

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ

«НОВОСИБИРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(НИУ-НГУ)

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по учебной работе

_____ САБЛИНА С.Г.

«__» _____ 2012 г

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС

«Поиск химической информации в научно-технических базах данных»

Кафедра органической химии, профиль «органическая химия»
Кафедра аналитической химии, профиль «аналитическая химия»

Лектор – к.п.н., старший преподаватель И.В. Зибарева

Новосибирск
2012 г.

Учебно-методический комплекс (УМК) ориентирован на студентов IV курса Факультета естественных наук НИУ-НГУ, обучающихся по программе бакалавриата по направлению подготовки 020100 «Химия», а также магистрантов и аспирантов других специальностей. В состав УМК включены: программа курса лекций, структура курса, рекомендации по организации самостоятельной работы студентов и банк обучающих материалов. Отличительная особенность УМК – возможность адаптации программы курса к конкретному профилю с учетом доступности в НИУ-НГУ и СО РАН релевантных информационных ресурсов.

Составитель

Зибарева И.В., ст. преп., к.п.н.

Учебно-методический комплекс подготовлен
в рамках реализации Программы развития НИУ-НГУ

© Новосибирский государственный университет, 2012

Содержание:

Аннотация УМК и рабочей программы курса «Поиск химической информации в научно-технических базах данных».....	4
1. Цели курса	6
2. Место курса в структуре образовательной программы	6
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения курса	6
4. Структура и содержание курса	8
Рабочий план курса	9
Программа курса.....	10
I. Поиск информации в библиографических БД и ИПС	10
II. Поиск информации в БД веществ	10
III. Особенности поиска специализированной информации.....	11
5. Виды учебной работы и образовательные технологии, используемые при их реализации	13
6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины	13
Литература	14
Ресурсы сети Интернет	14
Примеры заданий на контрольных работах и зачете	15
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение курса	18
8. Материально-техническое обеспечение курса	19
9. Банк обучающих материалов	20
Сеть STN International	20
Поиск в ИПС SciFinder.....	38
Сравнительные характеристики SciFinder, Reaxys, SoS и WoS, определяющие области применения этих ресурсов.....	98
Ресурсы сети Интернет	99
Краткий словарь патентных терминов	100

Аннотация УМК и рабочей программы курса «Поиск химической информации в научно-технических базах данных»

Одно из необходимых условий дальнейшего развития образования и науки – доступ к современным информационным ресурсам и умение их эффективного использования. УМК «Поиск химической информации в научно-технических базах данных» направлен на включение в химическое образование в НИУ-НГУ новейших информационных технологий. Он связан с разработкой концепции систематического обучения студентов адресному поиску химической информации, адаптированного к их профилям и позволяющего вводить блоки информационных поисковых технологий в учебный процесс на протяжении всего периода обучения. В состав УМК входят структура и программа курса лекций «Поиск химической информации в научно-технических базах данных», рекомендации по организации самостоятельной работы студентов и банк обучающих материалов.

УМК относится к базовой части профессионального учебного цикла Б.3. основной образовательной программы подготовки по направлению 020100 «Химия» (квалификация «бакалавр»). УМК реализуется на Факультете естественных наук НИУ-НГУ кафедрой Органической химии.

Рабочая программа курса «Поиск химической информации в научно-технических базах данных» включает в себя обзор основных для профессионального химика современных источников информации – баз данных (БД) и информационно-поисковых систем (ИПС), изучение их особенностей и областей применения, методов поиска различной специализированной информации – библиографической, структурно-химической, фактографической и иной.

Курс «Поиск химической информации в научно-технических базах данных» способствует формированию у студентов общекультурных (ОК-5, ОК-7, ОК-8, ОК-9, ОК-10) и профессиональных (ПК-4) компетенций.

Курс предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия в учебных и реальных БД и ИПС, контрольные работы, самостоятельная работа студента, консультации, сдача зачета.

Результатом обучения в рамках курса является итоговая оценка (не дифференцированный зачет).

Рабочей программой курса предусмотрены следующие виды контроля: текущий и итоговый. **Текущий контроль** включает контроль посещаемости занятий, сдачу заданий для самостоятельной работы и написание контрольных работ. Для допуска к зачету, студент ходе обучения должен: посетить не менее 50% занятий; выполнить 6 контрольных работ. **Итоговый контроль** включает выполнение зачетного задания, состоящего в составлении поискового запроса и проведении поиска информации в релевантной БД или ИПС по тематике собственной курсовой (дипломной) работы.

Рабочая программа курса рассчитана на 72 академических часа. Общая трудоемкость дисциплины 2 зачетные единицы.

Программой предусмотрены 14 лекционных часов, 3 часа практических занятий, 29 часов прохождения контрольных точек в течение семестра (включая домашние задания), 2 часа зачета, а также 24 часа самостоятельной работы студентов.

Полученные в рамках курса знания позволят студентам выработать навыки самостоятельного поиска и обработки специализированной химической информации с использованием поисково-аналитических возможностей современных БД и ИПС, необходимые для последующей профессиональной деятельности.

Курс «Поиск химической информации в научно-технических базах данных» является обновлением существующего курса «Поиск химической информации в базах данных сети STN International», преподаваемого студентам 4-го курса ФЕН отделения «Химия» на кафедрах органической и аналитической химии. Необходимость обновления обусловлена

быстрым прогрессом в области электронных информационных ресурсов для науки и образования; увеличением количества БД и ИПС, доступных в НИУ-НГУ; целесообразностью распространения курса на студентов ФЕН других специальностей (например, кафедры катализа и адсорбции); переходом на новые принципы обучения в рамках ФГОС ВПО 3-го поколения.

Курс имеет непосредственное отношение к ПНР-4 «Новые материалы» и способствует развитию у студентов ключевых компетенций в таких направлениях, как поиск специализированной информации по химическому материаловедению с целью разработки технологий направленного синтеза функциональных материалов.

УМК «Поиск химической информации в научно-технических базах данных» и соответствующий курс разработаны в рамках мероприятия 1.1. Блока 1 Заявки НГУ по проекту «Национальный исследовательский университет» и задачи 1 Программы развития НГУ, в части, касающейся следующих пунктов: совершенствование образовательных методик и технологий, в том числе на основе блочного принципа организации учебных курсов, использования ресурсов информационной среды; продолжение процесса интеграции НИУ-НГУ в мировое научно-образовательное пространство с целью укрепления его репутации, повышения места в международных рейтингах, доступа к мировым рынкам информации и знаний.

1. Цели курса

Цель курса «Поиск химической информации в научно-технических базах данных» – формирование у студентов профессиональных навыков работы с отечественными и зарубежными компьютерными информационными ресурсами (БД и ИПС) по химии, в том числе патентными. На лекциях студенты получают основные знания о современных компьютерных информационных ресурсах в области химии, методах поиска специализированной информации в наиболее авторитетных мировых БД и ИПС, подходах к разработке стратегий поиска релевантной информации. На семинарских занятиях – разбирают типовые задачи различной сложности, учатся проводить поиск информации по тематике и веществу в библиографических, структурно-химических, фактографических и иных БД и ИПС. В ходе обучения студенты интенсивно работают со вспомогательной литературой и релевантными информационными ресурсами, доступными по подписке в НИУ-НГУ или институтах СО РАН, а также бесплатно в сети Интернет.

Результаты освоения курса студентами – обладание систематизированными знаниями о современных источниках химической информации, владение современными приемами и методами получения релевантной информации, приобретение практических навыков проведения разнообразных поисков в БД и ИПС.

2. Место курса в структуре образовательной программы

Курс «Поиск химической информации в научно-технических базах данных» относится к базовой части профессионального учебного цикла Б.3. основной образовательной программы (ООП) подготовки по направлению 020100 «Химия» (квалификация «бакалавр») и опирается на следующие дисциплины ООП:

- Органическая химия
- Аналитическая химия
- Основы компьютерной грамотности

Результаты освоения курса используются в следующих дисциплинах ООП:

- Научно-исследовательская практика
- Методология органического синтеза
- Специальные методы синтеза органических соединений
- Аналитическая химия объектов окружающей среды

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения курса

Общекультурные компетенции:

- умение логически верно строить устную и письменную речь (**ОК-5**);
- умение работать с компьютером на уровне пользователя и способность применять полученные навыки как в социальной сфере, так и в области познавательной и профессиональной деятельности (**ОК-7**);
- способность понимать сущность и значение информации в развитии современного общества, сознавать опасности и угрозы, возникающие в этом процессе, соблюдать

основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны **(ОК-8)**;

- владение основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, навыки работы с компьютером как средством управления информацией **(ОК-9)**;
- способность работать с информацией в глобальных компьютерных сетях **(ОК-10)**.

Профессиональные компетенции:

- способность применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных **(ПК-3)**.

В результате освоения курса обучающийся будет:

- иметь представление об основных мировых информационных ресурсах (БД и ИПС) в области химии, включая их специфику;
- знать методы и приемы онлайн-поиска специализированной научно-технической информации;
- уметь находить релевантную научно-техническую информацию по тематике научной работы, включая курсовые и дипломные работы;
- уметь пользоваться справочной литературой, БД и ИПС, включая ресурсы, свободно доступные в сети Интернет.

4. Структура и содержание курса

Общая трудоемкость курса составляет 2 зачетные единицы, всего 72 академических часа.

№ п/п	Раздел курса	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов, и трудоемкость (в часах)									Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекция	Семинарские занятия	Практические занятия	Контр. работа	Коллоквиумы	Домашние задания	Самост. работа	Зачет	Экзамен	
1.1	Поиск информации в библиографических БД и ИПС	7	1-6	6		1	4		6	8			Домашнее задание Контрольные работы
1.2	Поиск информации в БД веществ	7	7-11	6		1	4		6	8			Домашнее задание Контрольные работы
1.3	Поиск специализированной информации (по органическим реакциям, аналитической химии, катализу, др.)	7	12-15	2		1	3		6	8	2		Домашнее задание Контрольные работы Зачет
	Итого	7	15	14		3	11		18	24	2		

Рабочий план курса

	Неделя	Темы занятий
Поиск информации в библиографических БД и ИПС	СЕНТЯБРЬ 1-я неделя	Лекция 1. Характеристика основных источников информации по химии.
	2-я неделя	Лекция 2. Тематический поиск в библиографических БД и ИПС.
	3-я неделя	Лекция 3. Поиск по специализированным индексам библиографических БД и ИПС.
	4-я неделя	Контрольная работа № 1: Поиск информации по автору в учебных БД.
Поиск информации в БД веществ	ОКТАБРЬ 1-я неделя	Контрольная работа № 2: Поиск информации по названию организации в учебных БД.
	2-я неделя	Контрольная работа № 3: Поиск информации по ключевым словам в учебных БД.
	3-я неделя	Лекция 4. Поиск веществ по названиям и молекулярным (брутто) формулам.
	4-я неделя	Контрольная работа № 4: Поиск веществ по их молекулярным формулам в учебных БД.
	5-неделя	Контрольная работа № 5: Поиск веществ по их названиям в учебных БД.
	НОЯБРЬ 1-я неделя	Лекция 5. Поиск веществ по их структурам.
	2-я неделя	Контрольная работа № 6: Поиск веществ по их структурам в учебных БД.
Поиск специализированной информации	3-я неделя	Лекция 6. Особенности поиска специализированной информации.
	4-я неделя	Лекция 7. Доступные ресурсы Интернет.
	ДЕКАБРЬ 1-я неделя	Контрольная работа № 7: Поиск специализированной информации в релевантных БД.
	2-я неделя	Зачет – Контрольная работа № 8 (зачетное задание): Поиск по теме научной (курсовой, дипломной) работы в релевантной БД.

Программа курса

I. Поиск информации в библиографических БД и ИПС

Лекция 1. Введение. Характеристика основных источников информации по химии

Основные причины обучения поиску информации – мировоззренческие, профессиональные, учебные. Цели, задачи, программа курса. Необходимость обучения поиску специализированной информации. Быстрое возрастание объема и диверсификация источников химической информации. Информационное значение патентов. Специфика работы с химической информацией. ИПС, платформы, БД, сети БД. Основные типы компьютерных БД – библиографические, фактографические, полнотекстовые, справочники, БД веществ, БД реакций. БД для профессионалов и «обычных» пользователей. Характеристика основных профессиональных БД и ИПС по химии, доступных в НИУ-НГУ и СО РАН. Сеть STN International как пример глобальной сети профессиональных БД.

Лекция 2. Тематический поиск в библиографических БД и ИПС

Характеристика библиографических БД и ИПС. Политематические и специализированные ресурсы. Различные версии одной БД в зависимости от платформы / сети. БД и ИПС по цитированию. Патентные библиографические БД. Основные понятия и терминология: запись БД, поля (индексы), основной (Basic) и специализированные индексы. Составление поискового запроса. Операторы булевой логики и операторы близости. Символы усечения и маскирования. Командный язык (на примере сети STN International). Проведение тематического поиска. Поиск по «свободному» тексту в основном индексе. Индексирование и контролируемая терминология БД Chemical Abstracts (CA). Индексирование концептов и веществ. Работа с набором ответов: просмотр, печать, сохранение для последующего использования. Активация сохраненного набора ответов. Текущее информирование. Инструменты анализа информации, в том числе по цитированию.

Лекция 3. Поиск по специализированным индексам библиографических БД и ИПС

Поиск публикаций по автору (патентов – по изобретателю). Поиск публикаций по месту работы автора (организации; патентов – по владельцу). Использование специализированных индексов для уточнения найденного набора ответов: год, тип (вид), язык публикации, номер патента, и др.

Контрольная работа № 1: Поиск информации по автору в учебной БД.

Контрольная работа № 2: Поиск информации по названию организации в учебной БД.

Контрольная работа № 3: Поиск информации по ключевым словам в учебной БД.

II. Поиск информации в БД веществ

Лекция 4. Поиск веществ по названиям и молекулярным (брутто) формулам

Введение. БД веществ Registry (сеть STN International, платформа SciFinder) и ИПС Reaxys (БД Beilstein и БД Gmelin; сеть STN International), БД химических каталогов (ChemCats) и нормативных перечней (ChemList). Химическая информация из Chemical Abstracts Service (CAS). Поиск информации о соединении по названию в БД Registry. Регистрационные номера веществ CAS. Выбор публикаций по соединению. Роли веществ

CAS. Рекомендации по поиску названий веществ. Специальные символы в названиях, вариации в написании. Поиск информации о соединении по его молекулярной формуле в БД Registry. Представление молекулярных формул (система Хилла), индекс MF. Особые случаи: поиск солей (по кислоте или основанию), полимеров, многокомпонентных соединений. Основной индекс БД Registry.

Контрольная работа № 4: Поиск веществ по их молекулярным формулам в учебных БД.

Контрольная работа № 5: Поиск веществ по их названиям в учебных БД.

Лекция 5. Поиск веществ по структурам.

Введение. БД сети STN International с возможностью структурного поиска. Этапы проведения структурного поиска. Нахождение экспериментальных и расчетных свойств веществ, включая спектральную информацию. Построение структурного запроса. Программное обеспечение STN Express. Основные графические средства. Рисование структур (цепей, циклов), спецификация атомов и связей, стирание, удаление, перемещение структур. Стратегия структурного поиска. Типы структурного поиска. Задание интервала поиска. Пробный поиск. Прогноз результатов поиска по полному информационному массиву БД. Контроль результатов пробного поиска. Поиск по всей БД. Поиск ссылок на соединение в БД CA, роли CAS. Сохранение и повторное использование результатов структурного поиска. Модификация структурного запроса. Допущения, используемые в STN Express. Задание поисковых требований для атомов циклов и цепей, и для связей в цепях. Расширение структурного запроса – варибельность атомов и связей. Типы и значения связей, нормализованные связи. Варибельность узлов. Использование G-групп. Спецификация переменного положения заместителя в цикле.

Контрольная работа № 6: Поиск веществ по их структурам в учебных БД.

III. Особенности поиска специализированной информации

Лекция 6. Особенности поиска специализированной информации

Для студентов, специализирующихся по органической химии: Поиск по реакциям в БД CASReact. Характер информации – препаративные органические реакции из журналов и патентов; новые, более удобные, улучшенные методики; процедуры, повышающие выходы целевых продуктов; применение новых реагентов. Охват типов реакций: одно- и многостадийные; стереоспецифические; энзиматические; однореакторные; неудавшиеся. Поисковые термины: структурные диаграммы; функциональные группы. Построение структурного запроса для поиска по реакциям. Загрузка запроса, проведение пробного поиска, оценка результатов. Проведение полного поиска, вывод найденных ответов. Повышение точности поиска с помощью задания реакционных участков и (или) мэпирования атомов реагентов и продуктов. Поиск по широко определенным превращениям с использованием функциональных групп. Уточняющие поисковые термины: выходы продуктов; число стадий; регистрационные номера веществ CAS, в том числе для катализаторов и (или) растворителей; тип документа; год публикации; автор; название организации.

Для студентов, специализирующихся по аналитической химии: Информация по аналитической химии в CAS. Определения. Области, относимые к аналитическим исследованиям: аналитические методы; синтетические подходы; типы реагентов; испытания на биологическую активность; компьютерное моделирование и методы управления БД; автоматизированные методы подготовки и тестирования образцов. Охват

источников в БД Chemical Abstracts (CA): периодические издания (ведущие журналы); неперіодические издания (книги, труды конференций, технические отчеты, диссертации, патенты, электронные документы). Сравнение с БД Analytical Abstracts. Отбор документов по аналитической химии, их индексирование и размещение по разделам и рубрикам БД CA. Способы поиска в БД CA по веществу и тематике. Использование ролей CAS при поиске информации по аналитической химии. Индексируемая терминология, содержание основного индекса БД CA. Регистрационные номера веществ CAS. Контролируемые термины для классов соединений, предметные контролируемые термины, заглавия и ключевые слова. Текст реферата. Индексирование аналитической информации: аналит; образец; аналитический метод; аппарат и реагент. Специфичность индексирования, основные (ANT – analyte; AMX – analytical matrix; ARG – analytical reagent use; ARU – analytical role, unclassified) и дополнительные (PEP – physical, engineering or chemical process; SPN – synthetic preparation; IMF – industrial manufacture; PUR – purification) тематические роли, и рекомендации по их выбору. Поиск аналита и образца по регистрационным номерам веществ CAS. Достижение максимальной специфичности. Термины контролируемого словаря. Возможности уточнения найденных ответов. Поиск в специализированных индексах. Ранжирование ответов по релевантности. Использование команд для реорганизации набора ответов. Анализ цитирования. Специализированные индексы. Разделы CA для нахождения аналитических исследований. Поиск по ссылкам в ИПС Science Citation Index (SCI). Идентификация часто цитируемых публикаций. Поиск в БД CA часто цитируемых ссылок. Примеры поисковых запросов.

Для студентов специализирующихся по науке о катализе: Охват в CAS катализа и катализаторов, отнесение публикаций к тематическим рубрикам. Тематическое индексирование катализаторов: индексирование веществ и предметных концептов. Тезаурусы. Роли веществ: катализатор, реагент, продукт и др. Различия в индексировании катализаторов между БД CAPlus и БД CASReact. Роли веществ в реакции по БД CASReact: реагент, реагент, растворитель, катализатор. Особенности индексирования веществ, используемых в качестве промышленных катализаторов (металлы, соли и оксиды металлов, смешанные оксиды, гетерополикислоты, алюмоксаны, цеолиты, ферменты). Каталитическая информация в патентах.

Лекция 7. Доступные ресурсы Интернет

ИПС SciFinder (БД CAPlus, Medline, Registry, CASReact, ChemCats, ChemList, Marpat) и Reaxys (БД Beilstein, Gmelin, патентные БД). Полнотекстовые источники журнальной и книжной литературы: издательства Elsevier (платформа ScienceDirect), American Chemical Society, Royal Society of Chemistry, Wiley, Springer, др. Полнотекстовые патентные БД: Espacenet, USPTO, Роспатент / ФИПС и др. Бесплатные источники химической информации для поиска по регистрационным номерам CAS и структурам веществ, спектральным и другим данным в Интернет.

Контрольная работа № 7: Поиск специализированной информации в релевантных БД.

Контрольная работа № 8 (Зачетное задание): Поиск по теме научной (курсовой, дипломной) работы в релевантных БД. Обсуждение стратегии и рамок поиска, основных концептов запроса, создание поискового предписания, выбор БД, анализ полученных результатов.

Зачет

5. Виды учебной работы и образовательные технологии, используемые при их реализации

Виды / формы образовательных технологий

Преподавание курса ведется в виде чередования лекций и практических занятий. В начале курса осуществляется введение в предмет – в первые две недели читаются лекции, затем по мере овладения лекционным материалом студентам предлагаются контрольные работы по различным аспектам поиска химической информации. Особенностью курса является то, что решаемые студентами задачи охватывают не только текущую тему, но и предыдущие. Так, при прохождении темы по поиску информации в специализированных индексах БД и ИПС задачи могут содержать элементы тематического поиска; при поиске информации по веществам с использованием их названий, молекулярных формул и (или) структур студенты применяют навыки, полученные при работе с библиографическими БД.

Наряду с лекциями в ходе курса студенты посещают практические занятия, на которых знакомятся с БД и ИПС, доступными НИУ-НГУ и СО РАН; учатся создавать поисковые стратегии и реализовывать их в учебных БД; анализировать полученные при поиске результаты. Занятия проводятся лектором в терминальных классах НИОХ, ИК и (или) НИУ-НГУ.

Обратная связь обеспечивается тем, что лектор при проведении практических занятий может оперативно корректировать лекционный материал в зависимости от результатов его усвоения студентами, выявленных при выполнении ими контрольных работ. Такая форма преподавания обеспечивает адекватное конечным целям курса разделение занятий на лекционные и практические: после прохождения части лекционного материала его можно сразу же закрепить решением релевантных задач. В случае недостаточного понимания материала студентами часть практического занятия можно превратить в лекцию, направленную на устранение проблемы. Практические занятия проходят в форме дискуссии преподавателя со студентами, в ходе которой каждый из участников может задавать вопросы и участвовать в анализе разбираемой задачи. Таким образом, на практических занятиях реализуется интерактивная форма обучения.

В течение семестра студентам выдаются задания для самостоятельной работы с использованием доступных им БД и ИПС, в том числе размещенных в сети Интернет (например, Google Scholar).

Стоит отметить, что преподаватель курса является специалистом в области химической информатики. В связи с этим в рамках курса студентам предлагается решать реальные задачи информационного обеспечения научной деятельности. Необходимым требованием получения студентами зачета по курсу является проведение поиска релевантной информации при решении собственных научных задач, возникающих в ходе прохождения ими научно-исследовательской практики – выполнении курсовых и (или) дипломных работ.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Формой текущего контроля при прохождении курса «Поиск химической информации в научно-технических базах данных» является контроль посещаемости занятий, сдача заданий для самостоятельной работы и написание контрольных работ.

Для допуска к зачету, студент должен: посетить не менее 50% занятий; выполнить не менее 60% заданий для самостоятельной работы и все контрольные работы. При наличии

уважительных причин выполнение заданий и (или) контрольных работ может быть перенесено на другой срок в пределах семестра.

Задание	Тема
Контрольная работа № 1	<i>Поиск информации по автору в учебных БД</i>
Контрольная работа № 2	<i>Поиск информации по названию организации в учебных БД</i>
Контрольная работа № 3	<i>Поиск информации по ключевым словам в учебных БД</i>
Контрольная работа № 4	<i>Поиск веществ по их молекулярным формулам в учебных БД</i>
Контрольная работа № 5	<i>Поиск веществ по их названиям в учебных БД</i>
Контрольная работа № 6	<i>Поиск веществ по их структурам в учебных БД</i>
Контрольная работа № 7	<i>Поиск специализированной информации в релевантных БД</i>
Контрольная работа № 8 (зачетное задание)	<i>Поиск информации по теме научной (курсовой, дипломной) работы в релевантных БД</i>

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы состоит в том, что задания выдаются студентам в виде печатных материалов и (или) компьютерных файлов. Для выполнения полученных заданий студенты могут использовать релевантные БД и ИПС, доступные в НИУ-НГУ и институтах СО РАН, а также в сети Интернет. Указанная ниже рекомендованная литература и другие материалы доступны в НИУ-НГУ, химических институтах СО РАН и сети Интернет.

Литература

1. Зибарева И.В. Химические базы данных сети STN International // Известия АН. Сер. хим. 2012. № 3. С. 679-716.
2. Ridley D.D. Information Retrieval: SciFinder. Wiley, 2009. 214 pp.
3. Хуторецкий В.М. Общие представления о поиске научно-технической информации в режиме онлайн. Базы данных STN International в теледоступе. М: РХТУ, 2000. 42 с.
4. Потапов В.М., Розенман М.И., Кочетова Э.К., Покровский Б.И. Поиск химической информации. Справочное руководство по использованию традиционных и компьютерных средств. М: Изд-во МГУ, 1990. 174 с.

Ресурсы сети Интернет

1. Международная сеть научно-технической информации STN International: <http://www.stn-international.de> и <http://cas.org/products/stnfamily/index.html>
2. ИПС SciFinder: <http://www.cas.org/products/scifinder>
3. CAS Learning Solutions: <http://www.cas.org/training/scifinder/>
4. ИПС Reaxys: <http://www.reaxys.com>
5. БД CA on CD: <http://www.cas.org/products/cd/cacd/quickstart/>
6. Платформа Web of Knowledge: <http://wokinfo.com/russian/>

Примеры заданий на контрольных работах и зачете

Контрольная работа № 1: Поиск информации по автору

Задание: провести поиск по автору в учебной БД LCA. Вывести один из ответов в указанных преподавателем форматах.

№	Поиск публикаций автора
1	Ohara Hiroyuki
2	O'Hara E.
3	Volker Münch
4	McCarthy J. по flotation process
5	Катрицкого А. по илидам
6	Brown H., патенты по боранам
7	Роальда Хофмана по комплексам
8	Н.К. Кочеткова на английском языке

Контрольная работа № 2: Поиск информации по организации

Задание: провести поиск по названию организации в учебной БД LCA. Вывести один из ответов в любом формате.

№	Поиск по организации
1	Лекарства фирмы Upjohn от заболевания herpes
2	Работы фирмы General Electric по поликарбонатам
3	Патенты фирмы IBM по химии
4	Работы сотрудника Бирмингемского университета J. Kennedy
5	Все работы ИОХ РАН им. Н.Д. Зелинского
6	Все работы НИОХ СО РАН им. Н.Н. Ворожцова

Контрольная работа № 3: Поиск информации по ключевым словам

Задание: провести тематический поиск информации в учебной БД LCA. Вывести один из ответов в любом формате.

№	Поиск по ключевым словам
1	Перфторированные соединения, производимые компанией «Дюпон»
2	Набивка газо-хроматографических колонок
3	Работы по триенам автора K. Bättig
4	Теплоты образования ионов
5	Патенты по уничтожению радиоактивных отходов
6	Статьи ИОНХ им. Курнакова по изучению структуры координационных соединений с органическими лигандами

Контрольная работа № 4: Поиск веществ по их молекулярным формулам

Задание: провести поиск веществ по молекулярным формулам и найти их регистрационные номера CAS в учебной БД LRegistry, затем вывести соответствующую библиографическую информацию из учебной БД LCA.

№	Поиск по молекулярной формуле вещества
1	Гидроксиды натрия, рубидия, калия

2	Цианид серебра
3	Бензоат меди (II)
4	Хлоргидрид пропиламина
5	Пикраты щелочных металлов
6	Хлорид кобальта (II) – каталитическое использование
7	Сополимеры стирола и метилметакрилата

Контрольная работа № 5: Поиск веществ по их названиям

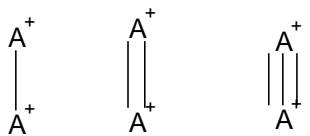
Задание: провести поиск веществ по химическому названию (фрагменту названия) в учебной БД LRegistry и вывести соответствующую библиографическую информацию из учебной БД LCA.

№	Поиск по названию (фрагменту названия) вещества
1	γ -chloroallyl chloride
2	<i>Пара</i> -амино- <i>мета</i> -метилстирол
3	1-(2-Бромэтил)-2-метил-5-нитроимидазол
4	Панадол и тайленол (два разных вещества или одно)?
5	Бис(2-хлорэтил)анилин
6	Четырехкомпонентные сополимеры бутадиена
7	Производные индола, содержащие группу CH_2F
8	Трицикло(6.2.0.0 ^{2,10})декан

Контрольная работа № 6: Поиск веществ по их структурам

Задание: провести в учебной БД LRegistry поиск веществ по структуре или ее фрагменту и вывести соответствующую библиографическую информацию из учебной БД LCA.

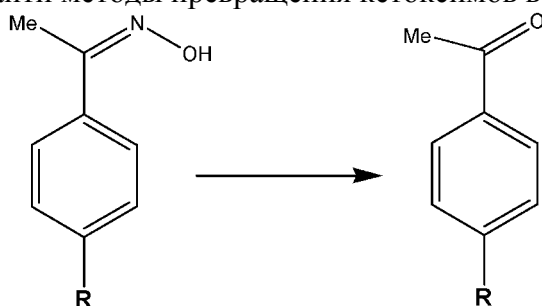
№	Поиск по фрагменту структуры
1	Способы получения веществ с фрагментом  $\text{G}_1 = \text{N}, \text{Si}, \text{X}, \text{C}$, общее число атомов углерода < 20
2	Публикации по производным вещества А, содержащим неконденсированные циклы 
3	Применение в фотолаборатории веществ  $\text{G}_1 = \text{O}, \text{N}, \text{S}, \text{C}$; положение 3 в пиразольном цикле

	может входить в состав как цепи, так кольца
4	Публикации по всем производным индола, содержащим группу CH_2F
5	Публикации по дикатионам  $A = \text{S, Si, As, N}$; катионы могут быть и ациклическими, и циклическими

Контрольная работа № 7: Поиск специализированной информации в релевантных БД

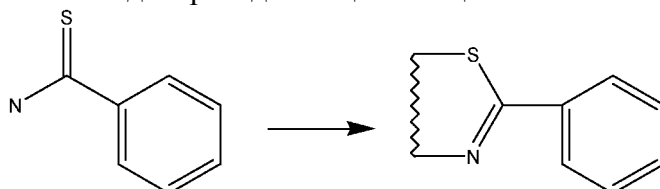
Органическая химия (БД CA / CAPlus, CA on CD, Registry, CASReact, ИПС Reaxys)

1. Найти методы превращения кетоксимов в кетоны:



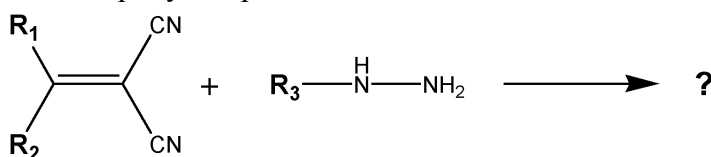
R – любой отличный от водорода циклический или ациклический заместитель; циклы могут входить в состав конденсированных систем; возможно любое замещение во все свободные положения.

2. Найти методы проведения циклизации:



Формирующая цикл связь CS может быть одинарной или двойной. Разрешено дополнительное замещение во все свободные положения и участие цикла в конденсированной системе.

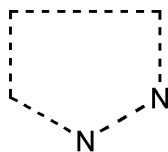
3. Найти продукты реакции:



R_1 и R_2 – любые заместители, включая H; R_3 – любой заместитель, за исключением H.

4. Найти реакции сульфидов, приводящие к сульфонам.
 5. Найти реакции галогенпроизводных, приводящие к спиртам в присутствии инертных первичных аминов.

6. Найти реакции гидразинов, приводящие к диазолам:



Аналитическая химия (БД CA / CAPlus, CA on CD, Registry)

1. Найти методы определения уровня глюкозы в молочных продуктах.
2. Найти публикации по устройству спектрометров, используемых для определения цинка в угле и других ископаемых формах углерода.
3. Найти патенты по кислородным сенсорам для выхлопных газов.

Наука о катализе (БД CA / CAPlus, CA on CD, Registry, CASReact, ИПС Reaxys)

1. Выявить в патентах фирмы Еххон катализаторы, наиболее часто используемые в производстве изотактического полипропилена.
2. Найти европейские патенты по использованию церий-обменных цеолитов в качестве катализаторов.
3. Найти основные компании, патентующие гетерополикислотные катализаторы, содержащие молибден и кремний.
4. Найти патенты последних лет компании Dow по катализаторам полимеризации.
5. Найти патенты на катализаторы, содержащие оксиды Fe-Cr-V.
6. Идентифицировать потенциальные новые мировые рынки Sm-содержащих катализаторов.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение курса

Основная литература

1. Зибарева И.В. Химические базы данных сети STN International // Известия АН. Сер. хим. 2012. № 3. С. 679-716.
2. Ridley D.D. Information Retrieval: SciFinder. Wiley, 2009. 214 pp.
3. Хуторецкий В.М. Общие представления о поиске научно-технической информации в режиме онлайн. Базы данных STN International в теледоступе. М: РХТУ, 2000. 42 с.
4. Ridley D.D. Online Searching: A Scientist's Perspective. A Guide for the Chemical and Life Sciences. Wiley, 1996. 344 pp.
5. Потапов В.М., Розенман М.И., Кочетова Э.К., Покровский Б.И. Поиск химической информации. Справочное руководство по использованию традиционных и компьютерных средств. М: Изд-во МГУ, 1990. 174 с.

Дополнительная литература

1. Ефременкова В.М., Круковская Н.В. 100-летний юбилей Chemical Abstracts Service: факты и цифры // Научно-техническая информация. Сер. 1. 2007. № 12. С. 24-29.
2. Powell E.C. A history of Chemical Abstracts Service, 1907-1998 // Science and Technology Libraries. 2000. V. 18. N 4. P. 93-110.
3. Buntrock R.E. Chemical Registries – in the forth decade of service // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. 2001. V. 41. N 2. P. 259-263.

- Ridley D.D. Strategies for chemical reaction searching in SciFinder // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. 2000. V. 40. N 5. P. 1077-1084.
- Кузьмичев А.Е. Современные источники патентной информации // Российский химический журнал. 2000. Т. XLIV. № 5. С. 94-97.
- Shively E. CAS patent information: then and now // World Patent Information. 2004. V. 26. P. 57-59.
- Simmons E.S. The grammar of Markush structure searching: vocabulary vs. syntax // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. 1991. V. 31. 1. P. 45-53.
- Adams S. The Beilstein Handbook as a source of pre-1960 chemical patent literature // World Patent Information. 1999. V. 21. N 2. P. 75-81.
- Wagner A.B. Finding physical properties of chemicals: a practical guide for scientists, engineers, and librarians // Science and Technology Libraries. 2001. V. 21. N. 3. P. 27-45.
- Smith A.L. Finding chemical information through Citation Index searching // Journal of Chemical Education. 1999. V. 76. N 8. P. 1153-1157.

Ресурсы сети Интернет

- SciFinder (учебные материалы): <http://cas.org/support/scifi/tutorials.html>
- CA on CD (руководство пользователя):
<http://www.cas.org/ASSETS/A25CA002AB0244B6BDAE0BAD150F71DA/cacdug.pdf>
- Reaxys (руководство пользователя на русском языке):
http://elsevierscience.ru/files/pdf/Reaxys_Guide_Russ.pdf
- SciVerse Scopus (руководство пользователя):
http://elsevierscience.ru/files/pdf/SciVerse_Scopus_User_Guide_RUS.pdf
- Информационные ресурсы издательства Thomson Reuters для научных исследований:
<http://wokinfo.com/media/pdf/science-resources-Paramonov.pdf>

8. Материально-техническое обеспечение курса

В качестве технического обеспечения лекционного процесса используются персональный компьютер, мультимедийный проектор, доска.

Для демонстрации иллюстрационного материала используется программа Microsoft Power Point 2007.

Для проведения практических занятий по работе с БД и ИПС используются персональные компьютеры в количестве не менее одного компьютера на двух студентов.

Для проведения практических занятий используется доступ к БД сети STN International по специальным учебным паролям; к ИПС SciFinder доступ осуществляется по IP-адресам и временным паролям.

Проведение самостоятельных и контрольных работ обеспечивается печатными материалами, раздаваемыми студентам.

9. Банк обучающих материалов

Сеть STN International

Операторы связи поисковых терминов

<i>Логические операторы</i>	
OR	Объединяет синонимы. Ответы содержат все (любой из) синонимов
AND	Объединяет разные концепты. Ответы содержат все концепты
NOT	Исключение концепта из набора ответов
<i>Операторы близости</i>	
(L)	Связывает термины в одном индексе – одно заглавие, один реферат, один термин индексирования
(S)	Связывает термины в одном предложении – в заглавии, в реферате или в терминах индексирования
(A)	Выстраивает термины рядом в произвольном порядке
(W)	Выстраивает термины рядом в заданном порядке

Символы усечения (маскирования)

<i>Символ</i>	<i>Определение</i>	<i>Пример</i>	<i>Будут найдены</i>
?	От 0 до любого числа символов в конце термина	?gene?	abiogenesis partenogenesis osteogenesis generates
#	0 или 1 символ в конце термина	grow##	grow grows growth
!	1 символ внутри или в конце термина	t!!th amin!	teeth tooth truth amine amino

Символы усечения можно объединять внутри одного термина, разрешено многократное использование символов # и !

Основные команды

<i>Команда</i>	<i>Действие</i>	<i>Результат</i>	<i>Пример</i>
FILE (FIL)	Ввод одной или нескольких БД (их кластера) для проведения поиска	Выбор БД для поиска. Получение сведений об информационном охвате и обновлениях БД	=> FILE CAPLUS => FIL PATENTS
EXPAND (E)	Просмотр поисковых терминов в индексе для подтверждения наличия нужного термина в БД; проверки написания термина в БД; идентификации альтернативных форм термина	Алфавитно-цифровой список терминов, соседних заданному термину	=> E STREPTOMYCES
SEARCH (S)	Поиск записей, содержащих термин(ы), и создание набора ответов из этих записей	Создание набора ответов (L#) записей по интересующей теме	=> S CYCLOADDITION
DISPLAY (D)	Вывод на экран результатов поиска	Просмотр результатов из набора ответов в заданном формате	=> D L1 1-2 BIB
LOGOFF (LOG)	Завершение поиска	Окончание работы с сетью STN	=> LOG Y

Команда DISPLAY (D)

<i>Задание</i>	<i>Вывод по умолчанию</i>	<i>Примечание</i>
L-номер набора ответов	Последний созданный L-номер	Команда D HIS – если нужно уточнить номер набора ответов, созданного ранее
Номер(а) ответа(ов)	Первый ответ	Опции: 1-5 – вывод первых пяти ответов; 1, 5 – просмотр 1-ого и 5-ого ответов
Формат вывода	Библиографическая информация (BIB)	Формат IBIB – библиографическая информация с названиями полей: ABS – реферат; ALL – полная запись

Основные поисковые индексы базы данных CAPlus

<i>Код</i>	<i>Название индекса</i>	<i>Примечания</i>
TI	T itle	Заглавие публикации
AU	A uthor	Автор
CS	C orporate S ource	Место работы автора
DT	D ocument T ype	Тип документа
LA	L anguage	Язык оригинальной публикации
AB	A Bstract	Реферат
ST	S upplementary T erms	Ключевые слова
IT	I ndex T erms	Концепты, сообщаемые в документе
RL	CAS R o L e	Роль вещества
RE	R Eferences	Ссылки в оригинальной публикации

Индексы для уточнения набора ответов

<i>Ограничение</i>	<i>Индекс</i>	<i>Пример</i>
Типом документа	/DT	Патенты: => S L7 AND PATENT/DT Статьи из журналов: => S L7 AND JOURNAL/DT
Языком	/LA	Немецкий язык: => S L7 AND GERMAN/LA
Временем	/PY	Год: => S L7 AND 1996/PY или => S L7 AND PY=1996 Период: => S L7 AND 1994-1996/PY или => S L7 AND PY>=2001
Автором	/AU	=> S IVANOV A?/AU
Организацией	/CS	=> S NOVOSIBIRSK UNIVERSITY/CS

Стратегия поиска информации по ключевым словам в библиографических БД и ИПС

1	Формулировка поискового запроса	
2	Составление поискового предписания	
	– выбор основных концептов и синонимов	
	– выбор логических операторов	AND, OR, NOT
3	Проведение предварительного поиска	
	Ввод БД	=> FILE CA
	Проверка поисковых терминов	=> E ANTIBIOTIC
	Создание набора поисковых терминов	Множественные формы, сокращения и усечения для альтернативных терминов
	Проведение поиска	=> S STREPTOMYCES AND ANTIBIOTIC# AND ANTITUMOR?
4	Оценка ответов с помощью бесплатных команд / идентификация дополнительных терминов	=> D SCAN
5	Уточнение стратегии поиска	
	Учет дополнительных терминов	=> S (ANTITUMOR OR ANTI-TUMOR OR ANTITUMOUR OR ANTICANCER OR NEOPLASM INHIBIT?)
	Применение операторов близости	=> S L2 (S) L3 (S) L4
6	Детальный вывод ответа(ов)	=> D L6 2 IBIB ABS

Рекомендации для поиска по имени автора

<i>Имя</i>	<i>Пример</i>	<i>Рекомендация для ввода</i>	<i>Пример</i>
Если неизвестно, в какой форме содержится в БД	Karl Wurst Karl A. Wurst K. A. Wurst	Фамилия и инициал	WURST K/AU
Имеет внутреннюю пунктуацию – апострофы, дефисы	O'Brian	Варианты написания с пунктуацией и без	OBRIAN/AU O BRIAN/AU
Содержит внутренние пробелы	La Bar	Варианты написания с пробелом и без	LA BAR/AU LABAR/AU
Содержит умляут	Müller	Варианты с замещениями: ae → ä; oe → ö; ue → ü	MUELLER/AU MULLER/AU
Неясно, что имя, а что фамилия	Chang Cheng	Используя оба слова как фамилию	CHANG/AU CHENG/AU
Транслитерировано, например, с кириллицы	Bagryanski	Используя альтернативное написание	BAGRYANSKII/AU BAGRYANSKY/AU

Рекомендации для поиска по названию организации

<i>Название</i>	<i>Пример</i>	<i>Рекомендация для ввода</i>	<i>Пример</i>
Изменилось со временем	Corning Glass Works USA → Corning USA	Используя постоянную часть	CORNING/CS
Изменилось после реорганизации (слияния)	Ciba-Geigy + Sandoz → Novartis	Используя новое и старые названия	(CIBA GEIGY OR SANDOZ OR NOVARTIS)/CS
Возможны разные написания	DuPont Du Pont Proctor and Gamble Proctor & Gamble Intel Corp. Intel Corporation	Используя оба варианта Исключение из запроса and или & Исключение Co., Corp., Inc. и др. из запроса	(DUPONT OR DU PONT)/CS PROCTOR GAMBLE/CS INTEL/CS
Различается для подразделений (филиалов)	Rockwell International Science Center и Rockwell International Electron Research Center	Используя общую часть	ROCKWELL/CS

Роли веществ Chemical Abstracts Service^a

ANST Analytical study	PREP Preparation ^c
ANT Analyte	BMF Bioindustrial manufacture
AMX Analytical matrix	BPN Biosynthetic preparation
ARG Analytical reagent use	BYP Byproduct
ARU Analytical role, unclassified	CPN Combinatorial preparation ^c
BIOL Biological study	IMF Industrial manufacture
ADV Adverse effect, including toxicity	PUR Purification or recovery
AGR Agricultural use	PNU Preparation, unclassified ^f
BAC Biological activity or effector, except adverse ^b	SPN Synthetic preparation
BCP Biochemical process ^c	PROC Process
BMF Bioindustrial manufacture	BCP Biochemical process ^c
BOC Biological occurrence ^b	BPR Biological process ^b
BPN Biosynthetic preparation ^c	GPR Geological or astronomical process
BPR Biological process ^b	PEP Physical, engineering, or chemical process
BSU Biological study, unclassified	CPS Chemical process ^g
BUU Biological use, unclassified	EPR Engineering process ^g
COS Cosmetic use ^c	PYP Physical process ^g
DGN Diagnostic use ^c	REM Removal or disposal
DMA Drug mechanism of action ^c	PRPH Prophetic substance ^h
FFD Food or feed use	RACT Reactant or reagent ^{b, g}
MFM Metabolic formation ^b	RCT Reactant ⁱ
NPO Natural product occurrence ^c	CRT Combinatorial reactant ^c
PAC Pharmacological activity ^c	RGT Reagent ^c
PKT Pharmacokinetics ^c	CRG Combinatorial reagent ^c
THU Therapeutic use	USES Uses
CMBI Combinatorial study ^c	AGR Agricultural use
CPN Combinatorial preparation ^c	ARG Analytical reagent use
CRT Combinatorial reactant ^c	BUU Biological use, unclassified
CRG Combinatorial reagent ^c	CAT Catalyst use
CST Combinatorial study ^c	COS Cosmetic Use ^c
CUS Combinatorial use ^c	CUS Combinatorial use ^c
FORM Formation, nonpreparative	DEV Device Component use ^f
FMU Formation, unclassified	DGN Diagnostic use ^c
GFM Geological or astronomical formation	FFD Food or feed use
MFM Metabolic formation ^b	MOA Modifier or additive use
NANO Nanomaterial ^d	NUU Other use, unclassified ^j
OCCU Occurrence	POF Polymer in formulation
BOC Biological occurrence ^b	TEM Technical or engineered material use
GOC Geological or astronomical occurrence	THU Therapeutic use
NPO Natural product Occurrence ^c	Specific roles that are not associated with any super roles:
OCU Occurrence, unclassified	MSC Miscellaneous
POL Pollutant	PRP Properties

^a Супер-роли имеют 4-буквенные коды, конкретные роли – 3-буквенные. Под каждой супер-ролью перечислены конкретные роли, которые будут найдены при поиске по супер-роли.

^b Используется в Chemical Abstracts (CA) с тома № 66 (1967 г.) по том № 135 (2001 г.).

^c Используется в CA, начиная с тома № 136 (2002 г.).

^d Используется в CA, начиная с тома № 116 (1992 г.).

^e Супер-роль PREP добавлена к записям до 1907 г.

^f Используется в CA с тома № 66 (1967 г.) по том № 145 (2006 г.).

^g Используется в CA с тома № 136 (2002 г.) по том № 145 (2006 г.).

^h Используется в CA с 2003 г. по настоящее время.

ⁱ Поиск по роли RCT находит ссылки в CA с тома № 66 (1967 г.) по настоящее время. Поиск по супер-роли RACT находит ссылки RCT, CRT, RGT или CRG, начиная с тома № 136 (2002 г.).

^j Начиная с 2002, поисковый текст для роли NUU изменился из Nonbiological use, unclassified/RL в Other use, unclassified/RL. Поиск по роли NUU/RL используется для поиска записей в CA, начиная с тома № 66 (1967 г.) по настоящее время.

Тезаурус CA Lexicon

Коды тезауруса CA Lexicon

<i>Код</i>	<i>Описание</i>
ALL	Все релевантные термины, за исключением связанных (LT)
MAX	Все релевантные термины, включая связанные (LT)
BT – Broader Terms	Более широкие термины
HIE – Hierarchy Terms	Термины BT и NT, входящие в иерархию данного термина
HNTE – History Note	Примечание – история введения термина
KT – Keyword Term	Термины, содержащие ключевые слова
LT – Linking term	Связанный термин, модифицирующий информацию из индексного заголовка / index heading modifying information
NEW	Новые термины, заменившие старые (OLD)
NOTE – Notes	Примечания
NT – Narrower Term	Более узкий термин
OLD	Старый термин, замененный новым (NEW)
PFT – Preferred Term	Предпочтительный термин (OLD, NEW, USE, UF)
RT – Related Term	Родственный термин
RTCS – Related Chemical Substance Term	Родственный термин для химического соединения
STD – Standard Term	Стандартный термин (BT, HNTE, Note, NT, RT, RTCS)
UF – Used For	Используемый термин (не предпочтительный синоним)
USE	Термин, который следует использовать

Фрагмент тезауруса CA Lexicon для катализаторов

<i>№</i>	<i>Количество записей</i>	<i>Код</i>	<i>Термин</i>
1	110818	=>	Catalysts/CT
		HNTE	Valid heading during volume 21 (1927) to present
2	2	OLD	Activator/CT
3	79931	OLD	Catalysts and catalysis/CT
4	53	OLD	Promoter action/CT
5	1606	OLD	Promoters/CT
6	2	OLD	Strengtheners/CT
7		UF	Activators/CT
8		UF	Catalyst/CT
9		UF	Reaction catalysts/CT
10		UF	Supported catalysts/CT
11	65	NT1	Abstraction reaction catalysts/CT
12	2080	NT1	Acylation catalysts/CT
13	1123	NT2	Acetylation catalysts/CT
14	742	NT2	Alkoxyacylation catalysts/CT

Поиск информации о веществе в структурно-химических БД

Основные поисковые индексы БД Registry

<i>Код</i>	<i>Поисковый индекс</i>	<i>Примечания</i>
RN	CAS Registry number	Регистрационный номер вещества CAS
CN	CA Index name	Название по номенклатуре CAS
	Other names	Другие названия вещества
CNS	Chemical name segment	Фрагмент химического названия
MF	Molecular formula	Молекулярная формула
LC	Locator code	Другие БД сети STN, имеющие ссылки на данный RN
EPROP	Experimental properties	Экспериментальные свойства вещества
CALC	Calculated properties	Рассчитанные свойства вещества

Уточнение набора ответов известными свойствами вещества

<i>Свойство</i>	<i>Поиск в индексе</i>	<i>Пример</i>
Показатель кислотности (pKa)	/PKA	=> S PKA<=-0.62 => S -0.62/PKA
Молекулярный вес (Molecular weight)	/MW	=> S MW<200
Свойства «правила пяти» Липинского ^a	/CALC	=> S LIPINSKI/CALC => S LIP/CALC
Температура кипения (Boiling point)	/BP	=> S 150-155/BP => S BP>=150
Плотность (Density)	/DEN	=> S DEN>=1.002
Оптическое вращение (Optical rotatory power)	/ORP	=> S 70-80/ORP
Показатель преломления (Refractive index)	/RI	=> S 1.427/RI => S RI=1.427

^a Lipinski's Rule-of-Five – эмпирическое правило, по которому лекарственные вещества с хорошей биологической доступностью при пероральном приеме должны обладать следующими характеристиками: число доноров водорода в молекуле (атомов азота или кислорода, связанных с атомами H) не должно превышать 5; число акцепторов водорода (атомов азота или кислорода, не связанных с атомами H) не должно превышать 10; молекулярная масса не должна превышать 500 D; логарифм распределения вещества в системе октанол / вода должен быть не более 5. Название правила связано с тем, что численные границы всех параметров кратны пяти.

Поиск веществ по химическим названиям

1	<i>Поиск регистрационного номера соединения по его названию</i>	
	1. Ввод БД Registry	=> FILE REGISTRY
	2. Проверка химического названия	=> E RESVERATROL/CN
	3. Поиск по названию	=> S E3 L1 1 RESVERATROL/CN
	4. Вывод ответов	=> D L1 1 IDE
2	<i>Поиск ссылок на соединение</i>	
	1. Ввод БД CAPlus	=> FILE CAPLUS => S L1
	2. Поиск по L-номеру из БД Registry	L2 2118 S L1
	3. Оценка найденных ответов	=> D SCAN
3	<i>Использование ролей CAS для выделения конкретных записей</i> (например, по способам синтеза)	=> S L1/PREP
4	<i>Вывод ответов</i>	=> D L2 4 IBIB ABS
5	<i>Извлечение названий и регистрационных номеров CAS</i> из БД Registry для поиска в других БД сети STN International	=> FILE REGISTRY => SEL CHEM L1
6	<i>Включение в поиск дополнительных БД сети STN International</i>	=> FILE USPATALL PCTFULL => S E1-E2 OR E4-E10
7	<i>Удаление дубликатов и вывод ответов на экран компьютера</i>	=> DUP REM L2 L7 => D 1 FROM EACH

Рекомендации по поиску веществ по химическим названиям

<i>Название содержит</i>	<i>Рекомендация</i>	<i>Пример</i>
надстрочные / подстрочные символы, курсив греческие буквы	игнорировать курсив и символы	=> E dichlorometane-d2/CN
апостроф	написать названия букв на латинице, поместив их между точками	=> E .alpha.-acetylnaphthalene/CN
круглые скобки	поместить название в двойные кавычки	=> S "N,N'-dimethyl-1,2-ethanediamine"/CN
квадратные скобки	поместить название в двойные кавычки	=> S "2-(1-acetoxyethyl)furan"/CN
	заменить квадратные скобки круглыми и поместить название в двойные кавычки	=> S "benzo(b)thiophene"/CN

Поиск веществ по молекулярным формулам

1	Поиск веществ	
1. Ввод БД Registry		=> FILE REGISTRY
2. Проверка присутствия формулы в БД: полных формул – в индексе MF; формул компонент – в Basic Index		=> E C5H13BRN/MF => E C5H13BRN
3. Поиск; возможно уточнение набора ответов известными свойствами или номенклатурным названием		=> S E3 L1 1 C5H13BRN/MF
4. Вывод ответов		=> D L1 1 IDE
2	Нахождение литературных ссылок на найденное вещество	
1. Ввод БД CAPlus		=> FILE CAPLUS
2. Перенос L-номера набора ответов из БД Registry		=> S L1 L2 1071 S L1
3. Оценка ответов		=> D SCAN
3	Добавление кода роли CAS для выделения конкретных записей (например, по способам синтеза)	
		=> S L1/PREP
4	Вывод ответов для записи в файл	
		=> D L2 4 IBIB ABS

Представление формул солей

Обычное	В БД Registry	В индексе MF
$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{-C=O} \\ \\ \text{O}^-\text{Na}^+ \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3\text{-C=O} \\ \\ \text{OH} \cdot \text{Na} \end{array}$	C2H4O2.Na
$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3\text{-N}^+\text{-H Cl}^- \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3\text{-N} \cdot \text{HCl} \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	C3H9N.ClH

Представление формул полимеров

Обычное	В БД Registry	В индексе MF
Гомополимер $\begin{array}{c} \text{H}_2\text{C=CH} \\ \\ \text{C}_6\text{H}_5 \end{array}$	$\text{H}_2\text{C=CH-Ph}$	(C8H8)X
Соплимер винилацетата (CH ₃ CO-O-CH=CH ₂), винилхлорида (CH ₂ =CH-Cl) и винилфторида (CH ₂ =CH-F)	$\begin{array}{l} \text{AcO-CH=CH}_2 \\ \text{H}_2\text{C=CH-Cl} \\ \text{H}_2\text{C=CH-F} \end{array}$	(C4H6O2.C2H3Cl.C2H3F)X

Поиск семейств веществ

Термин в индексе /MF	Связанные с ним термины в индексе /BI
C ₁₆ H ₃₂ O ₂	C ₁₆ H ₃₂ O ₂
C ₁₆ H ₃₂ O ₂ .H ₃ N	C ₁₆ H ₃₂ O ₂ и H ₃ N
C ₁₆ H ₃₂ O ₂ .Na	C ₁₆ H ₃₂ O ₂ и Na

Поиск веществ по их структурам

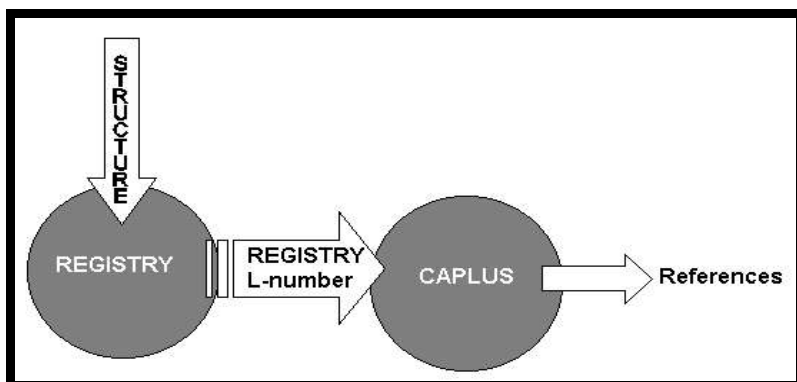
Цели и типы структурного поиска

<i>Цель</i> – найти:	<i>Тип поиска</i>		
	Exact (EXA)	Family (FAM)	Substructure (SSS)
конкретное вещество	✓	✓	✓
стереоизомеры	✓	✓	✓
изотопно-меченное вещество	✓	✓	✓
соль		✓	✓
смесь		✓	✓
замещенное производное			✓





Условия и результаты структурного поиска

<i>Условие</i>	<i>Цель</i>
точное соответствие запросу	нахождение синтеза конкретного соединения; выяснение того, было ли вещество получено ранее
близкое соответствие запросу (поиск родственных структур)	биологически активные соли соединения; полимерные материалы; лекарства, содержащие конкретное вещество
структуры, содержащие интересующий скелет или фрагмент	определение аналогов функциональных групп; соотношения структура / свойства (биологическая активность)

Поиск ссылок на химические структуры



Стратегия структурного поиска в базе данных Registry

1	Рисование структуры: STN Express STN on the Web	
	Сохранение структуры	
2	Вход в сеть STN International	
	Ввод БД Registry	=> FILE REGISTRY
3	Загрузка структуры	
	Проверка загруженной структуры	=> D L1 L1 HAS NO ANSWERS L1 STR
4	Проведение пробного поиска	=> S L1 EXACT SAM
	Оценка результатов: вывод структур для оценки; уточнение структуры (при необходимости)	=> D SCAN
5	Проведение поиска по всей БД	=> S L1 EXACT FULL
6	Ввод БД CAPlus	=> FILE CAPLUS
	Поиск ссылок на вещество	=> S L2/PREP => D BIB ABS HITSTR

Поиск по фрагменту структуры

<i>Запрос содержит</i>	<i>Принятое умолчание</i>	<i>Возможности</i>
Атомы с открытыми положениями замещения	Возможно любое замещение в эти положения	Замещение можно заблокировать, например, атомами водорода
Циклические системы	Атрибут циклической системы <i>Isolated / Embedded</i>	Изолировать циклы, чтобы не были найдены конденсированные системы
Цепочки атомов	Атрибут атома в цепи <i>Chain node</i>	Изменить атрибут на <i>Ring / Chain</i> , что позволит находить вещества, содержащие в этом положении атомы, входящие в цикл
Связи в цепочках	Атрибут связи в цепи <i>Chain bond</i>	Изменить характеристику связи на <i>Ring / Chain</i> , что позволит находить вещества с замкнутыми структурами
Насыщенные 6-членные циклы	Характеристика связи <i>Exact / Normalized</i>	Изменить характеристику связи на <i>Exact</i> , если нужны насыщенные циклы; на <i>Normalized</i> , если нужны ароматические циклы
Положения с определенными заместителями	Системные переменные <i>Variables</i>	Изменить атрибуты системных переменных, используя опции <i>Generic Definitions</i> и <i>Element Counts</i>
	Определяемые пользователем <i>G-группы</i>	Определенные пользователем <i>G-группы</i> могут содержать атомы, системные переменные или другие <i>G-группы</i>
Замещение в цикле по одному или нескольким положениям	Возможность задания переменных положений замещения <i>Variable Points of Attachment (VPA)</i>	Опция VPA может использоваться в циклических системах для атомов, системных переменных или <i>G-групп</i>

Классы соединений в БД данных Registry

<i>Код</i>	<i>Класс веществ</i>
AYS	сплав
CCS	координационные соединения
CTS	зарегистрированные концепты (registered concepts)
GRS	стандартная регистрация
IDS	не полностью определенные соединения
MAN	соединения, зарегистрированные вручную
MNS	минералы
MXS	смеси
PMS	полимеры
RIS	ион-радикалы
RPS	архетипы циклических систем
TIS	табличный состав для неорганических соединений
UVCB	соединения неизвестного или переменного состава или соединения биологического происхождения

Особенности поиска неорганических соединений в БД Registry

Различаются следующие типы неорганических веществ: *координационные соединения, металлсодержащие органические соли, металлоорганические соединения, металлы, сплавы, и минералы.*

Координационные соединения – нейтральные молекулы или ионы, в которых центральный атом (обычно атом металла) связан с другими, причем количество связей не равно валентности центрального атома.

Металлоорганические соединения содержат хотя бы один атом углерода, непосредственно связанный с атомом металла.

Металлы – элементы, отдающие электроны с образованием положительных ионов (катионов) и в конденсированном состоянии имеющие металлические связи между атомами.

Сплавы – смеси металлов с другими металлами, газами или неметаллическими соединениями, образующиеся при расплавлении и не разделяющиеся на компоненты при охлаждении.

Минералы – образовавшиеся в природе химические элементы или их соединения, имеющие определенный химический состав и, обычно, характерную форму кристаллов.

Для поиска ссылок на неорганические соединения используются символы элементов (/ELC), при необходимости – число компонент (/NC); для поиска групп элементов – поле Периодических групп (/PG); для поиска сплавов – поля Состав (/MAC) и Относительный состав (/RC).

Коды периодических групп

Коды периодических групп могут использоваться для поиска семейств элементов в периодах и группах Периодической таблицы.

Они генерируются для всех элементов молекулярной формулы, за исключением углерода и водорода.

Коды семейства элементов хранятся в поле /PG.

A1 A2											A3 A4 A5 A6 A7						A8	
3 Li	4 Be										5 B		7 N	8 O	9 F	10 Ne	2 He	
11 Na	12 Mg										13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar		
19 K	20 Ca	T1 →	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	T2 →	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Rb	T3 →	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra		89 Ac															

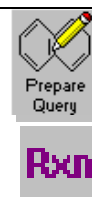
LNTN →	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
ACTN →	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr
SHEL →	104													

Поиск по химическим реакциям в базе данных CASREACT

Стратегия поиска по реакциям

1 Создание структурного запроса по реакции

STN Express
STN on the Web



Задание направления реакции



Задание роли структурного фрагмента



Спецификация связи, изменяющейся (остающейся неизменной) в реакции



Задание соответствия между атомами реактанта и продукта (мэпирование)



Сохранение запроса по реакции



2 Вход (LOGON) в сеть STN

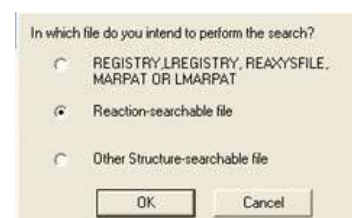


Ввод базы данных CASREACT

=> FILE CASREACT

3 Загрузка запроса в файл реакций сети STN

Проверка загруженной реакции



=> D L1
L1 HAS NO ANSWERS
L1 STR

4 Пробный поиск

Оценка результатов:
вывод реакции для оценки
уточнение реакции (при необходимости)

=> S L1 SAM

=> D SCAN

=> S L3 (L) NS = 1

5 Полный поиск

=> S L1 FULL

Термины функциональных групп

Acetal	Halohydrin	Phosphite
Acetyl	Hemiacetal	Phosphonate
Acid halide	Heterocycles	Phosphonium
Acyclic alkene	Hydrazide	Phosphorus ylide
Acyclic ketone	Hydrazine	Pi-alkene
Acylmetal	Hydrazone	Pi-alkyne
Alcohols	Hydroperoxide	Pi-allyl
Aldehyde	Hydroxylamine	Primary alcohol
Alkenes	Imide	Primary amine
Alkyl halide	Imine	Purine
Alkyne	Imino ether	Quaternary ammonium
Alkynes	Isocyanate	S-O group
Allene	Isonitrile	Se group
Allyl alcohol	Isothiocyanate	Secondary alcohol
Allyl halide	Ketal	Secondary amine
Amide	Ketene	Selenide
Amidine	Ketenimine	Selenol
Amine oxide	Ketones	Silyl
Amines	Lactam	Silyl enol ether
Anhydride	Lactone	Sulfenyl halide
Aryl halide	Mesyl	Sulfide
Arylsulfonyl	Metal arene	Sulfinate
Azide enol	Metal carbene	Sulfinyl halide
Azine	Metal carbonyl	Sulfonamide
Aziridine	Metal cyclopentadienyl	Sulfone
Azo	Metal halide	Sulfonyl halide
Azoxy	Metal hydride	Sulfonyloxy
Carbamate	Metal metal bond	Sulfoxide
Carbonate	Metal nitrogen	Sulfur ylide
Carbonate derivatives	Metal nitrosyl	Te group
Carboxy derivatives	Metal phosphine	Tertiary alcohol
Carboxylate	Metal sulfur	Tertiary amine
Carboxylic	Metallocarbocycle	Thioacetal
Cephem	Mu-carbonyl	Thioamide
Chloramine	Nitrile	Thiocarbonyl
Cyanamide	Nitrile oxide	Thiocarboxy
Cyanate	Nitrite	Thiocyanate
Cyanohydrin	Nitro	Thioketal
Cyclic alcohol	Nitrone	Thiol
Cyclic alkene	Nitrosamine	Thione
Cyclic ketone	Nitroso	Thiophenol
Cyclopropyl	Nitroxide	Thiourea
Diazo	Null	Triazene
Diazonium	O-quinone	Trihalide
Diene	Organometal	Unstd acid
Diimide	Organometallics	Unstd aldehyde
Disulfide	Ortho ester	Unstd amide
Enamine	Oxime	Unstd ester
Enol	Oxonium	Unstd ketone
Enol ether	P-N group	Unstd nitrile
Enyne	P-O group	Unsaturated acid
Episulfide	P-quinone	Unsaturated aldehyde
Epoxide	P-S group	Unsaturated amide
Ether	Penam	Unsaturated ester
Gem-dihalide	Peroxide	Unsaturated ketone
Glycol	Peroxy acid	Unsaturated nitrile
Guanidine	Peroxy	Urea
Halides	Phenol	Vic-dihalide
Haloformate	Phosphate	Vinyl halide

Термины классов и относящиеся к ним термины функциональных групп

Термины классов		Термины функциональных групп
Alcohols	Allyl alcohol	Hemiacetal
	Cyanohydrin	Hydroxylamine
	Cyclic alcohol	Phenol
	Enol	Primary alcohol
	Glycol	Secondary alcohol
Alkenes	Halohydrin	Tertiary alcohol
	Acyclic alkene	Cyclic alkene
	Alkynes	Pi-alkyne
Amines	Alkyne	
	Enyne	
Carbonate derivatives	Amine oxide	Hydroxylamine
	Aziridine	Imine
	Chloramine	Primary amine
	Cyanamide	Secondary amine
	Enamine	Tertiary amine
Carboxy derivatives	Carbamate	Haloformate
	Carbonate	Thiourea
	Guanidine	Urea
	Acid halide	Imide
	Amide	Lactam
	Amidine	Lactone
	Anhydride	Peroxy acid
	Carboxylate	Peroxy ester
	Carboxylic	Thioamide
	Halofomate	Thiocarboxy
Halides	Acid halide	Metal halide
	Alkyl halide	Sulfenyl halide
	Allyl halide	Sulfinyl halide
	Aryl halide	Sulfonyl halide
	Chloramine	Trihalide
	Gem-dihalide	Vic-dihalide
	Halofomate	Vinyl halide
	1,2-C3N2	1,4-C4NO
	1,2-C3NO	1,4-C4NS
	1,2-C3NS	1,4-C4O2
1,2-C3O2	1,4-C4OS	
1,2-C3OS	1,4-C4S2	
1,2-C3S2	1,4-C5N2	
1,2-C4N2	C2S	
1,2-C4NO	C3N	
1,2-C4NS	C3O	
1,2-C4O2	C3S	
1,2-C4OS	C4N	
1,2-C4S2	C4O	
1,3-C3N2	C4S	
1,3-C3NO	C5N	
1,3-C3NS	C5O	
1,3-C3O2	C5S	
1,3-C3OS	C6N	
1,3-C3S2	C6O	
1,3-C4N2	C6S	
1,3-C4NO	Aziridine	
1,3-C4NS	Cephem	
1,3-C4O2	Episulfide	
1,3-C4OS	Epoxide	
1,3-C4S2	Penam	
1,4-C4N2	Purine	
Ketones	Acyclic ketone	O-quinone
	Cyclic ketone	P-quinone
Organometallics	Acylmetal	Metal nitrosyl
	Metal arene	Metal phosphine
	Metal carbene	Metal sulfur Metallocarbocycle
	Metal carbonyl	Mu-carbonyl
	Metal cyclopentadienyl	Organometal
	Metal halide	Pi-alkene
	Metal hydride	Pi-alkyne
	Metal metal bond	Pi-allyl
	Metal nitrogen	

Уточнение результатов поиска по реакции

<i>Уточнение результатов поиска критерию</i>	<i>Используемый индекс</i>
Выход реакции	/YD
Количество стадий	/NS
Регистрационный номер CAS конкретного участника реакции:	
Растворитель	/SOL
Катализатор	/CAT
Реагент	/RGT
Реактант	/RCT
Реагент или реактант	/RRT
Продукт	/PRO
Не продукт	/NPRO
Термин из примечания к реакции (Note)	/BI

Примеры использования ролей веществ для уточнения набора ответов

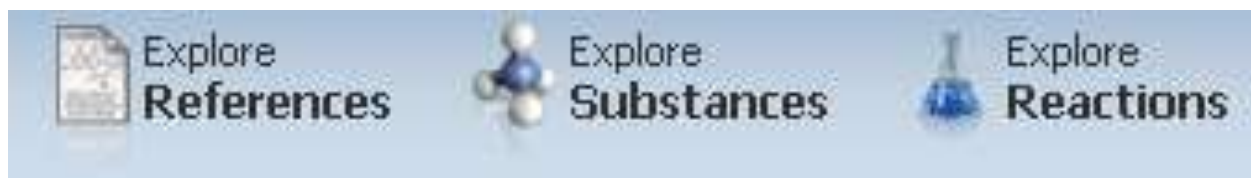
<i>Задача</i>	<i>Действия</i>
ограничить найденный набор реакциями, в которых в качестве катализатора используется палладий (регистрационный номер CAS 7440-05-3)	=> S L1 (L) 7440-05-3/CAT
ограничить найденный набор каталитическими реакциями	=> S L1 (L) ANY/CAT
ограничить найденные реакции теми, в которых уксусная кислота (регистрационный номер CAS 64-19-7) – исходное вещество	=> S L1 (L) 64-19-7/NPRO
удалить реакции, в которых в качестве реактанта или реагента используется уксусный ангидрид (регистрационный номер CAS 108-24-7)	=> S L1 (NOTL) 108-24-7/RRT

Форматы вывода информации в базе данных CASREACT

<i>Формат вывода</i>	<i>Результат вывода</i>
OCC	Количество найденных (HIT) реакций в каждом ответе
CRD	Все найденные (HIT) реакции для каждого ответа в компактной форме
FCRDREF	Первая найденная (HIT) реакция для каждого ответа в компактной форме вместе со ссылкой на источник
CRDREF	Все найденные (HIT) реакции для каждого ответа в компактной форме вместе со ссылкой на источник
FHIT	Первая найденная (HIT) реакция для каждого ответа в полной форме (карта, диаграмма и резюме, включая регистрационный номер CAS для каждого участника реакции)
HIT	Все найденные (HIT) реакции для каждого ответа в полной форме (карта, диаграмма и резюме, включая регистрационный номер CAS для каждого участника реакции)
BIB	Библиографическая информация
ABS	Реферат Chemical Abstracts

Поиск в ИПС SciFinder

Стартовая страница в ИПС SciFinder предоставляет возможность выбора БД и типа поиска:



Explore References:


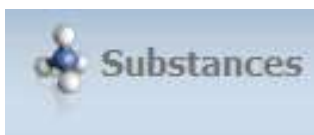

библиографический поиск в реферативных БД CAPlus и MedLine

Explore Substances:

поиск веществ в структурно-химических БД Registry, ChemCats и ChemList

Explore Reactions:

поиск реакций в БД CASReact по структурам реактантов и (или) продуктов, функциональным группам.

Тип информации	Содержание и охват	Поиск информации
	<p>> 35 млн. ссылок из > 60 мировых патентных ведомств и > 10 тыс. научных журналов</p> <p>> 18 млн. ссылок из БД MEDLINE</p> <p>Ретроспектива 1907+, избранные статьи и патенты до 1907</p>	<p>Тематика исследования</p> <p>Автор</p> <p>Организация</p> <p>Источник</p>
	<p>> 66 млн. химических веществ</p> <p>> 63 млн. биопоследовательностей</p> <p>> 4.5 млн. (для 3 млн. веществ) экспериментальных и 3.7 млрд. (для 55.6 млн. веществ) расчетных свойств;</p> <p>> 1.1 млн. экспериментальных спектров (для 778 тыс. веществ) и > 54.6 млн. расчетных спектров ЯМР ¹H и ЯМР ¹³C;</p> <p>Ретроспектива 1800+</p> <p>Коммерческая информация от >1050 поставщиков из > 1180 каталогов для > 69 млн. коммерчески доступных веществ (> 20 млн. регистрационных номеров веществ CAS)</p> <p>Нормативная информация для > 295 тыс. веществ</p>	<p>Химическое название</p> <p>Регистрационный номер вещества CAS</p> <p>Молекулярная формула</p> <p>Химическая структура</p> <p>(в том числе по структурам Маркуша)</p>
	<p>> 41.7 млн. одно- и многостадийных реакций с 1840+</p>	<p>Схемы реакций</p> <p>Превращения функциональных групп</p>

Поиск в библиографических БД – Explore References

Тематический поиск – бланк *Research Topic*

Проведение тематического поиска позволяет изучить конкретную область исследований посредством ввода фраз или предложений на английском языке.

1. Ввод поискового запроса в бланке *Research Topic*. Для начала поиска используется команда **Search**.

Рекомендации:

- Задание двух или трех концептов (основных понятий) на нормативном английском языке.
- Использование предлогов и артиклей для связи концептов.
- Заключение акронимов (аббревиатур) или синонимов в скобки после соответствующего концепта.
- Использование отрицаний *not* или *except* для исключения термина.
- Применение ограничений для уменьшения количества результатов в наборе ответов.

Explore References

Research Topic	Research Topic ⓘ	<input type="text" value="intramolecular hydroamination of aminoalkenes"/>	Search
-----------------------	-------------------------	--	---------------

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

Publication Year(s) ⓘ	<input type="text"/>	Examples: 1995, 1995-1999, 1995-, -1995	
Document Type(s) ⓘ	<input type="checkbox"/> Biography	<input type="checkbox"/> Dissertation	<input type="checkbox"/> Patent
	<input type="checkbox"/> Book	<input type="checkbox"/> Editorial	<input type="checkbox"/> Preprint
	<input type="checkbox"/> Clinical Trial	<input type="checkbox"/> Historical	<input type="checkbox"/> Report
	<input type="checkbox"/> Commentary	<input type="checkbox"/> Journal	<input type="checkbox"/> Review
	<input type="checkbox"/> Conference	<input type="checkbox"/> Letter	
Language(s) ⓘ	<input type="checkbox"/> Chinese	<input type="checkbox"/> German	<input type="checkbox"/> Polish
	<input type="checkbox"/> English	<input type="checkbox"/> Italian	<input type="checkbox"/> Russian
	<input type="checkbox"/> French	<input type="checkbox"/> Japanese	<input type="checkbox"/> Spanish
Author Name ⓘ	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
	Last *	First	Middle
Company Name ⓘ	<input type="text"/>		
	Examples: <i>Minnesota Mining and Manufacturing</i> <i>DuPont</i>		

Поиск следует начинать с более широкого запроса или применять ограничения.

Индекс для ограничения набора ответов	Получение ссылок, относящихся к определенному:
<i>Publication Year(s)</i> Год публикации	Периоду времени
<i>Document Type(s)</i> Тип документа	Типу документов
<i>Language(s)</i> Язык публикации	Языку публикации
<i>Author name</i> Имя автора	Автору публикации
<i>Company name</i> Название организации	Организации

Поиск автоматически проводится по родственным терминам, при этом учитываются альтернативные написания и окончания слов.

2. После выбора интересующих ссылок из предложенных (на основе отношений между терминами и концептами) вариантов применяется команда **Get References**.

Research Topic Candidates

5 Topics 1 Selected

Select All Deselect All

Research Topic Candidates	References
<input type="checkbox"/> 13 references were found containing "intramolecular hydroamination of aminoalkenes" as entered.	13
<input checked="" type="checkbox"/> 94 references were found containing the two concepts "intramolecular hydroamination" and "aminoalkenes" closely associated with one another.	94
<input type="checkbox"/> 126 references were found where the two concepts "intramolecular hydroamination" and "aminoalkenes" were present anywhere in the reference.	126
<input type="checkbox"/> 621 references were found containing the concept "intramolecular hydroamination".	621
<input type="checkbox"/> 670 references were found containing the concept "aminoalkenes".	670

Get References

Рекомендации:

При выборе варианта	В найденных документах термины будут встречаться:
<i>As entered</i> Как введены	Точно в той форме, как они введены в бланк запроса
<i>Closely associated with one another</i> Близко связаны	В одном предложении или в заголовке публикации
<i>Present anywhere within a reference</i> Присутствуют в ссылке	Где-либо в записи – в названии, реферате или индексируемой терминологии (возможно, далеко друг от друга)
<i>Containing the concept</i> Содержат один концепт	В записи – сам введенный термин, его синоним(ы) или похожие термины

3. Оценка ответов.

Поисковые термины в заголовках и реферате выделены цветом.

References **Get Substances** **Get Reactions** **Get Related** **Tools** **Send to SciPlanner**

94 References 0 Selected Save Print Export

Select All Deselect All Sort by: Accession Number ↓ Answers per Page [15] 1 2 3 4 5 6 7

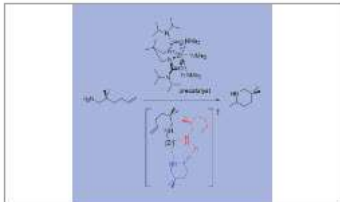
Display: [icon]

1. **New Highly Active Heteroscorpionate-Containing Lutetium Catalysts for the Hydroamination of Aminoalkenes: Isolation and Structural Characterization of a Dipyrrolidinide-Lutetium Complex** Full Text
By Otero, Antonio; Lara-Sanchez, Agustin; Najera, Carmen; Fernandez-Baeza, Juan; Marquez-Segovia, Isabel; Castro-Osma, Jose Antonio; Martinez, Javier; Sanchez-Barba, Luis F.; Rodriguez, Ana M.
From Organometallics (2012), 31(6), 2244-2255. | Language: English, Database: CAPLUS

The reactions of the hybrid scorpionate/cyclopentadiene compds., as a mixt. of regioisomers, 1-[2,2-bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-1,1-diphenylethyl]-1,3-cyclopentadiene and 2-[2,2-bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-1,1-diphenylethyl]-1,3-cyclopentadiene (bpzcpH) and 1-[2,2-bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-1-tert-butylethyl]-1,3-cyclopentadiene and 2-[2,2-bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-1-tert-butylethyl]-1,3-cyclopentadiene (bpztcpH), with [Lu(CH₂SiMe₃)₃(THF)₂] proceed in very high yields to give the free solvent neutral heteroscorpionate dialkyl Lu complexes [Lu(CH₂SiMe₃)₂(bpzcp)] (1) and chiral [Lu(CH₂SiMe₃)₂(bpztcp)] (2). The structures in soln. of 1 and 2 were studied by VT NMR spectroscopy, and a fluxional behavior corresponding to an exchange between the alkyl groups was obsd. The Lu complex [Lu(CH₂SiMe₃)₂(bpztcp)(THF)] (3) was isolated as an enantiomerically enriched complex. Supramol. CH-π interactions between mols. in crystals of 3 were identified in its x-ray mol. anal., and they explain the formation of a conglomerate among mols. of 3. Complexes 1-3 are efficient catalysts for the **intramol. hydroamination of aminoalkenes**, giving TOF values of up to 475 h⁻¹ at 90° for 2,2-diphenyl-pent-4-enylamine (4) by using complex 3 as catalyst. Enantioselectivities up to 70% ee were achieved in the cyclization of the 1,2-disubstituted olefin 6 with the high enantiopurity complex 3. The **hydroamination** reactions show apparently zero-order rate dependence on substrate concn. and 1st-order rate dependence on catalyst concn. Addnl., bicyclization of 2-allyl-2-methylpent-4-enylamine (10) was achieved at 60 and 100°, giving *exo,exo*-2,4,6-trimethyl-1-azabicyclo[2.2.1]heptane (12). The protonolysis reaction of [Lu(CH₂SiMe₃)₂(bpztcp)] (2) with 2 equiv of 2,2-diphenyl-pent-4-enylamine (4) yielded a dipyrrolidinide Lu complex [Lu(NC₄H₅-2-Me-4,4-Ph₂)₂(bpztcp)] (13) as a mixt. of two diastereoisomers. The structures of the complexes were detd. by spectroscopic methods, and the x-ray crystal structures of 3 and 13 were also established.

2. **Intramolecular Aminoalkene Hydroamination Mediated by a Tethered Bis(ureate)zirconium Complex: Computational Perusal of Various Pathways for Aminoalkene Activation** Full Text
By Tobisch, Sven
From Inorganic Chemistry (Washington, DC, United States) (2012), 51(6), 3786-3795.
| Language: English, Database: CAPLUS

The present study comprehensively explores alternative mechanistic pathways for the **intramol. hydroamination** of the prototype 2,2-dimethyl-5-penten-1-amine **aminoalkene** (1) by bis(ureate)ZrIV(NMe₂)₂(HNMe₂) (2), which proceeds through a ZrIV(NHR)₂ intermediate using d. functional theory (DFT) calcs. The classical stepwise *σ*-insertive mechanism that includes insertion of the C=C double bond into the Zr-N amido *σ* bond followed by Zr-C alkyl-bond aminolysis has been compared with a single-step pathway for amidoalkene →



4. Просмотр записи. Опция **Quick View** позволяет просмотреть детали записи, не покидая набор ответов.

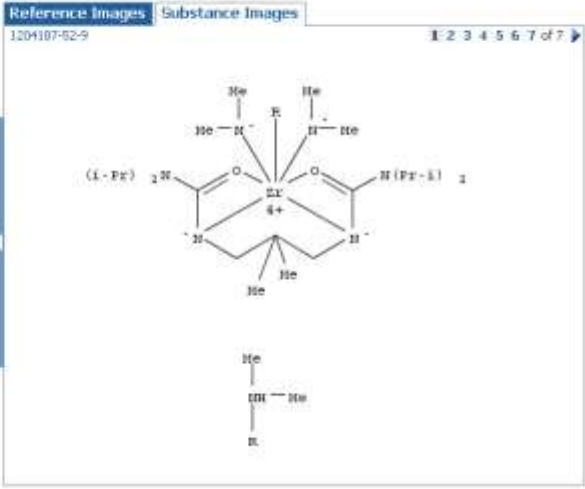
Quick View

Intramolecular Aminoalkene Hydroamination Mediated by a Tethered Bis(ureate)zirconium Complex: Computational Perusal of Various Pathways for Aminoalkene Full Text
By Tobisch, Sven
From Inorganic Chemistry (Washington, DC, United States) (2012), 51(6), 3786-3795. | Language: English, Database: CAPLUS

The present study comprehensively explores alternative mechanistic pathways for the intramol. hydroamination of the prototype 2,2-dimethyl-5-penten-1-amine aminoalkene (1) by bis(ureate)ZrIV(NMe₂)₂(HNMe₂) (2), which proceeds through a ZrIV(NHR)₂ intermediate using d. functional theory (DFT) calcs. The classical stepwise *σ*-insertive mechanism that includes insertion of the C=C double bond into the Zr-N amido *σ* bond followed by Zr-C alkyl-bond aminolysis has been compared with a single-step pathway for amidoalkene → cycloamine conversion through a concerted amino proton transfer assoc. with N-C ring closure. Noncompetitive kinetics for reversible *σ*-insertive cyclization, together with the incompatibility of a turnover-limiting insertion step with obsd. pronounced primary kinetic isotope effects (KIEs), strongly militates against the operation of a *σ*-insertive mechanism. A noninsertive pathway evolving through an ordered six-center transition-state structure describing N-C bond formation at an axial Zr-N amido *σ* bond triggered by concurrent proton transfer from an equatorially bound substrate mol. onto the adjacent olefin-carbon center is found to prevail energetically. The proton-triggered noninsertive cyclization commencing from a catalytically relevant ZrIV(NHR)₂(NHR) substrate adduct is strongly downhill, followed by product expulsion via dissociative amine exchange. The assessed effective barrier compares reasonably well with the previously detd. Eyring parameters, and the computationally estd. primary KIEs

Reference Images Substance Images

1204107-52-9 1 2 3 4 5 6 7 of 7



Рекомендации по проведению тематического поиска (Research Topic)

При тематическом поиске (*Explore references*) или уточнении (*Refine*) его результатов следует использовать полные предложения на нормативном английском языке. То, какие слова являются ключевыми и как они соотносятся друг с другом, определяется автоматически.

Определение темы поиска

Темы должны состоять из двух или трех концептов, объединенных предлогами, союзами и другими простыми частями речи.

Ограничения, налагаемые на вводимую фразу

- Число слов не может превышать 40.
- Число операторов AND или OR, используемых для определения отдельного концепта, не может превышать 3.
- Число используемых концептов не может превышать 7.
- Число используемых терминов для определения отдельного концепта не может превышать 8.

Примеры:

- *effect of penicillin on milk production in dairy cows*
- *liver apoptosis and nasal apoptosis*

Предлоги

Следует использовать распространенные предлоги: *after, among, at, between, from, in, into, on, upon, within*.

Языковые особенности

Следует учитывать особенности английского языка. Например, между фразами *Reactions caused by heat* и *Reactions causing heat* имеется семантическое различие.

Использование операторов AND и OR

В некоторых контекстах различие в операторах AND и OR не распознается. В этих случаях на выбор представляются оба результата.

Не следует использовать AND и OR, если имеется более точный по контексту предлог. Например, не *human growth hormone and fetal development*, а *effects of human growth hormone on fetal development*.

Не следует использовать оператор AND, когда в действительности в виду имеется OR.

Оператор OR используется для обозначения присутствия в искомых документах или одного, или обоих терминов.

Пример: *I am interested in interface software for bibliographic information OR numeric data.*

Используйте AND только для обозначения присутствия обоих терминов.

Пример: *I am interested in interface software for bibliographic information AND numeric data.*

Распределенные модификаторы

Хотя фраза *I am interested in liver or nasal apoptosis* грамматически корректна, распределенные модификаторы не распознаются. Тема должна быть описана фразой *I am interested in liver apoptosis or nasal apoptosis*.

Использование отрицания

Можно описать тему, используя такие отрицания, как NOT или EXCEPT. Например: *ringed planets but NOT Saturn*.

Сокращения и орфографические ошибки

Системой распознаются и воспринимаются часто используемые сокращения, например, *VTU* и *Prep*; распространенные ошибки, например, *affect* вместо *effect*; британский и американский варианты английского языка, например, *colour* и *color*.

Синонимы

При формулировке поискового запроса можно использовать синонимы. Их следует помещать в круглые скобки следом за поисковой формулой.

Пример: *milk production of cows (bovines)*.

Результат: поиск будет проведен по обоим терминам – *cows* и *bovines*.

Усеченные слова и символы усечения

Усечение терминов, учет множественных и других форм слов, глаголов в прошедшем времени происходит автоматически. Не надо включать символы усечения и маскирования (! или *) в поисковые формулы – они будут проигнорированы, а оставшиеся символы восприняты буквально.

Пример: *effects of age on calcium absorption in women*.

Результат: запрос будет автоматически расширен включением таких терминов, как *aged* и *aging*.

Булевы поиски

Не следует использовать булеву логику или группирование слов. В SciFinder в скобках указывают синонимы, а не группировку. Следует использовать союзы и предлоги вместо операторов.

Поиск по автору – бланк Author Name

1. Ввод имени автора в бланк поискового запроса. Для начала поиска используется команда **Search**.

Рекомендации:

- Вводить максимум известной информации.
- Вводить пробелы, дефисы и апострофы.
- Замещать специальные символы (например, умляуты) их эквивалентами.
- Использовать опцию **Look for alternative spellings of the last name** для учета лингвистических вариаций и типографских различий.
- Для сложных имен проводить несколько поисков с разными вариантами.
- Если нет уверенности, имя это или фамилия – использовать обе возможности в любом порядке.

Explore References

Research Topic Author Name CHISHOLM MALCOLM H Search

Author Name Last * First Middle

Company Name

Document Identifier

Journal

Patent

Tags

Look for alternative spellings of the last name

2. Выбор вариантов написания имени автора. Для получения ссылок применяется команда **Get References**.

Author Name Candidates

5 Authors 3 Selected

Select All Deselect All

Author Name Candidates	References
<input type="checkbox"/> CHISHOLM	2
<input type="checkbox"/> CHISHOLM M	74
<input checked="" type="checkbox"/> CHISHOLM M H	154
<input checked="" type="checkbox"/> CHISHOLM MALCOLM	9
<input checked="" type="checkbox"/> CHISHOLM MALCOLM H	705

Get References

3. Оценка ответов.

References | Get Substances | Get Reactions | Get Related | Tools | Send to SciPlanner

868 References | 0 Selected | Save | Print | Export

Select All | Deselect All | Sort by: Accession Number | Answers per Page [20] | 1 2 3 4 5 6 ... 44

Display: [icon]

1. **Photophysical properties of quadruply bonded (MM = Mo₂, MoW or W₂) supported by carboxylate ligands: Lifetimes and charge distribution in S₁ and T₁ states** | Full text
By Chisholm, Malcolm H.
From Abstracts of Papers, 244th ACS National Meeting & Exposition, San Diego, CA, United States, March 25-March 29, 2012 (2012), INOR-591. | Language: English, Database: CAPLUS
The transient absorption spectra and time resolved infra-red (fs and ns) spectra of MM(O₂CR)₄ and trans-MML₂(O₂CR)₂ compds. where MM = Mo₂, MoW and W₂ and R = alkyl or a conjugated org. group reveal relatively long-lived S₁ and T₁ states that can be characterized as MLCT or MM delta - delta star. The MLCT states can be characterized as mixed valence ions where the charge on the ligand is either delocalized or trapped on one ligand. R. groups containing IR reporter groups such as CCC and CN triple bonds allow interesting distinctions of charge distribution as well as compds. with trans O₂CC₆H₅(Cr(CO)₃)₂.

2. **Furan- and selenophene-2-carboxylate derivatives of dimolybdenum and ditungsten (M quadruple bond M): a comparison of their chemical and photophysical properties** | Full text
By Brown-Yu, Samantha E.; Chisholm, Malcolm H.; Gallucci, Judith C.; Ghosh, Yagnaseni; Gustafson, Terry L.; Reed, Carly R.
From Dalton Transactions (2012), 41(8), 2257-2263. | Language: English, Database: CAPLUS
From the reactions between M₂(TPB)₄, where TPB = 2,4,6-trisopropylbenzoate and two equiv. each of 2-furan carboxylic acid, FuCO₂H, and 2-selenophene carboxylic acid, SpCO₂H in toluene, trans-M₂(TPB)₂(O₂Fu)₂ (1a M = Mo, 2a M = W) and trans-M₂(TPB)₂(O₂Sp)₂ (1b M = Mo, 2b M = W) were formed. These new compds. were characterized by ¹H NMR, steady-state UV-visible-NIR absorption and emission spectroscopy, cyclic and differential pulse voltammetry, and fs and ns transient absorption spectroscopy. The compd. Mo₂(TPB)₂(O₂Sp)₂ (1b) was characterized by single crystal x-ray crystallog. These data are compared with those previously reported for related 2-thiophene carboxylate deriv.: M₂(TPB)₂(O₂Th)₂. The physicochem. data correlate well with electronic structure calcs. performed on model compds. All compds. have detectable S₁ photoexcited states with lifetimes that vary from ~5 ps to < 1 ps. The Mo compds. have T₁ states with microsecond lifetimes that are assigned as MMδδ* whereas the T₁ states for W are 3MLCT with lifetimes on the order of nanoseconds. In all cases, shorter lifetimes were seen in complexes contg. heavier atoms.

Analysis | Refine

Analyze by: Author Name

Click bar to view only those references within the current answer set

Chisholm Malcolm H	705
Huffman John C	196
Chisholm M H	154
Folting Kirsten	101
Streib William E	65
Gallucci Judith C	60
Huffman J C	51
Patmore Nathan J	46
Hadad Christopher M	35
Folting K.	34

Show More

Рекомендации:

Для уточнения ответов можно использовать имена соавторов, если известны.

Поиск по названию организации – бланк *Company Name*

1. Ввод **названия организации** в бланк поискового запроса. Для начала поиска используется команда **Search**.

Рекомендации:

- В каждом поиске следует вводить название только одной организации.
- В общем случае, чем больше терминов включено в запрос, тем конкретнее будет поиск. Поэтому для широкого поиска следует использовать меньше поисковых терминов; для сужения набора ответов – больше.

Explore References

Research Topic

Author Name

Company Name

Document Identifier

Journal

Patent

Tags

Company Name

Battelle Labs

Search

Examples:

3M

DuPont

При поиске автоматически учитываются различные написания, акронимы, сокращения, родственные термины и их группы. Например, использование *Company* или *Co.* даст одинаковый результат.

2. Оценка ответов.

References

7116 References

Get Substances

Get Reactions

Get Related

Tools

Send to SciPlanner

Select All

Deselect All

Sort by: Accession Number

Answers per Page [20]

1 2 3 4 5 6 ... 356

Display: [icon]

1. Universal state-selective corrections to multi-reference coupled-cluster theories with single and double excitations

By Orbeo, Jey van Dier, Hubertus J. J.; Pittney, Jey; Kowalski, Karol

From: Journal of Chemical Physics, Ahead of Print. | Language: English, Database: CAPLUS

The recently proposed universal state-selective (USS) corrections to approx. multi-ref. coupled-cluster (MRCC) energies can be commonly applied to any type of MRCC theory based on the exponential ansatz. In this paper we report on the performance of a simple USS correction to the Brillouin-Wigner and Mukherjee's MRCC approaches employing single and double excitations (USS-BW-MRCCSD and USS-Mk-MRCCSD). It is shown that the USS-BW-MRCCSD correction, which employs the manifold of single and double excitations, can be related to a posteriori corrections utilized in routine BW-MRCCSD calcs. In several benchmark calcs. we compare the USS-BW-MRCCSD and USS-Mk-MRCCSD results with the results obtained with the full CI method.

2. Worker inhalation dose coefficients for radionuclides not previously identified in ICRP publication 68

By McLaughlin, David A.; Schwahn, Scott O.

From: Radiation Protection Dosimetry (2012), 148(4), 426-430. | Language: English, Database: CAPLUS

While inhalation dose coeffs. are provided for about 800 radionuclides in International Commission on Radiol. Protection (ICRP) Publication 68, many radionuclides of practical dosimetric interest for facilities such as high-energy proton accelerators are not specifically addressed, nor are organ-specific dose coeffs. tabulated. The ICRP Publication 68 dosimetry concepts are used, along with updated radiol. decay data and metabolic data, to calc. committed equiv. dose coeffs. [h(50)] and committed ED coeffs. [e(50)] for radionuclides produced at the Oak Ridge National Lab.'s Spallation Neutron Source.

3. Electro-hydraulic forming of sheet metals: free-forming vs. conical-die forming

By Rokatep, Aashish; Stephens, Elizabeth V.; Davies, Richard W.; Smith, Mark T.; Soudani, Ayoub; Almi, Said

From: Journal of Materials Processing Technology (2012), 212(5), 1070-1079. | Language: English, Database: CAPLUS

This work builds upon our recent advances in quantifying high-rate deformation behavior of sheet metals, during electro-hydraulic forming (EHF), using high-speed imaging and digital image correlation techniques. Aluminum alloy AA5182-O and DP600 steel sheets (1 mm thick, ~152 mm diam.) were EHF deformed by high-energy (up to ~34 kJ) pressure-pulse in an open die (free-forming) and inside a conical die. The deformation history (velocity, strain, strain-rate, and strain-path) at the apex of the formed domes was quantified and analyzed. The data shows that the use of a die in the EHF process resulted in an amplification, relative to free-forming conditions, of the out-of-plane normal velocity and in-plane strain-rate at the dome apex. This amplification is attributed to the free-forming action of the die on account of its conical geometry. Further, while the strain-rate at

Analyze by:

Company-Organization

Click here to view only those references with the current answer set

Battelle Pac Northwest Lab, USA 1907

BATTELLE Columbus Lab, USA 1520

Battelle Mem Inst, USA 1075

Battelle Northwest, USA 456

BATTELLE, USA 419

Battelle Pacific Northwest Lab, USA 262

Battelle's Columbus Lab, USA 147

Battelle Northwest Lab, USA 111

Battelle Pac Northwest Labs, USA 104

Battelle Columbus Labs, USA 94

Show More

Рекомендации:

Для рассмотрения вариантов названий организаций следует использовать опцию анализа **Analyze by: Company-Organization**.

Поиск по названию журнала – бланк *Journal*

Конкретную публикацию в журнале можно найти с помощью соответствующей библиографической информации.

1. Ввод необходимой информации в бланке *Journal*. Для поиска интересных статей в журнале используется команда **Search**.

Необходимо ввести название журнала, слово из заглавия статьи или фамилию автора, дополнительно – год или интервал лет публикации.

<i>Поле</i>	<i>Формат ввода</i>	<i>Пример</i>
Journal Журнал	Полное название журнала Сокращенное название журнала Акроним	Journal of the American Chemical Society J. Am. Chem. Soc. JACS (для многих, но не всех журналов)
Volume Том	Номер тома Алфавитно-цифровая запись	57 NS33
Issue Номер (выпуск)	Номер выпуска Месяц выпуска	14 July
Publication year(s) Год публикации	Конкретный год Интервал лет	2005 2000-2005, 2000-, -2005

Чем больше терминов включено в запрос, тем конкретнее будет поиск. Для получения широкого набора ответов следует использовать меньше библиографической информации, для сужения набора – больше.

<i>Известно</i>	<i>Используйте для получения набора ответов</i>	
	<i>широкого</i>	<i>узкого</i>
Заглавие статьи (слова из заглавия)	Ключевые слова из названия	Полное заглавие статьи
Название журнала	Только название журнала	Название журнала, номера тома, выпуска, начальной страницы статьи
Имя автора	Только фамилию	Фамилию и инициалы

2. Оценка ответов.

The screenshot displays a search results page with two entries. The first entry, titled "1. A Unique Non-catenane Interlocked Self-Assembled Supramolecular Architecture and Its Photophysical Properties", is by Stang, Peter J. et al. The second entry, titled "2. Designed Post-Self-Assembly Structural and Functional Modifications of a Truncated Tetrahedron", is by Zheng, Yao-Rong et al. On the right, the "Analysis" panel shows a list of authors with their respective reference counts: Stang Peter J (159), Arif Atta M (28), Northrop Brian H (20), Muddiman David C (19), Yang Hai Bo (17), Ghosh Koushik (15), Zheng Yao Rong (14), Wan Li Jun (12), Cook Timothy R (8), and Das Neeladri (8).

В библиографическом описании поисковые термины выделены жирным шрифтом.

Поиск конкретных патентов – бланк Patent

Конкретный патент можно найти с помощью имеющейся библиографической информации.

1. Ввод информации о патенте (например, имя изобретателя). Для начала поиска используется команда **Search**.

Нужно ввести в бланк номер, имя патентовладельца или изобретателя, дополнительно – год (интервал лет) публикации патентного документа.

Поле	Формат ввода	Пример
Patent number Номер патента	Номер патента, заявки или приоритетной заявки	CA 2107100 или CA2107100 JP 1992-502228 IT 1998-BO661
Assignee name Имя владельца	Полное название компании Краткое название компании	GlaxoSmithKline GSK
Inventor name Имя изобретателя	Полное имя Фамилия и инициалы	Walker, Alexander Marriott Walker, A.M.
Publication year(s) Год публикации (интервал лет)	Конкретный год Интервал лет	2005 2000-2005, 2000-, -2005

2. Оценка ответов.

Для уточнения имени изобретателя следует использовать опцию **Analyze by: Author Name** (в примере результаты анализа содержат варианты имени Peter L. Stang и Peter J. Stang).

The screenshot displays a search results page with three entries. The first entry is titled "High-impetus, high-burn-rate gas-generating propellants, especially for seat belt pretensioners" and lists authors including Stang, Peter L. The second entry is "Triflate-mediated preparation and use of iodonium compounds" by Stang, Peter J. The third entry is "Precursors for and synthesis of mono- and difunctionalized acetylenes and difunctional 1,3-dienes" by Stang, Peter J. and others. A chemical structure of a diene is shown below the third entry.

On the right side, there is an "Analysis" sidebar. The "Analyze by:" dropdown is set to "Author Name". Below it, a list of authors and their corresponding counts is shown:

Author Name	Count
Stang Peter L.	8
Stang Peter J.	2
Van Orman Joel V.	2
Baglini James L.	1
Camp Albert T.	1
Crittell Charles M.	1
Dunkerson Dennis E.	1
Gallop Paul M.	1
Halmy Abdel K.	1
Kaufman Martin H.	1

Buttons for "Show More" and "Categorize" are also visible in the sidebar.

Анализ и оценка набора ответов

Анализ ответов помогает выявить тенденции и наиболее значимых исследователей (изобретателей) и организации в интересующей области.

Для идентификации ссылок, наиболее релевантных запросу, к набору ответов можно применять различные критерии анализа в закладке **Analysis**. Анализ помогает выявить ссылки, отвечающие заданным дополнительным критериям. Исходный набор ответов при этом останется неизменным.

The screenshot displays a research database interface with a list of references and an analysis sidebar. The main window shows 94 references, with the first one selected. The sidebar on the right is titled "Analysis" and contains a table of authors and their corresponding number of references.

Author Name	Count
Marks Tobin J	25
Roesky Peter W	8
Hultsch Kai C	7
Schafer Laurel L	6
Stubbert Bryan D	6
Hill Michael S	5
Hong Sukwon	5
Arrowsmith Merle	4
Collin Jacqueline	4
Hartwig John F	4

В наборе ответов ссылки автоматически анализируются по авторам и первые десять результатов выводятся в правой части экрана (указаны авторы и соответствующее им количество ссылок в наборе ответов). Можно выбрать и другие критерии анализа (см. ниже).

1. Для просмотра дополнительных результатов анализа используется команда **Show More**.

Опция Categorize

Опция **Categorize** предоставляет возможность детализации анализа на основании индексируемых (контролируемых) терминов, связанных с каждой ссылкой. Уточняет тематическую принадлежность ссылок, т.к. термины отсортированы по категориям, сгруппированным в различные научные дисциплины.

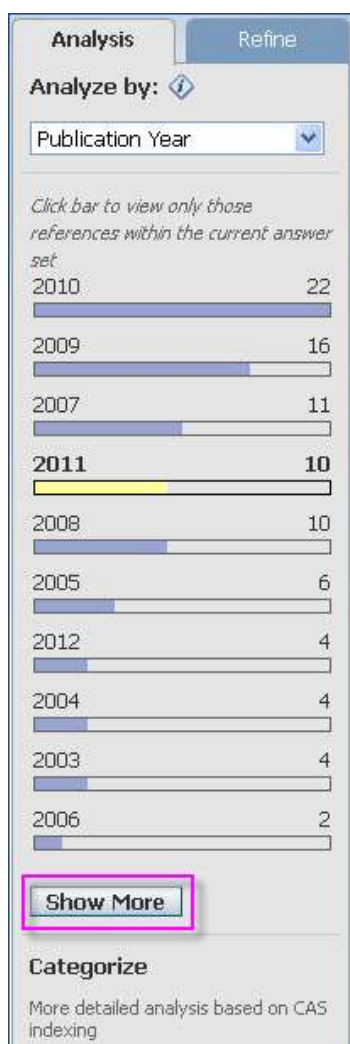
2. Для изменения критериев анализа следует выбрать другую опцию в ниспадающем меню *Analyze by:*, например, год публикации *Publication year*.



Опция	Позволяет идентифицировать
<i>Author Name</i> Имя автора	Ключевых исследователей (изобретателей) в технологической области
<i>CAS Registry Number</i> Регистрационный номер CAS вещества	Вещества, релевантные технологической области
<i>CA Section Title</i> Рубрика CA	Приписанные к записям рубрики CA
<i>Company-Organization</i> Название компании	Организации, активные в технологической области
<i>Database</i> База данных	Распределение записей по базам данных
<i>Document Type</i> Тип документа	Распределение записей по видам документов
<i>Index Term</i> Индексируемый термин	Отнесение записей к индексируемым терминам контролируемого словаря
<i>CA Concept Heading</i> Концепт CA	Контролируемую терминологию БД
<i>Journal Name</i> Название журнала	Публикации в конкретных журналах
<i>Language</i> Язык публикации	Записи на конкретном языке
<i>Publication Year</i> Год публикации	Годы публикаций
<i>Supplementary Terms</i> Ключевые слова	Тематическую принадлежность документов

Вывод результатов анализа

1. Для просмотра ссылок, связанных с конкретной опцией анализа, следует активировать соответствующий результат (на экране он будет выделен желтым цветом). Хотя исходный набор остается неизменным, будут показаны ссылки только из анализируемого набора.



2. Для вывода ссылок, релевантных одновременно нескольким критериям, следует использовать команду **Show More**.

Рекомендации:

Для задания предпочтительного порядка вывода следует использовать возможности сортировки в ниспадающем списке **Sort by**:

Frequency (по умолчанию) – вывод только 500 результатов;

Natural Order – вывод всех результатов в алфавитно-цифровом порядке.

3. Выбор интересующих вариантов. Для вывода применяется команда **Apply**.

Analysis - Publication Year

14 Items 4 Selected Export

Sort by: Frequency

Select bars: Frequency (references within the current answer set.)
Natural Order

<input checked="" type="checkbox"/>	2010	22
<input checked="" type="checkbox"/>	2009	16
<input type="checkbox"/>	2007	11
<input checked="" type="checkbox"/>	2011	10
<input type="checkbox"/>	2008	10
<input type="checkbox"/>	2005	6
<input checked="" type="checkbox"/>	2012	4
<input type="checkbox"/>	2004	4
<input type="checkbox"/>	2003	4
<input type="checkbox"/>	2006	2

Apply Cancel

Будет выведен отсортированный набор ответов, охарактеризованный сообщением на желтом фоне.

References 94 References 0 Selected Save Print Export

52 references with the Publication Years 2012, 2011, 2010, ... are displayed

Keep Analysis Clear Analysis

Select All Deselect All Sort by: Accession Number

Answers per Page [15] 1 2 3 4

Deploy: [icon]

1. New Highly Active Heteroscorpionate-Containing Lutetium Catalysts for the Hydroamination of Aminoalkenes: Isolation and Structural Characterization of a Dipyrroliptide-Lutetium Complex
By Otero, Antonio; Lara-Sánchez, Agustín; Najera, Carmen; Fernández-Baeza, Juan; Márquez-Segovia, Isabel; Castro-Osma, José Antonio; Martínez, Javier; Sánchez-Barba, Luis F.; Rodríguez, Ana M.
From Organometallics (2012), 31(6), 2244-2255. | Language: English, Database: CAPLUS

The reactions of the hybrid scorpionate/cyclopentadiene compds., as a mixt of regioisomers, 1-[2,2-bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-1,1-diphenylethyl]-1,3-cyclopentadiene and 2-[2,2-bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-1,1-diphenylethyl]-1,3-cyclopentadiene (bpzcpH) and 1-[2,2-bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-1-tert-butylethyl]-1,3-cyclopentadiene and 2-[2,2-bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-1-tert-butylethyl]-1,3-cyclopentadiene (bpztpH), with [Lu(CH2SiMe3)3(THF)2] proceed in very high yields to give the free solvent neutral heteroscorpionate dialkyl Lu complexes [Lu(CH2SiMe3)2(bpzcp)] (1) and chiral [Lu(CH2SiMe3)2(bpztp)] (2). The structures in soln. of 1 and 2 were studied by VT NMR spectroscopy, and a fluxional behavior corresponding to an exchange between the alkyl groups was obsd. The Lu complex [Lu(CH2SiMe3)2(bpztp)(THF)] (3) was isolated as an enantiomerically enriched complex. Supramol. CH-π interactions between mols. in crystals of 3 were identified in its x-ray mol. anal., and they explain the formation of a conglomerate among mols. of 3. Complexes 1-3 are efficient catalysts for the intramol. hydroamination of aminoalkenes, giving TOF values of up to 475 h⁻¹ at 90° for 2,2-diphenyl-pent-4-enylamine (4) by using complex 3 as catalyst. Enantioselectivities up to 70% ee were achieved in the cyclization of the 1,2-disubstituted olefin 6 with the high enantiopurity complex 3. The hydroamination reactions show apparently zero-order rate dependence on substrate concn. and 1st-order rate dependence on catalyst concn.

Analysis: Refine

Analyze by: Publication Year

Click bar to view only those references within the current answer set

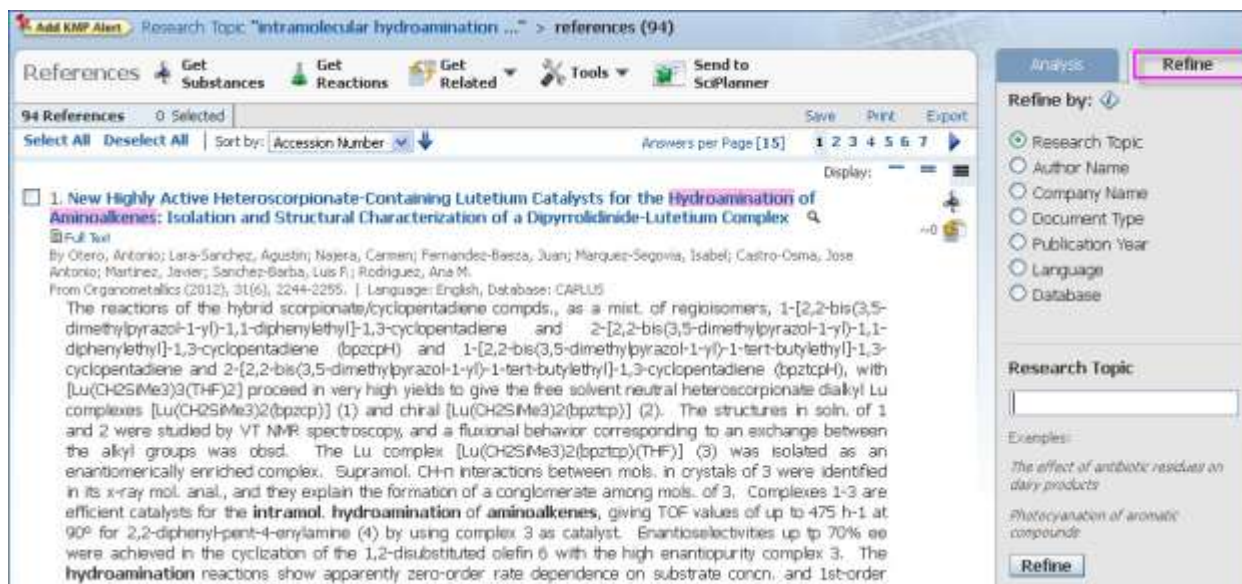
2010	22
2009	16
2007	11
2011	10
2008	10
2005	6
2012	4
2004	4

Для создания нового набора ответов, содержащего ссылки только из анализируемого набора, используется команда **Keep Analysis**; для возвращения к исходному набору – команда **Clear Analysis**.

Уточнение набора ответов

Опция уточнения **Refine** используется для просмотра, изучения и оценки набора ответов. Она помогает отобрать ссылки, наиболее релевантные интересующей области, с использованием дополнительных критериев.

1. Закладка **Refine** справа от выводимых ссылок позволяет выбрать критерии уточнения набора ответов.



Набор ответов можно уточнять произвольное количество раз с использованием любых комбинаций опций **Refine by**:

Опция	Позволяет идентифицировать публикации:
Research Topic Тематика исследования	Содержащие дополнительные слова и фразы
Author Name Имя автора	Конкретного автора
Company Name Название компании	Конкретной организации
Document Type Тип документа	Из источников определенного типа
Publication Year Год публикации	За указанный год (интервал лет)
Language Язык публикации	На определенном языке
Database База данных	Из конкретной базы данных

2. Выбор опции и спецификация соответствующей информации. Например, для опции **Document Type(s)** следует указать вид документов из предложенного списка (в данном случае патент).

2. При использовании опции **Refine** новый набор ответов будет содержать только ссылки, отвечающие выбранным критериям уточнения. Для возврата в исходный набор ответов следует перейти на соответствующий этап поиска с помощью **навигации** вверху страницы.

1. **Intramolecular hydroamination of aminoalkenes**
 By Takemiya, Akhiro; Liu, Zhijian; Hartwig, John F.
 From U.S. Pat. Appl. Publ. (2009), US 20090156824 A1 20090618. | Language: English, Database: CAPLUS
 The invention relates to the method of prep. azacycloalkanes via rhodium/phosphine-catalyzed **intramol. hydroamination of aminoalkenes**. The method of prep. azacycloalkanes via rhodium/phosphine-catalyzed **intramol. hydroamination of aminoalkenes** of formula I wherein R1 is an org. group; R2, R3 and R4 are independently H, Me, and an org. group; are claimed. In a typical example, compd. II was prepd. via rhodium /phosphine-catalyzed **intramol. hydroamination of N-(4-chlorobenzyl)-2,2-diphenylpent-4-en-1-amine**.

$$\begin{array}{c} R^1 & & R^3 \\ & \backslash & / \\ & C=C & \\ & / & \backslash \\ R^2 & & R^4 \end{array} \quad \text{I}$$

Доступ к полному тексту

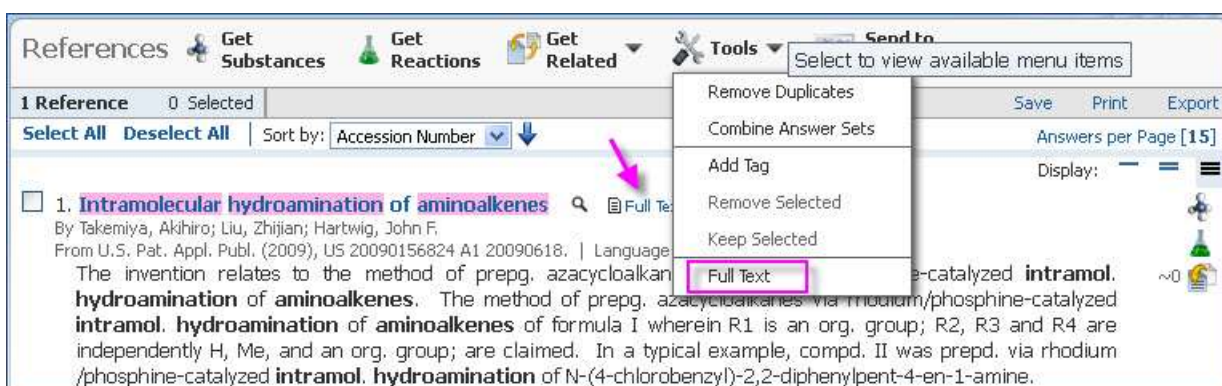
ИПС SciFinder позволяет быстро получить доступ к полным текстам:

- статей из журналов на веб-сайтах издательств (требуется отдельная подписка)
- патентов ряда патентных ведомств (USPTO, EPO, SIPO и KIPRIS)
- библиотечных ресурсов организации (требуется административный доступ к SciFinder)
- через службы доставки документов.

Перейти к полному тексту интересующей ссылки можно 3 способами.

При просмотре набора ответов:

1. через линк → **Full Text** справа от заглавия публикации
2. с помощью опции **Full Text** из ниспадающего меню **Tools**



При просмотре конкретного ответа:

3. по команде **Get Full Text**.

The screenshot shows the 'Reference Detail' page in SciFinder. At the top, there are navigation buttons: 'Reference Detail', 'Get Substances', 'Get Reactions', 'Get Cited', 'Get Citing', 'Get Full Text', and 'Send to SciPlanner'. The 'Get Full Text' button is highlighted with a pink box. Below the navigation bar, there's a 'Return' link. The main title is 'Intramolecular hydroamination of aminoalkenes'. Below the title, the authors are listed: 'By: Takemiya, Akihiro; Liu, Zhijian; Hartwig, John F.' and the assignee is 'University of Illinois, USA'. The main text describes the invention: 'The invention relates to the method of prepg. azacycloalkanes via rhodium/phosphine-catalyzed intramol. hydroamination of aminoalkenes. The method of prepg. azacycloalkanes via rhodium/phosphine-catalyzed intramol. hydroamination of aminoalkenes of formula I wherein R1 is an org. group; R2, R3 and R4 are independently H, Me, and an org. group; are claimed. In a typical example, compd. II was prepd. via rhodium/phosphine-catalyzed intramol. hydroamination of N-(4-chlorobenzyl)-2,2-diphenylpent-4-en-1-amine.' Below the text, there's a chemical structure labeled 'I' showing a double bond with substituents R¹, R², R³, and R⁴.

Документы будут затребованы через страницу *CAS Full Text*. В зависимости от системных установок своего сайта, варианта подписки и доступности документа пользователь будет связан либо непосредственно с полнотекстовым документом, либо с библиотечными ресурсами своей организации, либо со страницей *CAS Full Text*.

Bibliographic data: US2009156824 (A1) — 2009-06-18

★ In my patents list → EP Register → Report data error

Print

Hydroamination of Alkenes

Page bookmark [US2009156824 \(A1\) - Hydroamination of Alkenes](#)

Inventor(s): TAKEMIYA AKIHIRO [JP]; LIU ZHIJIAN [US]; HARTWIG JOHN F [US] ±

Applicant(s): UNIV ILLINOIS [US] ±

Classification: - international: [B01J31/02](#); [C07C209/60](#); [C07D209/54](#); [C07D211/06](#); [C07D295/02](#)

- European: [B01J31/18B](#); [B01J31/24B](#); [B01J31/24B2](#); [B01J31/24B6B2](#); [C07C209/60](#); [C07D207/06](#); [C07D207/09](#); [C07D207/12](#); [C07D209/96](#); [C07D211/12](#); [C07D211/14](#)

Application number: US20080251062 20081014

Priority number(s): US20080251062 20081014; US20070979652P 20071012

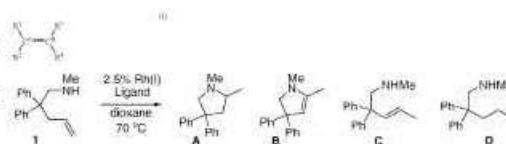
Abstract of US2009156824 (A1)

Translate this text into **i**

German

patenttranslate powered by EPO and Google

A method includes reacting an amino group, a composition including rhodium and an organic ligand, and a substrate having structural formula (I) in a reaction mixture. R1 is an organic group including a sp³ carbon atom bonded to CA. R2 is selected from the group consisting of hydrogen, methyl, and an organic group including a sp³ carbon atom bonded to CA. R3 and R4 independently are selected from the group consisting of hydrogen, methyl, and an organic group including a sp³ carbon atom bonded to CB. The method further includes forming a hydroaminated product in the reaction mixture.



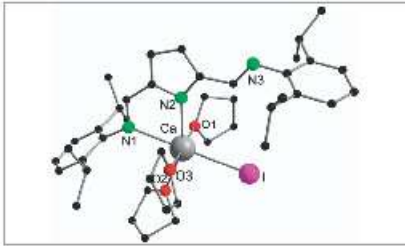
Идентификация родственных ссылок

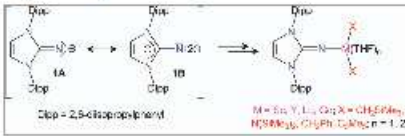
ИПС SciFinder позволяет легко идентифицировать цитирующие и цитируемые публикации.

Цитирующие ссылки

1. Для вывода документов, цитирующих конкретную публикацию из набора ответов, используется **число цитирований** справа от этой публикации. Для вывода документов, цитирующих отмеченные в наборе ответов публикации, применяется команда **Get Citing** (ниспадающее меню **Get Related**). Если конкретные публикации в наборе ответов не отмечены, то будут выведены цитирующие ссылки для всего набора ответов.

The screenshot displays the SciFinder 'References' page. At the top, there are navigation tabs: 'References', 'Get Substances', 'Get Reactions', and 'Get Related'. The 'Get Related' dropdown menu is open, showing 'Get Citing' and 'Get Cited' options. Below the navigation, there are search filters: '4 References', '0 Selected', 'Sort by: Accession Number', and 'Answers per Page [15]'. The main content area lists three search results:

- 1. 2,5-Bis[N-(2,6-diisopropylphenyl)iminomethyl]pyrrolyl Complexes of the Heavy Alkaline Earth Metals: Synthesis, Structures, and Hydroamination Catalysis**
By Jenter, Jelena; Koeppel, Ralf; Roesky, Peter W.
From Organometallics (2011), 30(6), 1404-1413. | Language: English, Database: CAPLUS


The heteroleptic iodo complexes [(DIP2pyr)MI(THF)_n] (M = Ca, Sr (n = 3); Ba (n = 4); (DIP2pyr)- = 2,5-bis{N-(2,6-diisopropylphenyl)iminomethyl}pyrrolyl) were synthesized by reaction of [(DIP2pyr)K] with anhyd. alk. earth metal diiodides. All complexes are monomeric in the solid state. A κ³-coordination mode of the (DIP2pyr)- ligand was obsd. for the Sr and the Ba compds., while the analogous Ca deriv. is κ²-coordinated in the solid state. However, VT-1H NMR studies of [(DIP2pyr)CaI(THF)₃] indicate a sym. coordinated (DIP2pyr)- ligand in soln. Computational studies confirm the different coordination modes in soln. and in the solid state. The preferred κ²-coordination mode obsd. in the solid state might be a result of temp. or/and crystal-packing effects. Also, the Ca and Sr amido complexes [(DIP2pyr)M{N(SiMe₃)₂}(THF)₂] (M = Ca, Sr) were prepd. by reaction of [(DIP2pyr)MI(THF)_n] (M = Ca, Sr (n = 3)) with [K{N(SiMe₃)₂}]₂. Both compds. were studied for the **intramol. hydroamination of aminoalkenes**. Both catalysts showed a good activity, and the best results were obtained for the Ca complex [(DIP2pyr)Ca{N(SiMe₃)₂}(THF)₂].
- 2. Aminotroponimate zinc complexes as catalysts for the intramolecular hydroamination**
By Jenter, Jelena; Luehl, Anja; Roesky, Peter W.; Blechert, Siegfried
From Journal of Organometallic Chemistry (2010), Volume Date2011, 696(1), 406-418. | Language: English, Database: CAPLUS
A review. This review deals with the synthesis of aminotroponimate and aminotroponate Zn complexes. The main focus is on their application as catalysts for the **intramol. hydroamination**, in which good activity, particularly high functional group tolerance and a relatively high stability towards moisture and air were obsd. A heterogeneous Zn catalyst is reported to increase the stability and the recyclability of the catalytic system.
- 3. Rare-Earth Metal Alkyl, Amido, and Cyclopentadienyl Complexes Supported by Imidazolin-2-iminato Ligands: Synthesis, Structural Characterization, and Catalytic Application**
By Trambitas, Alexandra G.; Panda, Tarun K.; Jenter, Jelena; Roesky, Peter W.; Daniluc, Constantin; Hrib, Cristian G.; Jones, Peter G.; Tamm, Matthias
From Inorganic Chemistry (Washington, DC, United States) (2010), 49(5), 2435-2446. | Language: English, Database: CAPLUS


The rare earth metal dichlorides [(1)MCl₂(THF)₃] (2a, M = Sc; 2b, M = Y; 2c, M = Lu) and the Gd complex [(1)GdCl₂(THF)₂]·[LiCl(THF)₂] (2d), contg. the 1,3-bis(2,6-diisopropylphenyl)imidazolin-2-

2. Новый набор ответов будет включать документы, цитирующие публикации, отобранные на предыдущем этапе.

Research Topic "intramolecular hydroamination ..." > references (94) > keep analysis "Author Name"

(4) > citing references (31)

References

31 References 0 Selected Save Print Export

Select All Deselect All Sort by: Accession Number ↓ Answers per Page [15] 1 2 3

Display: — = ≡

1. **Dianion and Monoanion Ligation of 1,4-Diaza-1,3-butadiene to Barium, Strontium, and Calcium**

By Panda, Tarun K.; Kaneko, Hiroshi; Michel, Olaf; Pal, Kuntal; Tsurugi, Hayato; Tornroos, Karl W.; Anwender, Reiner; Mashima, Kazushi
From *Organometallics*, Ahead of Print. | Language: English, Database: CAPLUS

Two synthetic protocols, a salt metathesis reaction and a direct metalation, were developed for prepg. 1,4-diaza-1,3-butadiene complexes of barium, strontium, and calcium, in which 1,4-diaza-1,3-butadiene serves as a dianionic or monoanionic ligand. A salt metathesis reaction of BaI₂ with the dipotassium salt of N,N'-bis(2,6-diisopropylphenyl)-1,4-diaza-1,3-butadiene (1; abbreviated (Dip)2DAD) afforded the iodide-bridged dinuclear complex [K((Dip)2DAD)(THF)₂][Ba(μ-I)(THF)₂]₂ (2) bearing a dianionic ene-diamide ligand, while the reaction of MI₂ (M = Sr, Ca) with the dipotassium salt of 1 gave the mononuclear complexes [M((Dip)2DAD)(THF)₄] (4, M = Sr; 5, M = Ca). A direct metalation reaction of barium powder with (Dip)2DAD in the presence of iodine (10 mol%) afforded an iodide-bridged dinuclear complex, [Ba((Dip)2DAD)(μ-I)(THF)₂]₂ (3), in which (Dip)2DAD coordinates as a monoanionic ligand to the barium center, as was evident from the X-ray anal. and the EPR spectral data. The products from the direct metalation reaction of Sr and Ca powders with 1 in the presence of a catalytic amt. of iodine (1 mol%) resulted in the formation of mononuclear complexes 4 and 5 bearing the dianionic ene-diamide DAD ligand.

2. **From a Cycloheptatrienylzirconium Allyl Complex to a Cycloheptatrienylzirconium Imidazolin-2-iminato "Pogo Stick" Complex with Imido-Type Reactivity**

By Gloeckner, Andreas; Bannenberg, Thomas; Daniliuc, Constantin G.; Jones, Peter G.; Tamm, Matthias
From *Inorganic Chemistry* (Washington, DC, United States), Ahead of Print. | Language: English, Database: CAPLUS

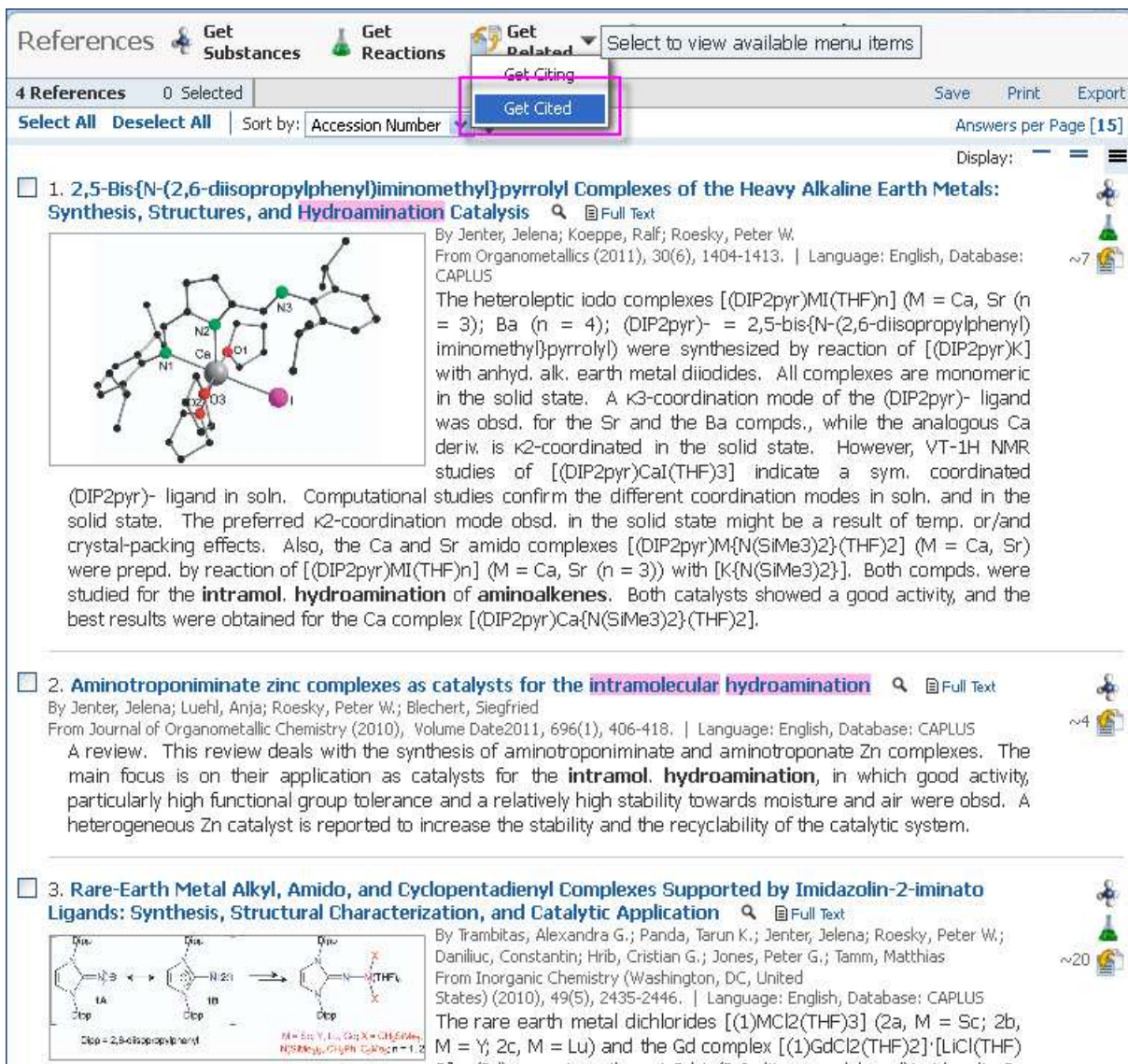
The reaction of the cycloheptatrienylzirconium half-sandwich complex [(η⁷-C₇H₇)ZrCl(tmeda)] (1) (tmeda = N,N,N',N'-tetramethylethylenediamine) with Li(ImDippN), generated from bis(2,6-diisopropylphenyl)imidazolin-2-imine (ImDippNH) with methyllithium, yields the imidazolin-2-iminato complex [(η⁷-C₇H₇)Zr(ImDippN)(tmeda)] (2). The corresponding tmeda-free complex [(η⁷-C₇H₇)Zr(ImDippN)] (5) can be synthesized via the 1,3-bis(trimethylsilyl)allyl complex [(η⁷-C₇H₇)Zr{η³-C₃H₃(TMS)₂}(THF)] (3; TMS = SiMe₃), which undergoes an acid-base reaction with ImDippNH to form 5 and 1,3-bis(trimethylsilyl)propene. 5 exhibits an unusual one-legged piano stool ("pogo stick") geometry with a particularly short Zr-N bond of 1.997(2) Å. Addn. of 2,6-dimethylphenyl or tert-Bu isocyanide affords the complexes [(η⁷-C₇H₇)Zr(ImDippN)(CNR)] (R = o-Xy, 6; R = t-Bu, 7), while the reaction with 2,6-dimethylphenyl isocyanate results in a [2 + 2] cycloaddn. to form the ureato(1-) complex [(η⁷-C₇H₇)Zr{ImDippN(C=O)N-o-Xy}] (8). 5 can also act as an initiator for the ring-opening polymn. of ε-caprolactone. These reactivity patterns together with d. functional theory calcns. reveal a marked similarity of the bonding in imidazolin-2-iminato and conventional imido transition-metal complexes.

Рекомендации:

Для возврата в исходный набор ответов следует с помощью **навигации** вверху страницы перейти на соответствующий этап поиска.

Цитируемые ссылки



1. Для вывода цитируемых ссылок следует отметить интересующие документы в наборе ответов и выбрать опцию **Get Cited** в меню **Get Related**. Если документы не отмечены, то цитируемые ссылки будут выведены для всего набора ответов.





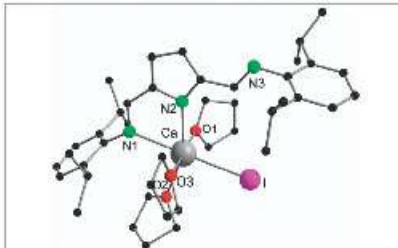
References **Get Substances** **Get Reactions** **Get Related** Select to view available menu items

4 References 0 Selected Save Print Export



Select All Deselect All Sort by: Accession Number Answers per Page [15] Display: [icon]



1. **2,5-Bis{N-(2,6-diisopropylphenyl)iminomethyl}pyrrolyl Complexes of the Heavy Alkaline Earth Metals: Synthesis, Structures, and Hydroamination Catalysis**  

By Jenter, Jelena; Koeppel, Ralf; Roesky, Peter W.
From Organometallics (2011), 30(6), 1404-1413. | Language: English, Database: CAPLUS  ~7 







The heteroleptic iodo complexes [(DIP2pyr)MI(THF)_n] (M = Ca, Sr (n = 3); Ba (n = 4); (DIP2pyr)⁻ = 2,5-bis{N-(2,6-diisopropylphenyl)iminomethyl}pyrrolyl) were synthesized by reaction of [(DIP2pyr)K] with anhyd. alk. earth metal diiodides. All complexes are monomeric in the solid state. A κ₃-coordination mode of the (DIP2pyr)⁻ ligand was obsd. for the Sr and the Ba compds., while the analogous Ca deriv. is κ₂-coordinated in the solid state. However, VT-1H NMR studies of [(DIP2pyr)CaI(THF)₃] indicate a sym. coordinated (DIP2pyr)⁻ ligand in soln. Computational studies confirm the different coordination modes in soln. and in the solid state. The preferred κ₂-coordination mode obsd. in the solid state might be a result of temp. or/and crystal-packing effects. Also, the Ca and Sr amido complexes [(DIP2pyr)M{N(SiMe₃)₂}(THF)₂] (M = Ca, Sr) were prepd. by reaction of [(DIP2pyr)MI(THF)_n] (M = Ca, Sr (n = 3)) with [K{N(SiMe₃)₂)]. Both compds. were studied for the **intramol. hydroamination of aminoalkenes**. Both catalysts showed a good activity, and the best results were obtained for the Ca complex [(DIP2pyr)Ca{N(SiMe₃)₂}(THF)₂].

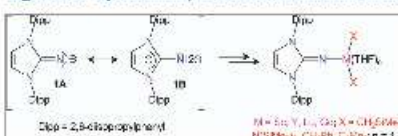
2. **Aminotroponimate zinc complexes as catalysts for the intramolecular hydroamination**  

By Jenter, Jelena; Luehl, Anja; Roesky, Peter W.; Blechert, Siegfried
From Journal of Organometallic Chemistry (2010), Volume Date2011, 696(1), 406-418. | Language: English, Database: CAPLUS  ~4 

A review. This review deals with the synthesis of aminotroponimate and aminotroponate Zn complexes. The main focus is on their application as catalysts for the **intramol. hydroamination**, in which good activity, particularly high functional group tolerance and a relatively high stability towards moisture and air were obsd. A heterogeneous Zn catalyst is reported to increase the stability and the recyclability of the catalytic system.

3. **Rare-Earth Metal Alkyl, Amido, and Cyclopentadienyl Complexes Supported by Imidazolin-2-iminato Ligands: Synthesis, Structural Characterization, and Catalytic Application**  

By Trambitas, Alexandra G.; Panda, Tarun K.; Jenter, Jelena; Roesky, Peter W.; Daniluc, Constantin; Hrib, Cristian G.; Jones, Peter G.; Tamm, Matthias
From Inorganic Chemistry (Washington, DC, United States) (2010), 49(5), 2435-2446. | Language: English, Database: CAPLUS  ~20 



The rare earth metal dichlorides [(1)MCl₂(THF)₃] (2a, M = Sc; 2b, M = Y; 2c, M = Lu) and the Gd complex [(1)GdCl₂(THF)₂][LiCl(THF)₂] (2d) were synthesized from the 1,2-bis(2,6-diisopropylphenyl)imidazolin-2-iminato ligand (1) and the rare earth metal dichlorides [(1)MCl₂(THF)₃] (2a, M = Sc; 2b, M = Y; 2c, M = Lu) and the Gd complex [(1)GdCl₂(THF)₂][LiCl(THF)₂] (2d) were synthesized from the 1,2-bis(2,6-diisopropylphenyl)imidazolin-2-iminato ligand (1) and the rare earth metal dichlorides [(1)MCl₂(THF)₃] (2a, M = Sc; 2b, M = Y; 2c, M = Lu) and the Gd complex [(1)GdCl₂(THF)₂][LiCl(THF)₂] (2d).

2. Новый набор ответов будет включать публикации, цитируемые документами, отображенными на предыдущем этапе.

4) > cited references (342)

References **Get Substances** **Get Reactions** **Get Related** **Tools** **Send to SciPlanner**

342 References 0 Selected Save Print Export

Select All Deselect All Sort by: Accession Number ↓ Answers per Page [15] 1 2 3 4 5 6 ... 23

Display: — = ≡

1. **Optically active, bulky tris(oxazolanyl)borato magnesium and calcium compounds for asymmetric hydroamination/cyclization** **Full Text**

By Neal, Steven R.; Ellern, Arkady; Sadow, Aaron D.
From Journal of Organometallic Chemistry (2010), Volume Date2011, 696(1), 228-234. | Language: English, Database: CAPLUS

The synthesis of the new chiral, pseudo C₃-sym., monoanionic ligand tris(4S-tert-butyl-2-oxazolanyl) phenylborate [ToT]⁻ is reported. The steric bulk, tridentate coordination, and anionic charge of [ToT]⁻ are suitable for formation of complexes of the type ToTMX, where one valence is available for reactivity. With this point in mind, we prepd. magnesium and calcium toT complexes that resist redistribution to (ToT)₂M compds. Both ToTMgMe and ToTCaC(SiHMe₂)₃ contain tridentate ToT-coordination to the metal center, as shown by NMR spectroscopy, IR spectroscopy, and x-ray crystallog. These compds. are active catalysts for the cyclization of three aminoalkenes to pyrrolidines, and provide non-racemic mixts. of pyrrolidines in enantiomeric excesses up to 36%.

2. **Concerted C-N and C-H Bond Formation in a Magnesium-Catalyzed Hydroamination** **Full Text**

By Dunne, James F.; Fulton, D. Bruce; Ellern, Arkady; Sadow, Aaron D.
From Journal of the American Chemical Society (2010), 132(50), 17680-17683.
| Language: English, Database: CAPLUS

Coordinatively satd. ToMMgMe (1; ToM = tris(4,4-dimethyl-2-oxazolanyl)phenylborate) is an active precatalyst for intramol. hydroamination/cyclization at 50 °C. The empirical rate law of -d[substrate]/dt = k_{obs}[Mg]1[substrate]1 and Michalis-Menton-type kinetics are consistent with a mechanism involving reversible catalyst-substrate assocn. prior to cyclization. The resting state of the catalyst, ToMMgNHCH₂CR₂CH₂CH-CH₂ [R = Ph, Me, -(CH₂)₅-], is isolable, but isolated magnesium amidoalkene does not undergo unimol. cyclization at 50 °C. However, addn. of trace amts. of substrate allows cyclization to occur. Therefore, we propose a two-substrate, six-center transition state involving concerted C-N bond formation and N-H bond cleavage as the turnover-limiting step of the catalytic cycle.

Рекомендации:

Для возврата в исходный набор ответов следует с помощью **навигации** вверху страницы перейти на соответствующий этап поиска.

Сортировка цитирующих ссылок

Выбор опции **Citing References** ниспадающего меню **Sort by** позволит быстро идентифицировать часто цитируемые статьи или авторов по интересующей теме.

References

94 References 0 Selected Save Print Export

Select All Deselect All Sort by: Accession Number

- Accession Number
- Author Name
- Citing References
- Publication Year
- Title

Answers per Page [15] 1 2 3 4 5 6 7

Display:

1. **New Highly Active Heteroaminoalkenes: Isolation and Synthesis of a Dipyrrolidinide-Lutetium Complex**

By Otero, Antonio; Lara-Sanchez, Agustin; Najera, Carmen; Fernandez-Baeza, Juan; Marquez-Segovia, Isabel; Castro-Osma, Jose Antonio; Martinez, Javier; Sanchez-Barba, Luis F.; Rodriguez, Ana M.
From Organometallics (2012), 31(6), 2244-2255. | Language: English, Database: CAPLUS

The reactions of the hybrid scorpionate/cyclopentadiene compds., as a mixt. of regioisomers, 1-[2,2-bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-1,1-diphenylethyl]-1,3-cyclopentadiene and 2-[2,2-bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-1,1-diphenylethyl]-1,3-cyclopentadiene (bpzcpH) and 1-[2,2-bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-1-tert-butylethyl]-1,3-cyclopentadiene and 2-[2,2-bis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-1-tert-butylethyl]-1,3-cyclopentadiene (bpztcpH), with [Lu(CH₂SiMe₃)₃(THF)₂] proceed in very high yields to give the free solvent neutral heteroscorpionate dialkyl Lu complexes [Lu(CH₂SiMe₃)₂(bpzcp)] (1) and chiral [Lu(CH₂SiMe₃)₂(bpztcp)] (2). The structures in soln. of 1 and 2 were studied by VT NMR spectroscopy, and a fluxional behavior corresponding to an exchange between the alkyl groups was obsd. The Lu complex [Lu(CH₂SiMe₃)₂(bpztcp)(THF)] (3) was isolated as an enantiomerically enriched complex. Supramol. CH-π interactions between mols. in crystals of 3 were identified in its x-ray mol. anal., and they explain the formation of a conglomerate among mols. of 3. Complexes 1-3 are efficient catalysts for the **intramol. hydroamination of aminoalkenes**, giving TOF values of up to 475 h⁻¹ at 90° for 2,2-diphenyl-pent-4-enylamine (4) by using complex 3 as catalyst. Enantioselectivities up to 70% ee were achieved in the cyclization of the 1,2-disubstituted olefin 6 with the high enantiopurity complex 3. The **hydroamination** reactions show apparently zero-order rate dependence on substrate concn. and 1st-order rate dependence on catalyst concn. Addnl., bicyclization of 2-allyl-2-methylpent-4-enylamine (10) was achieved at 60 and 100°, giving exo,exo-2,4,6-trimethyl-1-azabicyclo[2.2.1]heptane (12). The protonolysis reaction of [Lu(CH₂SiMe₃)₂(bpztcp)] (2) with 2 equiv of 2,2-diphenyl-pent-4-enylamine (4) yielded a dipyrrolidinide Lu complex [Lu(NC₄H₅-2-Me-4,4-Ph₂)₂(bpztcp)] (13) as a mixt. of two diastereoisomers. The structures of the complexes were detd. by spectroscopic methods, and the x-ray crystal structures of 3 and 13 were also established.

2. **Intramolecular Aminoalkene Hydroamination Mediated by a Tethered Bis(ureate)zirconium Complex: Computational Perusal of Various Pathways for Aminoalkene Activation**

By Tobisch, Sven
From Inorganic Chemistry (Washington, DC, United States) (2012), 51(6), 3786-3795. | Language: English, Database: CAPLUS

The present study comprehensively explores alternative mechanistic pathways for the **intramol. hydroamination** of the prototype 2,2-dimethyl-5-penten-1-amine **aminoalkene** (1) by bis(ureate)

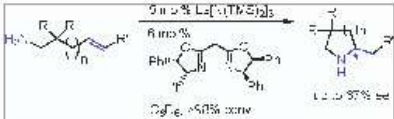
Набор цитирующих ссылок будет отсортирован в порядке уменьшения частоты цитирования – самые цитируемые документы будут выведены первыми.

References Get Substances Get Reactions Get Related Tools Send to SciPlanner

94 References 0 Selected Save Print Export

Select All Deselect All Sort by: Citing References Answers per Page [15] 1 2 3 4 5 6 7 Display:

1. C2-Symmetric Bis(oxazolinato)lanthanide Catalysts for Enantioselective **Intramolecular Hydroamination/Cyclization**

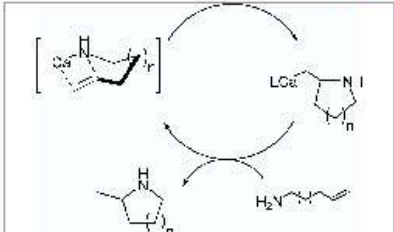


By Hong, Sukwon; Tian, Shun; Metz, Matthew V.; Marks, Tobin J.
From Journal of the American Chemical Society (2003), 125(48), 14768-14783.
| Language: English, Database: CAPLUS

C2-sym. bis(oxazolinato)lanthanide complexes of the type [(4*R*,5*S*)-Ph2Box]La[N(TMS)2]2, [(4*S*,5*R*)-Ar2Box]La[N(TMS)2]2, and [(4*S*)-Ph-5,5-Me2Box]La[N(TMS)2]2 (Box = 2,2'-bis(2-oxazoline)methylenyl; Ar = 4-tert-butylphenyl, 1-naphthyl; TMS = SiMe3) serve as precatalysts for the efficient enantioselective **intramol. hydroamination/cyclization** of **aminoalkenes** and aminodienes. These new catalyst systems are conveniently generated in situ from the known metal precursors Ln[N(TMS)2]3 or Ln[CH(TMS)2]3 (Ln = La, Nd, Sm, Y, Lu) and 1.2 equiv of com. available or readily prepd. bis(oxazoline) ligands such as (4*R*,5*S*)-Ph2BoxH, (4*S*,5*R*)-Ar2BoxH, and (4*S*)-Ph-5,5-Me2BoxH. The X-ray crystal structure of [(4*S*)-tBuBox]Lu[CH(TMS)2]2 provides insight into the structure of the in situ generated precatalyst species. Lanthanides having the largest ionic radii exhibit the highest turnover frequencies as well as enantioselectivities. Reaction rates maximize near 1:1 BoxH:Ln ratio (ligand acceleration); however, increasing the ratio to 2:1 BoxH:Ln decreases the reaction rate, while affording enantiomeric excesses similar to the 1:1 BoxH:Ln case. A screening study of bis(oxazoline) ligands reveals that aryl stereodirecting groups at the oxazoline ring 4 position and addnl. substitution (geminal di-Me or aryl) at the 5 position are crucial for high turnover frequencies and good enantioselectivities. The optimized precatalyst, in situ generated [(4*R*,5*S*)-Ph2Box]La[N(TMS)2]2, exhibits good rates and enantioselectivities, comparable to or greater than those achieved with chiral C1-sym. organolanthanocene catalysts, even for poorly responsive substrates (up to 67% ee at 23 °C). Kinetic studies reveal that **hydroamination** rates are zero order in [amine substrate] and first order in [catalyst], implicating the same general mechanism for organolanthanide-catalyzed **hydroamination/cyclizations** (**intramol.** turnover-limiting olefin insertion followed by the rapid protonolysis of an Ln-C bond by amine substrate) and implying that the active catalytic species is monomeric.

~197

2. Calcium-mediated **intramolecular hydroamination catalysis**



By Crimmin, Mark R.; Casely, Ian J.; Hill, Michael S.
From Journal of the American Chemical Society (2005), 127(7), 2042-2043.
| Language: English, Database: CAPLUS

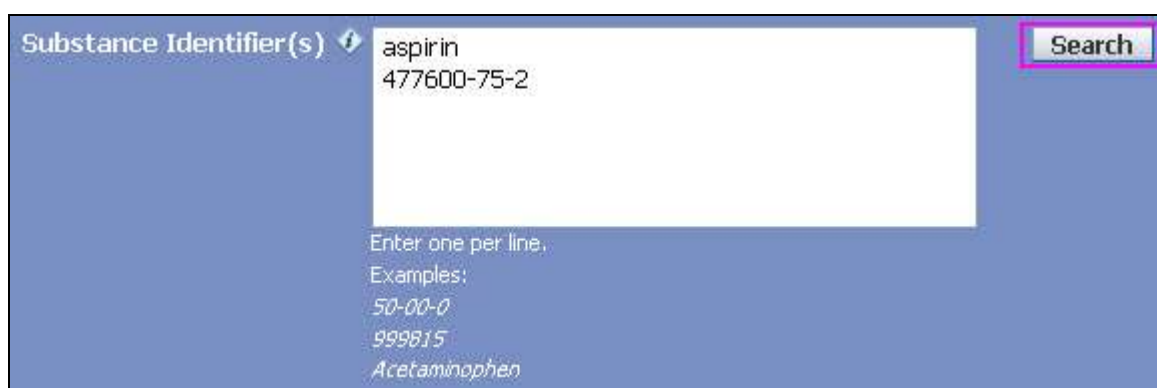
The calcium-catalyzed **intramol. hydroamination** of alkenes and alkynes is reported. The β -diketiminato complex [(HC(C(Me)2N-2,6-iPr2C6H3)2)-Ca{N(SiMe3)2}(THF)] affected the catalytic cyclization of a range of **aminoalkenes** and aminoalkynes with activities that were broadly commensurate to those of established rare earth catalysts.

~161

Поиск веществ с помощью идентификатора *Substance Identifier*

В качестве идентификаторов веществ используются их химические и торговые названия и регистрационные номера CAS.

1. Выбор бланка *Substance Identifier* в закладке *Explore Substances*.
2. Ввод в бланк идентификатора вещества. Можно проводить поиск по нескольким веществам, вводя до 25 идентификаторов одновременно. Каждый идентификатор следует вводить в отдельной строке.
3. Для поиска используется команда **Search**.



4. Ответы будут выведены в порядке уменьшения регистрационных номеров CAS веществ.
5. Для вывода детальной информации о веществе используются опции **Substance Detail** или **View Substance Detail** из контекстного меню для соответствующего вещества.

Ниже приведен пример вывода детальной информации для аспирина **Aspirin**.

Прокрутка меню позволяет просмотреть химическое название вещества, сопоставленные ему роли CAS, показатели биологической активности (*Bioactivity Indicators* или *Target Indicators*), экспериментальные и (или) расчетные свойства.

Substance Detail

Get References Get Reactions Get Commercial Sources Get Regulatory Info Send to SciPlanner

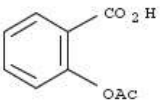
Link | Save | Print | Export

Return

CAS Registry Number: 50-78-2

C₉ H₈ O₄

Benzoic acid, 2-(acetyloxy)-



Rhodine (7CI); Salicylic acid acetate (8CI); 2-(Acetyloxy)benzoic acid; 2-Acetoxybenzoic acid; 2-Carboxyphenyl acetate; A.S.A. Empirin; AC 5230; ASA; Acenterine; Acesal; Acesan; Acetard; Acetyl; Acetilum acidulatum; Acetisal; Acetol; Acetonyl; Acetophen; Acetosal; Acetosalic acid; Acetosalin; Acetylin; Acetylsal; Acetylsalicylic acid; Acetyonyl; Acetysal; Acidum acetylsalicylicum; Acimetten; Acisal; Acylpyrin; Adiro; Albyl E; Anopyrin; Asaflow; Asagran; Asatard; Ascoden 30; Ascolong; Ascriptin; Aspalon; Aspergum; Aspidrops; **Aspirin**; Aspirin Protect 100; Aspirin Protect 300; Aspirin-Direkt; Aspirina 03; Aspirine; Aspro; Aspro Clear; Aspropharm; Asteric; Astrix; Benaspir; Bialpirina; Bialpirinia; Caprin; Cardioaspirin; Cardioaspirina; Claradin; Colfarit; Colsprin; Conthreuma Retard; Coraspin; Coricidin; Coricidin D; Crystar; Darvon Compound; Dolean pH 8; Dominal; Doril; Duramax; ECM; Easprin; Ecopirin; Ecosprin; Ecotrin; Empirin; Endosprin; Endydol; Entericin; Enterophen; Enterosarine; Entrophen; Ewin; Extren; Gelprin; Globentyl; Globoid; Helicon; Idragin; Istopirin; Kapsazal; Lysoprin (pharmaceutical); Magnecyl; Measurin; Medisyl; Melhoral; Micristin; Miniasal; Mycropyrin; NSC 27223; NSC 406186; Neuronika; Novid; Nu-seals; O-Acetylsalicylic acid; Persistin; Polopiryna; Rheumintabletten; Rhodine 2312; Rhodine NC RP; Rhonal; SP 189; Salacatin; Salcetogen; Saletin; Salospir; Salicylacetylsalicylic acid; Solpyron; Supac; Temperal; ThromboASS; Toldex; Triple-sal; Trombyl; Xaxa; Yasta; Zorprin; α -(Acetyloxy)benzoic acid; α -Acetoxybenzoic acid; α -Carboxyphenyl acetate

Deleted CAS Registry Numbers: 2349-94-2, 11126-35-5, 11126-37-7, 26914-13-6, 98201-60-6

CAS Role	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	✓	✓	✓	✓

[Bioactivity Indicators](#) **NEW** [Target Indicators](#) **NEW**

Predicted Properties: [Biological](#) [Chemical](#) [Density](#) [Lipinski](#) and Related [Spectra](#) [Structure-related](#) [Thermal](#)

Biological Properties	Value	Condition	Note	Top
Bioconcentration Factor	6.79	pH 1 Temp: 25 °C	(90)	
Bioconcentration Factor	6.60	pH 2 Temp: 25 °C	(90)	

Рекомендации:

Для вывода ссылок в таблице следует выбрать любую роль, заголовок или «галочку».

Для вывода показателей биологической активности следует выбрать опции **Bioactivity Indicators** или **Target Indicators**.

▼ Bioactivity Indicators <small>NEW</small>		References	▼ Target Indicators <small>NEW</small>		References
Anti-infective agents (all) > Anti-infective agents		30	Albuminoids (all) > Fibrins		49
Anti-infective agents (all) >>> Antibacterial agents		166	Albuminoids (all) > Keratins		11
Anti-infective agents (all) >> Antibiotics		281	Angiotensin (all) > Angiotensin II		20
Anti-infective agents (all) >> Antimicrobial agents		114	Apoptosis-regulating proteins (all) > Bax proteins		29
			Apoptosis-regulating proteins (all) > Bcl-2 proteins		43

Рекомендации:

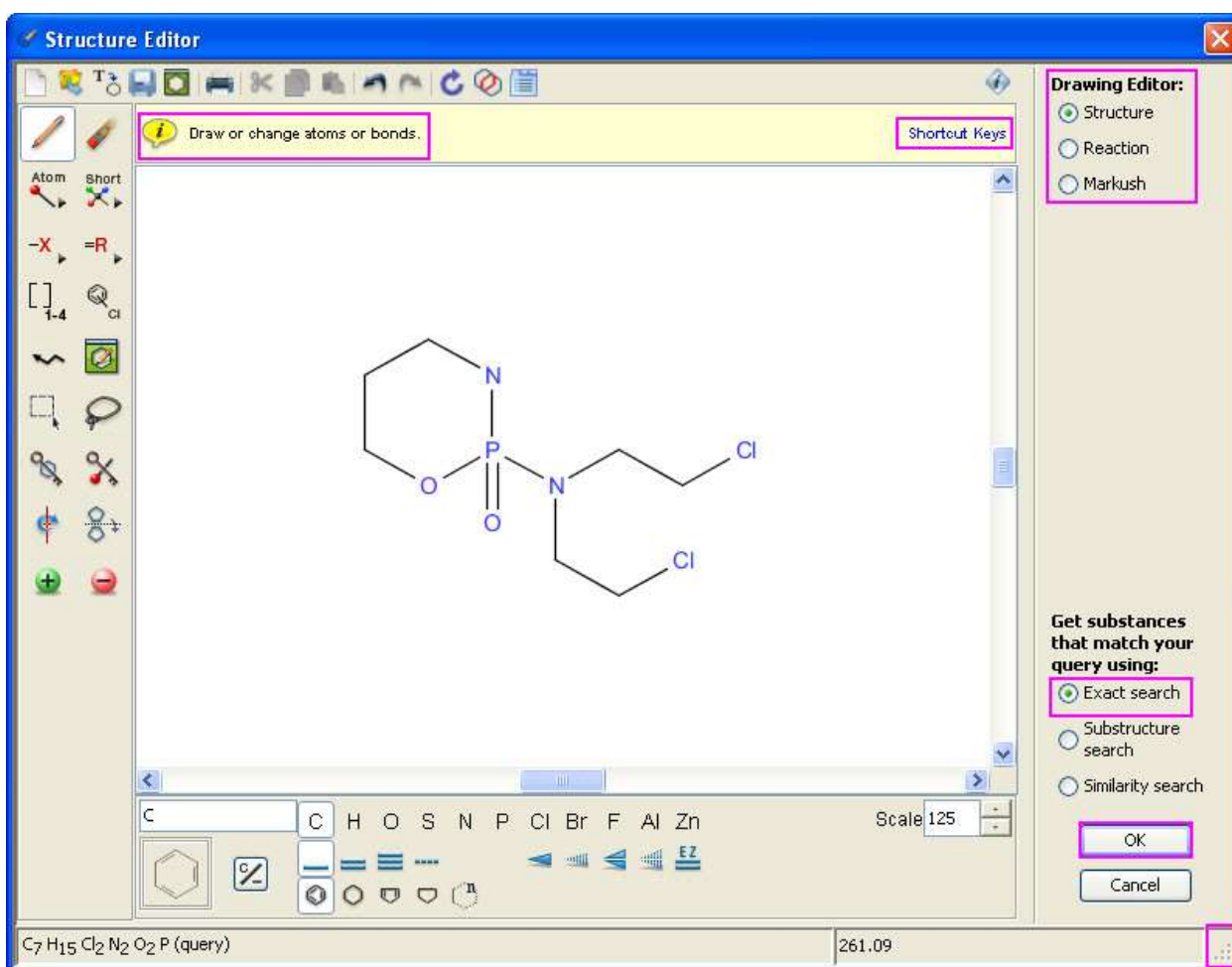
Для вывода источника информации о приведенных свойствах следует выбрать соответствующие сноски в колонке **Note**.

Experimental Properties: Biological Chemical Density Interface Lipinski and Related Optical and Scattering Spectra Structure-related Thermal				
Biological Properties	Value	Condition	Note	Top
ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion)	See full text	1 of 19	(2)CAS	
Half-Life (Biological)	See full text	1 of 10	(23)CAS	


Поиск вещества по его структуре

ИПС SciFinder позволяет нарисовать химические структуры и провести поиск конкретных веществ или группы веществ, соответствующих нарисованным структурам.

1. Изображение экрана для рисования структур позволяет открыть структурный редактор. Можно переключаться между редакторами структур, реакций и структур Маркуша.
2. Для рисования структур используются инструменты слева и внизу экрана. Также имеется опция выбора функциональных групп **Shortcut Keys**.
3. После завершения создания структуры следует задать желаемый тип поиска, например, точный поиск **Exact search**.



Рекомендации:

- Можно изменить размер окна, потянув его за нижний правый угол .
- Наведение курсора на кнопки позволяет увидеть названия и описания соответствующих инструментов; информация о выбранном инструменте выводится на желтом фоне.
- Детальные инструкции по рисованию структур и использованию каждого инструмента содержится в **help**-файлах или **CAS Learning Solutions** (<http://www.cas.org/training/scifinder/>).

Результаты поиска *Exact* могут включать:

- точную структуру – как она нарисована
- стереоизомеры
- таутомеры (в том числе кето-енольные)
- координационные соединения
- заряженные соединения
- радикалы и ион-радикалы
- изотопы
- полимеры, смеси, соли

Структура для поиска загружается в окно *Chemical Structure*.

4. Перед проведением поиска его можно модифицировать или уточнить. Можно выбрать:

- изменение типа поиска **Search Type** – опции *Exact Structure* (поиск точной структуры), *Substructure* (поиск фрагмента структуры) и *Similarity* (поиск подобных структур);
- просмотр анализа точности – опция **Show precision analysis** (не доступна для поисков со стерео характеристиками или при поиске подобных структур);
- задание дополнительных критериев – опции **Characteristics, Classes, Studies** для дальнейшего уточнения поиска

5. Для проведения поиска используется команда **Search**.

Explore Substances

Chemical Structure Chemical Structure

Markush
Molecular Formula
Property **NEW**
Substance Identifier

Search

Click image to change structure or view detail

Search type: Exact Structure
 Substructure
 Similarity

Show precision analysis

Characteristic(s)

Class(es)

Studies

Single component
 Commercially available
 Included in reference(s)

Alloys
 Coordination compounds
 Incompletely defined

Analytical
 Biological

Mixtures
 Polymers
 Organics, and others not listed

Preparation
 Reactant or reagent

6. Оценка ответов.

Результаты поиска *Exact Structure* могут включать стереоизомеры, изотопомеры и многокомпонентные вещества, в которых точная структура является одним из компонентов.

The screenshot displays the SciPlanner interface with search results for 254 substances. A dropdown menu for 'Sort by' is open, showing options: 'Relevance (New)', 'CAS Registry Number', 'Number of References', 'Molecular Weight', and 'Molecular Formula'. The 'View' button is also highlighted. Three substance detail panels are visible, each showing a chemical structure and its name: 1. Substance Detail 50-18-0 (2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N,N-bis(2-chloroethyl)tetrahydro-, 2-oxide); 2. Substance Detail 19-2 (Component, 50-18-0) (2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N,N-bis(2-chloroethyl)tetrahydro-, 2-oxide, hydrate (1:1)); 3. Substance Detail 60007-96-7 (2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N,N-bis(2-chloroethyl)tetrahydro-, 2-oxide, (2S)-).

Рекомендации:

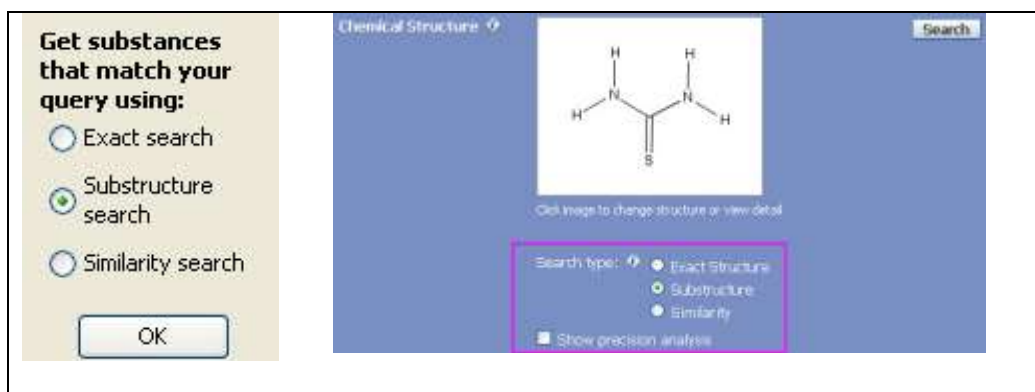
- Для изменения порядка вывода веществ следует использовать команду **Sort by**;
- Для вывода результатов поиска в две, три или четыре колонки следует выбрать соответствующую опцию команды **View**. Если структуры большие, предпочтительно использование меньшего количества колонок.

Выбор типа структурного поиска

Имеется три типа структурных поисков:

- Exact Structure
- Substructure
- Similarity

Тип поиска задается в структурном редакторе. После того, как структура нарисована, тип поиска можно определить (изменить) в окне поиска по структурам, выбрав нужный вариант в опции **Search Type**.



Опция *Show precision analysis* – полезная возможность при проведении структурных поисков определенного типа.



Тип поиска	Цель	Результат
Exact Structure Точная структура	Конкретная структура, нарисованная в запросе	<ul style="list-style-type: none">– Точное соответствие– Stereoisomers– Tautomers– Salts, mixtures– Polymers with monomer, exactly corresponding to the drawn structure
Substructure Фрагмент структуры	Соединения, в которых структура запроса: <ul style="list-style-type: none">– является частью более сложной структуры;– внедрена в большую систему	Соединения, содержащие заданный фрагмент, а также: <ul style="list-style-type: none">– с заместителями во всех свободных положениях– с дополнительной конденсацией циклов
Similarity Подобные структуры	Структурно-подобные вещества	Соединения, содержащие: <ul style="list-style-type: none">– positional isomers– other or fewer substituents– other cyclic systems <i>Примечание:</i> структуры поисковых запросов не могут включать переменные или повторяющиеся группы, переменные положения замещения.

Дополнительные критерии поиска

Можно задавать дополнительные критерии, которым должны отвечать целевые вещества:

- классы веществ;
- характеристики веществ;
- типы исследований.

По умолчанию в результаты поиска будут включены все классы веществ и исследований. Для ограничения набора ответов можно выбрать только интересующие классы.

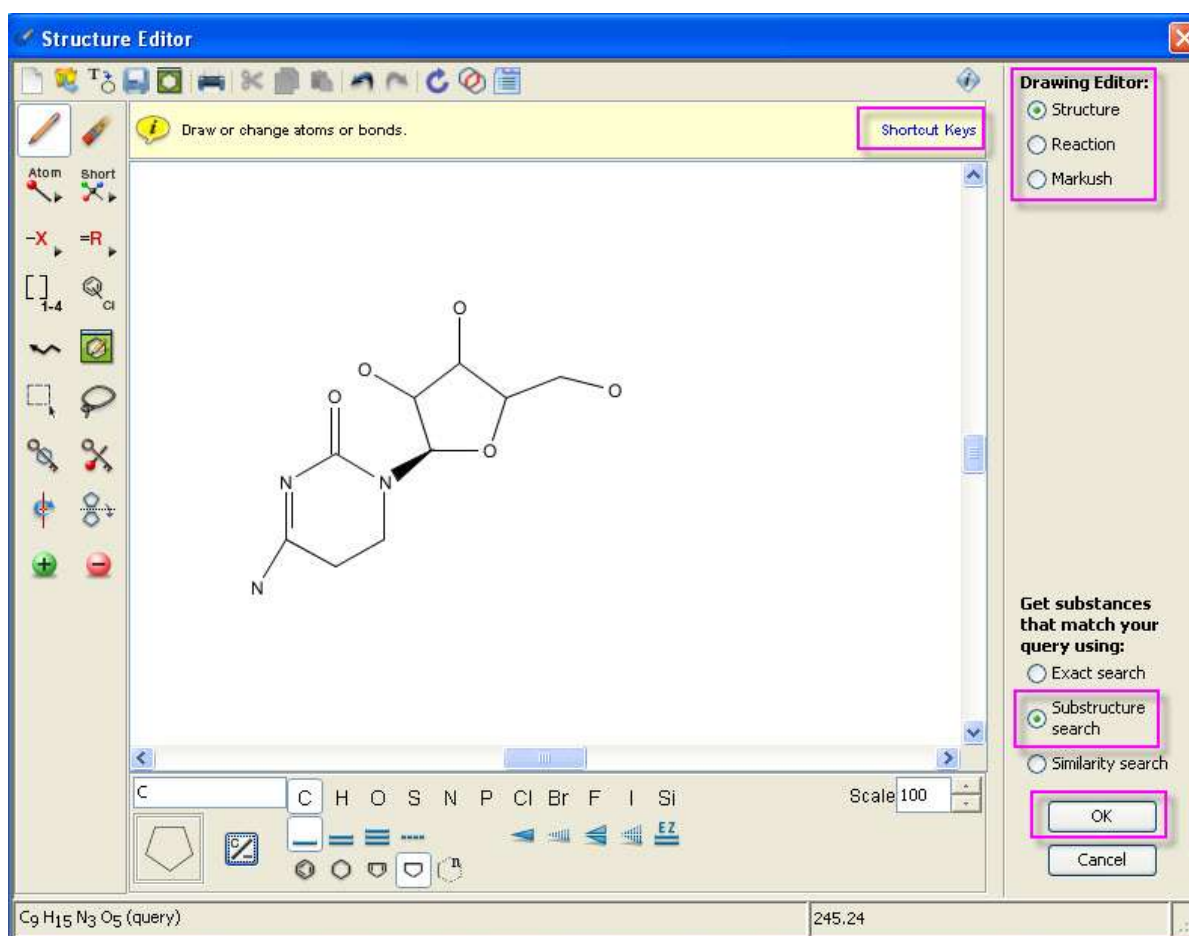
Characteristic(s)	<input type="checkbox"/> Single component	
	<input type="checkbox"/> Commercially available	
	<input type="checkbox"/> Included in reference(s)	
Class(es) 	<input type="checkbox"/> Alloys	<input type="checkbox"/> Mixtures
	<input type="checkbox"/> Coordination compounds	<input type="checkbox"/> Polymers
	<input type="checkbox"/> Incompletely defined	<input type="checkbox"/> Organics, and others not listed
Studies 	<input type="checkbox"/> Analytical	<input type="checkbox"/> Preparation
	<input type="checkbox"/> Biological	<input type="checkbox"/> Reactant or reagent

Поиск по фрагменту структуры


Дополнительные возможности – например, включение в структуру переменных или R-групп – позволяют расширить или сузить поисковый запрос. По умолчанию при поиске по фрагменту структуры находятся точно соответствующие запросу вещества и вещества с дополнительным замещением и (или) конденсацией циклов.

1. Изображение экрана для рисования структур позволяет открыть структурный редактор. Для рисования структур используются инструменты слева и внизу экрана. Имеется опция выбора функциональных групп **Shortcut Keys** и возможность задания переменных и (или) R-групп, а также блокировки – атомов от замещения, циклов – от конденсации.

После завершения создания структуры следует выбрать тип поиска **Substructure search** (по умолчанию).



Рекомендации:

- Можно изменить размер окна, потянув его за нижний правый угол .
- Наведение курсора на кнопки позволяет увидеть названия и описания соответствующих инструментов; информация о выбранном инструменте выводится выше области рисования.
- Можно переключаться между редакторами структур, реакций и структур Маркуша с помощью опций **Drawing Editor**.
- Детальные инструкции по рисованию структур и использованию каждого инструмента содержится в **help**-файлах или **CAS Learning Solutions** (<http://www.cas.org/training/scifinder/>).

2. Перед проведением поиска можно модифицировать или далее уточнить запрос, выбрав:

- изменение типа поиска **Search Type** – опции **Exact Structure** (поиск точной структуры), **Substructure** (поиск фрагмента структуры) и **Similarity** (поиск подобных структур);
- просмотр анализа точности – опция **Show precision analysis** (не доступна для поисков со стерео характеристиками или при поиске подобных структур);
- задание дополнительных критериев – опции **Characteristics, Classes, Studies**.

3. Поиск выполняется по команде **Search**.

Explore Substances

Chemical Structure Chemical Structure

Markush
Molecular Formula
Property **NEW**
Substance Identifier

Search

Click image to change structure or view detail

Search type: Exact Structure Substructure Similarity

Show precision analysis

Characteristic(s) Single component
 Commercially available
 Included in reference(s)

Class(es) Alloys Mixtures
 Coordination compounds Polymers
 Incompletely defined Organics, and others not listed

Studies Analytical Preparation
 Biological Reactant or reagent

4. Вывод вариантов ответов.

Если запрос включает стереохимическую информацию, эти результаты будут автоматически проанализированы.

5. Следует выбрать интересующий вариант и ввести команду **Get Substances**.

Stereo Candidates		Substances
<input checked="" type="checkbox"/>	Absolute stereo match	448
<input type="checkbox"/>	Absolute stereo mirror image	15
<input type="checkbox"/>	Relative stereo match	0
<input type="checkbox"/>	Stereo that doesn't match query	1
<input type="checkbox"/>	No stereo in answer structure	30

6. Оценка ответов.


Вещества будут отсортированы в порядке уменьшения релевантности. Можно выбрать другой порядок сортировки из опций ниспадающего списка **Sort by**.





Substances 448 Substances 0 Selected

Sort by: Relevance (New) [dropdown menu open]


- 1. Substance Detail 51860-53-8
- 3. Substance Detail 107672-20-8

Chemical structures and names are shown for each substance card.

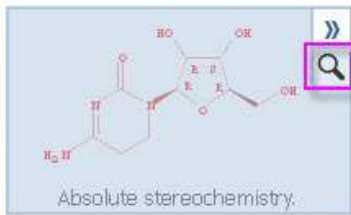
7. Для детального просмотра информации следует поместить курсор на найденное вещество и выбрать опцию *Quick View* .

Substances  Get References  Get Reactions  Tools  Send to SciPlanner

448 Substances 0 Selected Save Print Export

Select All Deselect All Sort by: Relevance (New) Answers per Page [15] 1 2 3 4 5 6 ... 30 View: 

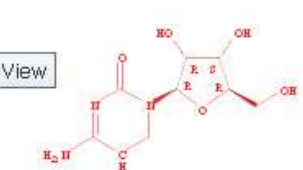
1. Substance Detail
51860-53-8



Absolute stereochemistry.

C₉ H₁₅ N₃ O₅
Cytidine, 5,6-dihydro- (6CI,9CI)


2. Substance Detail
107672-19-5



Absolute stereochemistry.


C₉ H₁₄ N₃ O₅
5-Pyrimidinyl, 4-amino-1,2,5,6-tetrahydro-2-oxo-1-β-D-ribofuranosyl- (9CI)

3. Substance Detail
107672-20-8



Absolute stereochemistry.

C₉ H₁₄ N₃ O₅
4-Pyrimidinyl, 6-amino-2,3,4,5-tetrahydro-2-oxo-3-β-D-ribofuranosyl- (9CI)

Quick View 

CAS Registry Number: 51860-53-8
Formula: C₉ H₁₅ N₃ O₅
CA Index Name: Cytidine, 5,6-dihydro- (6CI,9CI)

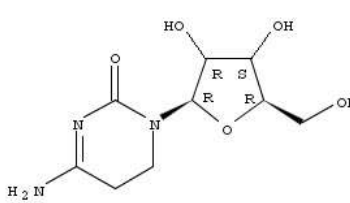
Other Names
5,6-Dihydrocytidine

Number of References
~6

Document Types
Journal


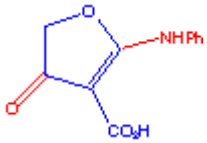

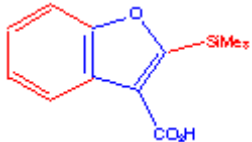

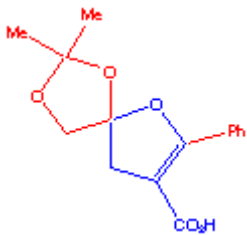
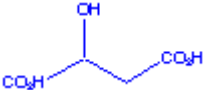
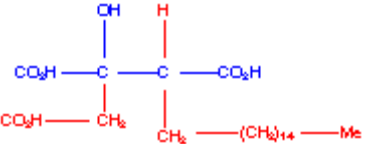

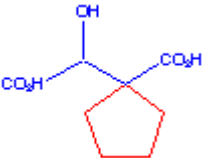

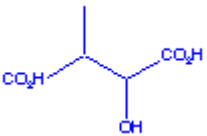
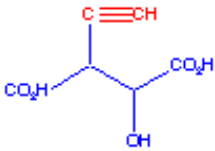

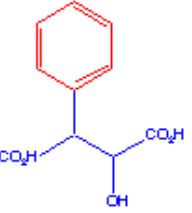
Properties
Predicted

Commercial Sources
Not Available



Absolute stereochemistry.

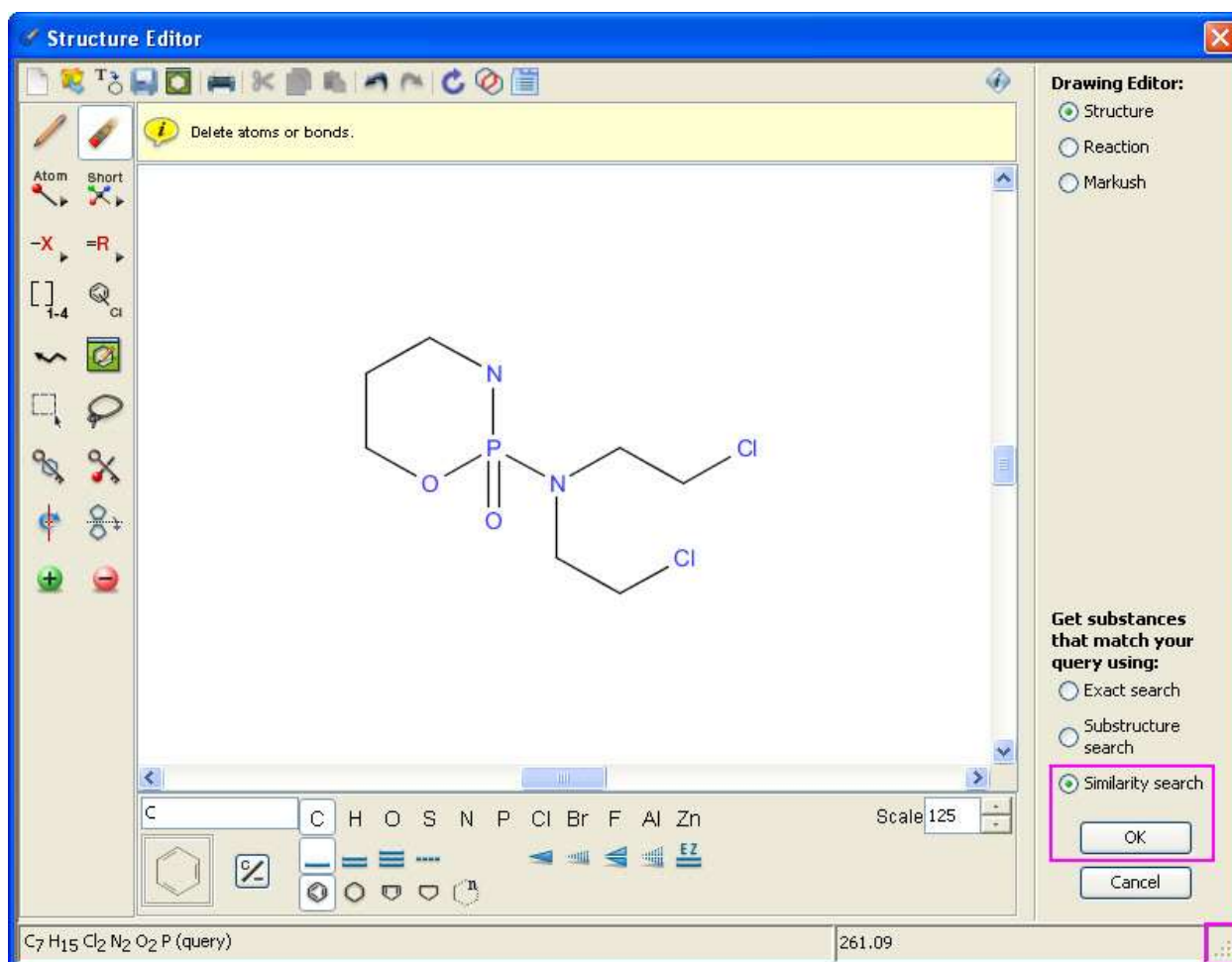
Некоторые возможности, полезные при поиске по фрагменту структуры

Структура содержит	Будет найдено	Возможности
<p>Цикл</p> 	<p>Замещение по атомам цикла</p> 	<p>Блокировка замещения на отдельных атомах</p> 
	<p>Конденсация с другими циклами</p> 	<p>Блокировка конденсации с другими циклами</p> 
		
<p>Цепь</p> 	<p>Замещение по атомам цепи</p> 	<p>Блокировка замещения на отдельных атомах</p> 
	<p>Атомы цепи входят в цикл</p> 	
	<p>Вся цепь входит в цикл</p> 	
<p>Незамещенный терминальный атом</p> 	<p>Замещение по такому терминальному атому</p> 	<p>Блокировка замещения на терминальном атоме</p> 
		


Поиск структурно-подобных веществ

При этом типе поиска используется алгоритм Танимото (Tanimoto) – алгоритм сравнения веществ в базе данных со структурным запросом. Он дополняет поиски *Exact Structure* и *Substructure*, так как может дать ответы, не являющиеся ни точными структурами, ни фрагментами структур.

1. Открытие структурного редактора.
2. Для рисования структур используются инструменты слева и внизу экрана. Также имеется опция выбора функциональных групп *Shortcut Keys*.
3. Завершив создание структуры, следует задать тип поиска **Similarity search**.



Рекомендации:

- Можно изменить размер окна структурного редактора, потянув его за нижний правый угол .
- Наведение курсора на кнопки позволяет увидеть названия и описания соответствующих инструментов; информация о выбранном инструменте выводится выше области рисования на желтом фоне.
- Детальные инструкции по рисованию структур и использованию каждого инструмента содержится в *help-файлах* или *CAS Learning Solutions* (<http://www.cas.org/training/scifinder/>).

Ограничения:

Поиски структурного подобия нельзя провести для структур, содержащих:

- R-группы, переменные или повторяющиеся группы, переменные положения замещения;
- несколько фрагментов;
- стереосвязи.

Структура загружается в окно поиска *Chemical Structure*.

4. Перед проведением поиска можно модифицировать или уточнить поиск, выбрав:

- изменение типа поиска – опции *Exact Structure* (поиск точной структуры), *Substructure* (поиск фрагмента структуры) и *Similarity* (поиск подобных структур);
- просмотр анализа точности – опция *Show precision analysis* (не доступна для поисков со стерео характеристиками или при поиске подобных структур);
- задание дополнительных критериев – опции *Characteristics*, *Classes*, *Studies* для дальнейшего уточнения поиска.

5. Поиск выполняется по команде *Search*.

Explore Substances

Chemical Structure Chemical Structure ⓘ

Markush
Molecular Formula
Property **NEW**
Substance Identifier

ClCCN(CCCl)P(=O)(OCC1CCOCC1)CC1

Click image to change structure or view detail

Search type: ⓘ

- Exact Structure
- Substructure
- Similarity

Show precision analysis

Characteristic(s)

- Single component
- Commercially available
- Included in reference(s)

Class(es) ⓘ

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

Studies ⓘ

- Analytical
- Biological
- Preparation
- Reactant or reagent

6. Получение набора веществ осуществляется по команде **Get Substances**. Вещества группируются по «показателям подобия» – более высокие показатели полнее соответствуют структуре в запросе.

Similarity Candidates

9 Candidates 4 Selected

Select All Deselect All

Similarity Candidates	Substances
<input type="checkbox"/> ≥ 99 (most similar)	254
<input checked="" type="checkbox"/> 95-98	5
<input checked="" type="checkbox"/> 90-94	14
<input checked="" type="checkbox"/> 85-89	30
<input checked="" type="checkbox"/> 80-84	39
<input type="checkbox"/> 75-79	108
<input type="checkbox"/> 70-74	112
<input type="checkbox"/> 65-69	198
<input type="checkbox"/> 0-64 (least similar)	320

Get Substances

7. Оценка ответов.

Значение показателя подобия **Score** выводится справа от регистрационного номера CAS вещества. Вещества отсортированы в порядке уменьшения показателя. Для изменения этого порядка следует выбрать другие опции в ниспадающем списке **Sort by**.

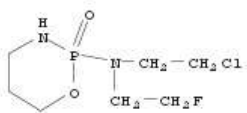
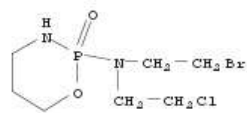
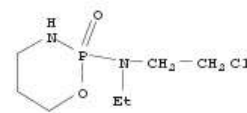
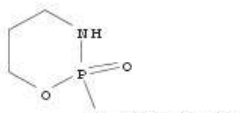
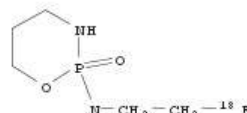
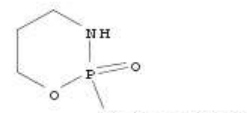
88 Substances 0 Selected

Select All Deselect All

Sort by: Similarity Score

Answers per Page [15] 1 2 3 4 5 6

View: [Icons]

<input type="checkbox"/> 1. Substance Detail 5001-29-6  C₇ H₁₅ Cl F N₂ O₂ P 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N-(2-chloroethyl)-N-(2-fluoroethyl) tetrahydro-, 2-oxide Score: 95	<input type="checkbox"/> 2. Substance Detail 13036-62-9  C₇ H₁₅ Br Cl N₂ O₂ P 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N-(2-bromoethyl)-N-(2-chloroethyl) tetrahydro-, 2-oxide Score: 95	<input type="checkbox"/> 3. Substance Detail 50650-73-2  C₇ H₁₆ Cl N₂ O₂ P 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N-(2-chloroethyl)-N-ethyltetrahydro-, 2-oxide Score: 95
<input type="checkbox"/> 4. Substance Detail 863331-87-7  C₇ H₁₅ Cl I N₂ O₂ P 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N-(2-chloroethyl)tetrahydro-N-(2- iodoethyl)-, 2-oxide Score: 95	<input type="checkbox"/> 5. Substance Detail 891203-08-0  C₇ H₁₅ Cl F N₂ O₂ P 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N-(2-chloroethyl)-N-[2-(fluoro-18F) ethyl]tetrahydro-, 2-oxide Score: 95	<input type="checkbox"/> 6. Substance Detail 1348384-36-0  C₆ H₁₃ Cl₂ N₂ O₂ P 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N-(2-chloroethyl)-N-(chloromethyl) tetrahydro-, 2-oxide Score: 94

Анализ набора веществ

Опция *Analyze* дает возможность просмотра, изучения и оценки набора веществ с использованием таких критериев, как показатели биологической активности (*Bioactivity indicators* и *Target indicators*), коммерческая доступность, присутствующие элементы, известные реакции, роли веществ.

Вывод результатов

При выводе набора ответов вещества автоматически анализируются по ролям в закладке **Analysis** (см. ниже другие категории анализа). Первые десять результатов анализа автоматически выводятся справа от веществ вместе с количеством релевантных ответов. Для вывода конкретных веществ следует активировать соответствующий результат анализа. Исходный набор ответов при этом остается неизменным.

1. Для просмотра дополнительных опций анализа используется команда **Show More** (в примере показан анализ по роли вещества *Substance Role*).

The screenshot displays a software interface for chemical analysis. The main window is titled "Substances" and shows a list of 254 substances. Two substance detail panels are visible:

- 1. Substance Detail 50-18-0**: Shows the chemical structure of 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N,N-bis(2-chloroethyl) tetrahydro-, 2-oxide. The structure is a six-membered ring containing one nitrogen and one oxygen atom, with a phosphorus atom double-bonded to an oxygen and single-bonded to the ring nitrogen. Two N-ethyl groups are attached to the ring nitrogen.
- 2. Substance Detail 6055-19-2 (Component: 50-18-0)**: Shows the same chemical structure as above, but with a water molecule (H₂O) listed below it, indicating a hydrate form.

Below each structure, the chemical formula and name are provided. The analysis sidebar on the right is titled "Analysis" and shows a table of results for "Substance Role". The table lists various categories and their corresponding counts:

Category	Count
Biological Study	222
Uses	210
Preparation	189
Properties	10
Process	7
Reactant or Reagent	7
Analytical Study	5
Formation, Nonpreparative	2
Occurrence	2
Miscellaneous	1

A "Show More" button is highlighted at the bottom of the sidebar.

2. Для анализа по другим критериям следует выбрать соответствующую опцию из ниспадающего меню, например, для вывода веществ с известными реакциями – опцию **Reaction Availability**.

Опция	Информация
Bioactivity Indicators Показатели биологической активности	Типы биологической активности, сопоставленные веществам
Commercial Availability Коммерческая доступность	Доступность из коммерческих источников
Elements Элементы	Химические элементы, присутствующие в наборе веществ
Reaction Availability Известные реакции	Ссылки на реакции с участием веществ
Substance Role Роль вещества	Роль, использование или тип исследования, с которыми связаны вещества
Target Indicators Показатели мишеней	Отношения между веществами и белками, энзимами или другими мишенями

Для вывода веществ, связанных одновременно с несколькими критериями анализа, следует выбрать команду **Show More**; после выбора интересующих вариантов – команду **Apply**.

Рекомендации:

Для задания порядка вывода результатов анализа следует использовать опции ниспадающего списка сортировки **Sort by**:

- **Frequency** (вариант вывода по умолчанию) – будут показаны 500 верхних результатов
- **Natural Order** – будут показаны все результаты в алфавитно-цифровом порядке.

Вещества выводятся в соответствии с заданными критериями анализа, что отмечается в сообщении на желтом фоне. Исходный набор ответов остается неизменным.

Для вывода анализируемого набора веществ используется команда **Keep Analysis**, для возвращения к исходному набору ответов – команда **Clear Analysis**.

The screenshot displays a software interface for chemical analysis. The top menu includes 'Substances', 'Get References', 'Get Reactions', 'Tools', and 'Send to SciPlanner'. A status bar indicates '254 Substances' and '0 Selected'. A yellow banner states: '223 substances with the Substance Roles: Analytical Study, Biological Study are displayed'. Below this, there are buttons for 'Keep Analysis' and 'Clear Analysis'. The 'Sort by' dropdown is set to 'Relevance (New)'. The main area shows two substance detail panels. The first panel, labeled '1. Substance Detail 50-18-0', shows the chemical structure of 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N,N-bis(2-chloroethyl) tetrahydro-, 2-oxide. The second panel, labeled '2. Substance Detail 6055-19-2 (Component: 50-18-0)', shows the same structure plus a water molecule (H₂O). On the right, an 'Analysis' sidebar shows a table of results for 'Biological Study' and 'Analytical Study'.

Substance Role	Count
Biological Study	222
Uses	210
Preparation	189
Properties	10
Process	7
Reactant or Reagent	7
Analytical Study	5
Formation, Nonpreparative	2
Occurrence	2
Miscellaneous	1

Уточнение набора ответов веществ

Для просмотра, изучения и оценки набора веществ имеется возможность уточнения ответов, помогающая отобрать наиболее релевантные соединения с использованием дополнительных критериев.

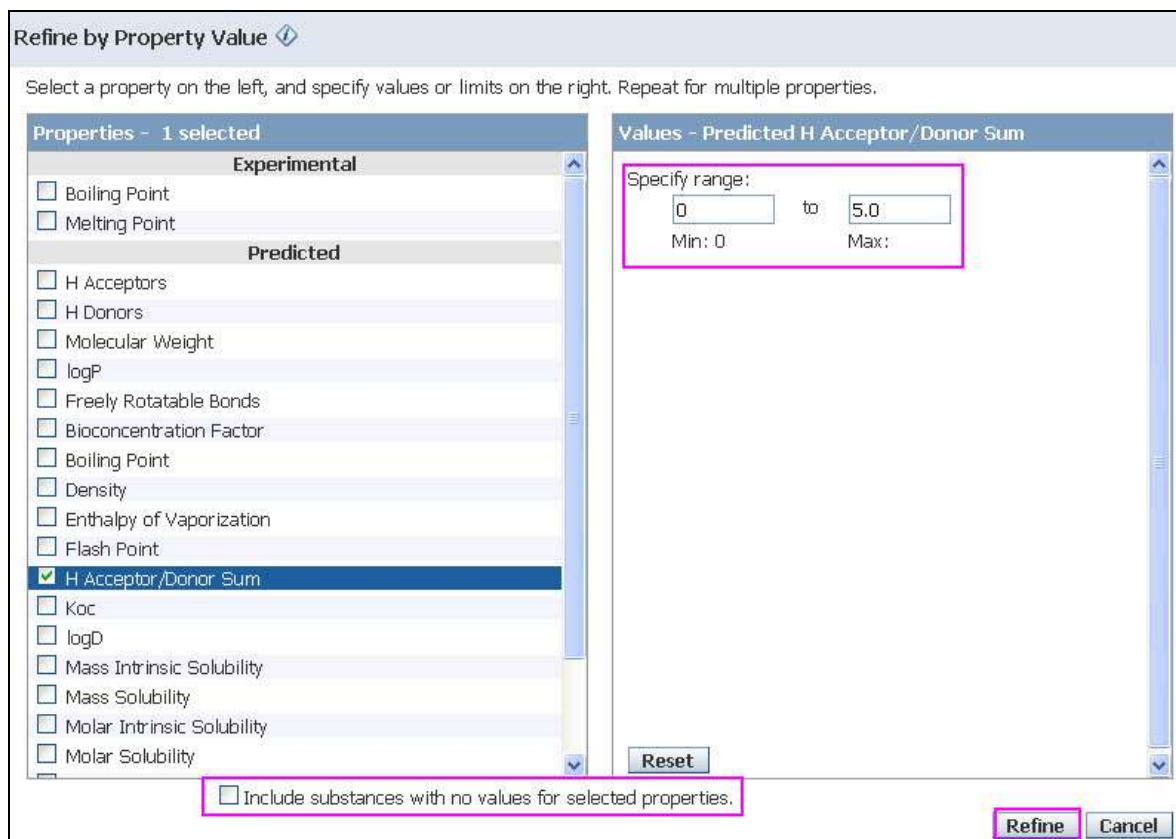
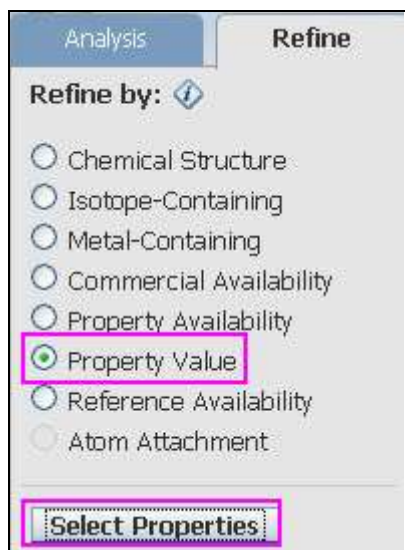
1. Для выбора критериев уточнения набора ответов используется закладка **Refine** справа от выведенных веществ.

The screenshot shows a web interface for a chemical database. At the top, there are navigation tabs: 'Substances', 'Get References', 'Get Reactions', 'Tools', and 'Send to SciPlanner'. Below this, there are search and sorting options: '254 Substances', 'Selected', 'Sort by: Relevance (New)', and 'Answers per Page [15]'. The main content area displays six substance detail cards, each with a chemical structure, a name, and a CAS number. The 'Refine' sidebar on the right allows users to filter results based on various criteria: Chemical Structure, Isotope-Containing, Metal-Containing, Commercial Availability, Property Availability, Property Value, Reference Availability, and Atom Attachment. There is also a section for 'Chemical Structure' with a search type dropdown set to 'Exact Structure'. At the bottom of the sidebar, there are checkboxes for 'Only retrieve substances that:' followed by options like 'Have references', 'Are commercially available', 'Are a single component', 'Are in specific substance classes', and 'Are in specific types of studies'.

Уточнение можно применять многократно с помощью любой комбинации критериев (опций).

Опция	Для идентификации веществ, имеющих:
Chemical Structure Химическая структура	Дополнительную или особую структурную компоненту
Isotope-Containing Наличие изотопа	Изотопные метки
Metal-Containing Наличие металла	Один или несколько металлов
Commercial Availability Коммерческая доступность	Коммерческую доступность
Property Availability Доступность свойств	Экспериментальные или расчетные свойства
Property Value Значение свойства	Конкретные значения экспериментальных или расчетных свойств
Reference Availability Наличие ссылок	Журнальные или патентные ссылки
Atom Attachment Присоединенный атом	Заместитель в конкретном положении структуры

2. При выборе критерия уточнения следует ввести требуемую информацию. Например, если выбрана опция **Property Value**, для ввода требуемых значений конкретного свойства (свойств) используется команда **Select Properties**.



3. По команде **Refine** в набор ответов будут включены только вещества, отвечающие выбранным критериям.

Рекомендации:

В случае веществ, для которых заданное свойство не представлено, или представлено, но его значение не сообщается, используйте опцию:

Include substances with no values for selected properties.

4. Оценка ответов.

5. Для возврата в исходный набор ответов используется **навигация** вверху страницы.

The screenshot shows a web interface for a chemical database. At the top, there is a search bar with the text "Chemical Structure exact > substances (254) > refine 'property value' (3)". Below the search bar, there are navigation buttons: "Substances", "Get References", "Get Reactions", "Tools", and "Send to SciPlanner". The main content area displays three search results, each with a chemical structure and associated data.

1. Substance Detail 50-18-0
~22139
CCN(CCCl)P(=O)(O)OCC1OCCO1
C7 H15 Cl2 N2 O2 P
2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N,N-bis(2-chloroethyl)tetrahydro-, 2-oxide
Spectra
Experimental Properties

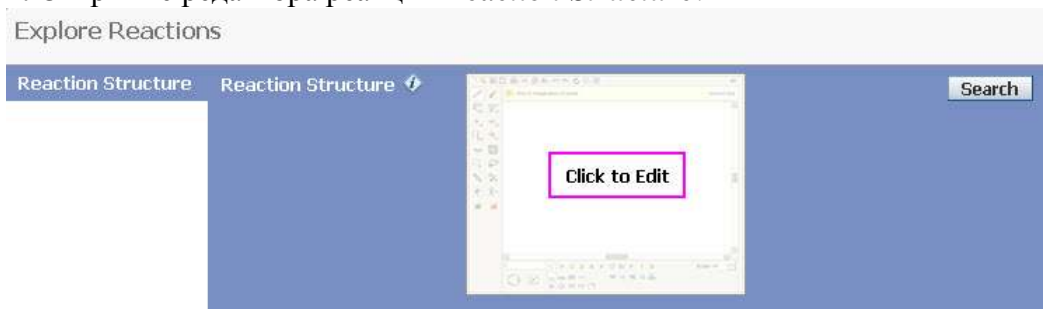
2. Substance Detail 60007-96-7
~38
CCN(CCCl)P(=O)(O)OCC1OCCO1
Absolute stereochemistry.
C7 H15 Cl2 N2 O2 P
2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N,N-bis(2-chloroethyl)tetrahydro-, 2-oxide, (2S)-
Experimental Properties

3. Substance Detail 60030-72-0
~39
CCN(CCCl)P(=O)(O)OCC1OCCO1
Absolute stereochemistry.
C7 H15 Cl2 N2 O2 P
2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N,N-bis(2-chloroethyl)tetrahydro-, 2-oxide, (2R)-
Experimental Properties

Поиск информации по реакциям


Для нахождения информации о химических реакциях используется закладка *Explore Reactions*. В поиске возможно: объединение структурных и функциональных групп; назначение ролей участникам реакции; использование всех характеристик структурных фрагментов – таких как разрешение (запрещение) дополнительного замещения и (или) конденсации циклов; анализ результатов по растворителю, количеству стадий и другим характеристикам реакции.

1. Открытие редактора реакций *Reaction Structure*:



2. Инструменты подготовки запроса по реакциям включают: задание ролей участников реакции; задание соответствия (мэпирование) атомов реагентов и продуктов; задание фрагментов молекул с меняющимися в реакции связями; включение в запрос функциональных групп.

Рекомендации:

Можно изменить размер экрана, потянув его за нижний правый угол ; просмотреть названия и описания инструментов, указав курсором на соответствующую кнопку. При выборе инструмента выводится соответствующая информация (на желтом фоне).

3. Для назначения ролей участникам реакции используются инструменты \rightarrow или \rightarrow A B.

4. Выбор типа поиска:

Тип поиска	Если нужно
<i>Variable only at the specified positions</i> Заместители только в заданных положениях	Запретить замещения для всех атомов, кроме переменных и R-групп; запретить дополнительную конденсацию цикла
<i>Substructures of more complex structures</i> Фрагмент в более сложных структурах	Разрешить дополнительное замещение и конденсацию цикла

Reaction Editor

Draw or change atoms or bonds. Shortcut Keys

Atom Short

-X =R

1-4 Cl

alchc ketor aldet

\rightarrow A B

Structure

Reaction

Markush

Get reactions where the structure(s) are:

Variable only at the specified positions

Substructures of more complex structures

OK

Cancel

Formula not available

Возможности дальнейшего уточнения запроса в Scifinder:

Опция	Применяется для
Solvents Растворители	Ограничения избранным растворителем или группой растворителей
Non-participating Functional Group(s) Не участвующая в реакции функциональная группа (ы)	Блокирования изменения функциональной группы реактанта при его превращении в продукт
Number of Steps Количество стадий	Ограничения количества стадий реакции
Classification(s) Классификация (и)	Ограничения реакции определенным типом, например, <i>catalyzed</i> , <i>stereoselective</i> , т.д.
Source(s) Источник (и) публикации	Указания типа источника (ов)
Publication Year(s) Год (ы) публикации	Задания года публикации или интервала лет

При необходимости тип поиска, заданный в структурном редакторе, можно изменить с помощью опции **Search type**.

5. Поиск начинается по команде **Search**.

Explore Reactions

Reaction Structure Reaction Structure

Search

Nitro reactant → AMINES product

Click image to change structure or view detail

Search type: Allow variability only as specified Substructure

Solvent(s)

Non-participating Functional Group(s)

Number of Steps

 Examples: 1, 1-3, 1-, -3

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

Source(s) Any source Patents only Sources other than patents

Publication Year(s)

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

6. Оценка ответов.

По умолчанию наборы ответов по реакциям выводятся в порядке релевантности поисковому запросу, определяемым алгоритмом подобия Танимото (Tanimoto).

Рекомендации:

- Для сортировки ответов по другим критериям, например, по экспериментальной процедуре, количеству стадий, выходу продукта или году публикации используются опции ниспадающего списка **Sort by**;
- Для вывода только одной (или всех) реакций в ссылке, схем реакций (или схем одновременно с другой информацией) используются опции команды **Display**;
- Для просмотра деталей реакции (или уменьшения количества выводимой информации) используются опции **Overview** или **Experimental Procedure**.

The screenshot displays a web interface for chemical reactions. At the top, there are navigation buttons: 'Get References', 'Tools', and 'Send to SciPlanner'. Below this, a header indicates '220 Reactions' and '0 Selected'. A 'Sort by' dropdown menu is open, showing options: 'Relevance', 'Accession Number', 'Experimental Procedure', 'Number of Steps', 'Product Yield', and 'Publication Year'. To the right, there are buttons for 'Save', 'Print', and 'Export', along with a 'Display' menu showing icons for list, grid, and other views. The main content area shows two reaction entries. Each entry consists of a chemical structure (a benzene ring with a nitro group and a cyano group), a reaction arrow, and the product structure (a benzene ring with an amino group and a cyano group). The first reaction shows a yield of 86%, and the second shows a yield of 91%. Below each reaction, there are links for 'Overview' and 'Experimental Procedure'.

7. Для просмотра ссылки без выхода из набора реакций используется опция **Quick View**



220 Reactions 0 Selected Save Print Export

Select All Deselect All | Sort by: Relevance Answers per Page [15] 1 2 3 4 5 6 ... 15

Display:

1. View Reaction Detail [Link](#) [Similar Reactions](#)
Single Step *Hover over any structure for more options.*

▼ Overview

Steps/Stages	Notes
1.1 R:Cu, R':NH ₄ ⁺ •HCO ₂ ⁻ , S:(CH ₂ OH) ₂ , 9 h, 120°C	chemoselective, Cu nanoparticles used, scalable, Reactants: 1, Reagents: 2, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1

References

Highly Chemoselective Reduction of Aromatic Nitro Compounds by Copper Nanoparticles/Ammonium Formate
[Full Text](#)
 By Saha, Amit and Ranu, Brindaban
 From Journal of Organic Chemistry, 73(17), 6867-6870; 2008

▼ Experimental Procedure

JOC The Journal of Organic Chemistry General/Typical Procedure: **Representative Experimental Procedure for Reduction of Aromatic Nitro Compound (entry 2, Table 1).** A mixture of 3-nitrotoluene (137 mg, 1 mmol), Cu nanoparticles (191 mg, 3 mmol) in ethylene glycol (10 mL), and ammonium formate (315 mg, 5 mmol) was heated at 120 °C with stirring for 12 h (TLC) under argon. Copper particles were filtered off through a short plug of silica gel. The filtrate was extracted with ethyl acetate. Evaporation of solvent followed by column chromatography over basic alumina furnished 3-nitroaniline (86 mg, 80%) as a pale yellow oil. The spectroscopic data (IR, ¹H NMR, ¹³C NMR) of this compound are in good agreement with those reported.⁴⁹

Quick View X

Highly Chemoselective Reduction of Aromatic Nitro Compounds by Copper Nanoparticles/Ammonium Formate
[Full Text](#)
 By Saha, Amit; Ranu, Brindaban
 From Journal of Organic Chemistry (2008), 73(17), 6867-6870. | Language: English, Database: CAPLUS

Reference Images **Substance Images**

A highly chemoselective redn. of arom. nitro compds. to the corresponding amino compds. was achieved by a combination of copper nanoparticles and ammonium formate in ethylene glycol at 120°. The redns. are successfully carried out in presence of a wide variety of other reducible functional groups in the mol., such as Cl, I, OCH₂Ph, NHCH₂Ph, COR, COOR, and CN. The reactions are very clean and high yielding.

Анализ набора реакций

Средства анализа ИПС SciFinder® позволяют просмотреть, изучить и оценить набор реакций с помощью различных критериев (по катализаторам, авторам публикаций, типам источников и др.).

При выводе набора ответов результат анализа автоматически появляется на экране справа.

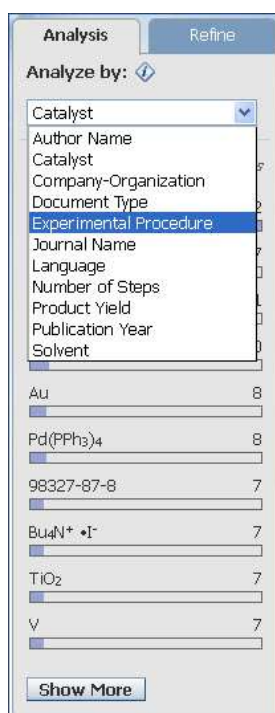
По умолчанию проводится анализ по катализатору реакции, и выводятся первые 10 результатов. Каждый результат представляет множество реакций (соответствующее количество приведено справа) из набора ответов.

При анализе не создается новый набор ответов – создается временный фокус текущего набора.

Reactions 423 Reactions 0 Selected
Get References Tools Send to SciPlanner
Select All Deselect All Sort by: Relevance Answers per Page [15] 1 2 3 4 5 6 ... 29
Deploy: [Icons]
1. View Reaction Detail Link Similar Reactions
Single Step Hover over any structure for more options:
O=[N+]([O-])c1ccc(Cl)cc1 >> Clc1ccc(N)cc1
99%
Overview
Steps/Stages
1.1 R: $\text{NH}_4\text{H}_2\text{O}$, C: $\text{Fe}(\text{OAc})_2$ (reaction product with Vulcan XC72R and 1,1), C: 1,10-Phenanthroline (reaction product with Vulcan XC72R and Ir), S: THF, 10 h, 100°C
Notes
solid-supported catalyst, green chemistry, chemoselective, Vulcan XC72R-supported $\text{Fe}(\text{OAc})_2$ -1,10-phenanthroline prepared by pyrolysis and used as catalyst, 99% selectivity, catalyst recyclable, Reactants: 1, Reagents: 1, Catalysts: 2, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1
References
Efficient and highly selective iron-catalyzed reduction of nitroarenes
By Jagadeesh, Rajenahally V. et al
From Chemical Communications (Cambridge, United Kingdom), 47(39), 10972-10974; 2011
Analysis Refine
Analyze by: [Dropdown]
Catalyst [Dropdown]
Click here to view only those reactions within the current answer set:
Pd 122
Pt 17
Ni 11
Pd(OAc)₂ 10
Au 8
Pd(PPh₃)₄ 8
9B327-87-8 7
Bu₄N⁺·Cl⁻ 7
TiCl₄ 7
V 7
Show More

1. Для просмотра дополнительных результатов анализа используется команда **Show More**.

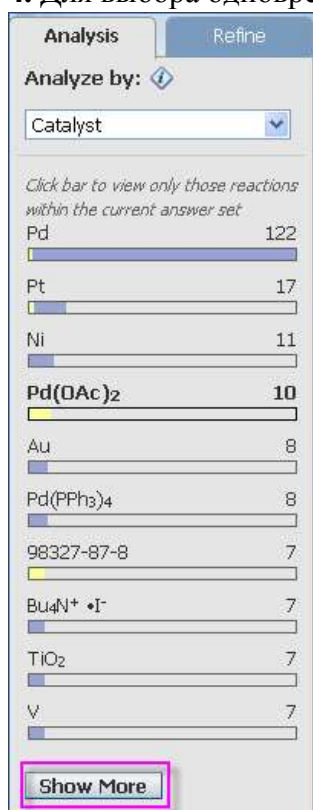
2. Для изменения категории анализа следует выбрать другие опции из ниспадающего меню *Analyze by*:



Опция	Идентифицирует
<i>Author Name</i>	Автора (ов) публикаций
<i>Catalyst</i>	Используемые в реакции катализаторы
<i>Company-Organization</i>	Организации авторов
<i>Document Type</i>	Тип публикации
<i>Experimental Procedure</i>	Детали эксперимента
<i>Journal Name</i>	Название журнала
<i>Language</i>	Язык публикации
<i>Number of Steps</i>	Количество стадий реакции
<i>Product Yield</i>	Выход продуктов реакций
<i>Publication Year</i>	Год публикации
<i>Solvent</i>	Используемые при проведении реакций растворители

3. Для вывода реакций следует активировать соответствующий результат (планка окрасится в желтый цвет). Если эти реакции входят также в другие наборы, соответствующие планки также станут желтыми. В примере 10 реакций включают катализатор $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ и входят во множество из 122 реакций, катализируемых Pd и (или) его производными.

4. Для выбора одновременно нескольких результатов используется команда **Show More**.



5. Для выбора интересующих вариантов применяется команда **Apply**.

6. Порядок сортировки результатов анализа определяется в ниспадающем меню **Sort by** с помощью опций:

- **Frequency** (по умолчанию) – вывод по частоте только первых 500 результатов
- **Natural Order** – вывод в алфавитно-цифровом порядке всех результатов.

The screenshot shows the 'Analysis - Catalyst' window with 77 items and 2 selected. The 'Sort by' dropdown is set to 'Frequency'. The list of catalysts is sorted by frequency, with 'Reactions not containing information for this analysis' at the top (195), followed by 'Pd' (122), 'Pt' (17), 'Ni' (11), 'Pd(OAc)₂' (10), 'Au' (8), 'Pd(PPh₃)₄' (8), '98327-87-8' (7), 'Bu₄N⁺ • I⁻' (7), and 'TiO₂' (7). The 'Apply' button is highlighted with a pink box.

Catalyst	Count
Reactions not containing information for this analysis	195
<input checked="" type="checkbox"/> Pd	122
<input type="checkbox"/> Pt	17
<input type="checkbox"/> Ni	11
<input checked="" type="checkbox"/> Pd(OAc) ₂	10
<input type="checkbox"/> Au	8
<input type="checkbox"/> Pd(PPh ₃) ₄	8
<input type="checkbox"/> 98327-87-8	7
<input type="checkbox"/> Bu ₄ N ⁺ • I ⁻	7
<input type="checkbox"/> TiO ₂	7

Будет выведен отфильтрованный по выбранным критериям набор ответов, о чем сообщается на желтом фоне.

7. Для создания нового набора ответов, содержащего только реакции из анализируемого набора, используется команда **Keep Analysis**.

8. Для возврата в исходный набор ответов используется команда **Clear Analysis**.

Информация по использованию команды **Send to SciPlanner** содержится в интерактивном пособии: **Plan a Synthesis Project** (<http://www.cas.org/etrain/scifinder/sciplanner.html>).

The screenshot displays the SciFinder interface. At the top, the 'Send to SciPlanner' button is highlighted with a pink box. Below it, a yellow banner indicates '131 reactions with the Catalysts Pd, Pd(OAc)2 are displayed', with 'Keep Analysis' and 'Clear Analysis' buttons. The main reaction area shows the reduction of 4-nitrophenol to 4-aminophenol with a 93% yield. Below the reaction, the 'Overview' section provides details on reagents, catalysts, solvents, and steps. The 'References' section lists a paper by Niu, Wujin et al. (2009). On the right, the 'Analysis' panel shows a bar chart of catalyst counts: Pd (122), Pt (17), Ni (11), Pd(OAc)2 (10), Au (8), Pd(PPh3)4 (8), 08327-87-8 (7), Bu4N+ +I- (7), TiO2 (7), and V (7).

Catalyst	Count
Pd	122
Pt	17
Ni	11
Pd(OAc) ₂	10
Au	8
Pd(PPh ₃) ₄	8
08327-87-8	7
Bu ₄ N ⁺ +I ⁻	7
TiO ₂	7
V	7

Уточнение набора реакций

Для просмотра, изучения и оценки реакций имеются возможности их уточнения, помогающие выбрать из набора наиболее релевантные реакции на основе заданных критериев.

1. Для выбора критериев уточнения набора используется закладка **Refine**.

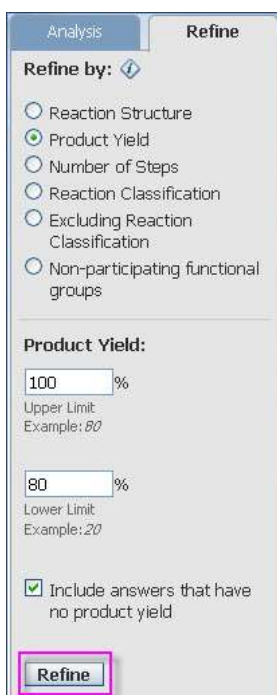
The screenshot shows a web interface for a chemical reaction database. The main area displays a reaction: 4-nitrophenol is reduced to 4-aminophenol with a 99% yield. Below the reaction is an 'Overview' section with 'Steps/Stages' and 'Notes'. The 'Notes' section describes the reaction as using a solid-supported catalyst (Vulcan XC72R-supported Fe(OAc)2-1,10-phenanthroline) for the efficient and highly selective iron-catalyzed reduction of nitroarenes. A 'References' section lists a paper by Jagadeesh, Rajenahally V. et al. from Chemical Communications (Cambridge, United Kingdom), 47(39), 10972-10974; 2011.

On the right side, there is a 'Refine' sidebar. It has a 'Refine by' dropdown menu and several radio button options: Reaction Structure, Product Yield, Number of Steps, Reaction Classification, Excluding Reaction Classification, and Non-participating functional groups. Below these options is a 'Reaction Structure' section with a small image of the reaction and a 'Refine' button.

Набор можно уточнять многократно при помощи любой комбинации следующих критериев:

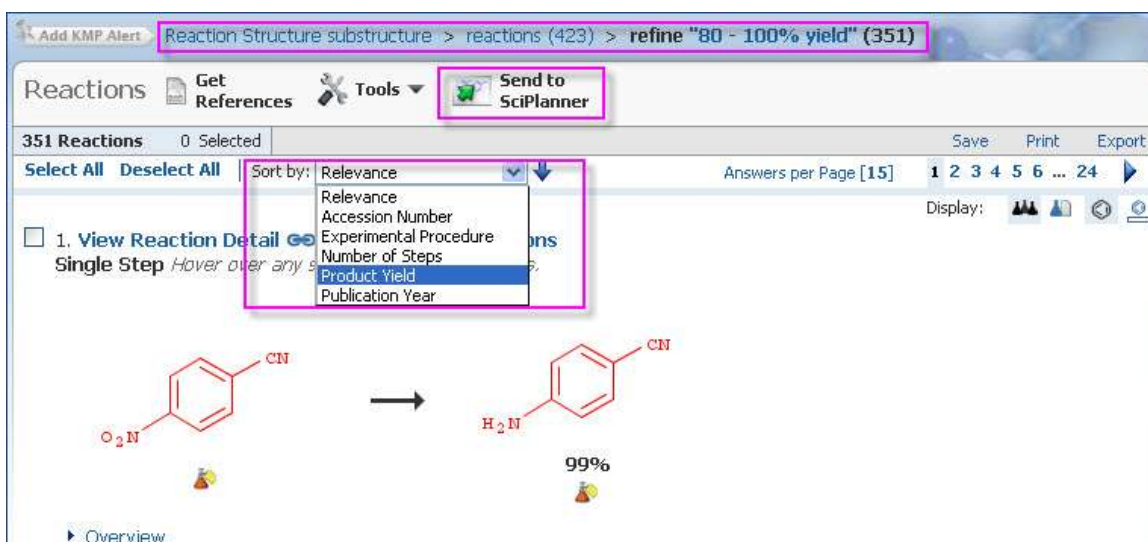
Критерий	Идентифицирует реакции, которые
Reaction Structure Структура участника реакции	Содержат дополнительный (специфический) структурный компонент с конкретной ролью
Product Yield Выход продукта	Имеют конкретный выход (интервал выходов)
Number of Steps Количество стадий реакции	Имеют конкретное количество (или численный интервал) стадий реакции
Reaction Classification Классификация реакции	Соответствуют определенной категории, например, <i>catalyzed</i> , <i>stereoselective</i> , т.д.
Excluding Reaction Classification Исключение классификации реакции	Не связаны с заданной классификацией
Non-Participating Functional Groups Не участвующие в реакции функциональные группы	Содержат одну или нескольких функциональных групп (или классов), не участвующих в реакции

2. При выборе критериев уточнения набора необходима их дальнейшая спецификация. Например, в опции **Product Yield** следует задать выход (интервал выходов) продуктов. Следует иметь в виду, что сведения о выходах представлены не для всех реакций.



3. По команде **Refine** новый набор ответов будет включать только реакции, отвечающие заданным критериям – остальные реакции будут удалены. Для возвращения к исходному набору ответов используйте **навигацию** вверх.

Отбор критериев для сортировки набора ответов производится из ниспадающего меню **Sort by**. В примере выбрана опция **Product Yield**.



Для организации результатов поиска используется команда **Send to SciPlanner**. Она позволяет легко объединять и визуализировать схемы реакций. Информация по использованию команды содержится в интерактивном пособии **Plan a Synthesis Project** (<http://www.cas.org/etrain/scifinder/sciplanner.html>).

Сравнительные характеристики SciFinder, Reaxys, SoS и WoS, определяющие области применения этих ресурсов

Характеристика	SciFinder	WoS	Reaxys	SoS
Общая	Доступ к 7 БД CAS	Доступ к БД Science Citation Index	Доступ к БД Beilstein, Gmelin и Patent Chemistry	Доступ к обзорам по методам органического синтеза
Кол-во библиографических записей	> 36 млн.	> 40 млн. ; 700 млн. цитируемых ссылок	> 4 млн.	–
Кол-во записей о веществах	> 66 млн.	–	> 20 млн.	–
Охват журналов	~ 9 тыс.	> 6.6 тыс.	~ 400 (исторически, охват был шире и включал патенты; до 1959 г. БД Beilstein полностью охватывала орг. химию)	–
Типы источников	Журналы, патенты, диссертации, отчеты, труды конференций, избранные книги, т.д.	Журналы, избранные труды конференций 1990+	Журналы и избранные патенты	Избранные журналы, книги и патенты
Временной охват	БД CA: 1907+; учтены некоторые более ранние источники	1965+	~ 1770+	–
Языковой охват	> 50 языков	В основном английский	В основном английский и немецкий; также французский, русский, др.	–
Типы поиска	Темы исслед.; хим. названия / синонимы; хим. структуры и их фрагменты; хим. реакции; свойства; рег. номера CAS; авторы / изобрет.; мол. формулы; номера патентов; т.д.	Ключевые слова; авторы; организации; ссылки; источник финансирования (funding agency); номер гранта; название публикации	Хим. структура и ее фрагмент; хим. реакция; хим. название / синоним; рег. номера CAS; мол. формулы; свойства; библиографические данные	Структуры / реакции; ключевые слова; авторы; просмотр содержания
Поиск по хим. структуре	+	–	+	+
Поиск по рег. номеру CAS	+	–	+ (для старых записей в БД Beilstein; новые записи в БД Beilstein и большинство записей в БД Gmelin их не содержат).	–
Поиск по хим. реакциям	+ (орг. / органомет. реакц. из БД CA 1985+; др. реакц. из разн. источников 1840+	–	+ (БД Beilstein, до 1959 полностью, затем частично; БД Gmelin, частично)	+ (> 265 тыс. реакц.)
Поиск спектров	+ (эксперим. ИК, УФ, ЯМР, МС NMR, MS; млн. рассчит. спектров ЯМР из ACD Labs)	–	Числ. данные и ссылки; без графики	–
Линки к полным текстам	+ для журналов и патентов	+	+	+
Автомат. уведомления	+ (опция Keep me posted)	+	+	–

Ресурсы сети Интернет

Химические ресурсы

1. Структурно-химическая БД Chemspider (Royal Society of Chemistry): <http://www.chemspider.com/>
2. CAS Common chemistry Substance Search: <http://www.commonchemistry.org/>
3. Organic Syntheses Website: <http://www.orgsyn.org/>
4. Chemical Synthesis Database: <http://www.chemsynthesis.com/>
5. ChemBioFinder: <http://chembiofinder.cambridgesoft.com/>
6. Organic Compounds Database: <http://www.colby.edu/chemistry/cmp/cmp.html>
7. MassBank: <http://www.massbank.jp/>
8. NIST Chemistry Webbook: <http://webbook.nist.gov/>
9. Integrated Spectral Data Base System: http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/direct_frame_top.cgi
10. C1-Catalyst Database: http://riodb.ibase.aist.go.jp/c1db/welcome_e.html

Патентные ресурсы

1. Патенты Австралии: <http://pericles.ipaustralia.gov.au/ols/auspat/>
2. Патенты Канады: <http://brevets-patents.ic.gc.ca/opic-cipo/cpd/eng/introduction.html>
3. Патенты Германии:
<http://depatisnet.dpma.de/DepatisNet/depatisnet?window=1&space=menu&content=index&action=recherche>
4. Патентные заявки Индии: <http://www.indianpatents.org.in/db/testmaina.asp>
5. Патенты Индии и других стран: <http://patinfo.nic.in/>
6. Патентная информационно-поисковая система Индии: <http://ipindia.nic.in/ipirs1/patentsearch.htm>
7. Платформа Espacenet (БД Worldwide – опубликованные заявки 90+ стран, БД EP-espacenet – полные тексты опубликованных европейских заявок, БД WIPO-espacenet – полные тексты опубликованных заявок Patent Cooperation Treaty):
http://worldwide.espacenet.com/quickSearch?locale=en_EP
8. Российские патентные документы на русском и английском языках (БД рефератов Федерального института промышленной собственности):
<http://www.fips.ru/cdfi/Fips2009.dll/DB>
9. Поисковая машина FreePatentsOnline (патентные документы European Patent Office, World Intellectual Property Organization / Patent Cooperation Treaty, США, ФРГ, Японии): <http://www.freepatentsonline.com/search.html>
10. Патентный поиск Google: <http://www.google.com/patents>
11. Патенты Венгрии: <http://epub.hpo.hu/e-kutatas/?lang=EN#>
12. IP.com Intellectual Property Library (международные патентные публикации):
<http://ip.com/search.html>
13. IP.com Prior Art (технические раскрытия компаний): <http://priorartdatabase.com/>
14. Патенты Израиля: <http://www.ilpatsearch.justice.gov.il/UI/MainPage.aspx>
15. IPDL (поисковый интерфейс на английском языке патентного ведомства Японии):
http://www.ipdl.inpit.go.jp/homepg_e.ipdl
16. БД патентов и заявок, опубликованных в Сингапуре: <http://www.epatents.gov.sg/PE/>
17. Patent Lens (полные тексты патентов European Patent Office, World Intellectual Property Organization, Австралии, США): <http://www.patentlens.net/patentlens/structured.html>
18. Patentscope (национальные и международные патентные коллекции):
<http://patentscope.wipo.int/search/en/search.jsf>

19. Патенты Филиппин: <http://patents.ipophil.gov.ph/patsearch2/>
20. PriorSmart (патенты национальных и международных патентных ведомств): <http://www.priorsmart.com/>
21. Поиск по патентам и заявкам Швеции и European Patent Office: <http://www.prv.se/spd/search?lang=en>
22. Поиск патентов Китая (машинный перевод с китайского): http://59.151.93.237/sipo_EN/search/tabSearch.do?method=init
23. SumoBrain (полные тексты патентов и заявки European Patent Office, World Intellectual Property Organization, США, Японии): <http://www.sumobrain.com/search.html>
24. Ipsum (служба проверки статуса патентных заявок Великобритании): <http://www.ipo.gov.uk/types/patent/p-os/p-find.htm>
25. Патенты США: <http://patft.uspto.gov/>
26. Патентные заявки США: <http://appft.uspto.gov/>

Краткий словарь патентных терминов

Вид патентного документа. Национальные патентные законодательства некоторых стран допускают многократную публикацию описания одного и того же изобретения в виде патентного документа: нерассмотренной заявки, рассмотренной заявки и собственно патента. Кроме того, в ряде стран существуют патентные документы с разным правовым статусом. Например, в России – авторские свидетельства, дополнительные авторские свидетельства, патенты, дополнительные патенты, аннулированные патенты. В США – патенты; переизданные патенты; переуступленные патенты; патенты, подвергшиеся повторной экспертизе; продленные патенты; восстановленные патенты; патенты с истекшим сроком действия.

Выделенная заявка (*выделенная продолжающая заявка*). В США – это патентная заявка, составленная на основании материалов первоначальной заявки, поданной с нарушением принципа единства изобретения. Нарушение принципа единства приводит к необходимости выделить из нескольких заявленных предметов изобретения один и оформить заявку, удовлетворяющую этому принципу, с сохранением приоритета первоначальной заявки. Последняя продолжает рассматриваться без учета притязаний, содержащихся в выделенной заявке.

Выставочный приоритет. Приоритет изобретения, полезной модели, промышленного образца, товарного знака, устанавливаемый по дате помещения объекта на официальной или официально признанной международной выставке.

Договор о патентной кооперации (Patent Cooperation Treaty – PCT). Межправительственное соглашение в области охраны изобретений, разрешающее изобретателю вместо подачи заявок в странах-участниках подать только международную заявку в т. н. получающее ведомство, причем эта заявка будет юридически эквивалентна национальным заявкам всех указанных в ней государств (см. *Указанные государства*). Соответствующие органы PCT проводят международный поиск, международную предварительную экспертизу и затем рассылают заявку (с приложением отчета о международном поиске) в патентные ведомства стран-участников, где она приобретает статус национального (регионального) охранного документа. Договор был подписан в Вашингтоне, США, 19 июня 1970 г. и вступил в силу 24 января 1978 г. СССР подписал договор 29 марта 1978 г.

Дополнительный патент. Выдается на дополнение, внесенное в объект изобретения. После прекращения действия основного патента превращается в основной патент.

Европейская патентная конвенция. Соглашение между странами-участниками Европейской патентной организации (European Patent Office – ЕРО). Разрешает

изобретателю вместо подачи заявок в странах-участниках подать только заявку в ЕРО, указав в ней те страны-участники, в которых он испрашивает охрану изобретения (см. *Указанные государства*). После рассмотрения заявки ЕРО выдает изобретателю патент, действующий на территории всех странах-участниках. Россия не участвует в Европейской патентной конвенции – она не может быть указана в заявке на европейский патент и решения ЕРО не распространяются на ее территорию. В то же время российские заявители могут подавать европейские заявки и получать европейские патенты.

Европейская патентная организация (European Patent Office – ЕРО). Международная организация, задачей которой является выдача европейских патентов. ЕРО создана на основании Европейской патентной конвенции, подписанной 5 октября 1973 г. и вступившей в силу одновременно с РСТ (см. *Договор о патентной кооперации*).

Единство изобретения. Заявка на изобретение должна относиться к одному изобретению или нескольким, но связанным между собой так, что они образуют единый изобретательский замысел.

Зависимые патентные документы. Это родственные патентные документы, происходящие от основного патентного документа как изобретательской основы: продолжающие и частично продолжающие, выделенные, переизданные.

Конвенционный приоритет. Устанавливается по дате подачи первой заявки в стране-участнике парижской патентной конвенции, если заявка на изобретение поступила в получающее ведомство в течение 12 месяцев с указанной даты (при определенных обстоятельствах этот срок может быть продлен на 2 месяца).

Малый патент. Патент, выданный на промышленный образец.

Международная заявка. Синоним заявки РСТ (см. *Договор о патентной кооперации*).

Множественный приоритет. Приоритет патентного документа, основанный на нескольких характеристиках – несколько дат приоритета, номеров приоритетных заявок, стран приоритета. Множественный приоритет возникает в процессе зарубежного патентования, когда несколько заявок объединяются в одну.

Основной патентный документ. Первый опубликованный документ среди членов патентного семейства.

Парижская конвенция об охране промышленной собственности. Межправительственное соглашение, устанавливающее, в частности, право конвенционного приоритета. Первоначально конвенция была подписана в 1883 г., затем многократно пересматривалась. СССР присоединился к конвенции в 1965 г.

Патент. Охраняемый документ, выдаваемый на изобретение (полезную модель, промышленный образец) и удостоверяющий исключительное право патентовладельца на использование объекта охраны в течение срока действия охранного документа. Различают национальные и региональные патенты. К национальным относятся патенты, выданные национальными патентными ведомствами. К региональным – европейские патенты (патенты ЕРО) и патенты Африканской организации интеллектуальной собственности (ОАРИ). В соответствии с РСТ, патентами называются собственно патенты, авторские свидетельства, свидетельства о полезности, полезные модели, дополнительные патенты, дополнительные авторские свидетельства, дополнительные свидетельства о полезности.

Патентная чистота. Юридическое свойство объекта техники, заключающееся в том, что он может быть свободно использован в данной стране без опасности нарушения действующих на ее территории охранных документов.

Патентное семейство. Совокупность всех патентных документов, выданных на одно изобретение. В среднем в одно патентное семейство входит 4-5 документов, отдельные семейства могут содержать несколько десятков документов. В БД Inpadoc в состав патентных семейств включаются т. н. псевдодокumentos, поэтому число членов семейства может достигать 40-50.

Патентные документы. Опубликованные охранные документы (и извлечения из них), содержащие сведения о результатах научно-технической деятельности, заявленных или признанных открытиями, изобретениями, полезными моделями, промышленными образцами, а также сведения о правах изобретателей, патентовладельцев, владельцев дипломов на открытия и свидетельств о регистрации промышленных образцов и полезных моделей. Таким образом, под патентными документами понимаются, прежде всего, официальные публикации патентных ведомств: официальные патентные бюллетени; а также описания: к заявкам на изобретения (как прошедшим, так и не прошедшим предварительную экспертизу); изобретений к авторским свидетельствам или патентам; полезных моделей; промышленных образцов; и официальные публикации об изменениях правового статуса (состояния правовой охраны); официальные патентные указатели. К патентным документам могут быть условно отнесены и т. н. защитные публикации, помещаемые в официальных патентных бюллетенях (например, в США), а также сведения о товарных знаках и знаках обслуживания, которые тоже являются объектами промышленной собственности.

Патентные документы-аналоги. Это – опубликованные охранные документы, выданные в разных странах на одно и то же изобретение с испрашиванием конвенционного приоритета согласно парижской конвенции или без него. Патентные документы-аналоги, выданные в соответствии с конвенционным приоритетом, содержат общие приоритетные данные и могут быть выявлены при автоматизированном поиске путем сравнения этих данных на совпадение. Документы, выданные без испрашивания конвенционного приоритета, преимущественно по заявкам, поданным по истечении года после даты приоритета, не содержат ссылки на общий приоритет и поэтому не могут быть выявлены формальными методами. Фирма Derwent идентифицирует такие документы посредством ручного поиска и анализа полных текстов описаний.

Первоначальная (родовая) заявка. Правильно оформленная национальная заявка на объект промышленной собственности, с даты подачи которой отсчитывается приоритет.

Переизданный (заменяющий) патент. В США – это переиздание ранее изданного (первоначального) патента, в котором устранены дефекты описания или формулы изобретения. Расширение объема притязаний в результате замены патента возможно только по заявке, поданной в течение 2 лет после выдачи первоначального патента, при этом сущность изобретения должна оставаться неизменной. Переизданному патенту присваивается новый номер, перед которым ставится индекс Re (означающий reissued – переизданный), например Re 28635. Срок действия такого патента тот же, что у первоначального патента.

Полезная модель. Это – новое конструктивное техническое решение, пригодное для промышленного применения. Полезные модели охраняются законом в Бразилии, Испании, Италии, Китае, Польше, Португалии, России, ФРГ, Японии, а также в странах, входящих в ОАРИ. Обычно полезные модели – это механические устройства и аппараты, однако в ФРГ сфера их применения включает также электрические устройства, промышленные химические продукты и технологии их получения. Чистые химические вещества и лекарственные препараты не охватываются полезными моделями ФРГ, но технологические приемы, связанные со спецификой их получения и применения, могут быть зарегистрированы как полезные модели. В ФРГ заявку на полезную модель можно подавать одновременно с заявкой на патент и германские фирмы все чаще используют полезные модели в качестве первой стадии патентных публикаций. Они являются таким же важным источником новой технической информации, как конвенционные патентные документы-аналоги, и могут применяться для оспаривания заявок на патент.

Получающее ведомство. Национальное ведомство или межправительственная организация, в которую подается международная заявка.

Правовой статус патентных документов. Отражает изменения, происходящие с патентным документом после публикации принятой заявки, выдачи авторского

свидетельства или патента. К ним можно отнести, например, изменение формулы (предмета) изобретения, переуступку прав, предоставление лицензии, аннулирование патента из-за неуплаты пошлины или представленных доказательств, что патент выдан ошибочно. В ряде стран допускается продление срока действия и восстановление действия аннулированного патента. Сведения об изменениях правового статуса патентных документов, в том числе о прекращении действия патентов, регулярно публикуются в официальных патентных бюллетенях.

Продолжающая заявка (полностью продолжающая заявка). В США – это заявка на изобретение, отличающаяся от первоначальной заявки, находящейся на рассмотрении, только отсутствием дефектов изложения. С подачей продолжающей заявки рассмотрение первоначальной заявки прекращается, а за продолжающей заявкой сохраняется приоритет первоначальной заявки.

Промышленный образец. Это – художественно-конструкторское решение внешнего вида изделия (устройства) бытового или производственно-технического назначения, обладающее новизной и оригинальностью, удовлетворяющее современным требованиям технической эстетики и осуществимое промышленным путем.

Противопоставленные (отсылочные) патентные документы. Это – патентные документы, которые эксперт, рассматривавший поданную заявку, или сам изобретатель идентифицировали как родственные документы или прототипы. Список таких документов приводится в отчете о поиске.

Псевдодокументы. Это – заявки РСТ и региональные патентные документы, действующие на территории данного государства, но не зарегистрированные в его патентном ведомстве.

Родственные патентные документы. Это – патентные документы, связанные общей изобретательской основой. В это понятие входят все патентные документы-аналоги, дополнительные и зависимые патентные документы, а также документы на одно и то же изобретение, находящиеся на различных стадиях публикации (см. *Вид патентного документа*).

Родственные патентные семейства. Согласно концепции фирмы Derwent это – семейства, связанные между собой через патентные документы с двумя или более приоритетами. Система формирования патентных семейств, принятая в БД Inpadoc, исключает возможность существования в ней родственных семейств.

Указанные государства. Это – государства, в которых испрашивается охрана изобретения на основе региональной или международной заявки. В качестве указанных государств могут фигурировать как отдельные страны, так и группы стран, входящих в региональную организацию типа ЕРО, ОАПИ и т. п. В патентных БД сети STN International приняты следующие условные обозначения типов указанных государств: R – входящие в региональные организации; W – входящие в РСТ; RW – входящие в РСТ.

Частично продолжающая заявка. В США – это повторная заявка на то же изобретение, в которую добавлены новые признаки, отсутствовавшие в первоначальной заявке. Первоначальный приоритет в случае частично продолжающей заявки сохраняется только в отношении той части притязаний, которая с достаточной полнотой была раскрыта в предшествующей заявке.

Частичный приоритет. Это – форма приоритета, относящегося к родственным патентным документам, выданным по одной из частей разделенной заявки, по продолжающей заявке и т. д.

УМК составлен в соответствии с требованиями ФГОС ВПО с учетом рекомендаций ПООП ВПО по направлению «020100 ХИМИЯ», а также в соответствии с Образовательным стандартом высшего профессионального образования, принятым в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования Новосибирский национальный государственный университет.

Автор: Зибарева Инна Владимировна, к.п.н., старший преподаватель кафедры органической химии ФЕН.

Рецензент: Елепов Борис Степанович, д.т.н., профессор, директор ГПНТБ СО РАН.