

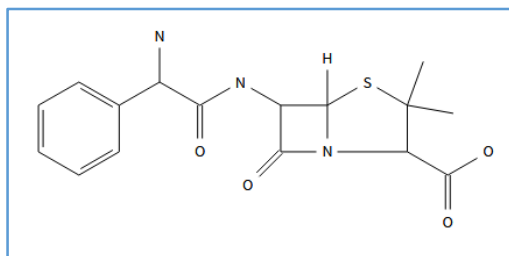
• Reagent or Reactant: این قسمت از جستجو به صورتی است که ترکیب مورد نظر به عنوان

واکنش دهنده یا واکنشگر موجود باشد.

۳-۱-۵- جستجوی ساختار به صورت Exact Structure

به عنوان مثال ساختار Ampicillin (CAS Registry No. : 69-53-4) که آنتی بیوتیک بتالاکتام است

ترسیم شده است. که به صورت Exact Structure روی این ترکیب جستجو میکنیم.



شکل ۳-۸

همانطور که در شکل مشاهده می کنید ۳۲۴ نتیجه بدست آمد که همانطور که در قسمت جستجو به صورت Exact Structure به صورت کامل بیان شد، شامل ترکیب باردار، ترکیب با استریوشیمی مورد نظر، ترکیبات هیدراته و غیره است.

Chemical Structure exact > substances (324)

Get References Get Reactions Get Commercial Sources Tools

Analyze Refine

Sort by: Relevance

0 of 324 Substances Selected

Page: 1 of 22

1. 69-52-3
(Component: 69-53-4)
~1005
~69
Absolute stereochemistry.
 $C_{16}H_{19}N_3O_4S \cdot Na$
4-Thia-1-azabicyclo[3.2.0]heptane-2-carboxylic acid, 6-[[[(2R)-2-amino-2-phenylacetyl]amino]-3,3-dimethyl-7-oxo-, sodium salt (1:1), (2S,5R,6R)-
Regulatory Information
Spectra

2. 69-53-4
~34891
~73
Absolute stereochemistry.
 $C_{16}H_{19}N_3O_4S$
4-Thia-1-azabicyclo[3.2.0]heptane-2-carboxylic acid, 6-[[[(2R)-2-amino-2-phenylacetyl]amino]-3,3-dimethyl-7-oxo-, (2S,5R,6R)-
Key Physical Properties
Regulatory Information
Spectra
Experimental Properties

3. 7177-48-2
(Component: 69-53-4)
~346
~68
Absolute stereochemistry.
 $C_{16}H_{19}N_3O_4S \cdot 3H_2O$
4-Thia-1-azabicyclo[3.2.0]heptane-2-carboxylic acid, 6-[[[(2R)-2-amino-2-phenylacetyl]amino]-3,3-dimethyl-7-oxo-, hydrate (1:3), (2S,5R,6R)-
Key Physical Properties
Regulatory Information
Spectra
Experimental Properties

4. 33993-48-5
~108
~5
68373-14-8
 $C_8H_{11}NO_5S$

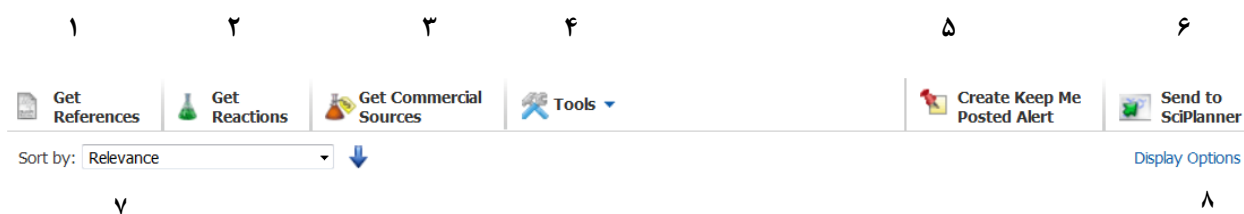
5. 94935-63-4
~3462
~3
58001-44-8
 $C_8H_9NO_5$

6. 121279-93-4
~100

شکل ۳-۹



باکس موجود در قسمت بالایی شامل ۸ قسمت است:



۱- **Get References**: با استفاده از این گزینه می توانید با توجه به نقش ترکیب مورد نظر، در اسناد به جستجو پرداخت که همانطور که در شکل ۳-۱۰ نیز مشخص است با استفاده از نقش ترکیب می توان آن را محدود کرد. به عنوان مثال به برای آماده سازی یا خواص یا کاربرد ترکیب یا ...

Get References

Retrieve references for:

All substances
 Selected substances

Limit results to:

<input type="checkbox"/> Adverse Effect, including toxicity	<input type="checkbox"/> Preparation
<input type="checkbox"/> Analytical Study	<input type="checkbox"/> Process
<input type="checkbox"/> Biological Study	<input type="checkbox"/> Properties
<input type="checkbox"/> Combinatorial Study	<input type="checkbox"/> Prophetic in Patents
<input type="checkbox"/> Crystal Structure	<input type="checkbox"/> Reactant or Reagent
<input type="checkbox"/> Formation, nonpreparative	<input type="checkbox"/> Spectral Properties
<input type="checkbox"/> Miscellaneous	<input type="checkbox"/> Uses
<input type="checkbox"/> Occurrence	

For each sequence, retrieve:

Additional related references, e.g., activity studies, disease studies.

شکل ۳-۱۰

۲- Get Reactions: با استفاده از این گزینه می توان تمامی واکنش هایی که از این ترکیب استفاد شده است را جستجو کرد که این نیز همانطور که در شکل ۳-۱۱ مشاهده می کنید شامل مواردی است که می تواند نتیجه را به سمت هدف مورد نظر محدود کند.

Get Reactions

Retrieve reactions for:

- All substances
- Selected substances

Limit results by reaction role:

- Product
- Reactant
- Reagent
- Reactant or reagent
- Catalyst
- Solvent
- Any role

شکل ۳-۱۱

۳- Get commercial source: با استفاده از این گزینه، اطلاعات مربوط به دسترسی تجاری ترکیب مورد نظر قابل مشاهده است که همانطور که در شکل ۳-۱۲ مشاهده می کنید به تجزیه و تحلیل ترکیب مورد نظر در هر منبع نیز پرداخته است که امکان مقایسه و بررسی آن نیز وجود دارد.

Chemical Structure exact > substances (324) > commercial sources (73)

COMMERCIAL SOURCES

Analyze by: Commercial Source

Sort by: Commercial Source

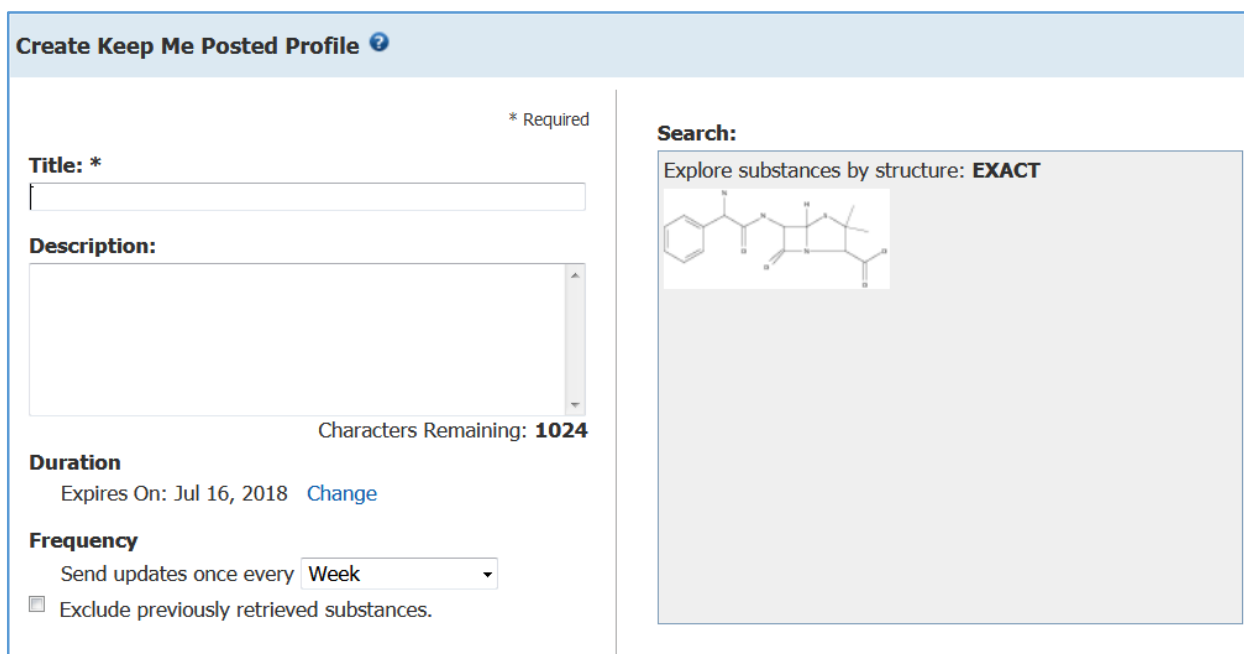
0 of 73 Commercial Sources Selected

Commercial Source	Substance	Purity	Quantity	Purchasing Details	Stock Status	Ships Within
1. 1717 CheMall Product List United States Set Preference	69-53-4 AMPICILLIN	95-98%	Kilograms or greater	1kg, USD 1382.40 Bulk	Typically in stock	2 weeks
2. 1717 CheMall Product List United States Set Preference	69-53-4 AMPICILLIN	95-98%	Grams	250g, USD 360.00 500g, USD 705.60 Bulk	Typically in stock	2 weeks
3. 5A Pharmatech Product List China Set Preference	69-53-4 (2S,5R,6R)-6-[(R)-2-Amino-2-phenylacetamido]-3,3-dimethyl-7-oxo-4-thia-1-azabicyclo[3.2.0]heptane-2-carboxylic acid	95-98%			Typically in stock	
4. A Chemtek Product List United States Set Preference	69-53-4 Ampicillin	95-98%			Intermittently available	
5. abcr GmbH Product List Germany Set Preference	69-53-4 Ampicillin	95-98%	Grams	5.0 g, EUR 58.40 25.0 g, EUR 176.40		
6. AbovChem AbovChem Product List United States	69-53-4 Ampicillin	95-98%	Grams	1g, USD 95	Maintained in stock	1 week

شکل ۳-۱۲

۴- Tools: با استفاده از این گزینه می توان با توجه به شرایط جستجو نتایج حاصله را با هم مقایسه کرد و یا به پاک کردن سند های مشابه پرداخت.

۵- Create Keep Me posted Alert: با استفاده از این گزینه می توان با استفاده از ذخیره جستجو، از هرگونه تغییرات و آپدیت سند به صورت هفتگی یا ماهانه مطلع شد. همانطور که در شکل ۳-۱۳ مشاهده می کنید تاریخ لغو و انقضا این جستجو نیز قابل تغییر است. در قسمت پایین نیز می توان با زدن تیک، ترکیباتی که قبلا بازیابی شده اند را حذف کرد.



Create Keep Me Posted Profile ⓘ

* Required

Title: *

Description:

Characters Remaining: **1024**

Duration
Expires On: Jul 16, 2018 [Change](#)

Frequency
Send updates once every **Week**

Exclude previously retrieved substances.

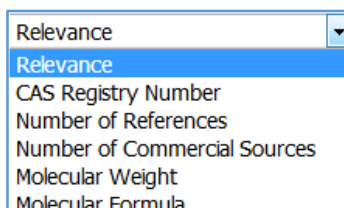
Search:
Explore substances by structure: **EXACT**

CC1(C)C(=O)N2C(=O)C(=O)N(C2)C1

شکل ۳-۱۳

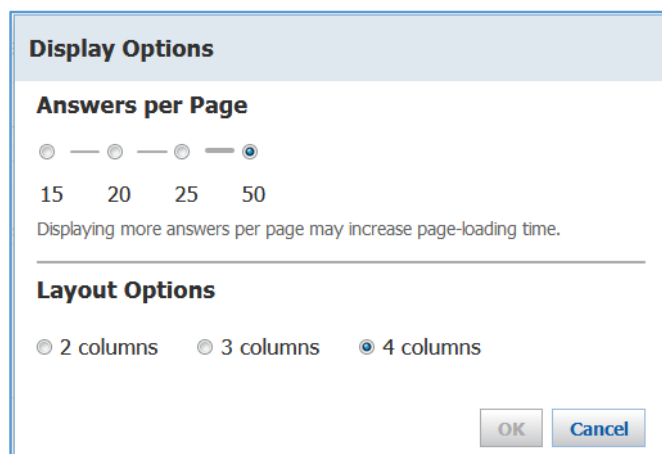
۶- Send to SciPlanner: با استفاده از این گزینه می توان ترکیب و یا واکنش مورد نظر را در محیط پویا و جذاب SciPlanner ترسیم کرد که در ادامه به توضیح کامل آن خواهیم پرداخت.

۷- Sort by: همچنین می توان اطلاعات بازیابی شده را بر اساس مرتبط بودن، CAS Registry No.، تعداد رفرنس ها، تعداد منابع تجاری، جرم و فرمول مولکولی مطابق شکل ۳-۱۴ از بالا به پایین و برعکس مرتب کرد.



شکل ۳-۱۴

۸- Display Options: در این قسمت نیز می توان نمایش نتایج حاصله در ستون های ۲ تا ۴ تایی و همچنین تعداد ۱۵ تا ۵۰ در هر صفحه مرتب کرد.



شکل ۳-۱۵

همانگونه که در قسمت رفرنس نیز بیان شد در باکس سمت چپ قسمتی به نام Analyze و Refine وجود دارد که می توان اطلاعات را به سمت هدف مورد نظر محدود کرد که در فصل مربوط به این موارد به آن خواهیم پرداخت.

۳-۱-۶- انتخاب یک ترکیب و بررسی ویژگی های آن:

Chemical Structure exact > substances (324) > refine "exact" (34) > 69-53-4

SUBSTANCE DETAIL | Get References | Get Reactions | Get Commercial Sources

Return

1. CAS Registry Number 69-53-4

C16H19N3O4S

4-Thia-1-azabicyclo[3.2.0]heptane-2-carboxylic acid, 6-[[[(2R)-2-amino-2-phenylacetyl]amino]-3,3-dimethyl-7-oxo-, (2S,5R,6R)-

Molecular Weight
349.40

Melting Point (Experimental)
Value: 202 °C (decomp)

Boiling Point (Predicted)
Value: 683.9±55.0 °C | Condition: Press: 760 Torr

Density (Predicted)
Value: 1.45±0.1 g/cm3 | Condition: Temp: 20 °C Press: 760 Torr

pKa (Predicted)
Value: 2.44±0.50 | Condition: Most Acidic Temp: 25 °C

Other Names
4-Thia-1-azabicyclo[3.2.0]heptane-2-carboxylic acid, 6-(2-amino-2-phenylacetamido)-3,3-dimethyl-7-oxo-, D-(-)- (8CI)
4-Thia-1-azabicyclo[3.2.0]heptane-2-carboxylic acid, 6-(D-2-amino-2-phenylacetamido)-3,3-dimethyl-7-oxo- (7CI)
4-Thia-1-azabicyclo[3.2.0]heptane-2-carboxylic acid, 6-[[aminophenylacetyl]amino]-3,3-dimethyl-7-oxo-, [2S-[20,50,60(5*)]]-
4-Thia-1-azabicyclo[3.2.0]heptane-2-carboxylic acid, 6-[[[(2R)-aminophenylacetyl]amino]-3,3-dimethyl-7-oxo-, (2S,5R,6R)- (9CI)
(2S,5R,6R)-6-[[[(2R)-2-Amino-2-phenylacetyl]amino]-3,3-dimethyl-7-oxo-4-thia-1-azabicyclo[3.2.0]heptane-2-carboxylic acid

Absolute stereochemistry.

شکل ۳-۱۶

به عنوان مثال همانطور که در شکل ۳-۱۶ مشاهده می کنید، ترکیب مورد نظر به صورت خالص آنانتیومری انتخاب شده است.

اطلاعات مربوط به هر ترکیب با CAS Registry No. در بالای صفحه شروع می شود.

سپس سه گزینه مربوط به منابع تجاری، واکنش ها و ترکیبات مرتبط در شکل ۳-۱۷ قابل مشاهده هستند.



شکل ۳-۱۷

جرم مولکولی، نقطه ذوب (در صورت گزارش نشدن در لیترچر به صورت پیش بینی شده)، نقطه جوش، چگالی، pKa و نام های دیگر موجود برای ترکیب مورد نظر، نمایش داده شده است.

۳-۱-۶-۱- بررسی باکس های آنالیز ترکیب:

Expand All Collapse All	
▶ EXPERIMENTAL PROPERTIES	
▶ EXPERIMENTAL SPECTRA	
▶ PREDICTED PROPERTIES	
▶ PREDICTED SPECTRA	
▶ REGULATORY INFORMATION	
▶ BIOACTIVITY INDICATORS	
▶ TARGET INDICATORS	
▶ CAS REFERENCE ROLES	
▶ ADDITIONAL DETAILS	

◀ Previous | Next ▶

شکل ۳-۱۸

در ادامه مطابق شکل ۳-۱۸ برای هر ترکیب اطلاعاتی بسیار جامع و کاربردی وجود دارد که به توضیح آن میپردازیم.

- **Experimental Properties:** در این قسمت ویژگی های ترکیب از قبیل ویژگی های زیستی مانند نیمه عمر و ...، ویژگی های شیمیایی مانند قدرت اسیدی و بازی و حلالیت و ...، **Lipinski**، ویژگی های نوری و پراکندگی نور مانند قدرت چرخش نوری، خواص مربوط به ساختار مورد نظر مانند **X-Ray** و خواص گرمایی مانند آنتالپی، انتروپی و ... قابل مشاهده است.

EXPERIMENTAL PROPERTIES

Biological	Chemical	Lipinski	Optical and Scattering	Structure Related	Thermal
Biological Properties					
ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion)	See full text				1 of 10 (2)CAS
Half-Life (Biological)	See full text				1 of 8 (6)CAS
Median Lethal Dose(LD50)	82500 mg/kg			Organism: 3-5-day-old checks Route: oral	(12)CAS
Median Lethal Dose(LD50)	3750 mg/kg			Organism: rat Route: intravenous	(13)CAS
Median Lethal Dose(LD50)	3250 mg/kg			Organism: mouse Route: intraperitoneal	(14)CAS
Median Lethal Dose(LD50)	2250 mg/kg			Organism: mouse Route: intravenous	(15)CAS
Minimum Inhibitory Concentration	See full text				1 of 221 (3)CAS
NOAEL/LOAEL	See full text				(25)CAS
Notes					
(2) Ng, Chee; Journal of Pharmaceutical Sciences 2004, V93(10), P2535-2544 CAPLUS					
(3) Thumar, Nilesh J.; Archiv der Pharmazie (Weinheim, Germany) 2011, V344(2), P91-101 CAPLUS					
(6) Huang, Cheng Zhi; Analytical and Bioanalytical Chemistry 2005, V382(1), P85-90 CAPLUS					
(12) Marchenko, N. S.; Veterinariya (Moscow, Russian Federation) 1976, (10), P42-4 CAPLUS					
(13) Bachev, S.; Suvremenna Meditsina 1974, V25(7), P28-32 CAPLUS					
(14) Germane, S.; Eksperimental'naya i Klinicheskaya Farmakoterapiya 1980, V9, P83-90 CAPLUS					
(15) Veis, R. A.; Antibiotki (Moscow) 1967, V12(8), P698-702 CAPLUS					
(25) Fujita, Mai; Microbiology and Immunology 2005, V49(4), P391-396 CAPLUS					

شکل ۱۹-۳

در هر مورد اسناد مرتبط با آن نیز در زیر آن در قسمت Notes نمایش داده شده است.

- **Experimental Spectra:** در این بخش نیز همانگونه که در شکل ۳-۲۰ مشاهده می کنید اطلاعات مربوط به طیف های ترکیب قابل مشاهده است که شامل $^1\text{H-NMR}$, $^{13}\text{C-NMR}$, Hetro NMR که مربوط به طیف دو بعدی است، IR, Mass, UV-Visible و طیف CD ترکیب مورد نظر است.

EXPERIMENTAL SPECTRA

$^1\text{H NMR}$	$^{13}\text{C NMR}$	Hetero NMR	IR	Mass	UV and Visible	Additional Spectra
IR Properties						
IR Absorption Spectrum	See spectrum					(7)AIST
IR Absorption Spectrum	See spectrum					(7)AIST
IR Absorption Spectrum	See spectrum					(8)BIORAD
IR Absorption Spectrum	See spectrum					(8)BIORAD
IR Absorption Spectrum	See spectrum					(8)BIORAD
IR Absorption Spectrum	See full text				1 of 5	(3)CAS
Notes						
(3) Thumar, Nilesh J.; Archiv der Pharmazie (Weinheim, Germany) 2011, V344(2), P91-101 CAPLUS						
(7) AIST: Integrated Spectral Database System of Organic Compounds. (Data were obtained from the National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (Japan))						
(8) BIORAD: Infrared spectral data from the Bio-Rad/Sadtler IR Data Collection was obtained from Bio-Rad Laboratories, Philadelphia, PA (US). Copyright © Bio-Rad Laboratories. All Rights Reserved.						

شکل ۲۰-۳

- **Predicted Properties:** در صورت در دسترس نبودن و عدم دستیابی اطلاعات، خواص آزمایشگاهی ترکیب مورد نظر به صورت پیش بینی شده با نرم افزار نیز قابل مشاهده است که بسیار در صرفه جویی در وقت ضروری است و می توان اطلاعات آن را جهت تایید صحت در انجام آزمایش یا در صورت دسترس نبودن اطلاعات تجربی مورد استفاده قرار داد.

نرم افزار مورد استفاده Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02 است.

▼ PREDICTED PROPERTIES

Biological	Chemical	Density	Lipinski	Structure Related	Thermal
Biological Properties					
		Value		Condition	Note
		Bioconcentration Factor	1.0	pH 1 Temp: 25 °C	(34)
		Bioconcentration Factor	1.0	pH 2 Temp: 25 °C	(34)
		Bioconcentration Factor	1.0	pH 3 Temp: 25 °C	(34)
		Bioconcentration Factor	1.0	pH 4 Temp: 25 °C	(34)
		Bioconcentration Factor	1.0	pH 5 Temp: 25 °C	(34)
		Bioconcentration Factor	1.0	pH 6 Temp: 25 °C	(34)
		Bioconcentration Factor	1.0	pH 7 Temp: 25 °C	(34)
		Bioconcentration Factor	1.0	pH 8 Temp: 25 °C	(34)
		Bioconcentration Factor	1.0	pH 9 Temp: 25 °C	(34)
		Bioconcentration Factor	1.0	pH 10 Temp: 25 °C	(34)
Notes					
(34) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02 (© 1994-2017 ACD/Labs)					

شکل ۳-۲۱

- **Predicted Spectra:** در این بخش نیز اطلاعات طیفی به صورت پیش بینی شده با نرم افزار ACD Labs نمایش داده شده که این کار برای صرفه جویی در زمان و بررسی اطلاعات آزمایشگاهی بسیار ضروری است.

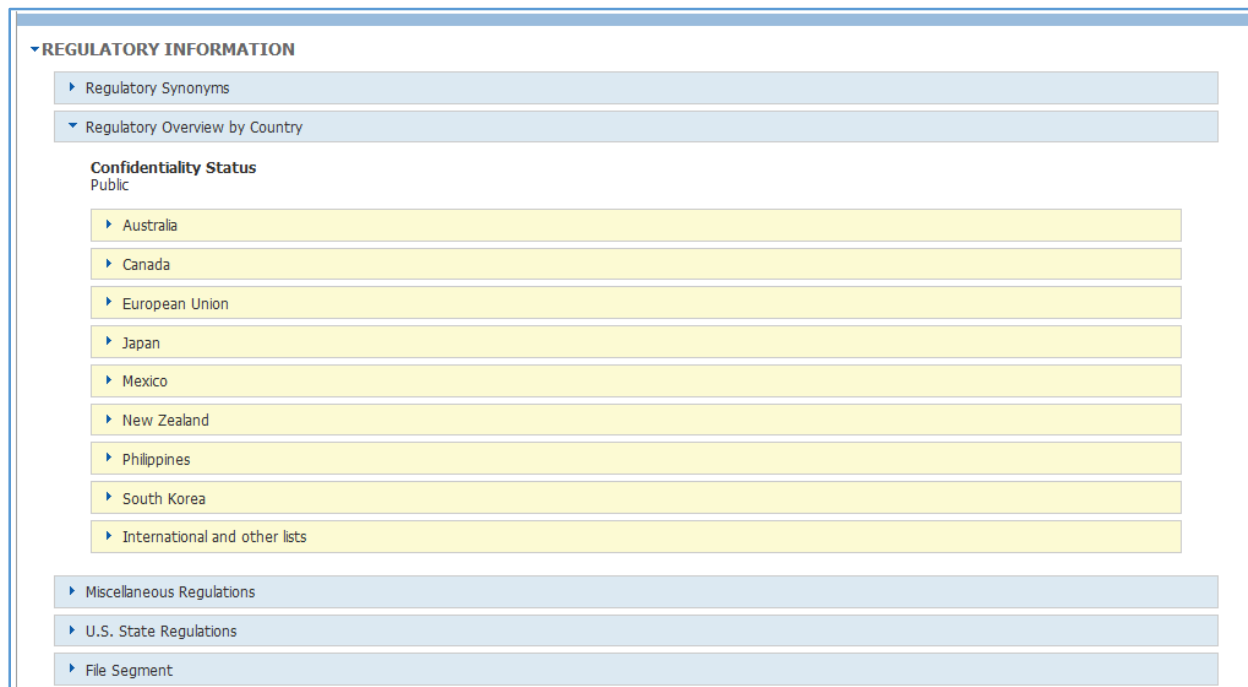
▼ PREDICTED SPECTRA

¹ H NMR	¹³ C NMR		
¹H NMR Properties			
	Value	Condition	Note
	Proton NMR Spectrum	See spectrum	(35)
Notes			
(35) Predicted NMR data calculated using Advanced Chemistry Development, Inc. (ACD/Labs) Software V11.01 (© 1994-2017 ACD/Labs)			

شکل ۳-۲۲

با کلیک بر روی See Spectrum که به رنگ آبی نمایش داده شده، می توان طیف مورد نظر را مشاهده کرد.

- **Regulatory Information:** در این بخش امکان بررسی هر ترکیب در Patent های موجود در سراسر جهان وجود دارد.



شکل ۳-۲۳

ابتدا نام های دیگر ترکیب که در همه Patent ها در سراسر جهان ثبت شده قابل مشاهده است و سپس اطلاعات مربوط به دسترسی آن سند قابل دستیابی است. هر ترکیب با هر شماره و نشانی در سراسر جهان ثبت شده است در این قسمت قابل بازیابی است که این بخش بسیار می تواند برای محققین کاربردی و سودمند باشد چون با جستجو یک ترکیب در یک Patent، امکان مشاهده دیگر اسناد برای آن نیز وجود خواهد داشت.

- **Bioactivity Indicator**: این بخش شامل شاخص های بیولوژیکی است که این شاخص ها به صورت دسته بندی شده نشان داده شده اند.

▼ BIOACTIVITY INDICATORS	
Indicators	References
Anti-infective agents (all) > > > Antibacterial agents	1821
Anti-infective agents (all) > > Antibiotics	4040
Anti-infective agents (all) > Anti-infective agents	95
Anti-infective agents (all) > > Antimicrobial agents	820
Anti-infective agents (all) > > Antimicrobial peptides	56
Anti-infective agents (all) > > > Antiviral agents	133
Anti-infective agents (all) > Disinfectants	92
Anti-infective agents (all) > > Fungicides	262
Anti-infective agents (all) > > > Tuberculostatics	53
Anti-inflammatory agents (all) > Anti-inflammatory agents	197
Anti-inflammatory agents (all) > Nonsteroidal anti-inflammatory drugs	75
Antitumor agents (all) > Antitumor agents	127
Natural products, pharmaceutical	94
Nervous system agents (all) > > > Analgesics	58

شکل ۳-۲۴

همانطور که در شکل ۳-۲۴ مشاهده می کنید شاخص هایی مانند آنتی بیوتیک با تعداد ۴۰۴۰ سند بیشترین تعداد را دارد. با کلیک روی هر شاخص می توان هر گروه از اسناد را مشاهده کرد.

- **Target Indicator**: این بخش شامل شاخص های هدف در فعالیت های بیولوژیکی است که همانگونه که در این مثال مشخص است، آنزیم و بتالاکتام که حلقه ی تشکیل دهنده Ampicillin است، بیشترین سند را نشان میدهد.

- CAS Reference Roles: در این بخش نقش های ترکیب مورد نظر در لیتراچر قابل مشاهده است که به عنوان مثال می توان به مطالعات تجزیه ای روی ترکیب، مطالعات بیولوژیکی و کاربرد های دیگر آن اشاره کرد.

CAS REFERENCE ROLES				
Roles	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study	✓	✓	✓	✓
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Combinatorial Study	✓			
Formation, Nonpreparative	✓	✓	✓	✓
Miscellaneous	✓	✓		
Occurrence	✓	✓		
Preparation	✓	✓	✓	✓
Process	✓	✓	✓	✓
Properties	✓	✓	✓	
Prophetic in Patents	✓		✓	
Reactant or Reagent	✓	✓	✓	✓
Uses	✓	✓	✓	✓

شکل ۳-۲۵

- Additional Details: در این بخش منبع اطلاعات بدست آمده و منبع ثبت این اطلاعات مشخص شده است.

۳-۱-۷- جستجوی ساختار به صورت SubStructure

پس از جستجوی ترکیب آنتی بیوتیک بتا لاکتام Ampicillin به صورت Exact Search، آن را به صورت Substructure جستجو میکنیم و با زدن تیک مربوط به Show Precision analysis، جستجو را ادامه میدهیم که مطابق با شکل ۳-۲۶ است.

0 of 4 Precision Candidates Selected		Substances
<input type="checkbox"/>	Conventional Substructure	11857
<input type="checkbox"/>	Closely Associated Tautomers and Zwitterions	38
<input type="checkbox"/>	Loosely Associated Tautomers and Zwitterions	2
<input type="checkbox"/>	Other	9

شکل ۳-۲۶

نتیجه به ۴ صورت کاملا مشابه، ساختار بسیار مشابه، ساختار های با مطابقت کمتر و غیره مطابق شکل ۳-۲۶ نشان داده می شود.

۳-۱-۸- جستجوی ساختار به صورت Similarity

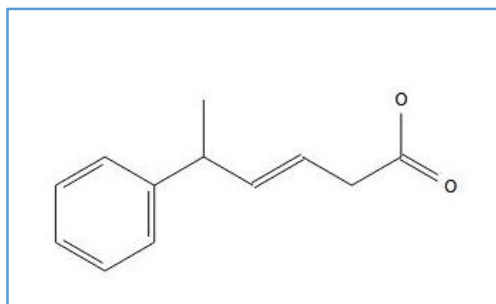
در جستجوی همین ترکیب به صورت Similarity نتیجه مطابق شکل ۳-۲۷ با درصد مشابهت نمایش داده می شود.

0 of 9 Similarity Candidates Selected	Substances
<input type="checkbox"/> ≥ 99 (most similar)	324
<input type="checkbox"/> 95-98	1109
<input type="checkbox"/> 90-94	264
<input type="checkbox"/> 85-89	914
<input type="checkbox"/> 80-84	2329
<input type="checkbox"/> 75-79	5363
<input type="checkbox"/> 70-74	7703
<input type="checkbox"/> 65-69	11503
<input type="checkbox"/> 0-64 (least similar)	16687

شکل ۳-۲۷

۳-۱-۹- رسم ساختار و استفاده از ابزار ها به منظور مقایسه نتیجه

به منظور مقایسه بهتر و بیشتر و کار با ابزار های رسم به صورت کاربردی تر، ترکیب زیر به صورت Substructure جستجو شد است.



شکل ۳-۲۸

در این جستجو تعداد ۱۳۳۸۰۴ نتیجه بدست آمده است.

Chemical Structure substructure > substances (133804)

Get References Get Reactions Get Commercial Sources Tools

Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

Analyze Refine

Sort by: Relevance

0 of 133804 Substances Selected

Page: 1 of 8921

Sample Analysis: Substance Role

Preparation ≥ 16673

Uses ≥ 12886

Biological Study ≥ 12828

Prophetic in Patents ≥ 11759

Reactant or Reagent ≥ 1734

Properties ≥ 1227

Process ≥ 274

Analytical Study ≥ 86

Formation, Nonpreparative ≥ 67

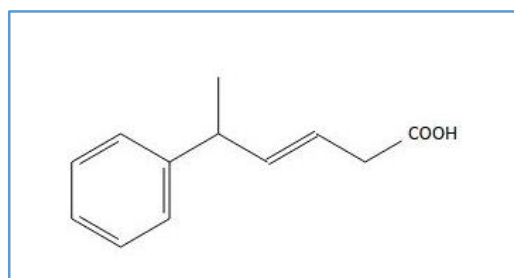
Occurrence ≥ 29

Show More

<p>1. 352641-70-4</p> <p>$C_{12} H_{14} O_2$ 3-Hexenoic acid, 5-phenyl- ▶ Key Physical Properties</p>	<p>2. 1072809-77-8</p> <p>$C_{12} H_{14} O_2$ 3-Hexenoic acid, 5-phenyl-, (3Z)- ▶ Key Physical Properties</p>	<p>3. 2089283-30-5</p> <p>$C_{15} H_{20} O_2$ 3-Hexenoic acid, 5-[3-(1-methylethyl)phenyl]-, (3E)- ▶ Key Physical Properties</p>
<p>4. 211423-68-6</p> <p>$C_{13} H_{16} O_2$ 2-Hexenoic acid, 2-methyl-5-phenyl- ▶ Key Physical Properties</p>	<p>5. 219998-03-5</p> <p>$C_{13} H_{16} O_2$ 2-Hexenoic acid, 2-methyl-5-phenyl-, (2E)- ▶ Key Physical Properties</p>	<p>6. 219998-01-3</p> <p>$C_{12} H_{14} O_2$ 2-Hexenoic acid, 5-phenyl-, (2E)- ▶ Key Physical Properties</p>

شکل ۳-۲۹

حال با استفاده از Shortcuts ساختار را به صورت ساختار بسته کربوکسیل رسم میکنیم.



شکل ۳-۳۰

نتیجه به تعداد ۱۶۶۲۶ سند تغییر کرد که در نتیجه تعیین گروه عاملی کربوکسیل به جای ساختار باز COO است.

Chemical Structure substructure > substances (16626)

Get References Get Reactions Get Commercial Sources Tools

Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

Analyze Refine

Sort by: Relevance

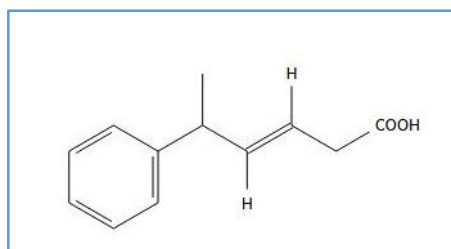
0 of 16626 Substances Selected

Page: 1 of 1109

<p>1. 352641-70-4</p> <p>$C_{12}H_{14}O_2$ 3-Hexenoic acid, 5-phenyl- ▶ Key Physical Properties</p>	<p>2. 1072809-77-8</p> <p>$C_{12}H_{14}O_2$ 3-Hexenoic acid, 5-phenyl-, (3Z)- ▶ Key Physical Properties</p>	<p>3. 2089283-30-5</p> <p>$C_{15}H_{20}O_2$ 3-Hexenoic acid, 5-[3-(1-methylethyl)phenyl]-, (3E)- ▶ Key Physical Properties</p>
<p>4. 211423-68-6</p> <p>$C_{13}H_{16}O_2$ 2-Hexenoic acid, 2-methyl-5-phenyl- ▶ Key Physical Properties</p>	<p>5. 219998-03-5</p> <p>$C_{13}H_{16}O_2$ 2-Hexenoic acid, 2-methyl-5-phenyl-, (2E)- ▶ Key Physical Properties</p>	<p>6. 219998-01-3</p> <p>$C_{12}H_{14}O_2$ 2-Hexenoic acid, 5-phenyl-, (2E)- ▶ Key Physical Properties</p>

شکل ۳-۳۱

بار دیگر با قرار دادن گروه های هیدروژن روی باند دوگانه مانع از قرار دادن استخلاف روی این باند شده و جستجو را باز هم محدود میکنیم.



شکل ۳-۳۲

نتایج به تعداد ۱۵۵۵ سند تغییر کرد.



Chemical Structure substructure > substances (1555)

SUBSTANCES

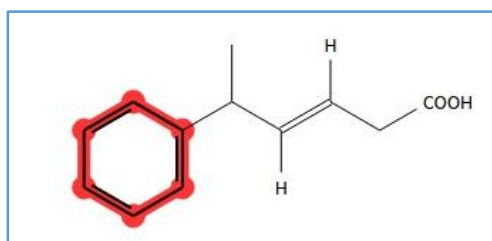
Analyze **Refine** Sort by: Relevance

0 of 1555 Substances Selected Page: 1 of 104

<p>1. 352641-70-4</p> <p>$C_{12}H_{14}O_2$ 3-Hexenoic acid, 5-phenyl-</p> <p>Key Physical Properties</p>	<p>2. 1072809-77-8</p> <p>Double bond geometry as shown.</p> <p>$C_{12}H_{14}O_2$ 3-Hexenoic acid, 5-phenyl-, (3Z)-</p> <p>Key Physical Properties</p>	<p>3. 2089283-30-5</p> <p>Double bond geometry as shown.</p> <p>$C_{15}H_{20}O_2$ 3-Hexenoic acid, 5-[3-(1-methylethyl)phenyl]-, (3E)-</p> <p>Key Physical Properties</p>
<p>4. 211423-68-6</p> <p>$C_{13}H_{16}O_2$ 2-Hexenoic acid, 2-methyl-5-phenyl-</p> <p>Key Physical Properties</p>	<p>5. 219998-03-5</p> <p>Double bond geometry as shown.</p> <p>$C_{13}H_{16}O_2$ 2-Hexenoic acid, 2-methyl-5-phenyl-, (2E)-</p> <p>Key Physical Properties</p>	<p>6. 219998-01-3</p> <p>Double bond geometry as shown.</p> <p>$C_{12}H_{14}O_2$ 2-Hexenoic acid, 5-phenyl-, (2E)-</p> <p>Key Physical Properties</p>

شکل ۳-۳

این تعداد با قفل کردن حلقه مطابق شکل باز هم محدود و محدود تر شده و اطلاعات بازیابی شده را به سمت هدف مورد نظر بیشتر هدایت میکند.



شکل ۳-۴

۸۵۹ نتیجه بدست آمده است که تمامی اصلاحات موجود را شامل می شود.

Chemical Structure substructure > substances (859)

SUBSTANCES

Get References Get Reactions Get Commercial Sources Tools

Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

Analyze Refine

Sort by: Relevance

0 of 859 Substances Selected

Analyze by: Substance Role

Preparation 383

Biological Study 176

Uses 139

Reactant or Reagent 124

Properties 61

Process 18

Formation, Nonpreparative 8

Analytical Study 2

Prophetic in Patents 2

Occurrence 1

Show More

1. 352641-70-4

CC(C)C=C(C)C(=O)O

$C_{12}H_{14}O_2$
3-Hexenoic acid, 5-phenyl-
Key Physical Properties

2. 1072809-77-8

CC(C)C=C(C)C(=O)O

$C_{22}H_{14}O_2$
3-Hexenoic acid, 5-phenyl-, (3Z)-
Double bond geometry as shown.
Key Physical Properties

3. 2089283-30-5

CC(C)C=C(C)C(=O)O

$C_{15}H_{20}O_2$
3-Hexenoic acid, 5-[3-(1-methylethyl)phenyl]-, (3E)-
Double bond geometry as shown.
Key Physical Properties

4. 211423-68-6

CC(C)C=C(C)C(=O)O

$C_{13}H_{16}O_2$
2-Hexenoic acid, 2-methyl-5-phenyl-
Key Physical Properties

5. 219998-03-5

CC(C)C=C(C)C(=O)O

$C_{13}H_{16}O_2$
2-Hexenoic acid, 2-methyl-5-phenyl-, (2E)-
Double bond geometry as shown.
Key Physical Properties

6. 219998-01-3

CC(C)C=C(C)C(=O)O

$C_{12}H_{14}O_2$
2-Hexenoic acid, 5-phenyl-, (2E)-
Double bond geometry as shown.
Key Physical Properties

شکل ۳-۳۵

با تعیین گروه های آمین، سیانید، هالوژن ها و گروه نیترو در موقعیت اورتو و متا و پارا، ساختار به شکل ۳-۳۶ نمایش داده می شود.

R1 = X, CN, NO₂, NH₂

► Atoms

► Variables

▼ Shortcuts

CH CH₂ Me OMe Et OEt Pr-n Pr-i OPr-n

OPr-i Bu-n Bu-i Bu-s Bu-t OBU-n OBU-i

OBU-s OBU-t Ph OPh o-C₆H₄ m-C₆H₄

p-C₆H₄ CF₂ CF₃ CCl₂ CCl₃ CBr₂ CBr₃ Cl₂

Cl₃ CHO CN C(O)CH₃ CO₂H COOH COSH

CS₂H CSSH NH NH₂ NH₃ NO₂ OH OPO₃H₂

OSO₃H PO₃H₂ SH SO₂ SO₃H

CC(C)C=C(C)C(=O)O

R1

شکل ۳-۳۶

شکل ۳-۳۷

۳۴۱ نتیجه در این جستجو بدست آمده است که بیش از پیش نتیجه را به سمت هدف خاص مورد نظر نزدیک کرده است.

۳-۲- Markush

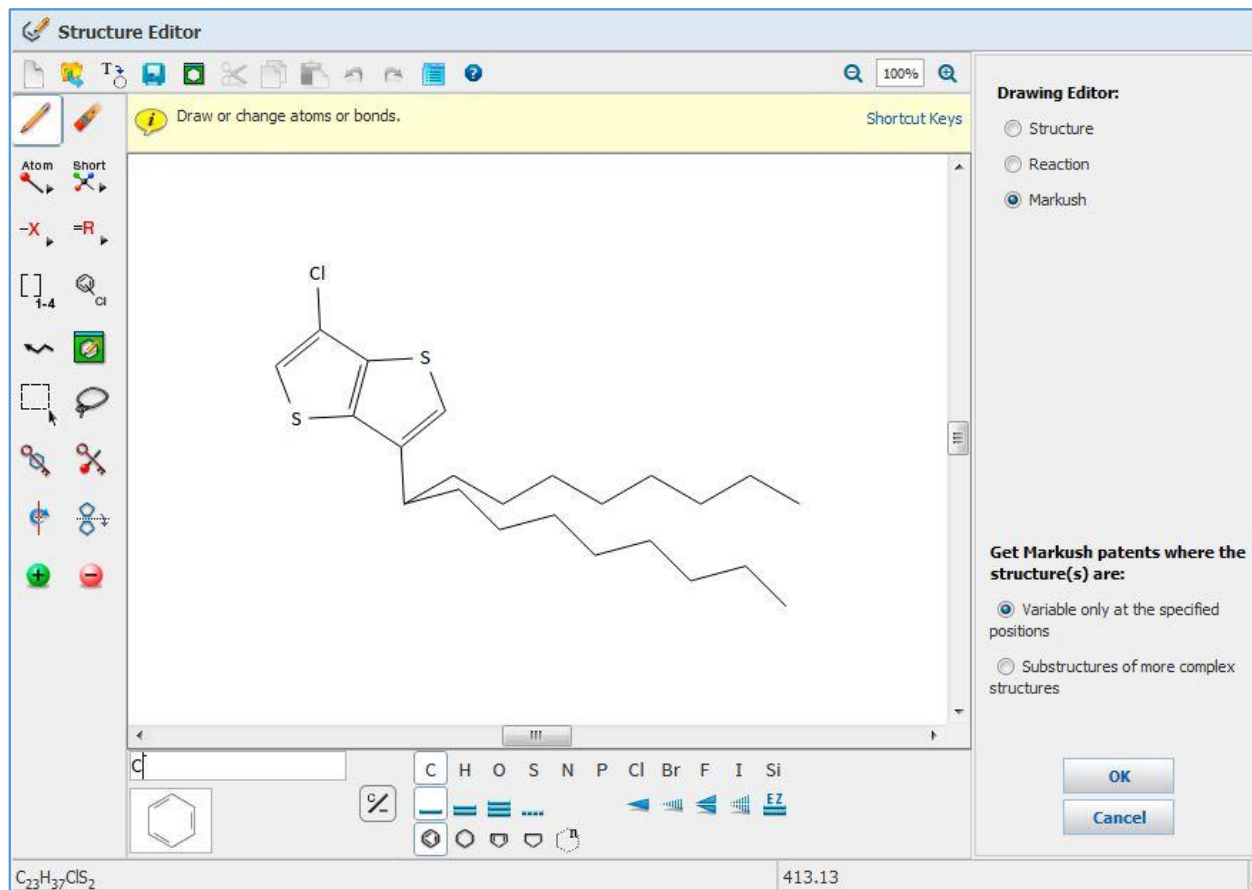
ساختار های Markush به صورت کلی با تعیین گروه های آلکیل و آریل، بیشتر در Patent ها جستجو می شوند. این ساختار ها نمادهای شیمیایی هستند که برای نشان دادن مجموعه ای از مواد شیمیایی با سازه های مشابه استفاده می شود.

ساختار های Markush با گروه های R نمایش داده می شوند و برای حفظ مالکیت معنوی آن سند بدون جزئیات دقیق در Patent ها وجود دارند.

در این جستجو ساختار همانند شیوه های رسم که در قسمت قبل توضیح داده شد، رسم می شود.

۳-۲-۱- رسم ساختار ناشناخته به عنوان ساختار Markush و جستجو به صورت کلی

به عنوان مثال همانطور که در شکل ۳-۳۸ مشاهده می کنید ساختار مورد نظر رسم شده است.



شکل ۳-۳۸

این ساختار در Exact Structure و Substructure هیچ نتیجه ای را بدست نمیدهد چون به عنوان مثال این ساختار با این گونه استخلاف ها در لیترچر ثبت نشده است.

دو شیوه برای جستجو در Markush وجود دارد:

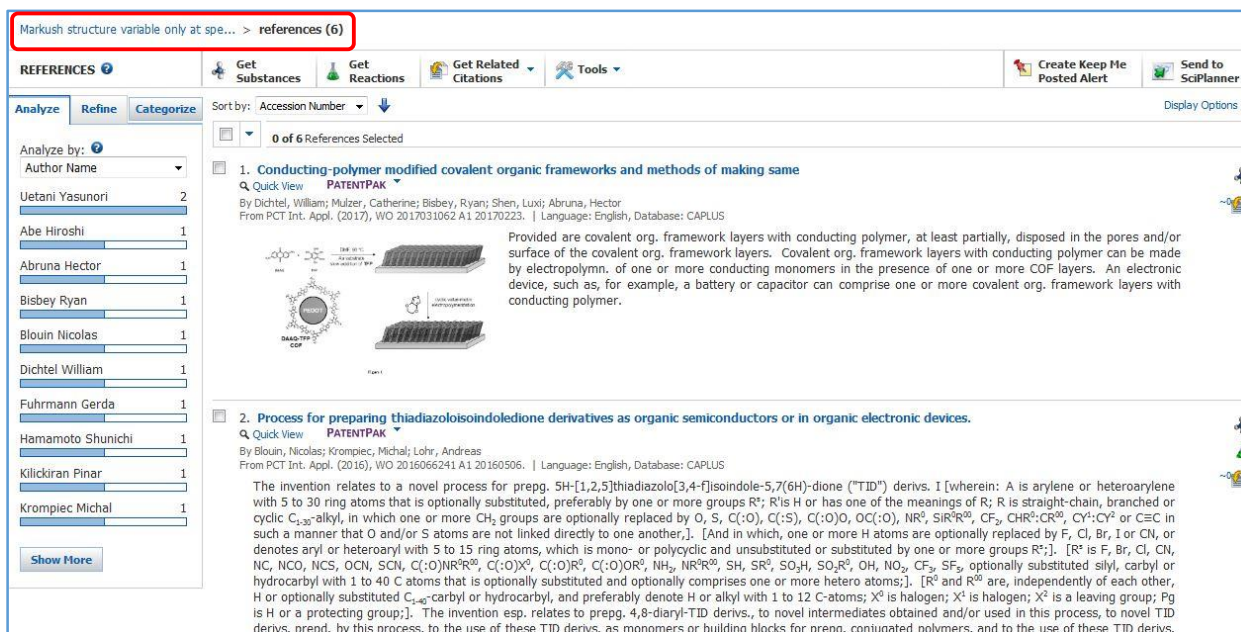
Search Type:

- Allow variability only as specified
- Substructure

شکل ۳-۳۹

- **Allow variability only as specified**: که فقط اجازه تغییر های مشخص شده را با توجه به ساختار مورد نظر میدهد.

در این جستجو ۶ سند بازیابی شد که در اینجا قابل توجه است. نتیجه مطابق شکل ۳-۴۰ نمایش داده می شود.



شکل ۳-۴۰

Search Type:

- Allow variability only as specified
- Substructure

شکل ۲-۴۰

- **Substructure**: در این شیوه از جستجو فقط به ساختار کلی توجه کرده و با حفظ ساختار کلی اجازه هر تغییری در استخلاف ها و ساختار را میدهد.

در این جستجو مطابق شکل ۲۹ سند بایابی شد.

Markush substructure > references (29)

REFERENCES

Get Substances Get Reactions Get Related Citations Tools

Create Keep Me Posted Alert Send to SciFinder

Analyze Refine Categorize

Sort by: Accession Number

0 of 29 References Selected

1. Preparation of dithienenzodithiophene (DTBDT) deriv. for organic semiconductor and organic solar cell

Quick View PATENTPAK

By Kim, Yun Hui; Kwon, Sun Gi; Sung, Min Jae
From Repub. Korean Kongkae Taeho Kongbo (2017), KR 2017026190 A 20170308. | Language: Korean, Database: CAPLUS

Dithienenzodithiophene (DTBDT) deriv. I [Z¹-Z² = independently S, O, Se; V¹ = CH(A³);C(A³)(A²); A¹-A³ = independently H, CN, COOR⁸, etc.; R² = H, C₁-C₂₀ alkyl; R¹-R⁶ = independently H, C₁-C₂₀ alkoxy, C₆-C₂₀ aryl, etc.; R⁷, R⁸ = independently (hetero)aryl] was prepd. for an org. semiconductor compd. and an org. solar cell. The org. solar cell employing I has high efficiency with high open-circuit voltage and high c.d. For example, II was prepd. and it was tested for org. solar cell.

I

Q =

شکل ۳-۴۱

PatentPak - ۲-۲-۳

همانطور که در شکل ۳-۴۲ نشان داده شده است با کلیک بر روی PatentPak قادر خواهید بود به متن کامل Patent دسترسی پیدا کنید.

PATENTPAK
A CAS SOLUTION

PAGE 1 / 97 ZOOM DOWNLOAD PDF

Key Substances in Patent

CAS RN 126213-50-1

Search in SciFinder | View Detail

Analyst Markup Locations (1)
page 34

CAS RN 34374-88-4
OH

(12) INTERNATIONAL APPLICATION PUBLISHED UNDER THE PATENT COOPERATION TREATY (PCT)
(19) World Intellectual Property Organization
International Bureau

(10) International Publication Number
WO 2017/031062 A1

(43) International Publication Date
23 February 2017 (23.02.2017)

(51) International Patent Classification:
H01G 11/48 (2013.01) H01M 8/102 (2016.01)
H01H 13/785 (2006.01)

(81) Designated States (unless otherwise indicated, for every kind of national protection available): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GM, GT,

شکل ۳-۴۲

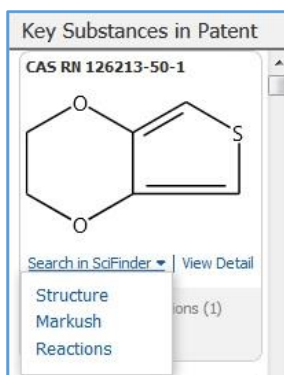
در PatentPak در باکس بالا امکان تغییر صفحه، بزرگ نمایی متن و دانلود Patent به دو صورت قابل مشاهده است.



شکل ۳-۴۳

- دانلود سند همانگونه که در PatentPak مشاهده می شود که مواد به صورت نشانه گذاری شده مشخص شده اند.
- دانلود سند بدون نشانه گذاری (سند اصلی)

در باکس سمت چپ ترکیبات مختلفی که در این سند نشانه گذاری شد، مطابق شکل ۳-۴۴ مشخص شده اند.



شکل ۳-۴۴

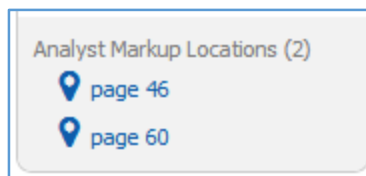
در هر مورد اطلاعات هر ترکیب نیز قابل بازیابی است.

همانطور که در شکل ۳-۴۴ میبینید در هر ترکیب اطلاعات زیر قابل مشاهده است :

- Search in SciFinder: می توان با کلیک روی این گزینه ترکیب مورد نظر را که در سند ثبت شده، به سه صورت Substance، Reaction، و ساختارهای Markush جستجو کرد.

• **View Detail**: با کلیک روی این گزینه اطلاعات مربوط به سند مورد نظر نمایش داده شده و می توان در مورد ترکیب مورد نظر اطلاعات کافی را بدست آورد.

در زیر هر کدام مکان هایی که ترکیب در هر صفحه نوشته شده است مشخص شده که به صورت نشانه گذاری قابل شناسایی هستند.



شکل ۳-۴۵

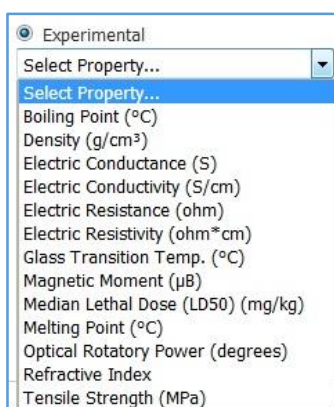
۳-۳- Molecular Formula

در این شیوه از جستجو همانگونه که در مثال زیر باکس جستجو مشخص شده، فرمول بسته ترکیبات می تواند جستجو شوند که این شیوه کاربردی برای جستجوی پلیمر هاست که در ادامه به آن خواهیم پرداخت.

۳-۴- Property

در این شیوه از جستجو می توان با استفاد از خصوصیات ترکیبات به دو صورت زیر عمل کرد:

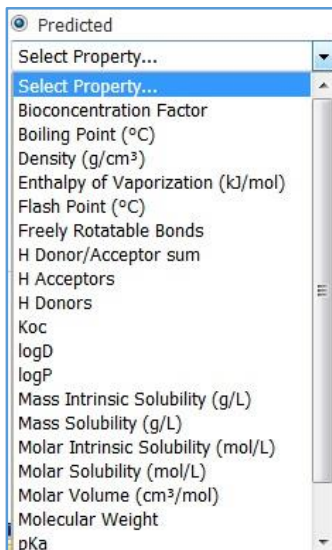
Experimental: خواص آزمایشگاهی مطابق شکل ۳-۴۶ شامل موارد زیر است.



شکل ۳-۴۶

- Predicted: در این شیوه از جستجو با استفاده از خواص پیش بینی شده ترکیب مطابق شکل ۳-۴۷ می توان

به جستجو پرداخت.

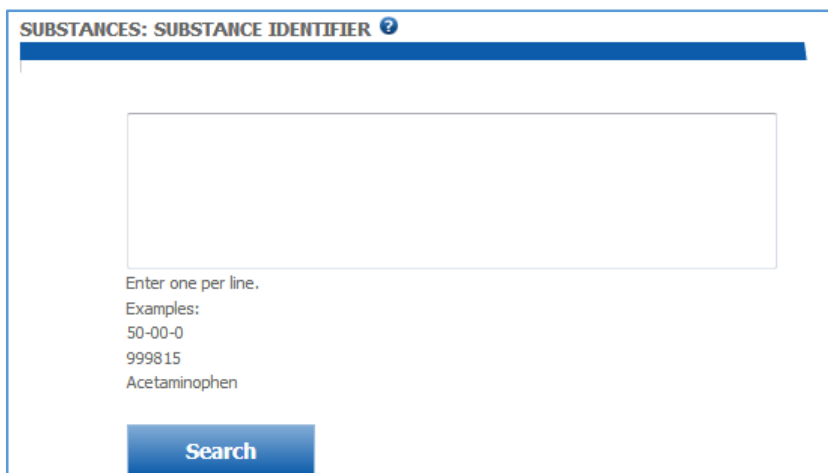


شکل ۳-۴۷

Substance Identifier – ۳-۵

- در این شیوه از جستجو مطابق شکل ۳-۴۸ امکان جستجو نام ترکیب به صورت لاتین و با شناسه CAS No. وجود

دارد.



The image shows a web interface for 'SUBSTANCES: SUBSTANCE IDENTIFIER'. It features a large text input field for entering search terms. Below the field, there is a 'Search' button. The interface also includes instructions: 'Enter one per line.' and 'Examples: 50-00-0, 999815, Acetaminophen'.

شکل ۳-۴۸

۳-۵-۱- جستجو ساختار میدازولام در Substance Identifier و ابزار های مربوطه

به عنوان مثال Midazolam که ترکیبی آرام بخش دارای حلقه بنزودیازپین (benzodiazepine) جستجو شد که نتیجه مطابق شکل ۳-۴۹ بدست آمده است.

The screenshot displays the Substance Identifier search results for "midazolam". The interface includes a search bar, navigation tabs for "SUBSTANCES", "Get References", "Get Reactions", and "Get Commercial Sources", and a "Tools" dropdown. The search results are sorted by "CAS Registry Number". The first result is "1. 59467-70-8", which is identified as "4# Imidazo[1,5-a][1,4]benzodiazepine, 8-chloro-6-(2-fluorophenyl)-1-methyl-". The chemical structure is shown, and the molecular formula is given as $C_{18}H_{13}ClFN_3$. Below the structure, there are links for "Key Physical Properties", "Regulatory Information", "Spectra", and "Experimental Properties".

شکل ۳-۴۹

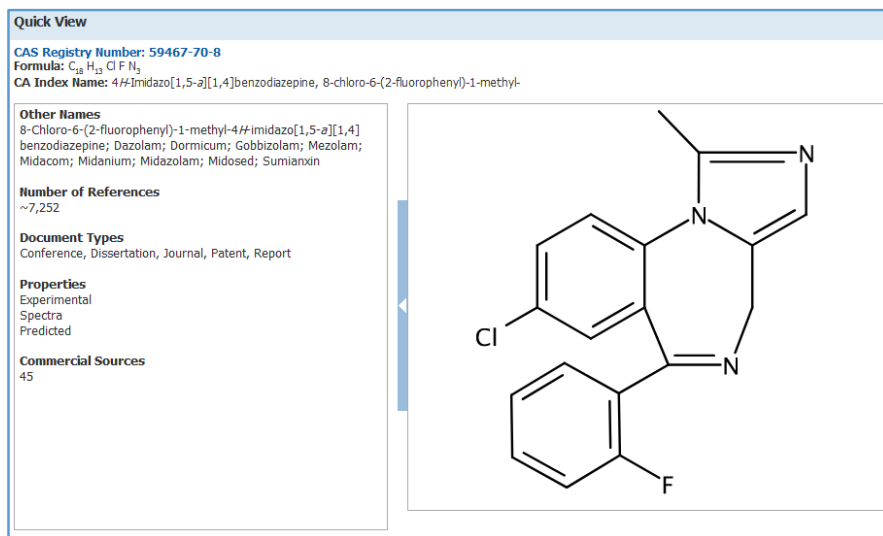
با کلیک بر روی شناسه ترکیب می توان کلیه اطلاعات موجود را در مورد این ماده بدست آورد که در قسمت های قبل به طور کامل به آن اشاره شده است.

همانگونه که در شکل ۳-۵۰ مشخص است با کلیک روی گوشه ساختار اطلاعاتی برای جستجوی بهتر قابل مشاهده است.

شکل ۳-۵۰

- View Substance Detail: مشاهده جزئیات ترکیب
- Explore by Structure: جستجو روی ساختار که خود به سه شیوه است:
 - Chemical Structure: جستجو به عنوان ترکیب شیمیایی
 - Markush Patents by Structure: جستجو به صورت Markush با ساختار کلی در Patent ها
 - Reactions: جستجو ترکیب در واکنش ها
- Synthesize this...: این یکی از ابزارهای کاربردی در جستجو است که با استفاده از نام ترکیب می توان ترکیب مورد نظر را سنتز کرد و تمامی واکنش های منجر شده به سنتز این ترکیب را مشاهده کرد.
- Get Reactions where Substance is: جستجو ترکیب مورد نظر درحالی که نقش محصول، واکنشگر، واکنش دهنده، کاتالیت، حلال یا هر نقش دیگری را داشته باشد.

- **Get commercial Source**: جستجو منابع تجاری برای دسترسی و خرید ترکیب مورد نظر
 - **Get Regulatory Information**: جستجو در دیگر Patent های موجود در سراسر جهان، حتی با نام های دیگر از این ترکیب
 - **Get Reference**: جستجو ترکیب در اسناد و رفرنس ها
 - **Export as Image**: ذخیره ساختار به عنوان عکس
 - **Export as molfile**: ذخیره ساختار با پسوند .mol
 - **Sent to SciPlanner**: رسم ساختار یا توالی واکنش به صورت پویا و بسیار جذاب و کاربردی که در قسمت مربوط به **SciPlanner** به صورت کامل به آن خواهیم پرداخت.
- همچنین با کلیک بر روی علامت ذره بین که در گوشه سمت راست مشاهده می کنید می توان صفحه موسوم به **Quick view** را مشاهده کرد.



شکل ۳-۵۱

که به صورت مختصر و مفید اطلاعات اجمالی از ترکیب مورد نظر را در اختیار قرار میدهد.



فصل چهارم

جستجوی واکنش ها **Reactions Searching**

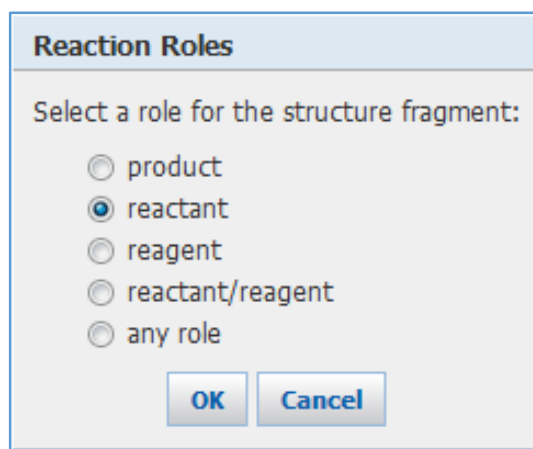
۱-۴- جستجو واکنش با رسم ساختار شیمیایی (Reaction Structure)

در رسم واکنش شیمیایی همانند توضیحات برای رسم ساختار در فصل ۲، از ابزار های موجود در نوار ابزار استفاده میکنیم که در جستجو واکنش مواردی به آن اضافه می شود که شامل موارد زیر است:



۱- رسم پیکان برای ارتباط دادن بین مواد اولیه و محصولات که به صورت خودکار با توجه به جهت نوک پیکان SciFinder نقش ترکیبات را حدس میزند و در زیر آن مینویسد.

۲- تعیین کننده نقش ترکیبات است به گونه ای که با قرار دادن آن روی ترکیب می توان نقش آن را تغییر داد که این نقش ها همانطور که در شکل ۱-۴ مشاهده می کنید شامل موارد زیر است :



شکل ۱-۴

در صورتی که نقش ترکیب در واکنش مورد نظر نا مشخص باشد از گزینه Any Role به معنای هر نقشی استفاده کنید

۳- تعیین کننده نقشه اتم Map Atom که در واکنش هایی که اتم مورد نظر در مواد اولیه و محصولات مشخص شده قابل شناسایی است استفاده می شود که بسیار در زمینه ی جستجو دقیق و درست کاربرد دارد. که به صورت عملی کاربرد آن را در مثالی که در ادامه بیان می شود، خواهید دید.

۴- در جستجوی واکنش، برای مشخص کردن پیوندی که در مسیر انجام واکنش شکسته یا تشکیل می شود، استفاده می شود.

۵- برای انتخاب گروه های عاملی استفاده می شود که شامل مواردی به شرح زیر است :

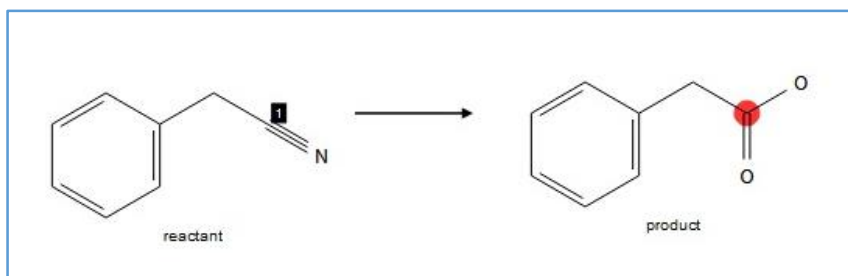
Functional Groups	
<input type="text" value="Enter 3 or more characters..."/>	
▶ Alcohols (13)	۱
▶ Alkenes (11)	۲
▶ Alkynes (4)	۳
▶ Amines (11)	۴
▶ Carbonate Derivatives (7)	۵
▶ Carboxy Derivatives (17)	۶
▶ Halides (16)	۷
▶ Heterocycles (54)	۸
▶ Ketones (6)	۹
▶ Organometallics (19)	۱۰
▶ Non-Rings (136)	۱۱
▶ Rings (71)	۱۲
<input type="button" value="Close"/>	

شکل ۲-۴

۱. الکل ها (۱۳ مورد): موادی شامل گروه عاملی هیدروکسیل
۲. الکن ها (۱۱ مورد): ترکیباتی دارای ۱ یا دو پیوند دوگانه به صورت مزدوج و یا پیایی است
۳. آلکین ها (۴ مورد): ترکیبات استیلنی دارای باند سه گانه
۴. آمین ها (۱۱ مورد): آمین در ساختار خود شامل نیتروژن است
۵. مشتقات کربونات ها (۷ مورد): ترکیبات کربنی که دارای ۱ باند دوگانه و دو باند یگانه هستند که همه اتمهای متصل به آن هترواتم هستند.
۶. مشتقات کربوکسی ها (۱۷ مورد): ترکیباتی دارای گروه عاملی کربونیلی (کربن - اکسیژن دوگانه)
۷. هالید ها (۱۶ مورد): ترکیباتی که در ساختار خود حداقل یک هالوژن به کار رفته است.
۸. ترکیبات هتروسیکلی (۵۴ مورد): حلقه هایی که در ساختار حلقه آنها حداقل از یک هترواتم استفاده شده است.
۹. کتون ها (۶ مورد): ترکیباتی دارای گروه کربونیل است که در دو طرف این گروه عاملی کربن قرار گرفته باشد.
۱۰. ترکیبات آلی فلزی (۱۹ مورد): ترکیباتی که در ساختارشان از فلز استفاده شده است.
۱۱. ترکیبات غیرحلقوی (۱۳۶ مورد): کلیه گروه های عاملی که به صورت خطی یا شاخه دار هستند، در آن قرار دارد.
۱۲. حلقه ها (۷۱ مورد): ترکیباتی که شامل حلقه در ساختار هستند.


۴-۲- جستجوی واکنش مورد نظر

به عنوان مثال واکنش تبدیل گروه سیانید به کربوکسیلیک اسید جستجو شد است که به شرح زیر است:



شکل ۴-۳

این واکنش که تبدیل سیانید به اسید است با استفاده از ابزار هایی که در فصل سوم در مورد آنها توضیح کامل داده شده، رسم شده است.

همانطور که مستحضرید به عنوان مثال در این تبدیل کربنی که با شماره ۱ مشخص شده به کربنی که به رنگ قرمز در شکل دیده می شود، تبدیل شده است که این کار با استفاده از  روی کربنی که در ماده اولیه و محصولات ثابت است یک عدد یکسان قرار میگیرد.

همانطور که در شکل ۴-۳ مشاهده می شود با رسم پیکان SciFinder به صورت خودکار واکنش دهنده و محصول را مشخص کرده است.

در جستجو واکنش در SciFinder دو شیوه وجود دارد:

Search Type:

Allow variability only as specified

Substructure

شکل ۴-۳

- **Allow variability only as specified**: در این مورد جستجو واکنش فقط با تغییرات مشخص شده توسط خود فرد انجام می شود و استخلاف ها و گروه های ترسیم شده ای که توسط خود فرد تعیین شده است می توانند در این مورد جستجو شوند.

Search Type:

Allow variability only as specified

Substructure

شکل ۴-۴

- **Substructure**: جستجو به صورت عمومی تر با محوریت واکنش ترسیم شده مورد بررسی قرار میگیرد که می تواند بسیار مفید باشد.

۳-۴- جستجوی پیشرفته واکنش ها

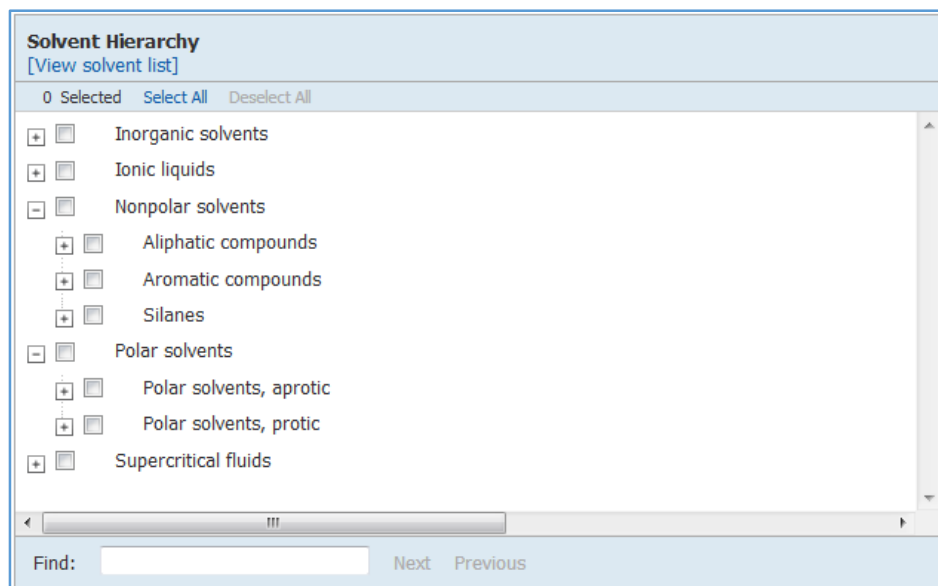
به طور مشابه با جستجو ترکیبات، جستجو واکنش ها نیز دارای جستجو پیشرفته (Advanced Search) است که می توانید با زدن تیک Always Show همیشه جستجو پیشرفته را به همین صورت کامل مشاهده کنید.

۱	Solvents	<input type="button" value="Select Solvents"/>
۲	Non-participating Functional Groups	<input type="button" value="Select Groups"/>
۳	Number of Steps	<input type="text"/> Examples: 1, 1-3, 1-, -3
۴	Classifications	<input type="checkbox"/> Biotransformation <input type="checkbox"/> Non-catalyzed <input type="checkbox"/> Catalyzed <input type="checkbox"/> Photochemical <input type="checkbox"/> Chemoselective <input type="checkbox"/> Radiochemical <input type="checkbox"/> Combinatorial <input type="checkbox"/> Regioselective <input type="checkbox"/> Electrochemical <input type="checkbox"/> Stereoselective <input type="checkbox"/> Gas-phase
۵	Sources	<input checked="" type="radio"/> Any source <input type="radio"/> Patents only <input type="radio"/> Sources other than patents
۶	Publication Years	<input type="text"/> Examples: 1995, 1995-1999, 1995-, -1995

شکل ۵-۴

این قسمت شامل ۶ قسمت به شرح زیر است :

۱- Solvents: حلال ها نیز مطابق شکل ۴-۶ زیر به ۵ گروه (حلال های معدنی، مایعات یونی، غیر قطبی، قطبی و مایعات فوق بحرانی) طبقه بندی شده اند و با کلیک روی حلال مورد نظر می توانید جستجو را به منظور صرفه جویی در زمان محدود کنید تا نتیجه مطلوب حاصل شود.



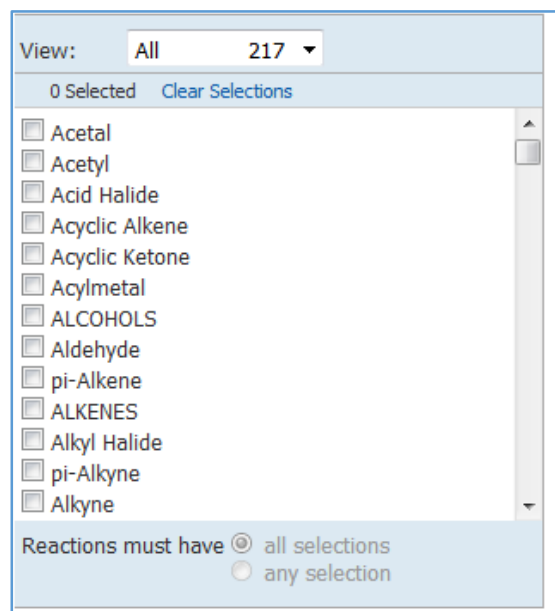
شکل ۴-۶

همانگونه که در شکل ۴-۶ مشخص است هر کدام از ۵ گروه حلال شامل مواردی است که می توانید آنها را انتخاب کرده تا جستجو پیشرفته ای در حلال های انتخاب شده داشته باشید.

همچنین با استفاده از کادر Find می توانید در حلال ها جستجو کنید تا به نتیجه مطلوب دست پیدا کنید.

۲- Non-participating Functional Groups: شامل گروه های عاملی است که مطابق شکل ۴-۷ شامل

موارد زیر است:



شکل ۴-۷

پس از انتخاب گروه های عاملی می توان به دو شیوه عمل کرد:

- همه گروه های عاملی انتخاب شده در واکنش شرکت نداشته باشند.
- هرکدام از موارد انتخابی در واکنش شرکت نداشته باشند (حتما همه نیست بلکه شاید یکی یا هرچند تا از موارد انتخاب شده اعمال شوند و لزوما همه با هم اعمال نمی شوند).

۳- Number of Steps: تعداد مراحل واکنش به منظور تهیه محصول مورد نظر که با تعیین آن، نتایج جستجو به سمت هدف مطلوب محدودتر می شود.

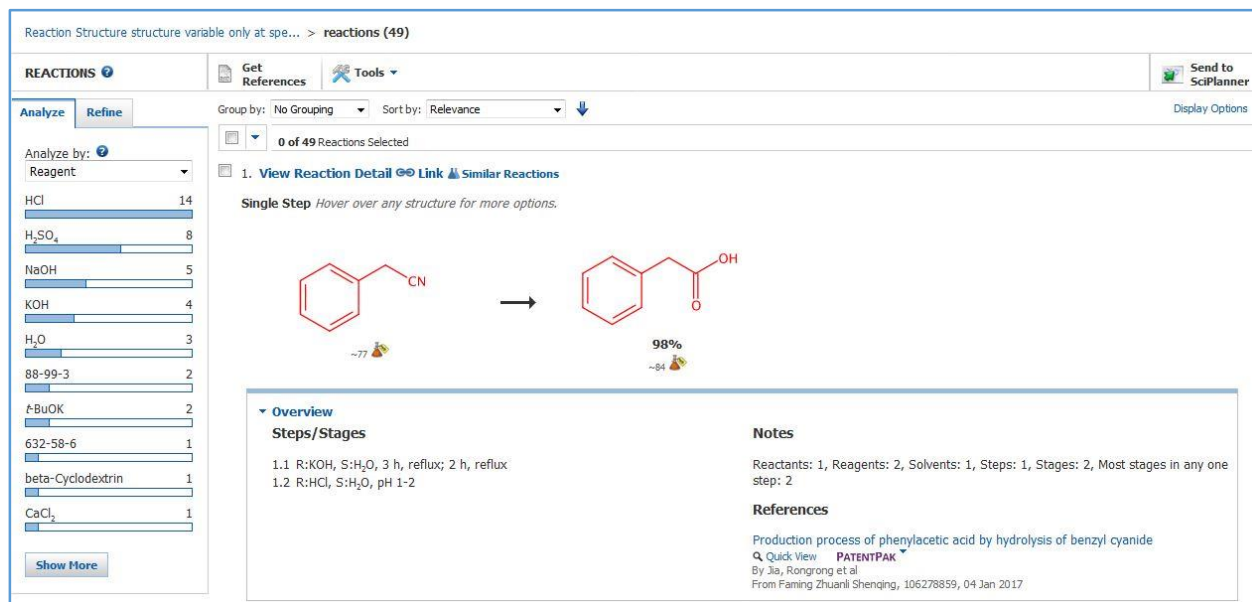
۴- Classifications: طبقه بندی واکنش ها به صورت واکنش های موجود در انتقالات زیستی، واکنش های کاتالیستی، واکنش های فضا گزین، الکتروشیمیایی، واکنش های در فاز گازی و ...

۵- Sources: سند می تواند از میان منابع ثبت اختراع ها، ژورنال ها و ... انتخاب شود که در جستجو پیشرفته

می توان قبل از انجام جستجو آن را به سمت بازیابی مطلوب تر، محدودتر کرد.

۶- Publication Year: سال انتشار سند که میتواند به صورت بازه نیز انتخاب شود.

نتایج جستجو واکنش تبدیل سیانید به اسید به صورت زیر به نمایش در می آید.



Reaction Structure structure variable only at spe... > reactions (49)

REACTANTS Get References Tools Send to SciPlanner

Analyze Refine Group by: No Grouping Sort by: Relevance 0 of 49 Reactions Selected

Analyze by: Reagent

HCl	14
H ₂ SO ₄	8
NaOH	5
KOH	4
H ₂ O	3
88-99-3	2
t-BuOK	2
632-58-6	1
beta-Cyclodextrin	1
CaCl ₂	1

1. View Reaction Detail Link Similar Reactions

Single Step *Hover over any structure for more options.*

c1ccccc1CC#N → c1ccccc1CC(=O)O

~77 98% ~84

Overview

Steps/Stages

- 1.1 R:KOH, S:H₂O, 3 h, reflux; 2 h, reflux
- 1.2 R:HCl, S:H₂O, pH 1-2

Notes

Reactants: 1, Reagents: 2, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 2, Most stages in any one step: 2

References

Production process of phenylacetic acid by hydrolysis of benzyl cyanide
 Quick View **PATENTPAK**
 By Jia, Rongrong et al
 From Faming Zhuanli Shengqing, 106278859, 04 Jan 2017

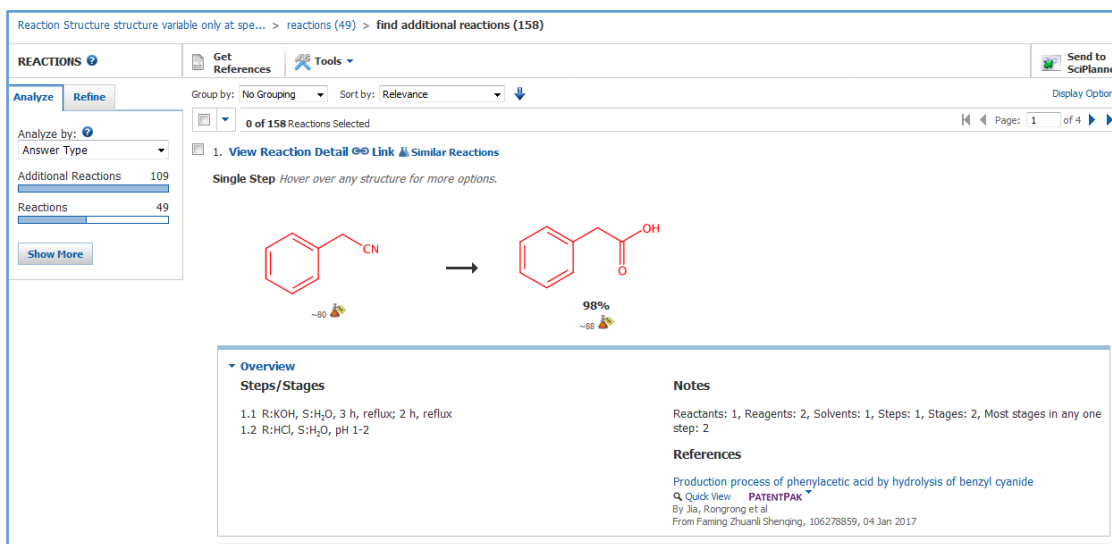
شکل ۴-۸

می توانید با استفاده از گزینه Get references سند هر کدام از واکنش ها را مشاهده کنید.

۴-۴- استفاده از ابزار های مفید Tools، Group و Sort در واکنش ها

در قسمت Tools می توان با کلیک بر روی Find Additional Reactions واکنش های دیگری که منجر به

سنتز این ترکیب شده را نیز مشاهده کرد. (واکنش هایی که این واکنش جستجو شده در آن وجود دارد).

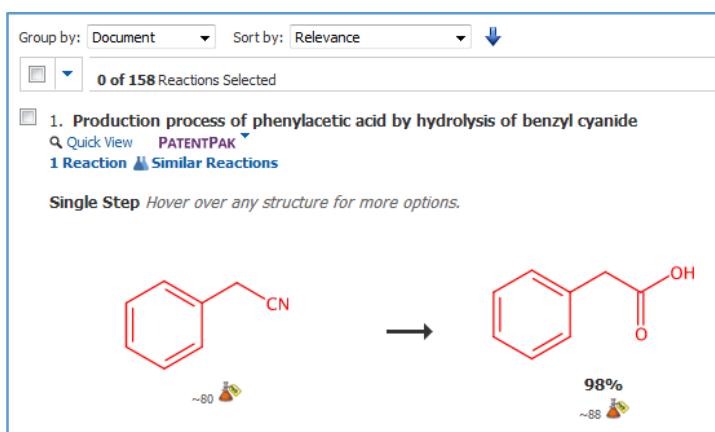


شکل ۹-۴

به عنوان مثال ۴۹ نتیجه با گزینه ی نتایج بیشتر به ۱۵۸ نتیجه منجر شد که در شکل ۴-۹ قابل مشاهده است.

با استفاده از گزینه **Group by** نیز می توان نتایج واکنش ها را به دو صورت دسته بندی کرد.

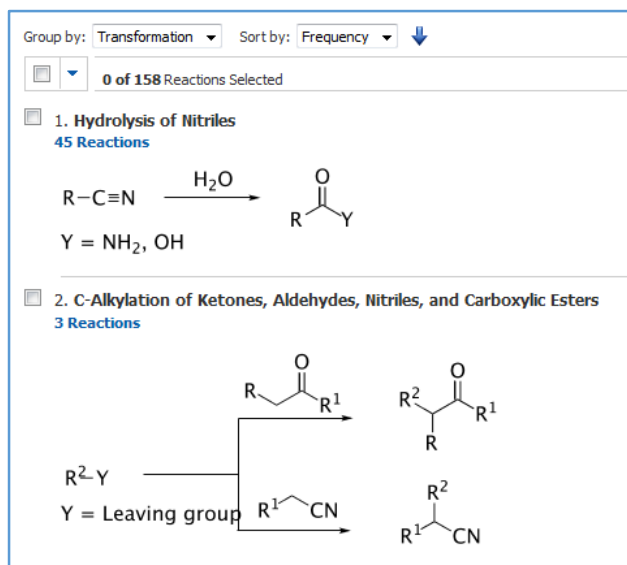
- **Document**: واکنش ها در قالب سند مورد نظر دسته بندی می شوند و همانطور که در شکل ۴-۱۰ مشاهده می کنید تعداد واکنش های مرتبط به آن سند به رنگ آبی نمایش داده می شود.



شکل ۴-۱۰

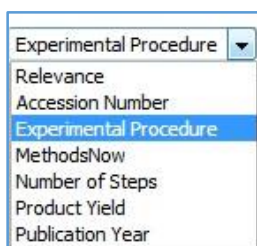
• Transformation

گروه بندی به صورت انتقالات مرتب شده است. که به عنوان مثال تبدیل معروف هیدرولیز نیتریل ها شامل ۴۵ واکنش در بالاترین تعداد واکنش مشاهده می شود.



شکل ۴-۱۱

همانگونه که در شکل ۴-۱۲ مشاهده می کنید نتایج بازیابی شده را می توانید با استفاده از Sort به ترتیب سال انتشار، بازده و ... مرتب کنید. به عنوان مثال می توان نتایج را براساس فرایند آزمایشگاهی مرتب کرد .



شکل ۴-۱۲

Experimental Procedure مربوط به واکنش هایی است که فرایند سنتز ترکیب مورد نظر یا به طور کلی فرایند های آزمایشگاهی در آن در لیترچر ثبت شده است.

به عنوان مثال با کلیک روی آن نتیجه به صورت شکل ۴-۱۳ قابل مشاهده است.

<p>▼ Overview</p> <p>Steps/Stages</p> <p>1.1. S:H₂O, S:DMSO, 30 h, 26°C, pH 7</p>	<p>Notes</p> <p>biotransformation, agitation (120 rpm), shake flask used, buffered solution (sodium phosphate) used, whole cells of <i>Aspergillus</i> species PTCC 5266 used as catalyst, optimization study, optimized on reaction pH, alternatively reaction carried out for 48 hours, Reactants: 1, Solvents: 2, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1</p> <p>References</p> <p>Nitrile biotransformation by whole cells of <i>Aspergillus</i> sp. PTCC 5266 Quick View Other Sources By Yousefi, M. et al From <i>Biocatalysis and Biotransformation</i>, 29(2-3), 54-59; 2011.</p>
<p>▼ Experimental Procedure</p> <p>General/Typical Procedure: <i>General procedure for biotransformation of nitriles using whole cells</i> The mycelium from 100 mL of cultivation medium (average dry cell weight of 300 mg, corresponding to 10g wet cell weight) was filtered off after 48 h, washed with sodium phosphate buffer (50 mM, pH 7) and re-suspended in 100 mL of the same buffer with 10 or 50 mM of the substrate. The substrates were dissolved in dimethylsulfoxide (2%, v/v) and all of the substrate was added in one step. The reactions were carried out in shaking flasks on an orbital shaker at 120 rpm and 26°C. The reaction, monitored by TLC, was quenched after a period of time by removing the biomass through filtration. For determination of the pH optimum, the same amount of mycelium, thoroughly washed with distilled water, was added to the reaction mixtures made of 50 mM buffers (Na₂HPO₄/citrate for pH 5, Na₂HPO₄/NaH₂PO₄ for pH 6-7, Tris-HCl for pH 8-9 and glycine/NaOH buffer for pH 10), 10 mM of benzonitrile and 2% (v/v) of dimethylsulfoxide. Entry: 1 Product: 1b; Yield: 80%. Entry: 2 Entry: 13 Product: 4b; Yield: 83%.</p>	
<p>▼ METHODSNOW™</p> <p>Procedure</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Filter off the mycelium from 100 mL of cultivation medium (average dry cell weight of 300 mg, corresponding to 10 g wet cell weight) after 48 hours. 2. Wash the mixture with sodium phosphate buffer (50 mM, pH 7). <p>View more...</p> <p>View with MethodsNow</p>	

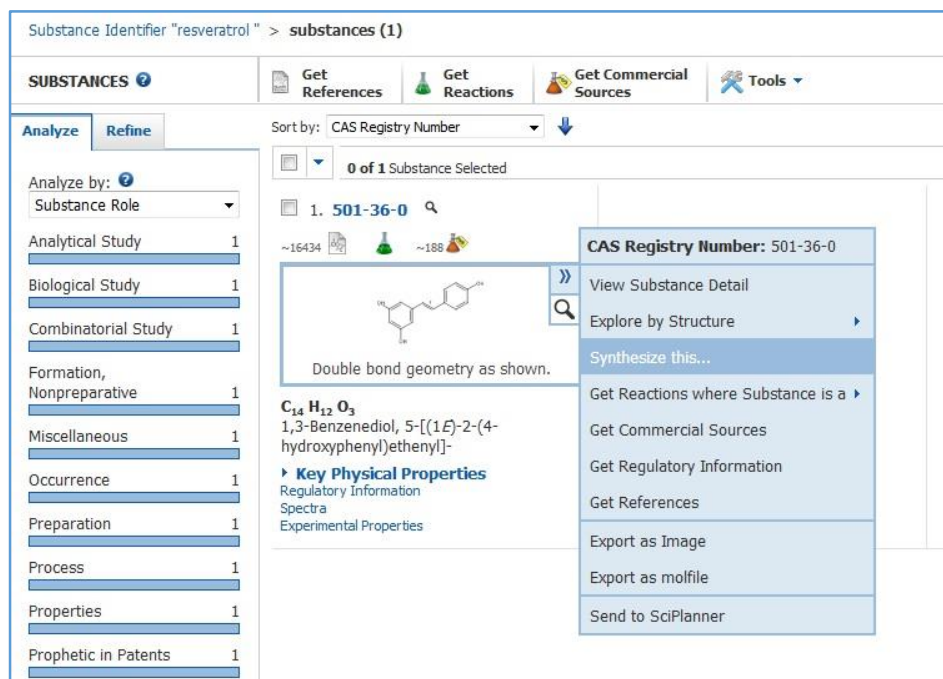
شکل ۴-۱۳

همانطور که مشاهده می کنید قسمتی با عنوان **Experimental Procedure** وجود دارد که روش سنتز ترکیب و فرایندهای آزمایشگاهی در آن ثبت شده است.

این گزینه به منظور یافتن شیوه سنتز ترکیب به صورت سریع در نظر گرفته شده که تمامی نتایج که دارای **Experimental Procedure** است، قابل مشاهده است.

Synthesis This –۵-۴

همچنین می توان برای سنتز یک ترکیب و همچنین مشاهده واکنش های آن از گزینه **Synthesis This** استفاده کرد.



Substance Identifier "resveratrol" > substances (1)

STANCES ? Get References Get Reactions Get Commercial Sources Tools

Analyze Refine Sort by: CAS Registry Number

0 of 1 Substance Selected

1. 501-36-0

~16434 ~188

Double bond geometry as shown.

C₁₄ H₁₂ O₃
1,3-Benzenediol, 5-[(1E)-2-(4-hydroxyphenyl)ethenyl]-

Key Physical Properties
Regulatory Information
Spectra
Experimental Properties

CAS Registry Number: 501-36-0

- View Substance Detail
- Explore by Structure
- Synthesize this...
- Get Reactions where Substance is a
- Get Commercial Sources
- Get Regulatory Information
- Get References
- Export as Image
- Export as molfile
- Send to SciPlanner

شکل ۴-۱۴

همانطور که در شکل ۴-۱۴ مشاهده می کنید ترکیب Resveratrol که مکمل غذایی گیاه به صورت پودر سفید رنگی است، برای سنتز جستجو شده است.

نتیجه سنتز ترکیب مورد نظر با استفاده از Synthesis This به نمایش در می آید که می توان با استفاده از ابزار های Refine و Analyze جستجو را به سمت هدف مورد نظر محدود تر کرد.



فصل پنجم

جستجوی پلیمرها

Polymers Searching



CAS برای هر پلیمر CAS Registry No. منحصر به فردی ترجیحا با استفاده از مونومر به آن اختصاص میدهد. با این وجود اگر آن مونومر به صورت کاملا مشخص و مجزا در سند موجود نباشد، CAS آن پلیمر و یا بخشی از آن را به صورت واحد های ساختاری تکرار شونده (SRU) نمایش میدهد.

پلیمرهای با استریو شیمی مشخص شده (تاکتیسیتی)، بلوک، پیوند یا پلیمرهای متناوب بصورت جداگانه (از سال ۱۹۸۶) ثبت می شوند و موارد زیر تاثیری در ثبت آن ندارد:

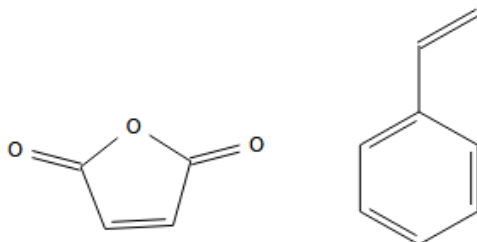
- وزن مولکولی (توزیع) و سایر مشخصات فیزیکی
- تعداد واحدهای تکراری
- نسبت اجزا شرکت کننده
- کاتالیزورها یا بازدارنده های واکنش
- کنترل گروه های عاملی و واکنش های پس از پلیمریزاسیون

جستجو پلیمر ها به ۵ طریق می تواند انجام شود

- جستجو بر اساس ساختار
- جستجو بر اساس فرمول مولکولی
- جستجو بر اساس CAS Registry No.
- جستجو بر اساس نام ترکیب
- جستجو بر اساس موضوع

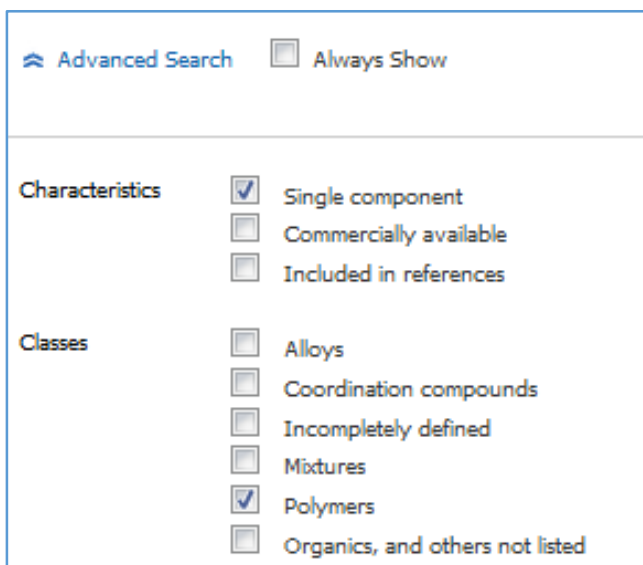
۵-۱- جستجو پلیمرها با استفاده از رسم ساختار

به عنوان مثال همانطور که در شکل ۵-۱ مشاهده می کنید از دو مونومر استایرن و مالئیک انیدرید استفاده شده است.



شکل ۵-۱

در این شیوه جستجو مطابق شکل ۵-۲ باید در قسمت Advanced تیک مربوط به پلیمر را فعال کنید تا جستجو را در حوزه پلیمر و این دو ترکیب را به عنوان مونومر های آن در نظر بگیرد.

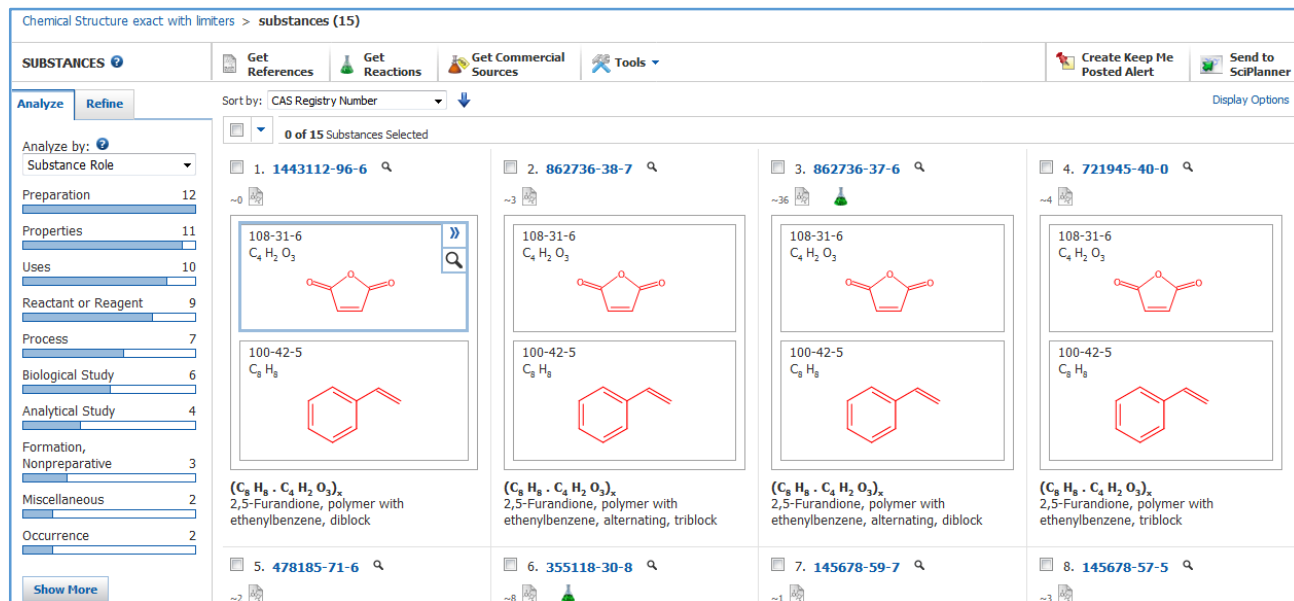


The image is a screenshot of a search interface. At the top, it says "Advanced Search" with a home icon and a checkbox labeled "Always Show". Below this, there are two sections: "Characteristics" and "Classes". Under "Characteristics", there are three items: "Single component" (checked), "Commercially available" (unchecked), and "Included in references" (unchecked). Under "Classes", there are six items: "Alloys" (unchecked), "Coordination compounds" (unchecked), "Incompletely defined" (unchecked), "Mixtures" (unchecked), "Polymers" (checked), and "Organics, and others not listed" (unchecked).

شکل ۵-۲

همچنین می توان با فعال کردن تیک Single Component فقط در این دو منومر ترسیم شده جستجو کنید.

نتیجه این جستجو مطابق شکل ۳-۵ نمایش داده می شود.



شکل ۳-۵

همچنین می توان نتایج را با استفاده از Sort by براساس تعداد رفرنس ها و اسناد (Number of Reference)

مرتب کرد که این در دستیابی نتایج با بیشترین تعداد رفرنس ها و اسناد کمک بزرگی می کند.

بدیهی است که با جستجو در مونومر ها نمی توان ساختار های تکرار شونده (SRU) که در آن منومر ها ذکر نشده اند را جستجو کرد.

۳-۵-۲- جستجو پلیمر ها با استفاده از فرمول مولکولی (Molecular Formula)

جستجو با استفاده از فرمول مولکولی روشی بسیار کارآمد برای جستجو در پلیمر ها و در واقع تنها روش برای جستجو واحد های تکرار شونده ساختاری ترکیبات (SRU) به خصوص در ترکیبات ساده آنهاست.

این جستجو به سه طریق انجام میگیرد:

۵-۲-۱- جستجو با استفاده از فرمول مولکولی مونومر:

برای استفاده از این روش کافیت فرمول مولکولی بسته منومر را در بین دو پرانتز قرار داد و در انتها X را بیرون پرانتز قرار دهید. (X به این معناست ک از مونومر های موجود در پرانتز برای تهیه پلیمر استفاده شود)

به عنوان مثال

برای ترکیب هموپلیمر استیرن $(C_8H_8)_x$

برای پلیمری از دو منومر ایزوپرن و استیرن $(C_8H_8.C_5H_8)_x$

برای یک پلی استر ساخته شده از تری فتالویل کلرید با گلیکول $(C_8H_4Cl_2O_2.C_2H_6O_2)_x$

باید فرمول مونومر ها به صورت کامل نوشته شود و نباید از فرمول مولکولی مونومر در پلیمر سنتز شده استفاده شود. به عنوان مثال گاز کلر از ترکیب پلیمر خارج شده و این در حالی است که در اینجا نام مونومر به صورت کامل نوشته شده است. به عنوان مثال مونومر های مالیک انیدرید و استیرن جستجو شده است $(C_8H_8.C_4H_2O_3)_x$

که نتیجه به صورت زیر قابل بازیابی است.

Molecular Formula "(C8 H8 . C4 H2 O3)x" > substances (28)

Substances: 1. 9011-13-6, 2. 106209-33-0, 3. 112020-31-2, 4. 128162-14-1

Chemical structures shown: 2,5-Furandione and ethenylbenzene derivatives.

Descriptions: (C₈H₈ · C₄H₂O₃)_x, 2,5-Furandione, polymer with ethenylbenzene

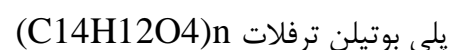
شکل ۵-۴

همچنین می توان با استفاده از قسمت آنالیز و Refine بهینه سازی شرایط را برای بازیابی نتیجه دقیق تر و مطلوب تر انجام داد.

۵-۲-۲- جستجو با استفاده از واحدهای تکرار شونده در ساختار پلیمر (SRU):

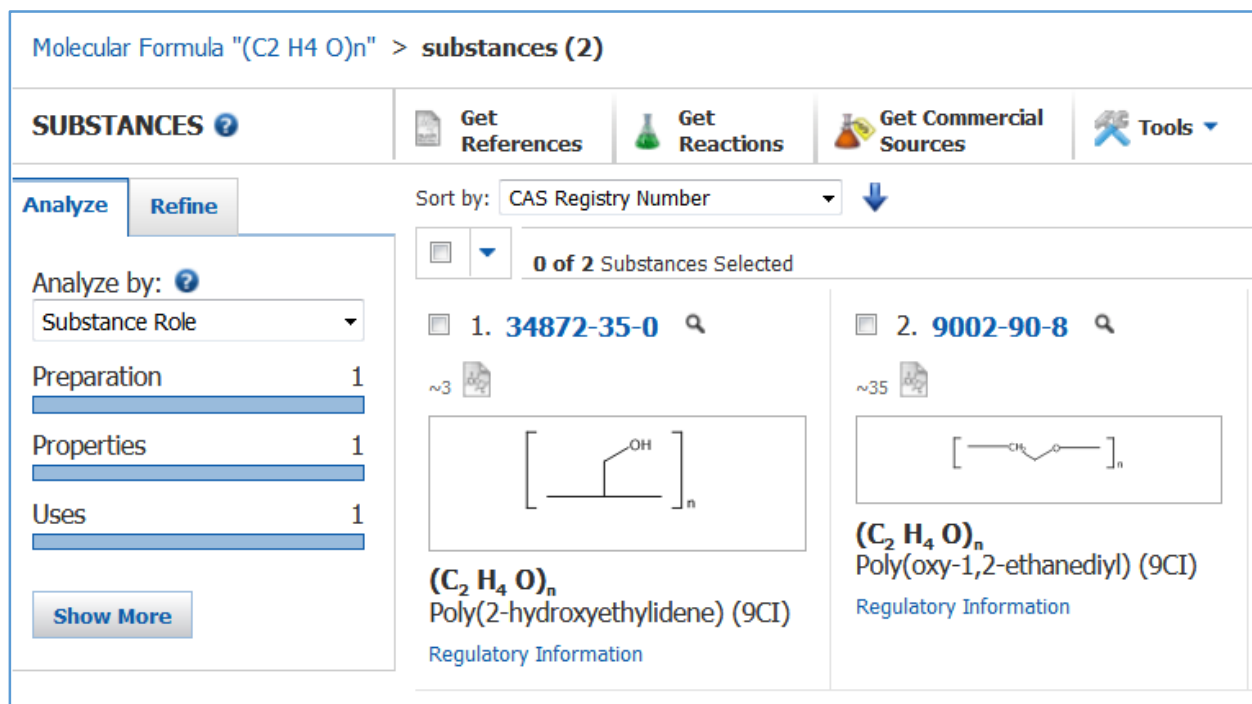
واحدهای تکرار شونده در ساختار پلیمرها (Structure Repeating Unit) یا به اختصار (SRU) در SciFinder با نماد n در بیرون پرانتز نمایش داده می شود.

به عنوان مثال



به عنوان مثال

با جستجو $(C_2H_4O)_n$ ، ترکیبات SRU با این فرمول بسته نمایش داده می شوند.



Molecular Formula "(C₂H₄O)_n" > substances (2)

SUBSTANCES ?

Get References Get Reactions Get Commercial Sources Tools

Analyze Refine

Sort by: CAS Registry Number

Analyze by: Substance Role

Preparation 1

Properties 1

Uses 1

Show More

0 of 2 Substances Selected

1. 34872-35-0

~3

[*]C(O)C[*]

$(C_2H_4O)_n$
Poly(2-hydroxyethylidene) (9CI)
Regulatory Information

2. 9002-90-8

~35

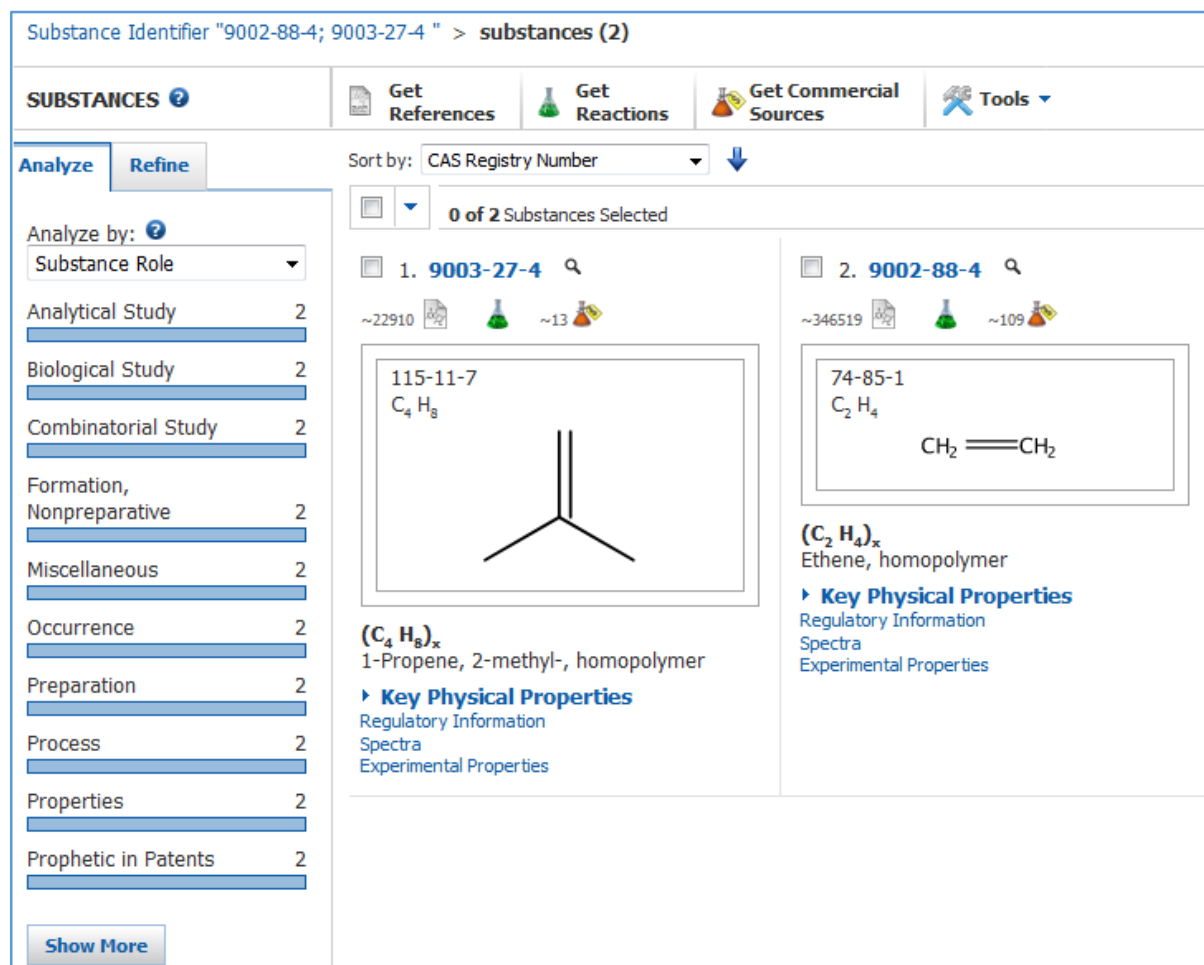
[*]COC[*]

$(C_2H_4O)_n$
Poly(oxy-1,2-ethanediyl) (9CI)
Regulatory Information

شکل ۵-۵

۵-۳- جستجو بر اساس CAS Registry No. منحصر به فرد ماده

همچنین می‌توانید با استفاده از شناسه منحصر به فرد CAS Registry No. هر پلیمر آن را جستجو کنید. به این منظور همان گونه که در شکل ۵-۷ مشاهده می‌کنید می‌توان با نوشتن CAS Registry No. منحصر به فرد هر پلیمر در قسمت Chemical Identifier آن را جستجو کرد. توجه داشته باشید که می‌توان تا ۲۵ پلیمر متفاوت را با این روش جستجو کرد. کافیست هر CAS No. را در یک سطر بنویسید. به عنوان مثال دو پلیمر ایزوبوتیلن و پلی اتیلن به صورت یکجا جستجو شده است.



Substance Identifier "9002-88-4; 9003-27-4" > substances (2)

SUBSTANCES Get References Get Reactions Get Commercial Sources Tools

Analyze Refine Sort by: CAS Registry Number

0 of 2 Substances Selected

1. **9003-27-4**
 ~22910
 C_4H_8
 CC(=C)C
 $(C_4H_8)_x$
 1-Propene, 2-methyl-, homopolymer
 Key Physical Properties
 Regulatory Information
 Spectra
 Experimental Properties

2. **9002-88-4**
 ~346519
 C_2H_4
 C=C
 $(C_2H_4)_x$
 Ethene, homopolymer
 Key Physical Properties
 Regulatory Information
 Spectra
 Experimental Properties

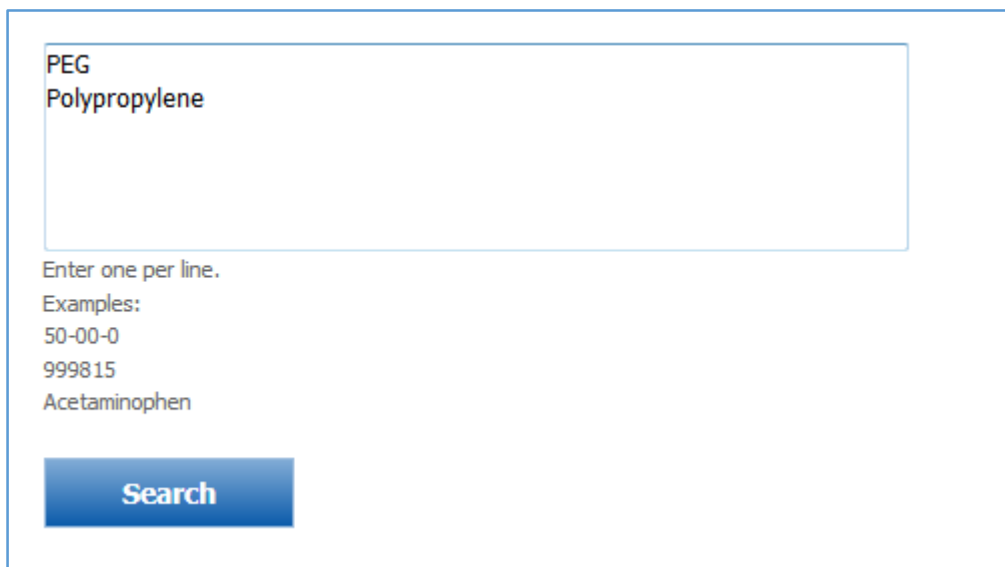
Show More

شکل ۵-۷

۵-۴- جستجو بر اساس نام ترکیب

با استفاده از نام ترکیبات پلیمری نیز می توان در SciFinder به جستجو پرداخت.

همانطور که مستحضرید برای حدود ۲۰۰ هزار پلیمر تنها نام تجاری آنها (نه نام شیمیایی) در دسترس است. به همین منظور می توان مطابق شکل ۵-۸ با نام ترکیب پلیمری به جستجو پرداخت.



PEG
Polypropylene

Enter one per line.
Examples:
50-00-0
999815
Acetaminophen

Search

شکل ۵-۸

در اینجا نیز می توان نام ۲۵ ترکیب پلیمری متفاوت را جستجو کرد و فقط کافیت هر ترکیب در یک سطر نوشته شود.

۵-۵- جستجو بر اساس موضوع

همچنین می توان پلیمر ها را با نام شیمیایی یا CAS Registry No. منحصر به فردش در قسمت Research Topic جستجو کرد.

این کار مزیتی که بر دیگر روش های جستجو دارد این است که در این قسمت می توان به مقالات یا پتنت هایی دسترسی پیدا کرد که هنوز ترکیباتش مورد بررسی قرار نگرفته و CAS No. نگرفته اند.



به عنوان مثال پلی اتیلن خطی با چگالی کم (LLDPE=Linear Low Density Polyethylene) مورد بررسی قرار گرفت و نتیجه مطابق شکل ۹-۵ حاصل شد.

0 of 2 Research Topic Candidates Selected		References
<input type="checkbox"/>	19039 references were found containing "LLDPE" as entered.	19039
<input type="checkbox"/>	28991 references were found containing the concept "LLDPE".	28991

شکل ۹-۵

و یا به عنوان مثال ترکیب Poly(D,L-lactide) را که از پلی لاکتید آلی است در مواد دندان‌پزشکی بررسی می‌کنیم و نتیجه مطابق شکل ۱۰-۵ به نمایش در می‌آید

REFERENCES: RESEARCH TOPIC ?

26023-30-3 for dental materials

Examples:
The effect of antibiotic residues on dairy products
Photocyanation of aromatic compounds

شکل ۱۰-۵



فصل ششم

رسم توالی واکنش ها **SciPlanner**

۶-۱- معرفی SciPlanner

محیط رسم توالی واکنش SciPlanner، محیطی پویا و بسیار کاربردی است که می توان با کمک آن به رسم توالی واکنش های چند مرحله ای و یک مرحله ای پرداخت.

SciPlanner یک فضای کاری تعاملی است که برای سازماندهی مواد، واکنش و نتایج جستجوی اسناد و مراجع، قبل از رفتن به آزمایشگاه و یا برای اشتراک گذاری نتایج که در یک محیط به صورت یکجا برنامه ریزی شده است.

از جمله ویژگی های این محیط رسم واکنش عبارتند از :

❖ Personal :

شما طراح هستید و تعیین می کنید که چگونه می خواهید نتایج جستجوی خود را از جمله منابع، مواد و واکنش ها را سازماندهی کنید.

❖ Visual :

تصاویر، ساختارها و واکنش ها را انتخاب کنید و آنها را به نحوی که می توانید بهتر ببینید و درک کنید، مرتب کنید.

❖ Central :

یک مکان منحصربه فرد در SciFinder که به عنوان یک مرکز اطلاعات عمل می کند و می توانید اطلاعات ذخیره شده از مواد، واکنش ها و مراجع در چندین جستجو را در یک محیط ترسیم کنید.

❖ Interactive :

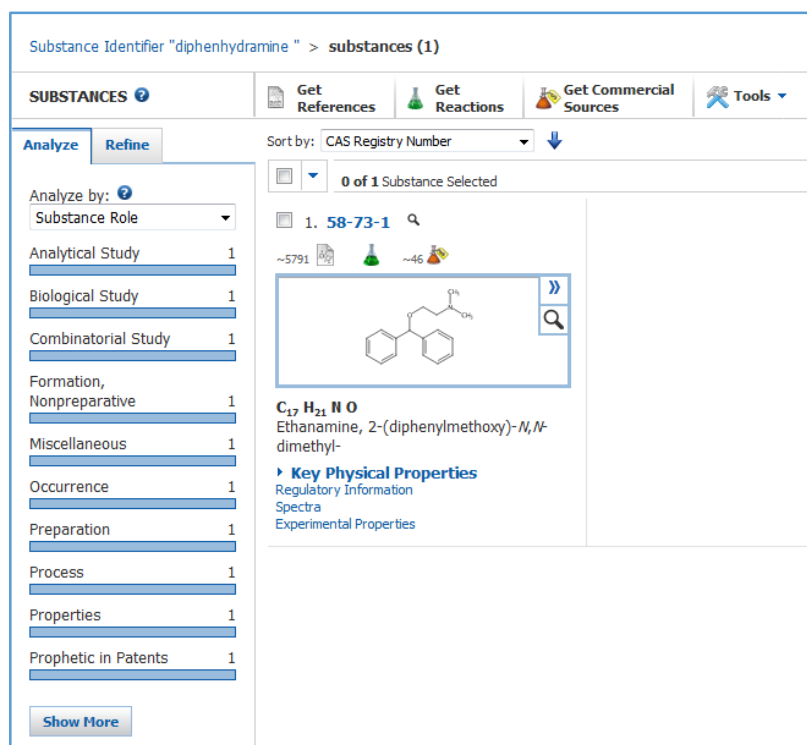
پیوند به تمام پایگاه داده های SciFinder به صورت همزمان که با استفاده از گزینه های پویا در محتوای آن می توانید جستجوهای مجانی را برای یافتن و سازماندهی اطلاعات ضروری برای پروژه انجام دهید.

از جمله امکانات بی نظیر محیط SciPlanner که دانشمندان ۱۰۰ دانشگاه برتر دنیا را مجاب به استفاده از این ابزار جستجو کرده است عبارتند از :

- بررسی مکانیسم براس سنتز معکوس : ایجاد مسیر سنتزی با توجه و بررسی هزینه مواد اولیه، مواد در دسترس و برنامه از پیش تعیین شده
- مقایسه مسیر های سنتزی: مقایسه مسیر ای سنتز برای یک ترکیب مورد نظر با بررسی پیچیدگی مسیر، تعداد مراحل و مواد اولیه در دسترس
- به اشتراک گذاری مسیر سنتزی: امکان به اشتراک گذاری مسیر های سنتزی به همراه شرایط واکنش، اسناد و مراجع آن

۲-۶- بررسی سنتز دارو در SciPlanner

دیفن هیدرامین که جز آنتی هیستامین هاست را با نام لاتینش Diphenhydramine در قسمت Substance Identifier مطابق شکل ۱-۶ جستجو شده است.



Substance Identifier "diphenhydramine" > substances (1)

SUBSTANCES ?

Get References Get Reactions Get Commercial Sources Tools

Analyze Refine

Sort by: CAS Registry Number

0 of 1 Substance Selected

1. 58-73-1

~5791 ~46

CN(C)CCOC(c1ccccc1)c2ccccc2

C₁₇ H₂₁ N O
 Ethanamine, 2-(diphenylmethoxy)-*N,N*-dimethyl-

Key Physical Properties
 Regulatory Information
 Spectra
 Experimental Properties

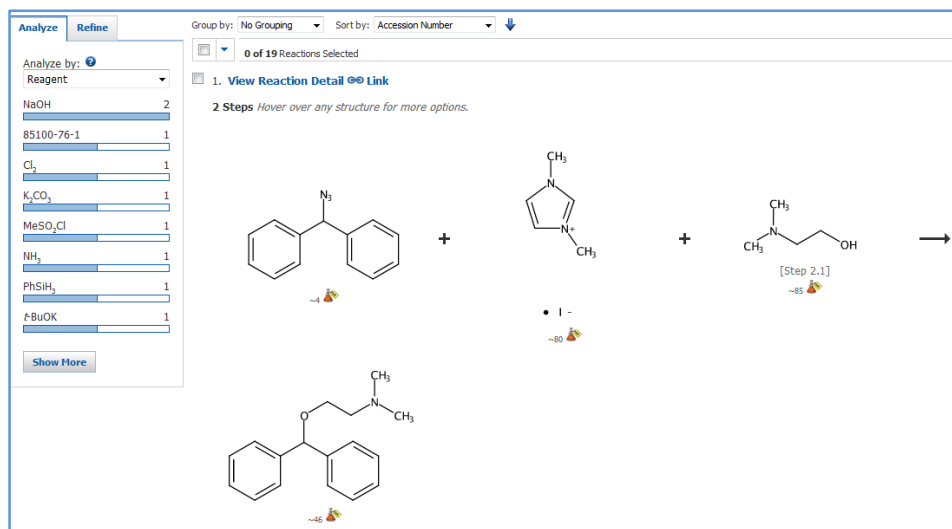
Analyze by: Substance Role

Analytical Study 1
 Biological Study 1
 Combinatorial Study 1
 Formation, Nonpreparative 1
 Miscellaneous 1
 Occurrence 1
 Preparation 1
 Process 1
 Properties 1
 Prophetic in Patents 1

Show More

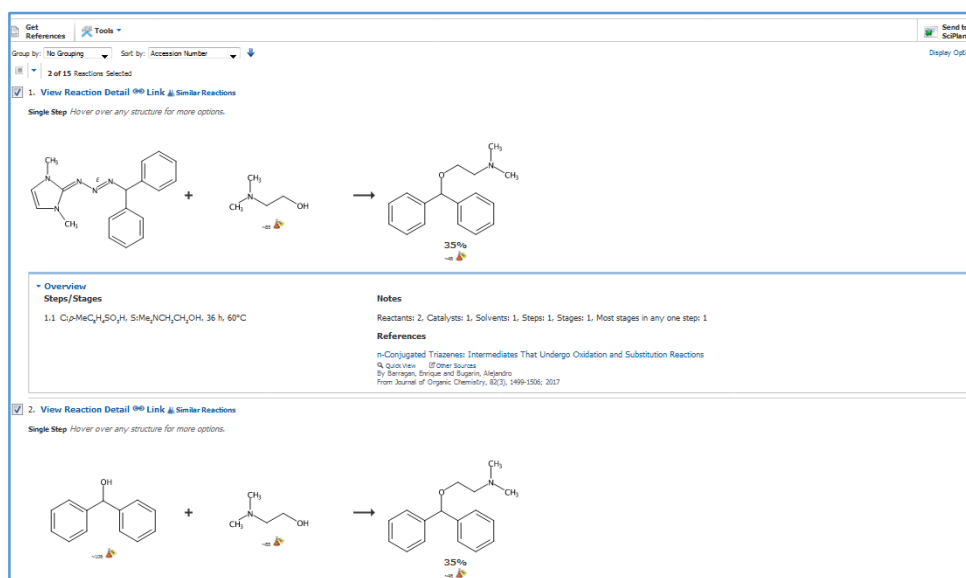
شکل ۱-۶

همانطور که در فصل قبل توضیح داده شد می توان سنتز این ترکیب را با استفاده از Synthesis This بررسی کرد و نتیجه مطابق شکل ۲-۶ قابل مشاهده است.



شکل ۲-۶

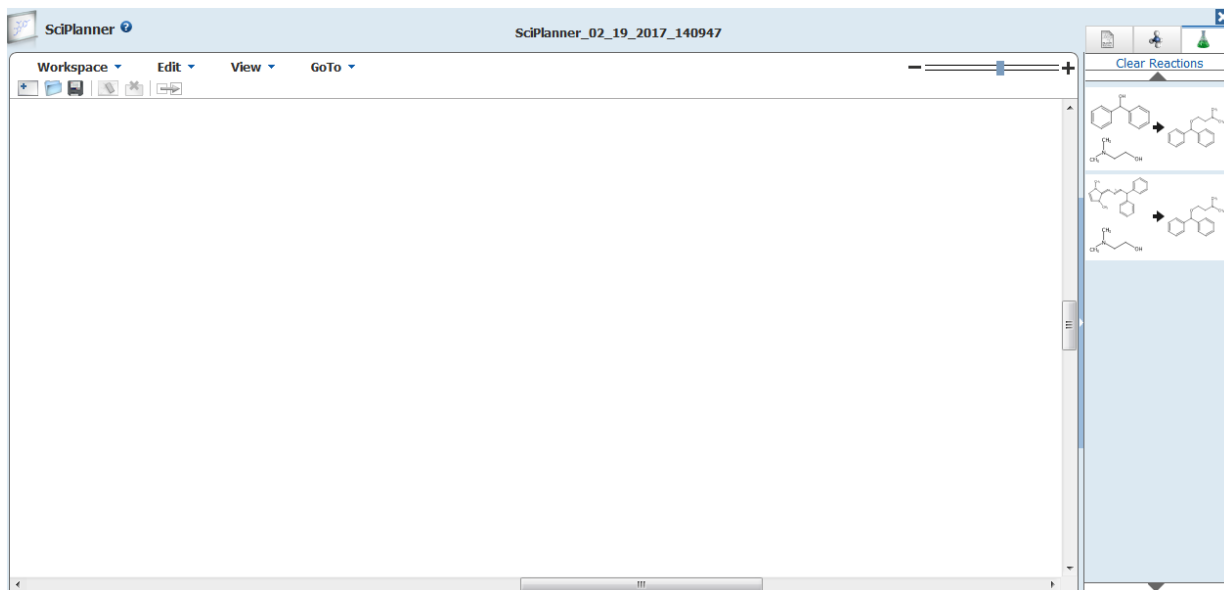
همانگونه که در شکل ۳-۶ مشخص است با انتخاب دو مورد از واکنش هایی که تک مرحله ای هستند، Send To SciPlanner را انتخاب می کنیم.



شکل ۳-۶

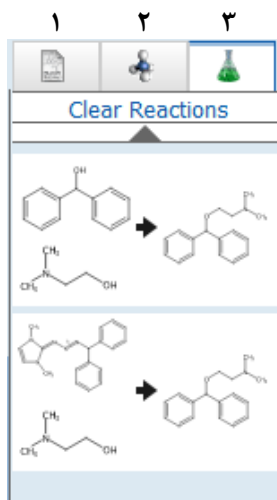
دو واکنش انتخاب شده مورد نظر در SciPlanner قابل مشاهده اند.

به همین جهت با کلیک بر روی SciPlanner، مطابق شکل ۴-۶ محیط کار SciPlanner را مشاهده می کنید.



شکل ۴-۶

محیط کار SciPlanner شامل سه باکس است:



باکس شماره ۱

این باکس که به Library معروف است از سه قسمت تشکیل شده است

۱. مربوط به رفرنس ها و اسناد

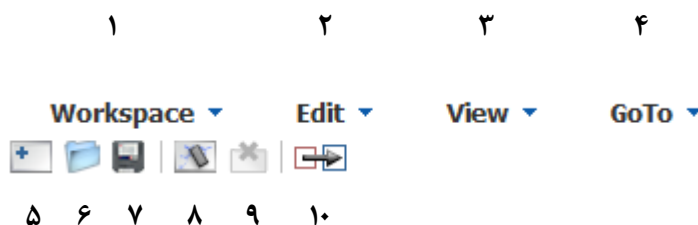
۲. مربوط به ترکیبات و مواد

۳. مربوط به واکنش ها

که در اینجا برای مثال در ترکیب دیفن هیدرامین، ۲ واکنش انتخاب شده مورد نظر در قسمت واکنش ها نمایش داده شده است.

همچنین می توانید با استفاده از Clear Reaction واکنش های مورد نظر را در این محیط جستجو پاک کنید.

باکس شماره ۲

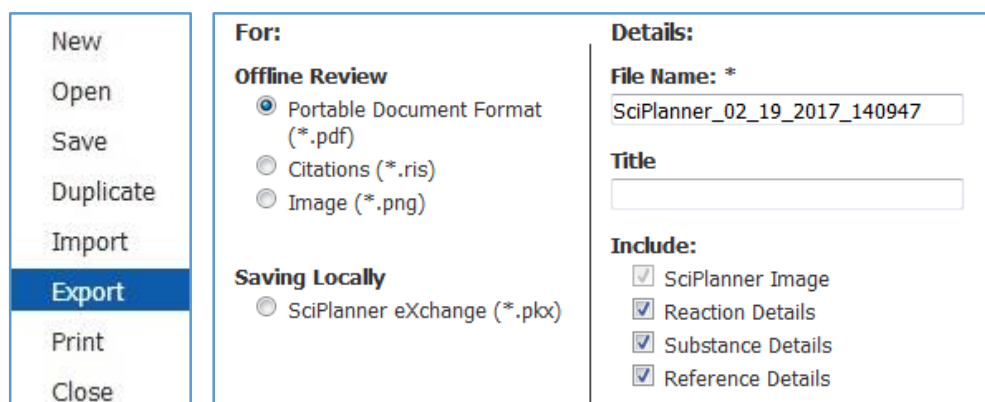


این باکس نیز به دو قسمت تقسیم شده که به معرفی برخی از آنها میپردازیم:

۱. مربوط به محیط کاری SciPlanner است و خود شامل مواردی است که از جمله آنها می توان به ایجاد

صفحه جدید، باز کردن صفحه ذخیره شده، ذخیره اطلاعات و گرفتن خروجی اشاره کرد.

در قسمت Export همانگونه که در شکل ۵-۶ مشاهده می کنید می توان خروجی را به فرمت ها و همچنین جزییات متفاوت تهیه کرد.



شکل ۵-۶

همانگونه که در شکل ۵-۶ مشخص است می توان به صورت PDF، ris که پسوند مربوط به ارجاعات است، به صورت عکس و یا به صورت ذخیره در همین محیط جستجو به منظور تغییر و توانایی ویرایش در آن، خروجی تهیه کرد.

۲. مربوط به پاک کردن محیط رسم واکنش هاست

۳. مربوط به بزرگ نمایی و تغییر سایز

۴. برای بررسی اسناد و رفرنس ها، ترکیبات و واکنش های انتخاب شده مربوطه در محیط کار SciPlanner

۵. ایجاد صفحه جدید

۶. باز کردن فایل ذخیره شده

۷. ذخیره اطلاعات

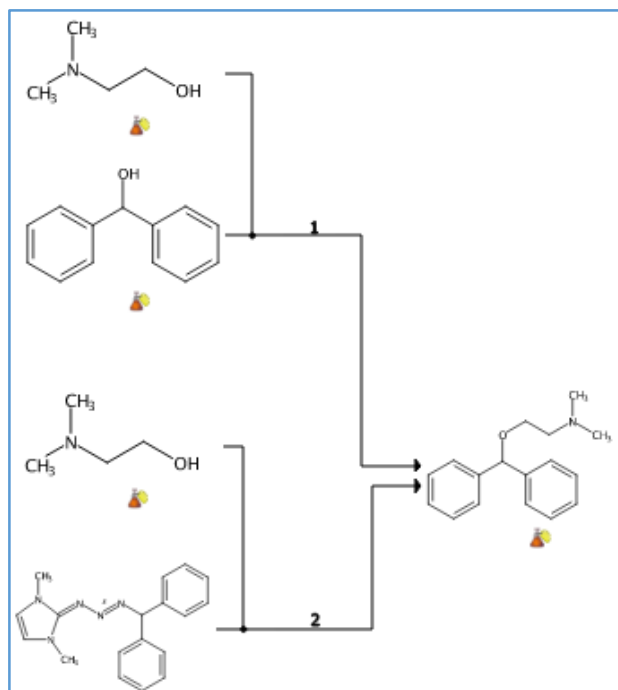
۸. پاک کردن محیط کار SciPlanner

۹. پاک کردن انتخابی واکنش دهند یا واکنشگر مورد نظر


۱۰. ترسیم پیکان از ترکیبی به ترکیب دیگر

برای انتقال واکنش مورد نظر از باکس شماره ۱ موسوم به Library به محیط رسم می توان با کلیک کردن و نگه داشتن آن و انتقال، این کار را انجام داد (Drag and Drop)

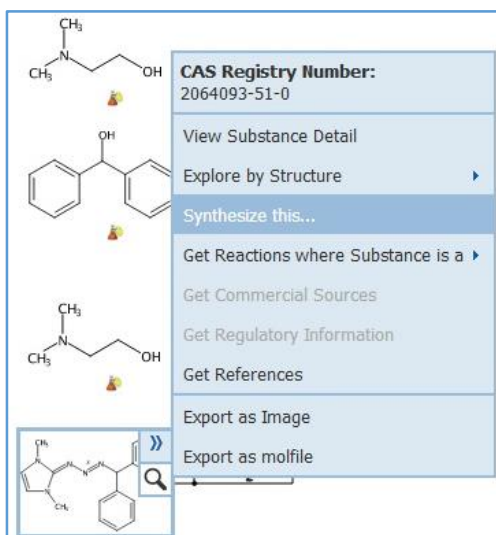
همچنین همانگونه که در شکل ۶-۶ مشاهده می کنید در صورتی که دو ترکیب یکسان بودند می توانید با قرار دادن آن دو روی هم، از تکرار ترکیب جلوگیری کنید.



شکل ۶-۶

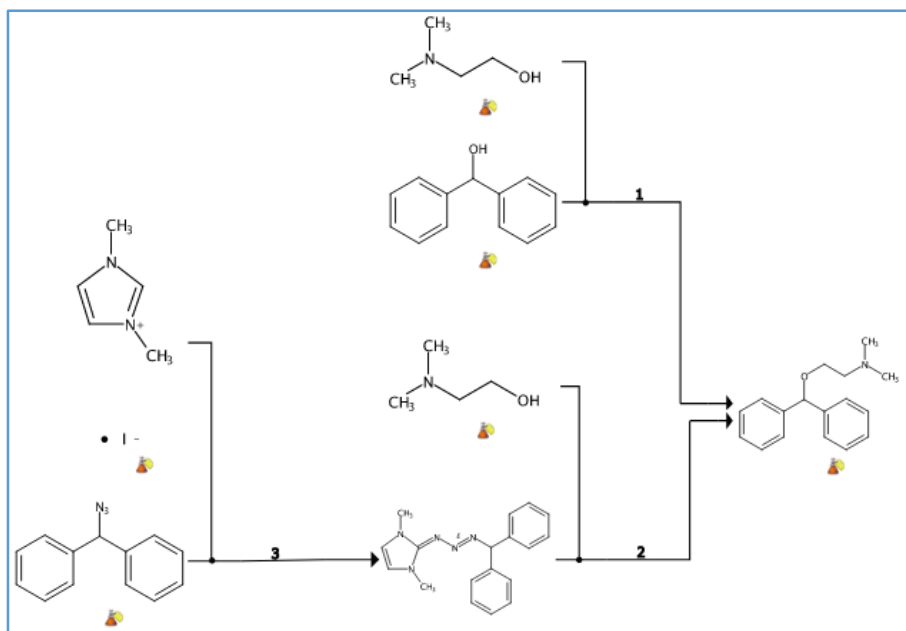
علامت  مربوط به دسترسی تجاری ترکیبات است که می توان با کلیک روی هرکدام از آنها جهت تهیه ترکیب مورد نظر و بررسی دسترسی آنها اطلاعات کافی را بدست آورد.

همانگونه که در شکل ۶-۷ مشخص است یکی از ترکیبات دسترسی تجاری نداشته و در نتیجه این ترکیب نیز سنتزی است به همین منظور باید سنتز این ترکیب را نیز در SciFinder جستجو کرد.



شکل ۶-۷

و مجدداً نتیجه مورد نظر را در در SciPlanner و سپس محیط رسم واکنش اضافه کرد که در نهایت با یکی کردن دو ترکیب یکسان، نتیجه به صورت زیر نمایش داد می شود.



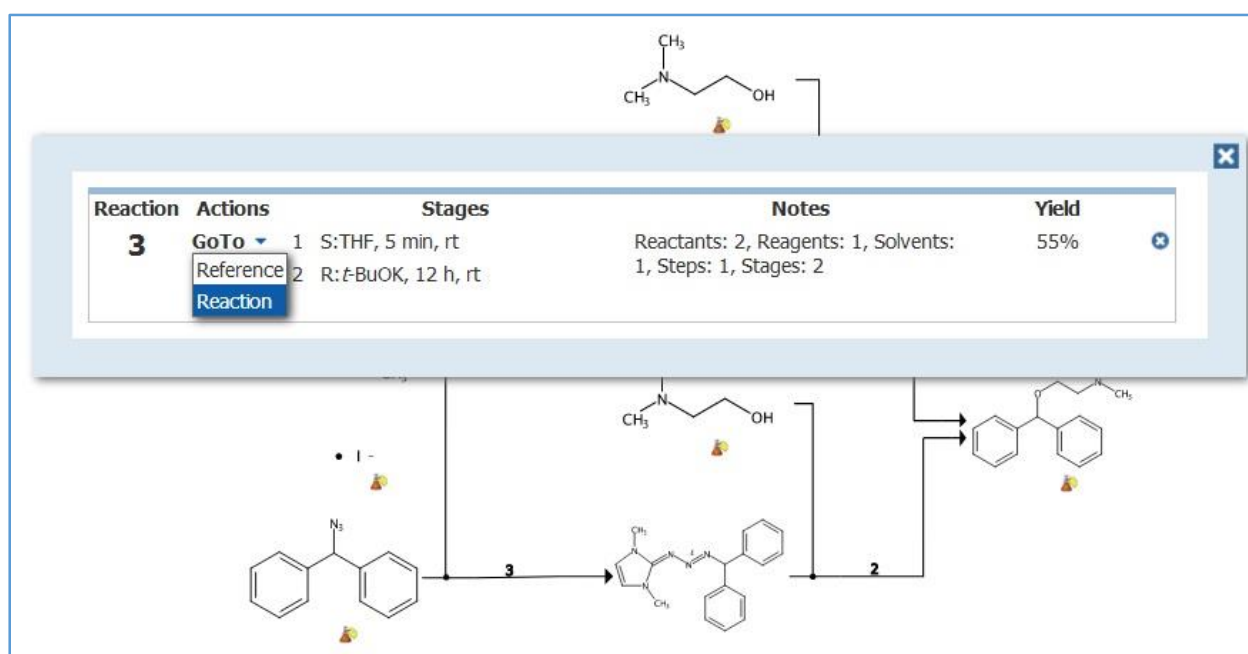
شکل ۶-۸

به این صورت تمامی ترکیبات از مواد اولیه قابل دسترس که به صورت تجاری قابل خریداری هستند نمایش داده می شوند.

همچنین می توان با تغییر در چینش ترکیبات نیز بهترین شیوه برای نمایش تولی واکنش را انتخاب کرد.

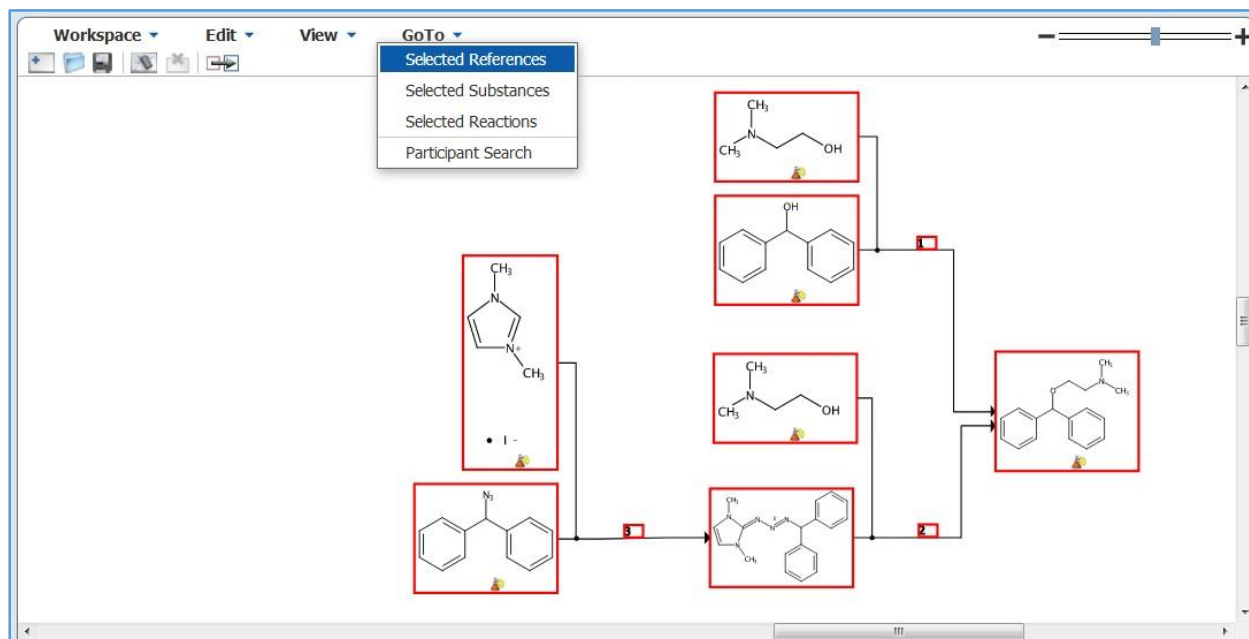
روی هر پیکان عددی نشان داده شده که با بردن موس روی آن می توان شرایط واکنش را مطابق شکل ۶-۹ مشاهده کرد

همچنین با زدن کلیک روی Goto می توان به رفرنس و واکنش مربوطه دسترسی پیدا کرد.



شکل ۶-۹

همانگونه که در شکل ۶-۱۰ مشاهده می کنید می توان با انتخاب همه توالی واکنش به صورت یکجا با انتخاب Selected References اسناد و رفرنس های واکنش های مربوطه را مشاهده کرد.

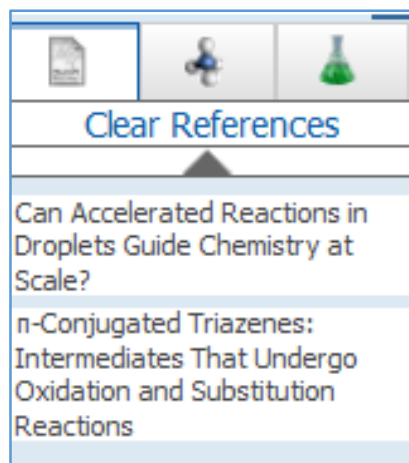


شکل ۱۰-۶

تمامی اسناد و رفرنس های واکنش های مورد نظر مطابق شکل ۱۱-۶ نمایش داده می شوند .

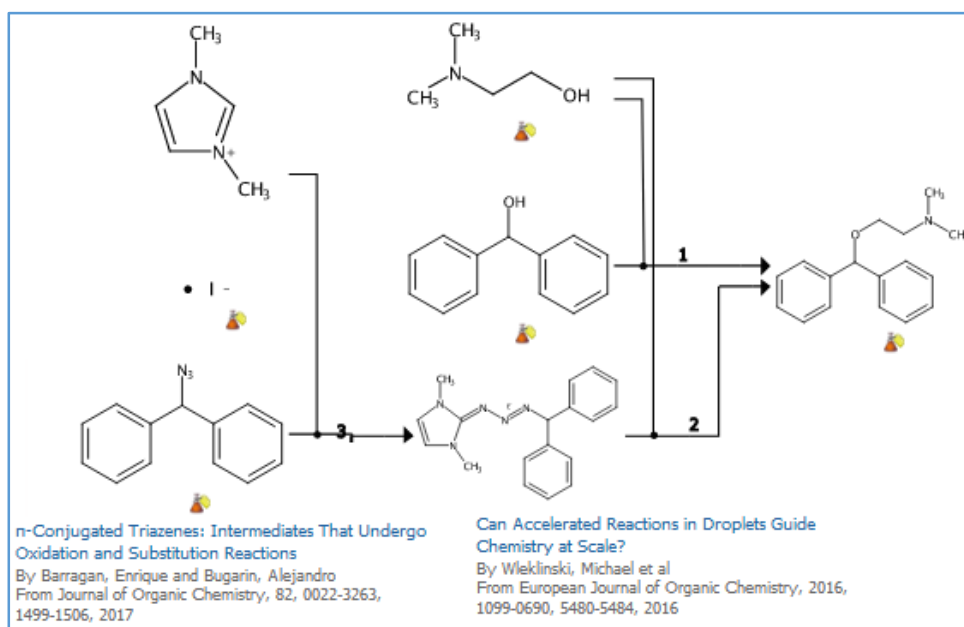
شکل ۱۱-۶

که می توان با انتخاب آنها و زدن Send to SciPlanner در قسمت رفرنس ها در باکس Library مطابق شکل ۱۲-۶ آنها را مشاهده کرد.



شکل ۱۲-۶

حال با کلیک کردن و انتقال هر رفرنس به قسمت واکنش مربوطه می توان مطابق شکل مسیر سنتزی را به صورت کامل و جامع مطابق شکل ۱۳-۶ مشاهده کرد که به این صورت مرتب شده است.



شکل ۱۳-۶



فصل هفتم

آنالیز ، بهبود و اصلاح مجدد نتایج

Analyze and Refine

با توجه به حجم بالای ارزیابی ها و عمق بسیار زیاد اطلاعات در ابزار جستجو SciFinder نیاز به ابزارهایی برای آنالیز، دسته بندی، بهبود و اصلاح مجدد اطلاعات است که این نتایج را بیش از پیش به هدف مورد نظر نزدیک کند. علاوه بر این ، هدف از این ابزار ها مرتب کردن، تجزیه و تحلیل و اصلاح اطلاعات به منظور صرفه جویی در وقت شما و افزایش بهره وری از زمان در SciFinder که به عنوان مجموعه ای از بزرگترین و قابل اعتماد ترین منبع برای شیمی دانان و علوم وابسته به آن از قبیل داروسازی، مهندسی و کشاورزی ، به شمار می آید. این بخش همانگونه که مستحضر هستید شامل سه بخش کلی در ابزار جستجو قدرتمند SciFinder است که در هر مورد به توضیح و بررسی کاربرد آن میپردازیم.

Analyze-۱-۷

هدف از این قسمت تجزیه و تحلیل نتایج حاصل از جستجو برای درک بهتر و عبور از تکنولوژی پیچیده و یافتن مسیر درست رسیدن به هدف است.

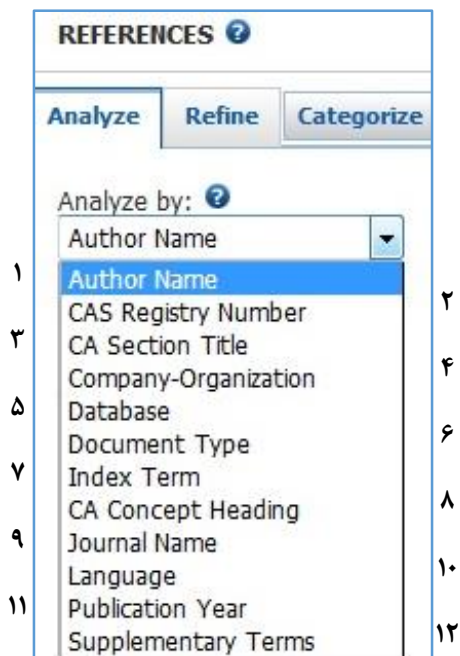
با استفاده از این ابزار می توان:

- به سرعت اطلاعات در دسترس را پیدا کرد.
- به تجزیه و تحلیل نتایج آسان حاصل از بازیابی در مواردی همچون فعالیت زیستی ترکیبات، انواع سند (مقاله ، ثبت اختراع و یا ...)، تعداد مراحل واکنش، اسامی نویسندگان، سازمان ها، تامین کنندگان تجاری و دیگر اطلاعاتی که به طور کامل به آن خواهیم پرداخت.
- نتایج را با توجه به شاخص های تعیین شده در CAS به صورت موضوعی طبقه بندی کرد.

این ابزار در سه بخش متفاوت رفرنس ها و اسناد ، ترکیبات شیمیایی و واکنش ها ، دارای گزینه های متفاوتی است که در هر مورد به توضیح آن می پردازیم.

۷-۱-۱- آنالیز اسناد و مراجع (References)

در قسمت رفرنس ها و اسناد همانطور که در شکل ۷-۱ مشاهده می کنید اطلاعات با توجه به هر مورد مرتب و دسته بندی می شود و به نمایش در می آید :



شکل ۷-۱

۱. اسم نویسنده سند

۲. شماره منحصر به فرد CAS Registry No.

۳. تقسیم بندی در Chemical Abstract

۴. نام سازمان یا شرکتی که پروژه را انجام داده است

۵. نام پایگاه داده (به عنوان مثال MEDLINE)

۶. نوع سند (مقاله ، ثبت اختراع و یا ...)

۷. اصطلاحات نمایه شده

۸. مجموعه ای از اصطلاحات با موضوع بندی کلی

۹. نام ژورنال

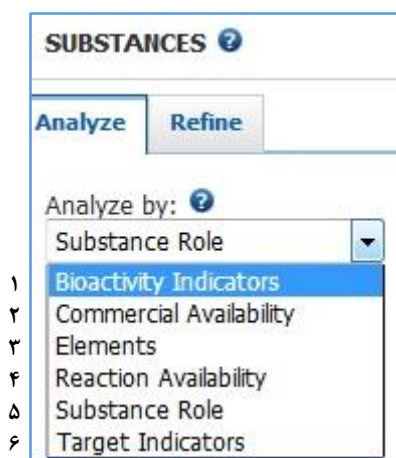
۱۰. زبان

۱۱. سال انتشار سند

۱۲. اصطلاحات مکمل یا اصطلاحات نمایه شده که اغلب توسط نویسندگان نوشته شده است.

۷-۱-۲- آنالیز ترکیبات (Substances)

در قسمت ترکیبات نیز این بخش همانند شکل ۷-۲ شامل موارد زیر است که در هر مورد اطلاعات با توجه به آن مورد تجزیه و تحلیل قرار میگیرد.



شکل ۷-۲

۱. شاخص های فعالیت زیستی ترکیب مورد نظر

۲. دسترسی های تجاری

۳. عناصر موجود در ترکیب

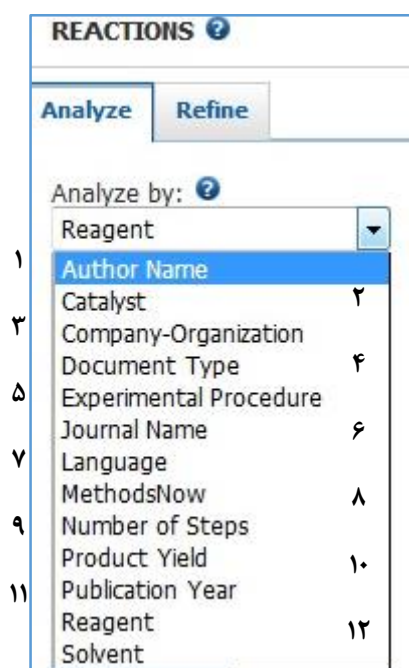
۴. واکنش های در دسترس

۵. نقش ترکیبات (بررسی مطالعات انجام شده روی ترکیب مورد نظر)

۶. شاخص های هدف

۷-۱-۳- آنالیز واکنش ها (Reactions)

در قسمت واکنش ها نیز مطابق شکل ۷-۳ این قسمت به موارد زیر تقسیم می شود:



شکل ۷-۳

۱. نام نویسنده

۲. کاتالیست به کار برده شده در واکنش

۳. سازمان یا شرکتی که واکنش در آنجا انجام شده است

۴. نوع سند

۵. فرایند های آزمایشگاهی جهت انجام واکنش

۶. نام ژورنال

۷. زبان

۸. دستور العمل گام به گام برای انجام واکنش

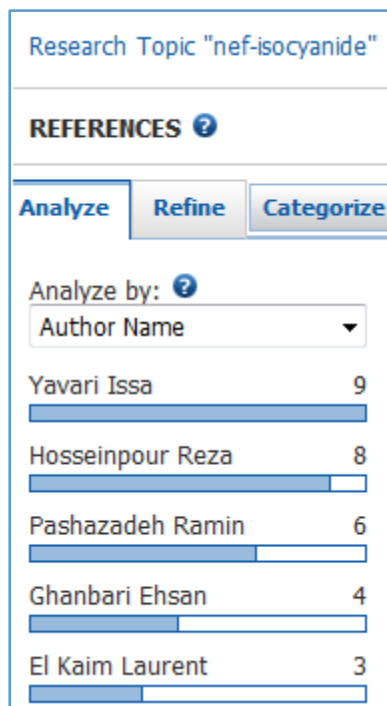
۹. تعداد مراحل واکنش

۱۰. بازده محصول

۱۱. سال انتشار سند

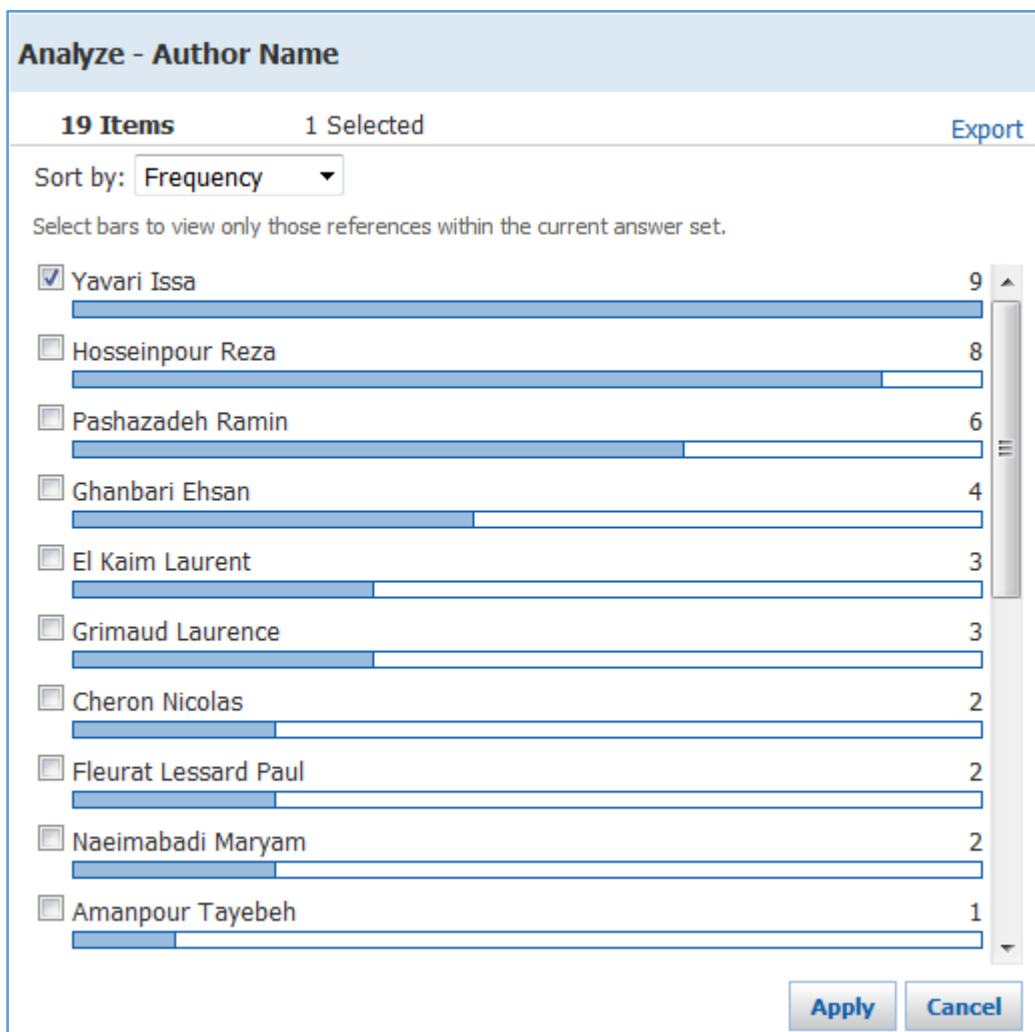
۱۲. نام واکنش دهنده

به عنوان مثال با جستجو واکنش های موسوم به Nef-Isocyanide و استفاده از ابزار Analyze می توان اطلاعات را مطابق شکل ۴-۷ مشاهده کرد.



شکل ۴-۷

همچنین می توان با [Show More](#) اطلاعات را مطابق آنچه مد نظر است مطابق شکل ۵-۷ انتخاب کرد.



شکل ۵-۷

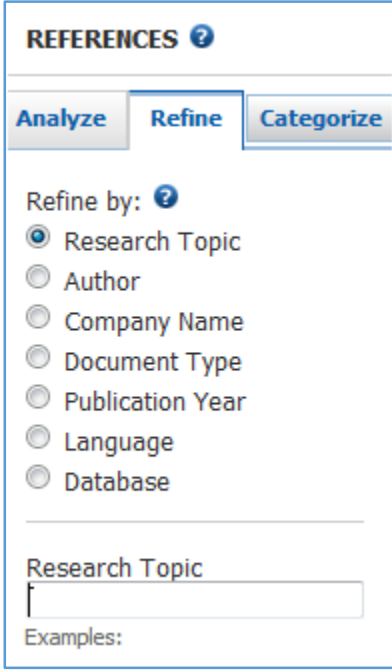
همچنین می توان از این اطلاعات یا هر کدام از اطلاعات مشابه دیگر با انتخاب گزینه [Export](#) فایلی برای اشتراک گذاری با فرمت PDF و یا Excel ذخیره کرد.

Refine-۲-۷

جستجو را برای بازیابی بهترین و کامل ترین راه حل ممکن محدود و محدود تر میکند و این امر سبب پیشرفت در پروژه تحقیقاتی در کمترین زمان ممکن می شود. صرفه جویی در وقت و پیدا کردن پاسخ مطلوب و توانایی ارزیابی ارزش اموال، بررسی استخلاف، مراجع، مواد و واکنش و دیگر اطلاعات موجود در واکنش هاست. این ابزار نیز همانند قسمت قبل در سه بخش متفاوت رفرنس ها و اسناد ، ترکیبات شیمیایی و واکنش ها ، دارای ویژگی های متفاوتی است که در هر مورد به توضیح آن می پردازیم.

۱-۲-۷- اصلاح مجدد اسناد و مراجع (References)

در قسمت رفرنس ها و اسناد مطابق بخش قبل همانطور که در شکل ۶-۷ مشاهده می کنید اطلاعات با توجه به هر مورد مرتب و دسته بندی شده و با انتخاب آنها می توان در بهبود و تصحیح مجدد آن کمک کرد :



REFERENCES ?

Analyze Refine Categorize

Refine by: ?

- ۱ Research Topic
- ۲ Author
- ۳ Company Name
- ۴ Document Type
- ۵ Publication Year
- ۶ Language
- ۷ Database

Research Topic

Examples:

شکل ۶-۷

۱. موضوع تحقیق: همانطور که در شکل ۶-۷ نیز مشخص است می توان با وارد کردن موضوع مورد نظر جستجو را به سمت هدف محدود و بهینه کرد.

۲. نام نویسنده

۳. نام شرکت

۴. نوع سند

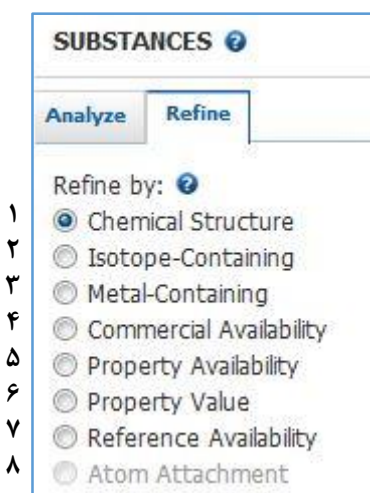
۵. سال انتشار سند

۶. زبان

۷. پایگاه داده

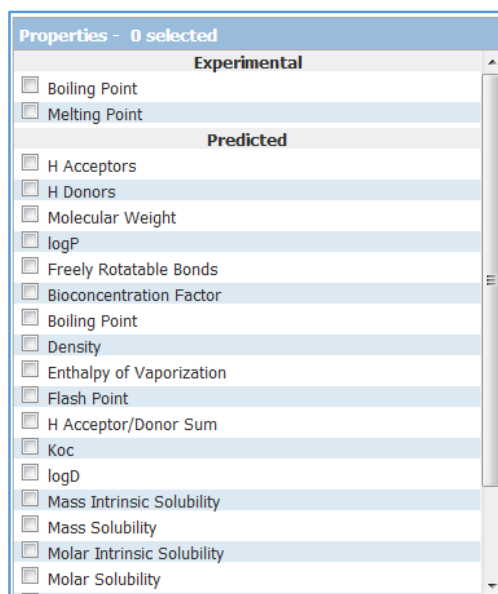
۷-۲-۲- اصلاح مجدد ترکیبات (Substances)

در قسمت ترکیبات نیز این بخش همانند قسمت قبل در شکل ۷-۷ مشخص شده که در هر مورد اطلاعات با توجه به آن مورد بازبایی و بهینه سازی قرار می گیرد.



شکل ۷-۷

۱. ساختار شیمیایی ترکیب مورد نظر
۲. ترکیبات شامل ایزوتوپ های عناصر مختلف
۳. ترکیبات شامل فلزات
۴. دسترسی تجاری ترکیبات
۵. دسترسی به خواص ترکیب
۶. دسترسی به خواص آزمایشگاهی و پیش بینی شده



شکل ۷-۸

۷. دسترسی به رفرنس ها و اسناد ترکیب مورد نظر
۸. اتم های متصل به ترکیب مورد نظر

Search type:
Substructure

Only retrieve substances that:

۱ Have references

۲ Are commercially available

۳ Are a single component

۴ Are in specific substance classes

۵ Are in specific types of studies

شکل ۷-۹

۹. در این قسمت فقط ترکیباتی را بازیابی می کند که :

۱. رفرنس داشته باشد

۲. از لحاظ تجاری در دسترس باشد

۳. به صورت تک جزئی باشد

۴. در گروه خاصی از ترکیبات ویژه باشد

۵. در نوع خاصی از تحقیق و مطالعه موجود باشد.

۷-۲-۳- اصلاح مجدد واکنش ها (Reactions)

در قسمت واکنش ها نیز این قسمت مطابق شکل ۷-۱۰ به موارد زیر تقسیم می شود.

۱. ساختار ترکیبات موجود در واکنش مورد نظر

۲. بازده محصولات

۳. تعداد مراحل واکنش

۴. دسته بندی واکنش

REACTIONS ?

Analyze Refine

Refine by: ?

۱ Reaction Structure

۲ Product Yield

۳ Number of Steps

۴ Reaction Classification

۵ Excluding Reaction Classification

۶ Non-participating functional groups

شکل ۷-۱۰

Reaction Classification(s):

- Biotransformation
- Catalyzed
- Chemoselective
- Combinatorial
- Electrochemical
- Gas-phase
- Non-catalyzed
- Photochemical
- Radiochemical
- Regioselective
- Stereoselective

شکل ۷-۱۱

۵. دسته بندی واکنش هایی بجز واکنش مورد نظر

۶. انتخاب گروه های عاملی که در واکنش شرکت نمی کنند

Non-participating
Functional Group(s)

View: All 217 ▾

0 Selected Clear Selections

- Acetal
- Acetyl
- Acid Halide
- Acyclic Alkene
- Acyclic Ketone
- Acylmetal
- ALCOHOLS

شکل ۷-۱۲

در قسمت Refine نیز می توان با جستجو واکنش هیدرولیز نیتریل ها با انتخاب بازده ۷۰ تا ۱۰۰ نتیجه جستجو را مطابق شکل ۷-۱۴ تغییر داد.

REACTIONS ?

Get References | Tools ▾

Analyze | **Refine**

Group by: Transformation ▾ | Sort by: Frequency ▾ | ↓

0 of 49 Reactions Selected

Refine by: ?

- Reaction Structure
- Product Yield
- Number of Steps
- Reaction Classification
- Excluding Reaction Classification
- Non-participating functional groups

Product Yield: 100 %

Upper Limit Example: 80

70 %

Lower Limit Example: 20

Include answers that have no product yield

Refine

1. Hydrolysis of Nitriles
45 Reactions

$$R-C\equiv N \xrightarrow{H_2O} R-C(=O)Y$$

Y = NH₂, OH

2. C-Alkylation of Ketones, Aldehydes, Nitriles, and Carboxylic Esters
3 Reactions


$$R^2-Y \begin{cases} \xrightarrow{R-CH_2-C(=O)R^1} R^2-CH(R)-C(=O)R^1 \\ \xrightarrow{R^1-CH_2-CN} R^2-CH(R^1)-CN \end{cases}$$


Y = Leaving group

3. Acylation of Nitrogen Nucleophiles by Carboxylic Acids
1 Reaction


شکل ۷-۱۳

Reaction Structure structure variable only at spe... > reactions (49) > refine "70 - 100% yield" (22)

REACTIONS 

Get References  Tools ▾

Analyze **Refine**

Analyze by:  Reagent ▾

HCl	5
NaOH	4
H ₂ SO ₄	3
88-99-3	2
H ₂ O	2
632-58-6	1
D-Glucose	1

Group by: Transformation ▾ Sort by: Frequency ▾ ↓

0 of 22 Reactions Selected

1. Hydrolysis of Nitriles
21 Reactions

$$\text{R}-\text{C}\equiv\text{N} \xrightarrow{\text{H}_2\text{O}} \text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{Y}$$

Y = NH₂, OH

2. Acylation of Nitrogen Nucleophiles by Carboxylic Acids
1 Reaction

$$\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{OH} + \text{R}^1-\text{NH}-\text{R}^1 \longrightarrow \text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{N}(\text{R}^1)_2$$

شکل ۷-۱۴

Categorize-۳-۷

این ویژگی که فقط در قسمت اسناد (References) وجود دارد به شما اجازه می دهد تا منابع خود را بر اساس دسته بندی هایی در اصطلاحات شاخص های شیمیایی خلاصه شده طبقه بندی کنید.

ابتدا با انتخاب موضوع اصلی یا به اصطلاح در Heading به جستجو می پردازیم و سپس موضوع را به صورت دسته بندی شده انتخاب می کنیم و در ادامه با انتخاب اصطلاحات فهرست شده می توانید این اطلاعات را در دسته بندی تعیین شده انتخاب کنید.

به عنوان مثال در قسمت رفرنس ها با جستجو نانو اسفنج ها با استفاده از فلزات نادر ، نتیجه مطابق شکل ۷-۱۵ به نمایش در می آید.



Research Topic "nano sponge in noble metal" > references (27)

REFERENCES 27

Get Substances Get Reactions Get Related Citations Tools

Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

Analyze Refine Categorize

Sort by: Accession Number

0 of 27 References Selected

Analyze by: Author Name

Du Xi Wen 2

Kulinich Sergei A 2

Li Guangfang Grace 2

Lin Ye 2

Meng Xiangkang 2

Newman Roger C 2

Niu Kai Yang 2

Sakai Go 2

Tang Shaochun 2

Vega Adrian A 2

1. Preparation method of network-like Ag-Au-Pd trimetal porous material

By Tang, Shaochun; Li, Tianyu; Xie, Hao; Huang, Xiao; Meng, Xiangkang
From Faming Zhanli Shenqing (2017), CN 106670495 A 20170517. | Language: Chinese, Database: CAPLUS

The title method comprises: under proper condition, suspending sponge-like silver nanostructure surface in chloroauric acid-potassium chloropalladate mixed soln., rapidly and partially substituting, distributing the generated gold and palladium nano particle uniformly and forming rough surface. By changing mixed soln. concn., effective regulation can be carried out to surface roughness, metallic atom ratio. In the case that noble metal Au and Pd total contents are very low (at. percent sum is less than 10%), Ag-Au-Pd trimetal porous material has ultra-high SERS detection sensitivity to the rhodamine B adsorbed on the surface, and very high catalysis activity in reaction system of sodium borohydride reducing 4-nitrophenol. The present invention has quick prepn. method, low cost, easy scale, and paves an effective way for the prepn. of polymetallic porous nanomaterial.

2. From biomass chitin to mesoporous nanosheets assembled loofa sponge-like N-doped carbon/g-C₃N₄ 3D network architectures as ultralow-cost bifunctional oxygen catalysts

By Wu, Xiaoyu; Li, Songmei; Wang, Bo; Liu, Jianhua; Yu, Mei
From Microporous and Mesoporous Materials (2017), 240, 216-226. | Language: English, Database: CAPLUS

To accelerate the O₂ redn. reaction (ORR) and O₂ evolution reaction (OER) in the field of air-based energy technologies, efficient low-cost bifunctional catalysts are highly desired. Here, biomass chitin-derived N-doped C (C-Chitin)/graphitic C₃N₄ (g-C₃N₄) composites were designed and fabricated via an ultralow-cost route including the low-temp. pyrolysis of biomass chitin and the subsequent carbonization. The C-Chitin/g-C₃N₄ composites exhibit well-designed loofa-sponge-like 3D network architectures as ultralow-cost bifunctional oxygen catalysts.

شکل ۷-۱۵

در اینجا تعداد ۲۷ سند بازیابی شد و حال با استفاده از Categorize به دسته بندی و انتخاب آنها جهت حصول نتیجه مطلوب تر میپردازیم.

در این بازیابی با انتخاب ۴ فلز نتیجه به تعداد ۱۸ تا کاهش یافت.

Category Heading	Category	Index Terms	Selected Terms
All	Substances (297)	Page: 1 of 3 Select All Deselect All	Click 'x' to remove the category from 'Selected Terms'
Technology		<input checked="" type="checkbox"/> Gold 13	<input checked="" type="checkbox"/> All > Substances (4 Terms)
General chemistry		<input type="checkbox"/> Nanoparticles 12	
Physical chemistry		<input checked="" type="checkbox"/> Palladium 9	
Synthetic chemistry		<input checked="" type="checkbox"/> Platinum 9	
Catalysis		<input checked="" type="checkbox"/> Silver 9	
Environmental chemistry		<input type="checkbox"/> Copper 7	
Biotechnology		<input type="checkbox"/> Surface area 7	
Polymer chemistry		<input type="checkbox"/> Nanoporous materials 6	
Analytical chemistry		<input type="checkbox"/> Nanostructures 6	
Genetics & protein chemistry		<input type="checkbox"/> Noble metals 6	
Biology		<input type="checkbox"/> Methanol 5	
		<input type="checkbox"/> Porosity 5	
		<input type="checkbox"/> Silver nitrate 5	
		<input type="checkbox"/> Sponges (artificial) 5	
		<input type="checkbox"/> Catalysts 4	
		<input type="checkbox"/> Chloroauric acid 4	

شکل ۷-۱۶



Research Topic "nano sponge in noble metal" > references (27) > refine by categories

REFERENCES ? [Get Substances](#) [Get Reactions](#) [Get Related Citations](#) [Tools](#) [Create Keep Me Posted Alert](#) [Send to SciPlanner](#)

Analyze **Refine** Categorize

Analyze by: ?
Author Name

Meng Xiangkang	2
Sakai Go	2
Tang Shaochun	2
Xu Caxia	2
An Yingze	1
Baumer Marcus	1
Biener Jeurgen	1
Biener Monika M	1
Cortie M B	1
Cui Juan	1

Sort by: Accession Number ↓

0 of 18 References Selected

1. Preparation method of network-like Ag-Au-Pd trimetal porous material PATENTPAK

[Quick View](#) [Other Sources](#)

By Tang, Shaochun; Li, Tianyu; Xie, Hao; Huang, Xiao; Meng, Xiangkang
From Faming Zhuanli Shenqing (2017), CN 106670495 A 20170517. | Language: Chinese, Database: CAPLUS

The title method comprises: under proper condition, suspending **sponge-like silver nanostructure** surface in chloroauric acid-potassium chloropalladate mixed soln., rapidly and partially substituting, distributing the generated gold and palladium **nano** particle uniformly and forming rough surface. By changing mixed soln. concn., effective regulation can be carried out to surface roughness, **metallic** atom ratio. In the case that **noble metal** Au and Pd total contents are very low (at. percent sum is less than 10%), Ag-Au-Pd trimetal porous material has ultra-high SERS detection sensitivity to the rhodamine B absorbed on the surface, and very high catalysis activity in reaction system of sodium borohydride reducing 4-nitrophenol. The present invention has quick prepn. method, low cost, easy scale, and paves an effective way for the prepn. of polymetallic porous **nanomaterial**.

2. Electrocatalytic activity of bimetallic Pd-Au nanostructure supported on nanoporous stainless steel surface using galvanic replacement reaction toward the glycerol oxidation in alkaline media Other Sources

[Quick View](#) [Other Sources](#)

By Rezaei, Behzad; Havakeshian, Elaheh; Ensafi, Ali A.
From Journal of Electroanalytical Chemistry (2016), 782, 108-116. | Language: English, Database: CAPLUS

Co-deposition of Au and Pd through galvanic replacement reaction (GRR) was used as a highly efficient method to fabricate bimetallic Pd-Au **nanostructure** on a **nanoporous** stainless steel substrate (Pd-Au/NPSS). Then, the electrocatalytic behavior of Pd-Au/NPSS for glycerol oxidn. was studied in alk. media and compared with Au/NPSS and Pd/NPSS using electrochem. methods. FESEM images showed that a **sponge-like** overlayer contg. many **nanosheets** and pores

شکل ۱۷-۷