راهنمای استفاده از :

تهیه و تنظیم :

موسسه نسیم ایمان

ویرایش ۲۰۱۷

تلفن: ۲۲۶۴۶۷۱۵ فکس: ۲۲۶۴۶۷۲

فهرست مطالب

فصل اول (معرفی ابزار جستجو سایفایندر) ۶

فصل دوم (جستجوی رفرنس ها) ۹

۲-۱ جستجو با استفاده از نام سند (Research Topic) ۱۰

۲-۱-۱ Quick View ۱۱

۲-۱-۲ Other Resource ۱۲

۲-۱-۳ Remove Duplicate ۱۳

۲-۱-۴ مشاهده سند ۱۴

۲-۲ جستجو با استفاده از نام نویسنده (Author Name) ۱۷

۲-۳ جستجو با استفاده از نام شرکت (Company Name) ۱۸

۲-۴ جستجو با استفاده از شناسه سند (Document Identifier) ۱۹

۲-۵ جستجو با استفاده از نام ژورنال (Journal Name) ۱۹

۲-۶ جستجو با استفاده از شماره پتنت (Patent Number) ۲۱

۲-۷ برچسب ها (Tags) ۲۳

فصل سوم (جستجوی ترکیبات) ۲۴

۳-۱- جستجو با استفاده از ساختار شیمیایی (Chemical Structure) ۲۵

۳-۱-۱- ابزار های رسم ساختار ۲۶

۳-۱-۲-روش های جستجو ترکیبات ۳۶

۳-۱-۳- Import CXF ۳۷
۳-۱-۴- Advanced Search ۳۷
۳-۱-۵- جستجوی ساختار به صورت Exact Structure..... ۳۹
۳-۱-۶- انتخاب یک ترکیب و بررسی ویژگی های آن..... ۴۵
۳-۱-۷- جستجوی ساختار به صورت SubStructure ۵۱
۳-۱-۸- جستجوی ساختار به صورت Similarity ۵۲
۳-۱-۹-رسم ساختار و استفاده از ابزار ها به منظور مقایسه نتیجه ۵۲
۳-۲- Markush ۵۷
۳-۲-۱- رسم ساختار ناشناخته به عنوان ساختار Markush و جستجو به صورت کلی ۵۸
۳-۲-۲- PatentPak ۶۰
۳-۳- Molecular Formula..... ۶۲
۳-۴- Property..... ۶۲
۳-۵- Substance Identifier..... ۶۳
۳-۵-۱-جستجو ساختار میدازولام در Substance Identifier و ابزار های مربوطه ۶۴
فصل چهارم (جستجوی واکنش ها) ۶۷
۴-۱- جستجو واکنش با رسم ساختار شیمیایی (Reaction Structure)..... ۶۸
۴-۲- جستجوی یک واکنش مورد نظر ۷۱
۴-۳- جستجوی پیشرفته واکنش ها ۷۲
۴-۴-استفاده از ابزار های مفید Tools، Group و Sort در واکنش ها ۷۵

۴-۵- Synthesis This ۷۸
فصل پنجم (جستجوی پلیمرها) ۸۰
۵-۱-جستجو پلیمرها با استفاده از رسم ساختار ۸۲
۵-۲- جستجو پلیمر ها با استفاده از فرمول مولکولی (Molecular Formula) ۸۳
۵-۲-۱-جستجو با استفاده از فرمول مولکولی مونومر ۸۴
۵-۲-۲-جستجو با استفاده از واحد های تکرار شونده در ساختار پلیمر (SRU) ۸۵
۵-۲-۳-جستجو پلیمر ها با گروه های انتهایی ۸۶
۵-۳-جستجو بر اساس CAS Registry No. منحصر به فرد ماده ۸۷
۵-۴- جستجو بر اساس نام ترکیب ۸۸
۵-۵-جستجو بر اساس موضوع ۸۸
فصل ششم (رسم توالی واکنش ها) ۹۰
۶-۱- معرفی SciPlanner ۹۱
۶-۲- بررسی سنتز دارو در SciPlanner ۹۲
فصل هفتم (آنالیز ، بهبود و اصلاح مجدد نتایج) ۱۰۲
۷-۱-Analyze ۱۰۳
۷-۱-۱-آنالیز اسناد و مراجع (References) ۱۰۴
۷-۱-۲- آنالیز ترکیبات (Substances) ۱۰۵
۷-۱-۳- آنالیز واکنش ها (Reactions) ۱۰۶
۷-۲-Refine ۱۰۹

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

فصل اول

معرفی ابزار جستجو سایفایندر

Introduction to SciFinder

SciFinder کامل‌ترین 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 می‌باشد که توسط انجمن شیمی امریکا (ACS) ارائه می شود. این مجموعه بر پایه کامل‌ترین اطلاعات علمی با استفاده از مشخصات مواد شیمیایی، واکنش‌ها، Patent ها و مراجع که به صورت روزانه به روزرسانی می شود، به جستجو می‌پردازد.

SciFinder در کوتاه‌ترین زمان ممکن، کامل‌ترین مجموعه از اطلاعات را به صورت یکپارچه در اختیار کاربران قرار می‌دهد.

اطلاعاتی که موتور جستجوی قدرتمند SciFinder ارائه می‌دهد 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 بیلیون‌ها رکورد از شاخص‌های پیش‌بینی شده (از جمله طیف‌های CNMR, HNMR, X-ray, و IR)
- 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 سایت‌های 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 مرحله‌ای و چند مرحله‌ای ژورنال‌ها وPatent ها
- امکان جستجوی واکنش‌های پلیمری و تجزیه و تحلیل آن‌ها
- بهینه‌سازی 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 دیتابیس‌هایCAS 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، زیست شناسی، 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

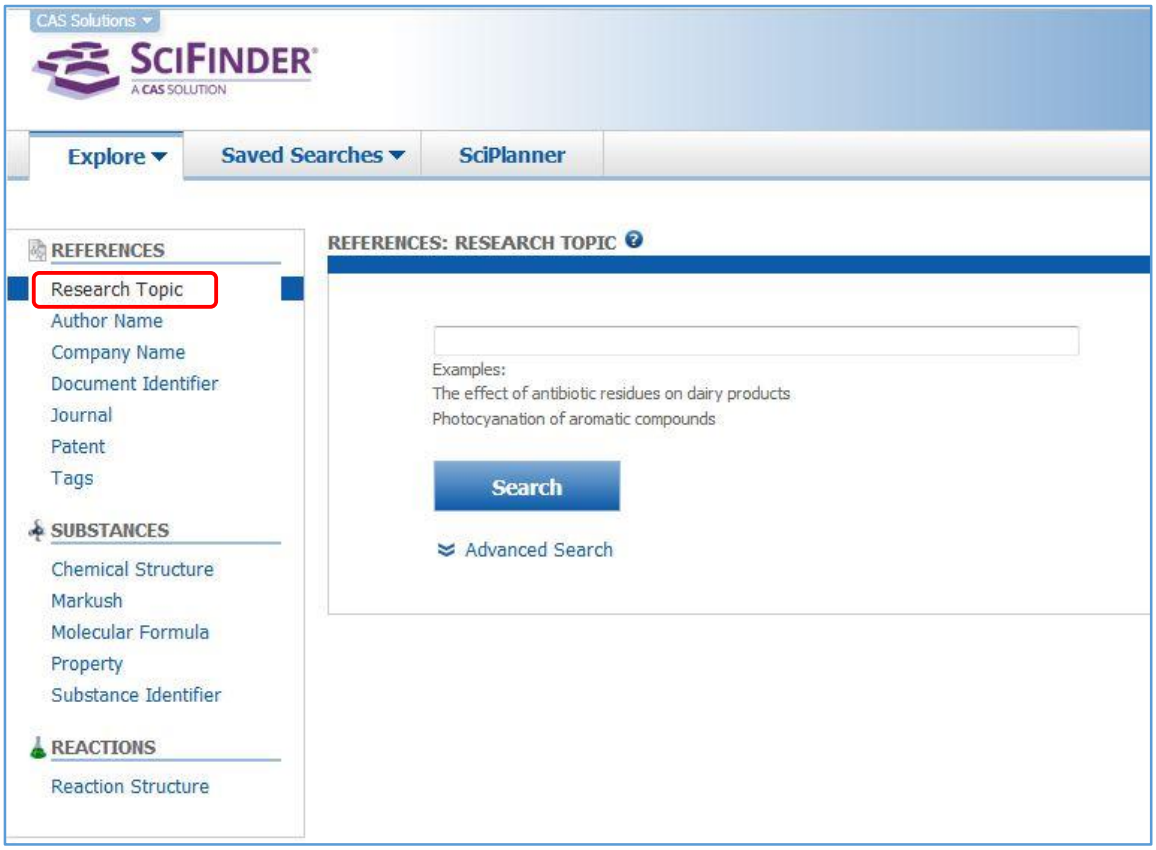
جستجوی رفرنس ها

References Searching

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder

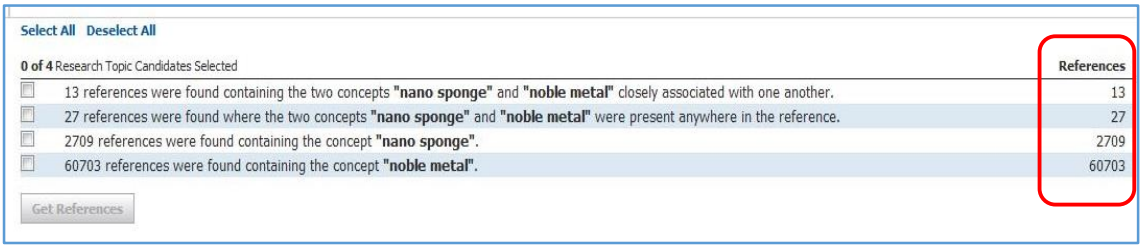
۲- ۱ جستجو با استفاده از نام سند (Research Topic)

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 ۲-۱

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



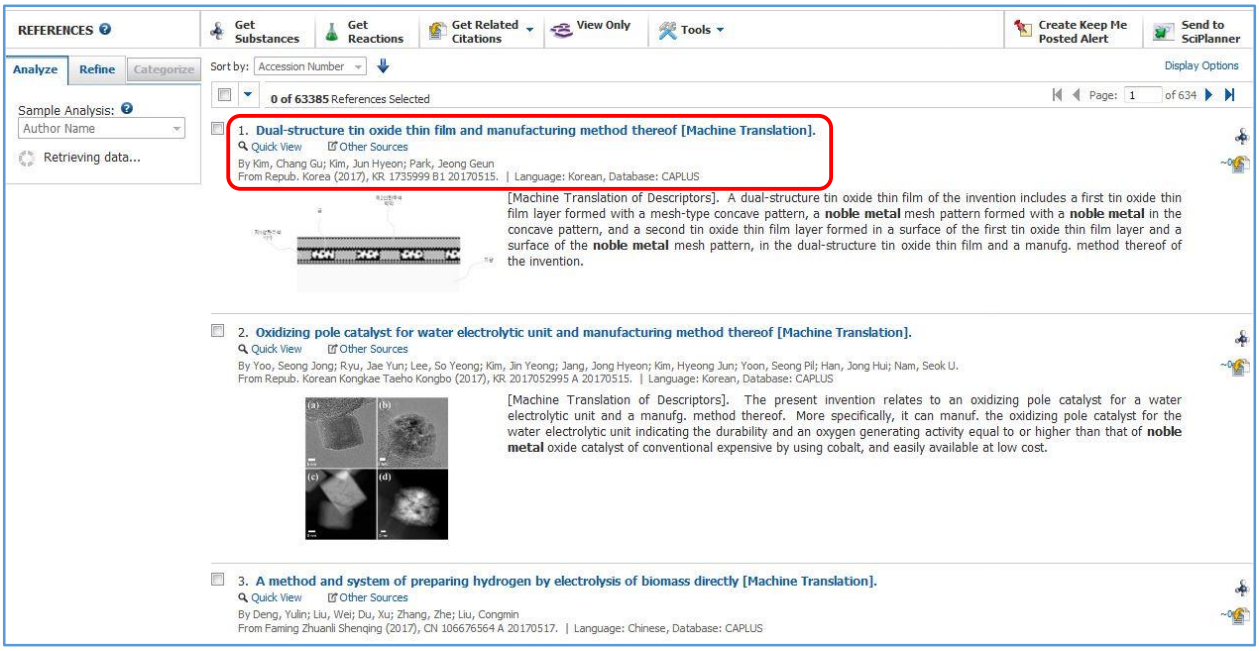
شکل ۲-۲

همانطور که در شکل ۲-۲ مشاهده می کنید در این جستجو هردو 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.

در۲۷۰۹ 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.

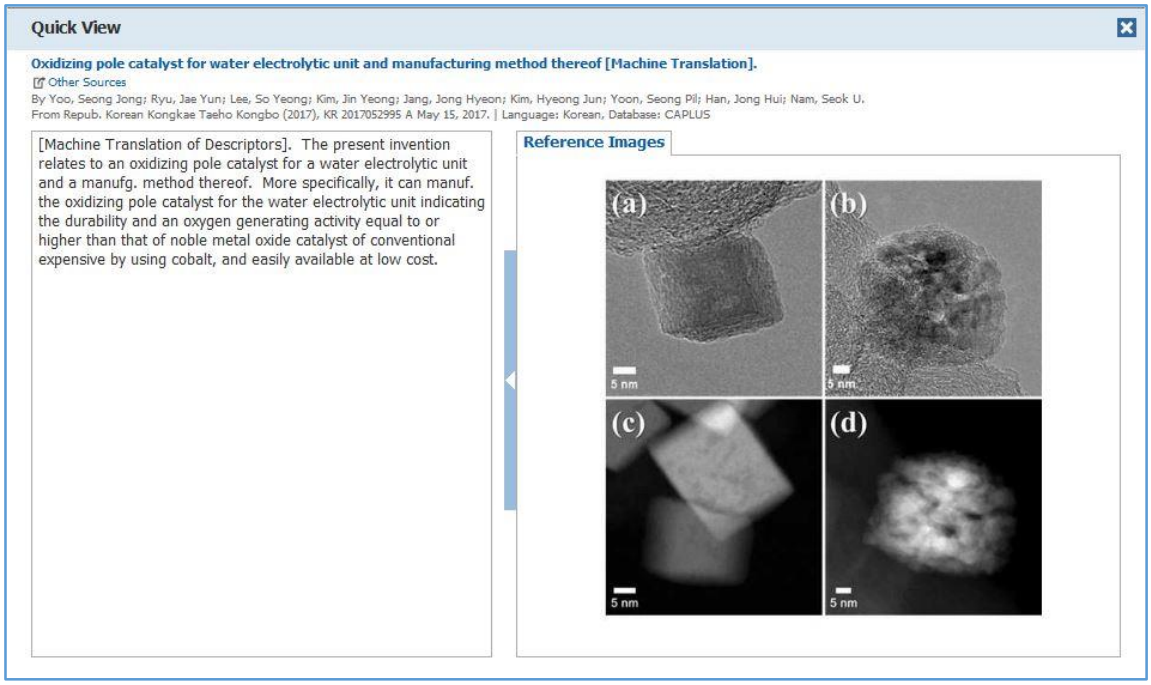


شکل ۲-۳

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 دیتابیسی که سند در آن ثبت شده، ذکر شده است.

Quick View ۱-۱-۲

با کلیک برروی 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.



شکل ۲-۴

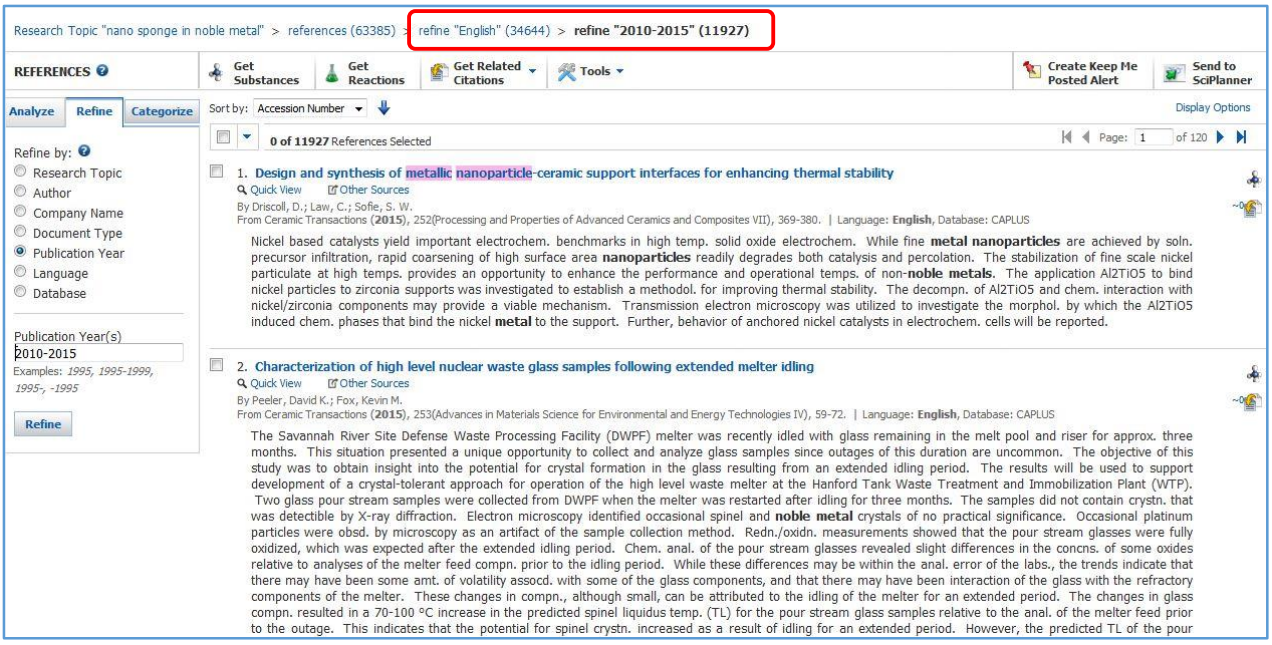
Other Resource ۲-۱-۲

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 بهRefine & 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.

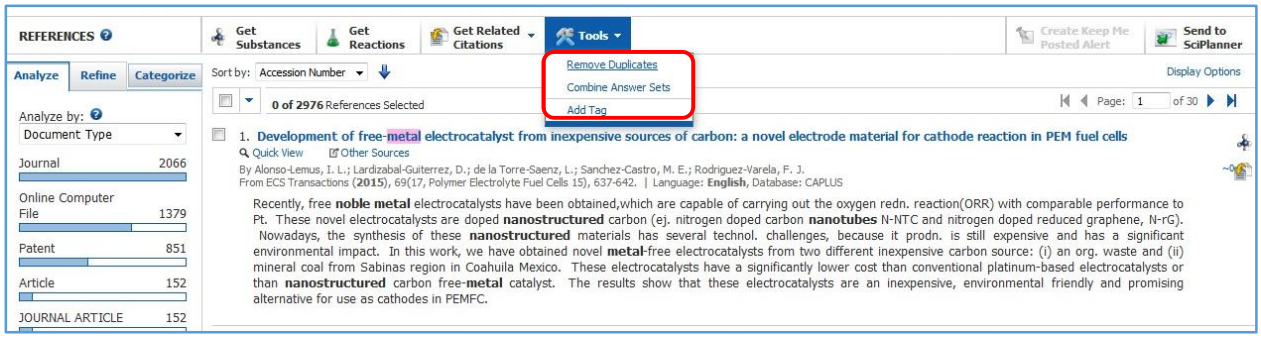


شکل ۲-۵

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.

Remove Duplicate ۳-۱-۲

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.



شکل ۲-۶

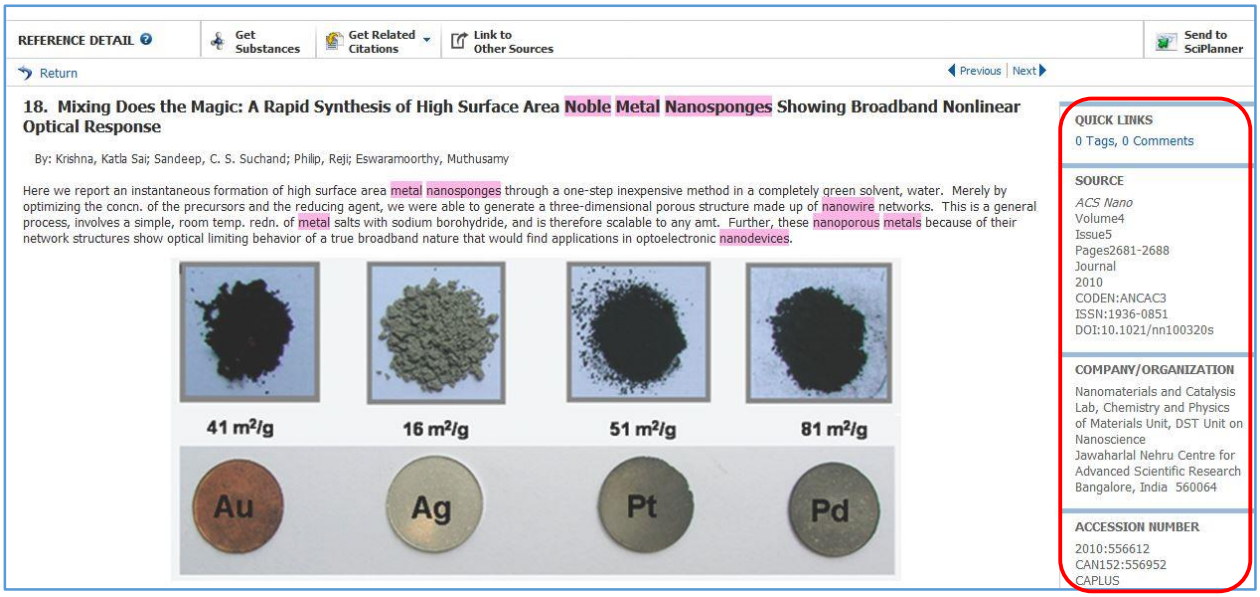
۲-۱-۴ مشاهده سند

با کلیک بر روی نام سند کلیه اطلاعات آن قابل مشاهده است و Nano Sponge وNoble Metal 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.

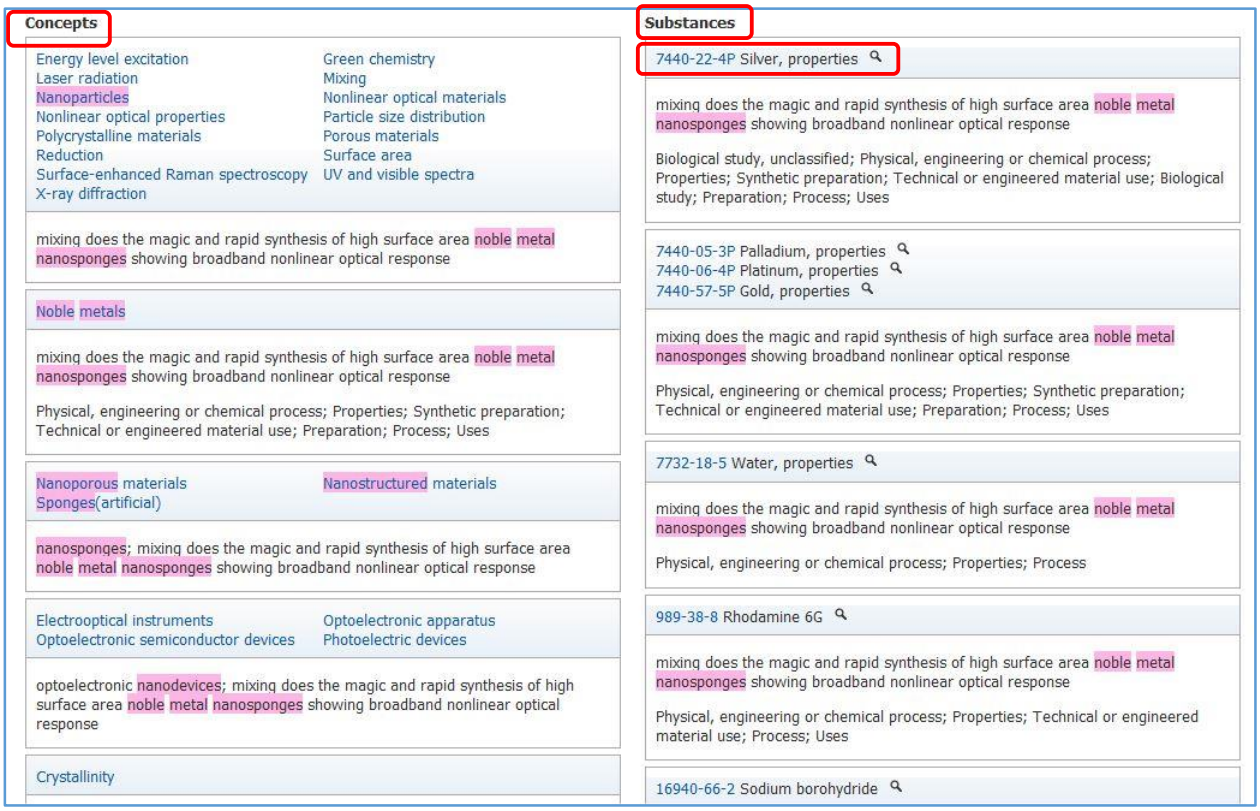
در سمت راست باکس مربوط به اطلاعات کتابشناختی از قبیل نام ژورنال یا محل ثبت سند و دیگر اطلاعات مهم از قبیل DOI قابل مشاهده است.

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 مشاهد است.



شکل ۲-۷

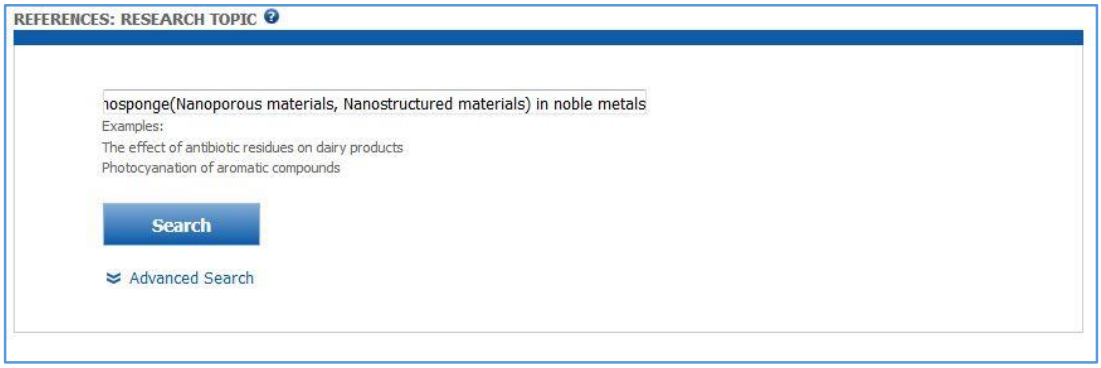
۲ باکس مشاهده شده در شکل ۲-۸ در قسمت انتهایی وجود دارد که یکی مربوط به Concept و دیگری مربوط به ترکیبات موجود در آن سند است که در قسمت اول همانطور که مشاهده می کنید، اطلاعات و تعاریف مربوط به اصطلاحات موجود در سند و قسمت دوم مربوط به ترکیباتی است که در سند مورد استفاده قرار گرفته است. در هر مورد اطلاعات 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.



شکل ۲-۸

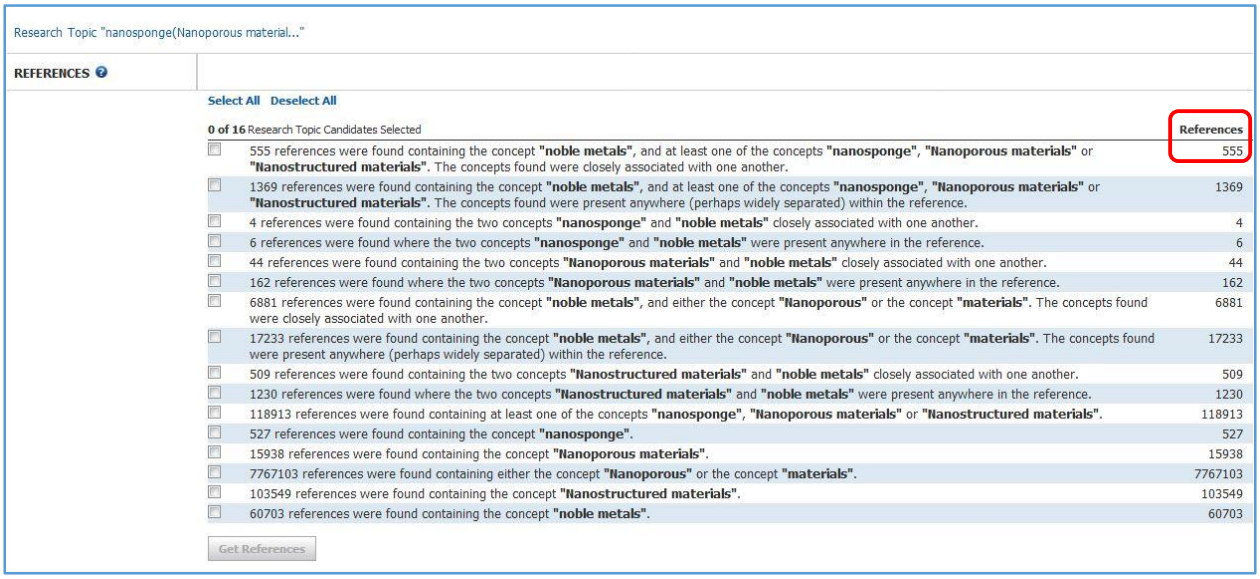
به منظور جستجو دقیق و بهینه تر با استفاده از Concept می توان جستجو را جامع تر کرد. به عنوان مثال با توجه به جستجو قبلی و نتایج حاصله همانطور که در شکل ۲-۹ مشاهده می کنید دو واژه مشابه دیگر (مفهوم یکسان از

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



شکل ۲-۹

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



شکل ۲-۱۰

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

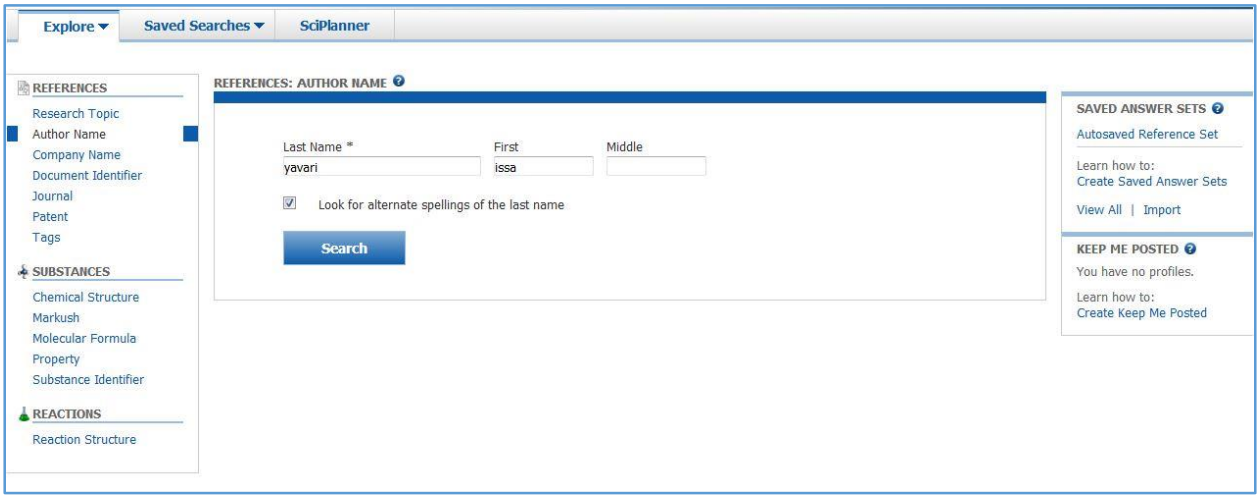
در این شیوه از جستجو نیز میتوان با استفاده از Advanced Search به صورت پیشرفته به جستجو پرداخت.

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 بازیابی را به سمت هدفی مطلوب تر، محدود کند.

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

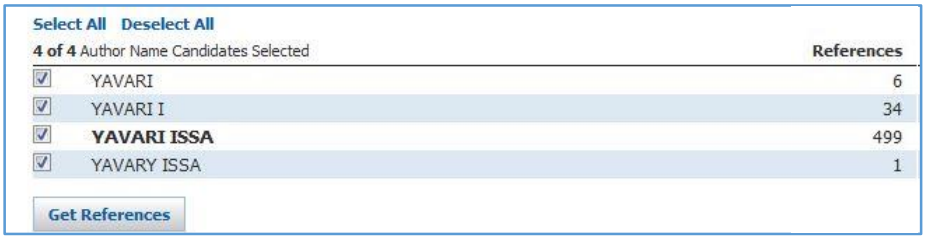
در قسمت دوم در جستجوی سند، می توان با استفاده از نام و نام خانوادگی نویسنده به جستجو پرداخت.

به عنوان مثال پروفسور عیسی یاوری جستجو شده است و نتایج همانند شکل ۲-۱۱ قابل مشاهده است.



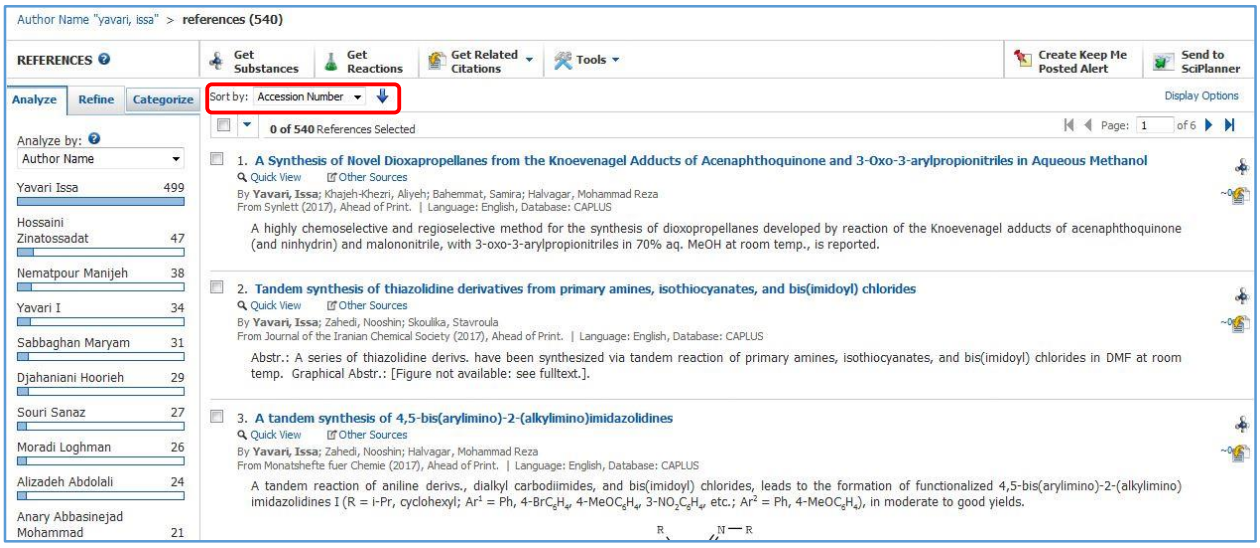
شکل ۲-۱۱

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



شکل ۲-۱۲

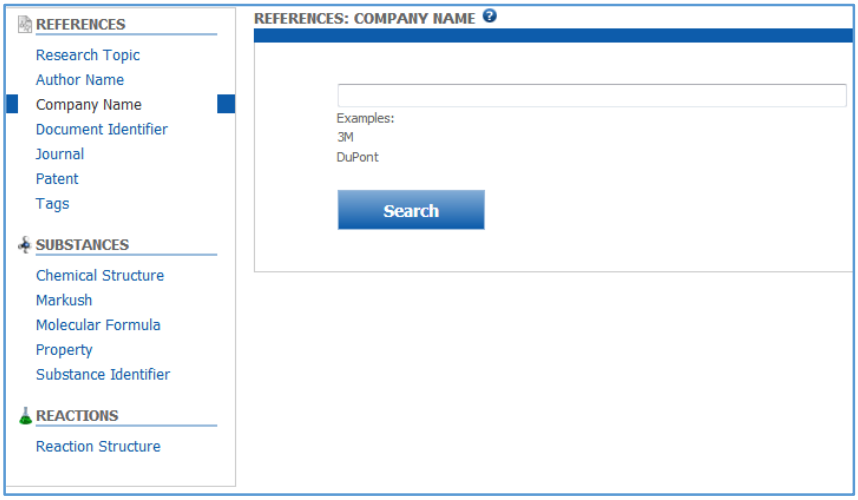
همانگونه که در شکل ۲-۱۳ مشاهده می کنید، اسناد به ترتیب سال مرتب شده اند و می توان با استفاده Sort by بر اساس بازده یا بقیه موارد نیز آن ها را مرتب کرد. و با استفاده از جهت فلش آنها را از اول به آخر و برعکس مرتب کرد.



شکل ۲-۱۳

۲-۳ 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.

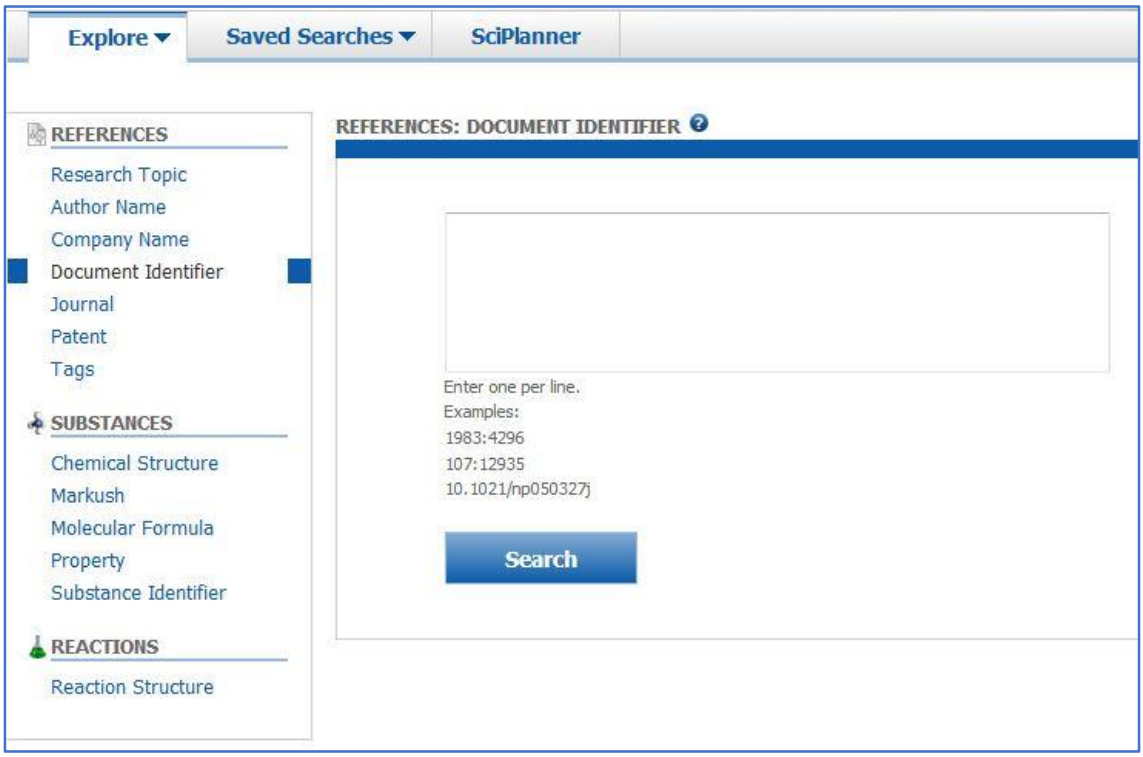


شکل ۲-۱۴

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.

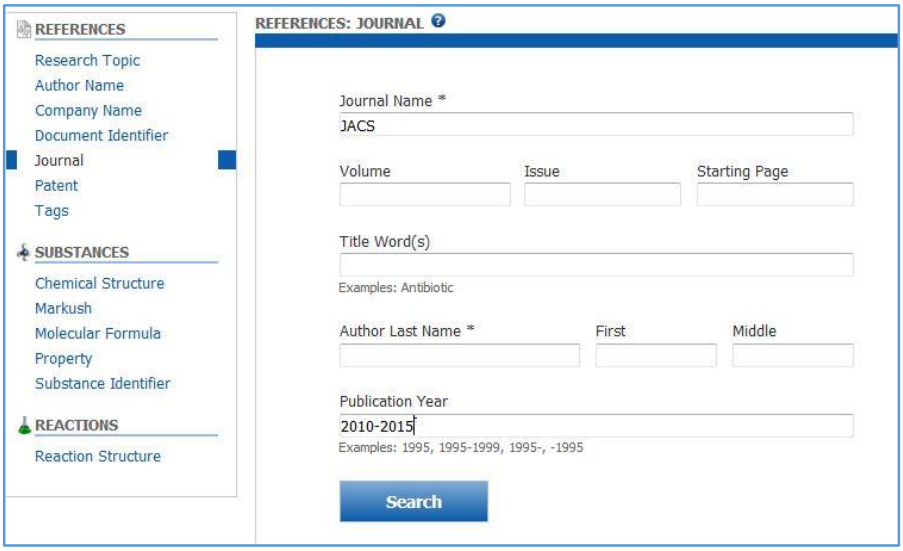


شکل ۲-۱۵

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

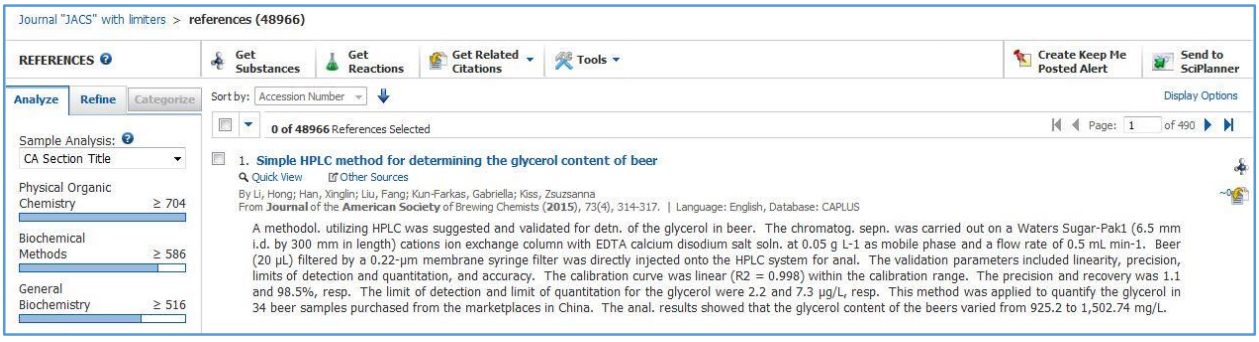
در جستجو با استفاده از نام ژورنال می توان با استفاده از Volume، Issue و شماره صفحه، جستجو را محدود تر کرد. به این منظور می توان از کلمات کلیدی که در ژورنال مد نظر است و یا نام نویسنده نیز برای جستجو دقیق تر بهره گرفت.

همانطور که در شکل ۲-۱۶ 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 ۲-۱۶

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.



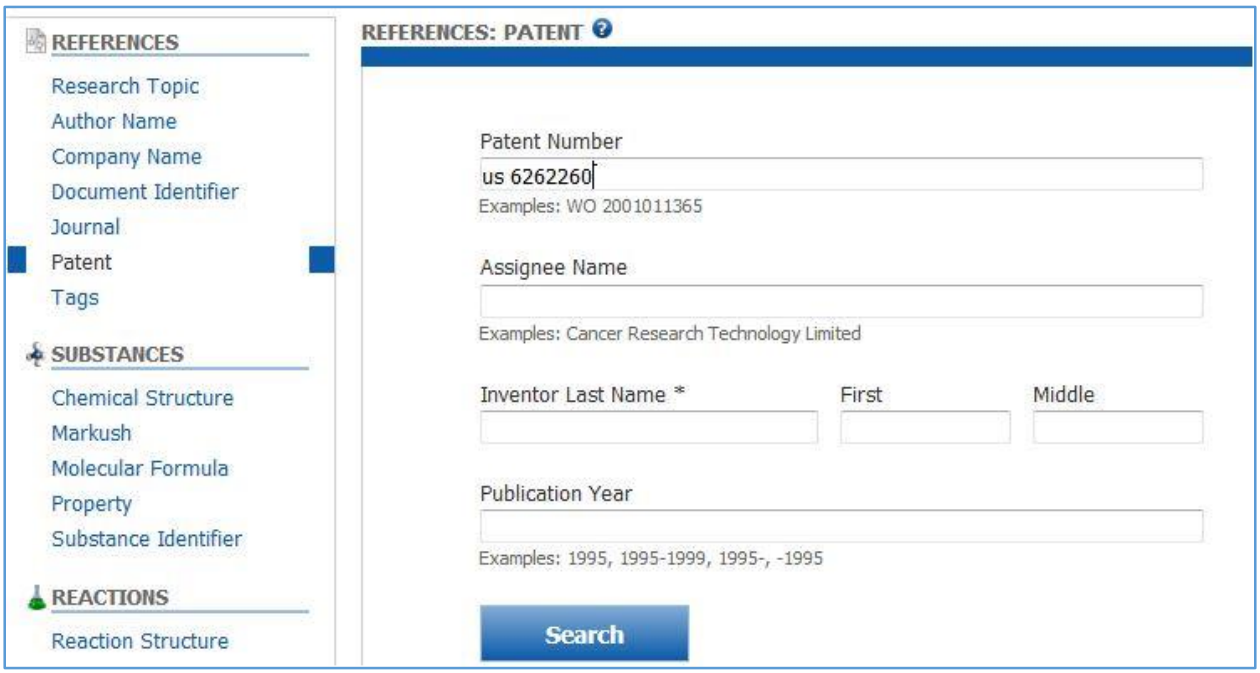
شکل ۲-۱۷

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– **SciFinder**

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

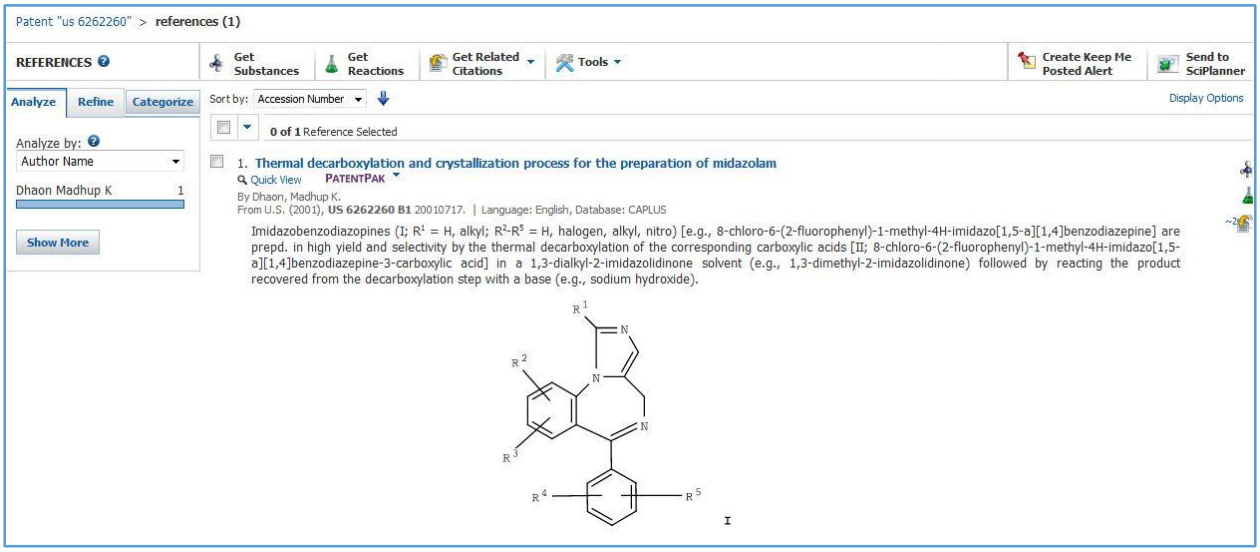
همچنین می توان با استفاده از شماره پتنت، نام شرکت و یا نام مخترع به جستجو پرداخت و این امر می تواند با استفاده از سال نیز به منظور دقت بهتر جستجو، محدود تر شود.

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.



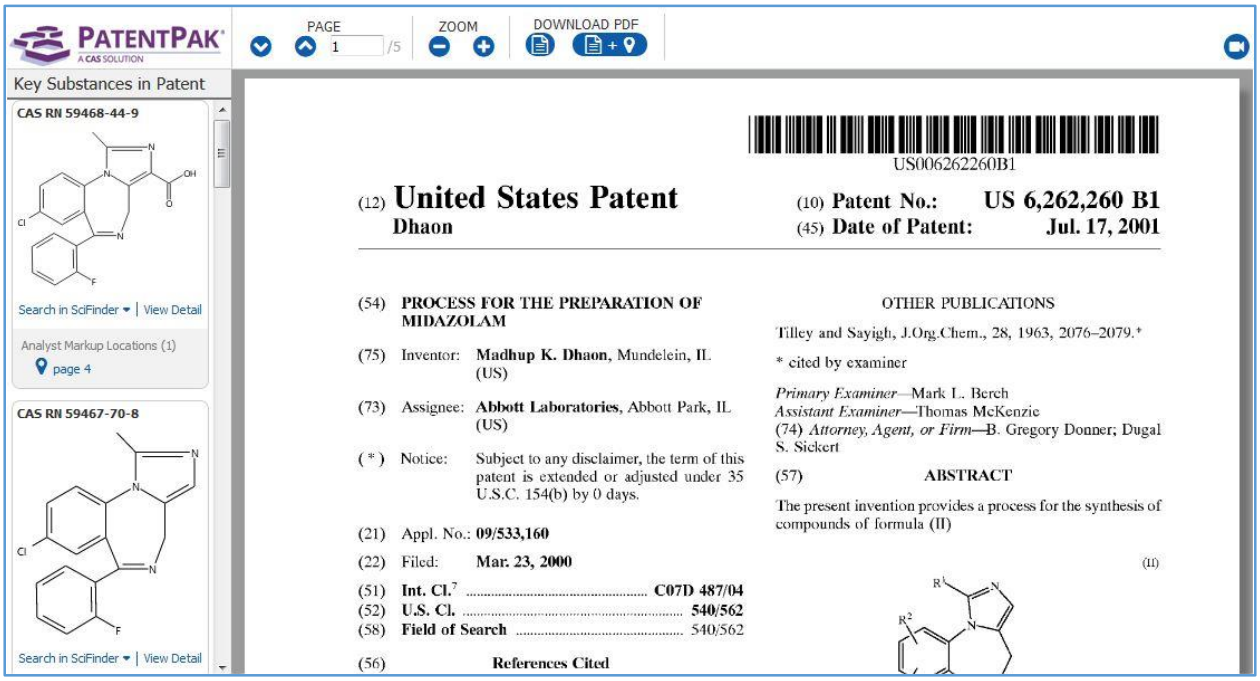
شکل ۲-۱۸

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.



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.



شکل ۲-۲۰

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder

۲-۷ 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

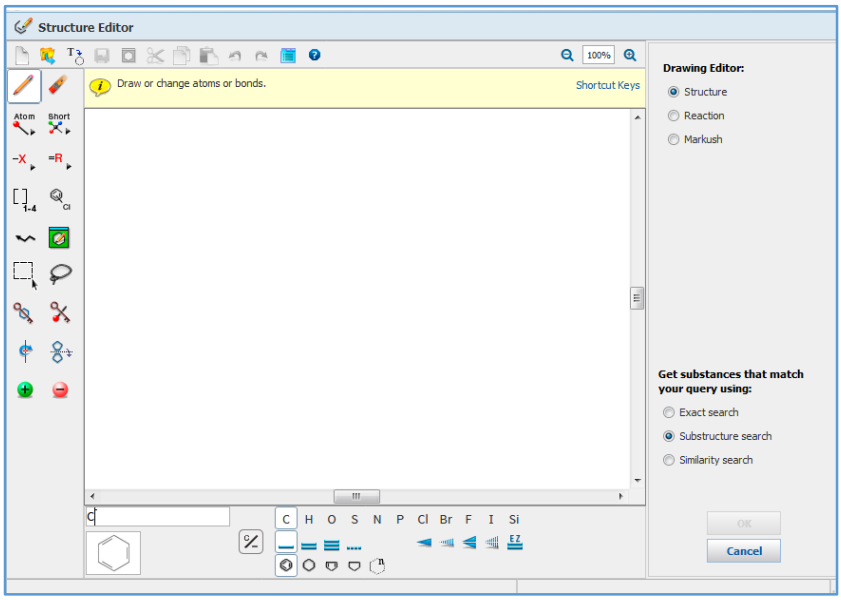
Substance Searching

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

در این قسمت می توان با 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

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder

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 افزرهای ترسیم ساختار با پسوند. cxF و mol .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

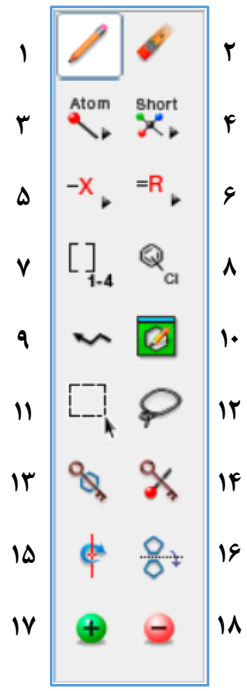
۱۰. Redo: رفتن به حالت بعدی

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**



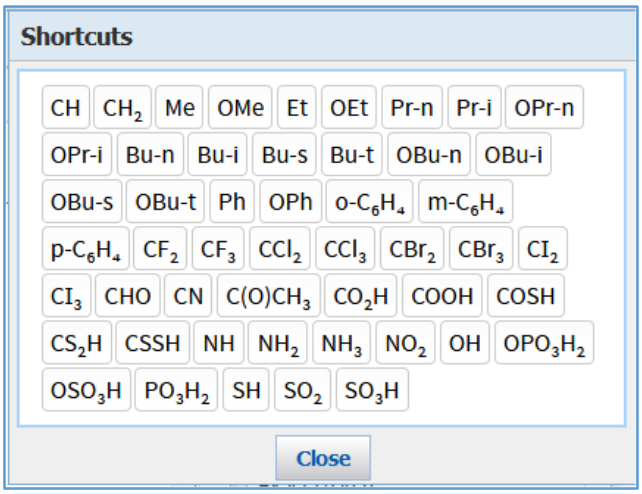
۱. Pencil: رسم اتم مورد نظر با زدن کلیک بر بروی صفحه و کشیدن موس برای رسم پیوند (به صورت پیش فرض اتم کربن و پیوند یگانه رسم می شود).

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 بپردازید.

۲. Eraser: با استفاده از این قسمت می توان اتم مورد نظر ویا 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.

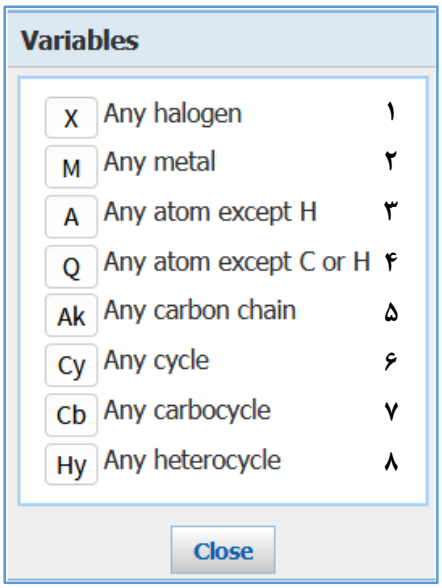
۳. Atoms: با کلیک بر روی این قسمت جدول تناوبی عناصر نمایش داده می شود که می توان با انتخاب آن از اتم مورد نظر برای رسم ساختار استفاده کرد. با نگه داشتن موس روی اتمهای جدول تناوبی، اطلاعات شامل عدد اتمی، نام عنصر، جرم مولی، گروه و دوره اتم نمایش داد می شود.

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.



۱- همه اتم های هالوژن

۲- همه فلزات

۳- همه اتم ها به جز هیدروژن

۴- همه اتم ها به جز کربن و هیدروژن

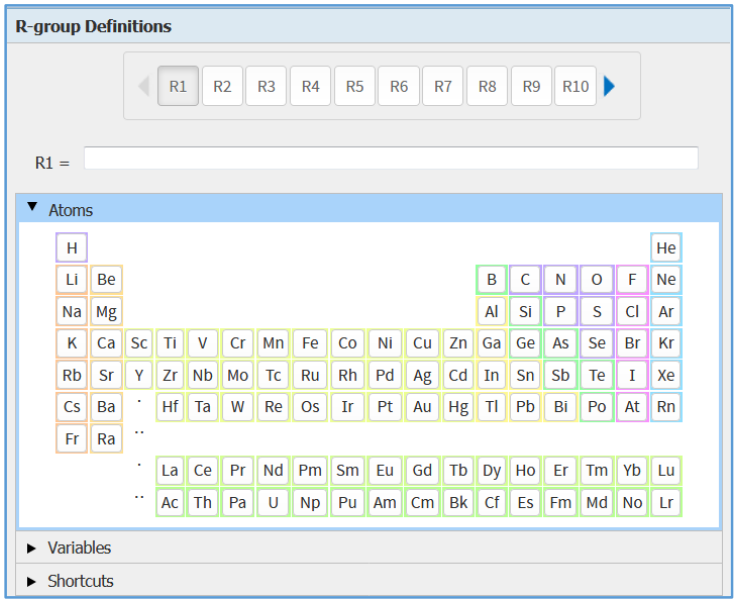
۵- همه زنجیره های باز کربنی (توالی اتم های کربن به صورت خطی)

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)

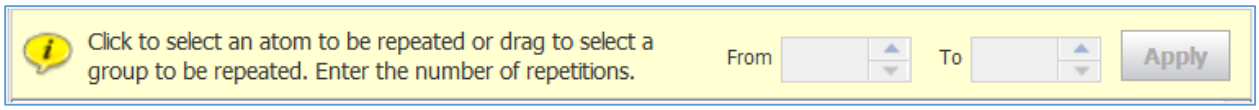
۶. R-Group definition: تعیین گروه R با تعیین اتمها در جدول تناوبی (Atoms)، (Shortcuts)، (Variables) که در بالا به تعریف هر کدام به صورت جداگانه پرداخته شده است.



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 کردکه 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

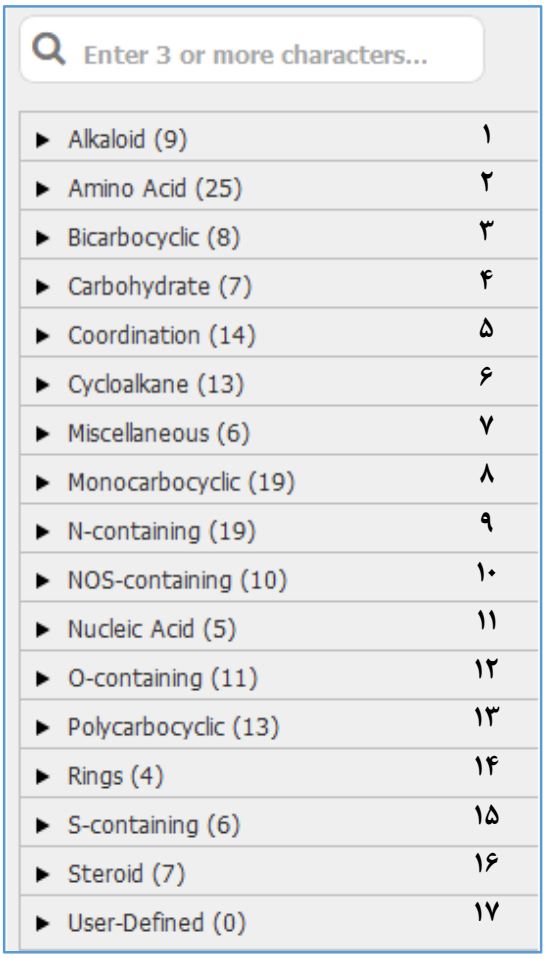
تعداد تکرار در قسمت تعیین شده قابل تغییر بوده و با زدن گزینه Apply روی قسمتی از ساختار که انتخاب شده، اعمال می شود.

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:



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 آلکالوئیدها 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- Bicarbocyclic (۸ مورد): به ترکیباتی شامل دو حلقه گفته می شود که به هم از طریق دو اتم متصل اند.

۴- کربوهیدرات ها (۷ مورد): ساختار هایی 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 هیدوژن تشکیل شده که بین آنها پیوند یگانه است.

۷- Miscellaneous (۶ مورد): ترکیبات که در دسته متفرقه طبقه بدی شده اند.

۸- Monocarbocyclic (۱۹ مورد): ترکیباتی رایج که شامل یک حلقه به صورت اشباع شده یا نشده است که فقط شامل کربن و هیروژن 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): زنجره 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 اتخاب 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.

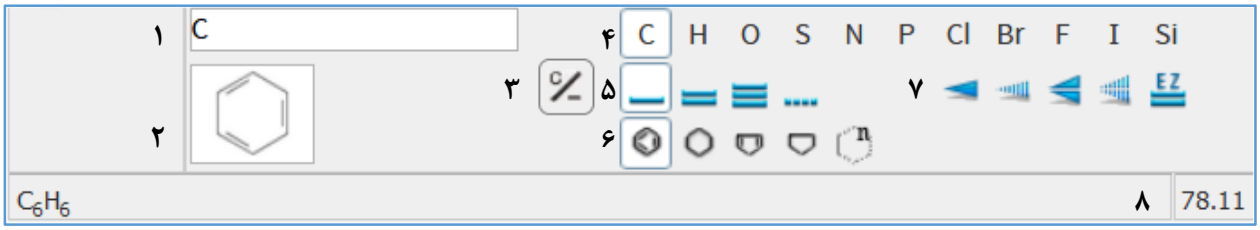
۱۵. Rotate fragment : به منظور چرخش ساختار روی صفحه در جهت مورد نظر است که این کار با کلیک کردن و چرخش موس در جهت مورد نظر صورت میگیرد.

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 NH2 گروه NH_2 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.

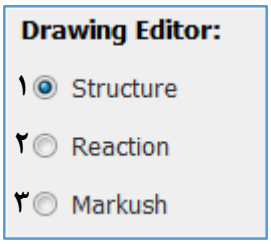
۵. پیوند ها به صورت یگانه، دوگانه، سه انه و خط چین نیز برای رسم ساختار در شکل قابل مشاهده هستند.

۶. حلقه های پرکاربرد 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 ودو 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**

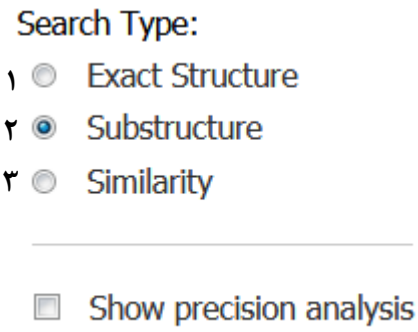
قسمت سفید برای رسم ساختار است که برای اتصال اتم یا پیوند، آن اتم یا پیوند به صورت قرمزرنگ مشخص می شوند. گزینه Shortcut Key مربوط به راهنمایی در مورد رسم ساختار است که می توان با استفاده از نوشتن کلید واژه ها و حروف مشخص شده نیز، ساختار مورد نظر را ترسیم کرد.

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:



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:

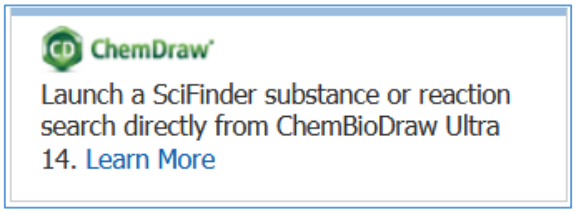
- بار ترکیب
- ایزومرهای فضایی
- رادیکال ها
- ایزوتوپ ها
- ترکیبات هیدراته
- ترکیبات کئوردینانسیون
- مونومرها
- نمکها و مخلوط ها

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

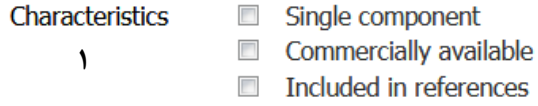
Import CXF -۳-۱-۳

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

Advanced Search -۴-۱-۳

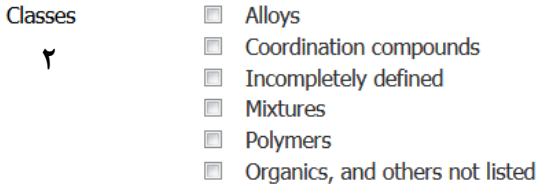
این قسمت نیز برای جستجو پیشرفته و محدود کردن هرچه بیشتر جستجو در نظر گرفته شده است که می توان با کلیک بر روی Always Show همیشه آن به صورت کامل مشاهده کرد.

این قسمت شامل سه قسمت است :



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

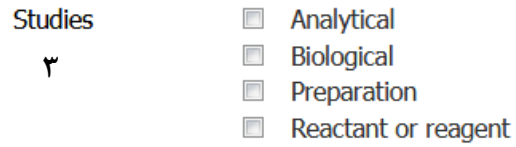
- Single Component: جستجو فقط در واکنش های یک مرحله انجام شود.
- Commercially available: جستجو در واکنش هایی انجام شود که مواد واکنش دهنده آن ها به صورت تجاری موجود باشند.
- Included in references: جستجو فقط در ترکیباتی است که در لیترچر به آن ها رفرنس داده شده است.



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 کئوردینانسیونی 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.

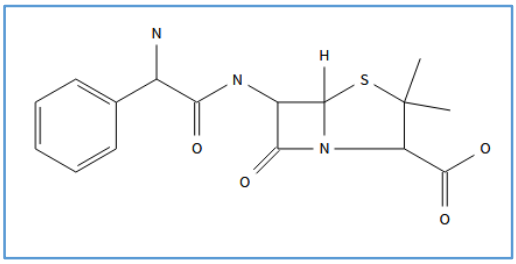


۳- Studies: به صورت کلی می توان جستجو را در حوزه های متفاوت علم شیمی نیز جستجو کرد. به همین منظور به ۴ دسته تقسیم بندی شده اند:

- 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.

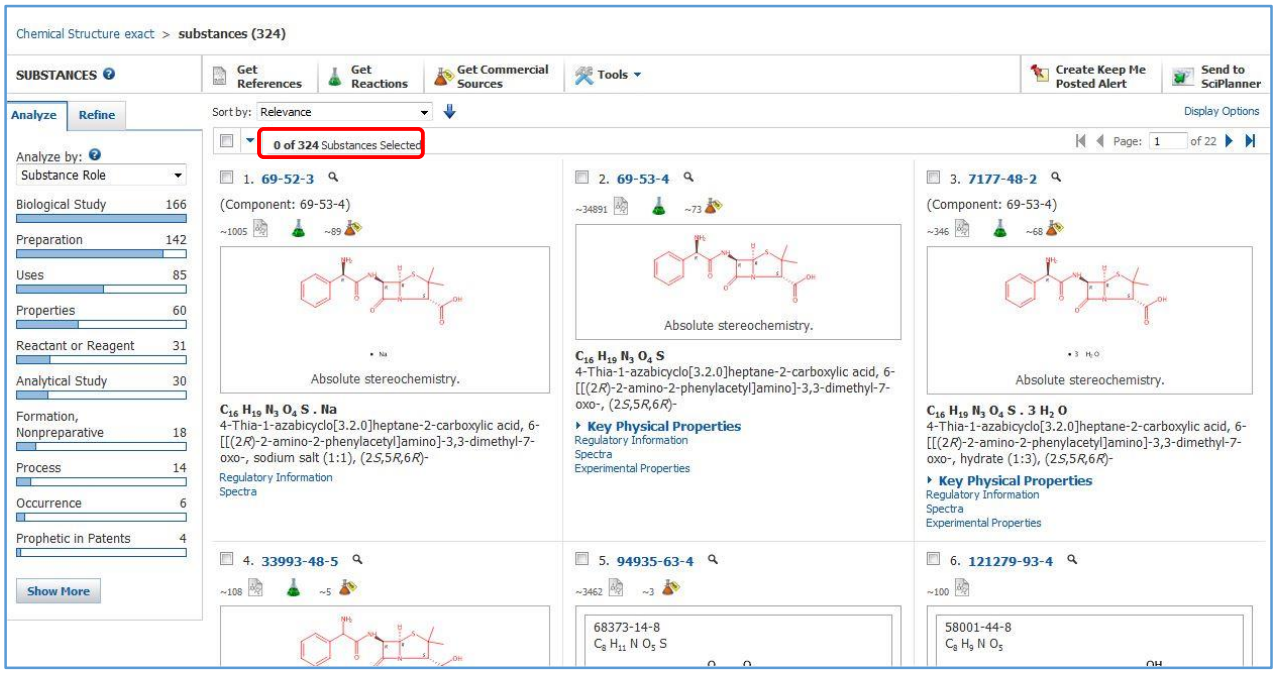
۳-۱-۵- جستجوی ساختار به صورت Exact Structure

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

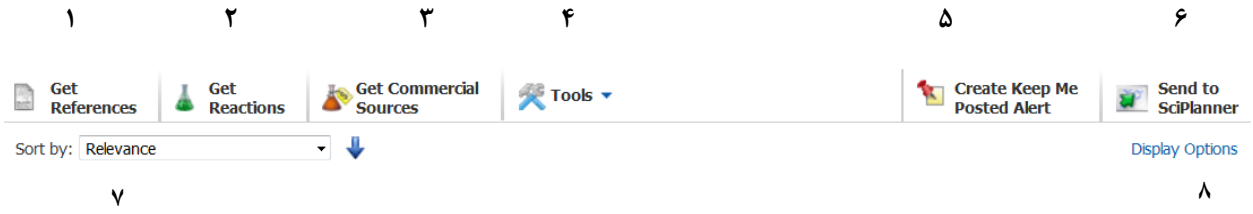
همانطور که در شکل مشاهده می کنید ۳۲۴ نتیجه بدست امد که همانطور که در قسمت جستجو به صورت Exact Structureبه صورت کامل بیان شد، شامل ترکیب باردار، ترکیب با استریوشیمی مورد نظر، ترکیبات هیدراته و غیره است.



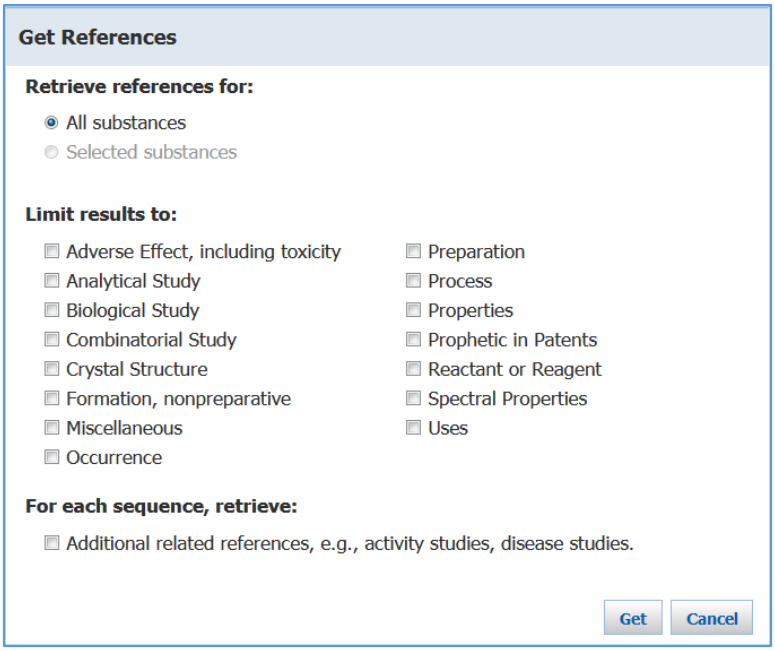
شکل ۳-۹

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder

باکس موجود در قسمت بالایی شامل ۸ قسمت است:

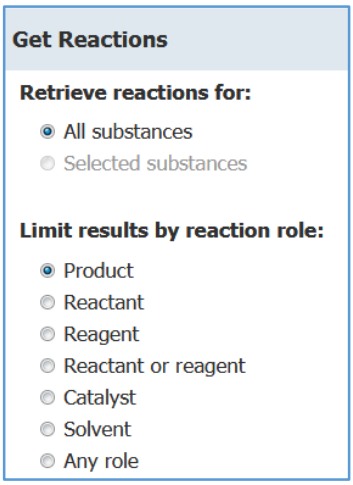


۱- Get References: با استفاده از این گزینه می توانید با توجه به نقش ترکیب مورد نظر، در اسناد به جستجو پرداخت که همانطور که در شکل ۳-۱۰ نیز مشخص است با استفاده از نقش ترکیب می توان آن را محدود کرد. به عنوان مثال به برای آماده سازی یا خواص یا کاربرد ترکیب یا ...



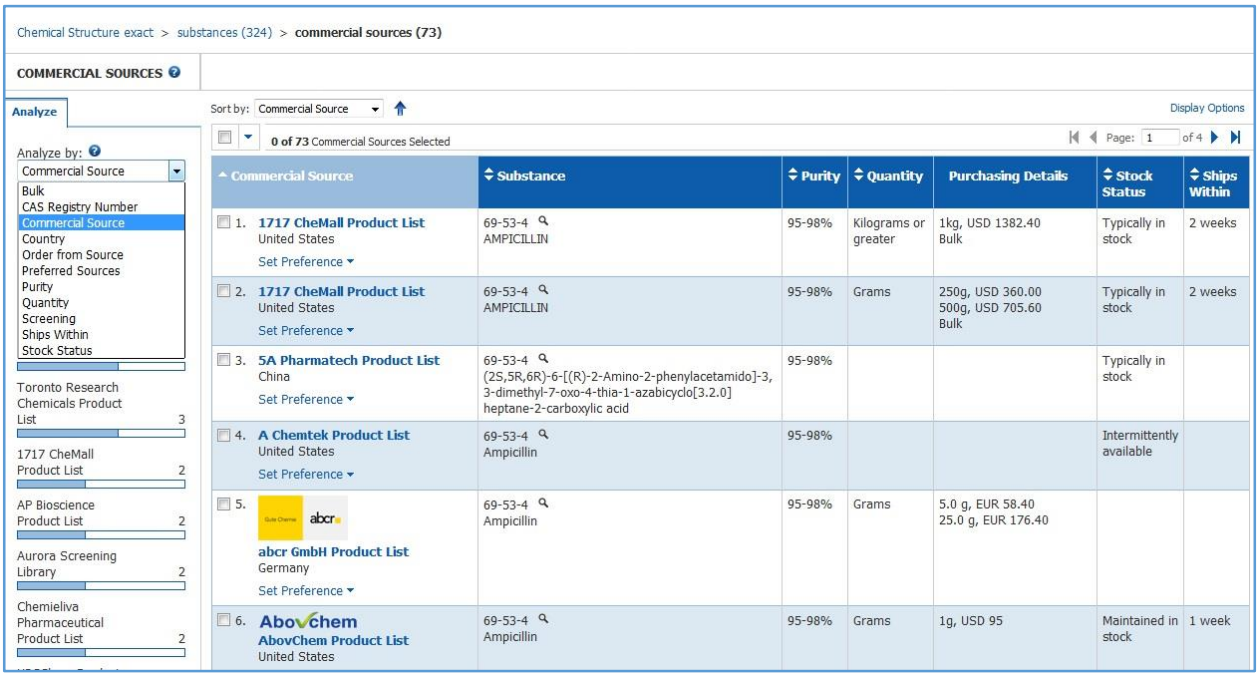
شکل ۳-۱۰

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.



شکل ۳-۱۱

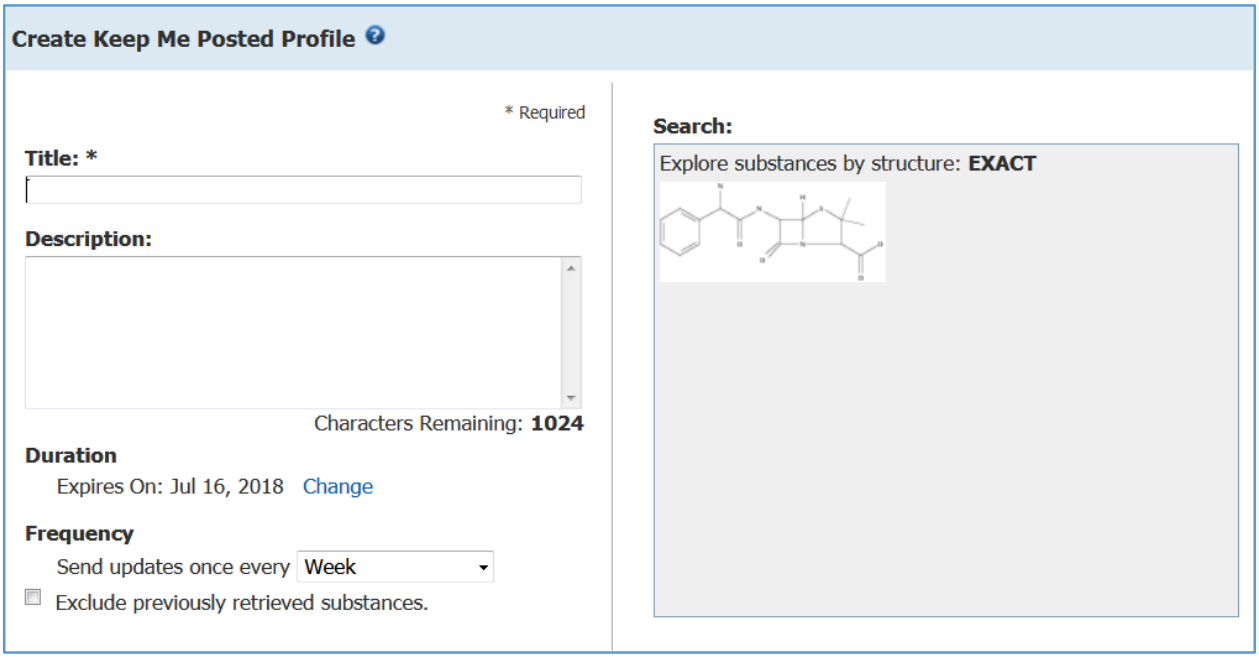
۳- Get commercial source: با استفاده از این گزینه، اطلاعات مربوط به دسترسی تجاری ترکیب مورد نظر قابل مشاهده است که همانطور که در شکل ۳-۱۲مشاهده می کنید به تجزیه و تحلیل ترکیب مورد نظر در هر منبع نیز پرداخته است که امکان مقایسه و بررسی آن نیز وجود دارد.



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.

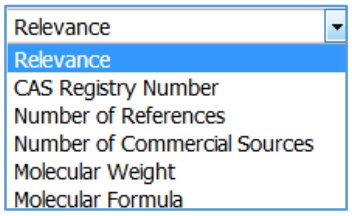
۵- Create Keep Me posted Alert: با استفاده از این گزینه می توان با استفاده از ذخیره جستجو، از هرگونه تغییرات و آپدیت سند به صورت هفتگی یا ماهانه مطلع شد. همانطور که در شکل ۳-۱۳ مشاهده می کنید تاریخ لغو و انقضا این جستجو نیز قابل تغییر است. در قسمت پایین نیز می توان با زدن تیک، ترکیباتی که قبلا بازیابی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



شکل ۳-۱۳

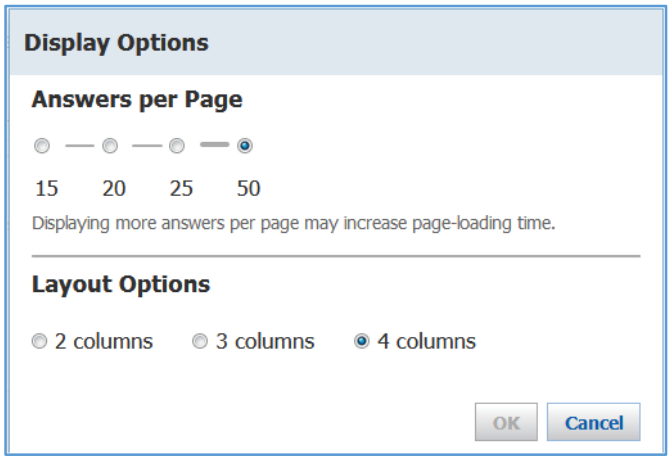
۶- Send to SciPlanner: با استفاده از این گزینه می توان ترکیب و یا واکنش مورد نظر را در محیط پویا و جذاب SciPlanner ترسیم کرد که در ادامه به توضیح کامل آن خواهیم پرداخت.

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

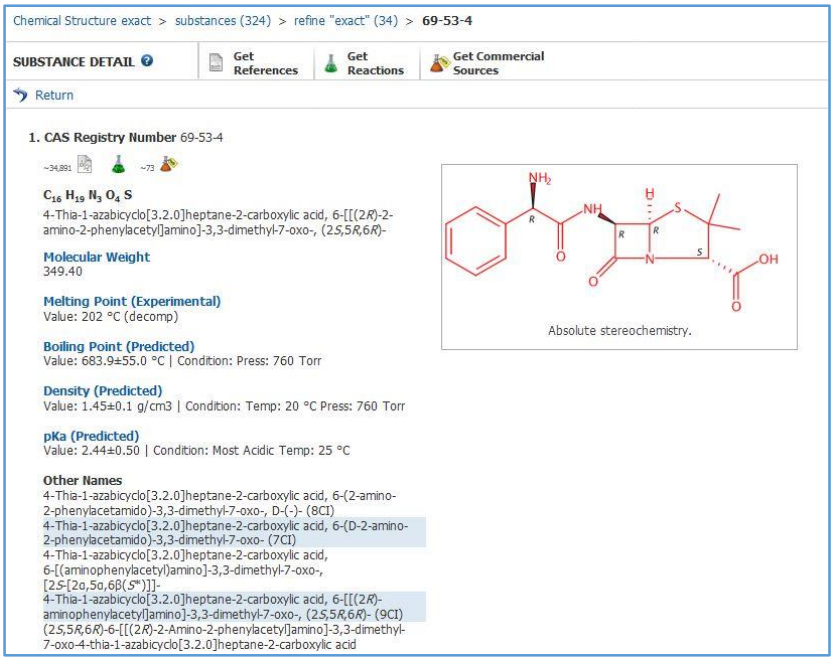
۸- Display Options: در این قسمت نیز می توان نمایش نتایج حاصله در ستون های ۲ تا ۴ تایی و همچنین تعداد۱۵ تا ۵۰ در هر صفحه مرتب کرد.



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:



شکل ۳-۱۶

به عنوان مثال همانطور که در شکل ۳-۱۶مشاهده می کنید، ترکیب مورد نظر به صورت خالص انانتیومری 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، pK_a و نام های دیگر موجود برای ترکیب مورد نظر، نمایش داده شده است.

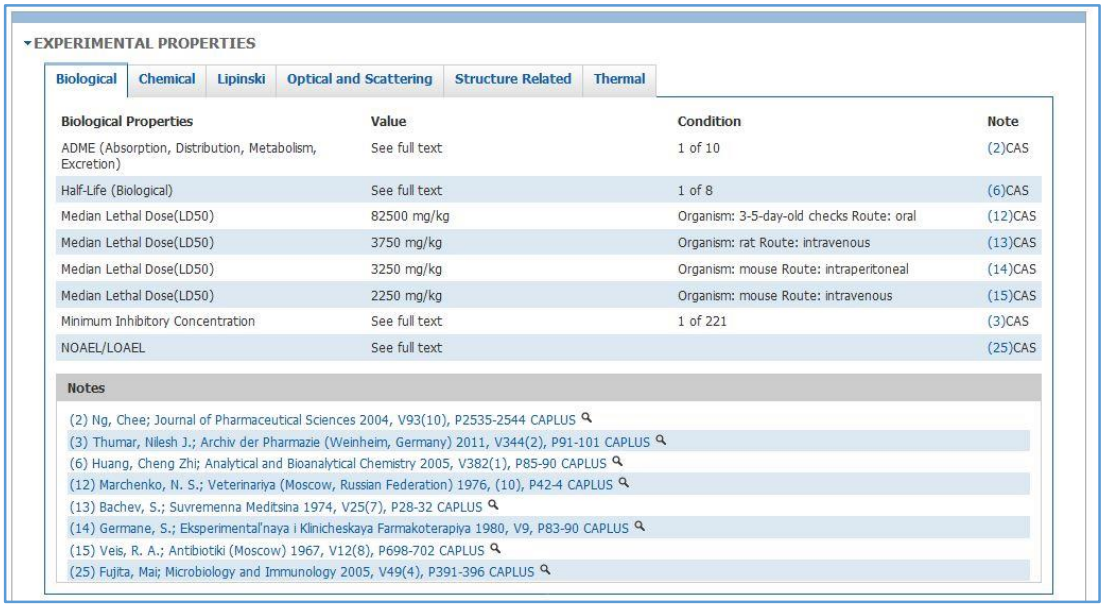
https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder

۳-۱-۶-۱- بررسی باکس های آنالیز ترکیب:

شکل ۳-۱۸

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

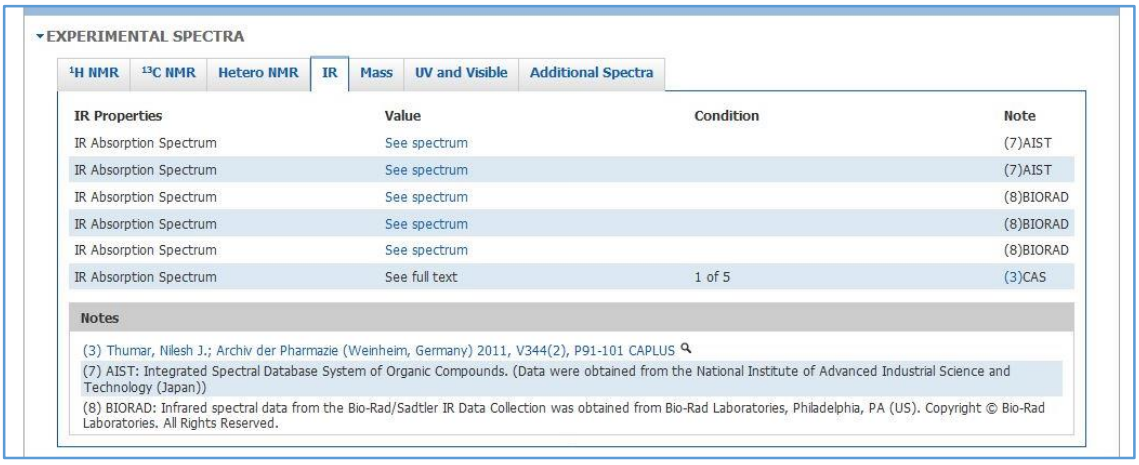
- Experimental Properties: در این قسمت ویژگی های ترکیب از قبیل ویژگی های زیستی مانند نیمه عمر و ...، ویژگی های شیمیایی مانند قدرت اسیدی و بازی و حلالیت و...، Lipinski، ویژگی های نوری و پراکندگی نور مانند قدرت چرخش نوری، خواص مربوط به ساختار مورد نظر مانند X-Ray و خواص گرمایی مانند آنتالپی، انتروپی و...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



شکل ۳-۱۹

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

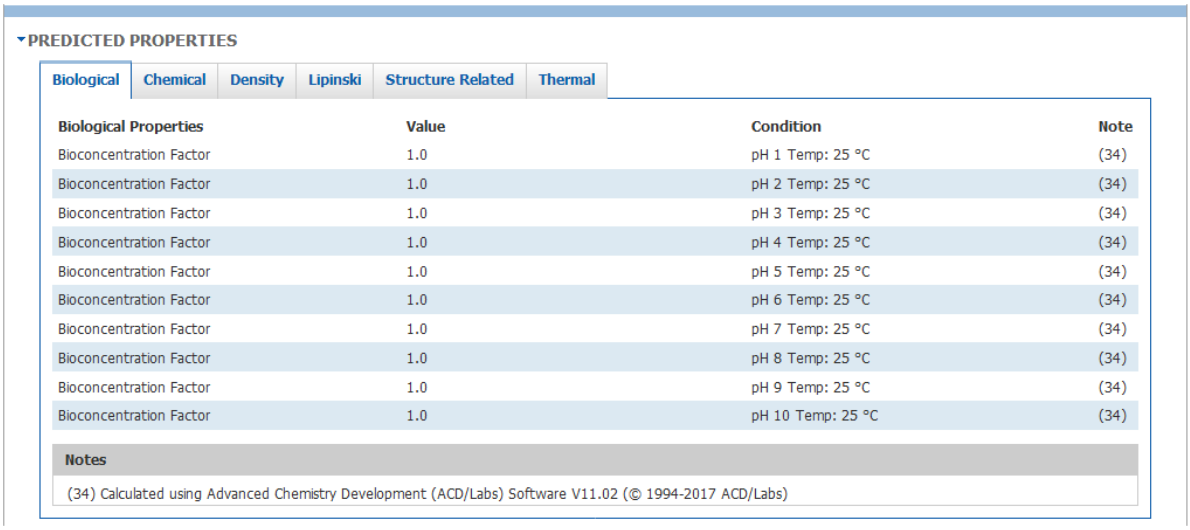
- Experimental Spectra: در این بخش نیز همانگونه که در شکل ۳-۲۰ مشاهده می کنید اطلاعات مربوط به طیف های ترکیب قابل مشاهده است که شامل H-NMR، C-NMR، Hetro NMR که مربوط به طیف دو بعدی است، IR، Mass، UV-Visible و طیف CD ترکیب مورد نظر است.



شکل ۳-۲۰

- 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

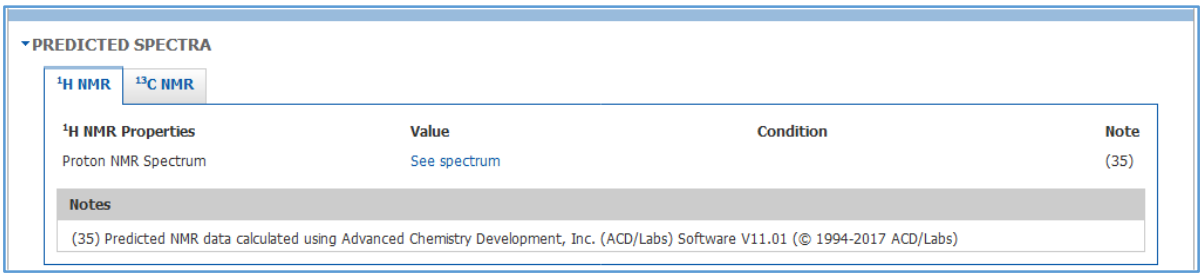
Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	1.0	pH 1 Temp: 25 °C	(34)
Bioconcentration Factor	1.0	pH 2 Temp: 25 °C	(34)
Bioconcentration Factor	1.0	pH 3 Temp: 25 °C	(34)
Bioconcentration Factor	1.0	pH 4 Temp: 25 °C	(34)
Bioconcentration Factor	1.0	pH 5 Temp: 25 °C	(34)
Bioconcentration 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

^{1}H NMR Properties	Value	Condition	Note
Proton NMR Spectrum	See spectrum		(35)

Notes

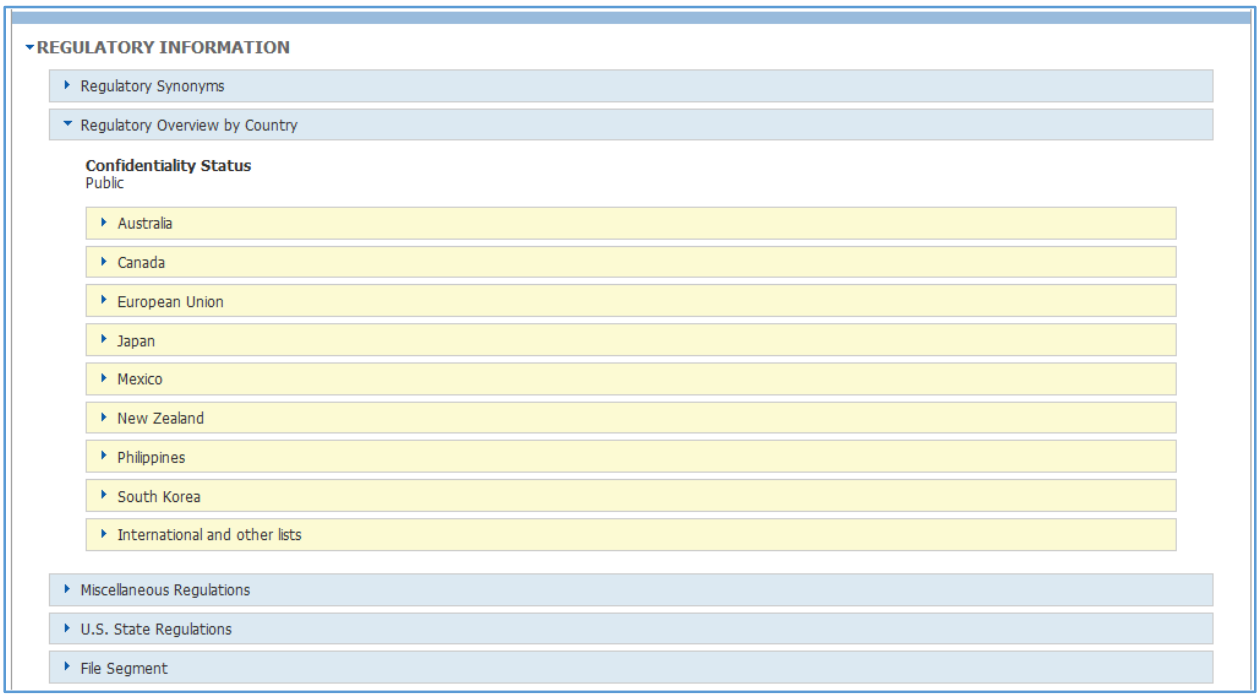
(35) Predicted NMR data calculated using Advanced Chemistry Development, Inc. (ACD/Labs) Software V11.01 (© 1994-2017 ACD/Labs)

شکل ۳-۲۲

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder

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 Patentهای 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 ونشانی در سراسرجهان 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.

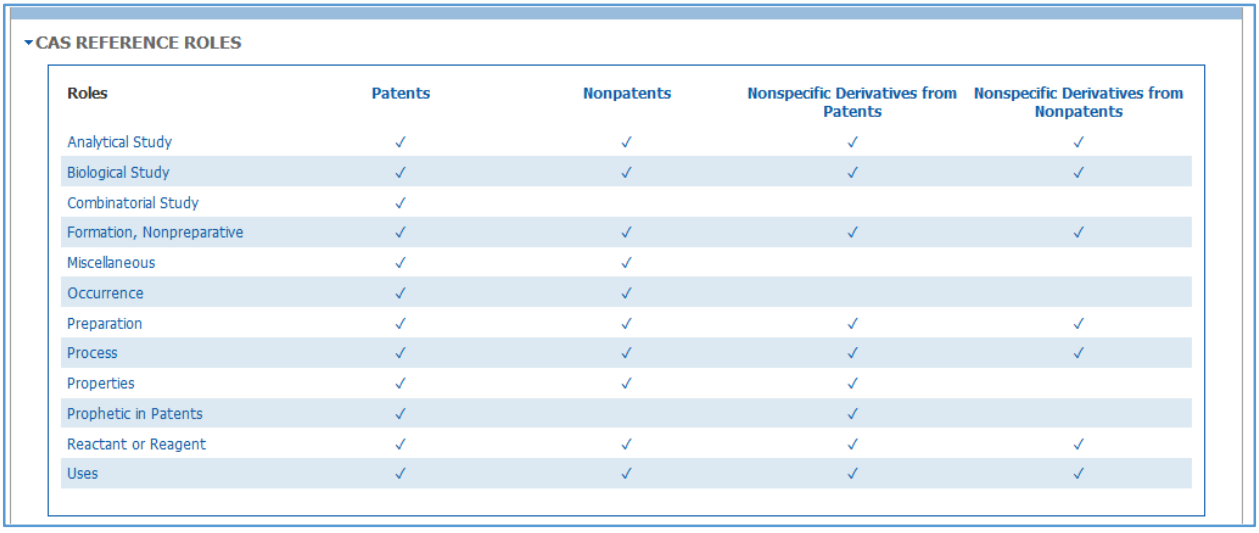
- Bioactivity Indicator: این بخش شامل شاخص های بیولوژیکی است که این شاخص ها به صورت دسته بندی شده نشان داده شده اند.

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 لیترچر 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

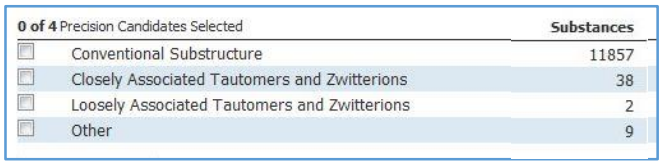
Roles	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study	✓	✓	✓	✓
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Combinatorial Study	✓			
Formation, Nonpreparative	✓	✓	✓	✓
Miscellaneous	✓	✓		
Occurrence	✓	✓		
Preparation	✓	✓	✓	✓
Process	✓	✓	✓	✓
Properties	✓	✓	✓	
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 Substructureجستجو 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
Conventional Substructure	11857
Closely Associated Tautomers and Zwitterions	38
Loosely Associated Tautomers and Zwitterions	2
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

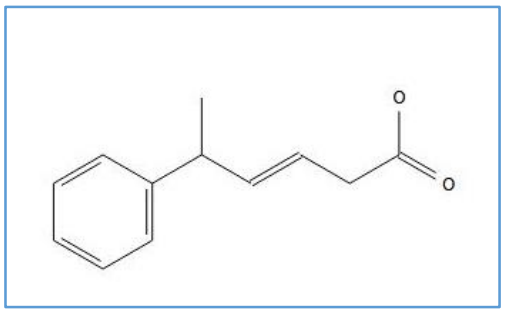
در جستجوی همین ترکیب به صورت Similarity نتیجه مطابق شکل ۳-۲۷ با درصد مشابهت نمایش داده می شود.

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

شکل ۳-۲۷

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

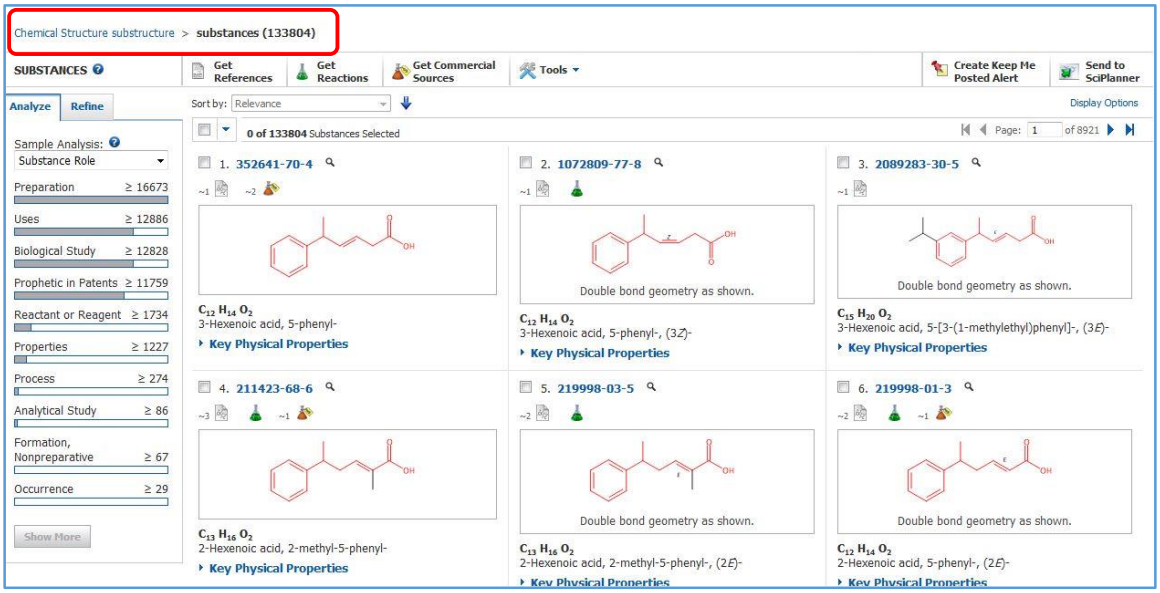
به منظور مقایسه بهتر و بیشتر و کار با ابزار های رسم به صورت کاربردی تر، ترکیب زیر به صورت Substructure جستجو شد است.



شکل ۳-۲۸

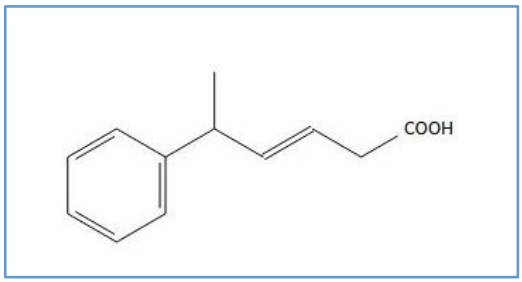
در این جستجو تعداد ۱۳۳۸۰۴ نتیجه بدست آمده است.

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder



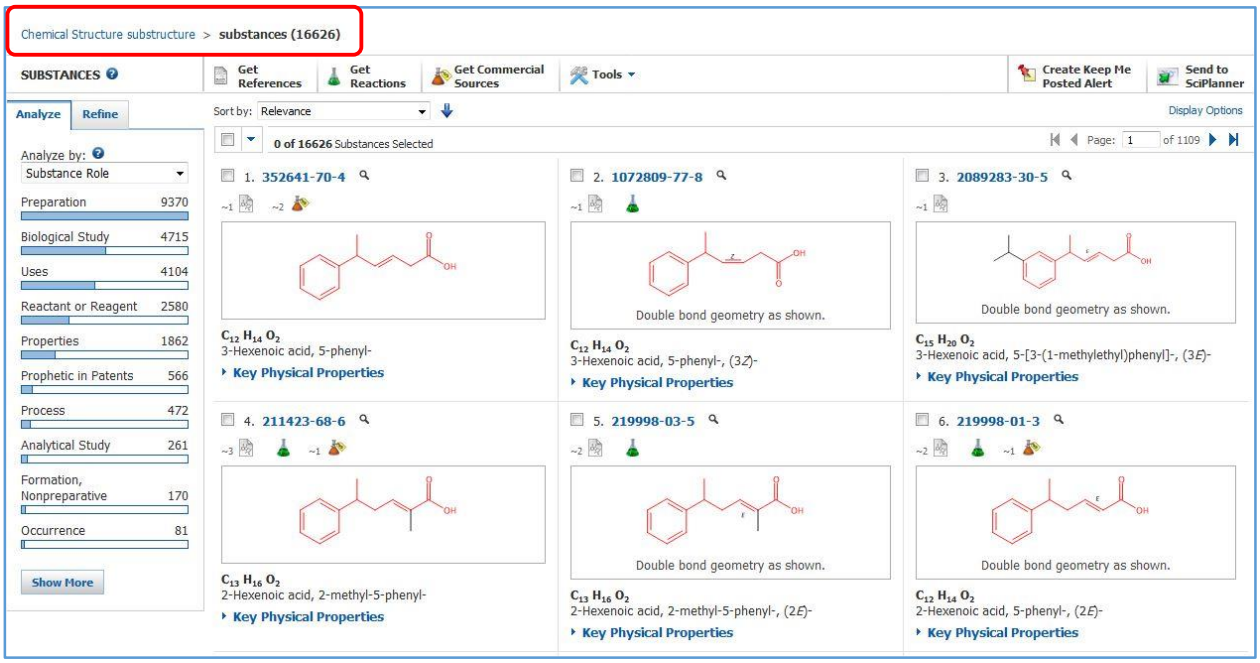
شکل ۳-۲۹

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



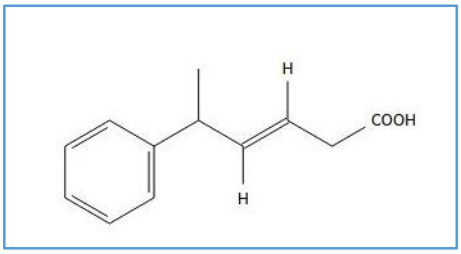
شکل ۳-۳۰

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



شکل ۳-۳۱

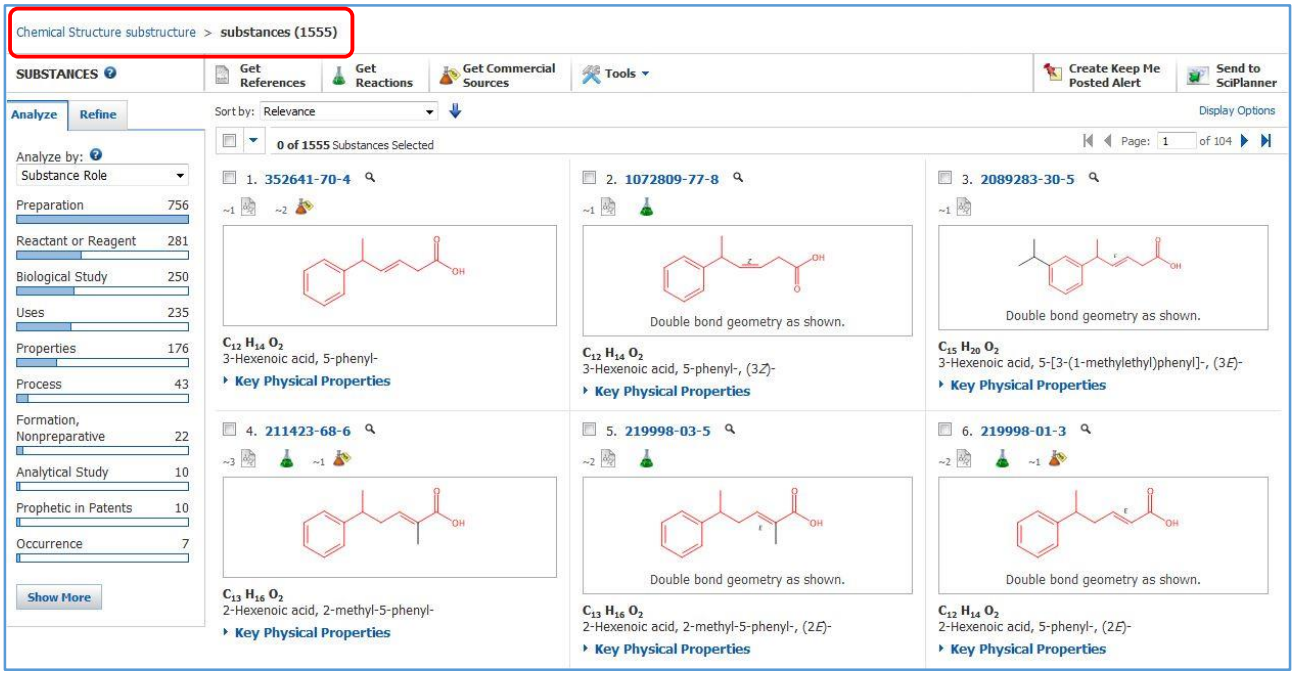
بار دیگر با قرار دادن گروه های هیدروژن روی باند دوگانه مانع از قرار دادن استخلاف روی این باند شده و جستجو را باز هم محدود میکنیم.



شکل ۳-۳۲

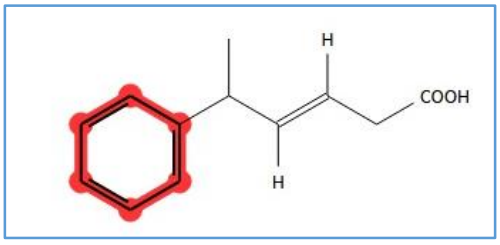
نتایج به تعداد ۱۵۵۵ سند تغییر کرد.

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder



شکل ۳-۳۳

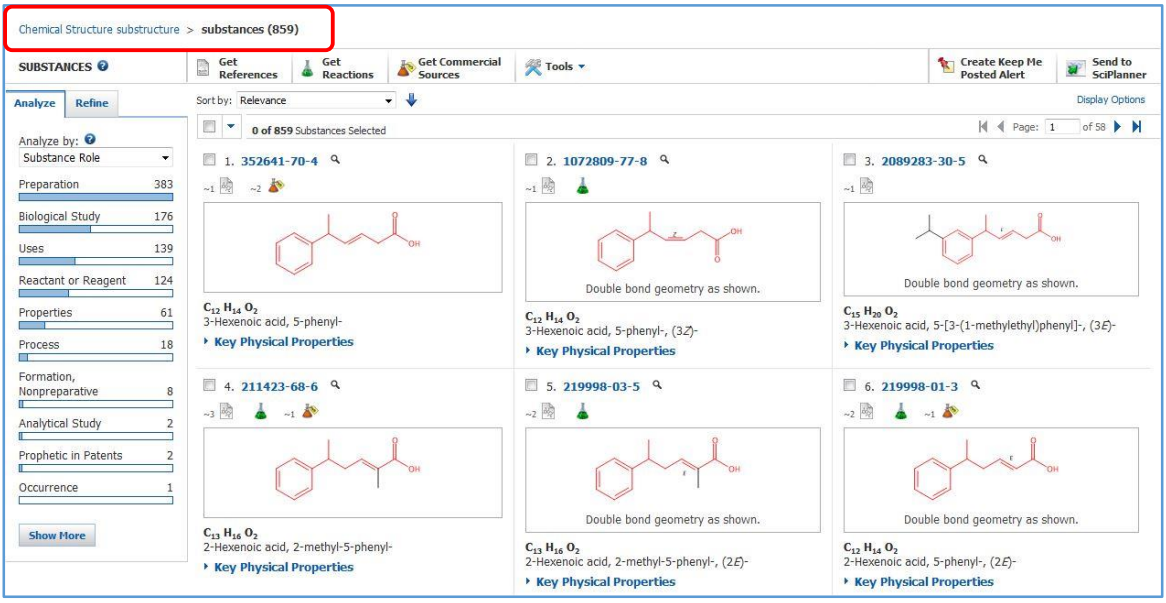
این تعداد با قفل کردن حلقه مطابق شکل باز هم محدود و محدود تر شده و اطلاعات بازیابی شده را به سمت هدف مورد نظر بیشتر هدایت میکند.



شکل ۳-۳۴

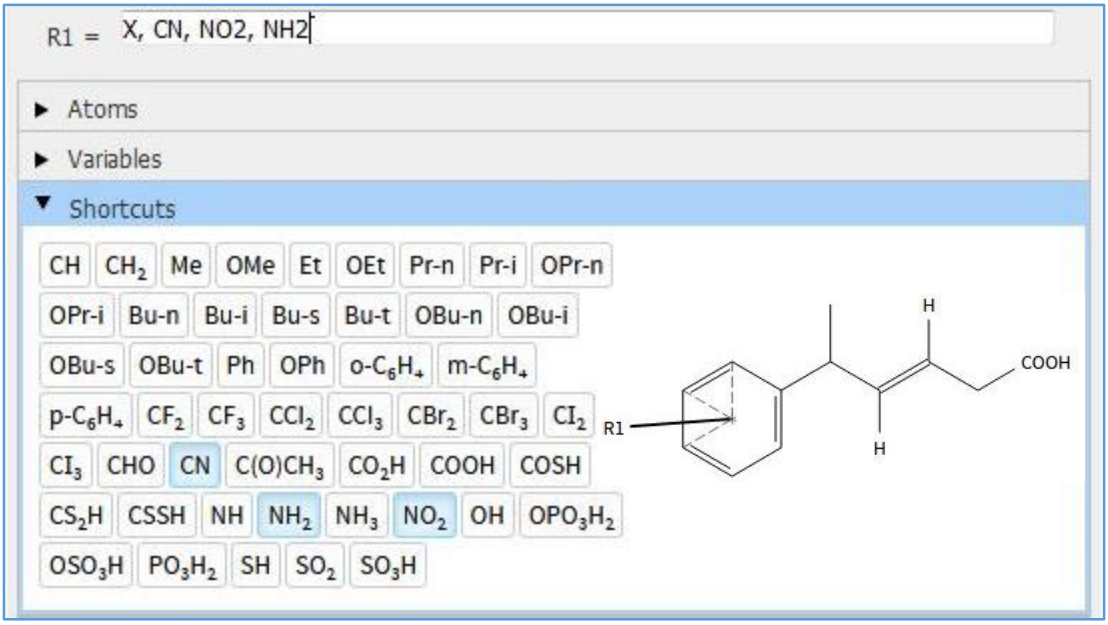
۸۵۹ نتیجه بدست آمده است که تمامی اصلاحات موجود را شامل می شود.

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder

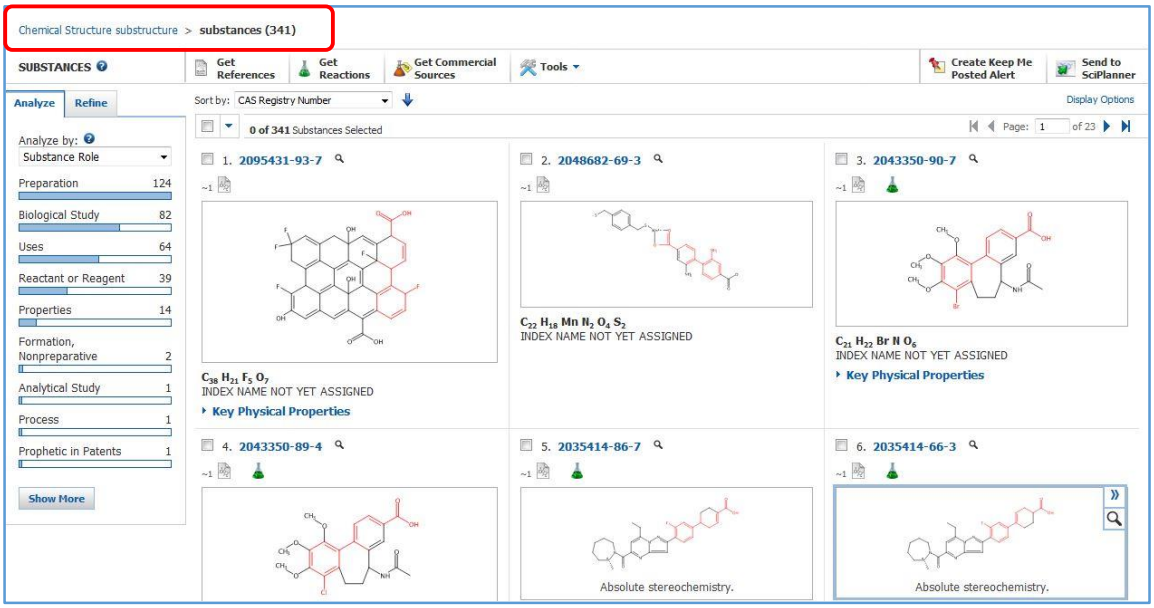


شکل ۳-۳۵

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.



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.

Markush -۲-۳

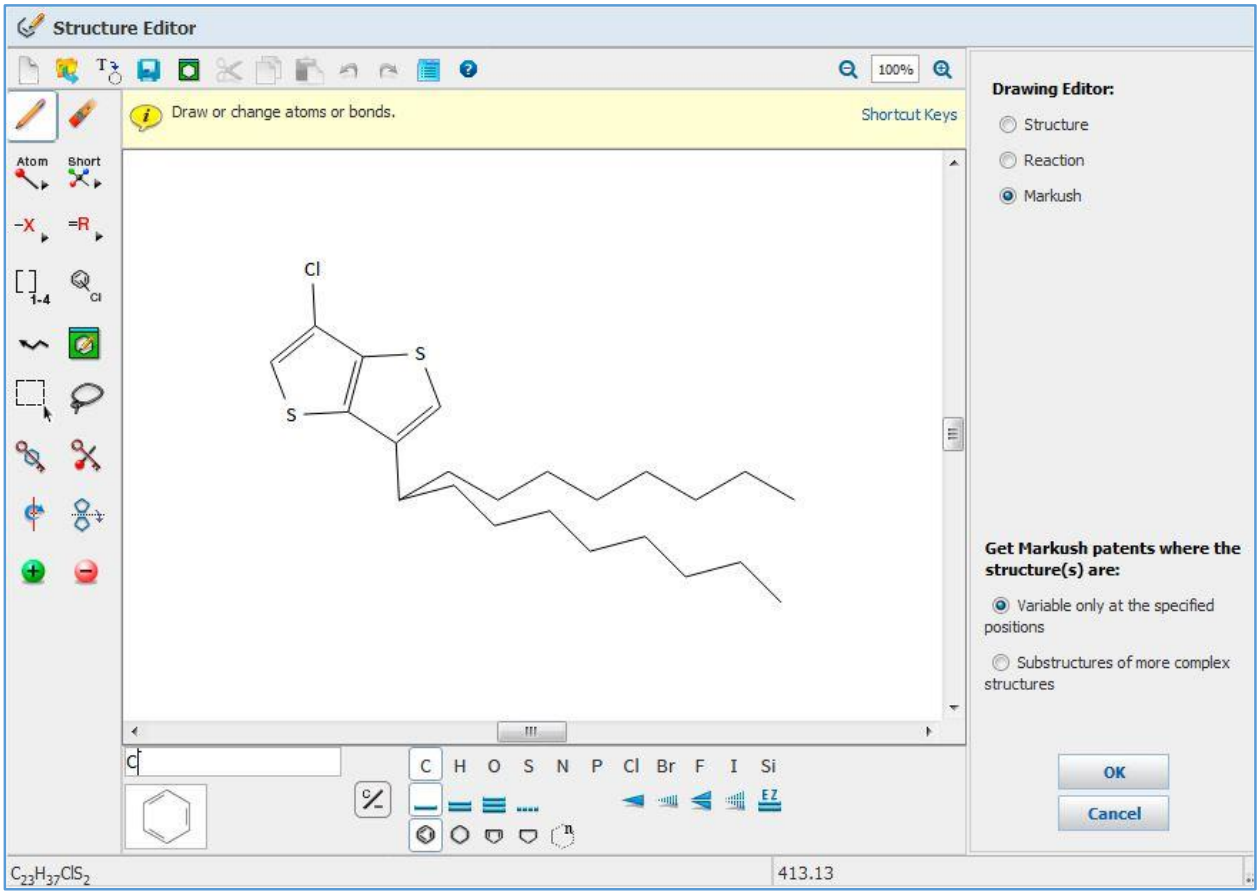
ساختار های Markush به صورت کلی با تعیین گروه های آلکیل و آریل، بیشتر در Patent ها جستجو می شوند. این ساختار ها نمادهای شیمیایی هستند که برای نشان دادن مجموعه ای از مواد شیمیایی با سازه های مشابه استفاده می شود.

ساختار های Markush با گروه های R نمایش داده می شوند و برای حفظ مالکیت معنوی آن سند بدون جزئیات دقیق درPatent 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

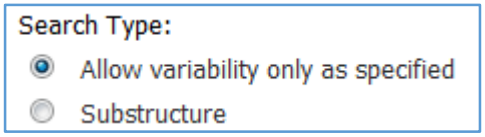
به عنوان مثال همانطور که در شکل ۳-۳۸ مشاهده می کنید ساختار مورد نظر رسم شده است.



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.

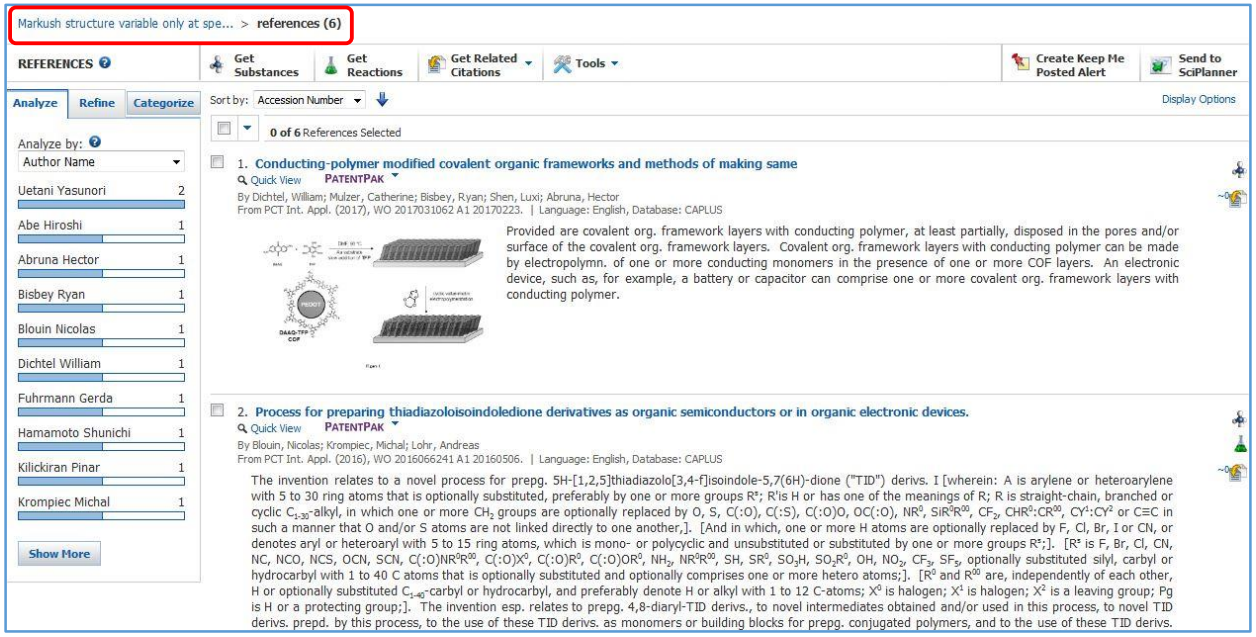
دو شیوه برای جستجو درMarkush وجود دارد:



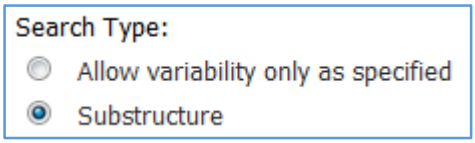
شکل ۳-۳۹

- 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 دراینجا قابل توجه است. نتیجه مطابق شکل ۳-۴۰ نمایش داده می شود.



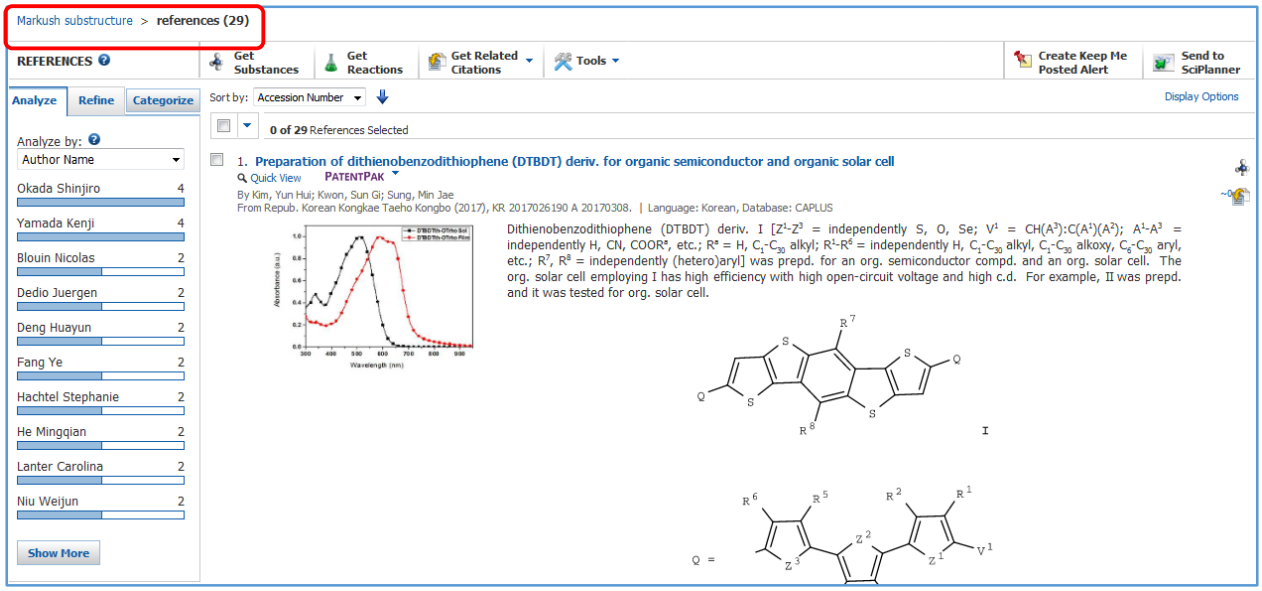
شکل ۳-۴۰



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.



شکل ۳-۴۱

PatentPak -۲-۲-۳

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

شکل ۳-۴۲

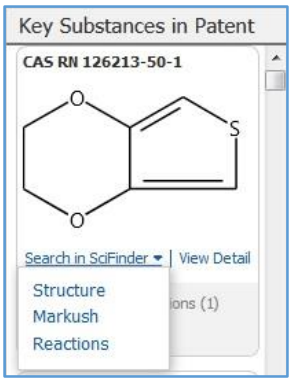
https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder

در PatentPak در باکس بالا امکان تغییر صفحه، بزرگ نمایی متن و دانلودPatent 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 گزاری شد، مطابق شکل ۳-۴۴ مشخص شده اند.



شکل ۳-۴۴

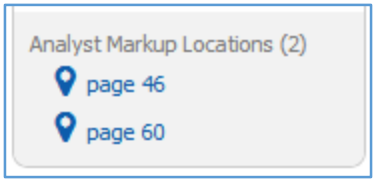
در هر مورد اطلاعات هر ترکیب نیز قابل بازیابی است.

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 ساختار های Markush جستجو کرد.

- View Detail: با کیلک 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

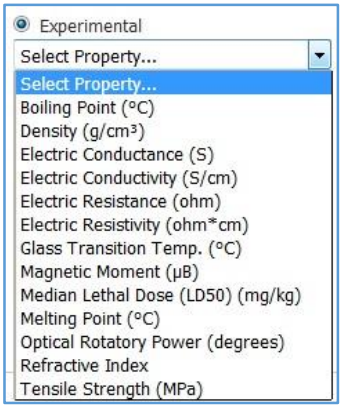
Molecular Formula -۳-۳

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

Property -۴-۳

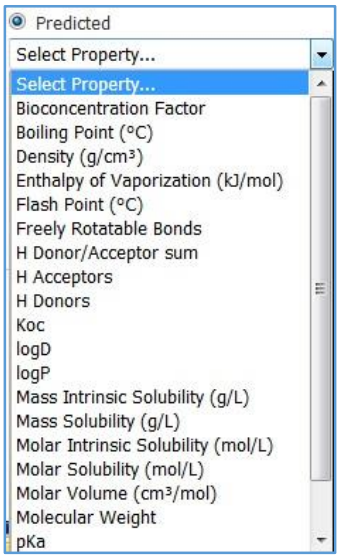
در این شیوه از جستجو می توان با استفاده از خصوصیات ترکیبات به دو صورت زیر عمل کرد:

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



شکل ۳-۴۶

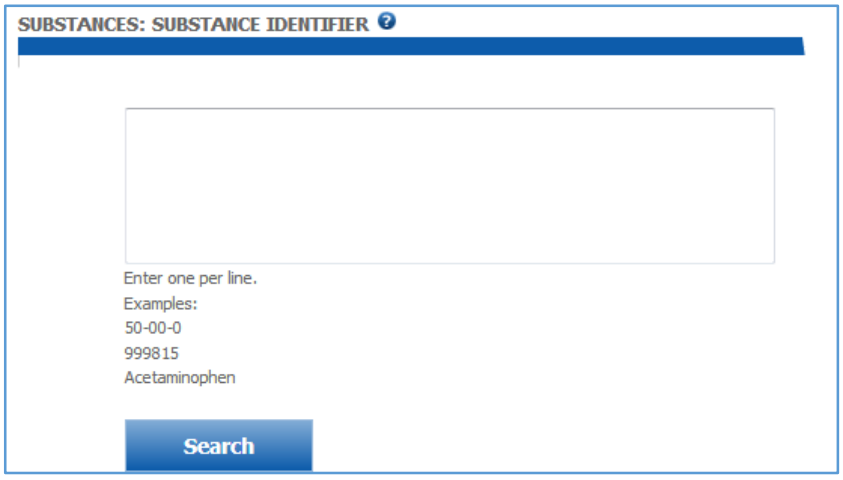
- Predicted: در این شیوه از جستجو با استفاده از خواص پیش بینی شده ترکیب مطابق شکل ۳-۴۷ می توان به جستجو پرداخت.



شکل ۳-۴۷

Substance Identifier -۵-۳

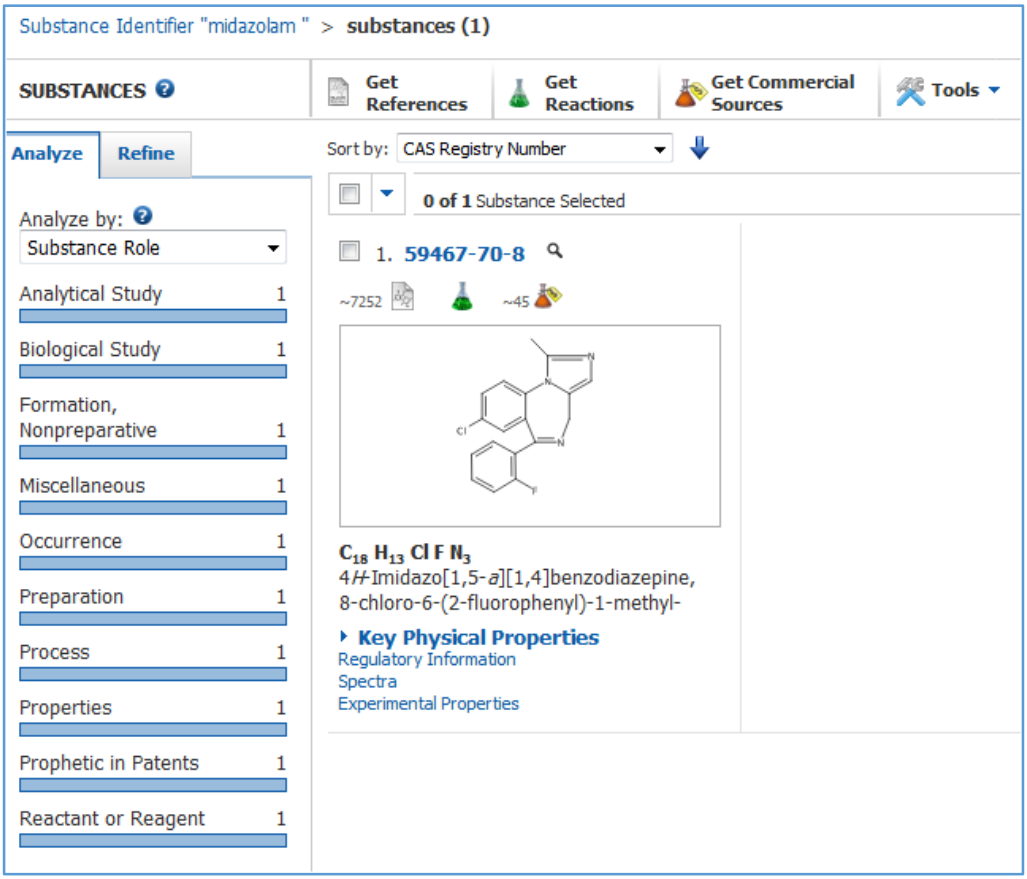
در این شیوه از جستجو مطابق شکل ۳-۴۸ امکان جستجو نام ترکیب به صورت لاتین و با شناسه .CAS No وجود دارد.



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.

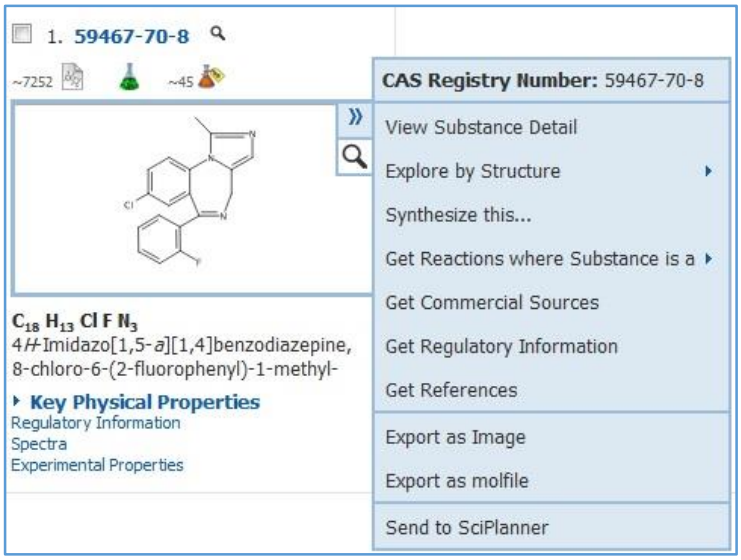


شکل ۳-۴۹

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.

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder

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

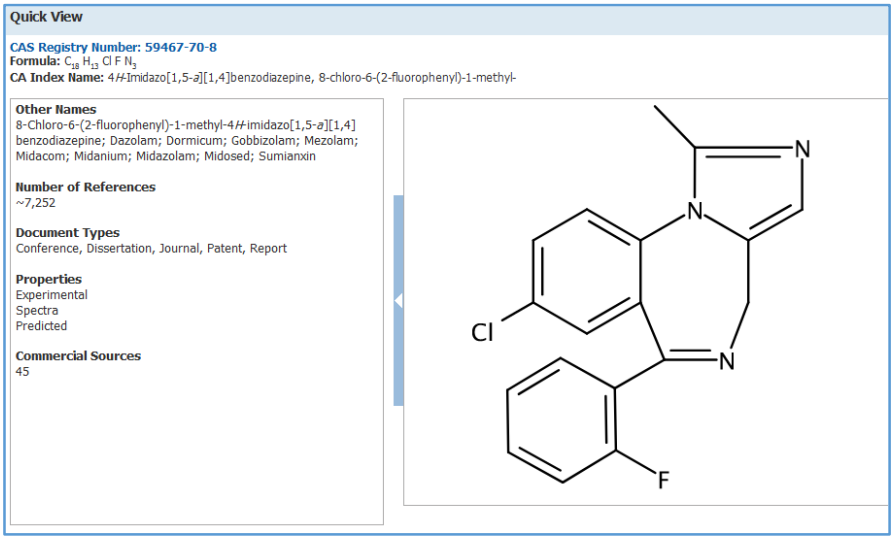


شکل ۳-۵۰

- 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 ابزار های 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 SciPlannerبه صورت کامل به آن خواهیم پرداخت.

همچنین با کیلک بر روی علامت ذره بین که در گوشه سمت راست ساختار 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.

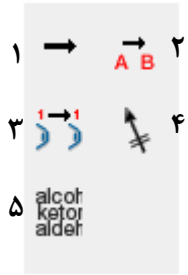
فصل چهارم

جستجوی واکنش ها

Reactions Searching

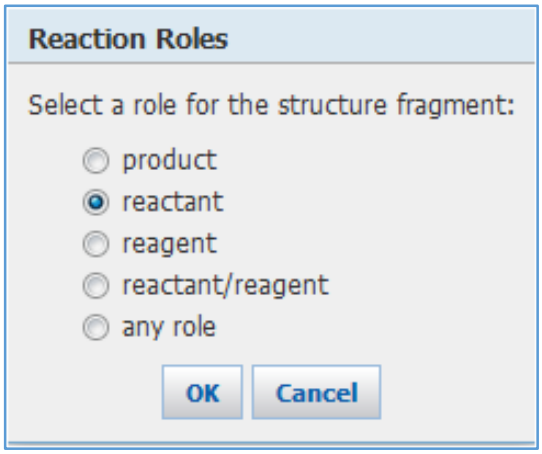
۴-۱- جستجو واکنش با رسم ساختار شیمیایی (Reaction Structure)

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 ۴-۱ مشاهده می کنید شامل موارد زیر است :



شکل ۴-۱

درصورتی 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 :

شکل ۴-۲

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 پیاپی است

۳. آلکین ها (۴ مورد): ترکیبات استیلنی دارای باند سه گانه

۴. آمین ها (۱۱مورد): آمین در ساختار خود شامل نیتروژن است

۵. مشتقات کربونات ها (۷ مورد): ترکیبات کربنی که داری 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 هترو اتم 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.

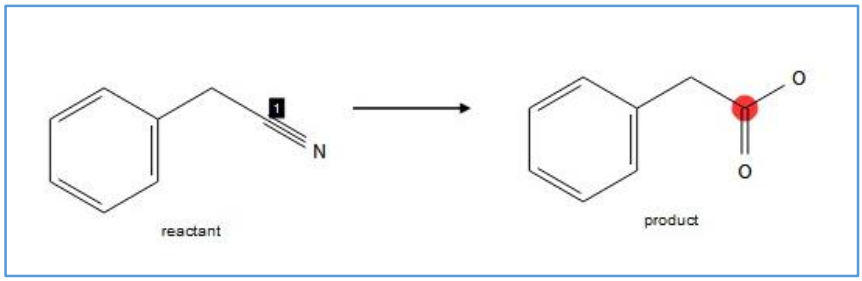
۱۱. ترکیبات غیرحلقوی (۱۳۶ مورد): کلیه گروه های عاملی که به صورت خطی یا شاخه دار هستند، در آن قرار دارد.

۱۲. حلقه ها (۷۱ مورد): ترکیباتی که شامل حلقه در ساختار هستند.

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder

۴-۲- جستجوی واکنش مورد نظر

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



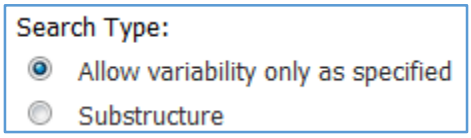
شکل ۴-۳

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 روی کربنی که در ماده اولیه و محصولات ثابت است یک عدد یکسان قرار میگیرد.

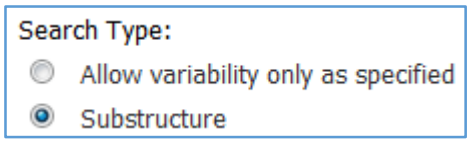
همانطور که در شکل ۴-۳ مشاهده می شود با رسم پیکان SciFinder به صورت خودکار واکنش دهنده و محصول را مشخص کرده است.

در جستو واکنش در SciFinder دو شیوه وجود دارد:



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.

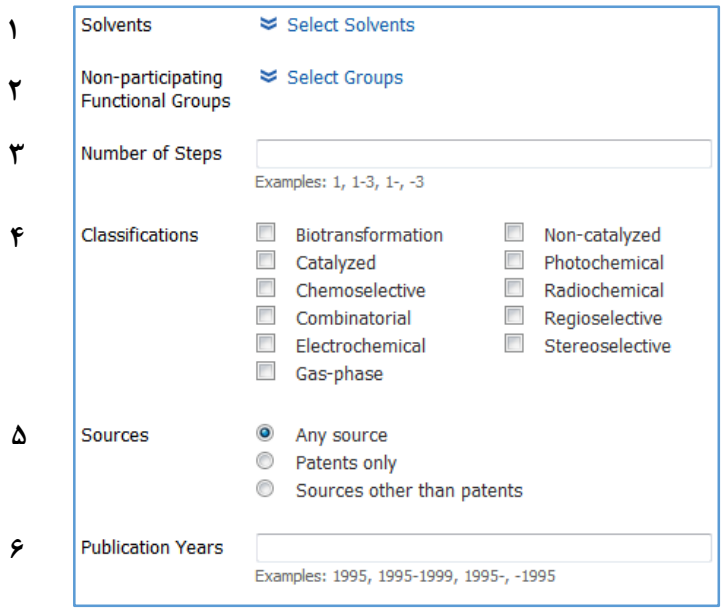


شکل ۴-۴

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

۴-۳- جستجوی پیشرفته واکنش ها

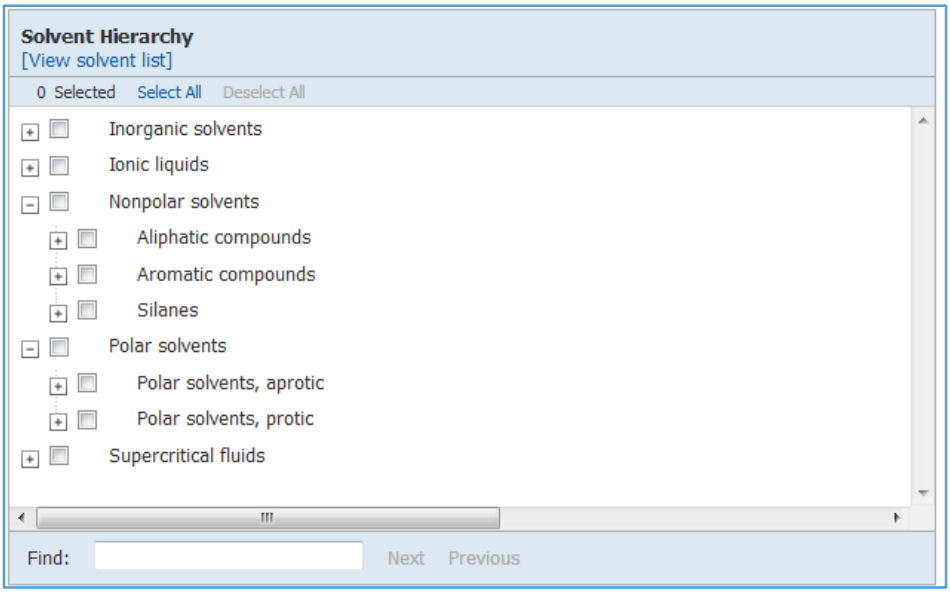
به طور مشابه با جستجو ترکیبات، جستجو واکنش ها نیز دارای جستجو پیشرفته (Advanced Search) است که می توانید با زدن تیک Always Show همیشه جستجو پیشرفته را به همین صورت کامل مشاهده کنید.



شکل ۴-۵

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.

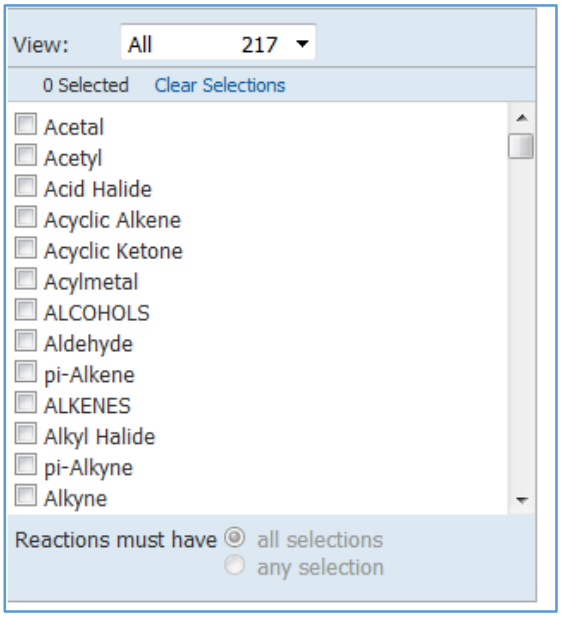


شکل ۴-۶

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.)

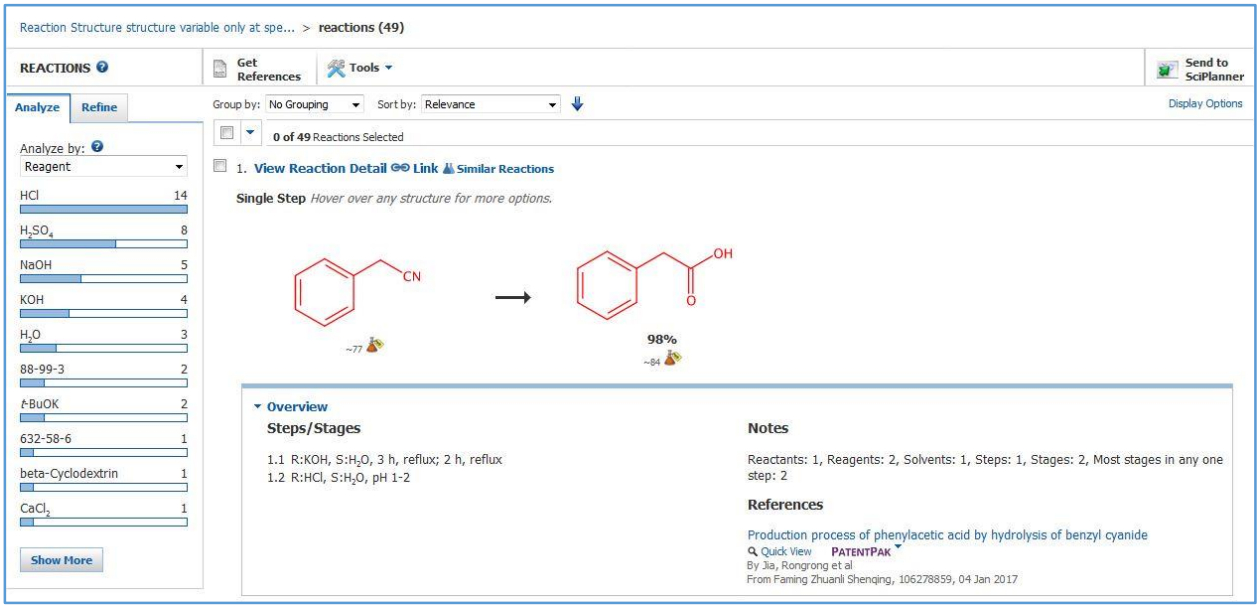
۳- Number of Steps: تعداد مراحل واکنش به منظور تهیه محصول مورد نظر که با تعیین آن، نتایج جستجو به سمت هدف مطلوب محدودتر می شود.

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.

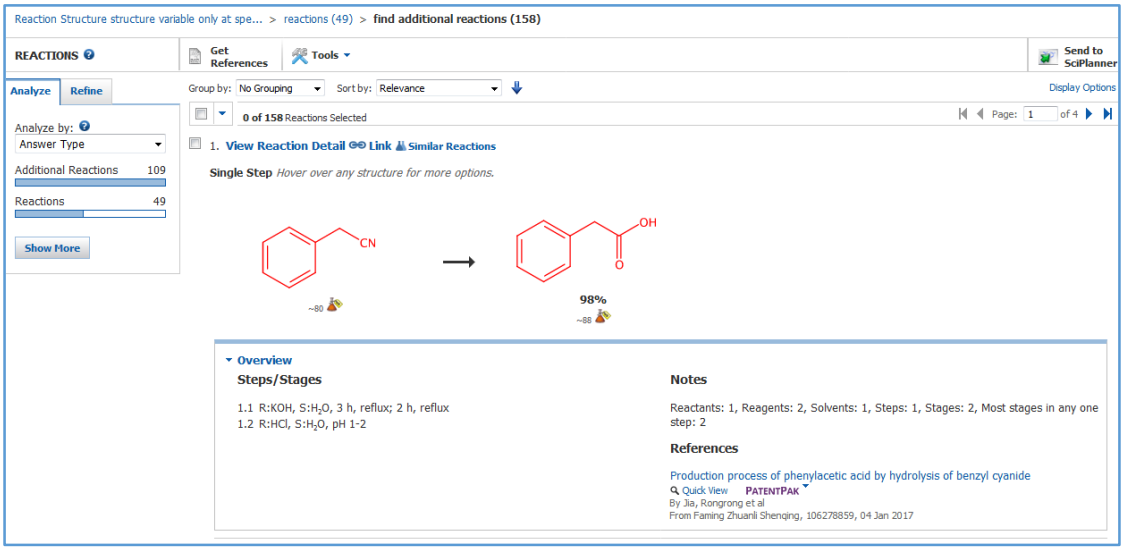


شکل ۴-۸

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 Toolsمی 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.)

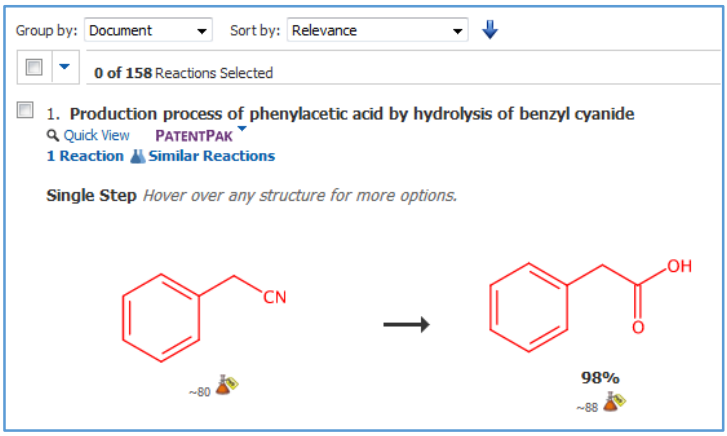


شکل ۴-۹

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.

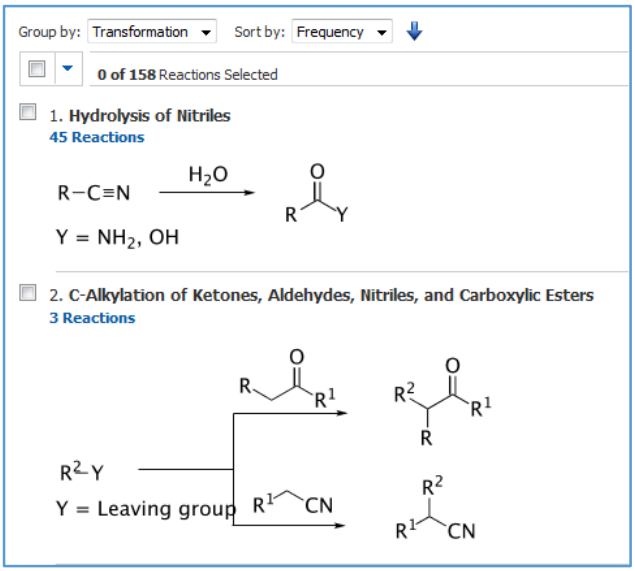
- Document: واکنش ها در قالب سند مورد نظر دسته بندی می شوند و همانطور که در شکل ۴-۱۰ مشاهده می کنید تعداد واکنش های مرتبط به آن سند به رنگ آبی نمایش داده می شود.



شکل ۴-۱۰

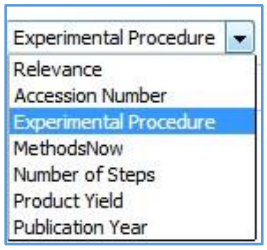
- Transformation:

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

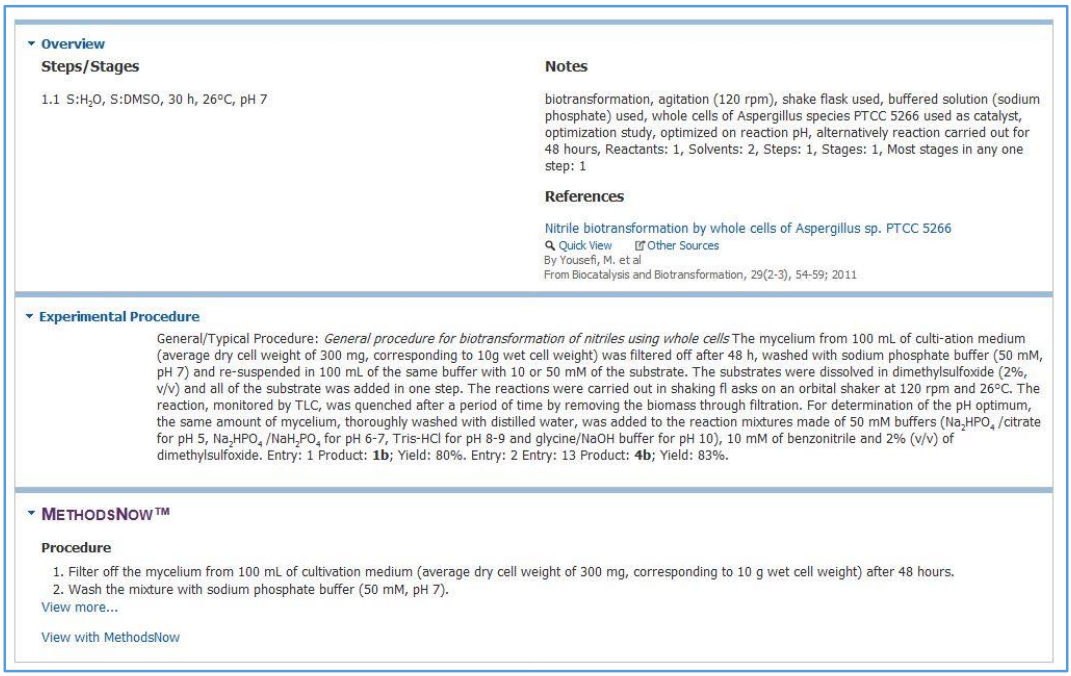
همانگونه که در شکل ۴-۱۲ مشاهده می کنید نتایج بازیابی شده را می توانید با استفاده از Sort به ترتیب سال انتشار، بازده و ... مرتب کنید. به عنوان مثال می توان نتایج را براساس فرایند آزمایشگاهی مرتب کرد .



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.



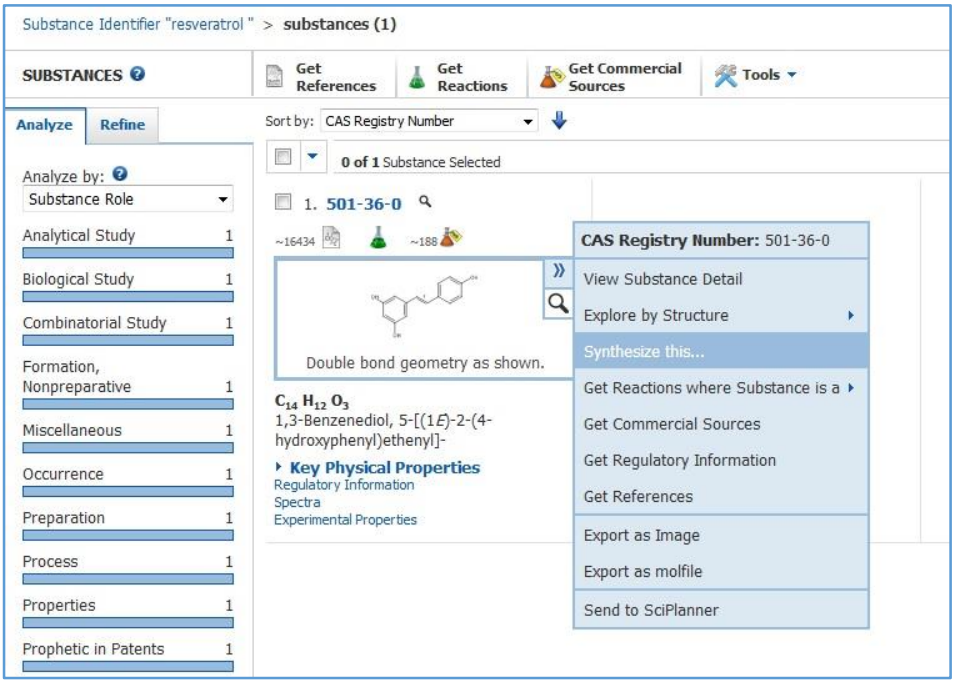
شکل ۴-۱۳

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

این گزینه به منظور یافتن شیوه سنتز ترکیب به صورت سریع درنظرگرفته 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.



شکل ۴-۱۴

همانطور که در شکل ۴-۱۴مشاهده 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 ویا 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

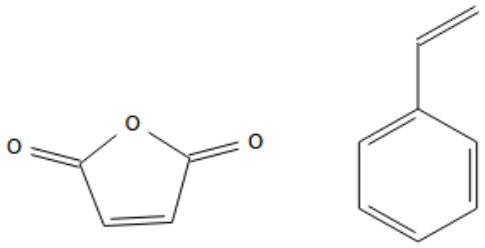
جستجو پلیمر ها به ۵ طریق می تواند انجام شود

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

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder

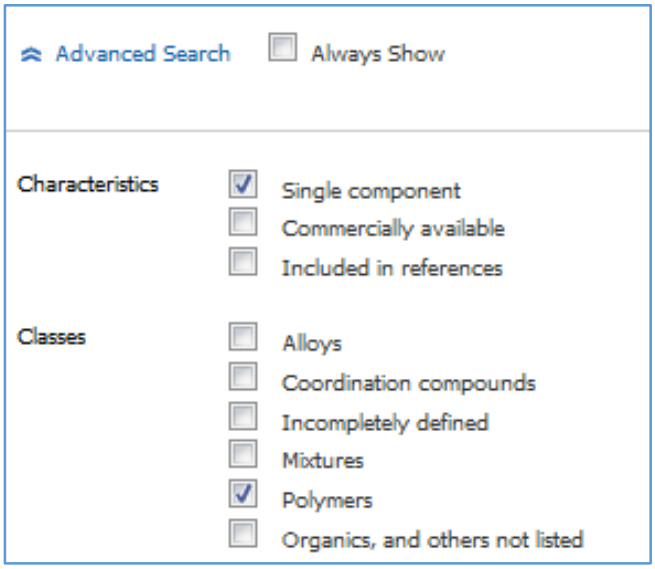
۵-۱-جستجو پلیمرها با استفاده از رسم ساختار

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

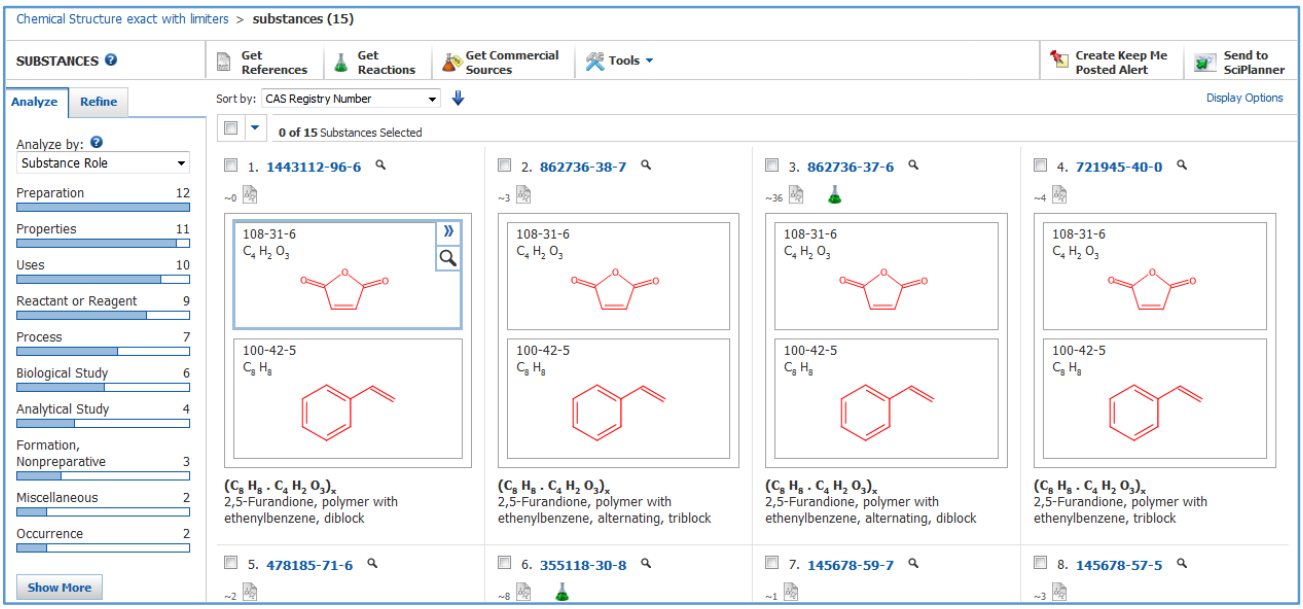
در این شیوه جستجو مطابق شکل ۵-۲ باید در قسمت Advanced تیک مربوط به پلیمر را فعال کنید تا جستجو را در حوزه پلیمر و این دو ترکیب را به عنوان مونومر های آن در نظر بگیرد.



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 ۵-۳ نمایش داده می شود.



شکل ۵-۳

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.

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

جستجو با استفاده از فرمول مولکولی روشی بسیار کارامد 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

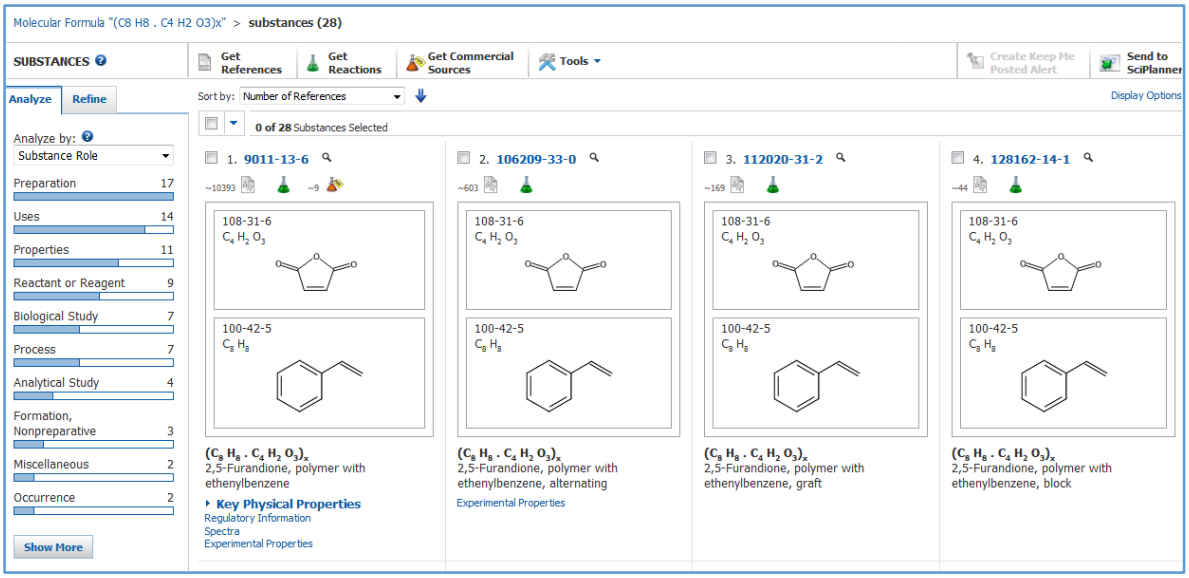
برای ترکیب هموپلیمر استیرن(C8H8)x

برای پلیمری از دو منومر ایزوپرن و استیرن (C8H8.C5H8)x

برای یک پلی استر ساخته شده از تری فتالویل کلرید با گلیکول (C8H4Cl2O2.C2H6O2)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 (C8H8.C4H2O3)x

که نتیجه به صورت زیر قابل بازیابی است.



شکل ۵-۴

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

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

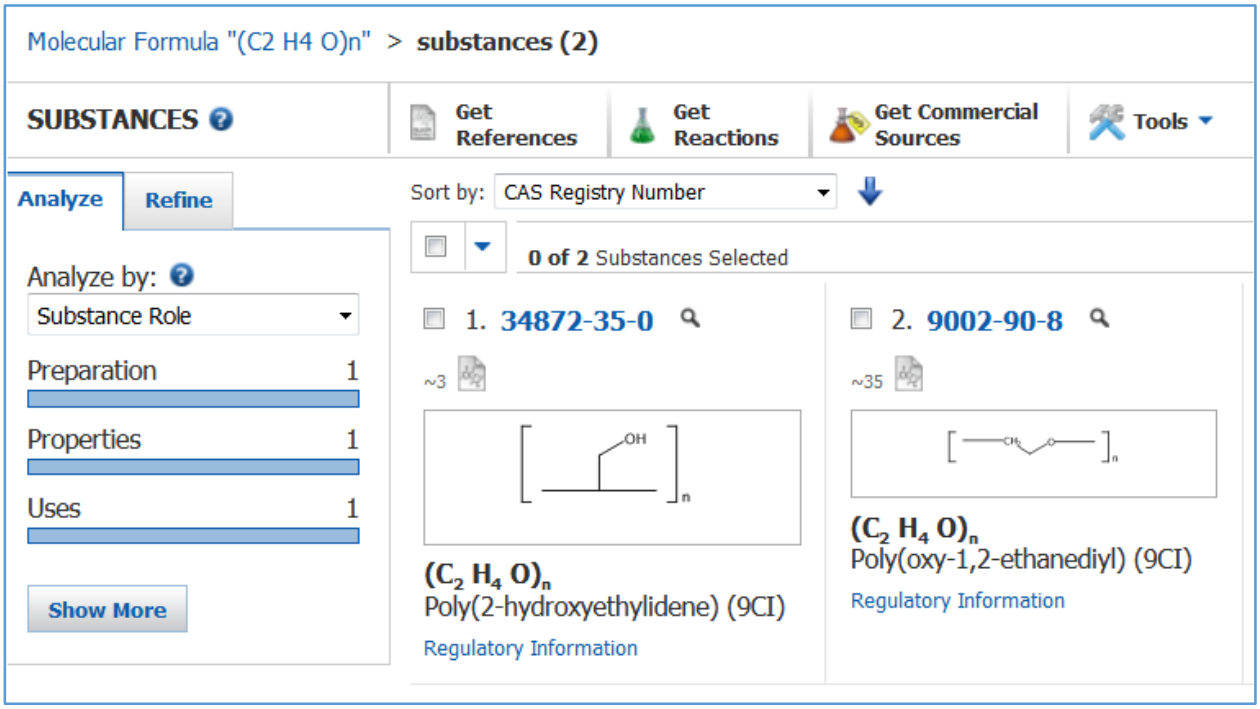
واحد های تکرار شونده در ساختار پلیمر ها (Structure Repeating Unit)یا به اختصار (SRU)در SciFinder با نماد n در بیرون پرانتز نمایش داده می شود.

به عنوان مثال

پلی بوتیلن ترفلات (C14H12O4)n

به عنوان مثال

با جستجو (C2H4O)n، ترکیبات SRU با این فرمول بسته نمایش داده می شوند.



شکل ۵-۵

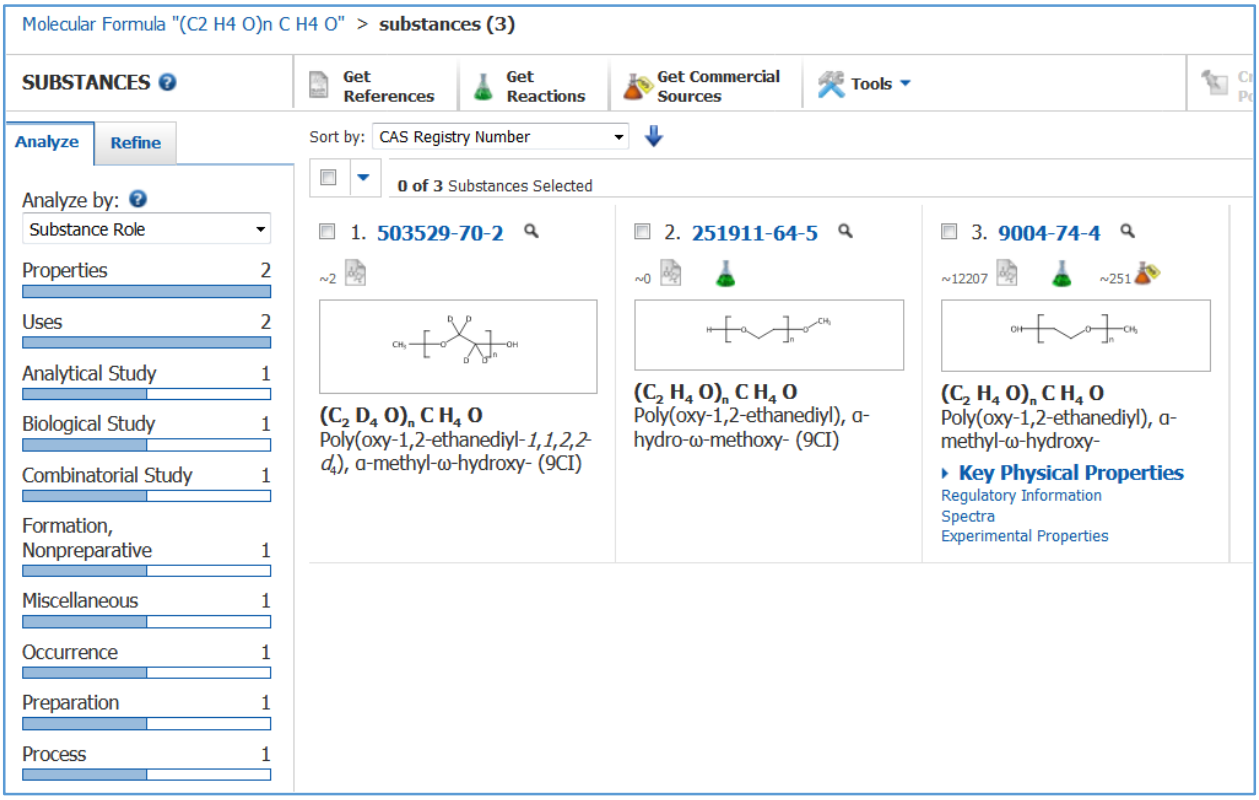
۵-۲-۳-جستجو پلیمر ها با گروه های انتهایی:

جستجو ترکیباتی از پلیمر ها که در انتهای واحد تکرار شونده خود، گروه ثابتی دارند در این گروه قرار می گیرند.

به عنوان مثال

آلفا-متیل گاما-هیدروکسی پلی اتر (C2H4O)nCH4O که مطابق شکل نشان داده شده است.

(مجموع اتم های متیل و هیدروکسی به صورت CH4O در فرمول بسته نوشته شده است)



شکل ۵-۶

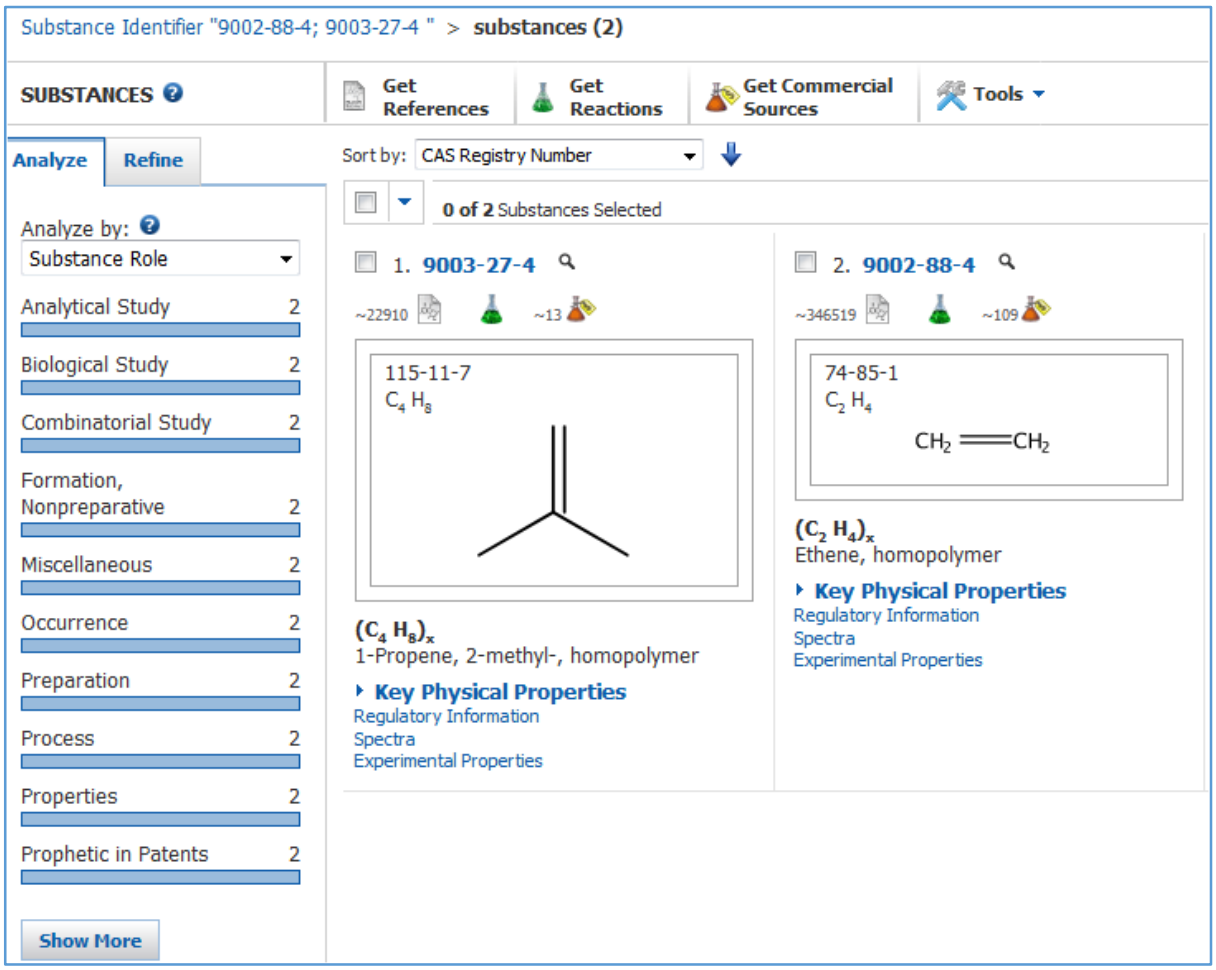
https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder

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

همچنین می توانید 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 می کنید می توان با نوشتن CAS Registry No. منحصر به فرد هر پلیمر درقسمت Chemical Identifier آن را جستجو کرد. توجه داشته باشید که می توان 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.



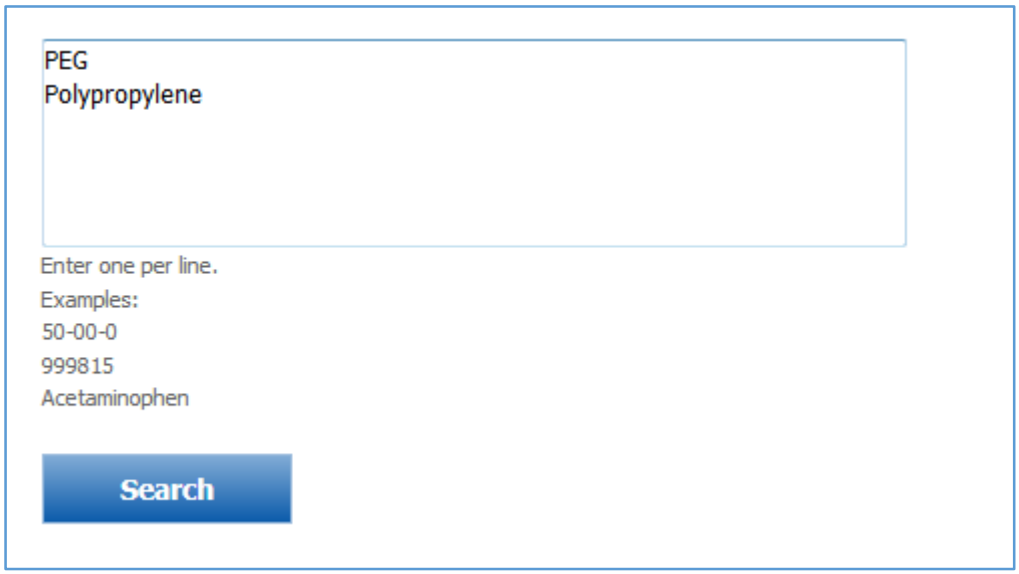
شکل ۵-۷

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder

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.



شکل ۵-۸

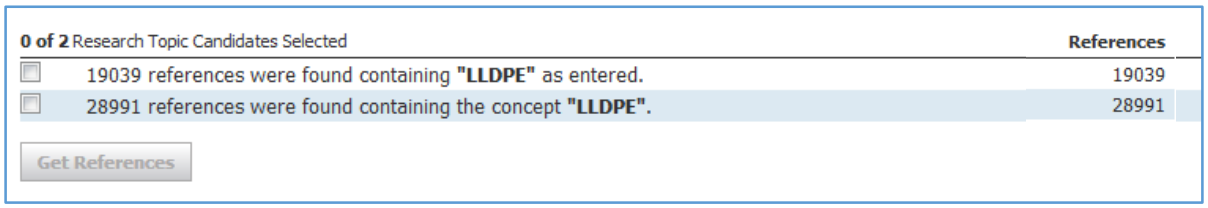
در اینجا نیز می توان نام ۲۵ ترکیب پلیمری متفاوت را جستجو کرد و فقط کافیت هر ترکیب در یک سطر نوشته شود.

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.

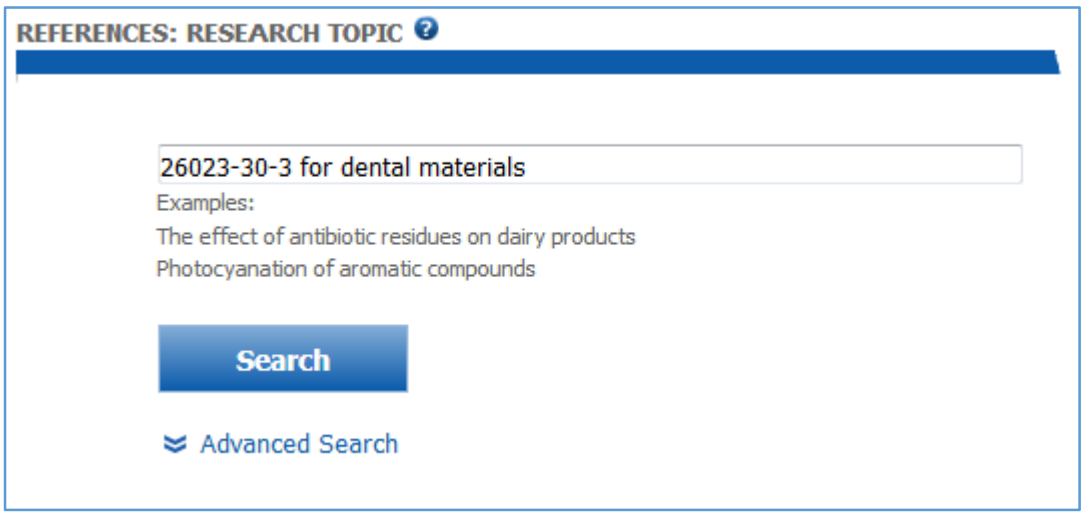
این کار مزیتی که بر دیگر روش های جستجو دارد این است که در این قسمت می توان به مقالات یا پتنت هایی دسترسی پیدا کرد که هنوز ترکیباتش مورد بررسی قرار نگرفته و CAS No. نگرفته اند.

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



شکل ۵-۹

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



شکل ۵-۱۰

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder

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 تولی 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** :

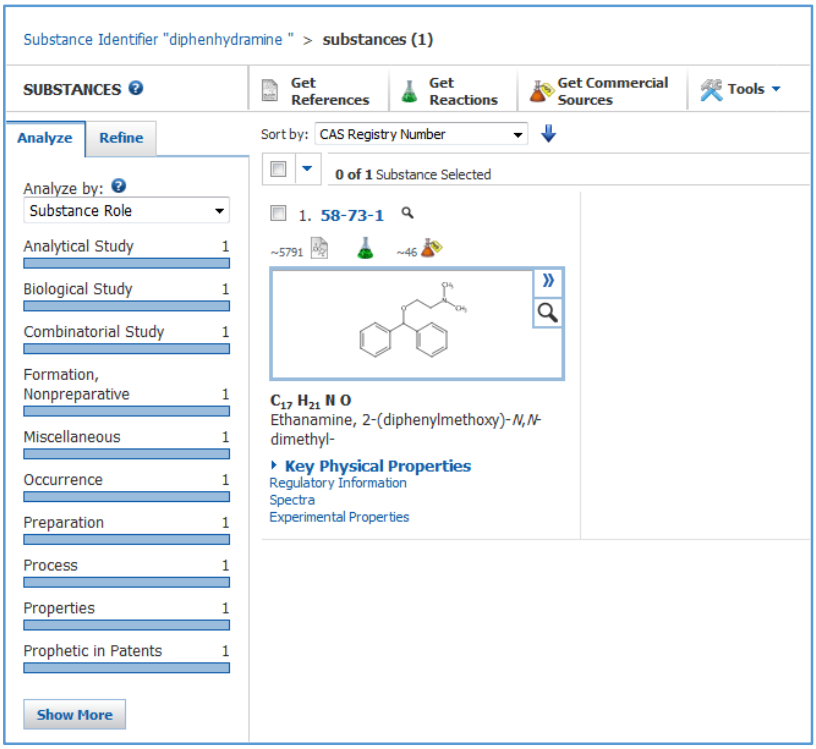
پیوند به تمام پایگاه داده های SciFinder به صورت همزمان که با استفاده از گزینه های پویا در محتوای آن می توانید جستجوهای مجانی را برای یافتن و سازماندهی اطلاعات ضروری برای پروژه انجام دهید.

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 دردسترس 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

۶-۲- بررسی سنتز دارو در SciPlanner

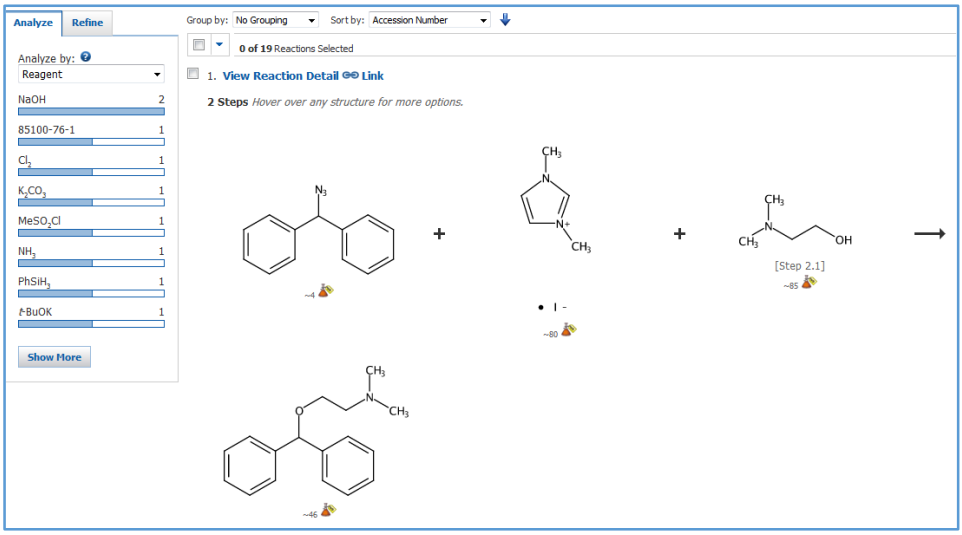
دیفن هیدرامین که جز آنتی هیستامین هاست را با نام لاتینش Diphenhydramine در قسمت Substance Identifier مطابق شکل ۶-۱ جستجو شده است.



شکل ۶-۱

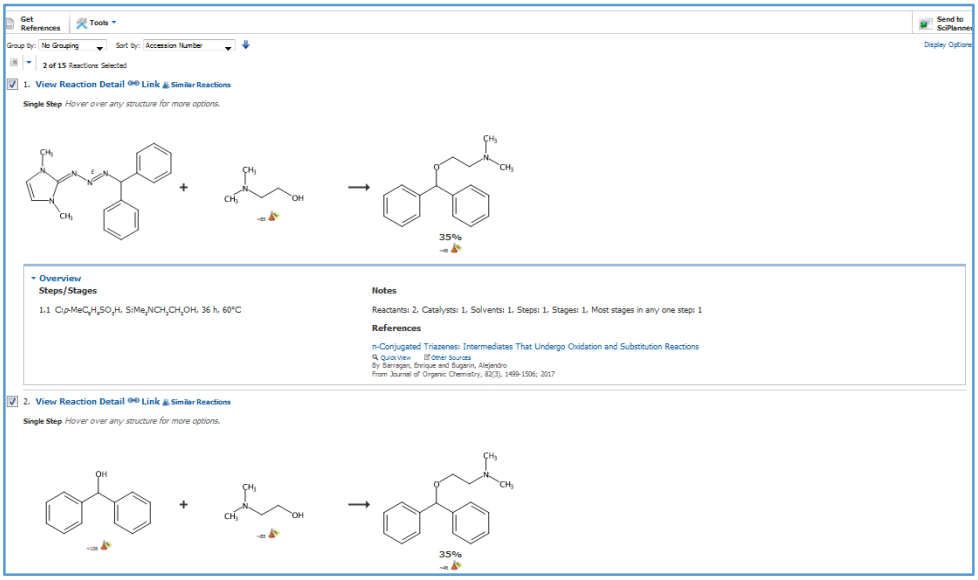
https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder

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 ۶-۲ قابل مشاهده است.



شکل ۶-۲

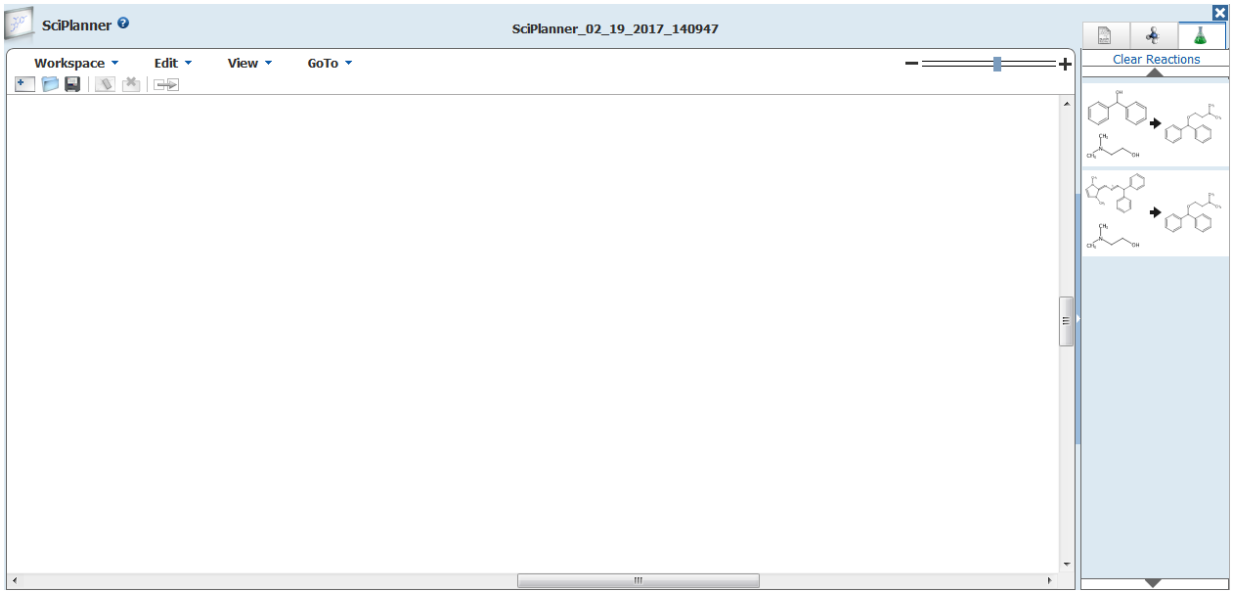
همانگونه که در شکل ۶-۳ مشخص است با انتخاب دو مورد از واکنش هایی که تک مرحله ای هستند، Send To SciPlanner را انتخاب می کنیم.



شکل ۶-۳

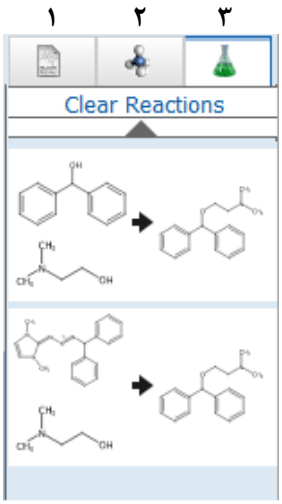
دو واکنش انتخاب شده مورد نظر در SciPlanner قابل مشاهده اند.

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



شکل ۶-۴

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 شدi است.

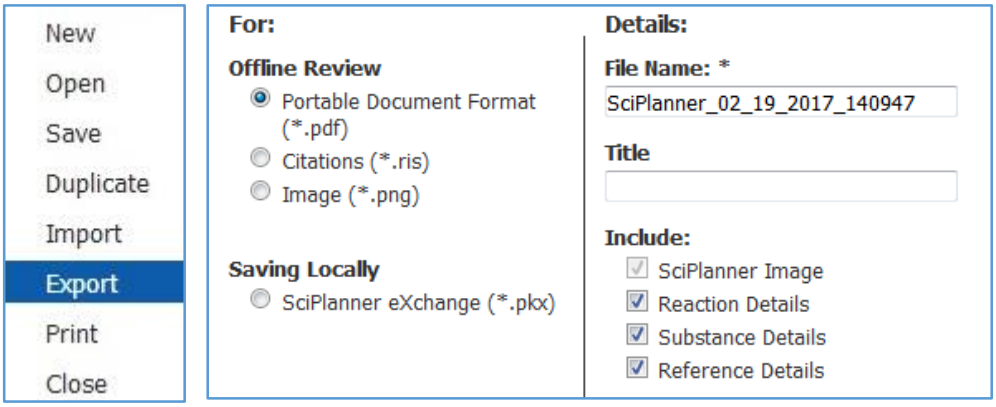
همچنین می توانید با استفاده از Clear Reaction واکنش های مورد نظر را در این محیط جستجو پاک کنید.

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 ازجمله 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 ۶-۵ مشاهده می کنید می توان خروجی را به فرمت ها و همچنین جزییات متفاوت تهیه کرد.



شکل ۶-۵

همانگونه که در شکل ۶-۵ 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

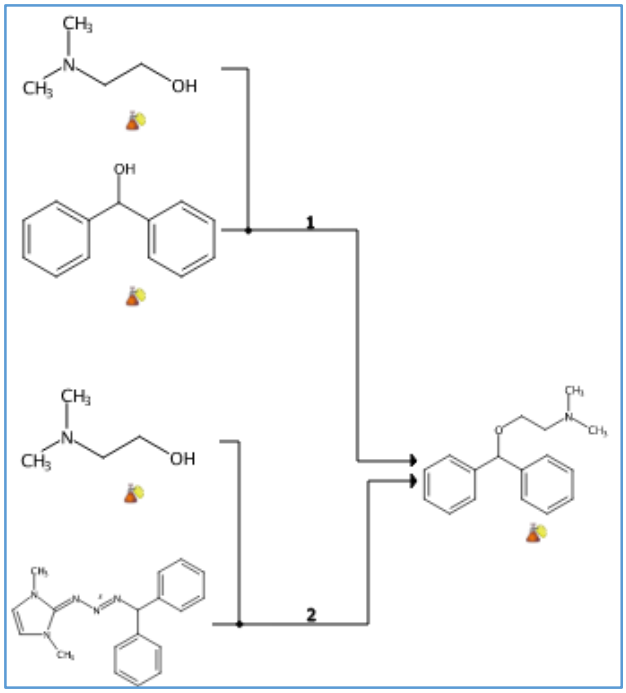
۸. پاک کردن محیط کار SciPlanner

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)

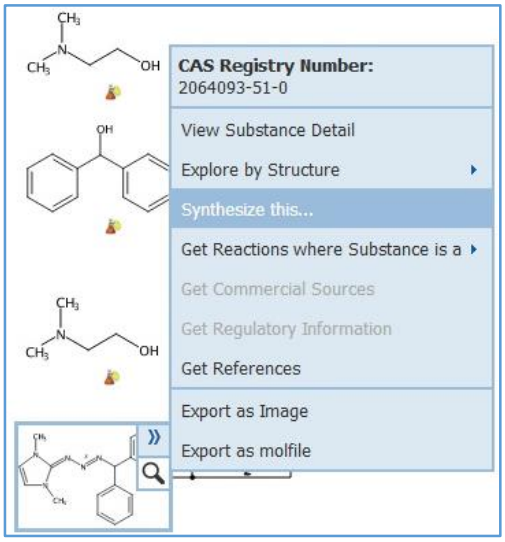
همچنین همانگونه که در شکل ۶-۶ مشاهده می کنید در صورتی که دو ترکیب یکسان بودند می توانید با قرار دادن آن دو روی هم، از تکرار ترکیب جلوگیری کنید.



شکل ۶-۶

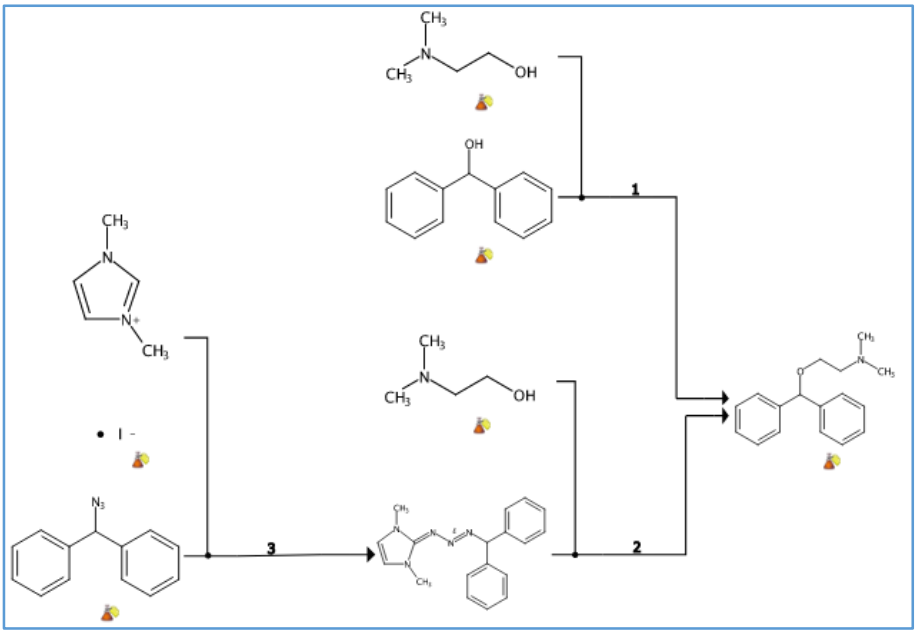
علامت مربوط به دسترسی تجاری ترکیبات است که می توان با کلیک روی هرکدام از آنها جهت تهیه ترکیب مورد نظر و بررسی دسترسی آنها اطلاعات کافی را بدست آورد.

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



شکل ۶-۷

و مجددا 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.



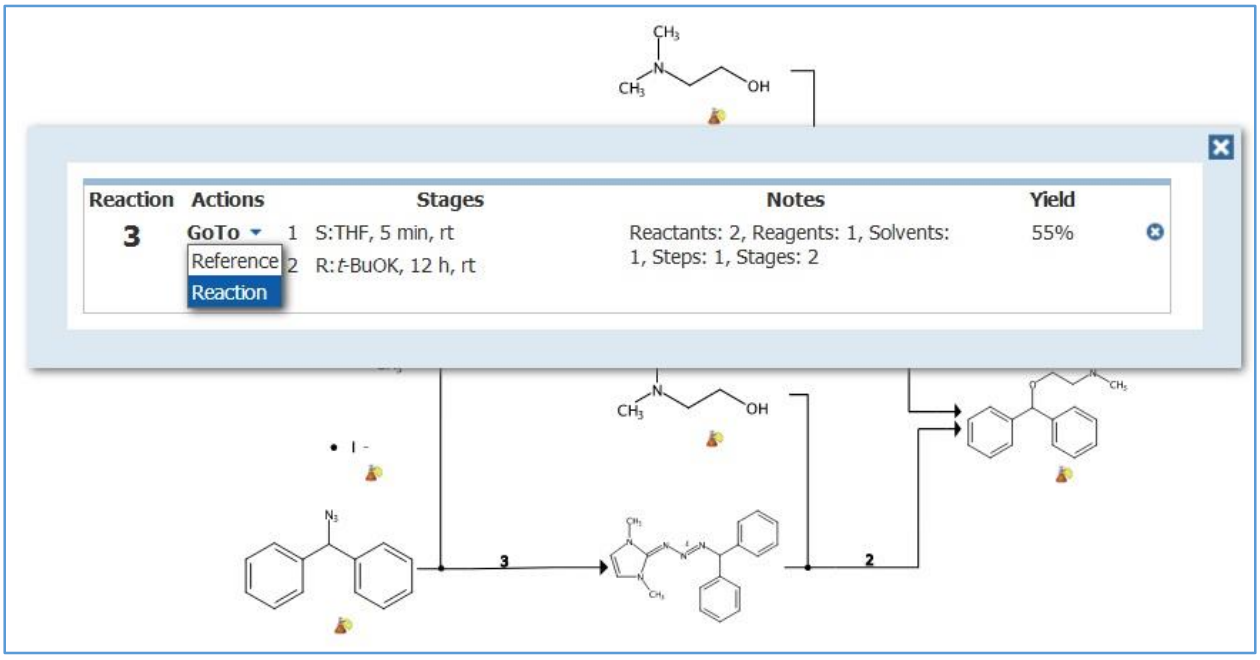
شکل ۶-۸

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.

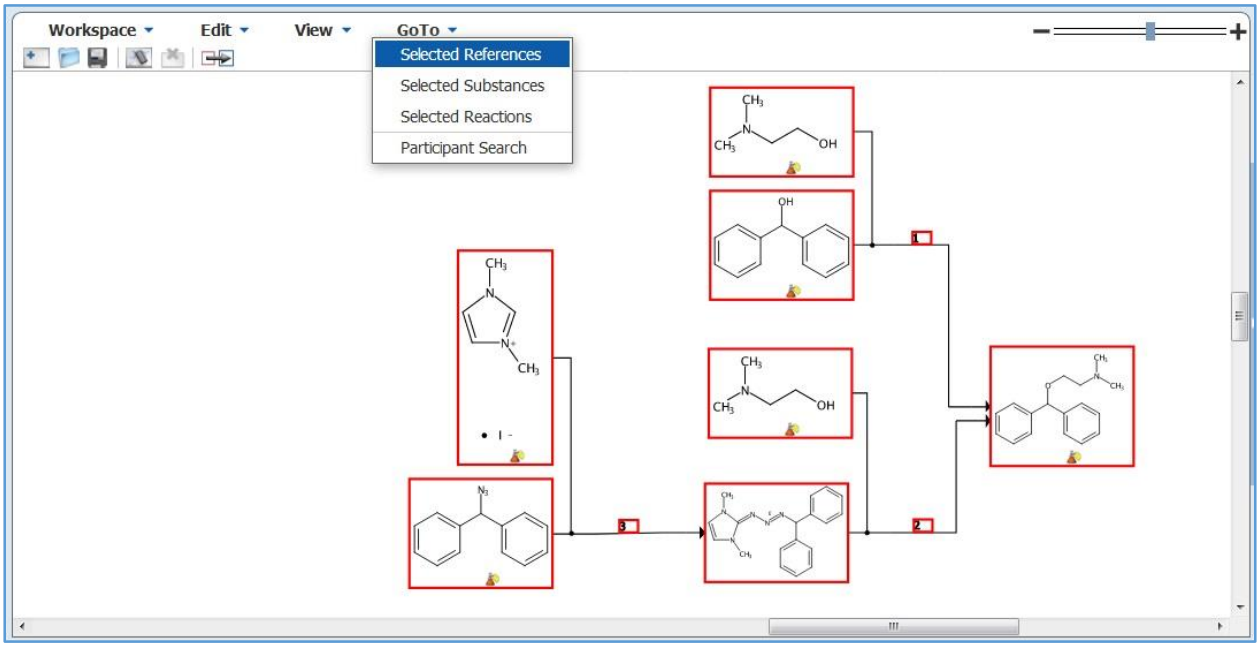
روی هر پیکان عددی نشان داده شده که با بردن موس روی آن می توان شرایط واکنش را مطابق شکل ۶-۹ مشاهده کرد

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



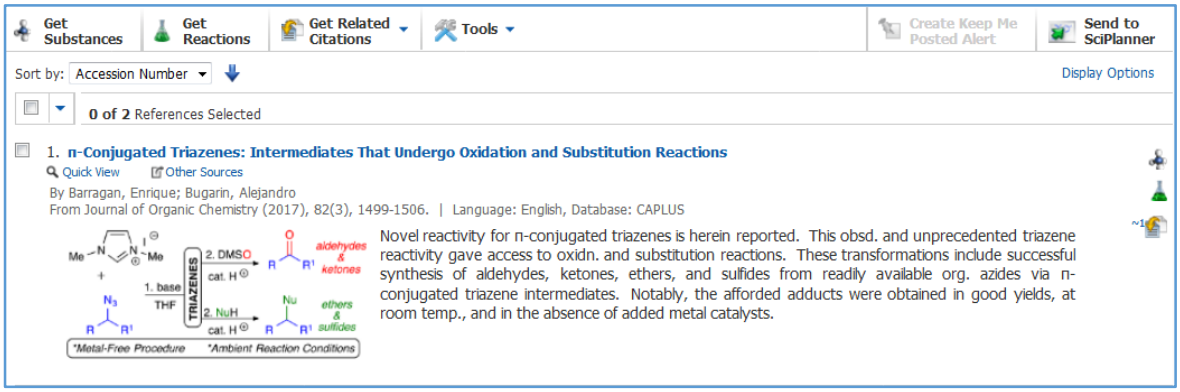
شکل ۶-۹

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.



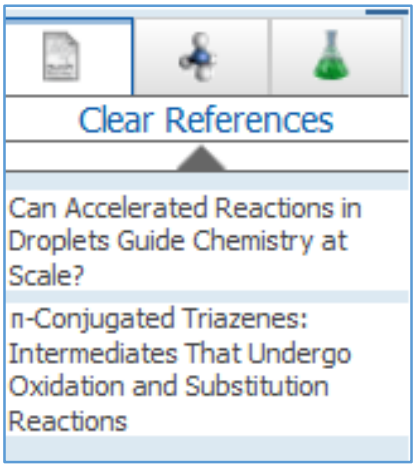
شکل ۶-۱۰

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



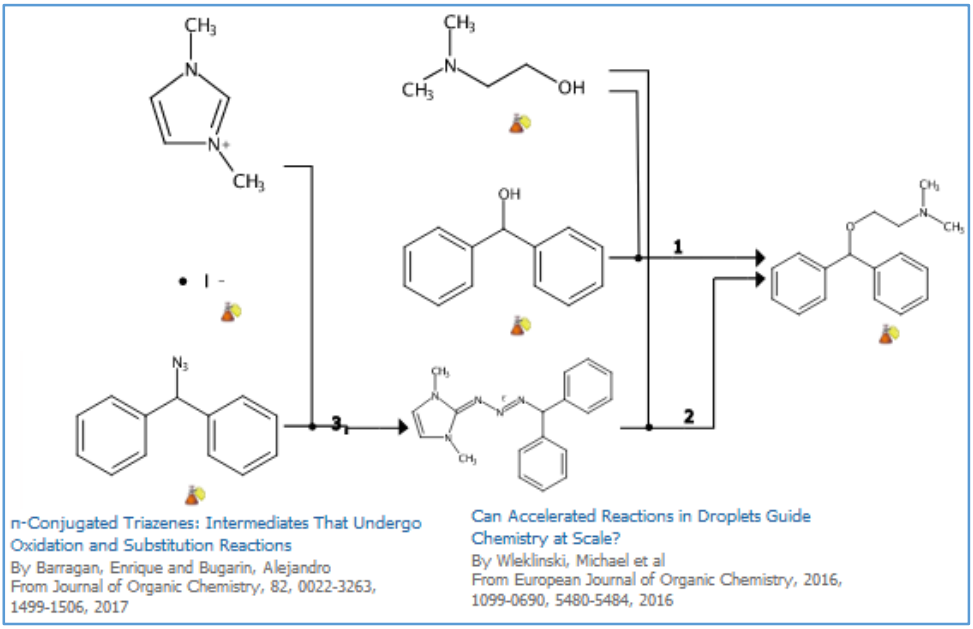
شکل ۶-۱۱

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



شکل ۶-۱۲

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 ۶-۱۳ مشاهده کرد که به این صورت مرتب شده است.



شکل ۶-۱۳

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.

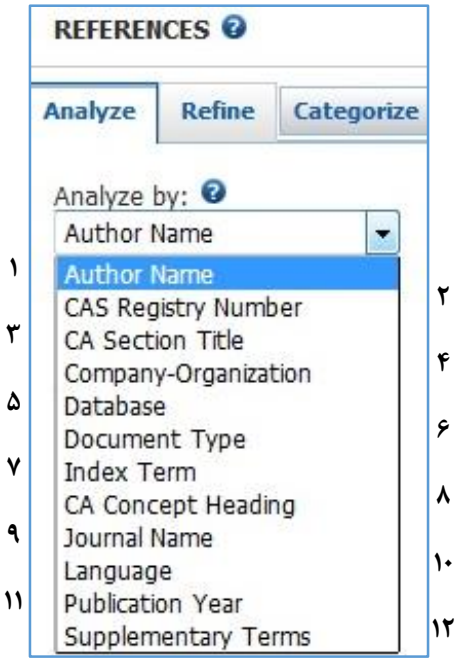
با استفاده از این ابزار می توان:

- 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 هرمورد 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

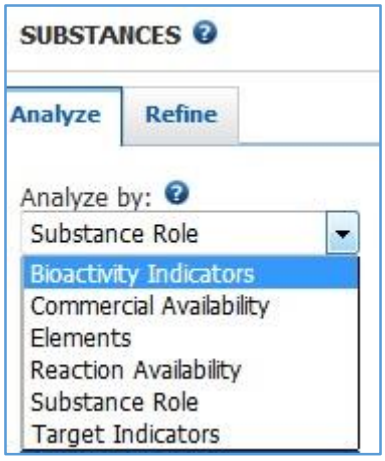
۱۰. زبان

۱۱. سال انتشار سند

۱۲. اصطلاحات مکمل یا اصطلاحات نمایه شده که اغلب توسط نویسندi 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

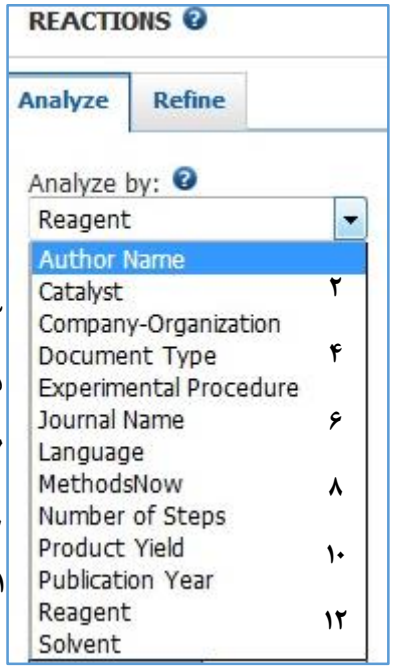
۴. واکنش های در دسترس

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 آزمایشاهی جهت انجام واکنش

۶. نام ژورنال

۷. زبان

۸. دستور العمل گام به گام برای انجام واکنش

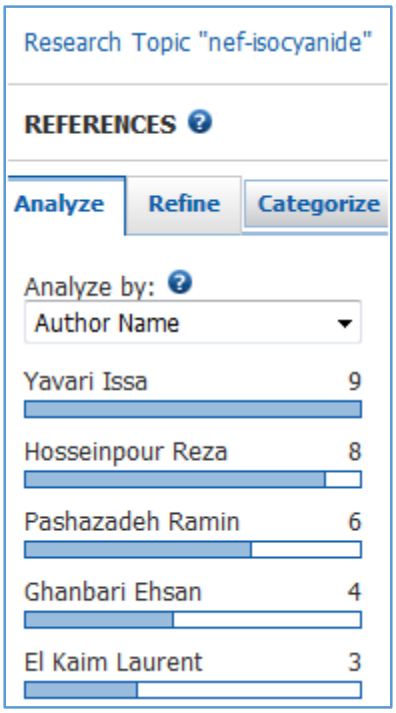
۹. تعداد مراحل واکنش

۱۰. بازده محصول

۱۱. سال انتشار سند

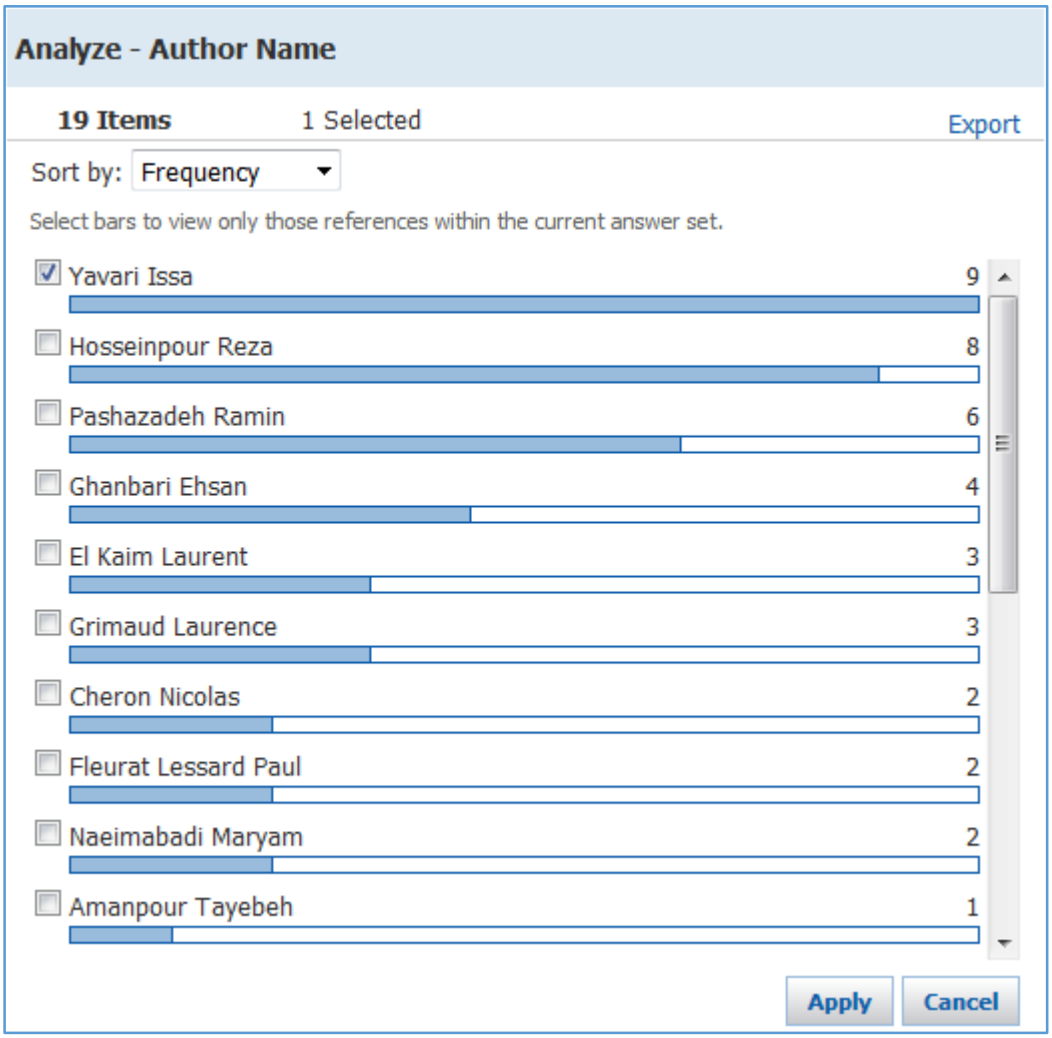
۱۲. نام واکنش دهنده

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



شکل ۷-۴

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



شکل ۷-۵

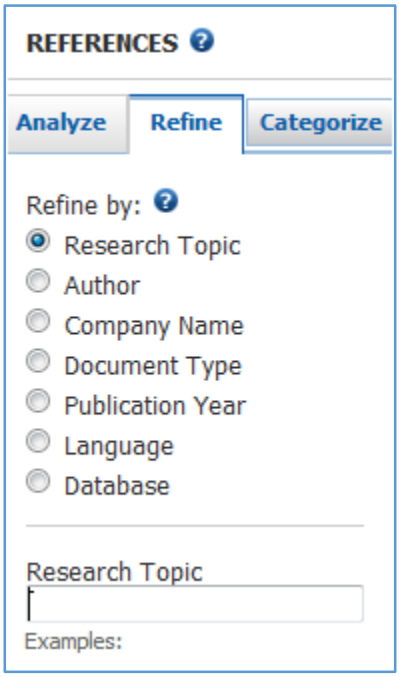
همچنین می توان از این اطلاعات یا هر کدام از اطلاعات مشابه دیگر با انتخاب گزینه Export فایلی برای اشتراک گزاری با فرمت PDF و یا Excel ذخیره کرد.

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.

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

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



شکل ۷-۶

۱. موضوع تحقیق: همانطور که در شکل ۷-۶ 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

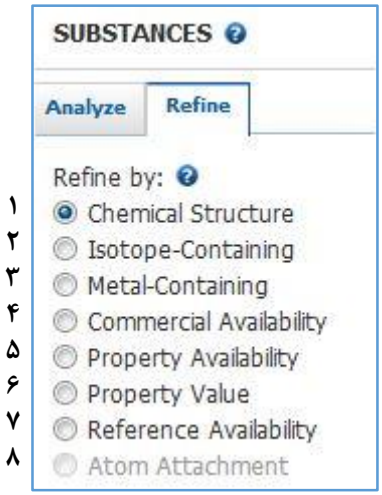
۵. سال انتشار سند

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 بازیابی و بهینه سازی قرار می گیرد.



شکل ۷-۷

۱. ساختار شیمیایی ترکیب مورد نظر

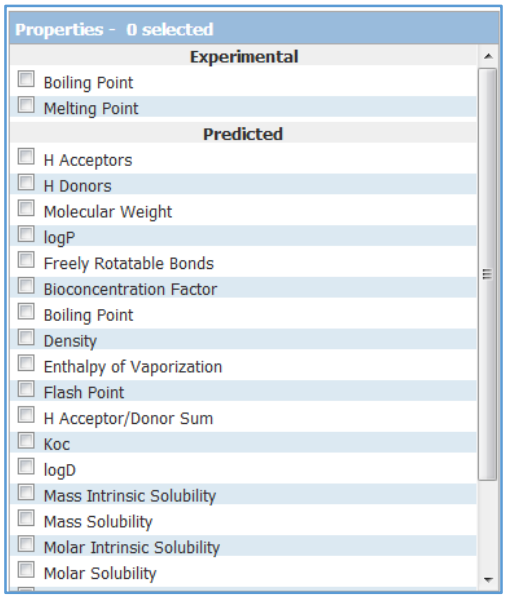
۲. ترکیبات شامل ایزوتوپ های عناصر مختلف

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

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

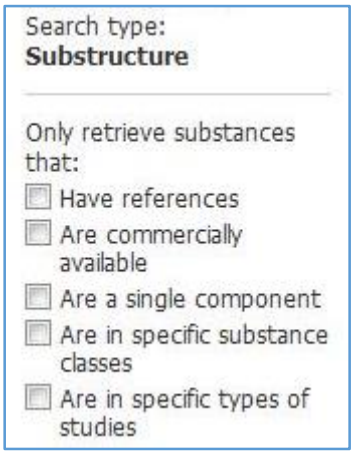
۱. رفرنس داشته باشد

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.



شکل ۷-۹

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.

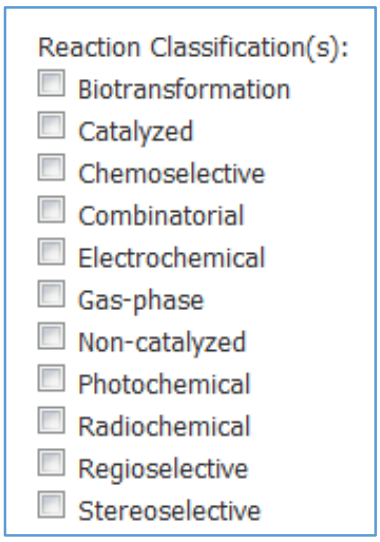
۱. ساختار ترکیبات موجود در واکنش مورد نظر

۲. بازده محصولات

۳. تعداد مراحل واکنش

۴. دسته بندی واکنش

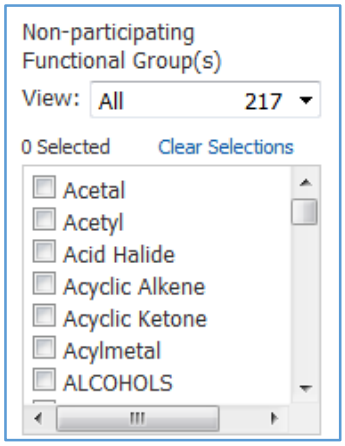
شکل ۷-۱۰



شکل ۷-۱۱

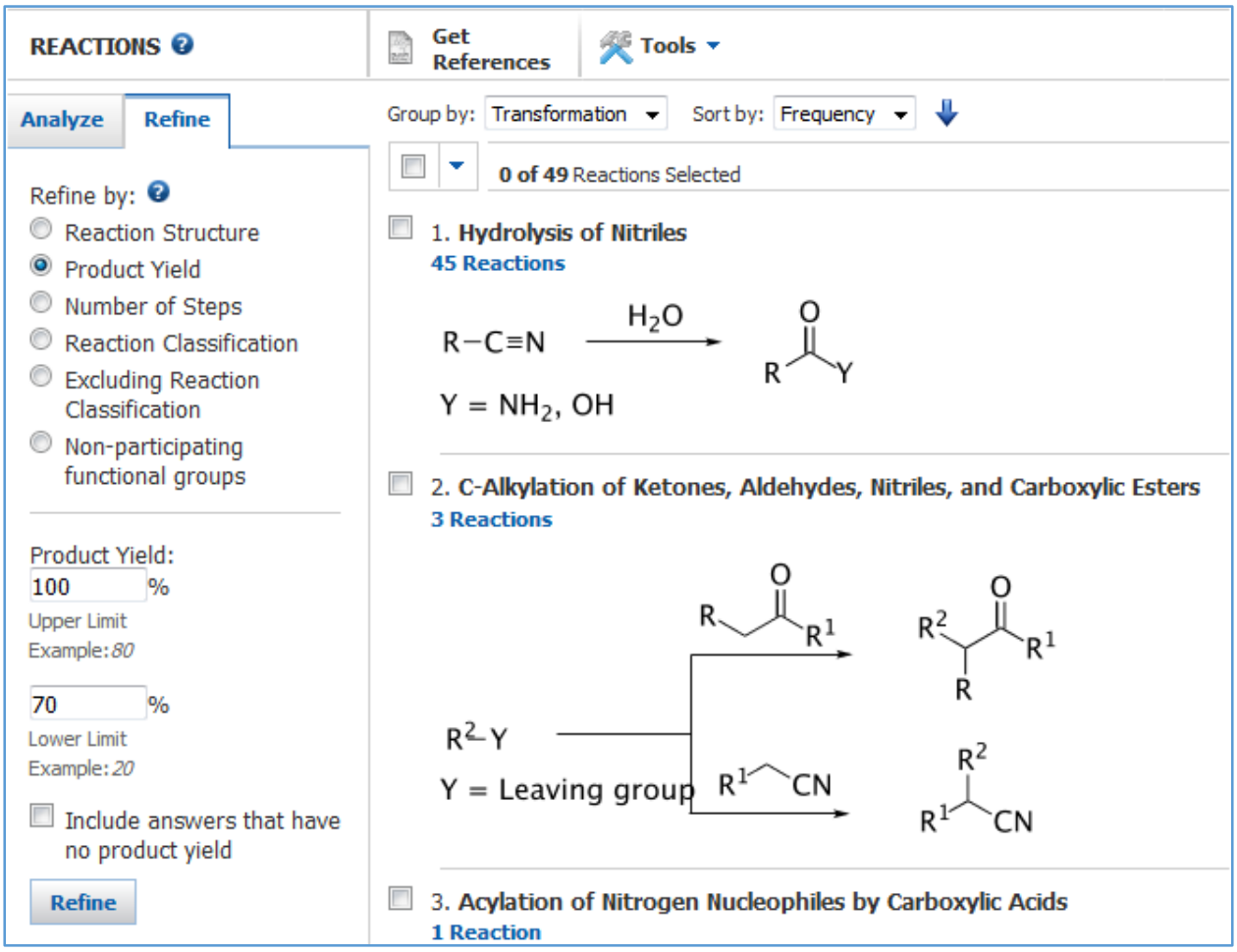
۵. دسته بندی واکنش هایی بجز واکنش مورد نظر

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



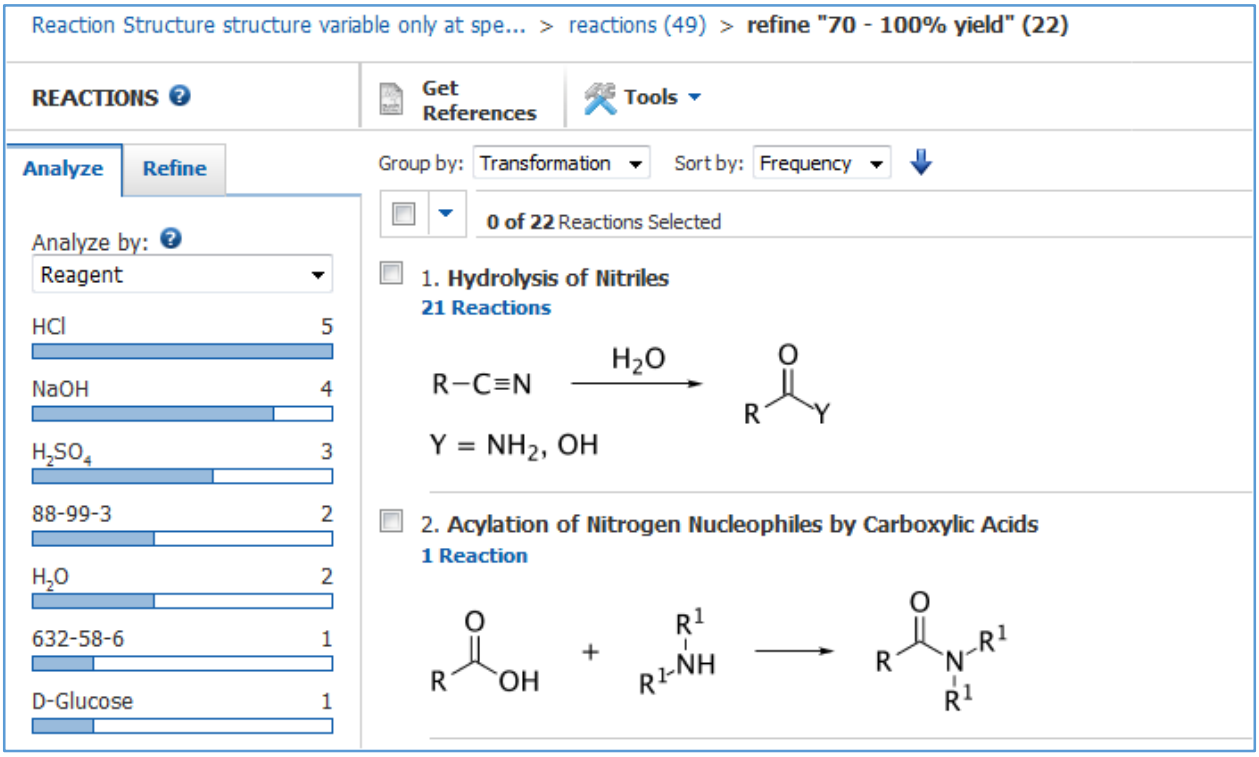
شکل ۷-۱۲

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.



شکل ۷-۱۳

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder



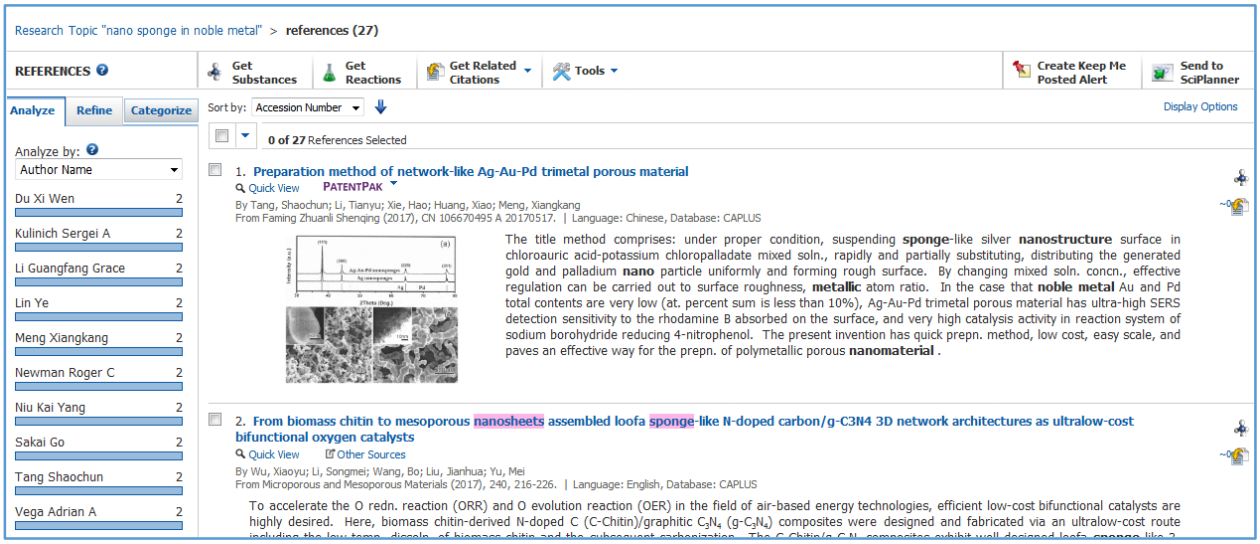
شکل ۷-۱۴

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 میپردازیم 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.

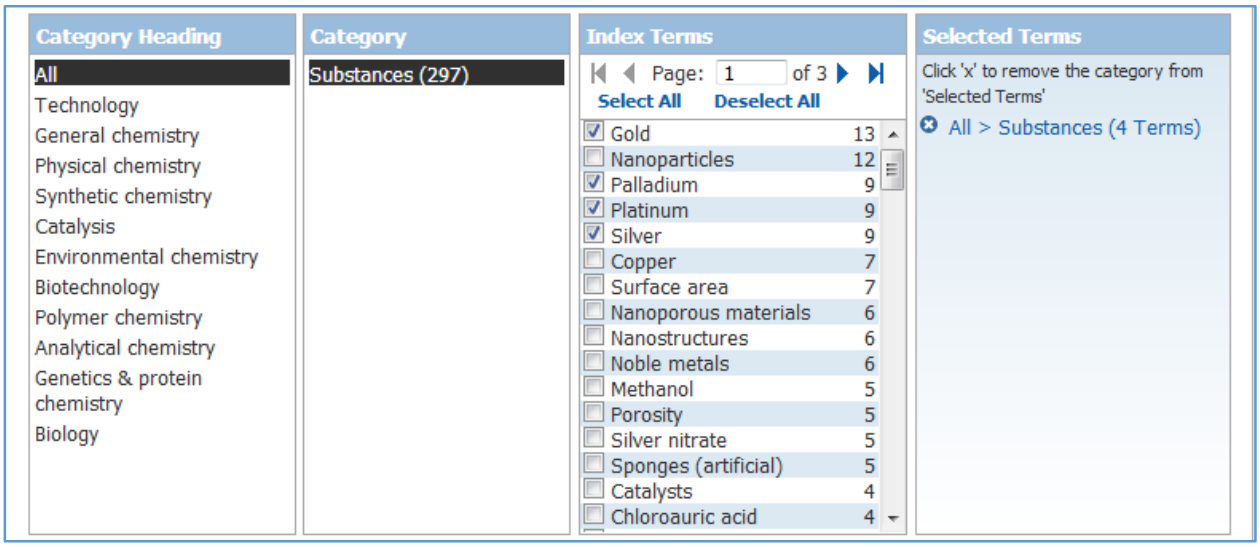
به عنوان مثال در قسمت رفرنس ها با جستجو نانو اسفنج ها با استفاده از فلزات نادر ، نتیجه مطابق شکل ۷-۱۵ به نمایش در می آید.



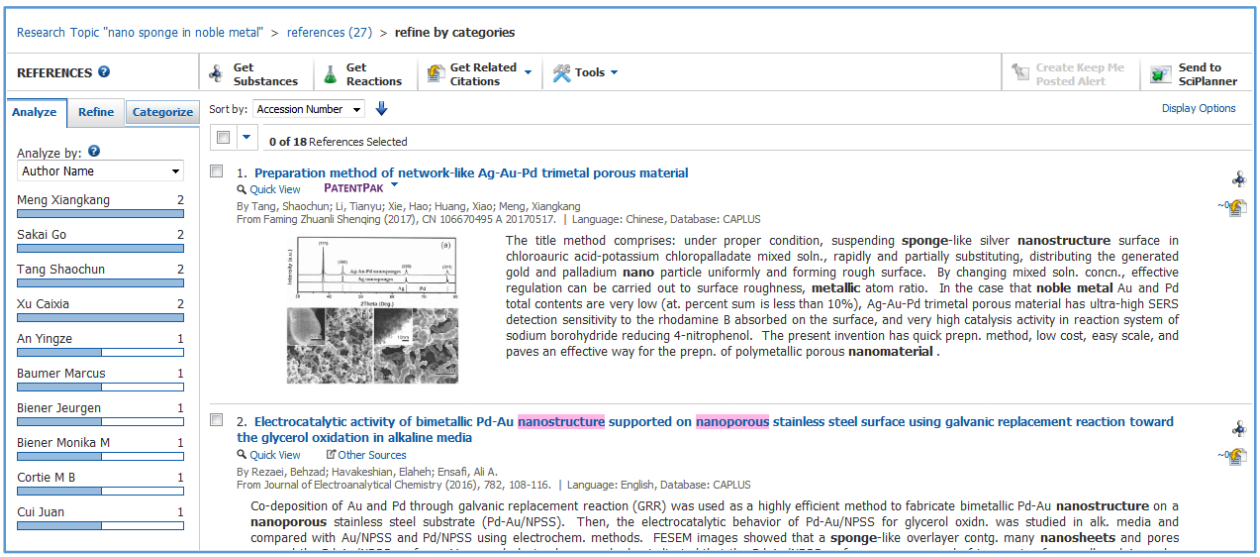
شکل ۷-۱۵

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 ۱۸تا کاهش یافت.



شکل ۷-۱۶



شکل ۷-۱۷

https://scifinder.cas.org/scifinder/login– SciFinder