Инна Владимировна Зибарева

Поиск химической информации в базах данных сети STN International

Методические материалы – Электронно-лекционный курс*

* Разработан в рамках Программы развития НИУ-НГУ

Обучение поиску информации в режиме online

Причины:

1. Мировоззренческие
2. Профессиональные
3. Дидактические

Where is the Wisdom we have lost in Knowledge?

Where is the Knowledge we have lost in Information?

T.S. Eliot, 1934

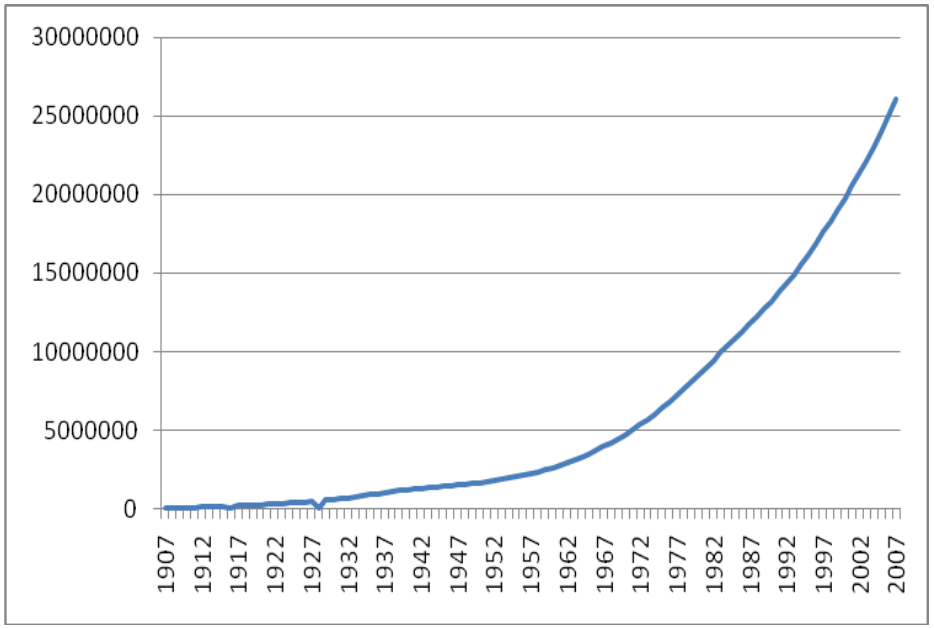
Where is the Information we have lost in Data?

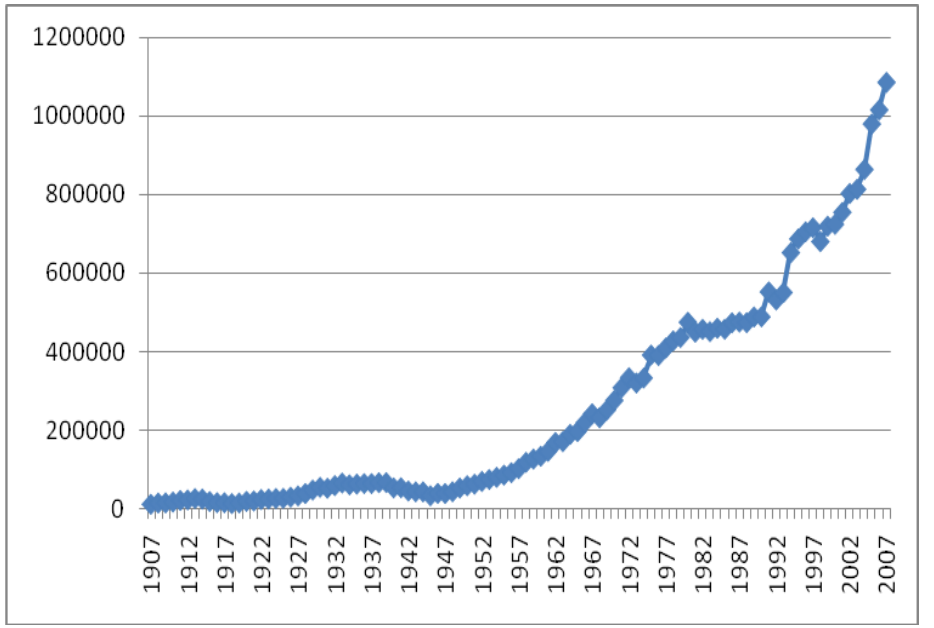
H. Cleveland, 1985

Where is the Data we have lost in Literature?

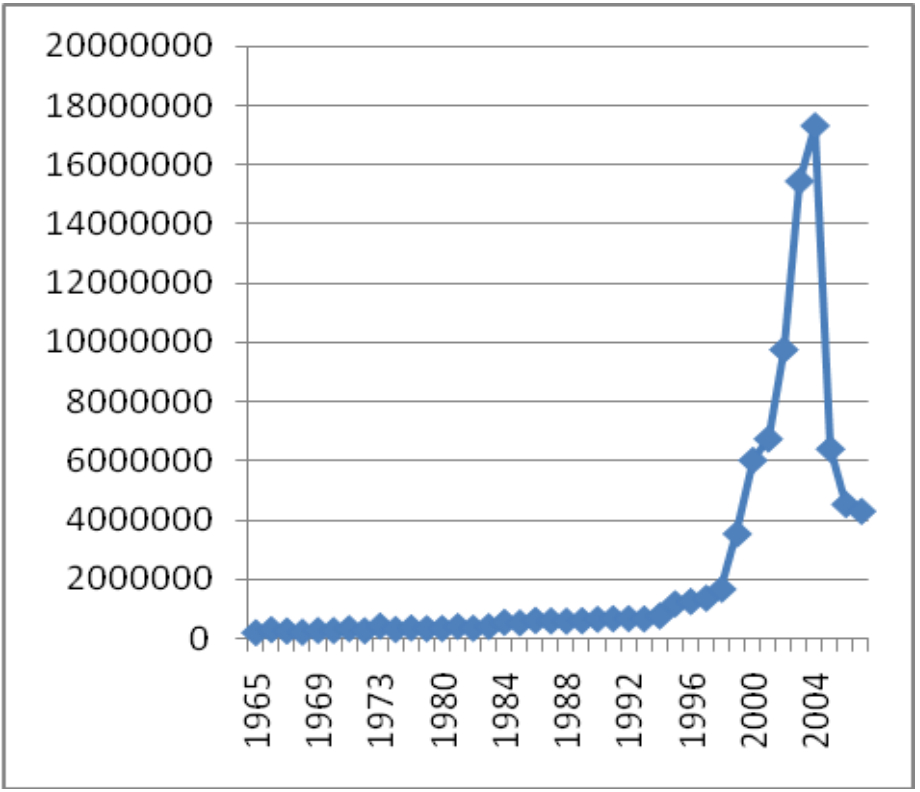
Active Scientists, Nowadays

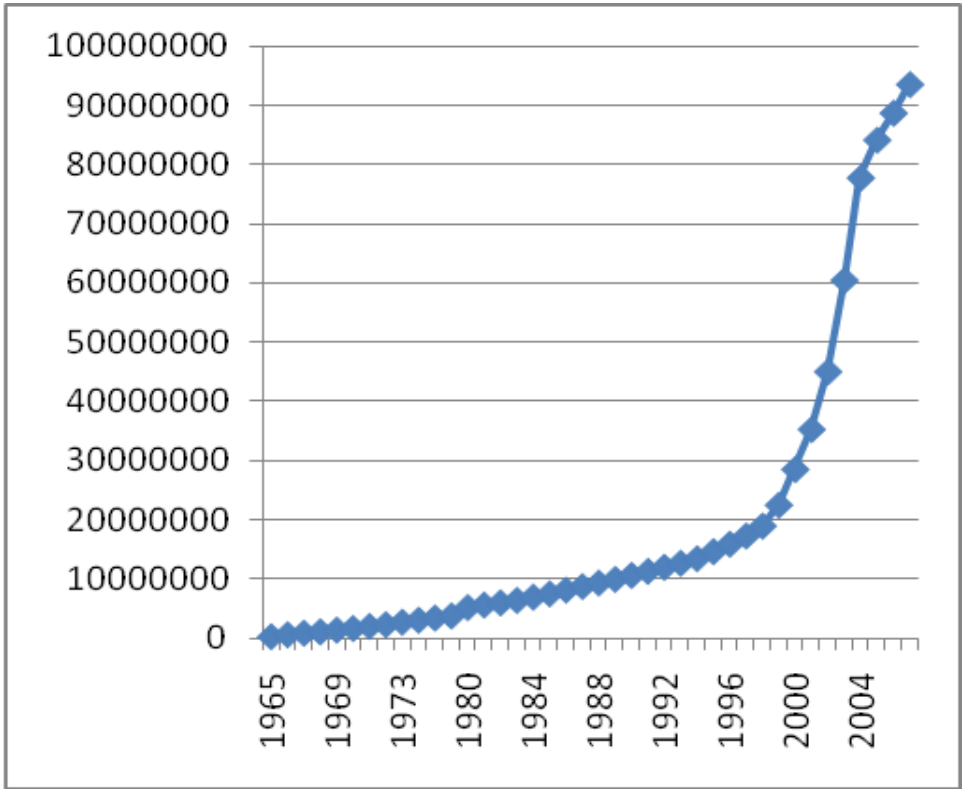
Общее (слева) и ежегодное (справа) количество рефератов в Chemical Abstracts, 1907-2007 гг.





Общее (справа) и ежегодное (слева) количество веществ, зарегистрированных Chemical Abstracts Service в 1965-2007 гг.





CAS Registers 70 Millionth ×
www.cas.org/news/product-news/70-millionth-substance
Регистрация | Сбербанк ОнЛ@йн | Spain Visa Informati... | Газета Поиск: Счет... | 02.20.2011 - Science ... | SIR - SCImago Instit... | Nanoscale Science ... | Learning Solutions | Common Chemistry... | Загрузить бесплатн... | TV Полиглот (Россия К)

Media Releases

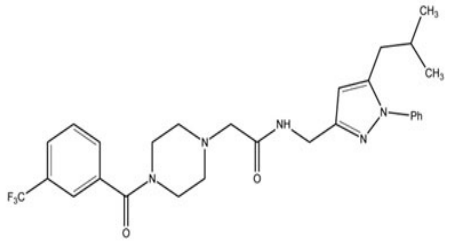
CAS Registers 70 Millionth Substance Just 18 Months After Reaching 60 Millionth Milestone

December 6th, 2012

Patents from Asian countries continue to be the leading source of chemistry disclosures

Columbus, Ohio (December 6, 2012) – Chemical Abstracts Service (CAS), the world's authority for chemical information, announced today a major milestone for the CAS REGISTRY[SM], the largest collection of publicly disclosed chemical substance information. CAS scientists registered the 70 millionth substance from a patent application submitted to the Korean Intellectual Property Office (KIPO).

The 70 millionth substance is a potential T-type calcium channel blocker discovered at the Korea Institute of Science and Technology (KIST), a multidisciplinary research institute in Seoul, South Korea. Assigned CAS Registry Number® 1411769-41-9, the substance is one of several pyrazolyl-piperazine compounds disclosed in the patent application published by KIPO on November 14, 2012. This molecule may be useful in the treatment of epilepsy, Parkinson's disease, dementia and other conditions.



CAS Registry Number 1411769-41-9

N-[[5-(2-methylpropyl)-1-phenyl-1H-pyrazol-3-yl]methyl]- 4-[3-(trifluoromethyl)benzoyl]-1-piperazineacetamide

"It's exciting that this milestone was realized with a substance from a Korean patent considering our earlier reports that Asian scientists are disclosing more chemical research in patents," said Christine McCue, vice president of marketing at CAS. "This year alone, 63 percent of all chemical patents covered by CAS originated in Asia. Our team of scientists analyzes documents in more than 50 languages, including more than 20 Asian languages, and is uniquely qualified to uncover important chemistry patented by scientists worldwide."

Similar to the 60 millionth substance registered in May 2011, the 70 millionth substance again reflects the value of patents as an important source of chemical information. In fact, more than 70 percent of new substances from the literature registered in 2012 originated from patents. To ensure the completeness and quality of the CAS premier substance collection, CAS scientists analyze, organize and curate chemistry in patents from 63 patent authorities around the world, far more than any other service.

About CAS

Recent News

February 6, 2013 | Enhancements to COMPENDEX

January 31, 2013 | INPADOC Database Enhancements: Calculated Expiration Dates, Citing Patent Information and Patent Family Counts (INPAFAMDB only)

January 28, 2013 | Reloaded MEDLINE on STN Now Includes 2013 MeSH Vocabulary and New Fields

More News >>

CAS
CASChemistry

MarkieKoester Aisle of chemical abstracts dating back to1907.. I'm in heaven. #library #nerd #heaven instagr.am/p/VcI2nOiEmh/
9 hours ago · reply · retweet · favorite

CASChemistry Join us at #AAASmtg 2013 Feb 14-18 or stop by our booth at other great events this month. ow.ly/huaI1
yesterday · reply · retweet · favorite

CASChemistry Check out our Training & Events Calendar and register for free @SciFinder and @STNInfo training in February. ow.ly/hu6zQ
yesterday · reply · retweet · favorite

CASChemistry Thanks @columbuschamber for recognizing CAS as a reason our city is a 2013 Top7 Intelligent Community! ow.ly/h8B2A
13 days ago · reply · retweet · favorite

Join the conversation

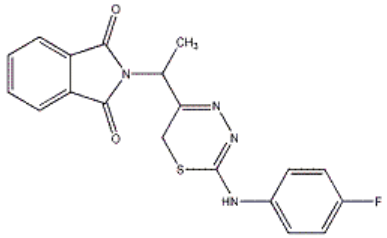
Media Contact

Name: Rhonda Ross
Phone: 614-447-3624
Email: cas-pr@cas.org

EN 10:28 08.02.2013

CAS REGISTRY Keeps Pace with Rapid Growth of Chemical Research, Registers 60 Millionth Substance

Therapeutic substance originates from Chinese patent, signifying role of Pacific Rim research in the field of chemical and scientific publishing



Columbus, Ohio (May 24, 2011) - Chemical Abstracts Service (CAS), the world's leader in chemical information, announced today that a patent application claiming compounds with potential therapeutic activity submitted to the State Intellectual Property Office of the People's Republic of China (SIPO) included the 60 millionth substance recorded in CAS REGISTRY.

CAS observed in 2009 that China surpassed all other nations as the top producer of chemical patent applications. China still maintains the lead today, and finding that the 60 millionth substance registered is from a SIPO application reconfirms that observation.

Coming less than two years after CAS REGISTRY crossed the 50 million mark, this second major milestone shows the continued acceleration of chemical and scientific output across the globe. CAS scientists keep up with this growth daily, by analyzing, organizing, and curating the output of worldwide research in their native languages to maintain the completeness and quality of CAS' premier substance collection.

The 60 millionth substance, a potential antiviral compound, was assigned the CAS Registry Number 1298016-92-8. The substance was discovered by the Institute of Materia Medica, Chinese Academy of Medical Sciences, which is one of the key drug research institutions in China. In the patent application, a team of inventors prepared derivatives of 2-amino-1,3,4-thiadiazine.

http://www.imm.ac.cn/en/index.html

"Our organization relies on CAS' research tool, SciFinder, as a critical asset to our research team, helping to educate our R&D teams along every step of the research process," said Pei Cheng Zhang, a professor at Institute of Materia Medica. "Its database's rapid growth demonstrates its leadership within the industry and breadth of coverage, making it paramount to our success."

"It seems fitting that the 60 millionth substance in CAS REGISTRY would originate from within an Asian country, given the region's growing and significant impact on scientific discovery in recent years," said Christine McCue, Vice President of Marketing at CAS. "This growth is illustrated not only in the patent arena, but also with respect to journal literature, and led CAS to expand coverage of Asian chemistry through the analysis of more than 300 additional journal titles in the past three years from China, Japan, and Korea alone."

Related links
http://www.cas.org/expertise/cascontent/registry/index.html

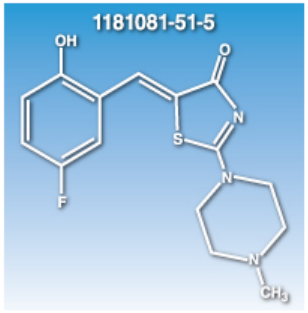
About CAS REGISTRY
CAS REGISTRY is the most comprehensive collection of disclosed chemical substance information in the world. It contains more than 60 million unique organic and inorganic substances, such as alloys, coordination compounds, minerals, mixtures, polymers, and salts, and more than 62 million sequences.

CAS REGISTRY in the News

- C&EN
- The Columbus Dispatch
  9/13/09
  9/25/09
- EContent Magazine
- MSNBC Cosmic Log
- Nature
- R&D Magazine
- Science Information News
- sciencebase
- ScienceNews
- The Resource Shelf
- U.S. News & World Report
- Wired
- Worcester Telegram & Gazette

50 Millionth Unique Chemical Substance Recorded in CAS REGISTRY

Novel analgesic marks major milestone in scientific discovery



(5*Z*)-5-[(5-Fluoro-2-hydroxyphenyl)methylene]-2-(4-methyl-1-piperazinyl)-4(5*H*)-thiazolone

Columbus, Ohio (September 8, 2009) - Chemical Abstracts Service (CAS), a division of the American Chemical Society, announced that on September 7 it recorded the 50 millionth substance in CAS REGISTRY℠, the world's most comprehensive and high-quality compendium of publicly disclosed chemical information. The recently registered substance is a novel arylmethylidene heterocycle with analgesic properties. Reaching the 50 million mark so quickly is an indicator of the accelerating pace of scientific knowledge. CAS registered the 40 millionth substance just nine months ago - in contrast, it took 33 years for CAS to register the 10 millionth compound in 1990.

Information professionals and scientists around the world have taken note of this important milestone. "The rapid growth of CAS REGISTRY is a mirror of the breadth and depth of creativity in research labs throughout the world," said Grace Baysinger, head librarian at the Swain Chemistry and Chemical Engineering Library at Stanford University. "CAS REGISTRY is an indispensable resource for users in research, education, and industry."

"Achieving a milestone of 50 million small molecules registered, which I congratulate CAS for, has given us two major insights; one is that a novel substance is either isolated or synthesized every 2.6 seconds on the average during the past 12 months, day and night, seven days a week in the world, showing an almost unbelievable rate of progress in science," said Dr. Hideaki Chihara, Ph.D. chemist and former president of Japan Association for International Chemical Information. "The other is that CAS is maintaining its reputation as the world's largest compilation of substance information that every scientist in the world relies on either directly or indirectly."

REGISTRY is the only integrated collection of chemical information from a full range of patent and journal literature, plus Web and other commercial sources, that is curated and quality-controlled by a global team of scientists. REGISTRY not only provides chemical names, the unique CAS Registry Number, and vital literature references, but also ancillary information such as experimental and predicted property data (boiling and melting points, etc.), commercial availability, preparation

CAS - Science Connections

CAS Registers 40 Millionth Substance

On November 21, CAS Registry Number 1073662-18-6 was assigned to the azulenobenzofuran derivative at right. CAS REGISTRY, the world's most authoritative collection of disclosed chemical substance information, now includes 40 million organic and inorganic substances. More than 100 million CAS Registry Numbers have been assigned to organic and inorganic substances and biosequences.

The 40 millionth substance was identified by CAS scientists in a journal article published in *Angewandte Chemie International Edition*:

- Oh, C.H.; Lee, J.H.; Lee, S.J.; Kim, J.I.; Hong, C.S. Intramolecular Huisgen-Type Cyclization of Platinum-Bound Pyrylium Ions with Alkenes and Subsequent Insertion into a Benzylic C-H Bond. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 7505-7507.

The article describes a novel method for the synthesis of polycyclic substances with "a central seven-membered carbocycle", including the 40 millionth substance. Such polycyclic substances are core structural components in certain naturally occurring chemicals, including Taxol(R) (CAS Registry Number 33069-62-4), a chemotherapeutic drug derived from the bark of the Pacific yew tree. More efficient methods to synthesize these polycyclic substances, such as the method described in this article, may lead to improved synthesis of Taxol, its analogs, and other potentially important pharmaceuticals.

If your organization is enabled to use the web version of SciFinder, you can directly access the substance and reference details for the 40 millionth substance. Look for more of these SciFinder links in future CAS - Science Connections.

Contributed by
Peter S. Carlton, Ph.D.
CAS Communications

Additional Articles

View more CAS - Science Connections articles.

Updated: 1/3/2012 11:58:11 AM

Copyright © 2012 American Chemical Society

http://www.cas.org/

ww.cas.org/content/counter

Банк ОнЛ@йн | Spain Visa Informati... | Газета Поиск: Счет... | 02.20.2011 - Science ... | SIR - SCImago Instit... | Nanoscale Science ... | Learning Solutions | Common Chemistry... | Загрузить бесплатн...

Database Counter

In addition to organic and inorganic substances, REGISTRY has:

64,340,973 sequences

CAS RN 1418357-64-8 is the most recent CAS Registry Number

CAS also provides specialized databases of chemical reactions, regulated chemicals, commercially available chemicals and Markush substance information.

Specialized Substance Collections Count

CASREACT(1) **62,583,851** Single and multi-step reactions, and synthetic preparations

CHEMLIST **296,662** Inventoried/regulated substances

CHEMCATS **72,525,566** Commercially available chemicals

MARPAT **967,377** Searchable Markush structures

(1) More information on CASREACT statistics.

CAS Content

- Chemical Substances - CAS REGISTRY
- References - CAplus
- Reactions - CASREACT
- Chemical Suppliers - CHEMCATS
- Regulated Chemicals - CHEMLIST
- Chemical Industry Notes - CIN
- Markush - MARPAT

Contact CAS Customer Center

E-mail
help@cas.org

Phone & Fax
800-753-4227 (North America)
614-447-3700 (Worldwide)
614-447-3751 (Fax)

More Contact Info >>

EN

Справочники и реферативные журналы по химии

Crell’s Chemisches Journal für die Freunde der Naturlehre (1778)

Gmelin Handbuch der Theoretischen Chemie (1817)

Chemisches Zentralblatt (1830)

Beilstein Handbuch der Organischen Chemie (1881)

Chemical Abstracts (1907)

Gmelin Handbuch der Anorganischen Chemie (1922)

Реферативный журнал «Химия» (1952)

Преимущества поиска информации в режиме online

- Скорость
- Точность
- Полнота
- Удобство

Информационный бизнес

- Производители (генераторы) БД
- Вендоры
- Телекоммуникационные сети
- Потребители информации

STN International

- Chemical Abstracts Service (CAS, г. Коламбус, шт. Огайо, США)
- Fachinformationszentrum Karlsruhe (FIZ-K, г. Карлсруэ, ФРГ)
- Japan Science and Technology Corporation (JST) - сначала. Japan Association for International Chemical Information (JAICI, г. Токио, Япония) - сейчас

Программа курса

1. Введение в STN: основы поиска в режиме online (2 часа – лекция)

2. Основы поиска в БД CA. Введение в online-поиск для химиков (14 часов, 4 – лекции, 10 – контр. раб.)

3. Поиск веществ в БД Registry.

4. Структурный поиск с STN Express (6 часов, 4 – лекции, 2 – контр. раб.)

Контрольные работы (online-практика):
Поиск по авторам (LCA)
Поиск по корпорациям (LCA)
Предметный поиск (по ключевым словам) (LCA)
Поиск веществ по молекулярным формулам (LREGISTRY и LCA)
Поиск веществ по хим. названиям (LREGISTRY и LCA)
Поиск веществ по структурам (LREGISTRY и LCA)

5. Зачет (REGISTRY и CA)

1. Основы поиска информации в БД сети STN International

STN International

STN International – служба, предоставляющая информацию по многим научным дисциплинам

- Online – STN Express with *Discover!*
- Web – STN® on the Web℠

STN International

- Биотехнология
- Химия
- Инженерия
- Здоровье и безопасность
- Правительственные нормативы
- Материаловедение
- Медицина
- Патенты
- Бизнес

STN

Терминология

База данных (БД)

Доступная через STN International информация хранится в >200 БД

Типы БД:

- Библиографические
- Структурно-химические
- БД по реакциям
- Фактографические (numeric)
- БД-справочники

STN

Типы БД

Тип БД	Содержание записей*	Поиск
Библио-графическая	Заглавие Автор Источник Реферат Индексируемые термины	▪ По автору ▪ По словам ▪ По названию компании

** Точное содержание различается от одной БД к другой.*

STN

Типы БД

Тип БД	Содержание записей*	Поиск
Полно-текстовая	Заглавие Автор Источник Реферат Текст документа	По предмету / предметной области

** Точное содержание различается от одной БД к другой.*

STN

Типы БД

Тип БД	Содержание записей*	Поиск
Химические вещества	Структуры Химические названия Молекулярные формулы Химические реакции	▪ Идентификация вещества ▪ CAS Registry номер ▪ Информация о реакции

** Точное содержание различается от одной БД к другой.*

STN

Типы БД

Тип БД	Содержание записей*	Поиск
Числовая	Данные по свойствам	▪ Вещества с конкретными свойствами ▪ Количественные характеристики свойств веществ

** Точное содержание различается от одной БД к другой.*

STN

Терминология

Библиографические БД

Извлечение из документов (публикаций – статей, патентов и др.) такой информации, как заглавие, авторы, источники и рефераты, и объединение этой информации в запись

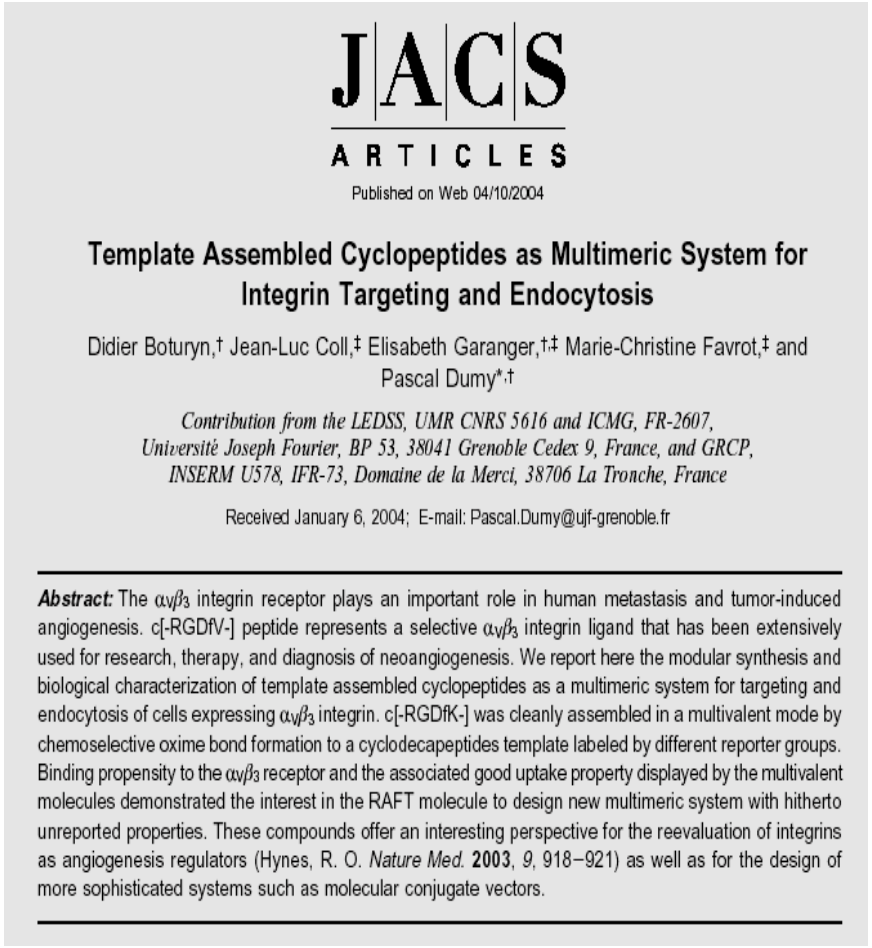
Запись

БД состоят из **записей**, соответствующих отдельным документам

STN

Пример – запись из журнала

Статья из журнала, доступная в режиме online – запись из БД CAPlus[SM]



JACS
ARTICLES
Published on Web 04/10/2004

Template Assembled Cyclopeptides as Multimeric System for Integrin Targeting and Endocytosis

Didier Boturyn,† Jean-Luc Coll,‡ Elisabeth Garanger,†,‡ Marie-Christine Favrot,‡ and Pascal Dumy*,†

Contribution from the LEDSS, UMR CNRS 5616 and ICMG, FR-2607, Université Joseph Fourier, BP 53, 38041 Grenoble Cedex 9, France, and GRCP, INSERM U578, IFR-73, Domaine de la Merci, 38706 La Tronche, France

Received January 6, 2004; E-mail: Pascal.Dumy@ujf-grenoble.fr

Abstract: The $\alpha_v\beta_3$ integrin receptor plays an important role in human metastasis and tumor-induced angiogenesis. c[-RGDfV-] peptide represents a selective $\alpha_v\beta_3$ integrin ligand that has been extensively used for research, therapy, and diagnosis of neoangiogenesis. We report here the modular synthesis and biological characterization of template assembled cyclopeptides as a multimeric system for targeting and endocytosis of cells expressing $\alpha_v\beta_3$ integrin. c[-RGDfK-] was cleanly assembled in a multivalent mode by chemoselective oxime bond formation to a cyclodecapeptides template labeled by different reporter groups. Binding propensity to the $\alpha_v\beta_3$ receptor and the associated good uptake property displayed by the multivalent molecules demonstrated the interest in the RAFT molecule to design new multimeric system with hitherto unreported properties. These compounds offer an interesting perspective for the reevaluation of integrins as angiogenesis regulators (Hynes, R. O. *Nature Med.* **2003**, *9*, 918−921) as well as for the design of more sophisticated systems such as molecular conjugate vectors.

```
AN   2004:293513  CAPLUS  Full-text
DN   141:7426
ED   Entered STN:  11 Apr 2004
TI   Template Assembled Cyclopeptides as
     Multimeric System for Integrin Targeting
     and Endocytosis
AU   Boturyn, Didier; Coll, Jean-Luc; Garanger,
     Elisabeth; Favrot, Marie-Christine; Dumy,
     Pascal
CS   LEDSS, UMR CNRS, Grenoble, 38041, Fr.
SO   Journal of the American Chemical Society
     (2004), 126(18), 5730-5739
     CODEN: JACSAT; ISSN: 0002-7863
PB   American Chemical Society
DT   Journal
LA   English
CC   34-3 (Amino Acids, Peptides, and Proteins)
     Section cross-reference(s): 1, 15
AB   The αVβ3 integrin receptor plays an important
     role in human metastasis and tumor-induced
     angiogenesis.  Cyclic peptide, cyclo[RGDfV]
     (f = D-Phe)represents a selective αVβ3
     integrin ligand that has been extensively
     used for research, therapy, and diagnosis of
     neoangiogenesis.  Here, the authors report
     the modular synthesis and biol.
```

STN

Индексы БД

Каждая запись БД организована в **индексы** (**поля**), помеченные идентифицирующими кодами

Многие производители БД также добавляют **термины индексирования**, выделяющие ключевые понятия (концепты) документа

Совокупность терминов индексирования – контролируемая терминология

- Термины, используемые производителями БД, являются постоянными
- Термины помогают пользователям отобрать документы по интересующей тематике

STN

Пример – запись в БД CAplus

Индексы:

- TI = TItle
- AU = AUthor
- CS = Corporate Source

Термины индексирования в БД CAplus:

- CC = Category Code
- ST = Supplementary Terms
- IT = Index Terms

AN 2001:752414 CAPLUS
TI Spin, Charge, and Lattice States in Layered Magnetoresistive Oxides
AU Mitchell, J. F.; Argyriou, D. N.; Berger, A.; Gray, K. E.; Osborn, R.; Welp, U.
CS Materials Science Division, Argonne National Laboratory, Argonne, IL, 60439, USA
SO Journal of Physical Chemistry B (2001), 105(44), 10731-10745
CODEN: JPCBFK; ISSN: 1089-5647
PB American Chemical Society
DT Journal; General Review
LA English
CC 76-0 (Electric Phenomena)
AB A review. Colossal magnetoresistive materials are perovskite-related mixed-valent (Mn3+/Mn4+) manganese oxides that exhibit both spontaneous (at a Curie transition) and magnetic field-induced insulator-metal transitions. In this article, we discuss how a particular class of these manganite materials, naturally layered manganites La2-2xSr1+2xMn2O7, has allowed us to exptl. probe many of these tightly coupled phenomena.
ST review spin charge lattice state layered magnetoresistive oxide
IT Crystal structure
Electric charge
Electron spin
Giant magnetoresistance
Magnetoresistors
(spin, charge, and lattice states in layered magnetoresistive oxides)
IT Oxides (inorganic), properties
RL: PRP (Properties)
(spin, charge, and lattice states in layered magnetoresistive oxides)
IT 1310-98-1, Manganite 59707-46-9, Lanthanum manganese strontium oxide
RL: PRP (Properties)
(spin, charge, and lattice states in layered magnetoresistive oxides)
RE.CNT 94 THERE ARE 94 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
RE
(1) Abrikosov, A; Phys Rev B 2000, V61, P7770 CAPLUS
(2) Akimoto, T; Phys Rev B 1999, V59, PR14153 CAPLUS
• • •

STN

Поиск по ключевым словам

Используется, когда основан на концепте, а не относится к конкретному химическому веществу

Наиболее распространенная форма поиска по ключевым словам – текстовый поиск (**free-text)** в индексе BI (Basic Index)

STN

Содержание БД CAplus

БД CAplus – мировые публикации по всем областям химии с 1840 гг. по настоящее время

Прикладная химия, химическая технология, биохимия, органическая, физическая, неорганическая и аналитическая химия

Библиографическая информация, реферат, индексирование по предмету и по веществу, имеющееся в печатном реферативном журнале *Chemical Abstracts*™

STN

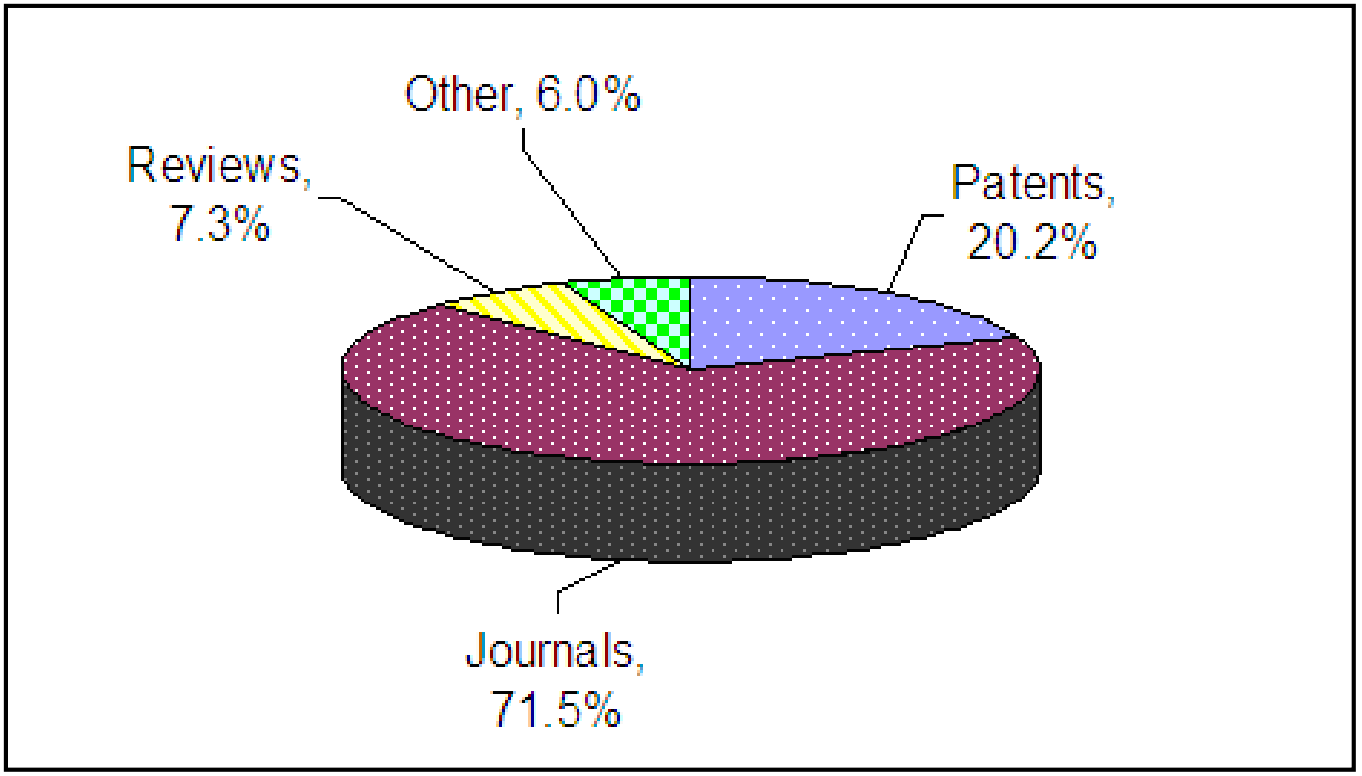
Содержание БД CAplus

Записи:

- ~ 9500 журналов из >150 стран
- патенты, выданные > 60 странами (США, Великобритания, Германия, Япония, Россия) и 2 международными патентными ведомствами (EPO и WIPO)
- оглавления 1600 наиболее часто цитируемых химических журналов (по каждому пункту)

STN

Источники информации для БД CAplus



Поиск в БД CAplus

Записи в CAplus указывают на публикации – статьи в журналах или патенты

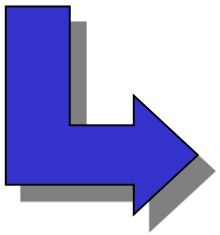
Поиск возможен несколькими способами

STN

Поиск в БД CAplus

Поиск:

- Предметные термины
- Номера патентов
- Имена авторов
- Названия компаний
- Цитируемые ссылки
- Регистрационные номера CAS



Записи CAplus:

- Библиографическая информация
- Информация о патентном семействе
- Англоязычные рефераты
- Индексирование ключевых предметных концептов и химических веществ
- Цитируемые ссылки
- Линки на полные тексты

STN

Записи в БД CAplus

В БД Caplus информация в записях организована в серии индексов, помеченных 2-буквенными кодами

Полный список индексов содержится в Database Summary Sheet

STN

Пример – запись из БД CAplus

AN 2006:983583 CAPLUS
DN 145:352267
ED Entered STN: 22 Sep 2006
TI Effects of high-potassium solutions and caffeine on synaptic vesicle exoendocytosis processes in the frog neuromuscular junction
AU Zefirov, A. L.; Abdrakhmanov, M. M.; Grigor'ev, P. N.
CS Kazan State Medical University, Kazan, 420012, Russia
SO Neuroscience and Behavioral Physiology (2006), 36(7), 781-788 CODEN: NBHPBT; ISSN: 0097-0549
PB Springer
DT Journal
LA English
CC 12-6 (Nonmammalian Biochemistry)

Библиографический сегмент записи

(продолжение на след. слайде)

STN

Пример – запись из БД CAplus

AB Studies on frog skin-pectoris muscle prepns. using vital fluorescent microscopy showed that stimulation of transmitter secretion using high-potassium solns. with the endocytosis marker FM 1-43 induced bright spots in all motor nerve terminals, these representing accumulations of vesicles undergoing the exoendocytic cycle in the active zones of nerve endings. Stimulation of transmitter secretion with caffeine evoked bright spots only in some nerve terminals and only in some parts of

● ● ●

The possible spatial localization of the endoplasmic reticulum in nerve endings is discussed. The endoplasmic reticulum is suggested to have a role in synapse remodeling processes.

(продолжение на след. слайде)

STN

Пример – запись из БД CAplus

ST frog NMJ calcium exoendocytosis depolarization endoplasmic reticulum

IT Polarization
(depolarization, biol.; effects of high-potassium solns. and caffeine on synaptic vesicle exoendocytosis processes in the frog neuromuscular junction)

●●●

IT 7440-70-2, Calcium, biological studies
RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)
(effects of high-potassium solns. and caffeine on synaptic vesicle exoendocytosis processes in the frog neuromuscular junction)

(продолжение на след. слайде)

STN

Пример – запись из БД CAplus

IT 58-08-2, Caffeine, biological studies 7440-09-7, Potassium, biological studies
RL: BSU (Biological study, unclassified); BUU (Biological use, unclassified); BIOL (Biological study); USES (Uses)
(effects of high-potassium solns. and caffeine on synaptic vesicle exoendocytosis processes in the frog neuromuscular junction)

RE.CNT 22 THERE ARE 22 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
RE
(1) Angleson, J; J Neurophysiol 2001, V85, P287 MEDLINE
(2) Avidor, T; Neurosci Lett 1974, V165, P133
(3) Balezina, O; Usp Fiziol Nauk 2002, V33, P38 CAPLUS
(4) Betz, W; Curr Opin Neurobiol 1996, V6, P365 CAPLUS

• • •

STN

Рабочий лист

Задание: Ввести в рабочий лист информацию об индексах CAplus.

Код	Название поля	Примечания
TI	Title	Заглавие публикации
AU		
CS		
	Document Type	
	Language	
	Abstract	
ST		Ключевые слова из печатного CA.
	Index Terms	Новые или неизвестные концепты, сообщаемые в документе.
	CAS Role	
RE		

STN

Basic Index

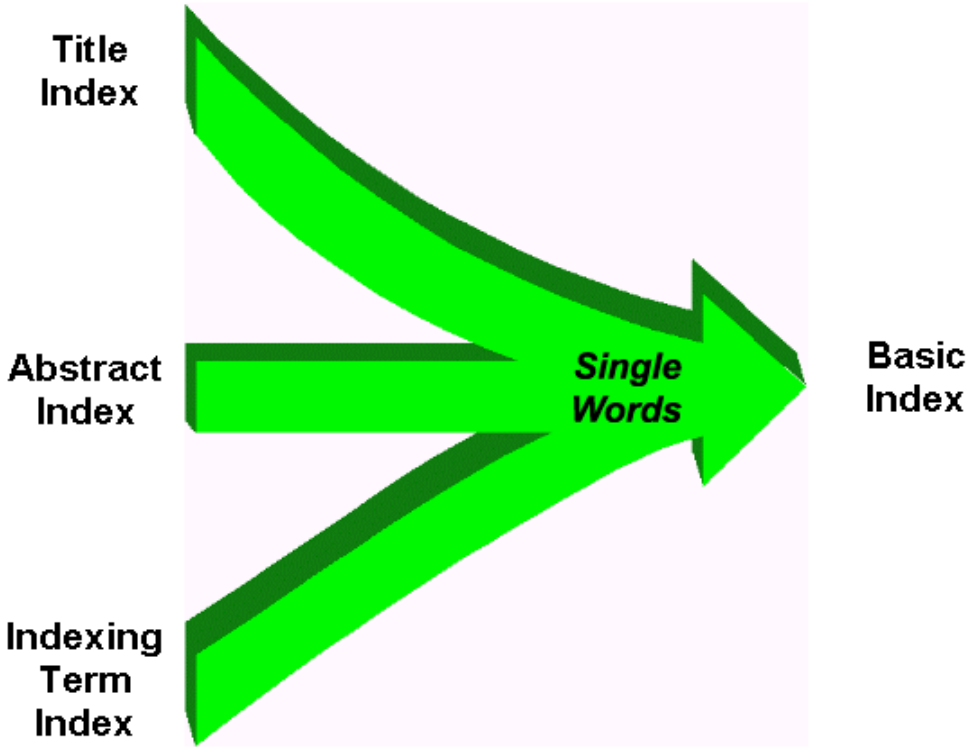
Для ускорения предметного поиска несколько индексов БД CAplus объединены в один – **Basic Index (по умолчанию)**

В Basic Index обычно проводят поиск по техническим терминам / словам, относящимся к интересующему предмету

STN

Basic Index

Basic Index БД CAplus состоит из ***отдельных слов*** из индексов TI (заглавие), AB (реферат) и IT (термины индексирования)



STN

Basic Index

В Basic Index не используются следующие артикли, предлоги и союзы (**стоп-слова**):

an	at	from	of	the
and	by	in	on	to
as	for	not	or	with

Пример – Basic Index БД CAplus (выделенные поля)

AN 2006:947768 CAPLUS
ED Entered STN: 14 Sep 2006
TI Medium throughput pKa determinations of drugs and chemicals by reverse phase HPLC with an organic gradient
AU Chiang, Po-Chang; Foster, Kimberly A.; Whittle, Marie C.; Su, Ching-Chiang; Pretzer, Denise K.
CS Global Research and Development, Pharmaceutical Research and Development, St. Louis Laboratories, Pfizer Inc, Chesterfield, MO, USA
SO Journal of Liquid Chromatography & Related Technologies (2006), 29(15), 2291-2301
CODEN: JLCTFC; ISSN: 1082-6076
PB Taylor & Francis, Inc.
DT Journal
LA English
CC 64-3 (Pharmaceutical Analysis)
AB A semi-automated method to det. pKa values of drugs and chems. by reverse phase HPLC is described. The method uses the capabilities of a crosslinked reverse phase HPLC column (Agilent extend C-18) as a sepn. device. The pKa value was detd. based on the different retention behaviors of the charged, multiply charged, and uncharged species at different pH conditions. The advantages of this method are low sample consumption, suitability for less sol. compds., high purity samples not necessary, no spectral shift needed, high sample throughput, easy set up, high sensitivity, low cost, good precision, and agreement with literature values.
ST drug analysis reversed phase HPLC dissocn const
IT Dissociation constant
Reversed phase HPLC
(pKa detns. of drugs and chems. by RP-HPLC)
IT 50-78-2, Aspirin 50-79-3, 2,5-Dichlorobenzoic acid 53-86-1, Indomethacin 57-41-0, Phenytoin 57-66-9, Probenecid 58-08-2, Caffeine 58-55-9, Theophylline 65-85-0, Benzoic acid
68-94-0, Hypoxanthine 81-81-2, Warfarin 87-51-4, Indoleacetic acid
94-09-7, Benzocaine 103-90-2, Acetaminophen 130-95-0, Quinine
137-58-6, Lidocaine 315-30-0, Allopurinol 525-66-6, Propranolol
526-08-9, Sulfaphenazole 635-78-9, Resorufin 1606-67-3, 1-Aminopyrene
1951-25-3, Amiodarone 2321-07-5, Fluorescein 2398-96-1, Tolnaftate
5104-49-4, Flurbiprofen 10540-29-1, Tamoxifen 15307-86-5, Diclofenac
15687-27-1, Ibuprofen 18559-94-9, Salbutamol 22071-15-4, Ketoprofen
22204-53-1, Naproxen 28088-64-4, Amino salicylic acid 29122-68-7,
Atenolol 38304-91-5, Minoxidil 49562-28-9, Fenofibrate 50370-12-2,
Cefadroxil 50679-08-8, Terfenadine 51384-51-1, Metoprolol
51481-61-9, Cimetidine 54739-18-3, Fluvoxamine 59804-37-4, Tenoxicam
65277-42-1, Ketoconazole 66357-35-5, Ranitidine
RL: ANT (Analyte); PRP (Properties); ANST (Analytical study)
(pKa detns. of drugs and chems. by RP-HPLC)
RE.CNT 14 THERE ARE 14 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD

2. Поиск по ключевым словам

Поисковый запрос:

Что сообщалось в литературе о противоопухолевой активности антибиотиков, полученных из Streptomyces bacteria?

Стратегия поиска

Стратегия поиска

1. Определение поискового запроса

Цель поиска:

- общая информация по предметной области
- конкретная информация

Степень специфичности искомой информации влияет на построение поискового запроса

STN

1. Определение поискового запроса

Информационный запрос

Общий

Antibiotics

Antibiotics from natural origins

Antibiotics from bacteria

Antibiotics from *Streptomyces*

Antitumorigenic antibiotics from *Streptomyces*

Конкретный

STN

2. Выбор релевантной БД

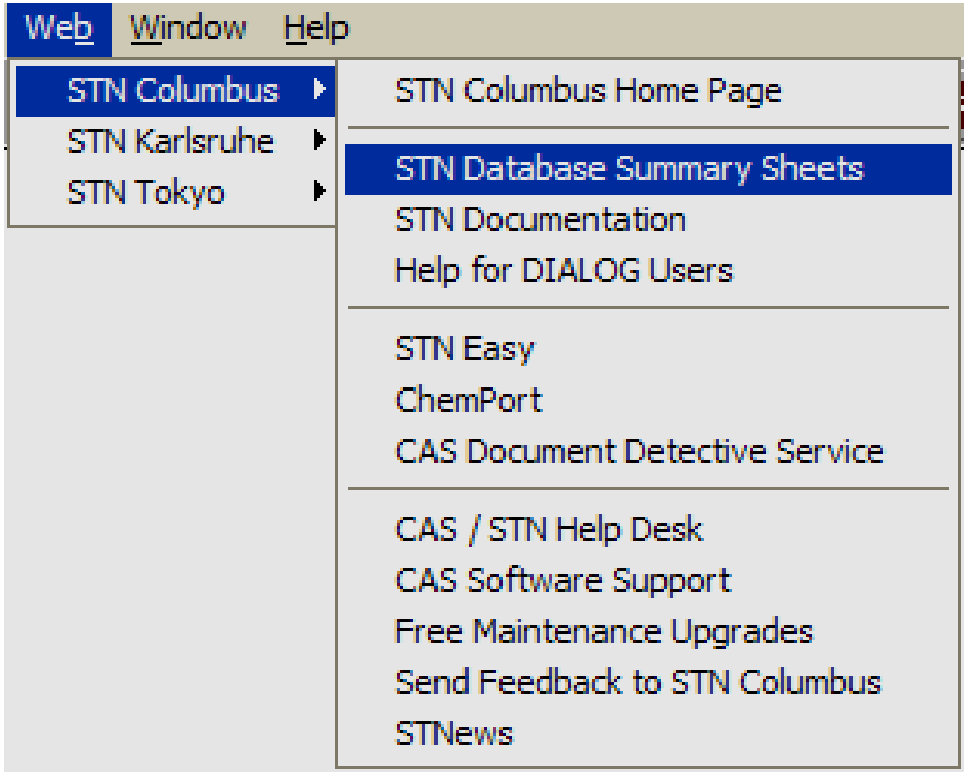
В сети STN International доступны > 200 БД научно-технической информации

Источник информации о БД:

- STN Database Summary Sheets:
  http://www.cas.org/products/stn/dbss

STN Database Summary Sheets

Программное обеспечение STN Express:



STN Database Summary Sheets

STN Database Summary Sheets имеются для каждой БД сети и включают:

- содержание, источники информации, данные о файле и его производителе
- поисковые поля и примеры
- дисплейные поля и форматы
- пример записи

STN

3. Составление поискового запроса

A Идентификация основных концептов

B Выбор поисковых терминов

C Объединение терминов с помощью логических операторов

STN

3-A. Идентификация основных концептов

Рабочий лист		
Нужна информация о противоопухолевой активности антибиотиков из Streptomyces bacteria *Каждый концепт поискового предписания помещается в отдельную колонку рабочего листа*		
Концепт 1	**Концепт 2**	**Концепт 3**

3-B. Выбор поисковых терминов

Выбор поисковых терминов включает идентификацию **синонимов** для каждого концепта

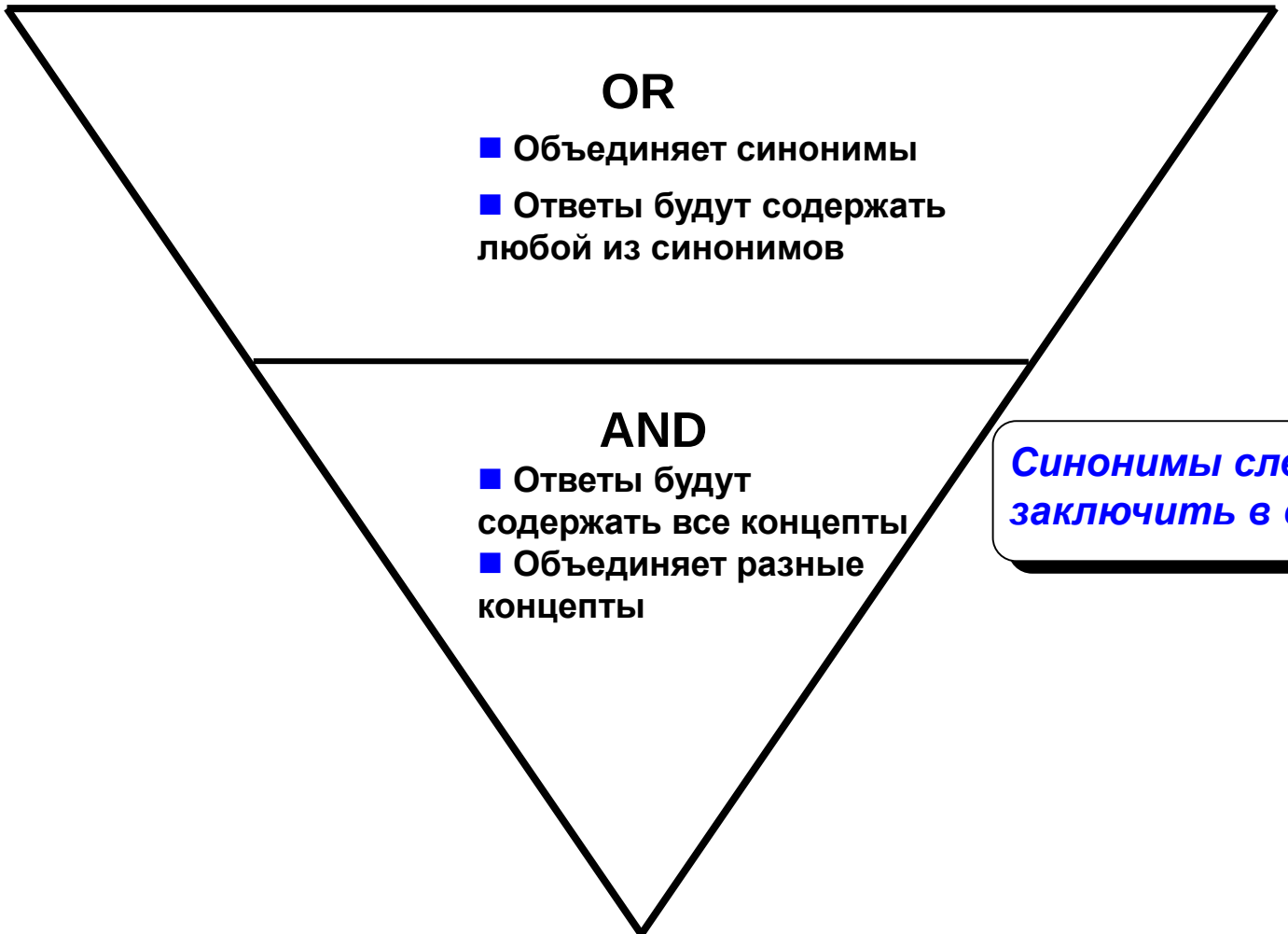
В рамках дисциплины может использоваться различная терминология, в том числе **акронимы**

Синонимы добавляются в рабочий лист к соответствующим основным концептам

STN

3-C. Объединение поисковых терминов с помощью логических операторов

Используется для повышения точности поиска



Синонимы следует заключить в скобки

STN

3-C. Объединение поисковых терминов с помощью логических операторов

Рабочий лист
Используйте логические операторы и скобки для построения поисковых запросов из слов:
ANTITUMOR _____ ANTIBIOTIC _____ STREPTOMYCES
ANTITUMOR _____ ANTI-TUMOR

STN

4. Проведение предварительного поиска

Предварительный поиск помогает выяснить, обеспечивает ли разработанная поисковая стратегия достижение желаемого результата

В предварительном поиске (во всех поисках по ключевым словам) последовательно используются три **основные команды**

STN

Основные команды

Команда	Действие	Пример
FILE	Выбор файла	=> FILE CAPLUS
E (EXPAND)	Проверка термина в БД	=> E STREPTOMYCES
S (SEARCH)	Поиск записей, содержащих термин (ы) и создание набора ответов (L#) из этих записей	=> S STREPTOMYCES

STN

Формат основных команд

Командная строка

```
=> Команда Инструкции  <Enter >
```

Пример:

```
=> FILE CAPLUS  <Enter>
```

Web-ресурс

Дополнительная информация об использовании команд STN: http://www.cas.org/training/stncommands/index.html

---

STN

Команда FILE – ввод БД (файла)

```
=> FILE CAPLUS
FILE 'CAPLUS' ENTERED AT 20:34:16 ON 24 OCT 2006
USE IS SUBJECT TO THE TERMS OF YOUR STN CUSTOMER AGREEMENT.
PLEASE SEE "HELP USAGETERMS" FOR DETAILS.
COPYRIGHT (C) 2006 AMERICAN CHEMICAL SOCIETY (ACS)

Copyright of the articles to which records in th
held by the publishers listed in the PUBLISHER
                    • • •
of this information, without the prior written c
strictly prohibited.

FILE COVERS 1907 - 24 Oct 2006  VOL 145 ISS 18
FILE LAST UPDATED: 23 Oct 2006  (20061023/ED)

  This file contains CAS Registry Numbers for easy and accurate
  substance identification.
                    • • •
Effective October 17, 2005, revised CAS Information Use Policies apply.
They are available for your review at:

http://www.cas.org/infopolicy.html
```

Выбор БД – вывод информации о его охвате и обновлениях

STN

Команда EXPAND – проверка поисковых терминов

Команда **EXPAND** (**E**) используется для проверки наличия интересующего термина в БД

EXPAND полезна при поиске по ключевым словам:

- определение наличия термина в БД
- идентификация альтернативных форм слов

Результат команды EXPAND – алфавитно-цифровой список терминов, соседних запрошенному

STN

Проверка поисковых терминов

```
=> E ANTITUMOR
E1             3      ANTITUMO/BI
E2             1      ANTITUMOIR/BI
E3        121939 --> ANTITUMOR/BI
E4          1145      ANTITUMORAL/BI
E5             1      ANTITUMORALE/BI
E6             3      ANTITUMORALLY/BI
E7            13      ANTITUMORALS/BI
E8             3      ANTITUMORE/BI
E9             5      ANTITUMORGENIC/BI
E10            2      ANTITUMORIAL/BI
E11           84      ANTITUMORIC/BI
E12            1      ANTITUMORIGEN/BI

=> E
E13            1      ANTITUMORIGENC/BI
E14            5      ANTITUMORIGENESIS/BI
E15          242      ANTITUMORIGENIC/BI
E16            9      ANTITUMORIGENICITY/BI
                      ● ● ●
E21           76      ANTITUMOROUS/BI
E22            1      ANTITUMORR/BI
E23          321      ANTITUMORS/BI
E24            1      ANTITUMOT/BI
```

/BI – Basic Index;
2 колонка – «постинги» – количество записей CAplus, содержащих интересующий термин

E – продолжение EXPAND-списка

Различные окончания термина – другие слова из списка можно также использовать в качестве поисковых терминов

STN

Проверка поисковых терминов

```
=> E ANTIBIOTIC
E1           27     ANTIBIOTHERAPY/BI
E2            1     ANTIBIOTI/BI
E3       101225 --> ANTIBIOTIC/BI
E4            2     ANTIBIOTIC8907/BI
E5           44     ANTIBIOTICA/BI
E6            5     ANTIBIOTICAL/BI
E7          199     ANTIBIOTICALLY/BI
E8            1     ANTIBIOTICAS/BI
              ● ● ●
E11           1     ANTIBIOTICCOMBNS/BI
E12           2     ANTIBIOTICCS/BI

=> E STREPTOMYCES
E1            1     STREPTOMYCER/BI
E2            1     STREPTOMYCERS/BI
E3        30604 --> STREPTOMYCES/BI
E4            1     STREPTOMYCESA/BI
E5            1     STREPTOMYCESAUREOFACIENS/BI
E6            1     STREPTOMYCESERYTHREUS/BI
              ● ● ●
E10           1     STREPTOMYCESROSEOFLAVUS/BI
E11           5     STREPTOMYCESS/BI
E12           1     STREPTOMYCESSP/BI
```

STN

Создание набора поисковых терминов

Выбор из списка, полученного по команде EXPAND, терминов, которые можно использовать в поиске

Имеются два способа учета различных форм слов в поисковых терминах:

- автоматические установки STN
- символы усечения

STN

Создание набора поисковых терминов

Автоматические установки

автоматический поиск единственной и множественной форм распространенных слов в CAplus – команда ***SET PLURALS ON***

автоматический поиск стандартных сокращений CAS в CAplus – команда ***SET ABB ON***

STN

Символы усечения

Символы усечения (wild cards) используются для учета различных форм слов:

- единственная и множественная формы
- префиксы и суффиксы
- вариации орфографии – ср., например, British English и American English

STN

Символы усечения

Символ	Определение	Пример	Будут найдены
?	От 0 до любого числа символов *конце* термина	?GENE?	ABIOGENESIS PARTHENOGENESIS OSTEOGENESIS GENERATES
#	0 или один символ в *конце* термина	GROW##	GROW GROWS GROWTH
!	Точно один символ *внутри* или в *конце* термина	T!!TH	TEETH TOOTH TRUTH
		AMIN!	AMINE AMINO

Прим.

Символы усечения можно объединять внутри одного термина. Разрешено многократное использование # и !.

STN

Символы усечения

Рабочий лист
Задание: Используйте символы усечения для создания поисковых терминов, позволяющих следующие группы слов.
antitumor, antitumorigenic, antitumorigenically, antitumorigenicity, antitumoral antibiotic, antibiotics

4. Проведение поиска

Команда **SEARCH** (**S**) – поиск записей, содержащих поисковые термины

```
=> SET ABB ON
SET COMMAND COMPLETED

=> SET PLURALS ON
SET COMMAND COMPLETED

=> S STREPTOMYCES AND ANTIBIOTIC AND ANTITUMOR?
          35759 STREPTOMYCES
         127853 ANTIBIOTIC
         113300 ANTIBIOTICS
         169286 ANTIBIOTIC
         211364 ANTITUMOR?
L1         1191 STREPTOMYCES AND ANTIBIOTIC AND ANTITUMOR?
```

L1 – набор ответов в CAplus, содержащий интересующие термины – 1191 записей

Прим. **Поиск без учета множественных, сокращенных и усеченных форм дал бы 1057 ответов.**

STN

5. Оценка ответов при помощи бесплатного формата D SCAN

Позволяет:

- проверить, что по поисковому запросу найдена нужная информация
- Идентифицировать дополнительную, специфическую для БД терминологию – для улучшения результатов поиска

STN

5. Оценка ответов

```
=> D SCAN
L1    1191 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS
IC    ICM  C12P019-56
      ICS  C07H015-252; A61K031-71
CC    16-2 (Fermentation and Bioindustrial Chemistry)
TI    IT-62-B substance and medicinal composition containing the same
ST    neoplasm inhibitor IT62B Streptomyces  fermn; antibiotic
      IT62B fermn Streptomyces
IT    Antibiotics
      Fermentation
      Neoplasm inhibitors
      Streptomyces
         (antitumor  antibiotic  IT-62-B from Streptomyces)
IT    Neoplasm inhibitors
         (nasopharynx, antitumor  antibiotic  IT-62-B from
         Streptomyces)
IT    Pharynx
         (nasopharynx, neoplasm, inhibitors, antitumor
         antibiotic  IT-62-B from Streptomyces)
IT    176259-62-4P, Antibiotic  IT 62B
      RL: BPN (Biosynthetic preparation); THU (Therapeutic use); BIOL
      (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)
         (antitumor antibiotic IT-62-B from Streptomyces)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
```

Выделение Hit-терминов помогает увидеть поисковые термины в ответе

STN

5. Оценка ответов

```
L1    1191 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS
IC    ICM  C12P001-06
      ICS  A61K035-74; C07G017-00; C12P001-06; C12R001-465
CC    16-2 (Fermentation and Bioindustrial Chemistry)
      Section cross-reference(s): 1, 63
TI    Manufacture of NA22598B1 and NA22598B2 as anticancer agents,
      and their manufacture with Streptomyces  species
ST    anticancer NA22598B1 NA22598B2 manuf Streptomyces
IT    Antitumor  agents
         (antibiotic; manufacture of NA22598B1 and NA22598B2 as
         anticancer agents with Streptomyces sp.)
IT    Antibiotics
         (antitumor; manufacture of NA22598B1 and NA22598B2 as
         anticancer agents with Streptomyces sp.)
IT    Fermentation
      Streptomyces
         (manufacture of NA22598B1 and NA22598B2 as anticancer agents
         with Streptomyces  sp.)
IT    226900-64-7P, NA 22598B1   226900-71-6P, NA 22598B2
      RL: BAC (Biological activity or effector, except adverse); BMF
      (Bioindustrial manufacture); BPN (Biosynthetic preparation); BSU
      (Biological study, unclassified); PRP (Properties); THU
      (Therapeutic use); BIOL (Biological study); PREP (Preparation);
      USES (Uses)
         (manufacture of NA22598B1 and NA22598B2 as anticancer agents
          with Streptomyces  sp.)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
```

5. Оценка ответов

L1 1191 ANSWERS CAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS
IC ICM C07C065-36
ICS A61K031-194; A61P031-04; A61P035-00; C12N001-20; C12P007-50; C12R001-465
CC 16-2 (Fermentation and Bioindustrial Chemistry)
Section cross-reference(s): 1, 10, 63
TI Novel polycyclic compound, TEL68M, its fermentative manufacture, and its use as antibacterial and antitumor agents
ST antibacterial antitumor TEL68M manuf Streptomyces
IT Antitumor agents
(antibiotic ; manufacture of TEL68M as antibacterial and antitumor agents with Streptomyces sp.)
IT Antibiotics
(antitumor ; manufacture of TEL68M as antibacterial and antitumor agents with Streptomyces sp.)
IT Antibiotics
Fermentation
New natural products
Streptomyces
(manufacture of TEL68M as antibacterial and antitumor agents with Streptomyces sp.)

(продолжение на след. слайде)

5. Оценка ответов

```
IT   343782-05-8P
     RL: BAC (Biological activity or effector, except adverse); BMF
     (Bioindustrial manufacture); BPN (Biosynthetic preparation); BSU
     (Biological study, unclassified); THU (Therapeutic use); BIOL
     (Biological study); PREP (Preparation); USES (Uses)
        (manufacture of TEL68M as antibacterial and antitumor  agents
        with Streptomyces  sp.)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L1   11916 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS
CC   74 (Fermentations)
TI   Production of antitumor antibiotics of the encalin
     group by actinomycetes
IT   Antibiotic substances
        (encaline group, from Streptomyces)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0
```

Для прекращения D SCAN:
0, NONE или END

STN

6. Уточнение поисковой стратегии

В зависимости от предметного материала и выбора пользователя можно расширить поиск по одним концептам и сузить по другим

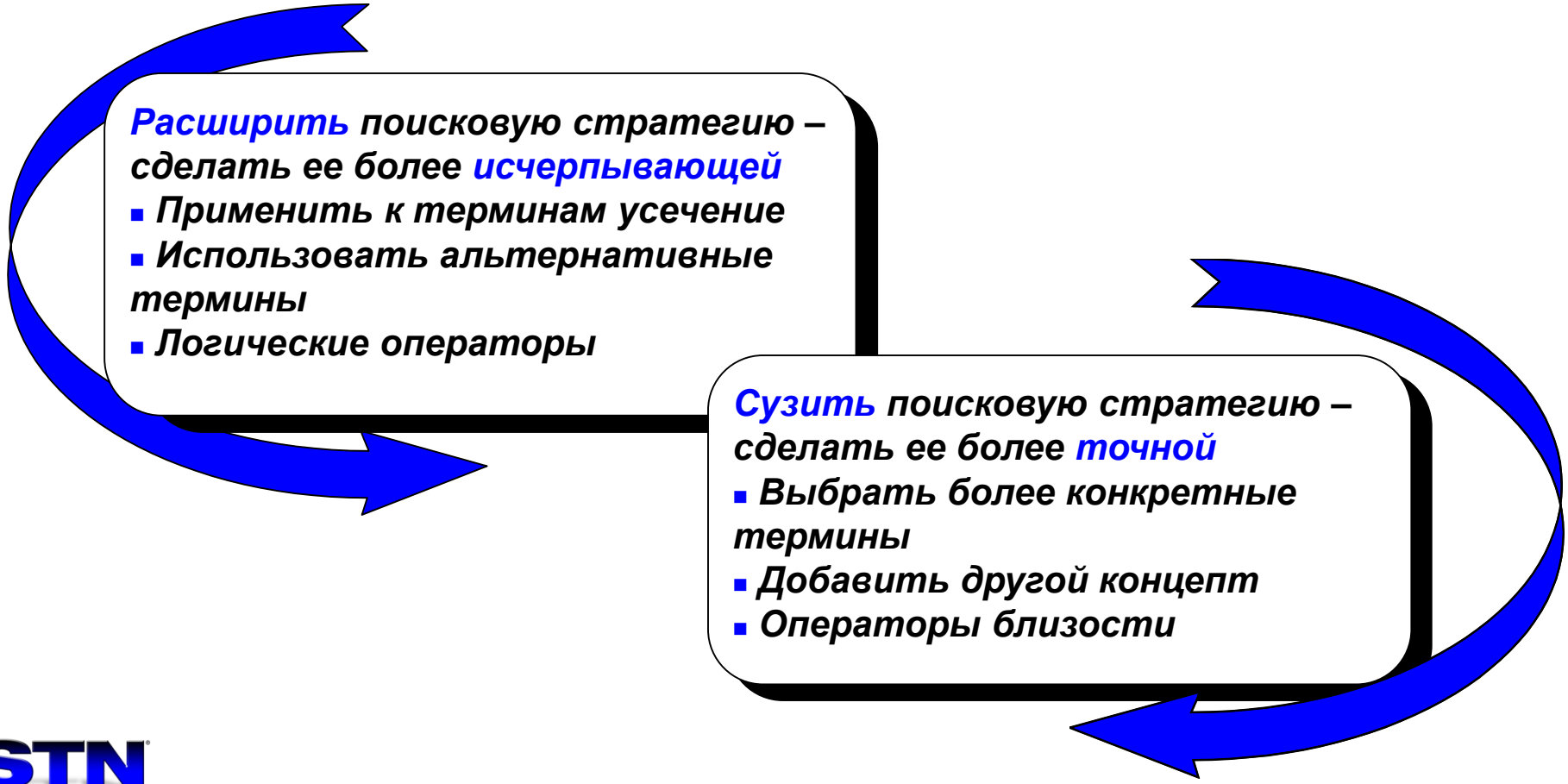
Для этого следует решить:

- ответы, просмотренные на стадии оценки – желаемые типы ответов?
- является ли большая часть ответов релевантной?
- приемлемо ли полученное количество ответов?

STN

6. Уточнение поисковой стратегии

Выбор направления



STN

Добавление альтернативной терминологии

Рабочий лист		
Задание: Посмотреть предыдущий вывод D SCAN. Идентифицировать альтернативные термины для каждого концепта. Записать их в соответствующую колонку. ***Альтернативные термины используются для создания более исчерпывающего поискового запроса.***		
Antitumor?	**Antibiotic**	**Streptomyces**
Новый запрос:		

STN

Более широкий поиск

```
=> S (ANTITUMOR? OR ANTITUMOUR? OR ANTI-TUMOR? OR ANTICANCER? OR
   NEOPLASM INHIBIT?)

L2       265344 (ANTITUMOR? OR ANTITUMOUR? OR ANTI-TUMOR? OR
                 ANTICANCER? OR NEOPLASM INHIBIT?)

=> S (ANTIBIOTIC# OR ANTIBACTER?)

L3       238537 (ANTIBIOTIC# OR ANTIBACTER?)

=> S (STREPTOMYCES OR ACTINOMYCETES)

L4        40479 (STREPTOMYCES OR ACTINOMYCETES)

=> S L2 AND L3 AND L4

L5         1608 L2 AND L3 AND L4
```

Синонимы повышают полноту поиска – найдено 418 дополнительных ответов

STN

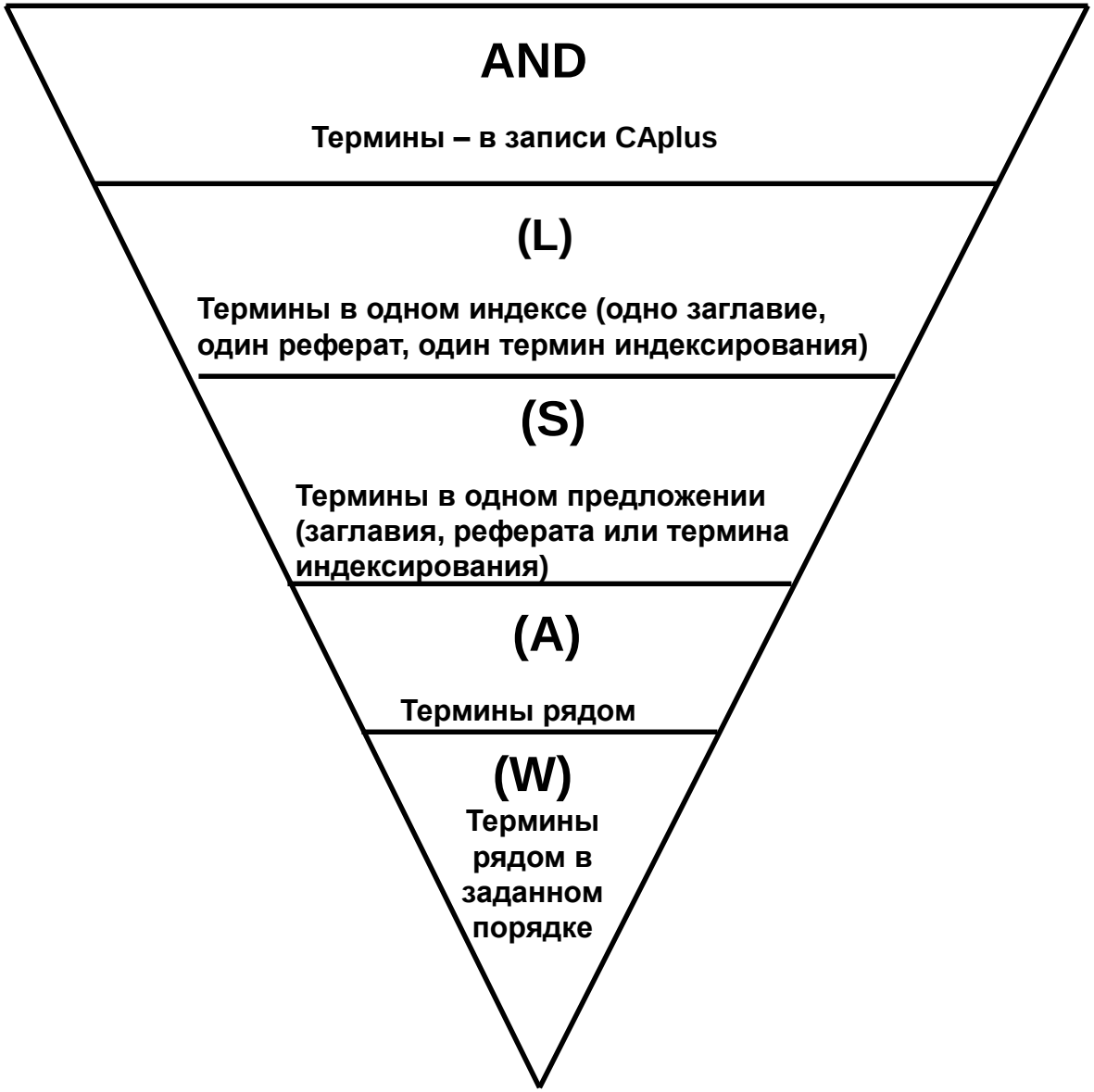
Изменение близости поисковых терминов

Используйте логический оператор **AND** между поисковыми терминами для того, чтобы найденные записи содержали все интересующие концепты

Другие операторы в БД CAplus позволяют более близко связать термины

STN

Операторы близости



Пример – поиск по запросу с большей близостью терминов

```
=> S L2 (S) L3 (S) L4

L6          808 L2 (S) L3 (S) L4
```

Оценка нового набора ответов

Для более компактного вывода можно задать поля, являющиеся частью D SCAN

```
=> D SCAN TI HIT

L6    808 ANSWERS    CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS
TI    Studies on the isotetracenone antibiotics.  II.  Kerriamycins A,
      B and C, new antitumor antibiotics
IT    Antibiotics
          (from Streptomyces violaceolatus, kerriamycins as)
IT    Neoplasm inhibitors
          (kerriamycins)
IT    Streptomyces violaceolatus
          (kerriamycins from)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
```

Оценка нового набора ответов

```
L6    808 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS
TI    Novel antibiotics, K93-0711-R4 and K93-0711-R6, and their
      manufacture with Streptomyces species
ST    anticancer antibiotic K930711R manuf
      Streptomyces; adriamycin resistant P388 leukemia inhibition
      K930711R
IT    Antitumor agents
         (antibiotic; manuf. of antibiotic K93-0711-R4 and
         K93-0711-R6 with Streptomyces sp. for inhibition of
         adriamycin-resistant P388 leukemia cell line)
IT    Antibiotics
         (antitumor; manuf. of antibiotic K93-0711-R4 and
         K93-0711-R6 with Streptomyces sp. for inhibition of
         adriamycin-resistant P388 leukemia cell line)
IT    Antitumor agents
         (leukemia; manuf. of antibiotic K93-0711-R4 and K93-0711-R6
         with Streptomyces sp. for inhibition of adriamycin-resistant
         P388 leukemia cell line)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
```

Оценка нового набора ответов

```
L6    808 ANSWERS    CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS
TI    Novel antibiotic agent, rubymycin, its manufacture with
      Streptomyces species, and its pharmaceutical uses
ST    antibiotic anticancer rubymycin manuf
      Streptomyces; antiviral antibiotic rubymycin manuf Streptomyces
IT    Antibiotics
      Fermentation
        Neoplasm inhibitors
      Streptomyces
      Virucides and Virustats
         (manuf. of antibiotic rubymycin with Streptomyces)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0
```

STN

7. Оценка ответов

Команда DISPLAY (D) обеспечивает детальный просмотр записи(ей)

Необходимо ввести:

- L-номер набора ответов
- номер(а) ответов
- формат вывода

STN

Принятые умолчания при выводе ответов

Указание в команде DISPLAY	Принятое умолчание	Примечание
L-номер набора ответов	Последний созданный L-номер	Используйте D HIS, если нужен набор ответов, созданный ранее
Номер(а) ответа(ов)	Первый ответ	Опции: 1–5 – для вывода первых пяти ответов 1, 5 – для просмотра 1 и 5 ответов
Формат	Библиографическая информация (BIB)	IBIB — Библиографическая информация с названиями полей ABS — Реферат ALL — Полная запись

СОВЕТ Информация о предопределенных форматах в файле:

=> `HELP FORMAT`

STN

7. Вывод ответов

По умолчанию записи в наборе ответов в CAplus выводятся в обратном хронологическом порядке (от новых к старым)

```
=> D L6 1, 808 IBIB ABS
L6   ANSWER 1 OF 808  CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
ACCESSION NUMBER:         2006:910077  CAPLUS
TITLE:                    Study on mechanisms of action of enediyne
                  antitumor antibiotic lidamycin
AUTHOR(S):                Gao, Rui-juan; Li, Dian-dong; Zhen, Yong-su
CORPORATE SOURCE:         Institute of Medicinal Biotechnology, Peking
                  Union Medical College, Chinese Academy of
Medical Sciences, Beijing, 100050, Peop.
                  Rep.China
SOURCE:                   Zhongguo Xinyao Zazhi (2006), 15(13), 1039-
                          1043  CODEN: ZXZHA6; ISSN: 1003-3734
PUBLISHER:                Zhongguo Xinyao Zazhi Youxian Gongsi
DOCUMENT TYPE:            Journal
LANGUAGE:                 Chinese
AB   Lidamycin (LDM), one of nine-ring enediyne antitumor
     antibiotics, was isolated by spermatogonial assay from the
     metabolic products of Streptomyces globisporus C-1027, which was
```

●●●

(продолжение на след. слайде)

STN

7. Вывод ответов

```
L6   ANSWER 808 OF 808  CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
ACCESSION NUMBER:         1953:68136  CAPLUS
DOCUMENT NUMBER:          47:68136
ORIGINAL REFERENCE NO.:   47:11551g-h
TITLE:                    A review on the mechanism of action of
certain
                          temporary anticancer agents
AUTHOR(S):                Skipper, Howard E.
CORPORATE SOURCE:         Southern Research Inst., Birmingham, AL
SOURCE:                   Cancer Research (1953), 13, 545-51
                          CODEN: CNREA8; ISSN: 0008-5472
DOCUMENT TYPE:            Journal
LANGUAGE:                 Unavailable
AB   A review on the possible sites of biochem. action of temporary
     anticancer agents, e.g., 4-aminopteroylglutamic acids, urethan,
     formamide, 2,6-diaminopurine, 8-azaguanine, 2,4-
     diaminopyrimidines, A-methopterin, netropsin (an antibiotic from
     Streptomyces netropsis), N mustard, cortisone, and x-radiation.
     52 references
```

STN

Вывод индивидуальных индексов

СОВЕТ **Во многих случаях индивидуальные индексы можно выводить независимо с помощью дисплейных кодов:**

```
=> D   L8   5   TI   LA
```

Уточнение набора ответов

Возможно уточнение набора ответов поисковыми терминами, не содержащимися в Basic Index

В специализированных индексах можно использовать поисковые термины для указания того, что записи должны быть из документа:

- определенного типа – например, патент, оригинальная или обзорная статья в журнале
- на определенном языке
- в определенный период времени

STN

Специализированный индекс Document Type

Индекс Document Type (DT) указывает на тип источника

Пример – уточнение поискового запроса

Какие обзоры опубликованы по противоопухолевой активности антибиотиков из Streptomyces?

STN

Специализированный индекс Document Type

Для идентификации термина, характеризующего тип документа (зависит от БД!), используется команда **EXPAND**

Так как индекс Document Type невелик, то один из способов определения релевантного термина – его полный просмотр

```
=> E A/DT
**** START OF FIELD *
E3            0 --> A/DT
E4       269768     B/DT
E5        10675     BIO/DT
E6        10675     BIOGRAPHY/DT
E7       269768     BOOK/DT
E8        41130     BOOK REVIEW/DT
E9        41130     BR/DT
E10     1127619     C/DT
E11         121     COMPUTER MAGNETIC DISK/DT
E12      102883     COMPUTER OPTICAL DISK/DT
```

STN

Специализированный индекс Document Type

```
=> E

E13     1127619      CONFERENCE/DT
E14      400983      D/DT
E15      400983      DISSERTATION/DT
E16       18092      ED/DT
E17       18092      EDITORIAL/DT
E18       12140      ER/DT
E19       12140      ERRATA/DT
E20     1968340      GENERAL REVIEW/DT
E21     1968340      GR/DT
E22    19297492      J/DT
E23    19297492      JOURNAL/DT
E24       20950      LE/DT

=> S L6 AND GENERAL REVIEW/DT

L8           25 L6 AND GENERAL REVIEW/DT
```

«General Review» – поисковый термин для обзоров в индексе DT

«GR» и «General Review» – синонимы

STN

Специализированный индекс Document Type

```
=> D L8 7 IBIB
L8   ANSWER 7 OF 25  CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS
ACCESSION NUMBER:         2001:101861  CAPLUS
DOCUMENT NUMBER:          135:151646
TITLE:                    Paramagnetic chromoprotein enediyne
                          antibiotic C-1027: chemical mechanism
AUTHOR(S):                Hirama, Masahiro; Noda, Takeshi; Iida, Kyo-
                          ichiro; Sato, Itaru; Hanaishi, Ryuji;
                          Fukuda, Sumiko; Yoshimura, Fumihiko; Mita,
                          Takashi; Akiyama, Kimio; Tanaka, Toshiyuki;
                          Otani,              Toshio; Leet, John E.
CORPORATE SOURCE:         Department of Chemistry, Tohoku University,
                          Japan
SOURCE:                   Tennen Yuki Kagobutsu Toronkai Koen Yoshishu
                          (2000), 42nd, 229-234
                          CODEN: TYKYDS
PUBLISHER:                Nippon Kagakkai
DOCUMENT TYPE:            Journal; General Review
LANGUAGE:                 Japanese
```

Специализированный индекс Language

Индекс Language (LA) содержит данные о языке оригинального документа – источника записи

Пример – уточнение поискового запроса

Ограничим набор ответов обзорами, опубликованными на **английском** языке

STN

Специализированный индекс Language

Для идентификации термина, характеризующего интересующий язык публикации, применяется EXPAND

```
=> E ENGLISH/LA
E25    15511831      EN/LA
E26    15511831      ENG/LA
E27    15511831 --> ENGLISH/LA
E28         143      EO/LA
E29       85142      ES/LA
E30         143      ESPERANTO/LA
E31         402      ESTONIAN/LA
E32         402      ET/LA
E33         121      EU/LA
E34        3587      FA/LA
E35        4136      FI/LA
E36        4136      FINNISH/LA

=> S L8 AND ENGLISH/LA
L9           17 L8 AND ENG/LA
```

EN и ENG – сокращенные формы слова ENGLISH, являются синонимами

STN

Специализированный индекс Language

```
=>  D L9 17 BIB

L9    ANSWER 17 OF 17  CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS
AN    1975:68701  CAPLUS
DN    82:68701
TI    Recent trends in the screening of new antibiotics
AU    Gauze, G. F.
CS    Inst. New Antibiot., Moscow, USSR
SO    Postepy Hig. Med. Dosw. (1974), 28(4), 471-7
      CODEN: PHMDAD
DT    Journal; General Review
LA    English
```

STN

Специализированный индекс Publication Year

Для выбора года публикации документа используется индекс Publication Year (PY)

Пример – уточнение поискового запроса

Выявить обзоры, опубликованные на английском языке, начиная с **2002** г.

STN

Специализированный индекс Publication Year

Уточнение времени публикаций возможно в нескольких форматах:

- отдельные годы: PY=2002 или 2002/PY
- интервалы лет: 1997-2002/PY или PY>=1997

```
=> S L9 AND PY>=2000

L10             6 L9 AND PY>=2000
```

STN

Специализированный индекс Publication Year

```
=> D L10 1-2 BIB
L10  ANSWER 1 OF 6  CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
AN   2005:502917  CAPLUS
DN   143:221590
TI   Bleomycin lung toxicity: who are the patients with increased risk?
AU   Azambuja, E.; Fleck, J. F.; Batista, R. G.; Menna Barreto, S. S.
CS   Department of Clinical Oncology, Hospital de Clinicas de Porto
     Alegre, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Porto
     Alegre, RS, Brazil
SO   Pulmonary Pharmacology & Therapeutics (2005), 18(5), 363-366
     CODEN: PPTHFJ; ISSN: 1094-5539
PB   Elsevier B.V.
DT   Journal; General Review
LA   English
RE.CNT  37    THERE ARE 37 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
              ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT
```

(продолжение на след. слайде)

STN

Специализированный индекс Publication Year

```
L10  ANSWER 2 OF 6  CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
AN   2005:270700  CAPLUS
DN   143:192329
TI   Production of erythromycin with Saccharopolyspora erythraea
AU   Minas, Wolfgang
CS   Anbics Management-Services AG, Zurich, Switz.
SO   Methods in Biotechnology (2005), 18(Microbial Processes and
     Products), 65-89
     CODEN: MEBIFQ
PB   Humana Press Inc.
DT   Journal; General Review
LA   English
RE.CNT  27    THERE ARE 27 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
              ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT
```

STN

Резюме

Стратегия поиска по ключевым словам в БД CAplus

1	**Определение поискового запроса.**	
2	**Построение поискового запроса.**	
	A. Основные концепты & синонимы	
	B. Логические опреаторы	**AND, OR**
3	**Проведение предварительного поиска.**	
	Ввод CAplus	**=> FILE CAPLUS**
	Проверка поисковых терминов	**=> E ANTIBIOTIC**
	Создание набора поисковых терминов	Множественные формы, сокращения и усечения для альтернативных форм слов
	Проведение поиска	**=> S STREPTOMYCES AND ANTIBIOTIC# AND ANTITUMOR?**

STN

Резюме

Стратегия поиска по ключевым словам в БД CAplus

4	**Оценка ответов.**	=> **D SCAN**
5	**Уточнение стратегии поиска.**	
	Термины БД	=> **S (ANTITUMOR OR ANTI-TUMOR OR ANTITUMOUR OR ANTICANCER OR NEOPLASM INHIBIT?)**
	Операторы близости	=> **S L2 (S) L3 (S) L4**
6	**Детальный вывод ответа (ов).**	=> **D L6 2 IBIB ABS**
Доп.	**Уточнение набора ответов.** **Перегруппировка набора ответов.**	Специализированные индексы **SORT, FOCUS**

STN

2. **Поиск по авторам и организациям**

- ☑ Поиск работ определенного автора
- ☑ Поиск работ определенной организации

Поиск по автору

Часто нужно найти работы определенного автора или группы авторов

Наиболее эффективный способ – поиск по имени автора с использованием специализированного индекса

STN

Поиск по автору

Поисковый запрос:

Найти публикации ***Matthew Callstrom*** *по стеклоуглеродистым материалам*

Стратегия поиска

статей определенного автора

STN

1. Составление поискового запроса

Рабочий лист	
Задание: Впишите каждый концепт поискового предписания в отдельную колонку рабочего листа.	
Концепт 1	**Концепт 2**

2. Предварительный поиск

Индекс Author (AU) содержит имена авторов, чьи труды проиндексированы в БД CAplus

Имена хранятся в следующем виде: фамилия, первое имя (инициал), среднее имя (инициал)

STN

2. Предварительный поиск

Рекомендуется использовать команду **EXPAND** для проверки:

- наличия имени в БД
- вариаций написания имени – в разных публикациях имя автора может быть представлено различным образом

STN

2. Предварительный поиск

```
=> FILE CAPLUS

=> E CALLSTROM M/AU 8

E1           22      CALLSEN JURGEN/AU
E2            1      CALLSEN T/AU
E3            0 --> CALLSTROM M/AU
E4            1      CALLSTROM M R/AU
E5            3      CALLSTROM MATTHEW/AU
E6           43      CALLSTROM MATTHEW R/AU
E7            1      CALLSTROM MATTHEW RAYMOND/AU
E8            4      CALLTHARP GLEN R/AU

=> S CALLSTROM M?/AU

L1           48 CALLSTROM M?/AU
```

Вариации первого имени/инициала учтены с использованием усечения

STN

3. Уточнение поисковой стратегии

Результаты поиска можно уточнить с использованием предметной терминологии, характеризующей исследования автора

```
=> S L1 AND GLASS? (2A) CARBON#

         789063 GLASS?
        1238306 CARBON#
          18602 GLASS?(2A)CARBON#
L2           22 L1 AND GLASS?(2A)CARBON#
```

4. Вывод ответов

```
=> D
L2   ANSWER 1 OF 22  CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS
AN   1995:896522  CAPLUS Full-text
DN   123:324509
TI   Glassy  carbon containing metal particles and its use
     on an electrode in an electrochemical cell where the
     particles are less than 10 nm
IN   Callstrom, Matthew R.; McCreery, Richard L.
PA   The Ohio State University, USA
SO   U.S., 12 pp. Cont.-in-part of U.S. Ser. No. 748,263.
     CODEN: USXXAM
DT   Patent
LA   English
FAN.CNT 3
     PATENT NO.         KIND  DATE          APPLICATION NO.  DATE
     ---------------    ----  --------      ---------------  --------
PI   US 5453169          A    19950926      US 1993-20198    19930219
     WO 9419515          A1   19940901      WO 1994-US1735   19940218
         W:  CA, JP
         RW: AT, BE, CH, DE, DK, ES, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL,
             PT, SE
     US 5645809          A    19970708      US 1995-529658   19950918
PRAI US 1991-748263            19910821
     US 1993-20198             19930219
```

Советы по поиску авторов

Для имен авторов	Пример	Совет	Пример
Когда есть сомнения о форме имени автора в БД	Karl Wurth Karl A. Wurth K. A. Wurth	EXPAND – фамилия и инициал	WURTH K/AU
С внутренней пунктуацией (апострофы, дефисы)	O'Brian	EXPAND – варианты написания с и без пунктуации	OBRIAN/AU O BRIAN/AU
С внутренними пробелами	La Bar	EXPAND – варианты написания с и без пробела	LA BAR/AU LABAR/AU
Содержащее умляут	Müller	EXPAND – варианты с замещениями ■ ae for ä ■ oe for ö ■ ue for ü	MUELLER/AU MULLER/AU

Советы по поиску авторов

Для имен авторов	Пример	Совет	Пример
Когда есть сомнения по фамилии Когда имена транслитерированы из другого алфавита, например, из кириллицы	Bing Chen	EXPAND – оба имени как фамилия EXPAND – используя альтернативное написание	BING/AU CHEN/AU …SKI/AU …SKY/AU

Поиск по названию организации

Важное применение специализированного индекса – поиск по названию организаций, включающих:

- корпорации / фирмы
- университеты / исследовательские институты
- правительственные агентства

STN

Формы названий организаций

В документах названия организаций могут быть приведены в различных формах:

- используются сокращения
- названия могут изменяться со временем

STN

Формы названий организаций

Пример:

Названия организации	Пример
Приводится полностью	General Electric
В сокращенной форме	General Elec.
Представлено акронимом	GE
Включает дополнительные слова	Co., Corp., Inc., GmBH, т.д.

STN

Поиск по названию организации

Поисковый запрос:

Найти патенты Hershey (шоколад или какао)

Стратегия поиска

исследований, проводимых интересующей организацией

STN

1. Построение поискового запроса

Рабочий лист	
Задание: Впишите каждый концепт в отдельную колонку.	
Концепт 1	**Концепт 2**

2. Проведение предварительного поиска

Индекс Corporate Source (CS) БД CAplus содержит названия организаций, в которых работают авторы проиндексированных статей

Названия организаций в БД CAplus:

- указываются только для первого автора статьи
- индексируются так, как приведены в статьях

STN

2. Проведение предварительного поиска

Названия организаций можно искать в индексе Corporate Source двумя способами:

- по ***полной*** (монолитной) ***фразе*** – как содержится в записи
- по ***отдельным словам*** из фразы

STN

2. Проведение предварительного поиска

для проверки присутствия в БД:

- искомого названия
- его вариантов

используется команда **EXPAND**

STN

2. Проведение предварительного поиска

```
=> FILE CAPLUS

=> E HERSHEY/CS
E1            1      HERSHERY/CS
E2            3      HERSHEV/CS
E3         5760 --> HERSHEY/CS
E4            1      HERSHEY CHOCOLATE AND CONFECTIONARY CORPORATION/CS
E5            1      HERSHEY CHOCOLATE AND CONFECTIONARY CORPORATION USA/CS
E6            1      HERSHEY COMPANY HERSHEY PA 17033 0805 USA/CS
E7            1      HERSHEY CORP HERSHEY CUBA/CS
E8            1      HERSHEY ELEMENTARY SCHOOL HERSHEY USA/CS
E9            1      HERSHEY ENTERTAINMENT RESORTS COMPANY/CS
E10           1      HERSHEY ENTERTAINMENT RESORTS COMPANY USA/CS
E11           1      HERSHEY FOOD TECH CENT HERSHEY PA 17033 USA/CS
E12          11      HERSHEY FOODS CORP/CS
```

STN

2. Проведение предварительного поиска

```
=> E
E13      1      HERSHEY FOODS CORP HERSHEY PA 17033 1025 USA/CS
E14     15      HERSHEY FOODS CORP HERSHEY PA 17033 USA/CS
E15      3      HERSHEY FOODS CORP HERSHEY PA USA/CS
E16      1      HERSHEY FOODS CORP TECH CENT HERSHEY PA 17033 0805 USA/CS
E17      1      HERSHEY FOODS CORP TECH CENT HERSHEY PA 17033 USA/CS
E18     12      HERSHEY FOODS CORP USA/CS
E19     13      HERSHEY FOODS CORPORATION/CS
E20      1      HERSHEY FOODS CORPORATION TECHNICAL CENTER HERSHEY PA 17033
                USA/CS
E21     11      HERSHEY FOODS CORPORATION USA/CS
E22      1      HERSHEY FOODS HERSHEY PA 17033 USA/CS
E23      1      HERSHEY FOODS RES HERSHEY PA 17033 USA/CS
E24      2      HERSHEY FOODS RES LAB HERSHEY PA USA/CS


=> S E3
L1          5760 HERSHEY/CS
```

Все варианты, содержащие Hershey, охватываются E3

STN

3. Уточнение поисковой стратегии

Возможно посредством:

- использования предметной терминологии, релевантной интересующему исследованию
- конкретизации типа документа (например, патент)

```
=> S L1 AND (CHOCOLAT? OR COCOA?) AND PATENT/DT

          7672 CHOCOLAT?
         10866 COCOA?
       5472911 PATENT/DT
L2           16 L1 AND (CHOCOLAT? OR COCOA?) AND PATENT/DT
```

STN

3. Уточнение поисковой стратегии

Прим

Информация о названии организации для патентов дублируется для индексов

- **Corporate Source (CS)**
- **Patent Assignee (PA)**

Можно использовать:

- **Company Name Thesaurus (CO)**

STN

4. Вывод ответов

```
=> D 5-6 BIB ABS
L2   ANSWER 5 OF 16  CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
AN   2003:295304  CAPLUS
DN   138:270666
TI   Process for crystallizing amorphous lactose in milk powder
IN   Baker, Brian S.; Zerphy, Gregory T.; Cook, Brandt C.
PA   Hershey Foods Corporation, USA
SO   U.S., 9 pp.
     CODEN: USXXAM
DT   Patent
LA   English
FAN.CNT 1
     PATENT NO.          KIND   DATE        APPLICATION NO.      DATE
     --------------      ----   --------    -------------------- --------
PI   US 6548099           B1    20030415    US 2000-723397       20001128
PRAI US 2000-723397              20001128
                                   ● ● ●
RE.CNT  61    THERE ARE 61 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
              ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT
```

STN

4. Вывод ответов

```
L2   ANSWER 6 OF 16  CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
AN   1998:816101  CAPLUS
DN   130:57221
TI   Use of hydrolyzed cocoa butter for percutaneous absorption
IN   Zoumas, Barry L.; Tarka, Stanley M.; McKim, J. Michael; Simmons,
        Bryan J.;Marks, James G., Jr.; Santanna, Michael
PA   Hershey Foods Corporation, USA
SO   U.S., 16 pp.
     CODEN: USXXAM
DT   Patent
LA   English
FAN.CNT 1
     PATENT NO.          KIND   DATE        APPLICATION NO.      DATE
     ---------------     ----   --------    -------------------- --------
PI   US 5849729           A     19981215    US 1995-578455       19951226
PRAI US 1995-578455             19951226
                                  ● ● ●
RE.CNT  38    THERE ARE 38 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
              ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT
```

STN

Советы по поиску названия организации

Название компании	Пример	Совет	Пример
Изменилось со временем	Corning Glass Works USA Corning USA	Поиск по постоянной части компании	CORNING/CS
Пробел в названии – изменился со временем	DuPont Du Pont	Поиск по названию с пробелом и без	(DUPONT OR DU PONT)/CS

STN

Советы по поиску названия организации

Название компании	Пример	Совет	Пример
Слияние компаний с образованием нового названия	Ciba-Geigy + Sandoz ↓ Novartis	Поиск по текущему и прежним названиям	(CIBA GEIGY OR SANDOZ OR NOVARTIS)/ CS
Содержит “and” или &	P AND G P&G	Исключить из запроса “and” или &	P G/CS

STN

Советы по поиску названия организации

Название компании	Пример	Совет	Пример
Содержит такие слова, как Co., Corp., Inc.	Intel Corp. Intel Corporation	Исключить слово или сокращение из запроса	INTEL/CS
Разные названия для филиалов	Rockwell International Science Center Rockwell International Electron Research Center	Поиск по общей части названия	ROCKWELL/CS

STN

Резюме: Специализированные индексы

Требование	Индекс	Пример
Ограничение типом документа	/DT	Патенты: => S L7 AND PATENT/DT Статьи из журналов: => S L7 AND JOURNAL/DT
Ограничение по языку	/LA	Немецкий язык => S L7 AND GERMAN/LA
Ограничение временными рамками	/PY	Год: => S L7 AND 1996/PY => S L7 AND PY=1996 Интервал лет: => S L7 AND 1994-1996/PY => S L7 AND PY>=2001
Поиск по конкретному автору	/AU	=> S CALLSTROM M?/AU
Поиск по месту работы автора	/CS	=> S HERSHEY/CS

STN

Обработка результатов поиска в БД сети STN International

Сохранение поисков, запросов или наборов ответов

Использование сохраненных поисков, запросов или наборов ответов

Работа с файлами-транскриптами

STN

Хранение поисков

Сеть STN International предоставляет ряд возможностей сохранения и последующего использования:

- наборов ответов
  => **SAVE SKINSUBS1/A**
- запросов
  => **SAVE SKINSUBS2/Q**
- списков L-номеров
  => **SAVE SKINSUBS3/L**

Информация сохраняется под идентификатором (login id).

STN

Управление сохраненными поисками

Команды для управления сохраненными результатами поиска:

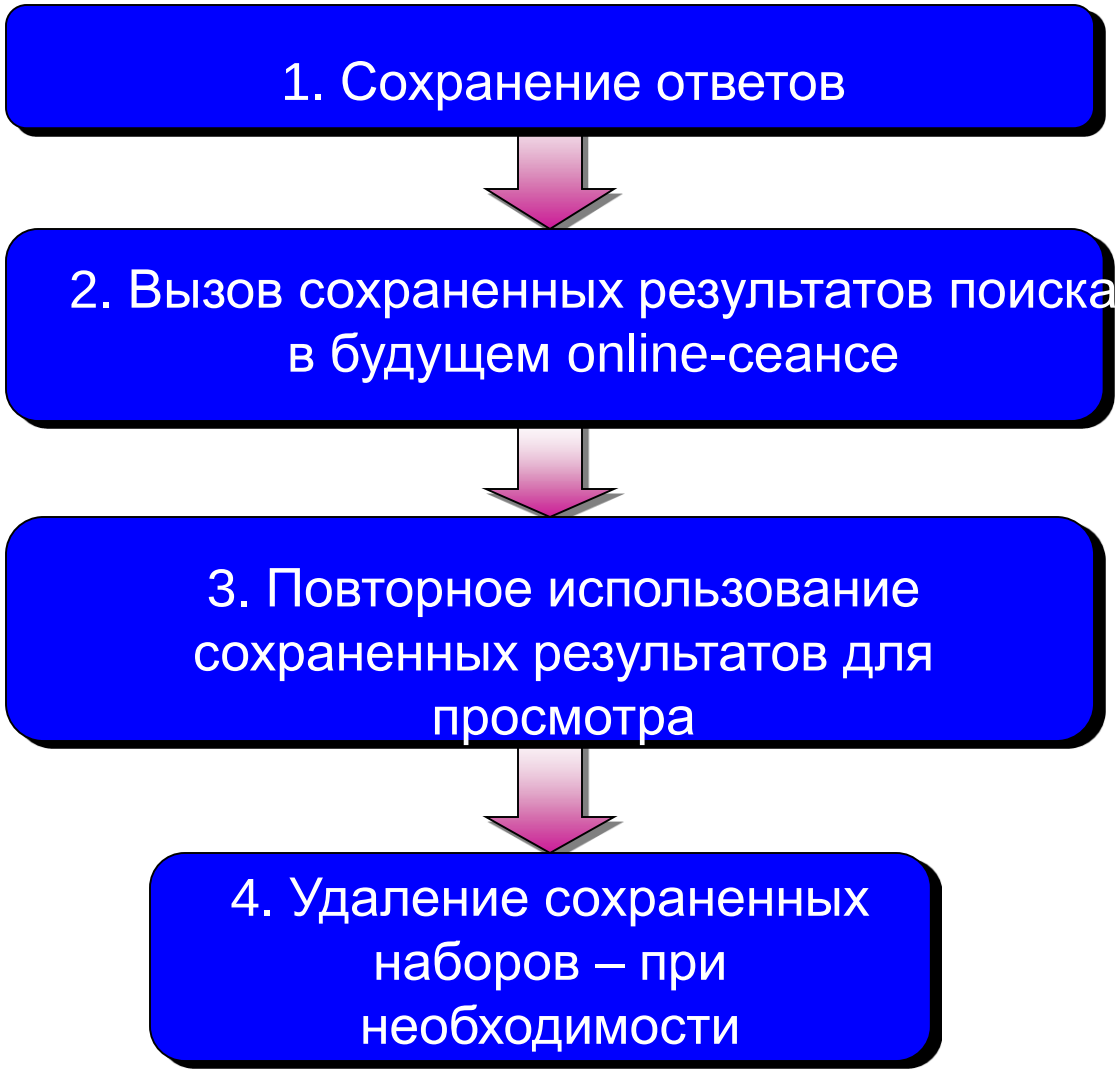
SAVE, ACTIVATE и **DELETE**

Возможности хранения

Имеются две возможности:

Чтобы сохранить информацию	Опция SAVE
Долговременно	SAVE
От 7-14 дней (истекает во 2 пятницу)	SAVE TEMP

Хранение и управление результатами



STN

Сохранение ответов

Для сохранения набора ответов требуется ввести:

- L-номер набора ответов
- имя файла
- название (дополн.)

Название должно начинаться с буквы, иметь 1-12 символов, содержать только буквы или цифры, и заканчиваться на /A. Слово TITLE должно быть включено в командную строку, если хотите добавить название

```
=> SAVE TEMP TITLE

ENTER L#, L# RANGE, ALL, OR (END):L2
ENTER NAME OR (END): SKINSUBS1/A
ENTER TITLE (NONE):PREPARATION OF SKIN SUBSTITUTES
ANSWER SET L2 HAS BEEN SAVED AS 'SKINSUBS1/A'
```

STN

Вызов сохраняемых результатов

Команда D SAVED вызывает все сохраняемые наборы

```
=> D SAVED
NAME             CREATED      NOTES/TITLE
--------------   -----------  -----------------------------------
ALLKW/A          15 MAY 2003  161 ANSWERS
                              158 ANSWERS IN FILE HCAPLUS
                              3 ANSWERS IN FILE WPINDEX
CAKW/A           15 JUN 2004  309 ANSWERS IN FILE HCAPLUS
CASEQ/A          14 AUG 2003  76 ANSWERS IN FILE HCAPLUS
CASSEP/A         09 NOV 2002  54 ANSWERS IN FILE CAPLUS
NEWHITS/A        14 AUG 2004  6 ANSWERS IN FILE HCAPLUS
SKINSUBS1/A      TEMP         361 ANSWERS IN FILE CAPLUS
                              PREPARATION OF SKIN SUBSTITUTES
WPIKW/A          20 AUG 2004  3 ANSWERS IN FILE WPINDEX
```

Повторное использование сохраненных результатов

Сохраненные наборы можно вызвать с помощью команды ACTIVATE

Повторный поиск по запросу не проводится, в наборе присутствуют лишь ответы, которые были сохранены

При активации сохраненный набор не удаляется из хранилища

STN

Детальный просмотр результатов

```
=> FILE CAPLUS

=> ACTIVATE SKINSUBS1/A
L3          349 SEA FILE=CAPLUS (SKIN OR DERMAL) (2A) (SUBSTITUTE# OR
            ARTIFICIAL) AND (PREPN# OR PREPARATI

=> D L3 12 BIB ABS
L3   ANSWER 12 OF 349  CAPLUS  COPYRIGHT 2004 AC
AN   2004:212886  CAPLUS
TI   Change in cell adhesion property on cytocompatible interface using
     phospholipid polymer grafted with poly(d,l-lactic acid) segment for
     tissue engineering
AU   Watanabe, Junji; Ishihara, Kazuhiko
CS   School of Engineering, Department of Materials Engineering, The
     University of Tokyo, Tokyo, 113-8656, Japan
SO   Science and Technology of Advanced Materials (2003), 4(6), 539-544
     CODEN: STAMCV; ISSN: 1468-6996
PB   Elsevier Ltd.
DT   Journal
LA   English
AB   Tissue engineering is a multi-disciplinary science that utilizes basic
     principles from materials engineering and mol. biol. to reconstruct
```

● ● ●

Наборы ответов должны активироваться в файле(ах), в которых были созданы

Очередной L-номер текущего сеанса будет приписан активированному набору ответов

STN

Поиск по активированному набору ответов

Активированный набор ответов можно уточнить с помощью дополнительных поисковых терминов

- Сеть STN не обновляет поиск – не будут найдены ответы, добавленные в БД после сохранения набора
- Будут отобраны ответы в сохраненном / активированном наборе, соответствующие дополнительному требованию

```
=> S L3 AND PY>=1998
        6193571 PY>=1998
L4          181 L3 AND PY>=1998
```

STN

Удаление наборов из хранилища

Сохраненные наборы можно удалить из долговременного хранения с помощью команды DELETE

```
=> D SAVED

                              • • •

=> DEL SKINSUBS1/A

DELETE SKINSUBS1/A? (Y)/N:Y
```

STN

Работа с файлами-транскриптами

STN on the Web

Транскрипты сохраняются на время сеанса

Они доступны через Transcript Assistant в течение 4 дней

Их можно выгружать в форматах PDF, RTF или HTML

STN

Работа с файлами-транскриптами

STN Express

Транскрипты можно сохранять в форматах TRN или RTF

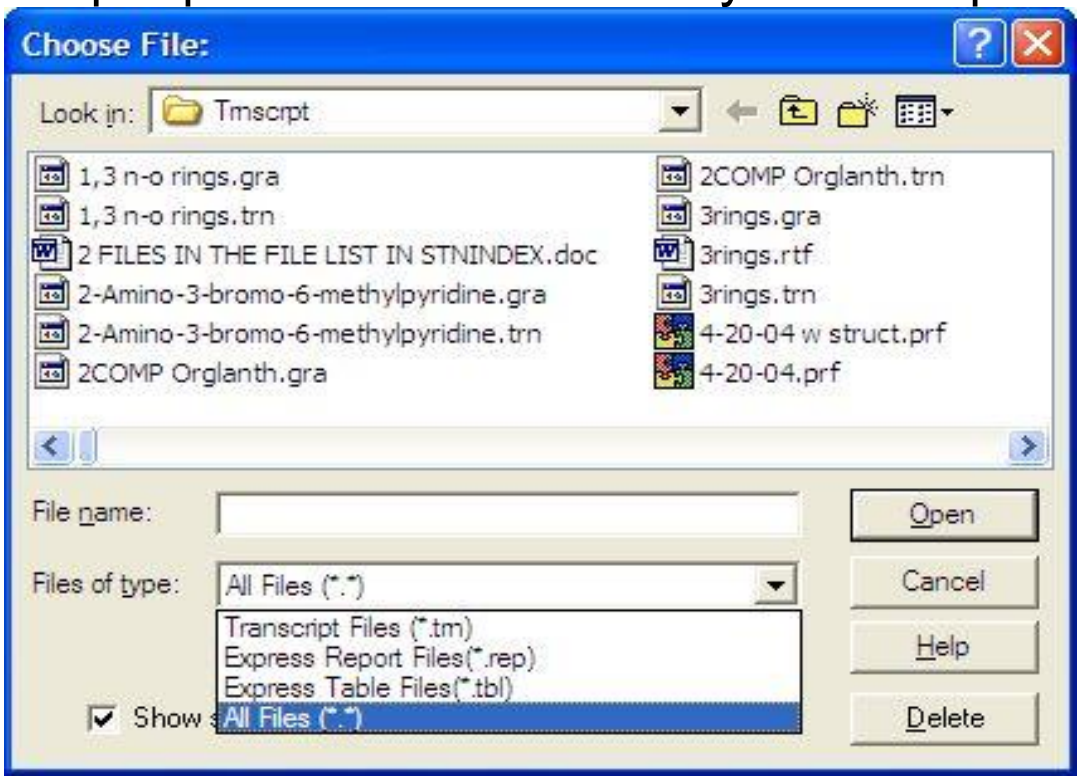
- формат TRN – по умолчанию в STN Express
- файл TRN можно сохранить как RTF
- STN Express предоставляет возможности последующей обработки результатов для создания профессиональных поисковых отчетов

STN

Открытие сохраненного транскрипта в STN Express

В главном меню STN Express нужно выбрать опцию **Results…Open**

- По умолчанию выводятся файлы TRN
- Для просмотра файлов RTF в меню нужно выбрать опцию All files



3. Поиск химических веществ

Поиск информации о химических веществах в БД Registry^{SM} и CAplus^{SM}

- **информация о веществе**
- **поиск по химическому названию**
- **поиск по молекулярной формуле**

STN

Информация о веществе

- Содержание БД Registry и БД CAplus
- БД Registry – стартовая точка
- Синергетика* БД Registry и БД CAplus

* *Syn-ergos*, *συνεργός* – работать вместе

STN

БД Registry

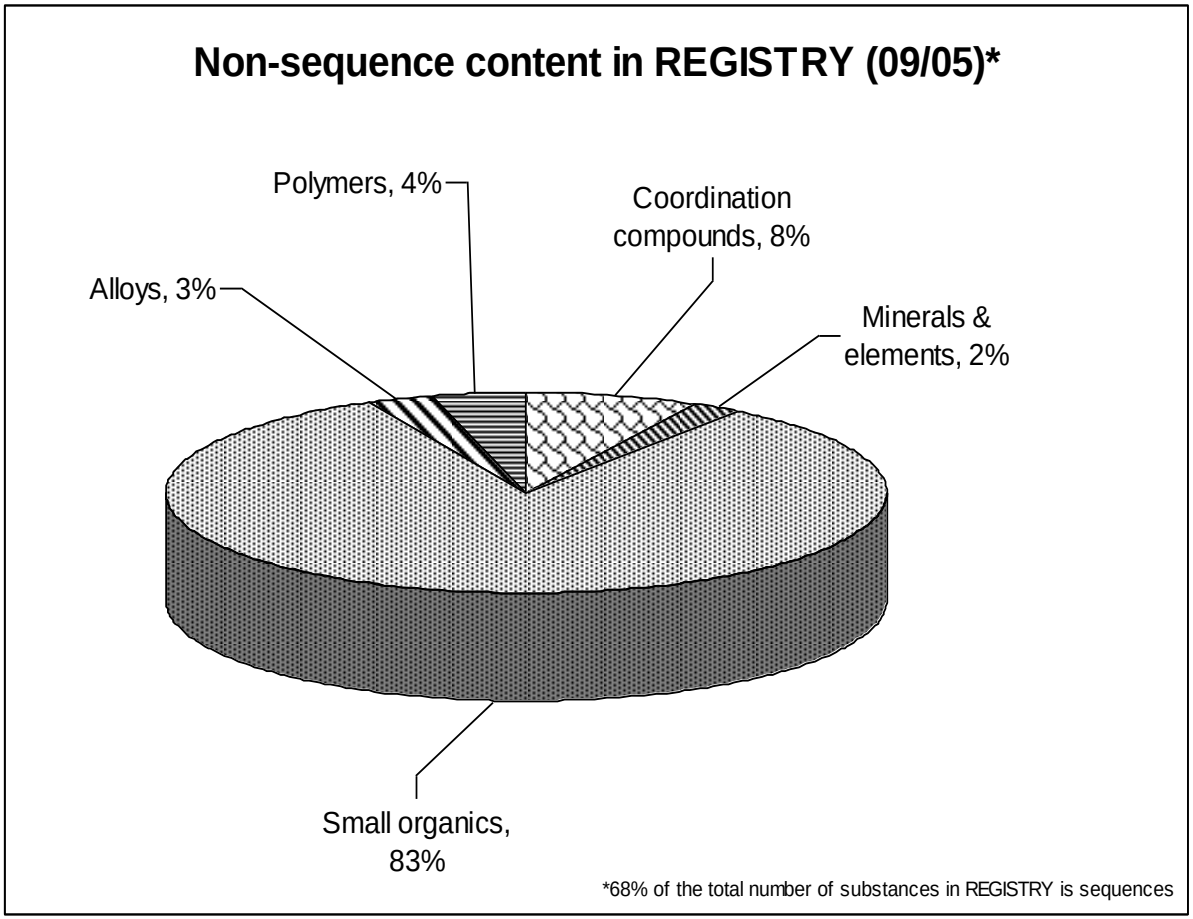
БД **Registry** содержит записи для химических веществ, регистрируемых CAS с 1907 г.

Индексируются все типы химических веществ:

- органические
- неорганические
- биоследовательности
- полимеры
- металлы и сплавы

STN

БД Registry


Non-sequence content in REGISTRY (09/05)*
Polymers, 4%
Coordination compounds, 8%
Alloys, 3%
Minerals & elements, 2%
Small organics, 83%
*68% of the total number of substances in REGISTRY is sequences

Идентифицирующая вещество информация

БД Registry содержит идентифицирующую информацию для веществ

Записи в БД Registry могут содержать:

- химические названия, в том числе систематические
- структуры
- биопоследовательности
- регистрационные номера веществ – CAS RN

БД Registry – самый авторитетный и полный источник CAS RN

STN

Записи в БД Registry

Информация в записях в БД Registry организована в серии индексов

Полный список индексов содержится в Database Summary Sheet

БД Registry

```
RN   83-67-0  REGISTRY
CN   1H-Purine-2,6-dione, 3,7-dihydro-3,7-dimethyl- (9CI)
     (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN   Theobromine (8CI)
OTHER NAMES:
CN   3,7-Dimethyl-3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione
CN   3,7-Dimethylxanthine
CN   Diurobromine
CN   Santheose
CN   SC 15090
CN   Teobromin
CN   Theosalvose
CN   Theostene
CN   Thesal
MF   C7 H8 N4 O2
```

(продолжение на след. слайде)

STN

БД Registry

CI COM

LC STN Files: ADISNEWS, AGRICOLA, ANABSTR, AQUIRE, BEILSTEIN*, BIOBUSINESS, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CABA, CANCERLIT, CAOLD, CAPLUS, CASREACT, CBNB, CHEMCATS, CHEMINFORMRX, CHEMLIST, CIN,CSCHEM, DDFU, DETHERM*, DIOGENES, DRUGU, EMBASE, GMELIN*, HODOC*, IFICDB, IFIPAT, IFIUDB, IPA, MEDLINE, MRCK*, NAPRALERT, NIOSHTIC, PROMT, RTECS*, SPECINFO, SYNTHLINE, TOXCENTER, ULIDAT, USAN, USPAT2, USPATFULL, VETU, VTB

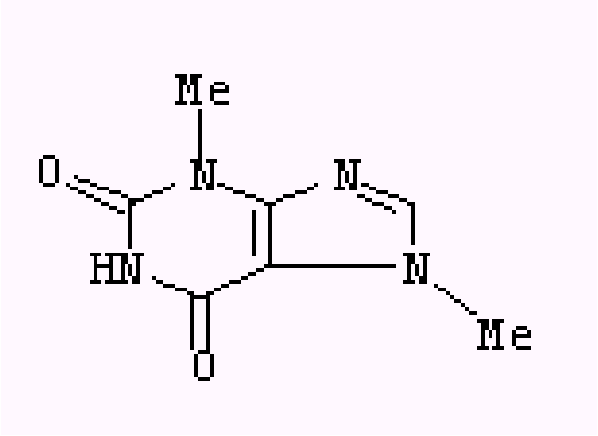
(*File contains numerically searchable property data)

Other Sources: DSL**, EINECS**, TSCA**

(**Enter CHEMLIST File for up-to-date regulatory information)

(продолжение на след. слайде)

БД Registry



Экспериментальные и расчетные свойства для конкретных веществ в БД Registry

```
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

          3033 REFERENCES IN FILE CA (1962 TO DATE)
            36 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES
               IN FILE CA
          3034 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1962 TO DATE)
             5 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)
```

STN

Пример информации по свойствам вещетва в БД Registry

Experimental Properties (EPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	NOTE	
Melting Point (MP)	357 deg C	(1)	APC
Melting Point (MP)	357 deg C	(2)	SRC
Melting Point (MP)	352-355 deg C	(3)	IC
Melting Point (MP)	350 deg C	(4)	IC

(1) "Drugs - Synonyms and Properties" data were obtained from Ashgate Publishing Co. (US) CAPLUS
(2) "PhysProp" data were obtained from Syracuse Research Corporation of Syracuse, New York (US)
(3) Hilgers, Georg; EP 319854 A2 1989 CAPLUS
(4) Bugglin, Marius; DE 3929589 A1 1991 CAPLUS

See HELP PROPERTIES for information about property data sources in REGISTRY.

Пример информации по свойствам вещества в БД Registry

Experimental Property Tags (ETAG)

PROPERTY	NOTE
IR Absorption Spectra	(1) CAS
IR Spectra	(2) CAS
Mass Spectra	(3) CAS
6 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	
Melting Point	(4) IC
Raman Spectra	(5) CAS
1 more tag shown in the MAX or ETAGFULL formats	
Solubility	(6) IC
UV and Visible Absorption Spectra	(7) CAS
3 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	
UV and Visible Emission/Luminescence Spectra	(8) CAS
2 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats	

(1) Gunasekaran, S.; Spectrochimica Acta, Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy 2004 V61A(1-2) P117-127 CAPLUS

Пример информации по свойствам вещества в БД Registry

Predicted Properties (PPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 1 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 2 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 3 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 4 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 5 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 6 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 7 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 8 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 9 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 10 25 deg C	(1)
Density (DEN)	1.60+/-0.1 g/cm**3	760 Torr	(1)
Freely Rotatable Bonds (FRB)	0		(1)
H acceptors (HAC)	6		(1)
H donors (HD)			

(1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD) Software Solaris V4.67 ((C) 1994-2002 ACD)

STN

Рабочий лист

Задание*: Ввести информацию об индексах *REGISTRY .

Код	Индекс	Примечания
RN		
CN	CA INDEX NAME	
CN	OTHER NAMES	
	Molecular Formula	
LC		Указание на файлы STN, имеющие ссылки на вещество.
	Experimental Properties	
CALC		

Содержание БД CAplus

БД CAplus охватывает мировые публикации по всем областям химии с 1840 гг. по настоящее время

Охват БД: прикладная химия, химическая технология, биохимия, органическая, физическая, неорганическая и аналитическая химия

БД содержит библиографическую информацию, реферат, а также индексирование по предмету и веществу, имеющееся в печатном реферативном журнале *Chemical Abstracts*™

STN

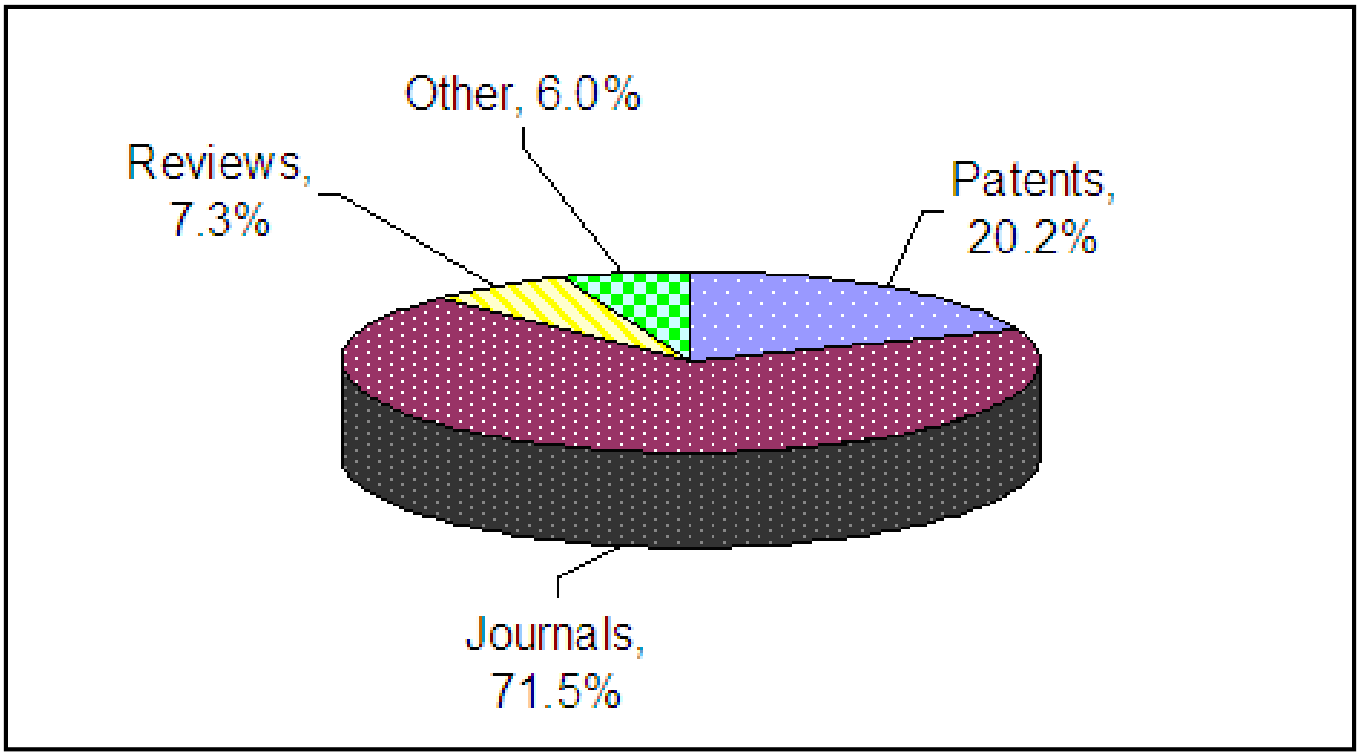
Содержание БД CAplus

БД CAplus содержит записи из:

- ~ 9500 журналов из >150 стран
- патенты, опубликованные > 60 странами (США, Великобритания, Германия, Япония, Россия, т.д.) и 2 международными патентными ведомствами (EPO и WIPO)
- оглавления 1600 наиболее часто цитируемых химических журналов (ссылки на каждый пункт)

STN

Источники информации для БД CAplus (10/06)



Рабочий лист

Задание: Введите в рабочий лист недостающую информацию об индексах CAplus.

Код	Название поля	Примечания
TI	Title	Заглавие публикации
AU		
CS		
	Document Type	
	Language	
	Abstract	
ST		Ключевые слова из печатного CA.
	Index Terms	Новые или неизвестные концепты, сообщаемые в документе.
	CAS Role	
RE		

Записи в БД CAplus

Информация в записях БД CAplus организована в серии индексов, помеченных 2-буквенными кодами

Полный список индексов содержится в Database Summary Sheet

Прим.

Некоторые записи CAplus содержат минимальное индексирование:

- Недавно добавленные записи, для которых индексирование CAS – в процессе

STN

Записи в БД CAplus

```
AN      2005:151065  CAPLUS Full-text
DN      143:247238
ED      Entered STN:  23 Feb 2005
TI      Chocolate drink powders: chemical analysis
AU      Eduardo, Mercia de Freitas; Lannes, Suzana Caetano da
        Silva
CS      Departamento de Tecnologia Bioquimico-Farmaceutica,
        Faculdade de Ciencias Farmaceuticas, Universidade de
        Sao Paulo, Sao Paulo-SP, 05508-900, Brazil
SO      Revista Brasileira de Ciencias Farmaceuticas (2004),
        40(3), 405-412 CODEN: RBCFFM; ISSN: 1516-9332
PB      Universidade de Sao Paulo, Faculdade de Ciencias
        Farmaceuticas
DT      Journal
LA      Portuguese
CC      17-13 (Food and Feed Chemistry)
```

Эти индексы составляют библиографический сегмент записи

(продолжение на след. слайде)

STN

Записи в БД CAplus

AB Chem. properties of 11 brands of chocolate drink powders from the Brazilian market were studied. The contents of lipid, protein, ash, moisture, pH, theobromine, and total alkaloids were determined The composition properties were influenced by the proportions of cocoa powder and dairy components, such as dry milk and whey. Brands comparison showed strong differences, especially among diet (without sugars) and light (low sugar) and the standard brands.

Англоязычные рефераты помогают найти и оценить международные исследования

(продолжение на след. слайде)

STN

Записи в БД CAplus

```
ST      chocolate drink powder chem compn Brazil
IT      Chocolate
            (beverages; chemical anal. of chocolate drink
        powders sold in Brazil)
IT      Alkaloids, biological studi
        Carboxylic acids, biological
        Lipids, biological studies
        Mineral elements, biological
        Proteins
        RL: FFD (Food or feed use); BIOL (Biological
        study); USES (Uses)
          (chemical anal. of chocolate drink powders sold in
        Brazil)
. . .
IT    83-67-0, Theobromine
      RL: FFD (Food or feed use)
        USES (Uses)
          (chemical anal. of chocolate drink powders sold in
        Brazil)
```

Контролируемое по словарю предметное индексирование обеспечивает стандартные поисковые термины

Индексирование по веществам включает регистрационные номера CAS, являющиеся связкой между REGISTRY и CAplus

(продолжение на след. слайде)

STN

Записи в БД CAplus

```
RE.CNT  30    THERE ARE 30 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR
THIS RECORD
RE
(1) Anon; http:/www.usdec.org/files/pdfs/USMP15-22.pdf
2004
(2) Brasil; http://www.anvisa.gov.br 2004
(3) Caffeine; Environ Nutr Newsl, New York 1979, V2(6), P1
(4) Candido, L; Alimentos para fins especiais:dieteticos
1996, P423
. . .
(20) Ninfali, P; Ingredienti Al
CAPLUS
(21) Omobuwajo, T; J Food Eng, London 2000, V46, P73
(22) Pivonka, E; J Am Diet Assoc, Chicago 1990, V90(2),
P250 MEDLINE
(23) Rein, D; J Nutr, Philadelphia 2000, V130(8), P2120S
(24) Schetty, O; Schweizerisches lebensmittelbuch Metodos
36C/17 e 36C/04 5 ed 1969
. . .
```

Ссылки, цитируемые авторами или патентными экспертами, включены в документы с 1997 г.

STN

• • •

Поиск информации о химических веществах

Тандем CAplus / Registry – БД работают вместе, предоставляя информацию о химических веществах

Поиск по веществам – 2-стадийный процесс

STN

Поиск информации о веществе

Поиск в БД Registry:

1

- химическое название
- молекулярная формула
- свойства
- структура

Нахождение соединений и их CAS RN

Затем поиск в БД CAplus для нахождения соответствующих записей, содержащих:

2

- библиографическую информацию об источнике
- информацию о патентном семействе
- англоязычные рефераты
- индексирование по ключевым химическим концептам – предмету и веществу
- цитируемые ссылки
- линки к полному тексту публикации

STN

Поиск по химическому названию

- Использование команд сети STN для построения запроса
- Последовательное использование БД Registry и CAplus для нахождения информации о химическом веществе
- Нахождение CAS RN вещества и релевантных ссылок, когда известно название соединения
- Уточнение результатов
- Проведение исчерпывающего поиска химических веществ в литературе с 1870 гг. по настоящее время

STN

Поиск по химическому веществу

Довольно часто интересующее вещество можно искать по общеупотребительному или торговому названию

Богатый источник названий веществ – БД Registry

Поиск по химическому веществу

Поисковый запрос:

Что известно в литературе о веществе resveratrol?

Поисковая стратегия

Для нахождения соединения по названию

1. Нахождение CAS RN вещества

A. Ввод БД Registry

B. Проверка химического названия в БД

C. Проведение поиска

D. Вывод ответов

1. Нахождение CAS RN вещества

Для нахождения записи в БД Registry последовательно используются три **основные команды**

Команда	Действие	Пример формата
FILE	**Ввод файла**	**=> FILE REGISTRY** ***или*** **=> FIL REG**
E (EXPAND)	**Проверка термина в БД**	**=> E RESVERATROL/CN**
S (SEARCH)	**Поиск записей, содержащих термин(ы) и создание набора ответов (L#) этих записей**	**=> S RESVERATROL/CN**

STN

1. Нахождение CAS RN вещества

Формат команд:

Общий формат ввода команд на STN

=> Команда Инструкции <Enter>

Пример

=> FILE REGISTRY <Enter>

Web-ресурс	**Дополнительная информация об использовании команд STN: http://www.cas.org/training/stncommands/index.html**

STN

1. Ввод БД Registry

Команда **FILE** – выбор БД

```
=> FILE REGISTRY
FILE 'REGISTRY' ENTERED AT 14:51:25 ON 13 NOV 2006
USE IS SUBJECT TO THE TERMS OF YOUR STN CUSTOMER AGREEMENT.
PLEASE SEE "HELP USAGETERMS" FOR DETAILS.
COPYRIGHT (C) 2006 American Chemical Society (ACS)

Property values tagged with IC are from the ZIC/VINITI data file
provided by InfoChem.

STRUCTURE FILE UPDATES:   12 NOV 2006  HIGHEST RN 913055-81-9
DICTIONARY FILE UPDATES:  12 NOV 2006  HIGHEST RN 913055-81-9

New CAS Information Use Policies, enter HELP USAGETERMS for details.

TSCA INFORMATION NOW CURRENT THROUGH June 30, 2006

  Please note that search-term pricing does apply when
  conducting SmartSELECT searches.
```

• • •

После ввода БД появляется баннер, показывающий ее охват и обновления

STN

1. Проверка названия в БД

БД Registry – богатая коллекция химических названий, приписанных CAS и собранных из химической литературы, однако конкретное название может как присутствовать, так и отсутствовать в БД

Для проверки наличия в БД интересующего термина – в данном случае химического названия – используется команда **EXPAND**

По команде EXPAND показывается список из 12 E-нумерованных терминов, введенный термин появляется под номером E3

STN

1. Проверка названия в БД

Команда EXPAND полезна при поиске по химическим названиям:

- определяет наличие термина в БД
- идентифицирует соединения, родственные интересующему

В БД Registry химические названия хранятся в индексе **Chemical Name (CN)**. Для указания того, что поиск следует проводить в этом индексе, в конце химического названия добавляют **/CN**

1: Проверка названия в БД

E-номера из 1 колонки – поисковые термины для химических названий из EXPAND-списка

```
=> E RESVERATROL/CN
E1      1      RESUSCITATION-PROMOTING FACTOR RPFB (CORYNEBACTERIUM
               JEIKEIU M STRAIN K411 GENE RPFB)/CN
E2      1      RESUSCITATION-PROMOTING FACTOR RPFC (CORYNEBACTERIUM
               JEIKEIU M STRAIN K411 GENE RPFC)/CN
E3      1  --> RESVERATROL/CN
E4      1      RESVERATROL B-D-GLUCOSIDE/CN
E5      1      RESVERATROL 12-C-B-GLUCOPYRANOSIDE/CN
E6      1      RESVERATROL 3-O-B-GLUCOPYRANOSIDE/CN
E7      1      RESVERATROL 3-O-GLUCURONIDE/CN
E8      1      RESVERATROL 4'-O-B-D-GLUCOPYRANOSIDE/CN
E9      1      RESVERATROL 4'-O-GLUCURONIDE/CN
E10     1      RESVERATROL CIS-DEHYDRODIMER/CN
E11     1      RESVERATROL GLUCOSIDE/CN
E12     1      RESVERATROL SYNTHASE/CN
```

Постинги во 2 колонке – количество записей в БД Registry, содержащих этот термин

STN

1. Проведение поиска

Для поиска записей, содержащих интересующий термин(ы), используется команда **SEARCH (S)**. Имеются два способа ввода:

- полностью напечатать термин: RESVERATROL/CN
- использовать связанный с термином E-номер, т.е. E3

```
=> S E3

L1              1 RESVERATROL/CN
```

1 запись (ответ) содержит название соединения. Ответ помещается в набор ответов, помеченный L-номером

STN

1. Вывод ответов

Для детального просмотра записей из БД Registry используется команда **DISPLAY (D)**

В команде DISPLAY необходимо задать:

- L-номер набора ответов
- номер(а) ответов
- формат вывода

1. Вывод ответов

Указание в команде DISPLAY	Принятое умолчание:	Примечание
L-номер набора ответов	Последний созданный L-номер	Команда D HIS – если нужен набор ответов, созданный раньше
Номер ответа(ов)	Первый ответ	Опции: ■ 1-5 – просмотр первых пяти ответов ■ 1, 5 – просмотр 1 и 5 ответов ■ 1 – просмотр всех ответов
Формат	Идентифициру-ющая вещество информация (IDE)	

STN

1. Вывод ответов

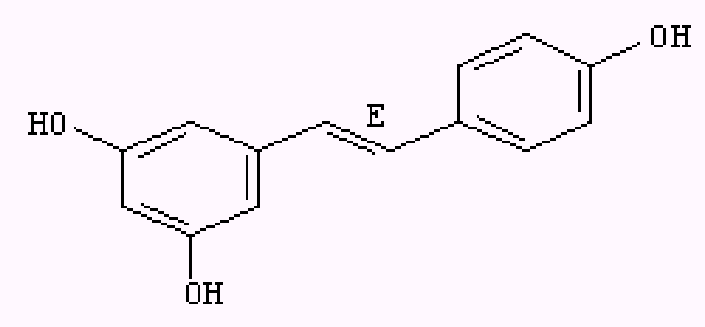
```
=> D L1 1 IDE
L1   ANSWER 1 OF 1  REGISTRY  COPYRIGHT 2003 ACS
RN   501-36-0  REGISTRY
CN   1,3-Benzenediol, 5-[(1E)-2-(4-hydroxyphenyl)ethenyl]- (9CI)
     (CA INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN   1,3-Benzenediol, 5-[2-(4-hydroxyphenyl)ethenyl]-, (E)-
CN   3,4',5-Stilbenetriol (7CI, 8CI)
CN   Resveratrol (6CI)
OTHER NAMES:
CN   (E)-5-(p-Hydroxystyryl)resorcinol
CN   (E)-Resveratrol
CN   3,5,4'-Trihydroxystilbene
CN   CA 1201
CN   trans-Resveratrol
FS   STEREOSEARCH
DR   31100-06-8
MF   C14 H12 O3
CI   COM
LC   STN Files:   ADISINSIGHT, ADISNEWS, AGRICOLA, ANABSTR,
       BEILSTEIN*, BIOBUSINESS, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CANCERLIT,
       CAOLD, CAPLUS, CASREACT, CEN, CHEMCATS, CIN, CSCHEM, DDFU,
       DRUGU, EMBASE, HODOC*, IPA, MEDLINE, MRCK*, NAPRALERT, PHAR,
       PROMT, SYNTHLINE, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL
         (*File contains numerically searchable property data)
Double bond geometry as shown.
```

(продолжение на след. стр.)

*Термины, соответствующие поисковому запросу (hit-термины) выделены другим **цветом***

STN

1. Вывод ответов




```
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

 2697 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
            100 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
           2727 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
             10 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)
```

Прим.

Информация о свойствах приведена для многих веществ в БД REGISTRY. Ее доступность указывается баннером

****PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT****

Для вывода свойств вещества следует после стрелки-подсказки напечатать:

=> D PROP

STN

1. Вывод ответов

```
=> D L1 1 PROP
L1 1 PROP

L1   ANSWER 1 OF 1  REGISTRY

Experimental Properties (EPROP)

 PROPERTY (CODE)   |    VALUE     |     CONDITION      |   NOTE
===================+==============+====================+===========
Melting Point (MP)|260 deg C     |Solv: ethyl acetate| (1)    CAS
                  |              |(141-78-6),         |
                  |              |hexane              |
                  |              |(110-54-3)          |
Melting Point (MP)|260 deg C     |                    | (2)     IC
Melting Point (MP)|258-260 deg C|                    | (3)    CAS
Melting Point (MP)|258 deg C     |                    | (4)    CAS
. . .

(1)      Pettit, George R.;  WO 2003086414 A1 2003 CAPLUS
(2)      Malan, Elfranco; Phytochemistry 1988 V27(7) P2309-12 CAPLUS
(3)      Jin, WenYi; Natural Product Sciences 2002 V8(4) P129-132
         CAPLUS
(4)      Roberti, Marinella; Journal of Medicinal Chemistry 2003
         V46(16) P3546-3554 CAPLUS
                              . . .
```

(продолжение на след. странице)

Значения экспериментальных свойств (EPROP) приводятся в БД Registry в табличной форме. Даются линки к соответствующим статьям

STN

1. Вывод ответов

```
Experimental Property Tags (ETAG)

                          PROPERTY
==================================
Acid/Base Dissociation Constant
ADME (Absorption, Distribution, M
Carbon-13 NMR Spectra
     7 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats |
IR Spectra                                            |(4) CAS
Mass Spectra                                          |(4) CAS
    17 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats |
Minimum Inhibitory Concentration                      |(5) CAS
     1 more tag shown in the MAX or ETAGFULL formats  |
Molecular Structure                                   |(6) CAS
NMR Spectra                                           |(7) CAS
Partition Coefficient                                 |(8) CAS
Proton NMR Spectra                                    |(9) CAS
     8 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats |
UV and Visible Absorption Spectra                     |(1) CAS
     2 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats |
UV and Visible Spectra                                |(4) CAS
     3 more tags shown in the MAX or ETAGFULL formats |
X-Ray Spectra
                          . . .
```

(продолжение на след. странице)

Метки (маги) на экспериментальные свойства (ETAG) даются для свойств, доступных в полном тексте документа. Линки к соответствующей записи в БД CAplus даются вместе с цитируемой информацией

STN

1. Вывод ответов

Расчетные свойства (PPROP) содержатся в БД Registry в табличной форме. Они рассчитываются с использованием программного обеспечения ACD

Predicted Properties (PPROP)

PROPERTY (CODE)			NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	143.10	pH 1 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	143.10	pH 2 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	143.10	pH 3 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	143.10	pH 4 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	143.09	pH 5 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	143.05	pH 6 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	142.67	pH 7 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	138.89	pH 8 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	107.62	pH 9 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	18.40	pH 10 25 deg C	(1)
Boiling Point (BP)	489.3+/-45.0 deg C	760 Torr	(1)
Density (DEN)	1.359+/-0.06 g/cm**3	760 Torr	(1)
Enthalpy of Vap. (HVAP)	78.43+/-3.0 kJ/mol	760 Torr	(1)
Flash Point (FP)	244.1+/-23.3 deg C		

. . .

(continued on next page)

STN

2. Нахождение ссылок

Поисковый запрос:

Что известно о веществе под названием resveratrol?

БД **Registry** – информация о химических веществах

Библиографические ссылки и рефераты статей, описывающих вещества с конкретными химическими названиями, хранятся в БД **CAplus**

L-номер, сгенерированный при поиске в БД Registry – ключ для нахождения релевантных ссылок

STN

2. Нахождение соответствующих ссылок

Прим.

Поиск в REGISTRY – важный первый шаг в поиске по веществу. Его результат – набор ответов, содержащий CAS RN – однозначный поисковый термин для химического вещества.

Для нахождения в в БД CAplus ссылок, связанных с интересующим веществом, требуется:

A. Ввод БД CAplus

B. Поиск по L-номеру из БД Registry

C. Оценка ответов

STN

2-A. Ввод БД CAplus

```
=> FILE CAPLUS

FILE 'CAPLUS' ENTERED AT 15:29:35 ON 13 NOV 2006
USE IS SUBJECT TO THE TERMS OF YOUR STN CUSTOMER AGREEMENT.
PLEASE SEE "HELP USAGETERMS" FOR DETAILS.
COPYRIGHT (C) 2006 AMERICAN CHEMICAL SOCIETY (ACS)

Copyright of the articles to which records in this database refer is
held by the publishers listed in the PUBLISHER (PB) field (available
for records published or updated in Chemical Abstracts after December
26, 1996), unless otherwise indicated in the original publications.
The CA Lexicon is the copyrighted intellectual property of the
American Chemical Society and is provided to assist you in searching
databases on STN.  Any dissemination, distribution, copying, or storing of
this information, without the prior written consent of CAS, is strictly
prohibited.

FILE COVERS 1907 - 13 Nov 2006  VOL 145 ISS 21
FILE LAST UPDATED: 12 Nov 2006  (20061112/ED)

Effective October 17, 2005, revised CAS Information Use Policies apply.
They are available for your review at:

http://www.cas.org/infopolicy.html
```

2-B. Поиск

```
=> S L1

L2          2727 L1
```

>2700 записей в CAplus содержат CAS RN этого вещества

2-C. Оценка ответов

При поиске в БД CAplus полезна команда **D SCAN:**

- проверка, что найдена нужная информация
- идентификация терминологии для улучшения результатов поиска

По команде D SCAN из полученного набора случайным образом отбираются ответы, для которых выводятся заглавие и индексирование

STN

2-C. Оценка ответов

```
=> D SCAN
L2    2727 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
CC    4-3 (Toxicology)
TI    Protection from half-mustard-gas-induced acute lung injury in the rat
ST    antidote half mustard gas lung injury; chloroethyl ethyl sulfide
      lung injury antidote
IT    Lung, disease
         (injury; protection from half-mustard gas-induced acute lung
         injury)
IT    Antidotes
      Antioxidants
      Neutrophil
         (protection from half-mustard gas-induced acute lung injury)
IT    Complement
      Reactive oxygen species
      RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)
         (protection from half-mustard gas-induced acute lung injury)
IT    693-07-2, 2-Chloroethyl ethyl sulfide
      RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)
         (protection from half-mustard gas-induced acute lung injury)
IT    501-36-0 , Resveratrol
      RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)
         (protection from half-mustard gas-induced acute lung injury)
IT    9001-05-2, Catalase   61805-96-7,
      Dimethylthiourea
      RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)
         (protection from half-mustard gas-induced acute lung injury)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
```

Эта статья сообщает о биологических исследованиях (BSU)

Для просмотра след. ответа введите 1

2-C. Оценка ответов

```
L2    2727 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
CC    1-11 (Pharmacology)
TI    Protective effect of trans-resveratrol against kainic acid-
      induced seizures and oxidative stress in rats
ST    transresveratrol anticonvulsant antioxidant malonaldehyde
      excitatory amino acid
IT    Anticonvulsants
      Antioxidants
      Cytoprotective agents
      Human
         (antioxidants as potential adjunct therapy for epilepsy)
IT    70-18-8, Glutathione, biological studies   542-78-9,
      Malonaldehyde
      RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological
      study)
         (antioxidants as potential adjunct therapy for epilepsy)
IT    501-36-0, trans-Resveratrol
      RL: PAC (Pharmacological activity); THU (Therapeutic use);
      BIOL (Biological study); USES (Uses)
         ants as potential adjunct therapy for epilepsy)

      WERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
```

В этой статье сообщается о фарм. активности (PAC)

STN

2-C. Оценка ответов

```
L2    2727 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
CC    17-1 (Food and Feed Chemistry)
TI    Determination of resveratrol in grape wine by high performance
      liquid chromatography
ST    resveratrol detn wine HPLC
IT    Reversed phase HPLC
      Wine analysis
         (determination of resveratrol in grape wine by high
         performance liquid chromatog.)
IT    501-36-0, trans-Resveratrol   61434-67-1, cis-Resveratrol
      RL: ANT (Analyte); ANST (Analytical study)
         (determination of resveratrol in grape wine by high
         performance liquid chromatog.)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0
```

В этой статье описано аналитическое исследование (ANST)

3. Уточнение ответов

В БД CAplus результаты поиска по веществу можно легко уточнить с помощью ролей CAS (например, получение или использование)

Роли CAS:

- описывают новую или неизвестную информацию о веществе
- назначаются каждому веществу, проиндексированному в записи в БД CAplus
  - конкретные вещества с CAS RN
  - классы веществ по контролируемой терминологии, например, алкены, нитрилы, пероксиды, т.д.

STN

3. Уточнение ответов

Пример:

```
TI   Synthesis of stereoselective exocyclic double bonds by the use of
     palladium catalysts
IT   Alkenes, preparation
     RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
         (synthesis of stereoselective exocyclic double bonds by the use
         of palladium catalysts)
IT   7440-05-3, Palladium, uses
     RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)
         (synthesis of stereoselective exocyclic double bonds by the use
         of palladium catalysts)
```

Уточнение поискового запроса:

Описаны ли способы синтеза вещества resveratrol?

STN

Роли CAS

Конкретные роли CAS – 3-буквенные коды

Супер-роли – 4-буквенные коды

Можно проводить поиск или по конкретной роли, или по супер-роли

Роли CAS

ANST Analytical Study

ANT	Analyte
AMX	Analytical Matrix
ARG	Analytical Reagent Use *
ARU	Analytical Role, Unclassified

BIOL Biological Study

ADV	Adverse Effect, Including Toxicity
AGR	Agricultural Use *
BAC	Biological Activity or Effector, Except Adverse (1)
BCP	Biochemical Process (2)
BMF	Bioindustrial Manufacture *
BOC	Biological Occurrence *
BPN	Biosynthetic Preparation
BPR	Biological Process *(1)
BSU	Biological Study, Unclassified
BUU	Biological Use, Unclassified *
COS	Cosmetic Use (2)
DGN	Diagnostic Use (2)
DMA	Drug Mechanism of Action (2)
FFD	Food or Feed Use *
MFM	Metabolic Formation *
NPO	Natural Product Occurrence (2)
PAC	Pharmacological Activity (2)
PKT	Pharmacokinetics (2)
THU	Therapeutic Use *

CMBI Combinatorial Study (2)

CPN	Combinatorial Preparation (2)
CRT	Combinatorial Reactant (2)
CRG	Combinatorial Reagent (2)
CST	Combinatorial Study (2)
CUS	Combinatorial Use (2)

FORM Formation, Nonpreparative

FMU	Formation, Unclassified
GFM	Geological or Astronomical Formation
MFM	Metabolic Formation *(1)

OCCU Occurrence

BOC	Biological Occurrence *(1)
GOC	Geological or Astronomical Occurrence
NPO	Natural Product Occurrence (2)
POL	Pollutant
OCU	Occurrence, Unclassified

PREP Preparation

BMF	Bioindustrial Manufacture *
BPN	Biosynthetic Preparation *
BYP	Byproduct
CPN	Combinatorial Preparation (2)
IMF	Industrial Manufacture
PUR	Purification or Recovery
PNU	Preparation, Unclassified
SPN	Synthetic Preparation

PROC Process

BCP	Biochemical Process (2)
BPR	Biological Process *(1)
GPR	Geological or Astronomical Process
PEP	Physical, Engineering, or Chemical Process
CPS	Chemical Process (2)
EPR	Engineering Process (2)
PYP	Physical Process (2)
REM	Removal or Disposal

RACT Reactant or Reagent (2,3)

RCT	Reactant (3)
CRT	Combinatorial Reactant (2)
RGT	Reagent (2)
CRG	Combinatorial Reagent (2)

USES Uses

AGR	Agricultural Use *
ARG	Analytical Reagent Use *
BUU	Biological Use, Unclassified *
CAT	Catalyst Use
COS	Cosmetic Use (2)
CUS	Combinatorial Use (2)
DEV	Device Component Use
DGN	Diagnostic Use (2)
FFD	Food or Feed Use *
MOA	Modifier or Additive Use
NUU	Nonbiological Use, Unclassified
POF	Polymer in Formulation
TEM	Technical or Engineered

Specific r

MSC M
PRP Pr

** М.б. приписано более одной супер-роли.*
(1) Используется с CA Vol. 66 (1967) по Vol. 135 (2001); (2) Используется, начиная с CA Vol. 136 (2002)

STN

3. Задание ролей CAS

Для задания роли CAS достаточно ввести L-номер БД Registry с кодом роли CAS

```
=> S L1/PREP
          2727    L1
       3558058    PREP/RL
L3          208    L1/PREP

=> D SCAN
L3   208 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
CC   11-1 (Plant Biochemistry)
TI   Chemical research on stilbenes from Veratrum maackii Reg.
ST   Veratrum rhizome stilbene resveratrol tetrahydroxystilbene TLC
IT   Veratrum maackii
        (rhizome; chemical research on stilbenes from Veratrum
         maackii Reg)
IT   501-36-0P, Resveratrol   4721-07-7P, 2,4,3',5'-
     Tetrahydroxystilbene
     RL: PUR (Purification or recovery); PREP (Preparation)
        (chemical research on stilbenes from Veratrum maackii Reg)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0
```

Роли CAS

Web-ресурс

Роли CAS доступны в «Quick Reference Card»:
http://info.cas.org/ONLINE/QR/casroles.pdf

Прим.

Роли CAS применимы только к ссылкам с 1967- наст. вр.

Использование ролей CAS в поиске автоматически ограничивает результаты 1967-наст. вр.

Исключение – роль PREP (Preparation) – до 1907.

STN

4. Вывод ответов

Для детального просмотра записей в БД CAplus используется команда **DISPLAY (D)**

В команде DISPLAY следует указать следующую информацию:

- L-номер набора ответов
- номер(а) ответа(ов)
- формат вывода

STN

4. Вывод ответов

Указание в команде DISPLAY	Принятое умолчание	Примечание
L-номер набора ответов	Последний созданный L-номер	Используйте D HIS, если нужен набор ответов, созданный ранее
Номер(а) ответа(ов)	Первый ответ	Опции: 1–5 – для вывода первых пяти ответов 1, 5 – для просмотра 1 и 5 ответов
Формат	Библиографическая информация (BIB)	IBIB — Библиографическая информация с названиями полей ABS — Реферат (включая имеющуюся структуру) HITSTR — Термин индексирования, Название по CA (Index Name), структура для хита (CAS RN) ALL — Полная запись, включая ссылки

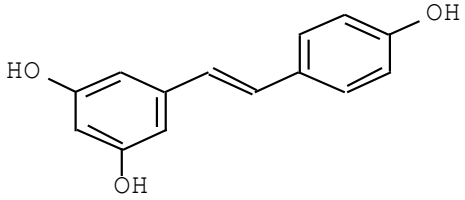
В БД CAplus другой набор форматов вывода, чем в БД Registry

STN

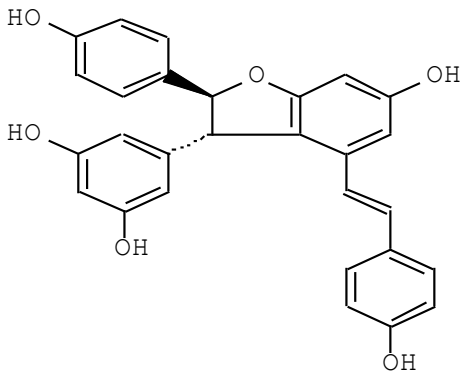
4. Вывод ответов

```
=> D L3 40-41 BIB ABS
L3   ANSWER 40 OF 208  CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
AN   2005:1024775  CAPLUS
DN   143:459926
TI   Biomimic transformation of resveratrol
AU   Takaya, Yoshiaki; Terashima, Kenji; Ito, Junko; He, Yue-Hua;
     Tateoka, Maki; Yamaguchi, Naho; Niwa, Masatake
CS   Faculty of Pharmacy, Meijo University, Nagoya, 468-8503, Japan
SO   Tetrahedron (2005), 61(43), 10285-10290
     CODEN: TETRAB; ISSN: 0040-4020
PB   Elsevier B.V.
DT   Journal
LA   English
OS   CASREACT 143:459926
GI
```

Формат ABS включает избранную графику из статьи



I



II

4. Вывод ответов

```
AB   Resveratrol (I) was treated with several kinds of peroxidases
     and inorg. reagents so as to prep. .epsilon.-viniferin (II).
     Among several inorg. reagents, which were investigated in this
     study, thallium(III) nitrate in methanol gave (.+-.)-.epsilon.-
     viniferin in the yield of 68%.  On the other hand, peroxidases
     did not lead to .epsilon.-viniferin, but some stilbenedimers
     such as pallidol, resveratrol trans-dehydrodimer, and leachianol
     F were obtained.
RE.CNT  11    THERE ARE 11 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD
              ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

L4   ANSWER 41 OF 208  CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
AN   2005:1001848  CAPLUS
DN   143:284834
TI   Manufacture of flavonoids with transgenic microorganisms expressing
     genes for enzymes of phenylpropanoid metabolism
IN   Schmidt-Dannert, Claudia; Watts, Kevin
PA   Regents of the University of Minnesota, USA
SO   PCT Int. Appl., 91 pp.
     CODEN: PIXXD2
DT   Patent
LA   English
FAN.CNT 1
```

(продолжение на след. стр.)

STN

4. Вывод ответов

```
     PATENT NO.          KIND  DATE        APPLICATION NO.    DATE
     --------------      ----  --------    ---------------    --------
PI   WO 2005084305        A2   20050915    WO 2005-US6587     20050301
                                   • • •
     US 2005208643        A1   20050922    US 2005-69633      20050301
PRAI US 2004-549077P      P    20040301
OS   CASREACT 143:284834
AB   Methods of producing flavonoids from an inexpensive
     phenylpropanoid feedstock such as agricultural waste using
     transgenic microorganisms expressing foreign genes for enzymes
     of flavonoid biosynthesis is described.  Construction of
     transgenic Escherichia coli expressing Arabidopsis thaliana
     genes for enzymes phenylpropanoid metab. is demonstrated.  The
     genes were placed under control of an arabinose-inducible
     promoter.  The A. thaliana for cinnamate hydroxylase was
     not active in an E. coli host, however, feeding hosts 4-coumaric
     acid led to the accumulation of naringenin.
```

STN

Исчерпывающий поиск по химическому названию

Поиск по L-номеру набора ответов из БД Registry в БД CAplus выявит все релевантные документы для интересующего вещества

Другие БД сети STN International могут содержать дополнительные релевантные ссылки

Сеть STN International предоставляет средства для использования номенклатуры БД Registry и CAS RNs в других своих БД

STN

Исчерпывающий поиск по химическому названию

Расширенный поисковый запрос:

Провести исчерпывающий поиск ссылок для вещества resveratrol

STN

Стратегия поиска

исчерпывающего набора ссылок для соединения:

STN

1. Выбор записи в БД Registry

```
=> D HIS
 (FILE 'HOME' ENTERED AT 15:25:13 ON 13 NOV 2006)

     FILE 'REGISTRY' ENTERED AT 15:25:21 ON 13 NOV 2006
                E RESVERATROL/CN
L1             1 S E3

     FILE 'CAPLUS' ENTERED AT 15:29:35 ON 13 NOV 2006
L2          2727 S L1
L3           208 S L1/PREP

=> FILE REGISTRY
```

Для просмотра истории online-поиска и L-номеров используется команда D HIS

STN

1. Выбор записи в БД Registry

```
=> D L1 1 FCN

L1    ANSWER 1 OF 1  REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
CN    1,3-Benzenediol, 5-[(1E)-2-(4-hydroxyphenyl)ethenyl]- (9CI)  (CA
      INDEX NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN    1,3-Benzenediol, 5-[2-(4-hydroxyphenyl)ethenyl]-, (E)-
CN    3,4',5-Stilbenetriol (7CI, 8CI)
CN    Resveratrol (6CI)
OTHER NAMES:
CN    (E)-5-(p-Hydroxystyryl)resorcinol
CN    (E)-Resveratrol
CN    3,4',5-Trihydroxy-trans-stilbene
CN    5-[(1E)-2-(4-Hydroxyphenyl)ethenyl]-1,3-benzenediol
CN    CA 1201
CN    trans-Resveratrol
```

Формат FCN выводит полную информацию о названиях вещества

БД Registry – уникальный источник названий веществ, которые можно использовать как поисковые термины

STN

2. Создание поисковых терминов

Команда SELECT CHEM (SEL CHEM)

- Извлечение всех химических названий и CAS RN из записи в БД Registry
- Создание поисковых терминов из найденных терминов

```
=> SEL CHEM L1
E1 THROUGH E10 ASSIGNED
=> D SEL
E1      1     (E)-RESVERATROL/BI
E2      1     (E)-5-(P-HYDROXYSTYRYL)
E3      1     CA 1201/BI
E4      1     RESVERATROL/BI
E5      1     TRANS-RESVERATROL/BI
E6      1     3,4',5-STILBENETRIOL/BI
E7      1     3,4',5-TRIHYDROXY-TRANS-STILBENE/BI
E8      1     31100-06-8/BI
E9      1     5-((1E)-2-(4-HYDROXYPHENYL)ETHENYL)-1,3-BENZENEDIOL/BI
E10     1     501-36-0/BI
```

Команда D SEL используется для просмотра отдельных терминов. Термины, представленные в Basic Index, создают возможность более общего поиска

STN

3. Проведение поиска

Все E-нумерованные термины можно использовать в поиске

```
=> FILE USPATFULL USPAT2 PCTFULL

=> SET MSTEPS ON

=> S E1-E2 OR E4-E10

L4           89 FILE USPAT2
L5          848 FILE USPATFULL
L6          699 FILE PCTFULL


TOTAL FOR ALL FILES
L7         1636 ("(E)-RESVERATROL"/BI OR "(E)-5-(P-
                HYDROXYSTYRYL)RESORCINOL"/BI) OR (RESVERATROL/BI OR
                TRANS-RESVERATROL/BI OR "3,4',5-STILBENET...
```

Просмотрите термины до проведения мультифайлового поиска. Некоторые могут дать много «шума» и их не следует использовать, например CA 1201 – т.к. поиск будет проведен в /BI, по этому термину могут быть найдены ссылки, связанные с кальцием (Ca)

STN

4. Удаление дубликатов

Все E-нумерованные термины можно использовать в поиске

```
=> SET DUPORDER FILE

=> DUP REM L2 L7

PROCESSING IS APPROXIMATELY
PROCESSING COMPLETED FOR L2
PROCESSING COMPLETED FOR L7
L8          3969 DUP REM L3 L8 (394 DUPLICATES REMOVED)
                 ANSWERS '1-2726' FROM FILE CAPLUS
                 ANSWERS '2727-2805' FROM FILE USPAT2
                 ANSWERS '2806-3459' FROM FILE USPATFULL
                 ANSWERS '3460-3969' FROM FILE PCTFULL
```

Команда DUP REM удаляет дублетные ответы. Порядок ввода наборов L-номеров устанавливает приоритет файлов для хранения дубликатов. Команда SET DUPORDER FILE организует записи в порядке ввода файлов

STN

5. Вывод ответов

```
=> D 1 FROM EACH

L8  ANSWER 1 OF 3969  CAPLUS  COPY
AN   2006:1124928  CAPLUS  Full-text
TI   Compositions comprising aminergic compounds and complement
     compounds, such as ascorbates, cysteines, opioids, resveratrols,
     and polycarboxylic acid chelators
IN   Dillon, Patrick F.; Root-Bernstein, Robert S.
PA   Board of Trustees of Michigan State University, USA
SO   PCT Int. Appl., 71pp.
     CODEN: PIXXD2
DT   Patent
LA   English
FAN.CNT 3
     PATENT NO.         KIND  DATE       APPLICATION NO.      DATE
     -------------      ----  --------   -----------------    --------
PI   WO 2006113485       A2   20061026   WO 2006-US14165      20060414
```

Формат 1 FROM EACH выводит по одной записи из каждой БД – в формате по умолчанию

Патент из БД CAplus (поиск проведен 13.11.2006)

• • •

STN

5. Вывод ответов

```
L8  ANSWER 2727 OF 3969  USPAT2 on STN                    DUPLICATE 81
AN      2006:41332  USPAT2  Full-text
TI      Method of inhibiting formation of Neisseria gonorrhea and
        Neisseria meningiditis
IN      Docherty, John, Kent, OH, UNITED STATES
PA      Northeastern Ohio Universities College of Medicine, Rootstown,
        OH, UNITED STATES (U.S. corporation)
PI      US 7037945          B2   20060502
AI      US 2001-13760            20011211 (10)
RLI     Continuation of Ser. No. US 2000-734444, filed on 11 Dec 2000,
        Pat. No. US 6355692
DT      Utility
FS      GRANTED
LN.CNT 504
```

Патент США (US) из БД USPAT2

• • •

5. Вывод ответов

```
L8  ANSWER 2806 OF 3969  USPATFULL on STN
AN      2006:295930  USPATFULL  Full-text
TI      Systems and Methods to Treat Pain Locally
IN      Burright, Eric N., 899 Oak Court, Eagan, MN, UNITED STATES
        55123 Shafer, Lisa L., 3768 Ambercrombie Lane, Stillwater, MN,
        UNITED STATES 55082 McKay, Bill, 3870 McElrie Cove, Memphis,
        TN, UNITED STATES  38133Zanella, John, 307 Steadman Lane,
        Cordova, TN, UNITED STATES  38018
PA      MEDTRONIC, INC., Minneapolis, MN, UNITED STATES (U.S.
        corporation)
PI      US 2006253100      A1   20061109
AI      US 2006-460012     A1   20060726 (11)
RLI     Continuation-in-part of Ser. No. US 2004-972157, filed on 22
        Oct 2004, PENDING
DT      Utility
FS      APPLICATION
LN.CNT 1016
```

Патент США (US) из БД USPATFULL

• • •

5. Вывод ответов

```
L8    ANSWER 3460 OF 3969 PCTFULL   COPYRIGHT 2006 Univentio on STN
AN     2006116262 PCTFULL  ED 20061107  EW 200644  Full-text
TIEN   USE OF VITAMIN E TOCOTRIENOLS FOR THE INHIBITION OF
       INTRACELLULARLY OBLIGATE PATHOGEN CHLAMYDIA
TIFR   UTILISATION DE TOCOTRIENOLS DE LA VITAMINE E POUR L'INHIBITION
       AU NIVEAU INTRACELLULAIRE DE CHLAMYDIAE PATHOGENES
       OBLIGATOIRES
IN     TAN, Barrie, 49 Northampton Road, Amherst, MA 01002, US;
       MUELLER, Anne, 248 Amherst Road, Apt 315, Sunderland, MA
       01375, US; STUART, Elizabeth, 38 Chapel Road, Amherst, MA
       01002, US
PA     TAN, Barrie, 49 Northampton Road, Amherst, MA 01002, US;
       MUELLER, Anne, 248 Amherst Road, Apt 315, Sunderland, MA
       01375, US; STUART, Elizabeth, 38 Chapel Road, Amherst, MA
       01002, US
AG     HAHN, Kirk, 14431 Holt Avenue, Santa Ana, CA 92705; 92705, US
LAF    English
LA     English
DT     Patent
PI     WO 2006116262        A1 20061102
```

Патент из БД PCTFULL

• • •

Советы по поиску названий

Химические названия часто содержат специальные символы, требующие дополнительного внимания

Химическое название содержит	Следующие действия
Символы: **Надстрочные** **Подстрочные** **Курсив**	Игнорировать курсив или надстрочные / подстрочные символы **=> E DICHLOROMETHANE-D2/CN**
Греческие буквы	Прописать название греческой буквы и поместить точки до и после ее названия **=> E .ALPHA.-ACETYLNAPHTHALENE/CN**
Прим (апострофы)	Поместить кавычки (“ ”) вокруг всего названия **=> S “N,N’-DIMETHYL-1,2-ETHANEDIAMINE”/CN**
Круглые скобки	Поместить кавычки (“ ”) вокруг всего названия **=> S “2-(1-ACETOXYETHYL)FURAN”/CN**
Квадратные скобки	Заменить квадратные скобки круглыми и поместить кавычки (“ ”) вокруг всего названия **=> S “BENZO(B)THIOPHENE”/CN**

STN

Резюме

Поиск по химическому названию

Для нахождения литературных ссылок на соединения:

1	**Найти CAS RN интересующего соединения.**	
	A. Ввод REGISTRY.	**=> FILE REGISTRY**
	B. Проверка химического названия.	**=> E RESVERATROL/CN**
	C. Поиск.	**=> S E3** **L1 1 RESVERATROL/CN**
	D. Вывод ответов.	**=> D L1 1 IDE**
2	**Найти ссылки, цитирующие соединение.**	
	A. Ввод CAplus.	**=> FILE CAPLUS**
	B. Поиск по L-номеру REGISTRY.	**=> S L1** **L2 2118 S L1**
	C. Оценка ответов.	**=> D SCAN**
3	**Добавление кода роли CAS – изоляция конкретных записей.**	**=> S L1/PREP**
4	**Вывод ответов.**	**=> D L2 4 IBIB ABS**

STN

Резюме

Поиск по химическому названию

5 **(дополнит.)**	**Экстракция названий и CAS RN для поиска в других файлах STN.**	**=> FILE REGISTRY** **=> SEL CHEM L1**
6 **(дополнит.)**	**Включение в поиск дополнительных файлов STN.**	**=> FILE USPATALL PCTFULL** **=> S E1-E2 OR E4-E10**
7 **(дополнит.)**	**Удаление дубликатов и вывод ответов.**	**=> DUP REM L2 L7** **=> D 1 FROM EACH**

STN

Поиск по молекулярной* формуле

В этом разделе:

- Поиск соединений, соответствующих известной молекулярной формуле
- Уточнение результатов поиска по веществу экспериментальными данными и названиями
- Нахождение семейства веществ

*** Суммарной (брутто-) формуле**

STN

Поиск по молекулярной формуле

В БД Registry веществам сопоставлены молекулярные формулы, которые можно использовать для идентификации их CAS RN

Поиск по молекулярной формуле полезен, когда нужно идентифицировать неизвестное вещество на основе определенных свойств

STN

Поиск по молекулярной формуле

Поисковый запрос:

Выделенное вещество имеет следующие характеристики:

Молекулярная формула: $C_3H_8N_3SH$

Молекулярный вес: 119.19

Показатель кислотности pKa: 9.77

Что это за вещество?

STN

Стратегия поиска

веществ с известными экспериментальными свойствами

STN

1. Молекулярная формула по системе Хилла

Перед поиском составляется молекулярная формула соединения по системе Хилла

Вещества без углерода:

- **химические элементы располагаются в алфавитном порядке с указанием числа атомов каждого из них, число 1 не указывается**
  - ***Пример:*** **H2O4S ClH Cl5Sb**

Вещества с углеродом :

- **первым располагается углерод, вторым водород (если присутствует), затем все другие элементы в алфавитном порядке.**
  - ***Пример:*** **C8H18 C2Ag2N8 C9H8Cl4N8O**

STN

1. Молекулярная формула по системе Хилла

Рабочий лист
Задание: Записать молекулярную формулу соединения по системе Хилла.
C3H8N3SH _____

2. Поиск соединений по молекулярной формуле

Использование молекулярной формулы для нахождения CAS RN (записи в БД Registry) интересующего соединения:

A. Ввод БД Registry

B. Проверка наличия формулы в БД

C. Проведение поиска

STN

2-A,B. Ввод БД Registry и проверка формулы

В БД Registry молекулярные формулы соединений хранятся в индексе **Molecular Formula (MF)**

Для просмотра этого индекса добавьте /MF в конце интересующей формулы

```
=> FILE REGISTRY

=> E C3H9N3S/MF
E1            1      C3H9N3PB/MF
E2            1      C3H9N3PT/MF
E3           23 --> C3H9N3S/MF
E4            1      C3H9N3S.1/2BR3CU.BRH.H/MF
E5            1      C3H9N3S.1/2H2O4S/MF
E6            5      C3H9N3S.2BRH/MF
E7            1      C3H9N3S.2C2H4O2/MF
E8            1      C3H9N3S.2CLH/MF
E9            1      C3H9N3S.2CLHO4/MF
E10           1      C3H9N3S.2H/MF
E11           1      C3H9N3S.2HI/MF
E12           1      C3H9N3S.2HNO3/MF
```

23 вещества в БД Registry имеют ту же молекулярную формулу, что и интересующее вещество

STN

2-C. Проведение поиска

```
=> S E3

L1           23 C3H9N3S/MF
```

3. Уточнение ответов известными свойствами

Числовые свойства можно искать в индивидуальных полях

Имеются два способа задать поисковый термин:

- добавление соответствующих кодов полей к значению свойства – 150/BP
- Создание уравнения значения свойства – BP = 150

STN

3. Уточнение ответов известными свойствами

Свойство	Поиск в поле	Пример
Показатель кислотности (pKa)	/PKA	=> S PKA<=-0.62 => S -0.62/PKA
Молекулярный вес (Molecular weight)	/MW	=> S MW<200
Свойства «Правила пяти» Lipinski	/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

Помощь Дополнительная информация по поиску свойств в REGISTRY:

```
=> HELP PROPERTIES
```

STN

3. Уточнение ответов известными свойствами

```
=> S L1 AND MW=119.19
           139 MW=119.19
L2          20 L1 AND MW=119.19

=> S L2 AND PKA=9.77
       1277177 PKA=9.77
L3            1 L2 AND PKA=9.77
```

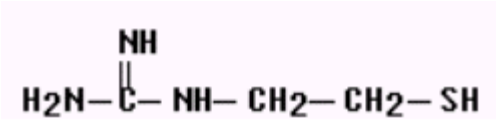
MW = молекулярный вес
PKA = показатель кислотности

STN

4. Вывод ответов

Совместное использование форматов IDE и PROP обеспечивает исчерпывающий вывод информации о веществе

```
=> D L3 IDE PROP
L3   ANSWER 1 OF 1  REGISTRY  COPYRI
RN   1190-74-5  REGISTRY
ED   Entered STN:  16 Nov 1984
CN   Guanidine, (2-mercaptoethyl)- (6CI, 8CI, 9CI)  (CA INDEX NAME)
OTHER NAMES:
CN   (.beta.-Mercaptoethyl)guanidine
CN   (2-Mercaptoethyl)guanidine
CN   (Mercaptoethyl)guanidine
CN   MEG
CN   N-(2-Mercaptoethyl)guanidine
MF   C3 H9 N3 S
CI   COM
LC   STN Files:   BEILSTEIN*, BIOSIS, CA, CAOLD, CAPLUS, CASREACT,
       DDFU, DRUGU, EMBASE, IMSDRUGNEWS, IMSRESEARCH, MEDLINE,
       RTECS*, TOXCENTER, USPATFULL
         (*File contains numerically searchable property data)
```




```
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
             160 REFERENCES IN FILE CA (1907 TO DATE)
              11 REFERENCES TO NON-SPECIFIC DERIVATIVES IN FILE CA
             160 REFERENCES IN FILE CAPLUS (1907 TO DATE)
              29 REFERENCES IN FILE CAOLD (PRIOR TO 1967)
```

STN

4. Вывод ответов

Experimental Property Tags (ETAG)

PROPERTY	NOTE
Carbon-13 NMR Spectra	(1) CAS
Mass Spectra	(1) CAS
Proton NMR Spectra	(1) CAS

(1) Solodenko, Wladimir; Synthesis 2006(3) P461-466 CAPLUS

Predicted Properties (PPROP)

PROPERTY (CODE)	VALUE	CONDITION	NOTE
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 1 25 deg C	(1)
Bioconc. Factor (BCF)	1.0	pH 2 25 deg C	(1)
	• • •		
PKA (PKA)	9.59+/-0.25	Most Acidic 25 deg C	(1)
PKA (PKA)	13.43+/-0.70	Most Basic 25 deg C	(1)
	• • •		

STN

Многокомпонентная молекулярная формула

Индекс MF содержит полную молекулярную формулу каждого вещества. Для определения MF некоторых классов веществ

- соли кислот
- соли аминов
- полимеры

существуют особые правила.

Их молекулярные формулы в БД имеют многокомпонентную структуру: каждая запись MF состоит из > 1 отдельной компоненты

Многокомпонентная молекулярная формула

Соли кислот

Для определения MF солей кислот следует:

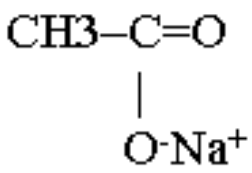
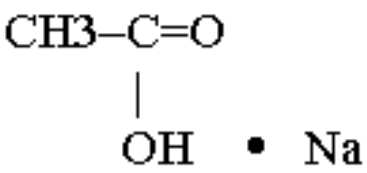
1. Заменить атомы металла в формуле соли атомами водорода (с учетом валентности)
2. Записать формулу нейтральной молекулы кислоты
3. Записать формулу кислоты и формулу металла, разделив их точкой. Углеродсодержащая компонента ставится первой

STN

Многокомпонентная молекулярная формула

Соли кислот

Пример: *Ацетат натрия*

Common representation	REGISTRY representation	MF index entry
		C2H4O2.NA

Многокомпонентная молекулярная формула

Соли аминов

Для определения MF солей аминов (солей ионов аммония), кватернизованных хотя бы одним атомом водорода, следует:

1. Удалить такие атомы *водорода* из формулы иона аммония и добавить их к формуле аниона
2. Записать формулы полученных нейтральных фрагментов, разделив их точкой. Углеродсодержащая компонента ставится первой

STN

Многокомпонентная молекулярная формула

Соли аминов

Для определения MF солей аминов (ионов аммония), в которых нет атомов водорода в составе кватернизованной группы, следует:

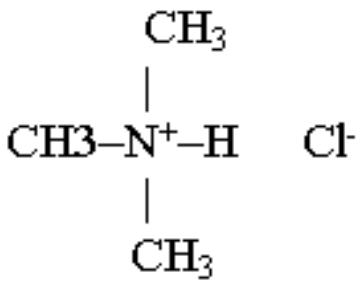
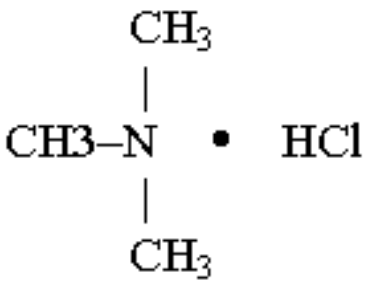
1. Определить формулу каждого заряженного фрагмента (иона)
2. Записать полученные формулы, разделив их точкой. Углеродсодержащая компонента ставится первой

STN

Многокомпонентная молекулярная формула

Соли аминов

Пример: *Хлорид триметиламмония*

Common representation	REGISTRY representation	MF index entry
		C3H9N.CLH

Многокомпонентная молекулярная формула

Полимеры

CAS определяет полимеры как природные или синтетические макромолекулы, образующиеся связыванием вместе меньших молекул (мономеров). Большинство полимеров регистрируются CAS в терминах их компонент-мономеров

Записи MF для полимеров содержат:

- формулы каждого мономера, отделенные друг от друга точками*

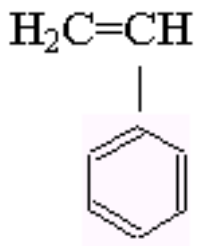
* формулы компонент-мономеров заключаются в круглые скобки, сопровождаемые знаком X

STN

Многокомпонентная молекулярная формула

Полимеры – гомополимеры

Пример: *Полистирол*

Common representation	REGISTRY representation	MF index entry
Homopolymer of 	$H_2C=CH–Ph$	(C8H8)X

Многокомпонентная молекулярная формула

Полимеры – сополимеры

Пример: *Сополимер винилацетат-винилхлорид-винилфторид*

Common representation	REGISTRY representation	MF index entry
Copolymer of vinyl acetate ($CH_3CO–O–CH=CH_2$), vinyl chloride ($H_2C=CH–Cl$), and vinyl fluoride ($H_2C=CH–F$)	$AcO–CH=CH_2$ $H_2C=CH–Cl$ $H_2C=CH–F$	(C4H6O2.C2H3CL.C2H3F)X

STN

Резюме

Многокомпонентные молекулярные формулы

Когда MF содержит более одной химической формулы, то ее компоненты организуются в соответствии с правилами:

Прим.

Если между компонентами нужен коэффициент, он задается так, чтобы для первой компоненты он был равен 1, например, MF ацетата кальция - C2H4O2.1/2CA, а MF адипата натрия - C6H10O4.2NA.

Если ...	То порядок ....
Имеется углеродсодержащая и не содержащая углерод компонента	Первой ставится углеродсодержащая компонента *Example:* C2H402.K/MF
Нет углеродсодержащей компоненты	По алфавиту, по первым элементам каждой компоненты *Example:* H2O4S.2K/MF
Все компоненты содержат углерод	Компонента с наибольшим числом атомов углерода – первая , другие – в порядке уменьшения *Example*: (C8H8.C2H4)X/MF
Две или более компонент имеют одинаковое число углеродов	Определить число атомов водорода, и компонента с наибольшим числом атомов водорода – первая *Example:* C3H9N.C3H6O2/MF
Две или более компонент имеют одинаковое число углеродов и водородов	По алфавиту, используя другие элементы

STN

Поиск семейств веществ

Структура индекса MF облегчает нахождение семейств родственных веществ

Индекс MF содержит ***полную*** молекулярную формулу вещества

Basic Index (BI) БД Registry содержит ***индивидуальные*** формулы компонент, составляющих полную молекулярную формулу

STN

Поиск семейств веществ

Если термин в /MF …	То связанные с ним термины в /BI …
C16H32O2	C16H32O2
C16H32O2.H3N	C16H32O2 и H3N
C16H32O2.NA	C16H32O2 и NA

Помощь	Для нахождения вещества и всех многокомпонентных веществ, в которых оно является компонентой (соли и смеси), следует проводить поиск по мол. формуле в Basic Index REGISTRY.

STN

Поиск семейств веществ

Поисковый запрос:

Найти CAS RN для следующего родоначального (parent) вещества:

$Me_3^+N\text{-}CH_2\text{-}CH_2Br$

Поиск семейств веществ

Рабочий лист
Задание: Записать молекулярную формулу родоначальника
_____

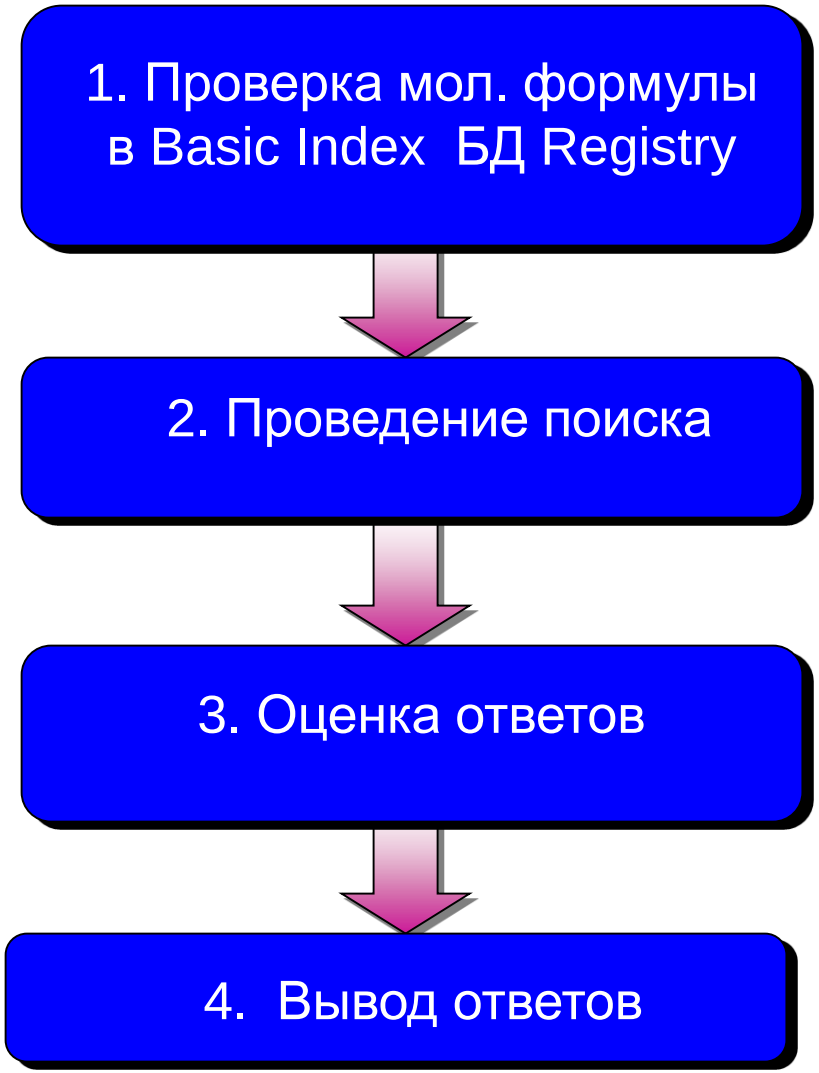
Поиск семейств веществ

Расширенный поисковый запрос:

Найти CAS RN бромидной соли вещества bromocholine ($C_5H_{13}BrN$)

Стратегия поиска

веществ с общим родоначальным соединением



1. Проверка молекуляной формулы

```
=> FILE REGISTRY

=> E C5H13BRN

E1            1      C5H13BRMGSI/BI
E2            1      C5H13BRMON2O2S4SI/BI
E3           16 --> C5H13BRN/BI
E4           17      C5H13BRN2/BI
E5            1      C5H13BRN2NIO5/BI
E6            2      C5H13BRN2O/BI
E7            1      C5H13BRN2O2/BI
E8            1      C5H13BRN2O6S3/BI
E9            2      C5H13BRN2P/BI
E10           1      C5H13BRN2S/BI
E11           1      C5H13BRN4NIS2/BI
E12           6      C5H13BRNO/BI
```

16 веществ имеют общую молекулярную формулу с соединением bromocholine – родоначальным (parent) в поиске

2. Проведение поиска

```
=> S E3
L1          16 C5H13BRN/BI
```

3. Оценка ответов

Поиски по молекулярной формуле часто дают более одного ответа

Один из способов получить конкретный ответ(ы) – добавить дополнительные требования к поисковому запросу

Рекомендуемая стратегия – использование названий фрагментов, описывающих инвариантную (постоянную) часть родственных химических веществ

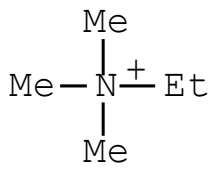
STN

3. Оценка ответов

Применение номенклатуры

Релевантные названия фрагментов можно получить из индексных названий в БД Registry

```
=> D SCAN
L1    16 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    Ethanaminium, bromo-N,N,N-trimethyl- (9CI)
MF    C5 H13 Br N
CI    IDS, COM
```



D1—Br

```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
```

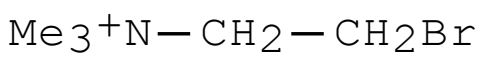
STN

3. Оценка ответов

Применение номенклатуры (продолжение)

Релевантные названия фрагментов можно получить из индексных названий БД Registry (продолжение)

```
=> D SCAN
L1    16 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    Ethanaminium, 2-bromo-N,N,N-trimethyl-, bromide (9CI)
MF    C5 H13 Br N . Br
CI    COM
```



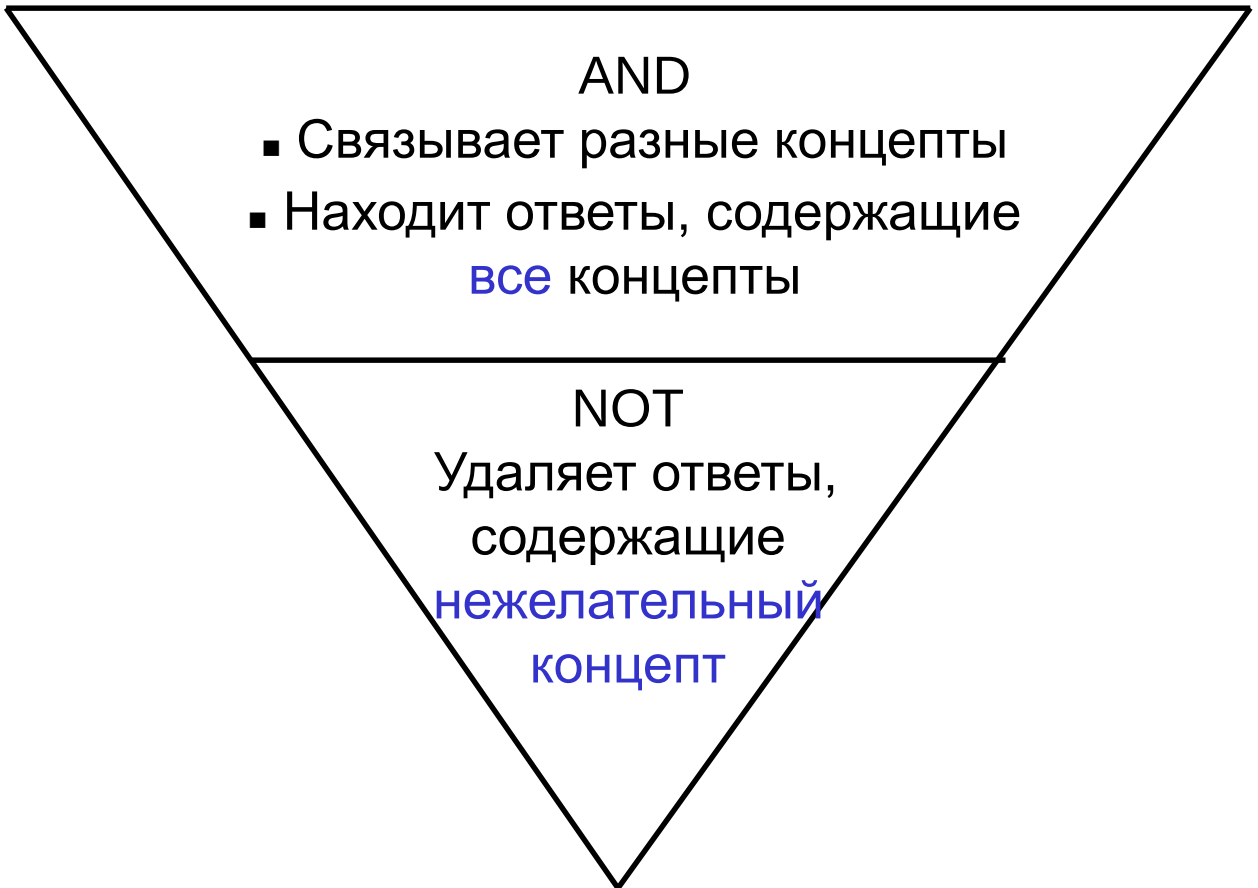
```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):END
```

Это название интересующего вещества. Названия фрагментов – 2-bromo-N,N,N-trimethyl- и bromide – помогут его идентифицировать

3. Оценка ответов

Уточнение результатов

Для повышения точности поиска используются логические операторы



3. Уточнение результатов

```
=> S L1 AND BR

         131103 BR
            847 BRS
         131943 BR
L2            3 L1 AND BR
```

Поиск в Basic Index по символу Br дает только соли бромид-иона. В данном случае получены лишь 3 ответа, которые нужно вывести для выявления интересующего вещества

4. Вывод ответов

Формат SAM выводит название, молекулярную и структурную формулы вещества

```
=> D SAM 1-
YOU HAVE REQUESTED DATA FROM 3 ANSWERS - CONTINUE? Y/(N):Y


L2    ANSWER 1 OF 3  REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    Ethanaminium, 2-bromo-N,N,N-trimethyl-, bromide, compd. with
      diethenylbenzene polymer with 4-ethenylpyridine (9CI)
MF    (C10 H10 . C7 H7 N)x . x C5 H13 Br N . x Br

      CM   1
```

$Me_3^+N—CH_2—CH_2Br$

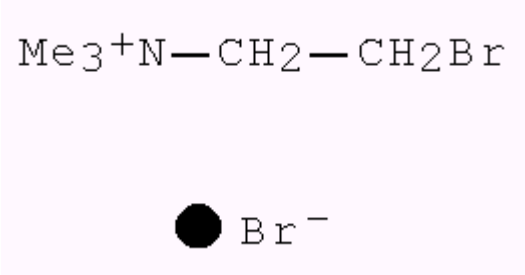
Br^- . . .

(продолжение на след. слайде)

4. Вывод ответов

L2 ANSWER 2 OF 3 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN IN
Ethanaminium, 2-bromo-N,N,N-trimethyl-, bromide (9CI)
MF C5 H13 Br N . Br
CI COM

Второе вещество также представляет интерес



L2 ANSWER 2 OF 3 REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN IN
Ethanaminium, bromo-N,N,N-trimethyl-, bromide (9CI)
MF C5 H13 Br N . Br
CI IDS

• • •

4. Вывод ответов

Вывод идентифицирующей информации для вещества

```
=> D 2 IDE

L2   ANSWER 2 OF 3  REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
RN   2758-06-7  REGISTRY
ED   Entered STN:  16 Nov 1984
CN   Ethanaminium, 2-bromo-N,N,N-trimethyl-, bromide (9CI)  (CA INDEX
NAME)
OTHER CA INDEX NAMES:
CN   (2-Bromoethyl)trimethylammonium bromide (6CI, 7CI)
CN   Ammonium, (2-bromoethyl)trimethyl-, bromide (8CI)
OTHER NAMES:
CN   BCB
CN   BCB (onium compound)
CN   Bromcholin
CN   Bromocholine bromide
CN   BTAB
CN   Hypercyl
CN   Kathesin
CN   Trimethyl .beta.-bromoethylammonium bromide
MF   C5 H13 Br N . Br
CI   COM
```

Резюме
Поиск по молекулярной формуле

Нахождение ссылок на литературу для веществ с известными формулами

1	**Найти вещества с известной MF.**	
	A. Ввод REGISTRY.	=> FILE REGISTRY
	B. Проверка формулы. ***Полные формулы – в индексе MF; parent-формулы – в BI.***	=> E C5H13BRN/MF
	C. Поиск. ***Опция: Уточнение набора ответов свойствами или номенклатурой.***	=> S E3 L1 1 C5H13BRN/MF
	D. Вывод ответов.	=> D L1 1 IDE

STN

Резюме
Поиск по молекулярной формуле

Нахождение ссылок на литературу для веществ с известными формулами

2	**Найти ссылки на вещество.**	
	A. Ввод CAplus.	=> FILE CAPLUS
	B. Поиск по L-номеру из REGISTRY.	=> S L1 L2 1071 S L1
	C. Оценка ответов.	=> D SCAN
3	**Добавление кода роли CAS для изоляции конкретных записей.**	=> S L1/PREP
4	**Вывод ответов.**	=> D L2 4 IBIB ABS

STN

4. Структурный поиск в CAS Registry

Структурный поиск в БД Registry

- Рисование структур
- Стратегия структурного поиска
- Поиск по фрагменту структуры (Substructure – SSS)

Почему структурный поиск?

Несколько способов найти информацию о химическом веществе:

- Химическое название
- Молекулярная формула
- Структура

STN

Почему структурный поиск?

Преимущества поиска по структуре:

- Каждое химическое вещество обладает уникальной структурой
- Классы веществ образуются вариацией структуры родоначального (parent) соединения, т.е. родственные группы веществ имеют общий структурный фрагмент
- По структуре молекулы легко искать энантиомеры и изотопомеры
- По структуре молекулы легко искать биологически активные соединения
- Биологическая активность может быть связана с определенным структурным фрагментом молекулы
- Полимерные материалы содержат структурно-подобные мономерные единицы – элементарные звенья

STN

БД Registry

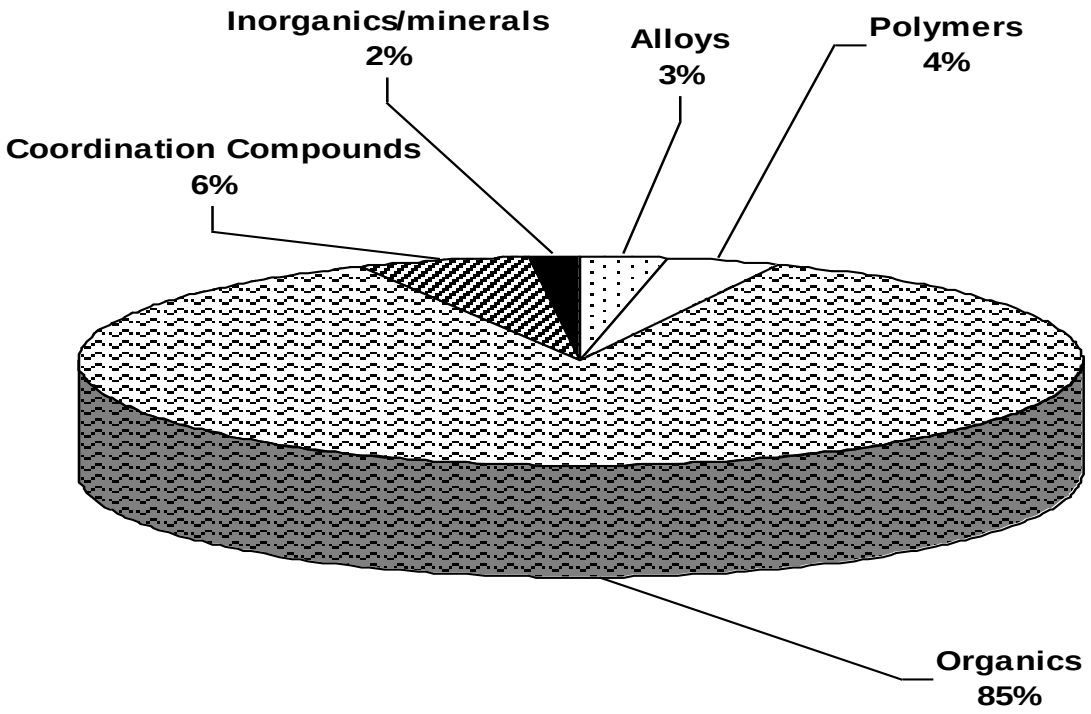
Эта БД содержит записи для химических веществ, регистрируемых CAS с 1957 г.

В ней индексируются все типы химических соединений:

- органические
- неорганические
- (био)последовательности
- полимеры
- металлы и сплавы

БД Registry

Содержание REGISTRY (без последовательностей) (12/05)



Поиск по химической структуре в сети STN International

Поиск по химической структуре возможен в ряде БД сети

Производимая CAS БД Registry – самая большая мировая коллекция научной информации о химических веществах

Структурно-химические БД сети STN

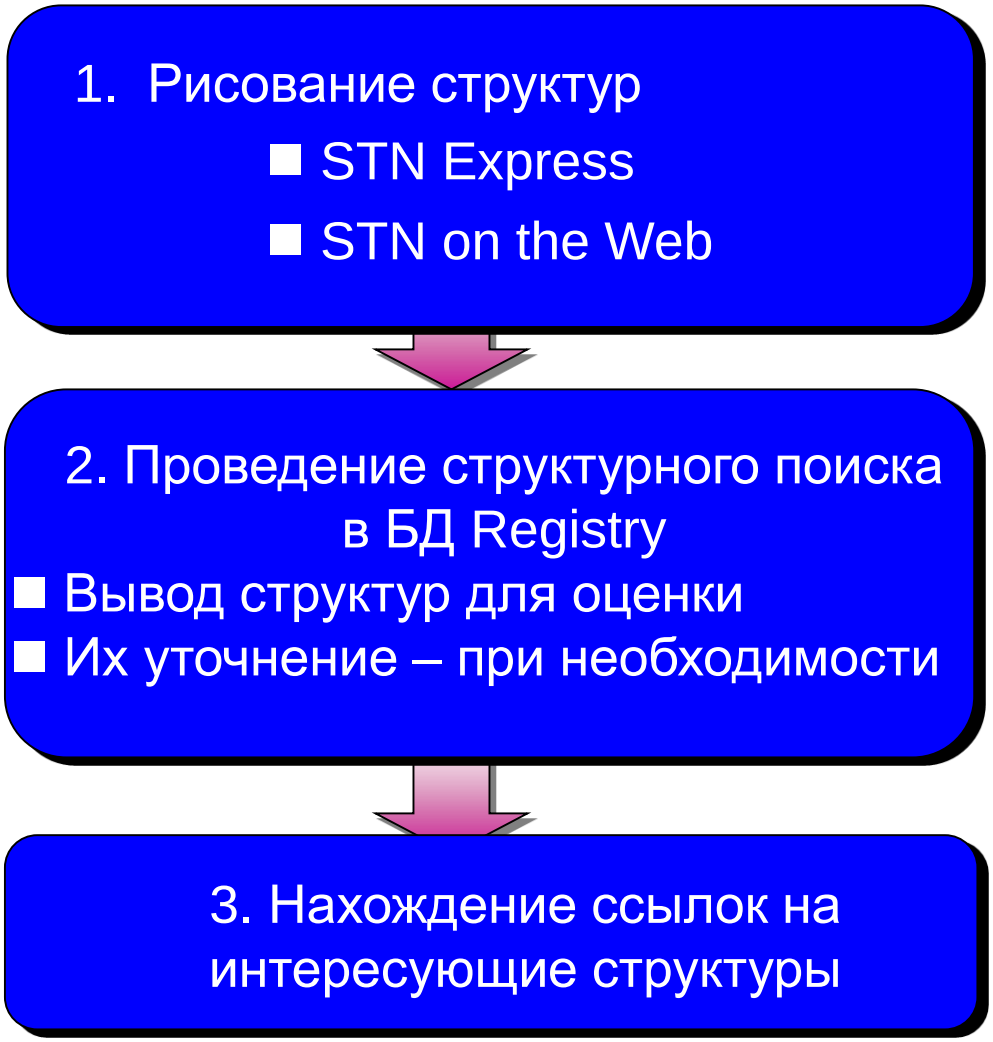
Структурно-химическая БД	Полезна при поиске …
REGISTRY, ZREGISTRY	Органика, неорганика, биохимия или последовательности
BEILSTEIN	Органические вещества
GMELIN	Неорганические вещества
WPINDEX, WPIDS, WPIX	Избранные структуры из разделов B, C, E Derwent's World Patent Index (с 8/99)
MARPAT	Структуры Маркуша из патентов
CASREACT, CHEMINFORMRX, CHEMREACT, DJSMONLINE, DJSMDS, DRUGU, PS	Органические реакции

Учебные файлы, связанные с перечисленными БД, также структурно-химические. Семинар разработан для обучения структурному поиску в БД Registry, но та же поисковая техника применима и в других БД сети STN.

STN

Стратегия структурного поиска

Поиск информации по структурам веществ:



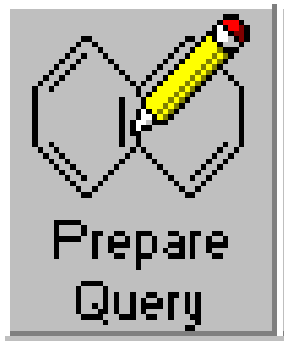
Рисование структур

- Рисование цепей (ациклических фрагментов), циклов (циклических фрагментов) и их систем, и связывание цепей и циклов
- Добавление к структуре других элементов, связей и функциональных групп
- Исправление ошибок
- Сохранение нарисованных структур

STN

Вызов экрана для рисования

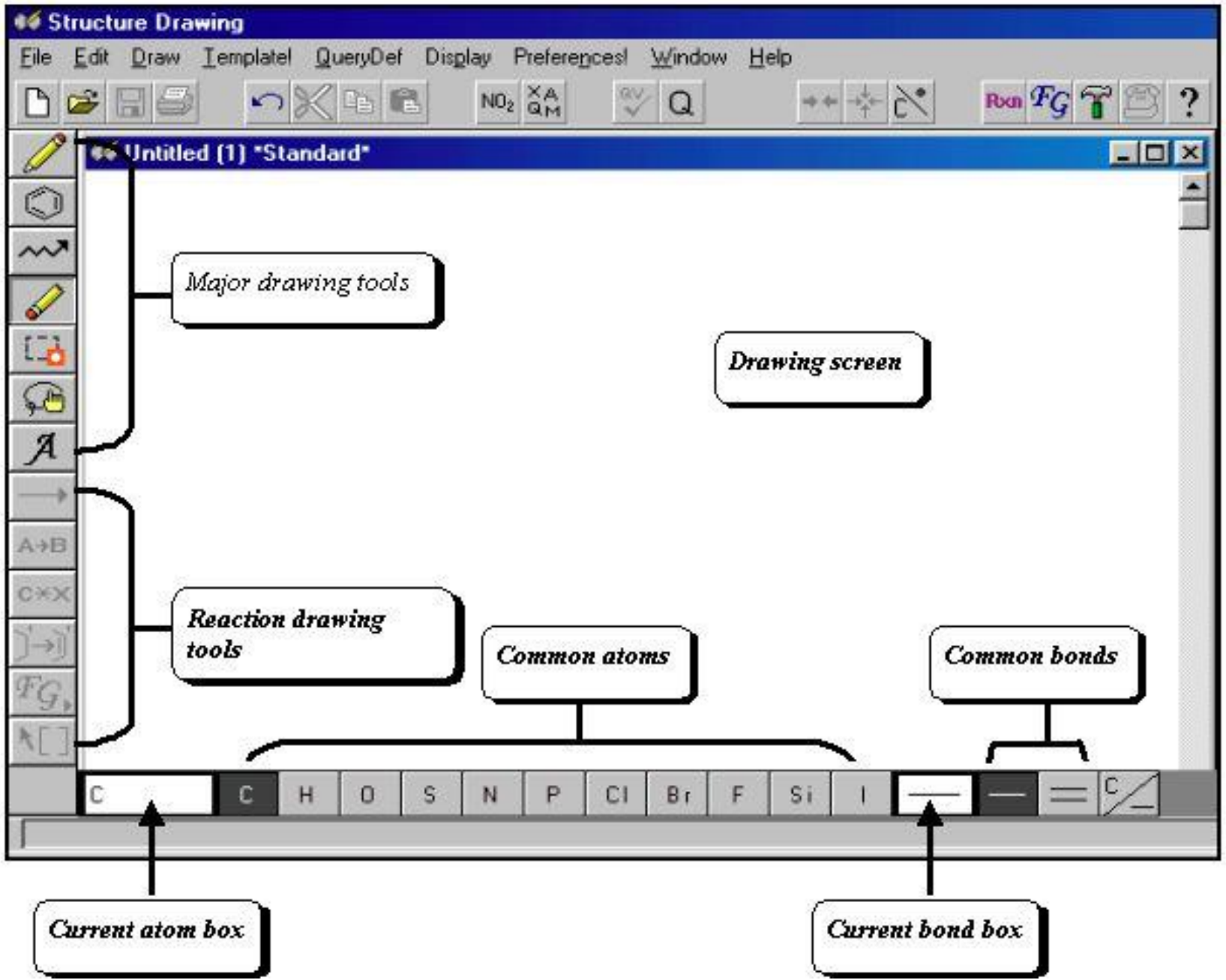
Пиктограмма



на главной панели инструментов STN Express

STN

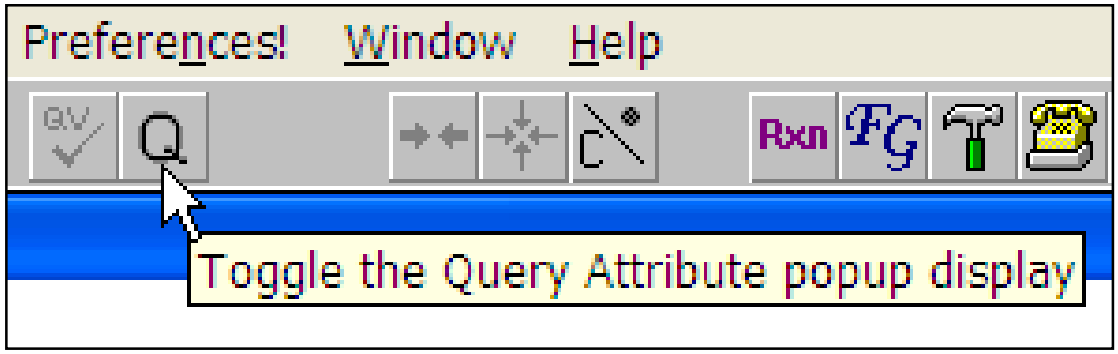
Компоненты экрана – 7 основных частей



Подсказки

Описывают инструментарий для рисования структур в STN Express

При наведении курсора на инструмент появляется подсказка:



Рисование структур

Большинство химических структур можно нарисовать с помощью следующей техники:

- рисование цепей (ациклических фрагментов)
- рисование циклов (циклических фрагментов) и их систем
- связывание циклов и цепей
- задание атомов
- задание функциональных групп (shortcuts)
- задание химических связей
- стирание и удаление

STN

Умолчания

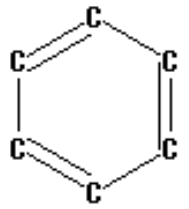
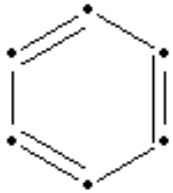
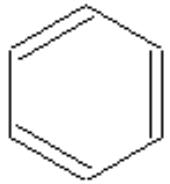
- Атомы в структуре соответствуют элементу в ***current atom box***. При открытии экрана для рисования текущий атом – C (углерод)

- Химические связи в структуре соответствуют связям в ***current bond box***. При открытии экрана для рисования текущая связь – одинарная

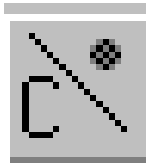
STN

Атомы углерода

Атомы C можно выводить в виде:

The element symbol	Dots	Angles
		

Для переключения между опциями используется пиктограмма



Рисование ациклических фрагментов

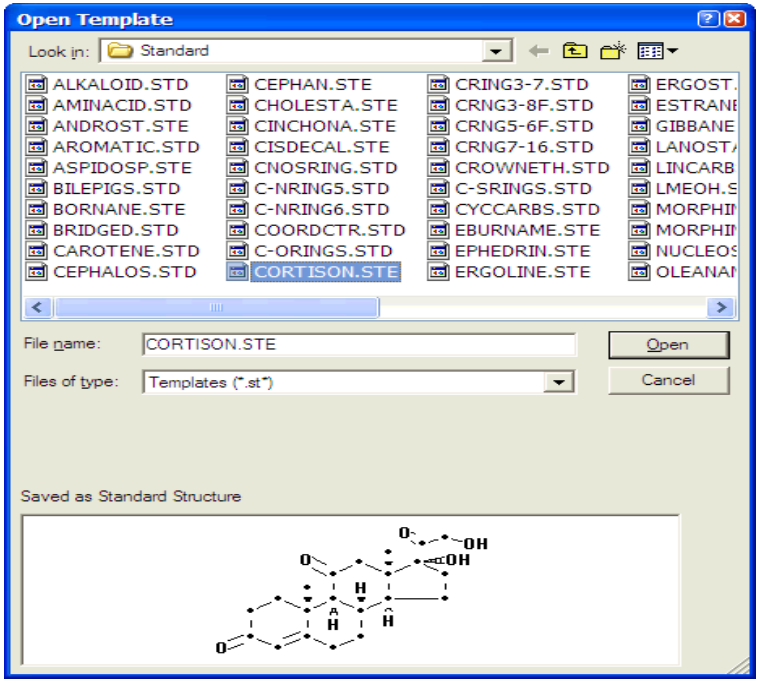
Если нужно	Действия:
Нарисовать цепочку от руки	1. *Инструмент*: 2. Поместить курсор на экране в точке, где хотите начать рисовать. 3. Нарисовать линию – атом, связанный с другим атомом. 4. Повторить 3 при необходимости.
Нарисовать с помощью инструмента рисования *цепочек*	1. *Инструмент*: 2. Появится опция Длина цепочки. Прокрутить до выбора нужной длины. *OK*. 3. Разместить на экране.

STN

Рисование циклов и их систем

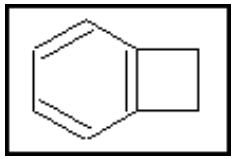
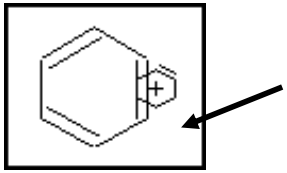
Если нужно	Действия:
Нарисовать отдельный цикл	**1. *Инструмент*:** **2. Появится опция описания циклов. Выбор нужного цикла:** ◆ **Кнопки для распространенных циклов, например,** ◆ **Лист прокрутки описаний циклов** ***OK*.** **3. Разместить цикл на экране.**

Рисование циклов и их систем

Если нужно	Действия:
Нарисовать отдельный цикл с помощью шаблона	1. **Template!** из ниспадающего меню. 2. **Open Template** – список файлов, содержащих шаблоны циклов. Выберите интересующий файл. ***Open***.  3. **Появятся опции Template. Двойной click на атоме или связи цикла.** 4. **Click на экране для размещения цикла.**

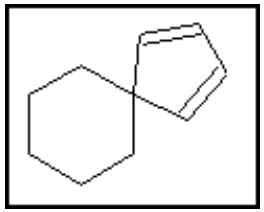
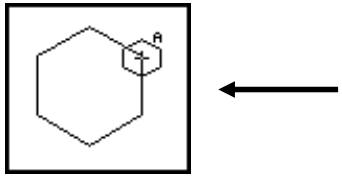
STN

Рисование циклов и их систем

Если нужно	Действия:
Нарисовать систему, конденсированную по связи 	**Нарисуйте крайний слева цикл:** **1. *Инструмент* :** **2. Выбрать нужный цикл:** ◆ **Распространенные циклы, например,** ◆ **Прокрутить список описаний циклов** ***OK*.** **3. Поместить цикл на экран.** **Нарисовать следующий цикл:** **4. Повтор шагов 1-2 для выбора другой компоненты цикла.** **5. Расположить курсор на середине связи, где имеет место конденсация.**  **6. Поместить цикл на экран.**

STN

Рисование циклов и их систем

Если нужно	Действия:
Нарисовать спиро-циклическую систему 	**Нарисовать цикл:** **1. *Инструмент*:** **2. Выбор цикла:** ◆ **например,** ◆ **прокрутить список описаний циклов** ***OK*.** **3. Разместить цикл на экране.** **Нарисовать следующий цикл:** **Шаги 1-2 – для выбора другой компоненты цикла.** **4. Расположить курсор на атоме, где имеет место конденсация:**  **5. Поместить цикл на экран.**

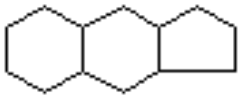
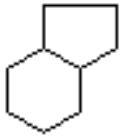
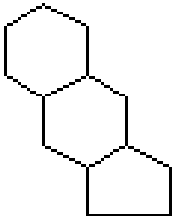
STN

Прим.

Конденсированные по связи системы можно нарисоать с использованием команд с клавиатуры.

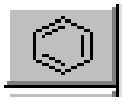
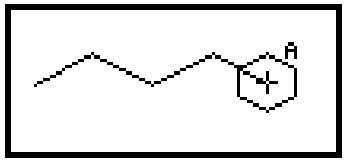
Эти команды – серии номеров, задающих размеры циклов для конденсации, слева направо. Буква, заданная перед номером кольца (u или d), указывает, что следующий цикл должен быть конденсирован с предыдущим в горизонтальном направлении

- **u – вверх (up)**
- **d – вниз (down)**

Команда	Циклическая система
665	
6u5	
6d65	

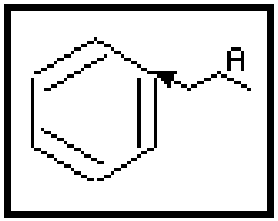
STN

Связывание циклов и цепей в рисуемой структуре

Если нужно	Действия:
Присоединить цикл к цепочке	1. *Инструмент*:  2. Выбор цикла ◆ Или , ◆ Или список описаний циклов *OK*. 3. Расположить курсор на атоме, где имеет место связывание:  4. Поместить цикл на экран.

STN

Связывание циклов и цепей в рисуемой структуре

Если нужно	Действия:
Связать цепочку с циклом	**1. *Инструмент*:** **2. Выбор длины цепочки. *OK*.** **3. Расположить курсор на атоме, где имеет место связь:**  **4. Поместить цепочку на экран.**

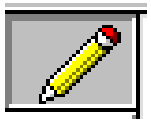
Задание атомов в рисуемой структуре

Когда структуры рисуют с помощью инструментов (карандаш, цикл или цепь), атомы в структуре – по умолчанию те, что находятся в Current atom box

При необходимости атомы можно переопределить

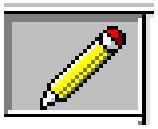
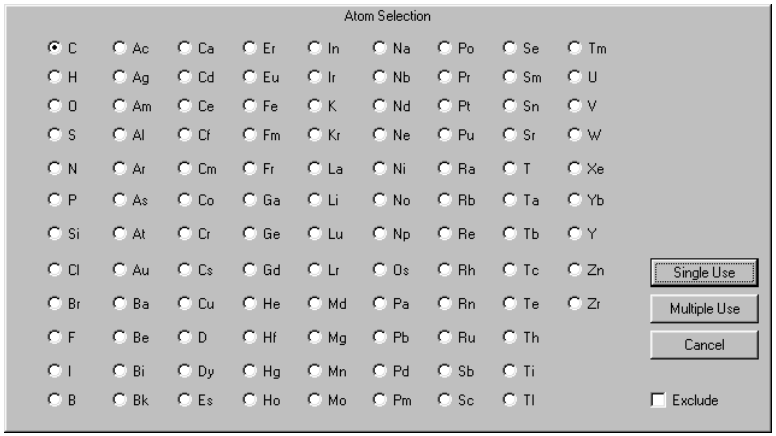
STN

Задание атомов в рисуемой структуре

Если нужно изменить один или несколько атомов на элемент	Действия:
В **палитре атомов**	**1. *Инструмент*:**  **2. Выбор элемента – click:** ◆ **один раз для изменения 1 атома в структуре** ◆ **дважды для изменения >1 атома в структуре** **3. Поместить курсор на изменяемый атом. Click.**

STN

Задание атомов в рисуемой структуре

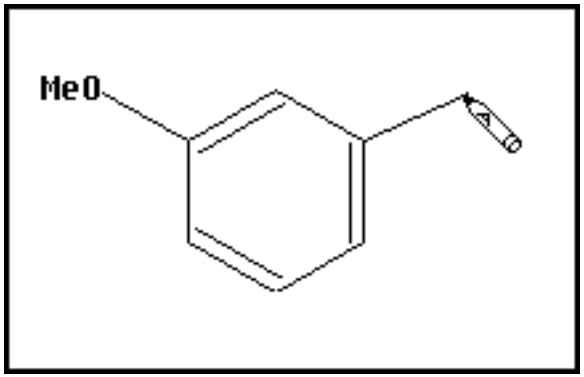
Если нужно изменить один или несколько атомов	Действия:
***Нет* в палитре атомов**	1. ***Инструмент***:  2. **Из ниспадающего меню Draw – *Atom*.** 3. **Из меню Atom Selection выбрать нужный атом, а также *Single Use* или *Multiple Use*.**  4. **Поместить курсор на изменяемом атоме (x). Click.**

STN

Прим.

При вставке атома в структуру появляется символ "A", указывающий, что карандаш находится непосредственно на атоме.

Пример:



Совет

Возврат исходных установок

При многократном использовании (multiple use) атома или группы исходные установки меняются и действуют до тех пор, пока не выбрана пиктограмма

Исходные (по умолчанию) установки можно также вернуть нажатием клавиши пробел

STN

Задание функциональных групп в рисуемой структуре – Shortcuts

Когда структуры рисуют с помощью инструментов (карандаш, цикл или цепь), атомы в структуре – по умолчанию те, что находятся в Current atom box

При необходимости атомы можно переопределить

Функциональные группы в рисуемой структуре – Shortcuts

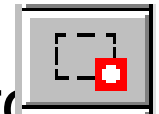
Если нужно	Действия:
Изменить один или несколько атомов на одну из групп	**1. *Инструмент*:** **2. *Инструмент*:** **3. Из меню Функциональных групп выбрать нужную группу, а также *Single Use* или *Multiple Use*.** **4. Поместить курсор на изменяемый атом.**

STN

Совет

Пространственная ориентация (разворот) групп в рисуемой структуре

Действия по развороту групп атомов в структуре:

1. Выбрать инструмент 
2. Выделить группу, которую следует развернуть
3. В меню Display выбрать Reverse Shortcut

STN

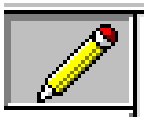
Задание химических связей в рисуемой структуре

Когда структуры нарисованы с помощью инструментов (карандаш, цикл, цепь), химические связи в них – по умолчанию те, что указаны в Current bond box

При необходимости химические связи можно переопределить

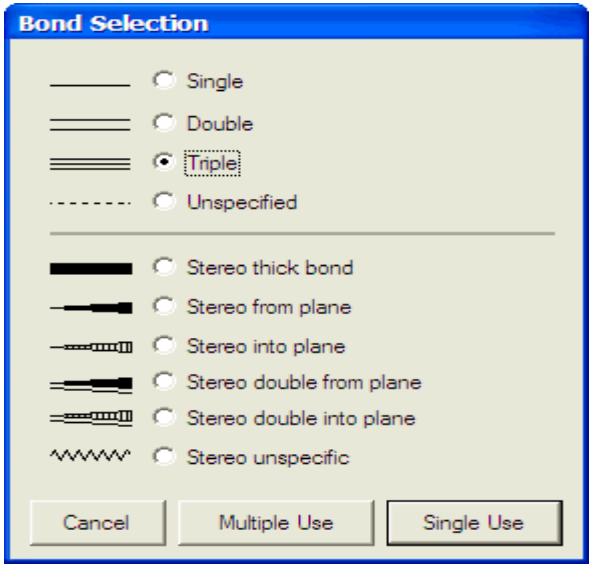
STN

Задание химических связей в рисуемой структуре

Нужно:	Действия:
Изменить одну или несколько связей на ту, что есть *палитре*	**1. *Инструмент*:**  **2. Выбрать связь из *палитры*:** ◆ **Click один раз – для изменения 1 связи в структуре** ◆ **Click дважды – для изменения >1 связи в структуре** **3. Расположить курсор поверх изменяемой связи (ей). Click.**

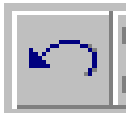
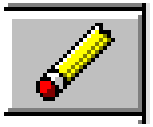
STN

Задание химических связей в рисуемой структуре

Нужно:	Действия:
Изменить одну или несколько связей на связь, которой *нет в палитре* (common bonds)	**1. *Инструмент*:** **2. Из меню Draw выбрать *Bond*.** **3. Из меню Bond Selection выбрать нужную связь, а также *Single Use* или *Multiple Use*.**  **4. Поместить курсор на связь (и), которые надо изменить. Click.**

STN

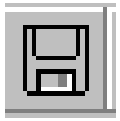
Исправление ошибок в нарисованной структуре

Нужно:	Действия:
Отменить последнее действие	*Инструмент*: 
Стереть атом и связь	1. *Инструмент*:  2. Click на стираемом атоме.
Очистить экран для рисования	Из меню Edit выбрать *Clear All*.

STN

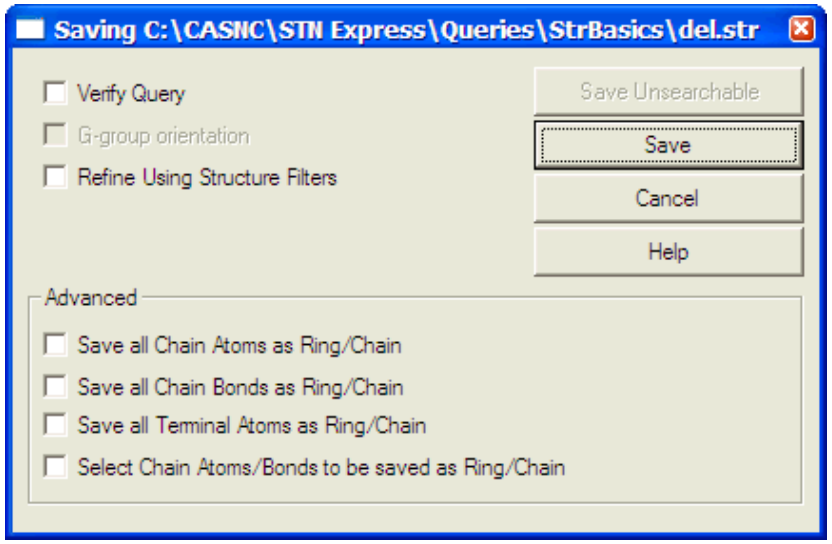
Сохранение нарисованной структуры

По окончанию рисования структуры ее следует сохранить для последующего использования в структурном поиске

Шаг	Действие
1	***Иконка:*** 
2	**Появляется Save Query As.** **В *File Name:* напечатать имя структуры.** ***OK*.**

STN

Сохранение нарисованной структуры

Шаг	Действия
3	**Появляется Saving. Удалить все метки (для учебных целей).**  **Click *Save*.**

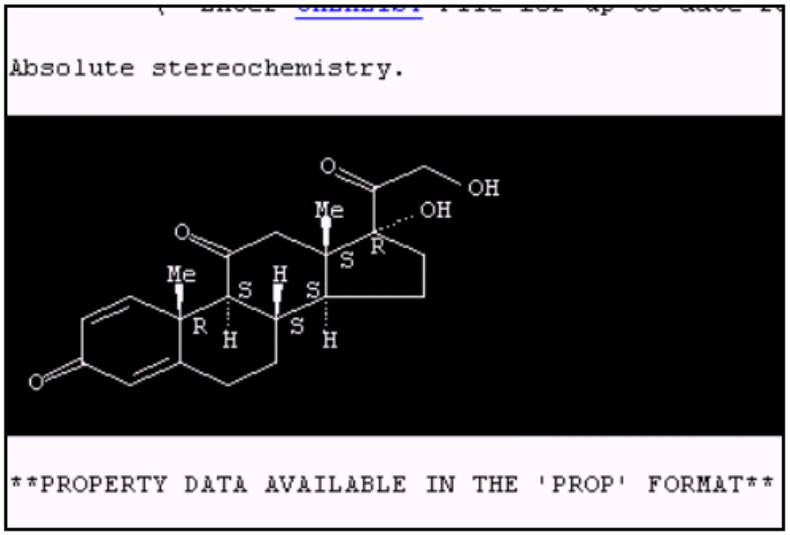
Совет

Моделирование структур

Структуры из online-вывода или транскриптов можно использовать в качестве основы для нового структурного запроса

Для моделирования структуры нужно:

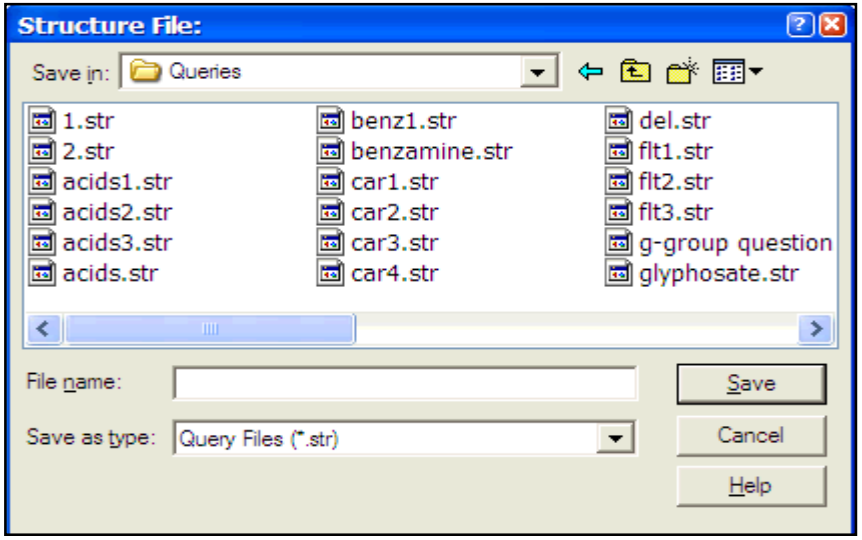
1. Выделить структуру на экране



Совет *(продолжение)*

2. Из меню Edit выбрать Create Query File

3. Сохранить структур, нажатием клавиши Save

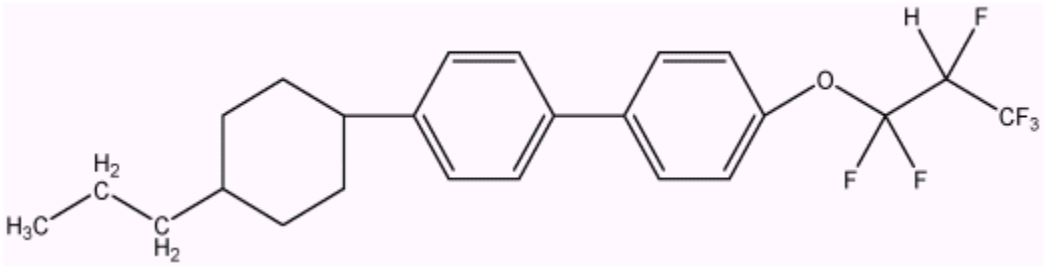


4. Открыть структуру на экране для рисования и модифицировать ее при необходимости. Сохранить изменения (клавиша Save)

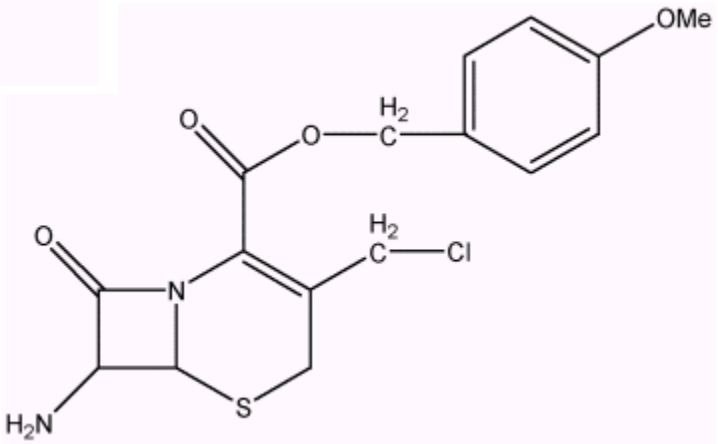
STN

Практика

***Задание*: Нарисовать и отдельно сохранить каждую из структур**



Сохранить этот ответ Skills1.str



Сохранить этот ответ Skills2.str

STN

Структурный поиск

В этом разделе:

- Задание типа структурного поиска на основе информационной потребности
- Загрузка (upload) структур в БД сети STN International
- Использование команд сети STN для проведения структурного поиска
- Нахождение ссылок на интересующие структуры в БД CAplus

STN

Структурный поиск

Многофункциональность структурного поиска:

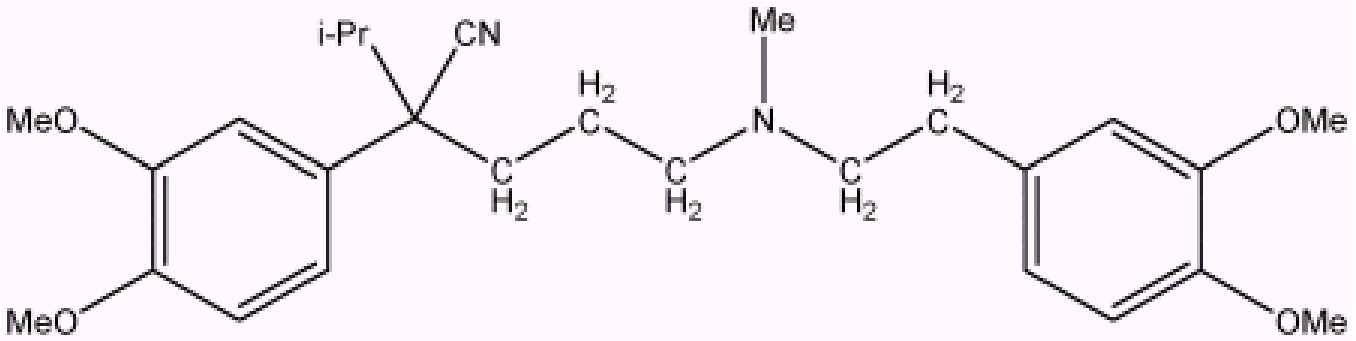
Поиск	Полезен для:
Точный	■ Нахождение синтеза конкретного соединения ■ Выяснение того, получено ли вещество ранее
Близкий (родственные структуры)	■ Биологически активные соли соединения ■ Поиск полимерных материалов ■ Идентификация лекарств, содержащих конкретное вещество
Структуры содержат интересующий скелет или фрагмент	■ Определение аналогов функциональных групп ■ Соотношения структура /активность

STN

Поиск семейства структур

Поисковый запрос:

Найти ссылки на следующее вещество, его соли и любые смеси с другими соединениями



Стратегия поиска

статей, описывающих семейство структур

STN

Стратегия поиска

статей, описывающих семейство структур

STN

1. Рисование и сохранение структуры

STN Express **или** STN on the Web

2. Ввод БД Registry

Для ввода БД Registry используется команда FILE

```
=> FILE REGISTRY
FILE 'REGISTRY' ENTERED AT 13:45:46 ON 23 MAR 2006
USE IS SUBJECT TO THE TERMS OF YOUR STN CUSTOMER AGREEMENT.
PLEASE SEE "HELP USAGETERMS" FOR DETAILS.
COPYRIGHT (C) 2006 American Chemical Society (ACS)

Property values tagged with IC are from the ZIC/VINITI data file
provided by InfoChem.

STRUCTURE FILE UPDATES:   21 MAR 2006  HIGHEST RN 877591-95-2
DICTIONARY FILE UPDATES:  21 MAR 2006  HIGHEST RN 877591-95-2

TSCA INFORMATION NOW CURRENT THROUGH January 6, 2006

  Please note that search-term pricing does apply when
  conducting SmartSELECT searches.
```

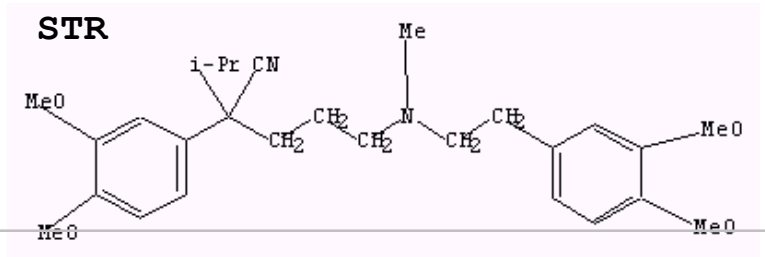
● ● ●

STN

3. Загрузка структуры

Шаг	Действие
1	**Загрузка структуры:**
2	**Структурные файлы:** выбор интересующей структуры.

3	**Загрузка структуры в STN. Структуре приписывается L-номер:**
	`=>`
	`Uploading C:\ProgramFiles\Stnexp\Queries\basics1.str`
	`L1 STRUCTURE UPLOADED`

4	**Проверка в online:**
	`=> D L1`
	`L1 HAS NO ANSWERS`
	`L1 STR`
	 

STN

4. Пробный поиск

Пробный (sample) поиск – структурный поиск по части БД

Это бесплатная опция для оценки эффективности поиска – проверка того, что

- поиск проходит через системные ограничения
- выводятся нужные типы ответов

STN

4. Проверка структуры

Для проведения структурного поиска используется команда **SEARCH (S)**. В командной строке необходимо указать:

1. L-номер, приписанный структуре при загрузке
2. тип структурного поиска (в зависимости от цели возможны три типа поиска)
3. рамки поиска – SAM (т.е. sample) или FULL

```
=> S L1 FAM SAM
```

STN

4. Типы структурного поиска

Цель	Тип поиска		
	Exact EXA	**Family FAM**	**Substructure SSS**
Конкретное вещество	✓	✓	✓
Стереоизомеры	✓	✓	✓
Изотопомеры		✓	✓
Соли		✓	✓
Смеси		✓	✓
Замещение во все возможные положения			✓

STN

4. Проверка структуры

3. Рамки структурного поиска:

- ***SAM*** – поиск по фиксированной части БД для проверки запроса
- ***FULL*** – поиск по всей БД

```
=> S L1 FAM SAM
SAMPLE SEARCH INITIATED 11:45:03
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -     22 TO ITE

100.0% PROCESSED      22 ITERATIONS                    9 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
                        BATCH   **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:          159 TO      721
PROJECTED ANSWERS:               9 TO      360

L2             9 SEA FAM SAM L1
```

Прогноз по системным ограничениям: поиск пройдет полностью

Структуры («ответы») помещаются в набор, которому приписывается L-номер

STN

4. Проверка ответов

Для оценки результатов структурного поиска используется бесплатная команда **D SCAN**

Команда D SCAN осуществляет случайный отбор ответов из набора с выводом названия (CAS Index Name), молекулярной формулы и структуры соединения (*см. следующие слайды*)

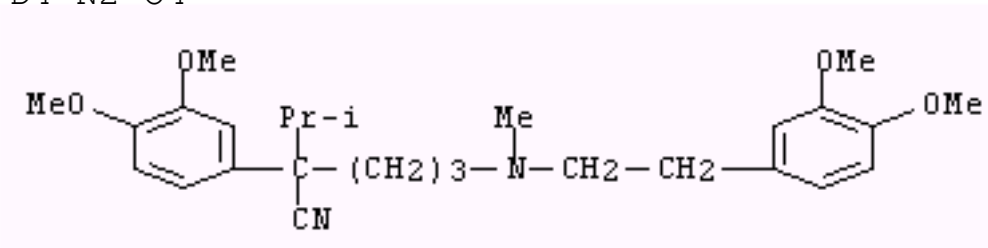
STN

4. Проверка ответов

=> **D SCAN**

Результат подходит

L2 9 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Benzeneacetonitrile, α-[3-[[2-(3,4-dimethoxyphenyl)ethyl]methyl amino]propyl]-3,4-dimethoxy-α-(1-methylethyl)-, labeled with deuterium (9CI)
MF C27 H34 D4 N2 O4



HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):**1**

Число ответов для просмотра

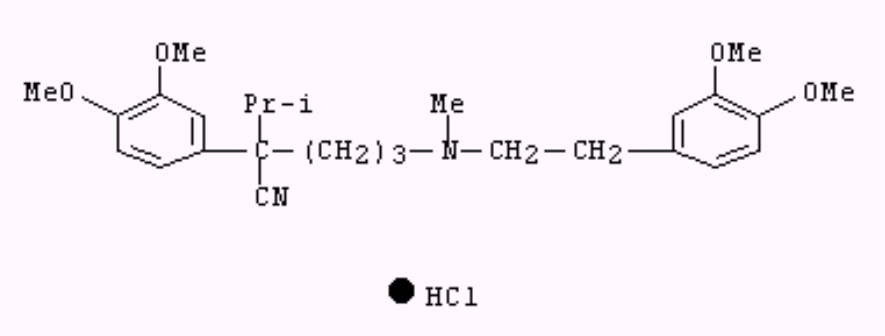
STN

4. Проверка ответов

L2 9 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN Alginic acid, sodium salt, mixt. with α-[3-[[2-(3,4-dimethoxyphenyl)ethyl]methylamino]propyl]-3,4-dimethoxy-α-(1-methylethyl)benzeneacetonitrile monohydrochloride (9CI)
MF C27 H38 N2 O4 . Cl H . Unspecified
CI MXS

CM 1

*** STRUCTURE DIAGRAM IS NOT AVAILABLE ***



Выйти из D SCAN - 0, ZERO, NONE или END

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 0

STN

5. Полный поиск по всей БД

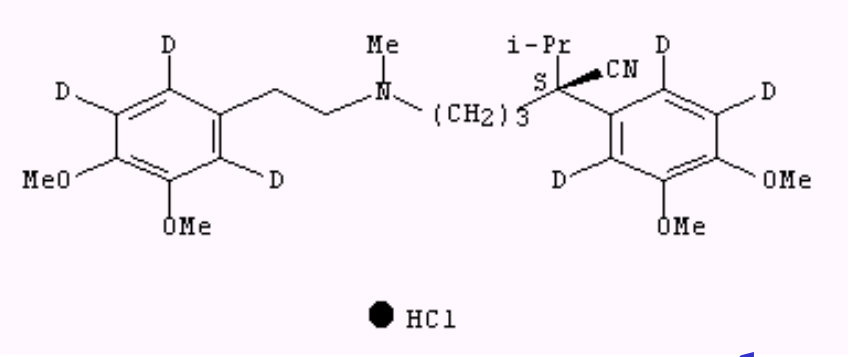
```
=> S L1 FAM FULL

FULL SEARCH INITIATED 11:45:27
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -    265 TO ITERATE

100.0% PROCESSED     265 ITERATIONS                77
ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01


L3             77 SEA FAM FUL L1
```

Результаты помещаются в новый набор ответов

5. Полный поиск по всей БД

Дополнительная оценка ответов

```
=> D SCAN
L3  77 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN   Benzene-2,3,6-d3-acetonitrile, α-[3-[[2-(4,5-dimethoxyphenyl)-2,3,6-
     d3-ethyl]methylamino]propyl]-4,5-dimethoxy-α-(1-methylethyl)-,
     monohydrochloride, (S)- (9CI)
MF   C27 H32 D6 N2 O4 . Cl H

Absolute stereochemistry.
```



Изотопно-меченая соль

```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
```

5. Полный поиск по всей БД

Дополнительная оценка ответов

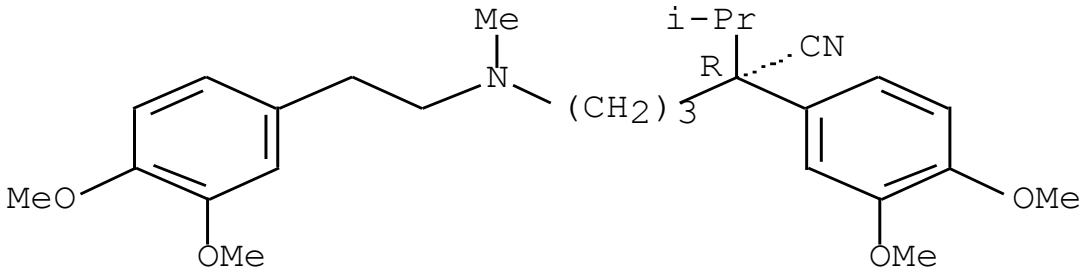
L3 77 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN

IN Benzeneacetonitrile, α-[3-[[2-(3,4-dimethoxyphenyl)ethyl]methylamino]propyl]-3,4-dimethoxy-α-(1-methylethyl)-, (αR)- (9CI)

MF C27 H38 N2 O4

CI COM

Absolute stereochemistry.



Стереоизомер

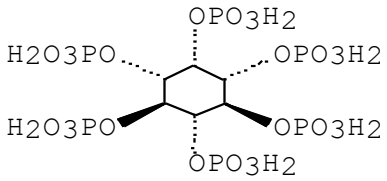
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):**1**

5. Полный поиск по всей БД

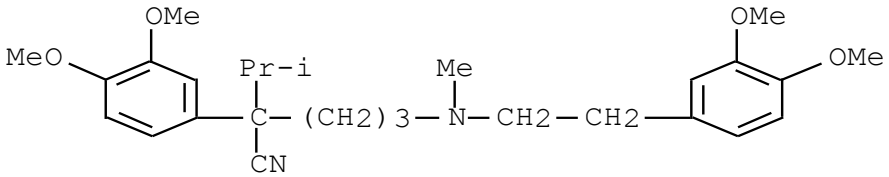
L3 77 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN myo-Inositol, hexakis(dihydrogen phosphate), compd. with α-[3-[[2-(3,4-dimethoxyphenyl)ethyl]methylamino]propyl]-3,4-dimethoxy-α-(1-methylethyl)benzeneacetonitrile (9CI)
MF C27 H38 N2 O4 . x C6 H18 O24 P6

CM 1

Relative stereochemistry.



CM 2



Смесь с другим веществом

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1): 0

STN

Совет

В большинстве структурно-химических БД имеется плата за полный (Full) поиск.

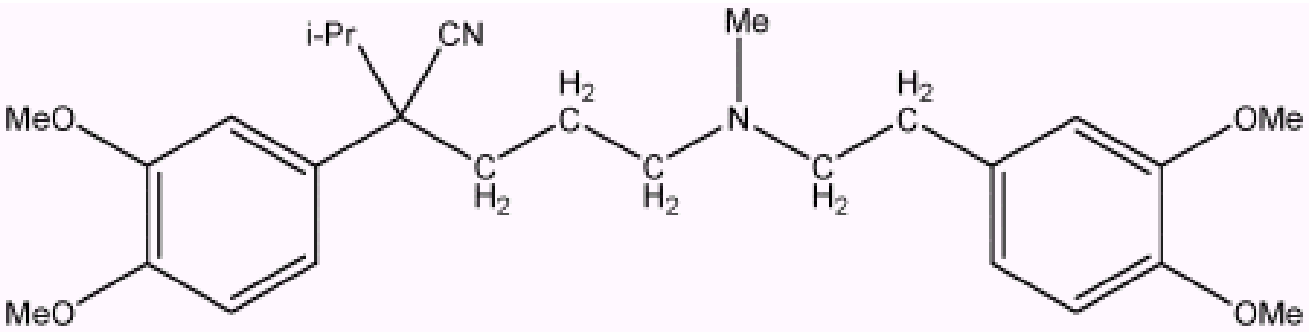
Ее можно узнать по команде:

```
=> HELP COST
```

6. Поиск релевантных ссылок

Вспомним поисковый запрос:

Найти ссылки на соединение со структурой:



6. Поиск релевантных ссылок

Нужны

БД Registry – информация о химических веществах

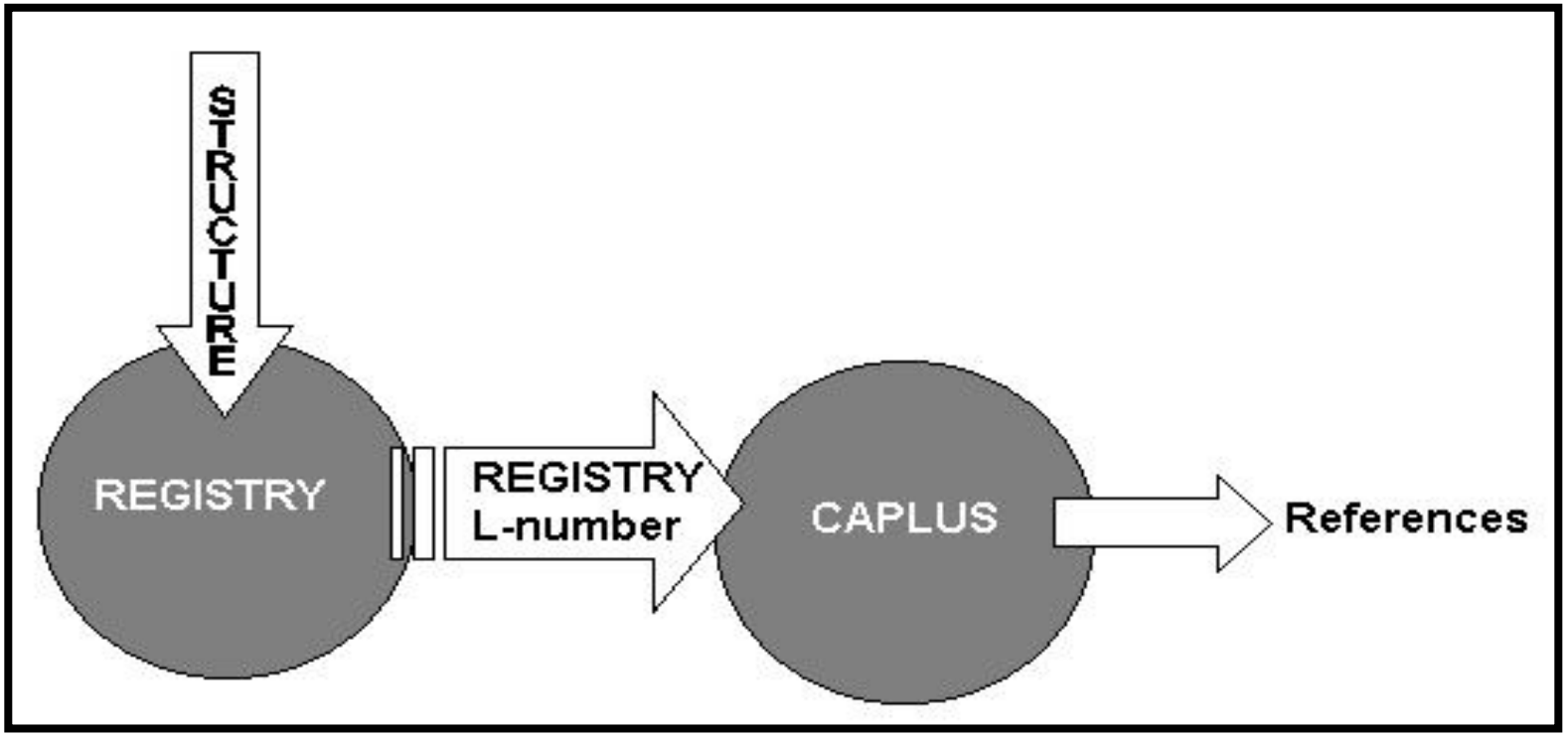
БД CAplus – библиографические ссылки и рефераты статей

L-номер, сгенерированный при полном поиске – ключ для нахождения релевантных ссылок

STN

6. Поиск релевантных ссылок

Пример



6. Поиск релевантных ссылок

Последовательность поиска ссылок в БД CAplus:

1. Ввод БД CAplus
2. Поиск по L-номеру из БД Registry
3. Оценка ответов
4. Уточнение результатов

STN

6. Поиск релевантных ссылок

1. Ввод БД CAplus

```
=> FILE CAPLUS
FILE 'CAPLUS' ENTERED AT 14:21:04 ON 23 MAR 2006
USE IS SUBJECT TO THE TERMS OF YOUR STN CUSTOMER AGREEMENT.
PLEASE SEE "HELP USAGETERMS" FOR DETAILS.
COPYRIGHT (C) 2006 AMERICAN CHEMICAL SOCIETY (ACS)

Copyright of the articles to which records in this database refer is
held by the publishers listed in the PUBLISHER (PB) field (available
for records published or updated in Chemical Abstracts after December
26, 1996), unless otherwise indicated in the original publications.
The CA Lexicon is the copyrighted intellectual property of the
American Chemical Society and is provided to assist you in searching
databases on STN.  Any dissemination, distribution, copying, or storing
of this information, without the prior written consent of CAS, is
strictly prohibited.

FILE COVERS 1907 - 23 Mar 2006  VOL 144 ISS 13
FILE LAST UPDATED: 22 Mar 2006  (20060322/ED)
```

STN

6. Поиск релевантных ссылок

2. Поиск по L-номеру из БД Registry

```
=> S L3

L4          10112 L3
```

6. Поиск релевантных ссылок

3.Оценка результатов

```
=> D SCAN
L4    10112 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
CC    4-3 (Toxicology)
TI    Expression and activity of a multixenobiotic resistance system in
      the Pacific oyster Crassostrea gigas
ST    multixenobiotic resistance system Pacific oyster; Crassostrea
      multixenobiotic resistance system
IT    Crassostrea gigas
      Development, nonmammalian postembryonic
      Environmental pollution
      Gill
         (expression and activity of multixenobiotic resistance system
         in Pacific oyster Crassostrea gigas)
IT    P-glycoproteins
      RL: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)
         (multixenobiotic resistance (MXR); expression and activity of
         multixenobiotic resistance system in Pacific oyster Crassostrea
         gigas)
```

(продолжение на след. слайде)

6. Поиск релевантных ссылок

3. Оценка результатов

```
IT   Egg
        (oocyte; expression and activity of multixenobiotic resistance
        system in Pacific oyster Crassostrea gigas)
IT   50-32-8, Benzo[a]pyrene, biological studies 52-53-9, Verapamil
     1912-24-9, Atrazine   59865-13-3, Cyclosporin
     RL: ADV (Adverse effect, including toxicity); BIOL (Biological
        study)
        (expression and activity of multixenobiotic resistance system
        in Pacific oyster Crassostrea gigas)

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
```

В этом ответе описаны побочные эффекты вещества

STN

6. Поиск релевантных ссылок

3. Оценка ответов

```
L4    10112 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IC    ICM  C07C255-43
      ICS  C07C253-34
CC    25-20(Benzene, Its Derivatives, and Condensed Benzenoid Compounds)
TI    Optical resolution of verapamil
ST    verapamil optical resoln
IT    56949-77-0
      RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)
         (optical resoln. of, method for)
IT    151079-03-7P 151079-04-8P
      RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP
      (Preparation); RACT (Reactant or reagent)
         (prepn. and decompn. of, in prepn. of verapamil enantiomer)
IT    36622-28-3P, (S)-Verapamil hydrochloride 38176-02-2P,
      (R)-Verapamil hydrochloride
      RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
         (prepn. of, method for)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0
```

В этом ответе описан синтез

STN

6. Поиск релевантных ссылок

4. Уточнение результатов

В БД CAplus результаты поиска по веществам можно легко ограничить с помощью ролей CAS – например, *синтез* или *использование*

Роли CAS

- описывают новую или неизвестную информацию о веществе
- назначены каждому веществу, проиндексированному в записи в БД CAplus:
  - Конкретным веществам с CAS RN
  - Классам веществ по терминологии CAS (например, alkenes, nitrites, peroxides)

STN

6. Поиск релевантных ссылок

4. Уточнение результатов

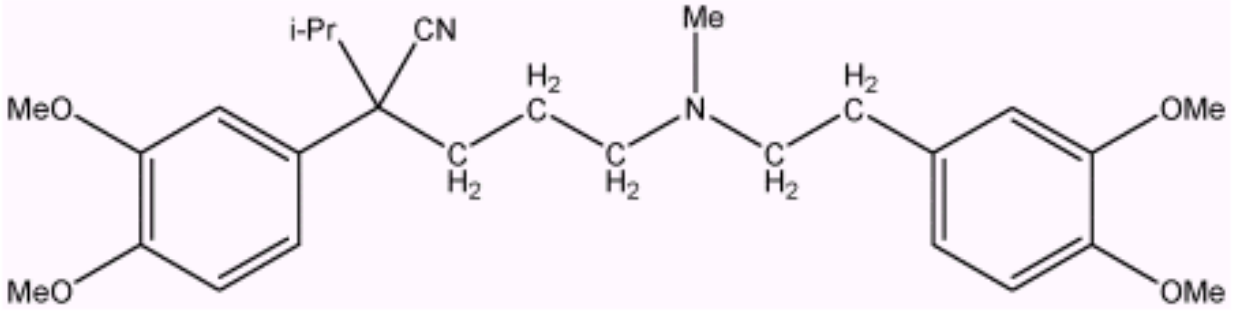
```
TI   Synthesis of stereoselective exocyclic double bonds by the use of
     palladium catalysts
IT   Alkenes, preparation
     RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
        (synthesis of stereoselective exocyclic double bonds by the use
        of palladium catalysts)
IT   7440-05-3, Palladium, uses
     RL: CAT (Catalyst use); USES (Uses)
        (synthesis of stereoselective exocyclic double bonds by the use
        of palladium catalysts)
```

STN

6. Поиск релевантных ссылок

Расширим предыдущий поисковый запрос:

Найти ссылки на способы синтеза вещества со структурой:



Роли веществ CAS

Конкретные роли – имеют 3-буквенные обозначения (коды)

Супер-роли – имеют 4-буквенные обозначения (коды)

В поиске можно использовать как конкретные роли, так и супер-роли

STN

Роли CAS

ANST Analytical Study

ANT	Analyte
AMX	Analytical Matrix
ARG	Analytical Reagent Use *
ARU	Analytical Role, Unclassified

BIOL Biological Study

ADV	Adverse Effect, Including Toxicity
AGR	Agricultural Use *
BAC	Biological Activity or Effector, Except Adverse (1)
BCP	Biochemical Process (2)
BMF	Bioindustrial Manufacture *
BOC	Biological Occurrence *
BPN	Biosynthetic Preparation
BPR	Biological Process *(1)
BSU	Biological Study, Unclassified
BUU	Biological Use, Unclassified *
COS	Cosmetic Use (2)
DGN	Diagnostic Use (2)
DMA	Drug Mechanism of Action (2)
FFD	Food or Feed Use *
MFM	Metabolic Formation *
NPO	Natural Product Occurrence (2)
PAC	Pharmacological Activity (2)
PKT	Pharmacokinetics (2)
THU	Therapeutic Use *

CMBI Combinatorial Study (2)

CPN	Combinatorial Preparation (2)
CRT	Combinatorial Reactant (2)
CRG	Combinatorial Reagent (2)
CST	Combinatorial Study (2)
CUS	Combinatorial Use (2)

FORM Formation, Nonpreparative

FMU	Formation, Unclassified
GFM	Geological or Astronomical Formation
MFM	Metabolic Formation *(1)

OCCU Occurrence

BOC	Biological Occurrence *(1)
GOC	Geological or Astronomical Occurrence
NPO	Natural Product Occurrence (2)
POL	Pollutant
OCU	Occurrence, Unclassified

PREP Preparation

BMF	Bioindustrial Manufacture *
BPN	Biosynthetic Preparation *
BYP	Byproduct
CPN	Combinatorial Preparation (2)
IMF	Industrial Manufacture
PUR	Purification or Recovery
PNU	Preparation, Unclassified
SPN	Synthetic Preparation

PROC Process

BCP	Biochemical Process (2)
BPR	Biological Process *(1)
GPR	Geological or Astronomical Process
PEP	Physical, Engineering, or Chemical Process
CPS	Chemical Process (2)
EPR	Engineering Process (2)
PYP	Physical Process (2)
REM	Removal or Disposal

RACT Reactant or Reagent (2,3)

RCT	Reactant (3)
CRT	Combinatorial Reactant (2)
RGT	Reagent (2)
CRG	Combinatorial Reagent (2)

USES Uses

AGR	Agricultural Use *
ARG	Analytical Reagent Use *
BUU	Biological Use, Unclassified *
CAT	Catalyst Use
COS	Cosmetic Use (2)
CUS	Combinatorial Use (2)
DEV	Device Component Use
DGN	Diagnostic Use (2)
FFD	Food or Feed Use *
MOA	Modifier or Additive Use
NUU	Nonbiological Use, Unclassified
POF	Polymer in Formulation
TEM	Technical or Engineered Material Use
THU	Therapeutic Use *

Specific roles that are not upposted to any super roles:

MSC	Miscellaneous
PRP	Properties

STN

6. Поиск релевантных ссылок

Задание роли вещества CAS:

Для задания роли необходимы L-номер из БД Registry и код роли

```
=> FILE CAPLUS

=> S L3/PREP
          10112 L3
        3430147 PREP/RL
L5            88 L3/PREP
                    (L3 (L) PREP/RL)
```

L3 – набор результатов из полного поиска

Web-ресурс для ролей веществ CAS

Web ресурс	Quick Reference Card: http://www.cas.org/training/stn/database-specific

6. Поиск релевантных ссылок

Оценка результатов:

```
=> D SCAN
L5    88 ANSWERS   CAPLUS  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IC    ICM  C07C255-43
      ICS  C07C253-34
CC    25-20 (Benzene, Its Derivatives, and Condensed Benzenoid
      Compounds)
TI    Optical resolution of verapamil
ST    verapamil optical resoln
IT    56949-77-0
      RL: RCT (Reactant); RACT (Reactant or reagent)
         (optical resolution of, method for)
IT    151079-03-7P  151079-04-8P
      RL: RCT (Reactant); SPN (Synthetic preparation); PREP
      (Preparation) ; RACT (Reactant or reagent)
         (preparation and decomposition of, in preparation of verapamil
         enantiomer)
IT    36622-28-3P, (S)-Verapamil hydrochloride 38176-02-2P,
      (R)-Verapamil hydrochloride
      RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
         (preparation of, method for)
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0
```

Вывод результатов поиска

Для детального просмотра записей из БД Caplus используется команда DISPLAY (D). В команде DISPLAY необходимо указать:

- L-номер набора ответов
- номер(а) ответов
- формат вывода

Вывод результатов поиска

Опция	Умолчания:	Примечания
L-номер набора ответов	Последний созданный L-номер	D HIS
Номер(а) ответа(ов)	Первый номер	Опции: 1–5 1, 5
Формат	Библиографическая информация (BIB)	IBIB ABS HITSTR ALL

STN

=> **D L5 1 IBIB ABS HITSTR**

L5 ANSWER 1 OF 88 CAPLUS COPYRIGHT 2006 ACS on STN
ACCESSION NUMBER: 2005:1146709 CAPLUS Full-text
DOCUMENT NUMBER: 144:69607
TITLE: Mild Palladium-Catalyzed Selective Monoarylation of Nitriles
AUTHOR(S): Wu, Lingyun; Hartwig, John F.
CORPORATE SOURCE: Department of Chemistry, Yale University, New Haven, CT, 06510, USA
SOURCE: Journal of the American Chemical Society (2005),127(45), 15824-15832
CODEN: JACSAT; ISSN: 0002-7863
PUBLISHER: American Chemical Society
DOCUMENT TYPE: Journal
LANGUAGE: English

(продолжение на след. слайде)

STN

AB Two new palladium-catalyzed procedures for the arylation of nitriles under less basic conditions than previously reported have been developed. The selective monoarylation of acetonitrile and primary nitriles has been achieved using .alpha.-silyl nitriles in the presence of ZnF2. This procedure is compatible with a variety of functional groups, including cyano, keto, nitro, and ester groups, on the aryl bromide. The arylation of secondary nitriles occurred in high yield by conducting reactions with zinc cyanoalkyl reagents. These reaction conditions tolerated base-sensitive functional groups, such as ketones and esters. The combination of these two methods, one with .alpha.-silyl nitriles and one with zinc cyanoalkyl reagents, provides a catalytic route to a variety of benzylic nitriles, which have not only biol. significance but utility as synthetic intermediates. The utility of these new coupling reactions has been demonstrated by a synthesis of verapamil, a clin. used drug for the treatment of heart disease, by a three-step route from com. materials that allows convenient variation of the aryl group.

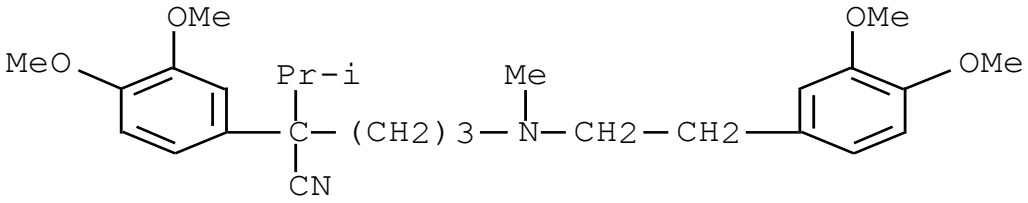
IT 52-53-9P, Verapamil
RL: SPN (Synthetic preparation); PREP (Preparation)
(preparation of benzylic nitriles via palladium-catalyzed monoarylation of aceto, primary and secondary nitriles with aryl bromide in the presence of zinc fluoride and zinc cyanoalkyl reagents)

(***продолжение на след. слайде***)

STN

RN 52-53-9 CAPLUS

CN Benzeneacetonitrile, .alpha.-[3-[[2-(3,4-dimethoxyphenyl)ethyl]methylamino]propyl]-3,4-dimethoxy-.alpha.-(1-methylethyl)- (9CI) (CA INDEX NAME)



REFERENCE COUNT: 58 THERE ARE 58 CITED REFERENCES AVAILABLE FOR THIS RECORD. ALL CITATIONS AVAILABLE IN THE RE FORMAT

Резюме — Стратегия структурного поиска

1	Рисование структур.	
	Сохранение структуры.	
2	Logon в STN.	
	Ввод REGISTRY.	=> FILE REGISTRY
3	Загрузка структуры.	
	Проверка структуры.	=> D L1
4	Sample-поиск.	=> S L1 EXACT SAM
	Оценка результатов.	=> D SCAN
5	Full-поиск.	=> S L1 EXACT FULL
6	Ввод CAplus.	=> FILE CAPLUS
	Поиск ссылок, цитирующих вещество.	=> S L2/PREP => D BIB ABS HITSTR

STN

Поиск по фрагменту структуры (Substructure search – SSS)

Рисование структур для SSS-поиска:

- ☑ Конденсированные циклы
- ☑ Химические связи
- ☑ Замещение

STN

SSS-поиск

Позволяет вносить в поисковые результаты большее разнообразие

Находит все вещества, содержащие заданный структурный фрагмент

Полезен тем, кто заинтересован в базовой структуре, содержащей различные заместители

STN

SSS-поиск

В этом виде поиска имеются **допущения**

– в структуре запроса для циклов и цепочек

– для типа получаемых ответов

В поисковом запросе:	По умолчанию будут найдены структуры:
Циклические системы	■ Как нарисовано ■ Циклическая система как часть большей циклической системы
Атом в цепочке	Атом только в цепочке
Связь в цепочке	Связь только в цепочке

Их можно изменить.

STN

Циклические системы

Допущение, принятое для циклических систем – ***isolated / embedded***. Поиск автоматически проводится для каждой циклической системы в структуре:

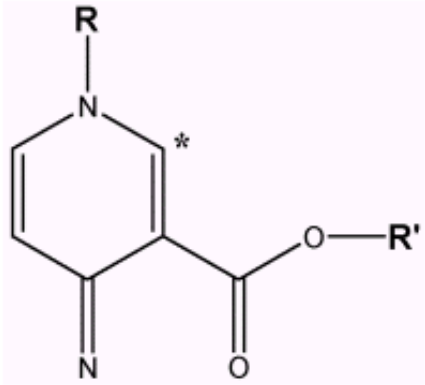
- Как нарисовано, т.е. без других циклов, присоединенных к системе посредством химических связей – изолированная (isolated) циклическая система (цикл)
- Как части большей циклической системы, т.е. с другими циклами, сочлененными с данной системой – конденсированная (embedded) циклическая система

Можно задать, что циклическая система в структуре должна быть изолированной

Циклические системы

Поисковый запрос:

Найти вещества со следующими характеристиками:



Требования:

- *Заместители R и R‘ – любые, в том числе атом H*
- *Нет замещения в положении, помеченном (*)*
- *Цикл может быть замещен во все другие возможные положения, но не должно быть дополнительных конденсированных циклов*

Построение структуры

Рабочий лист	
Требование к структурному поиску	**Действие**
R и R' = любой, в то числе H	
Нет замещения по C цикла, помеченному (*)	
Цикл может быть замещен далее по открытым участкам	
Не должно быть конденсации циклов	

STN

Построение структуры

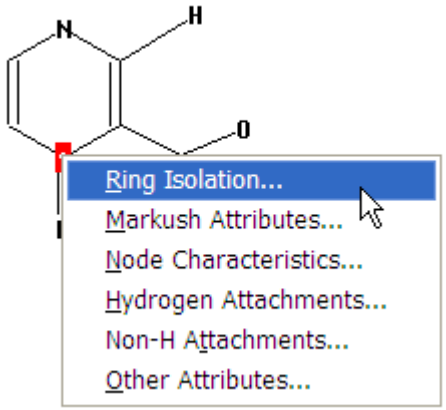
Рабочий лист	
Требование к структурному поиску	**Действие**
R и R' = любой, в то числе H	Ничего не делаем – это умолчание
Нет замещения по C цикла, помеченному (*)	Блокируем замещение водородами
Цикл может быть замещен далее по открытым участкам	Ничего не делаем
Не должно быть конденсации циклов	Изолируем цикл

STN

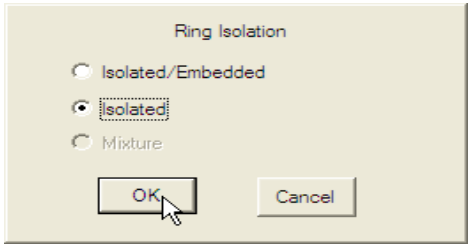
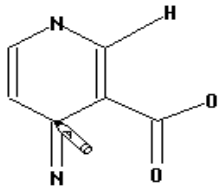
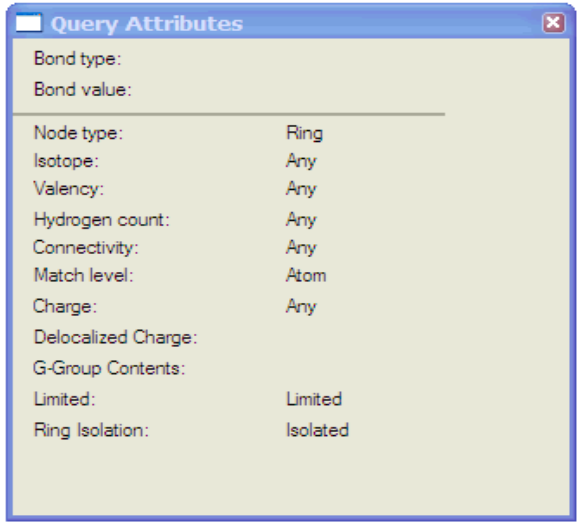
Построение структуры

Назначение атрибутов — изоляция цикла

Для предотвращения нахождения циклических систем, входящих в большую систему, необходима ***изоляция цикла***:

Шаг	Действие
1	**Поместить курсор на атом циклической системы, которая должна быть изолирована.**
2	**При клике правой клавишей мыши появится меню, в котором можно выбрать для изменения опцию *Ring Isolation*:** 

Построение структуры

Шаг	Действие
3	Появится диалоговое окно Ring Isolation. Выбор *Isolated*. *OK*. 
4	(дополнительно) Для проверки, что изменения в структуре имели место – кнопка
5	Появится меню Query Attributes. Разместить курсор на любом атоме изолированной системы – будет показано текущее значение.  

STN

Совет

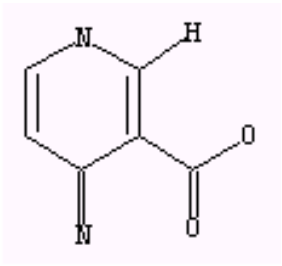
Можно изменить установки так, чтобы изолированные циклы при просмотре в окне рисования структур выводились в другом цвете

Для этого в меню **Preferences** нужно выбрать **Colors/Fonts**, затем для изменения цвета – ***Isolated rings***

STN

Проведение SSS-поиска

```
=> FILE REGISTRY
=>
Uploading C:\Program Files\Stnexp\Queries\pg 50.str
L1      STRUCTURE UPLOADED

=> D L1
L1 HAS NO ANSWERS
L1              STR
```

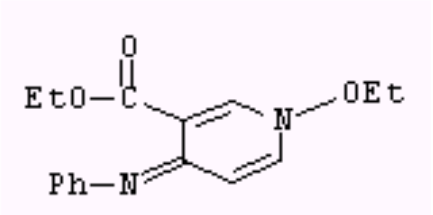



```
=> S L1 SSS SAM
SAMPLE SEARCH INITIATED
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -    988 TO ITERATE

100.0% PROCESSED     988 ITERATIONS                    1 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE   **COMPLETE**
                        BATCH    **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:         17875 TO    21645
PROJECTED ANSWERS:               1 TO       80

L2            1 SEA SSS SAM L1
```

STN

Проведение SSS-поиска

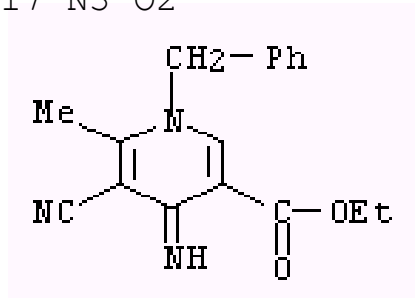
```
=> D SCAN

L2    1 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    3-Pyridinecarboxylic acid, 1-ethoxy-1,4-dihydro-4-(phenylimino)-,
      ethyl ester (9CI)
MF    C16 H18 N2 O3
CI    COM
```




```
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED
```

Проведение SSS-поиска

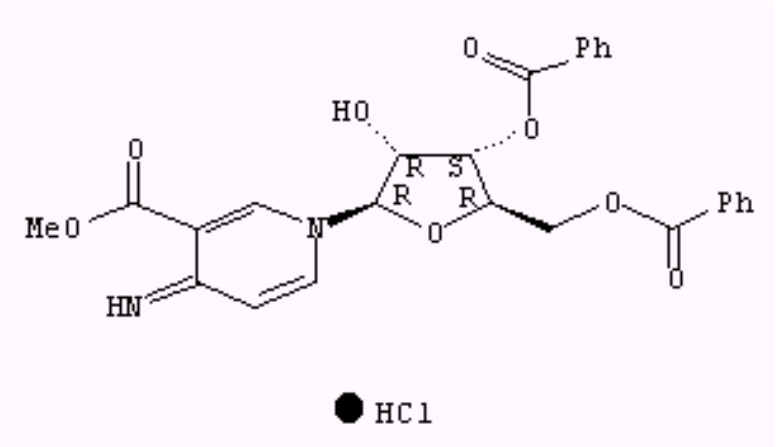
```
=> S L1 SSS FULL
FULL SEARCH INITIATED 17:04:43
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -   20377 TO ITERATE

100.0% PROCESSED    20377 ITERATIONS                          21 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01
L3            21 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN

L3   21 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN   3-Pyridinecarboxylic acid, 5-cyano-1,4-dihydro-4-imino-6-methyl-
     1-(phenylmethyl)-, ethyl ester (9CI)
MF   C17 H17 N3 O2
```




```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
```

Проведение SSS-поиска

```
L3    21 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    3-Pyridinecarboxylic acid, 1-(3,5-di-O-benzoyl-β-D-
      ribofuranosyl)-1,4-dihydro-4-imino-, methyl ester,
      monohydrochloride (9CI)
MF    C26 H24 N2 O8 . Cl H

Absolute stereochemistry.
```

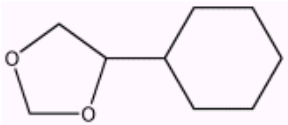
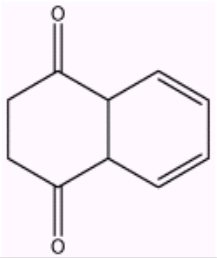
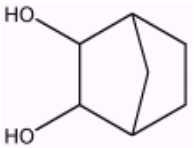
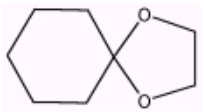


HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0

Практика

Для структуры сделана установка **Isolated** в **Ring Isolation**

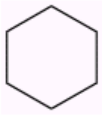
Будут ли найдены следующие вещества при SSS-поиске?

	Retrieved	Not Retrieved
		
		
		
		

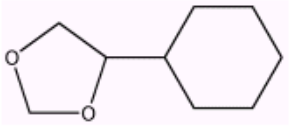
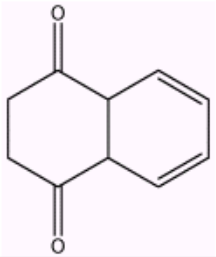
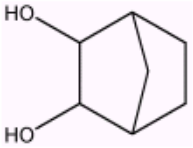
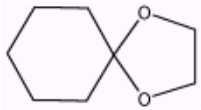
STN

Ответы

Для структуры сделана установка **Isolated** в **Ring Isolation**



Будут ли найдены следующие вещества при SSS-поиске?

	Retrieved	Not Retrieved
	✓	
		X
		X
		X

STN

Задание атомов

По умолчанию, принятому для атомов, при SSS-поиске полученные ответы будут зависеть от того, как положения атомов заданы в поисковом запросе

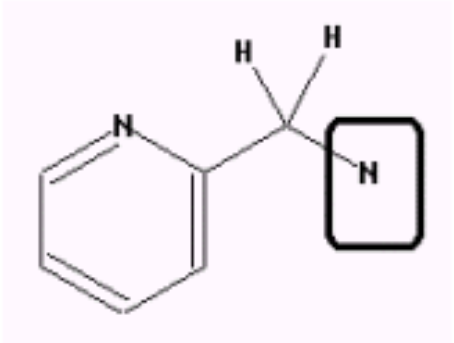
Если в запросе атом является частью	Будут найдены структуры, в которых
Цепочки	Атом всегда часть цепочки
Цикла	Атом всегда часть цикла

STN

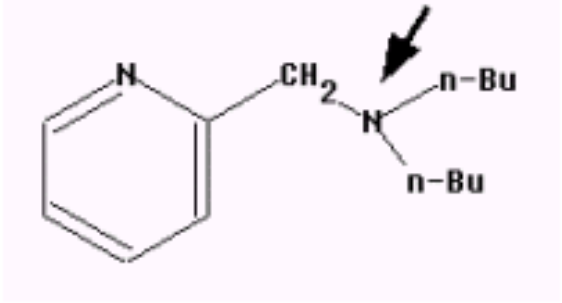
Задание атомов

Пример:

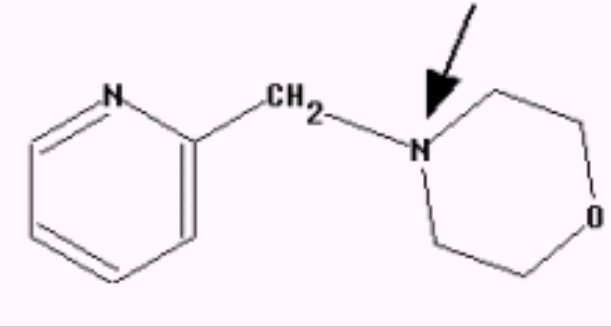
By default, the chain N in this substructure



Retrieves answers where N is in a chain:



But not answers where N is in a ring:

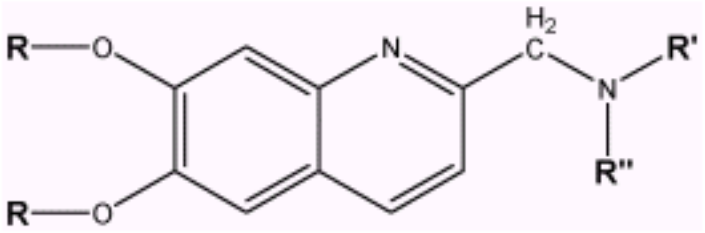


Есть возможность задать, что атом должен быть частью цикла/цепочки.

STN

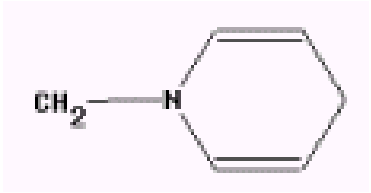
Поисковый запрос:

Найти вещества со следующими характеристиками:



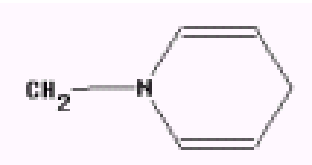
Требования:

- *Заместители R, R', и R'' – любые, включая атомы H*
- *В циклической системе возможно замещение во все свободные положения*
- *Могут быть дополнительные циклы, конденсированные с системой*
- *Заместители R' и R'' могут образовать цикл с атомом N, например,*



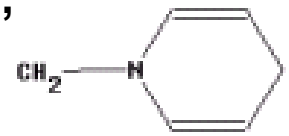
STN

Построение структуры для поиска

Рабочий лист	
Требования запроса	**Действие**
R, R', и R" = любой, включая H	
Цикл может быть замещен во все открытые положения	
Дополнительные циклы могут быть конденсированы с циклической системой	
R' и R" могут образовать цикл с азотом, например, 	

STN

Построение структуры для поиска

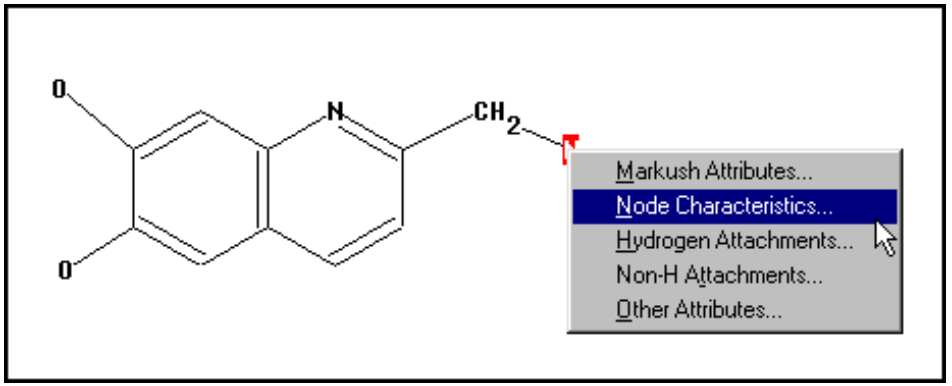
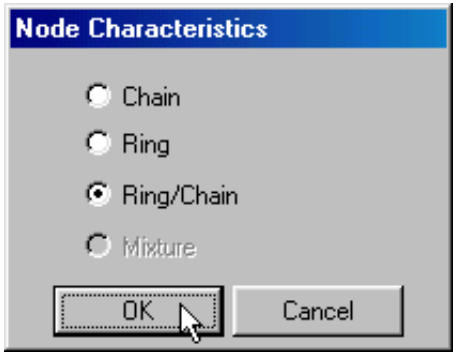
Рабочий лист	
Требования запроса	**Действия**
R, R', и R" = любой, включая H	Ничего не делаем – это умолчание
Цикл может быть замещен во все открытые положения	Ничего не делаем – это умолчание
Дополнительные циклы могут быть конденсированы с циклической системой	Ничего не делаем – это умолчание
R' и R" могут образовать цикл с азотом, например, 	Изменяем характеристики атома (NODE CHARACTERISTICS) – на Ring или Chain

STN

Назначение атомам атрибута Ring / Chain

Для того, чтобы при SSS-поиске задать атомы, входящие в цепь или цикл, необходимо следующее:

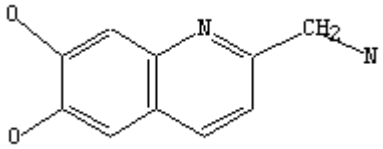
Назначение атомам атрибута Ring / Chain

Шаг	Действие
1	**Поместить курсор на интересующий атом.**
2	**Правый клик – меню, из которого выбираем *Node Characteristics*:** 
3	**Из диалогового окна Node Characteristics выбор опции *Ring/Chain*, затем *OK*.** 
4	**(*Option*) Проверка изменений в структуре – *кнопка*:**

STN

SSS-поиск

```
=> FILE REGISTRY
=>
Uploading C:\Program Files\Stnexp\Queries\pg 57.str
L1      STRUCTURE UPLOADED

=> D L1
L1 HAS NO ANSWERS
L1              STR
```



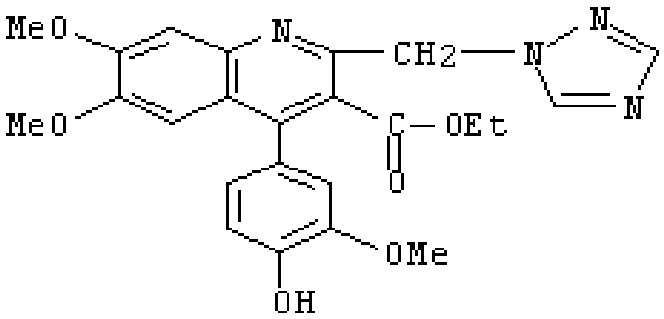

```
=> S L1 SAM SSS
SAMPLE SEARCH INITIATED 15:31:10
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -     22 TO ITERATE

100.0% PROCESSED      22 ITERATIONS                    4 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
                        BATCH   **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:          159 TO      721
PROJECTED ANSWERS:               4 TO      200

L2            4 SEA SSS SAM L1
```

STN

SSS-поиск

=> **D SCAN**

L2 4 ANSWERS REGISTRY COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN 3-Quinolinecarboxylic acid, 4-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-6,7-dimethoxy-2-(1H-1,2,4-triazol-1-ylmethyl)-, ethyl ester (9CI)
MF C24 H24 N4 O6

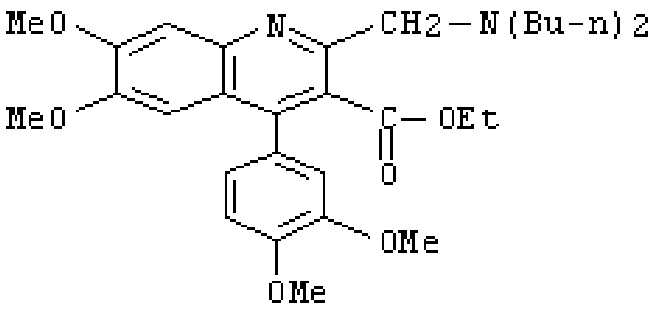


Помеченный атом N находится в триазольном цикле

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):**1**

SSS-поиск

```
L2    4 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    3-Quinolinecarboxylic acid, 2-[(dibutylamino)methyl]-4-(3,4-
      dimethoxyphenyl)-6,7-dimethoxy-, ethyl ester (9CI)
MF    C31 H42 N2 O6
```



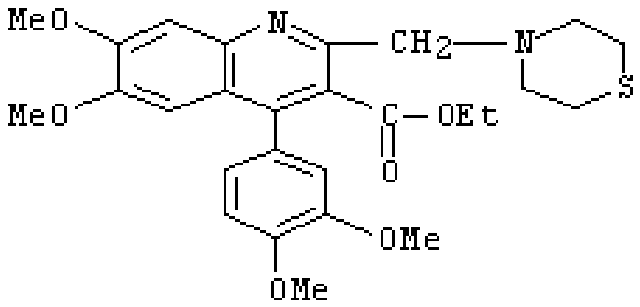
Помеченный атом N находится в ациклическом фрагменте

```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0

=> S L1 SSS FULL
FULL SEARCH INITIATED 15:31:16
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -    508 TO ITERATE

100.0% PROCESSED     508 ITERATIONS                    126 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

L3          126 SEA SSS FUL L1
```

STN

SSS-поиск

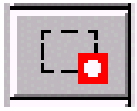
```
=> D SCAN

L3    126 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    3-Quinolinecarboxylic acid, 4-(3,4-dimethoxyphenyl)-6,7-
      dimethoxy-2-(4-thiomorpholinylmethyl)-, ethyl ester (9CI)
MF    C27 H32 N2 O6 S
```




```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0
```

Совет

Для одновременного изменения характеристик нескольких атомов следует:

1 Выбрать пиктограмму 

2 Держать нажатой клавишу SHIFT при определении атомов, чьи характеристики должны быть изменены

3 В меню QueryDef выбрать опцию Node Characteristics

4 В Node Characteristics выбрать опцию Ring/Chain и нажать кнопку OK

STN

Задание химических связей

В структурном запросе каждая связь имеет три характеристики:

- тип
- структура
- значение

STN

Тип химической связи

Определяет, является ли связь частью цикла, цепи или одновременно и цикла и цепи

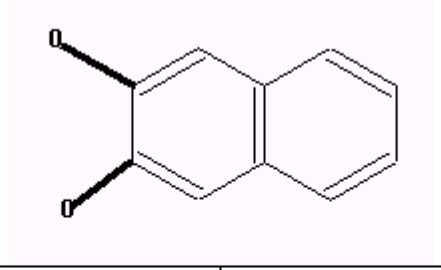
Если связь является частью	В найденных ответах
Цепи	**Связь всегда – в цепочке**
Цикла	**Связь всегда – в цикле**

STN

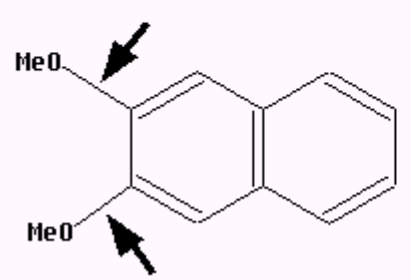
Тип химической связи

Примеры:

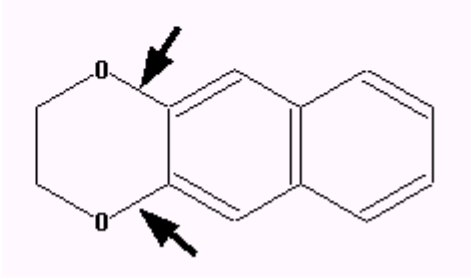
By default, the chain bonds in this substructure



Retrieve answers with bonds in a chain:



But not answers with bonds in a ring:



Опция для определения типа связи Ring / Chain

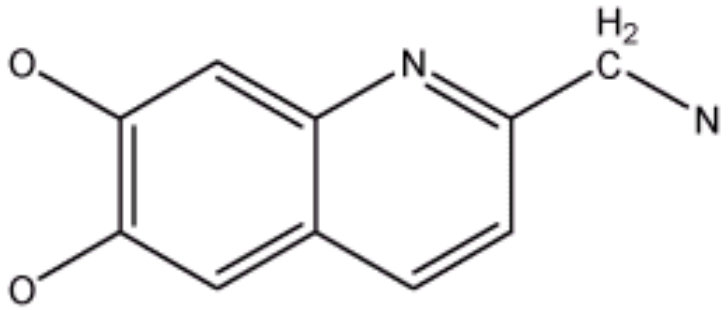
Прим

Изменение атомов цепи на Ring/Chain, как в предыдущем примере, автоматически не меняет связи на Ring/Chain.

STN

Запрос:

Расширим предыдущий запрос для нахождения структур, в которых атомы O и цепочки CH_2–N являются частью циклов, конденсированных с хинолиновым циклом



Требования:

- *Замещение разрешено во все свободные положения*
- *Могут быть дополнительные циклы, конденсированные с хинолиновой системой*

STN

Построение структуры для поиска

Рабочий лист	
Требования к структуре	**Действия**
Любой тип замещения во все открытые участки	
Дополнительные циклы могут конденсироваться к циклической системе, в том числе циклы, образованные атомами O и цепочкой CH_2–N	

STN

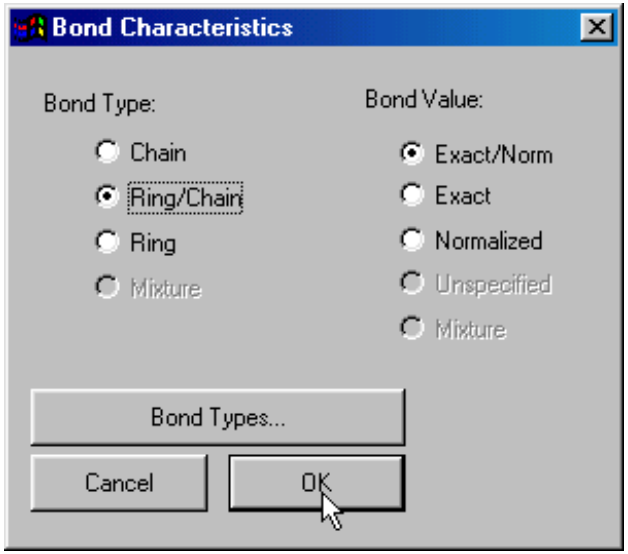
Построение структуры для поиска

Рабочий лист	
Требования к структуре	**Действия**
Любой тип замещения во все открытые участки	**Ничего не делаем, это умолчание**
Дополнительные циклы могут конденсироваться к циклической системе, в том числе циклы, образованные атомами O и цепочкой CH_2–N	**Меняем BOND CHARACTERISTICS на Ring/Chain**

STN

Назначение атрибута
Тип связи

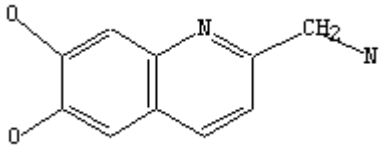
Для того, чтобы в результате поиска были найдены вещества, в которых интересующая связь входит и в цепь, и в цикл, следует:

	Действия
1	**Поместить курсор на нужную связь.**
2	**Правый клик: появится диалог Bond Characteristics. Выбрать *Ring/Chain*. Затем *OK*.** 
3	**(*Дополнительно*) Проверить, что изменения вступили в силу:** ***кнопка просмотра атрибутов*:**

STN

SSS-поиск

```
=> FILE REGISTRY
=>
Uploading C:\Program Files\Stnexp\Queries\pg 63.str
L1      STRUCTURE UPLOADED

=> D L1
L1 HAS NO ANSWERS
L1                STR
```

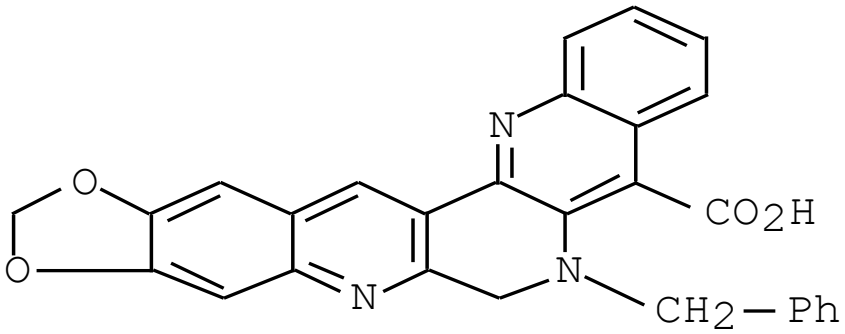



```
=> S L1 SAM SSS
SAMPLE SEARCH INITIATED 15:22:49
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -     4890 TO ITERATE
 40.9% PROCESSED     2000 ITERATIONS                    2 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
                        BATCH   **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:         93607 TO   101993
PROJECTED ANSWERS:                2 TO      229

L2            2 SEA SSS SAM L1
```

STN

SSS-поиск

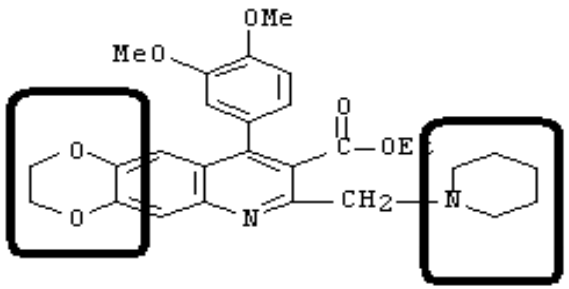
```
=> D SCAN

L2    2 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    Benzo[b][1,3]dioxolo[6,7]quino[2,3-h][1,5]naphthyridine-5-carboxylic acid,
      6,7-dihydro-6-(phenylmethyl)- (9CI)
MF    C28 H19 N3 O4
```




```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0
```

SSS-поиск

```
=> S L1 SSS FULL
FULL SEARCH INITIATED 15:22:54
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -    96970 TO ITERATE

100.0% PROCESSED    96970 ITERATIONS                150 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

L3          150 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN
L3   150 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN   1,4-Dioxino[2,3-g]quinoline-8-carboxylic acid, 9-(3,4-
     dimethoxyphenyl)-2,3-dihydro-7-(1-piperidinylmethyl)-, ethyl
     ester (9CI)
MF   C28 H32 N2 O6
```



Атомы O входят в цикл

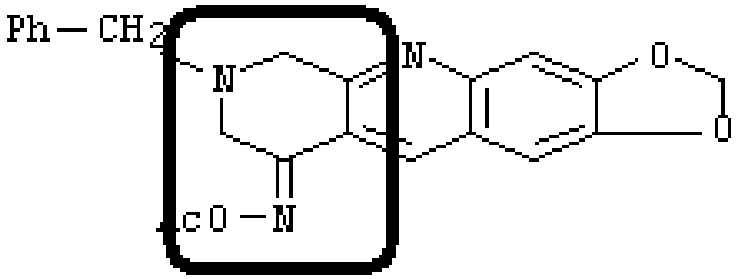
Атом N находится в цикле, не аннелированном с хинолиновой системой

```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
```

STN

SSS-поиск

```
L3    150 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    1,3-Benzodioxolo[5,6-b][1,7]naphthyridin-9(6H)-one, 7,8-dihydro-
      7-(phenylmethyl)-, O-acetyloxime (9CI)
MF    C22 H19 N3 O4
```



Атом N находится в цикле, аннелированном с хинолиновой системой

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):**0**

Типы химической связи в структурном поиске

В структуре могут быть заданы четыре типа связи

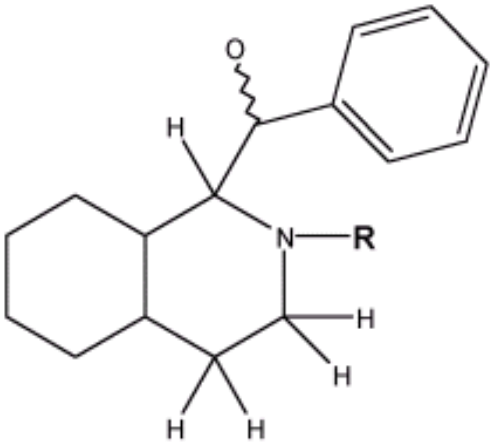
- одинарная
- двойная
- тройная
- неопределенная

Если в структуре связь	В найденных ответах связь будет
Одинарная	Одинарная — в ароматических/таутомерных структурах они могут быть двойными
Двойная	Двойная — ароматических/таутомерных структурах они могут быть одинарными
Тройная	Тройная
Неопреленная	Одинарная, двойная или тройная

STN

Поисковый запрос:

Найти вещества со следующими характеристиками:



Требования:

- *R – органический ациклический заместитель*
- *Связь* C~~O *может быть одинарной или двойной*
- *Нежелательна дополнительная конденсация с какой-либо циклической системой*
- *Возможно любое замещение во все свободные положения*

STN

Построение структуры для поиска

Рабочий лист	
Требование	**Действия**
R – атом C в цепочке	
Связь – одинарная или двойная	
Нет дополнительной конденсации цикла	
Может присутствовать дополнительное замещение во все открытые участки	

STN

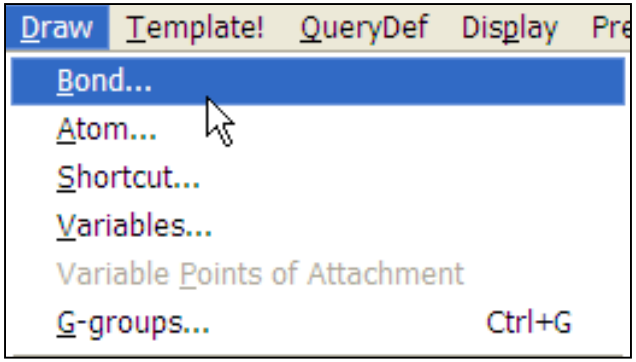
Построение структуры для поиска

Рабочий лист	
Требование	**Action**
R – атом C в цепочке	**Рисуем атом C**
Связь **– одинарная или двойная**	**Задаем связь «unspecified»**
Нет дополнительной конденсации циклов	**Изолируем циклы**
Может присутствовать дополнительное замещение во все открытые участки	**Ничего не делаем, это – умолчание**

STN

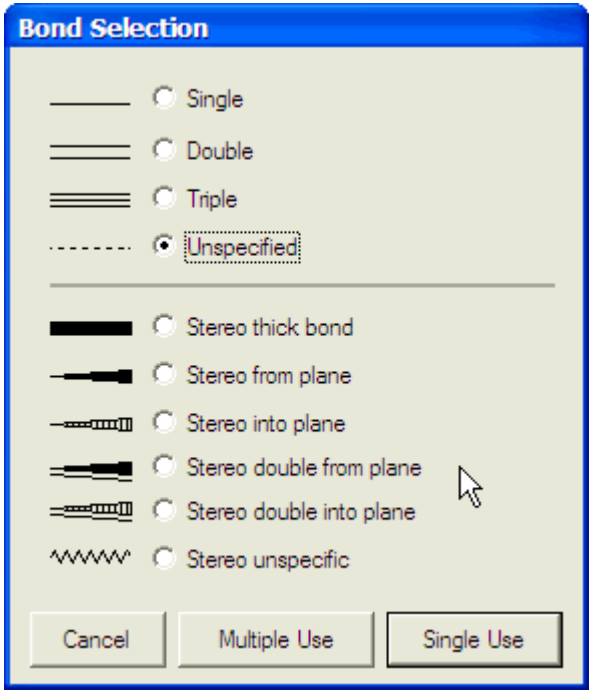
Структура химической связи при поиске

Чтобы при SSS-поиске находились вещества с одинарными или двойными связями, нужно выполнить следующие действия:

	Действия
1	**Рисуем структуру с одинарной связью.**
2	**Из меню Draw выбираем *Bond*.** 

Структура химической связи при поиске

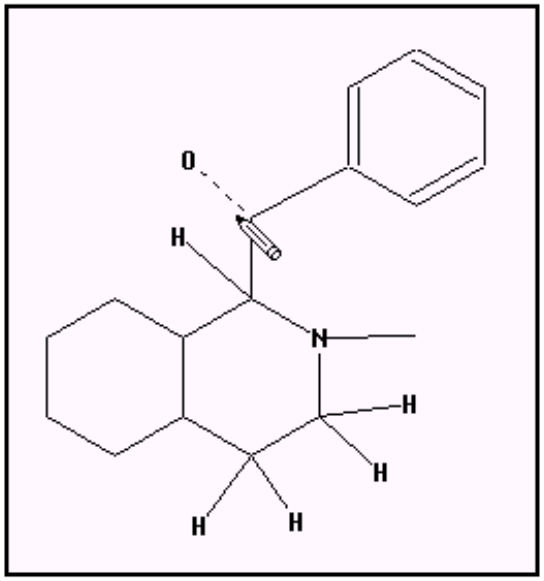
Чтобы при SSS-поиске находились вещества с одинарными или двойными связями, нужно выполнить следующие действия:

	Действия
3	**Появится диалог Bond Selection. Выбираем *Unspecified*, *Single Use*.** 

STN

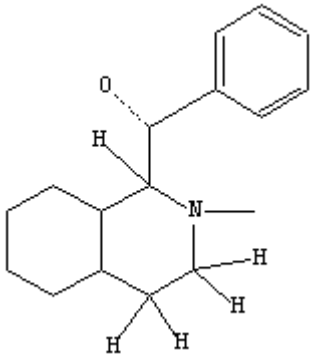
Структура химической связи при поиске

Чтобы при SSS-поиске находились вещества с одинарными или двойными связями, нужно выполнить следующие действия:

	Действия
4	**Поместить курсор на связь. Click.** 

SSS-поиск

```
=> FILE REGISTRY
=>
Uploading C:\Program Files\Stnexp\Queries\pg 68.str
L1      STRUCTURE UPLOADED

=> D L1
L1 HAS NO ANSWERS
L1                STR
```

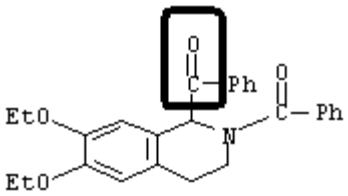


Обе циклические системы – изолированные

```
=> S L1 SAM SSS
SAMPLE SEARCH INITIATED 15:36:59
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -     1078 TO ITERATE

100.0% PROCESSED     1078 ITERATIONS                  10 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
                        BATCH   **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:        19591 TO    23529
PROJECTED ANSWERS:              11 TO      389
L2           10 SEA SSS SAM L1
```

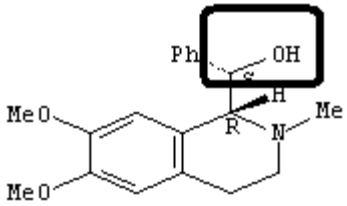
SSS-поиск

```
=> D SCAN
L2    10 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    Isoquinoline, 1,2-dibenzoyl-6,7-diethoxy-1,2,3,4-tetrahydro-(7CI)
MF    C27 H27 N O4
```



Атом O участвует в двойной связи. Обратите внимание на двойные связи в конденсированном цикле!

```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1

L2 10 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    1-Isoquinolinemethanol, 1,2,3,4-tetrahydro-6,7-dimethoxy-2-
      methyl-α-phenyl-, [S-(R*,S*)]- (9CI)
MF    C19 H23 N O3
Absolute stereochemistry.
```



Атом O участвует в одинарной связи

```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0
```

STN

SSS-поиск

```
=> S L1 SSS FULL

FULL SEARCH INITIATED 15:37:48
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -    22835 TO ITERATE

100.0% PROCESSED    22835 ITERATIONS                    170 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

L3          170 SEA SSS FUL L1
```

STN

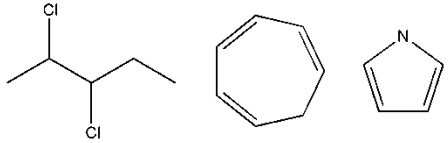
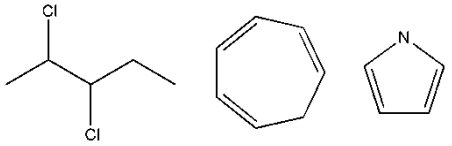
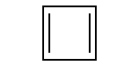
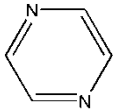
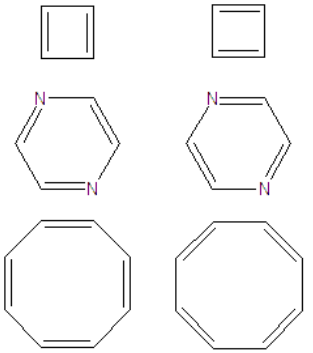
Значение химической связи в структурном поиске

Значение химической связи в структурном поиске основано на характеристиках структурного фрагмента

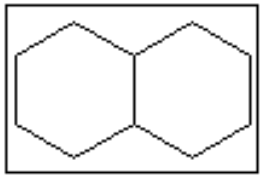
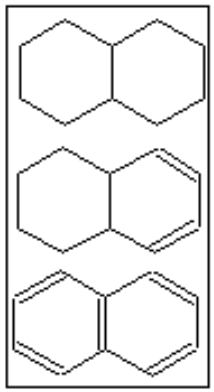
Программа для рисования структур часто назначает точные или нормализованные связи – *для увеличения количества найденных ответов*

STN

Значение химической связи в структурном поиске

Если запрос содержит …	Тогда значение связи…	Ответы будут содержать …
Атомы, не являющиеся частью таутомерной или ароматической системы (например, все одинарные связи, или нечетное число атомов в цикле). 	**Точная**	**Нарисованный фрагмент:** 
Атомы участвуют в расширенном pi-связывании, например, четное число атомов в цикле, с чередующимися одинарными и двойными связями.  	**Нормализованная**	**Нарисованный фрагмент плюс эквивалентное представление:** 

Значение химической связи в структурном поиске

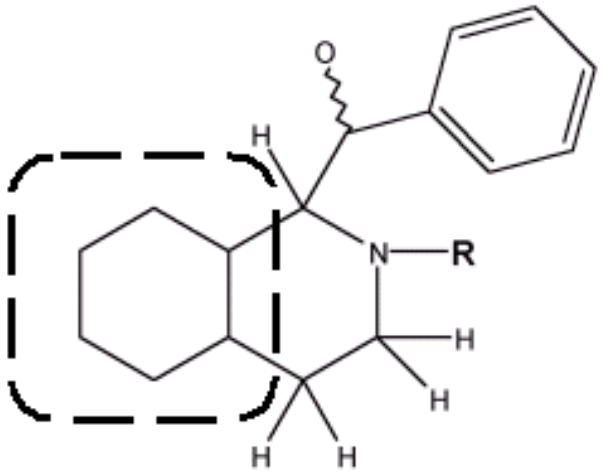
Если запрос содержит …	Тогда значение связи…	Ответы будут содержать …
Четное число атомов в цикле, другие делокализованные или таутомерные системы. 	**Exact/Normalized**	**Все возможные образцы связывания:** 

STN

Значение химической связи в структурном поиске

Расширим поисковый запрос:

Предыдущий набор ответов содержал ответы с ароматическими циклами. Удалим их из набора.



Построение структуры для поиска

Рабочий лист	
Поисковое требование	**Действия**
Конденсированные C6-циклы – ненасыщенные (все одинарные связи)	
Применимы все другие поисковые критерии	

STN

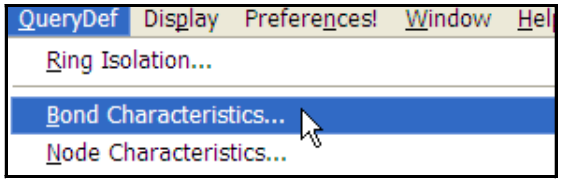
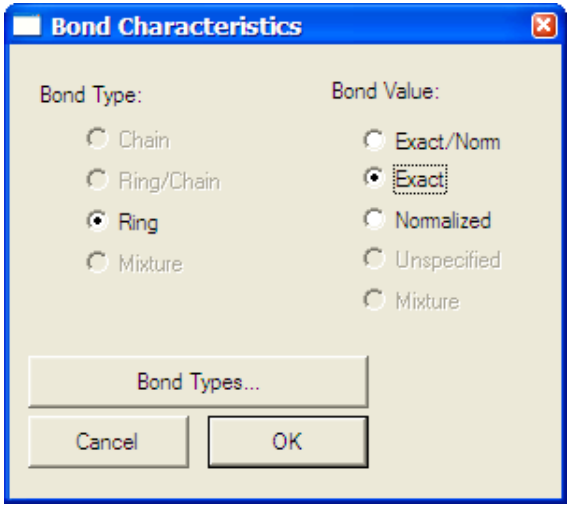
Построение структуры для поиска

Рабочий лист	
Поисковое требование	**Действия**
Конденсированные C6-циклы – ненасыщенные (все одинарные связи).	**Изменить значение связи**
Применимы все другие поисковые критерии.	

STN

Задание значения химической связи

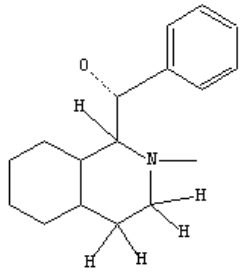
Для изменения значений связей необходимы следующие действия:

	Действия
1	**Выбираем кнопку**
2	**При нажатой кнопке Shift выбираем связи, значения которых следует изменить.**
3	**Из меню QueryDef выбираем *Bond Characteristics*.** 
4	**В диалоге Bond Characteristics выбираем *Exact*, затем *OK*.** 

STN

SSS-поиск

```
=> FILE REGISTRY
=>
Uploading C:\Program Files\Stnexp\Queries\pg 74.str
L1      STRUCTURE UPLOADED

=> D L1
L1 HAS NO ANSWERS
L1                  STR
```

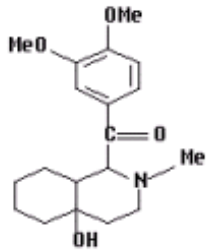



```
=> S L1 SSS SAM
SAMPLE SEARCH INITIATED 15:45:18
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -       23 TO ITERATE
100.0% PROCESSED       23 ITERATIONS                    1 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
                        BATCH   **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:          173 TO      747
PROJECTED ANSWERS:               1 TO       80
L2            1 SEA SSS SAM L1
```

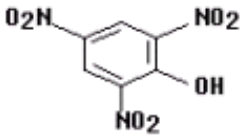
STN

SSS-поиск

```
=> D SCAN
L2    1 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    Ketone, decahydro-4a-hydroxy-2-methyl-1-isoquinolyl 3,4-
      dimethoxyphenyl, picrate (6CI)
MF    C19 H27 N O4 . C6 H3 N3 O7

      CM   1
```




```
      CM   2
```




```
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED

=> S L1 SSS FULL
FULL SEARCH INITIATED 15:45:28
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -      633 TO ITERATE
100.0% PROCESSED      633 ITERATIONS                16 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01
L3           16 SEA SSS FUL L1
```

Добавление точных значений связи в запрос уменьшило количество ответов с 170 до 16. Этот эффект следует всегда учитывать

STN

Резюме

Замещение атомов

SSS-поиск позволяет разнообразить замещение в свободные положения структуры. Замещение атомов при этом можно контролировать

Если нужен следующий тип замещения	Build this into the substructure query:
Предопределенные «классы» атомов (например, галогены) или циклические системы (например, гетероциклы)	Предопределенные переменные группы STN
Широкие классы структурных атрибутов (например, линейные или разветвленные алкильные цепочки, моно- или полициклы, т.д.)	Предопределенные переменные группы STN с общими определениями
Конкретные типы или количества гетероатомов в гетероцикле	Предопределенные переменные группы STN с заданным количеством элементов
Список заместителей. Определенных пользователем	G-группы
Переменные положения заместителя в цикле	Переменное положение присоединения (Variable point of attachment – VPA)

Задание групп при структурном поиске

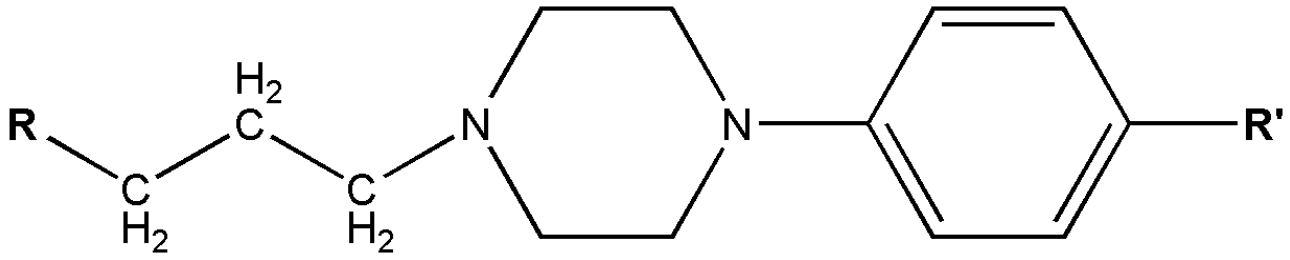
Имеется ряд системных возможностей, разрешающих задавать при поиске различные группы:

Символы в структуре	Будут найдены
X	Любой галоген
A	Любой атом, за исключением H
Q	Любой атом, за исключением C или H
M	Любой металл
Cb	Любой карбоцикл
Cy	Любой цикл
Hy	Любой гетероцикл
Id	"Dummy node" – для поисков полимеров
Ak	Любая углеродная цепочка

STN

Поисковый запрос:

Найти соединения со следующими характеристиками:



Требования:

- *Заместитель R – любой гетероцикл с любым типом замещения*
- *Заместитель R' – любой циклический или ациклический заместитель кроме атома H*
- *Нежелательна дополнительная конденсация по циклическим фрагментам*
- *Возможно любое замещение во всех свободных положениях*

STN

Построение структуры для поиска

Рабочий лист	
Требование	**Действия**
R – любой гетероцикл	
R' – любой не водородный заместитель (цикл или цепочка)	
Нет дополнительной конденсации циклических систем	
Любое замещение в открытые участки	

STN

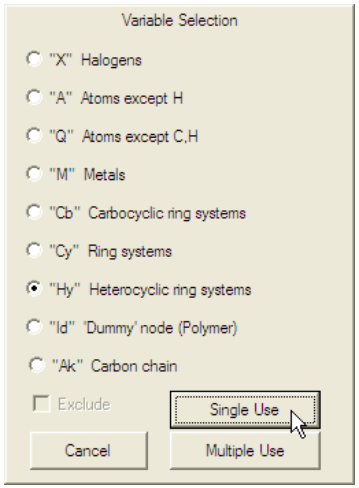
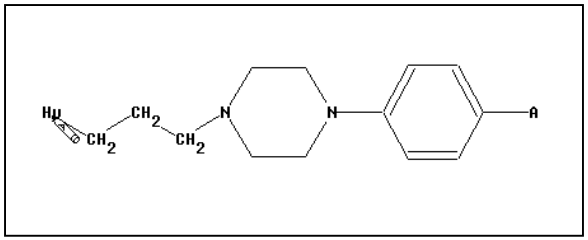
Построение структуры для поиска

Рабочий лист	
Требование	**Действия**
R – любой гетероцикл	Переменная HY
R' – любой не водородный заместитель (цикл или цепочка)	Переменная A, с атрибутом Ring/Chain
Нет дополнительной конденсации циклических систем	Изоляция циклов
Любое замещение в открытые участки	Это умолчание

STN

Добавление в структуру переменной группы

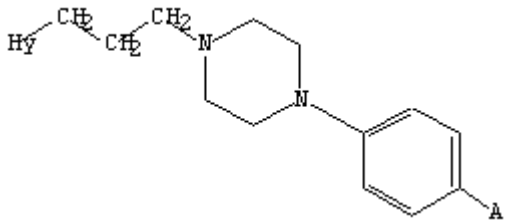
Для добавления в структуру переменной группы нужны следующие действия:

	Действия
1	**Кнопка:**
2	**Диалог Variable Selection. Выбрать кнопку *"Hy"*, затем *Single Use*.** 
3	**Поместить переменную в структуру.** 

STN

Проведение поиска по структуре

```
=> FILE REGISTRY
=>
Uploading C:\Program Files\Stnexp\Queries\pg 80.str
L1      STRUCTURE UPLOADED

=> D L1
L1 HAS NO ANSWERS
L1                  STR
```



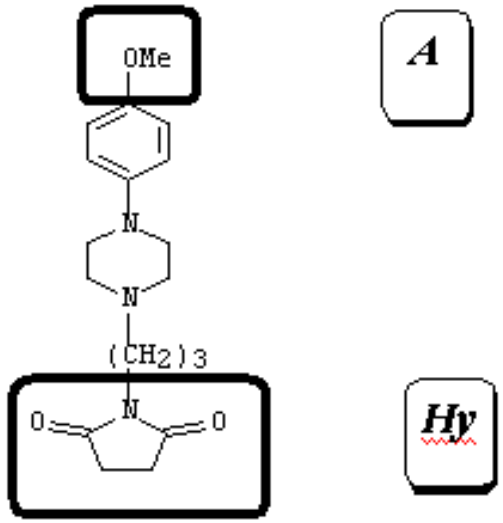
Циклы изолированы, характеристики узла A – Ring / Chain

```
=> S L1 SSS SAM
SAMPLE SEARCH INITIATED 14:55:50
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -     5424 TO ITERATE
 36.9% PROCESSED     2000 ITERATIONS                          24 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
                        BATCH   **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:       104064 TO   112896
PROJECTED ANSWERS:             817 TO     1785
L2          24 SEA SSS SAM L1
```

STN

Проведение поиска по структуре

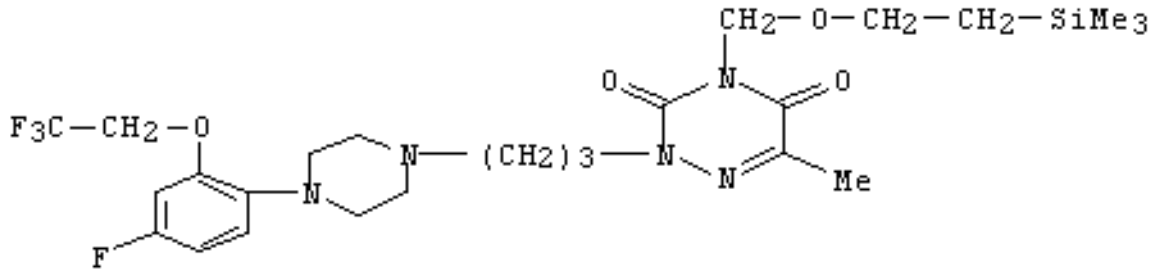
```
=> D SCAN

L2    24 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    2,5-Pyrrolidinedione, 1-[3-[4-(4-methoxyphenyl)-1-
      piperazinyl]propyl]-(9CI)
MF    C18 H25 N3 O3
CI    COM
```




```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
```

Проведение поиска по структуре

```
L2    24 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    1,2,4-Triazine-3,5(2H,4H)-dione, 2-[3-[4-[4-fluoro-2-(2,2,2-
      trifluoroethoxy)phenyl]-1-piperazinyl]propyl]-6-methyl-4-[[2-
      (trimethylsilyl)ethoxy]methyl]- (9CI)
MF    C25 H37 F4 N5 O4 Si
```




```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0

=> S L1 SSS FULL
FULL SEARCH INITIATED 14:55:55
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -   107604 TO ITERATE

100.0% PROCESSED   107604 ITERATIONS                    1346 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.01

L3          1346 SEA SSS FUL L1
```

STN

Назначение атрибутов переменным группам

Переменным группам циклических систем Cy, Cb и Hy по умолчанию приписываются самые широкие определения

Их можно уточнять с помощью:

- общих определений
- счетчиков элементов

STN

Назначение атрибутов переменным группам

Общие определения

Используются, чтобы задать

- насыщение
- тип алкильной цепи – линейная или разветвленная
- количество гетероатомов – 1 или больше
- характер циклов – моноциклы или полициклы
- число атомов углерода – до 7 или более

STN

Назначение атрибутов переменным группам

Счетчики элементов

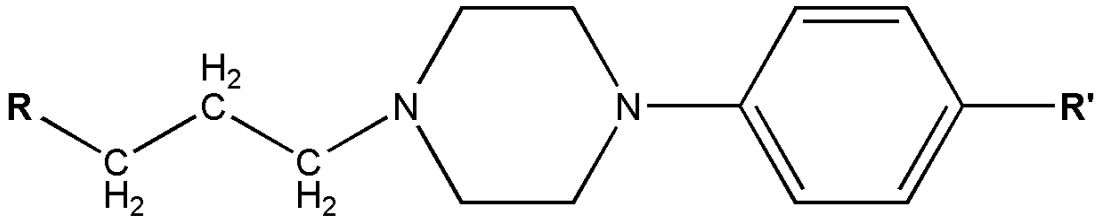
используются для указания

- конкретных элементов в переменной группе
- количества атомов каждого присутствующего элемента

STN

Поисковый запрос:

Уточнить предыдущий поиск и найти вещества со следующими характеристиками:



Требования:

- *Заместитель R – **моноцикл**, гетероцикл, **содержит 2-7 атомов C и 1-3 атома N** В цикле могут присутствовать другие элементы*
- *В гетероцикле разрешено любое замещение*
- *Заместитель R' – **линейная алкильная цепь***
- *Нежелательна дополнительная конденсация по любому циклу*
- *Возможно любое замещение во все свободные положения*

STN

Построение структуры для поиска

Рабочий лист	
Требование	**Действие**
R – моно(гетеро)цикл	
R имеет 2–7 C и 1–3 N, с любым типом замещения	
R' – линейная алкильная цепочка	
Дополнительная конденсации по любой циклической системе нежелательна	
Может быть любое замещение во все открытые участки	

STN

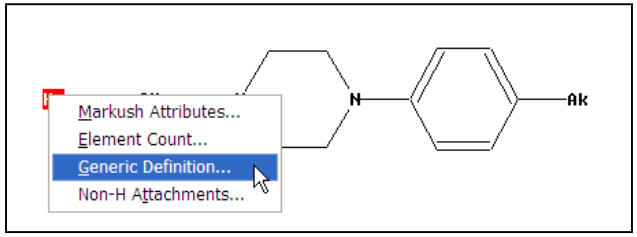
Построение структуры для поиска

Рабочий лист	
Требование	**Действие**
R – моно(гетеро)цикл	Hy – Generic Definition
R имеет 2–7 C и 1–3 N, с любым типом замещения	Hy – Element Counts
R' – линейная алкильная цепочка	Ak – Generic Definition
Дополнительная конденсации по любой циклической системе нежелательна	Изоляция циклов
Может быть любое замещение во все открытые участки	По умолчанию

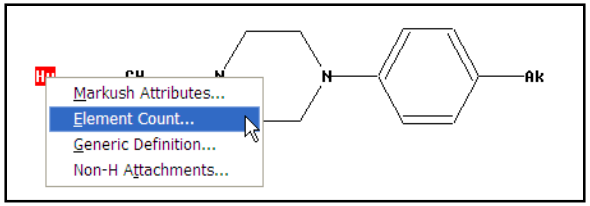
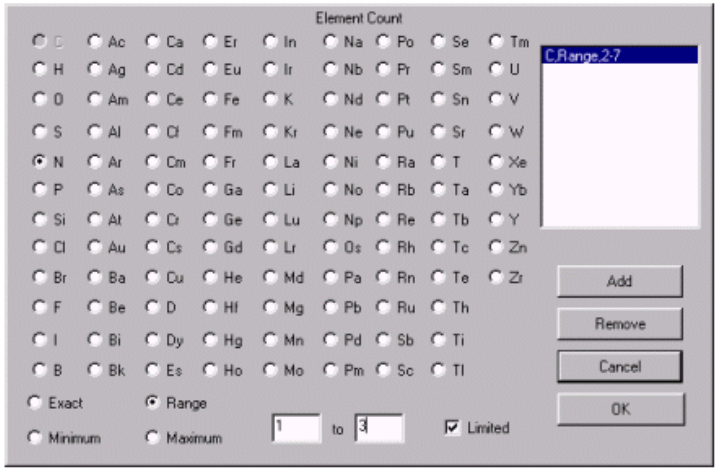
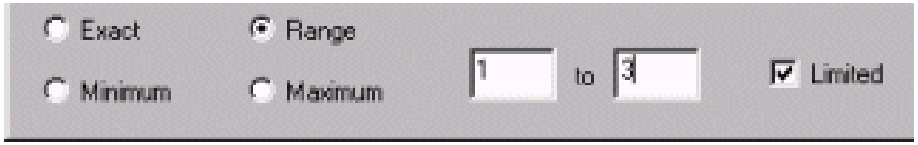
STN

Назначение общих определений переменной группе

	Действие
1	Помещение курсора на переменную.
2	Правая кнопка мыши. В меню – выбор *Generic Definition.*
3	Диалог *Generic Definition* – выбор нужной опции.
4	*OK*.
5	Повтор операций 1–4 для других определений.



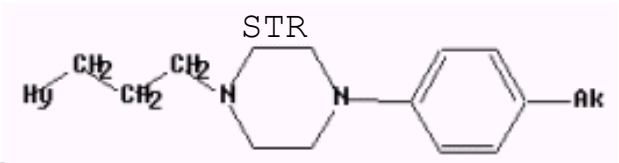
Назначение общих определений переменной группе

	Действие
1	**Позиционируем курсор на нужной переменной.**
2	**Правый клик – меню. Выбор – *Element count*.** 
3	**Диалог Element Count – выбор *Exact, Minimum, Maximum* или *Range* с соответствующим количеством. *Add*.** 
4	***OK*.** 

STN

Проведение SSS-поиска

```
=> FILE REGISTRY
=>
Uploading C:\Program Files\Stnexp\Queries\pg 85.str
L1       STRUCTURE UPLOADED

=> D L1
L1 HAS NO ANSWERS
L1                    STR
```



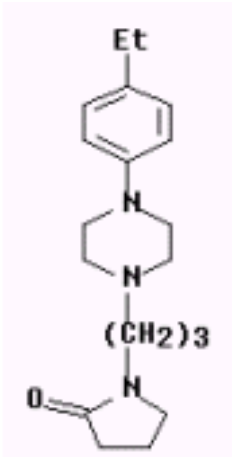

```
Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.
=> S L1 SSS SAM
SAMPLE SEARCH INITIATED 15:06:13
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -     5424 TO ITERATE
 36.9% PROCESSED     2000 ITERATIONS                    0 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
                        BATCH   **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:       104064 TO   112896
PROJECTED ANSWERS:               0 TO        0
L2            0 SEA SSS SAM L1
```

Иногда пробные (sample) поиски дают 0 ответов. Прогнозируемое число ответов тогда тоже 0, но следует провести полный (full) поиск

STN

Проведение SSS-поиска

```
=> S L1 SSS FULL
FULL SEARCH INITIATED 15:06:18
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -   107557 TO ITERATE
100.0% PROCESSED   107557 ITERATIONS                    68 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.02
L3           68 SEA SSS FUL L1

=> D SCAN
L3   68 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN   2-Pyrrolidinone, 1-[3-[4-(4-ethylphenyl)-1-piperazinyl]propyl]-
     (9CI)
MF   C19 H29 N3 O
```



Алкил – этил

Гетероцикл – моноцикл с 1 атомом N и 5 атомами C

```
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0
```

Совет

Целесообразно минимальное требование по количеству элементов

Если не сделаны конкретные запреты, то могут присутствовать дополнительные элементы

Для исключения атомов с использованием опции ***element counts*** следует указывать конкретный элемент и ***exact count – 0***

STN

Повторяющиеся группы

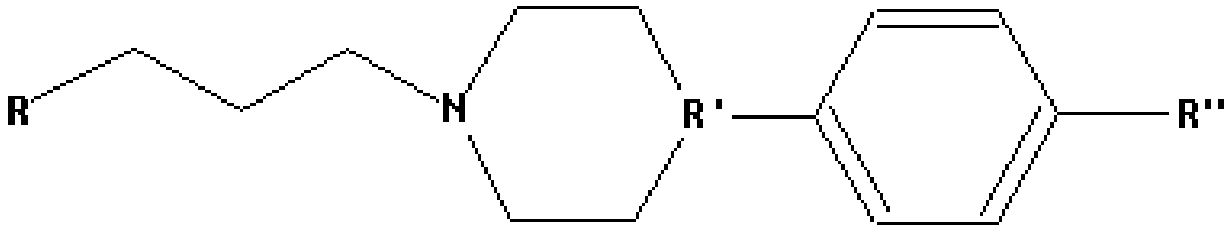
Эта функция позволяет задавать атомы или их группы, повторяющиеся в запросе

- Повторяющиеся атомы / группы должны иметь узлы с двух сторон от скобок, показывающих количество повторов
- Интервал повторов – от 0 (т.е. избранный узел (ы) могут отсутствовать в наборе ответов) до 20

STN

Поисковый запрос:

Найти вещества с характеристиками:



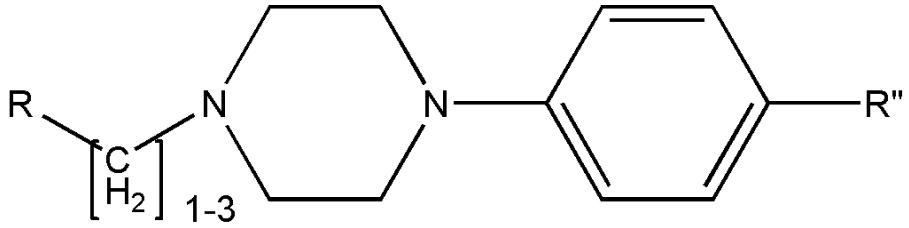
Требования:

- *Заместитель R – любой гетероцикл*
- *Атом R‘ – C, N или P*
- *Заместитель R” – амидная группа, связанная с циклом через атом C или атом N*
- *Запрещена дополнительная конденсация по любому из 6-членных циклов*
- *Возможно замещение во всех свободных положениях*

STN

Поисковый запрос:

Расширим предыдущий запрос – насыщенная алкильная цепь может содержать 1-3 атома С



Построение структуры для поиска

Рабочий лист	
Требование	**Действие**
R – моно(гетеро)цикл	
R имеет 2–7 C и 1–3 N, с любым типом замещения	
R' – линейная алкильная цепочка	
Дополнительная конденсации по любой циклической системе нежелательна	
Может быть любое замещение во все открытые участки	
Цепочка CH_2 может содержать 1-3 C	

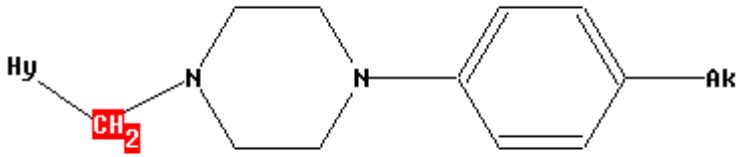
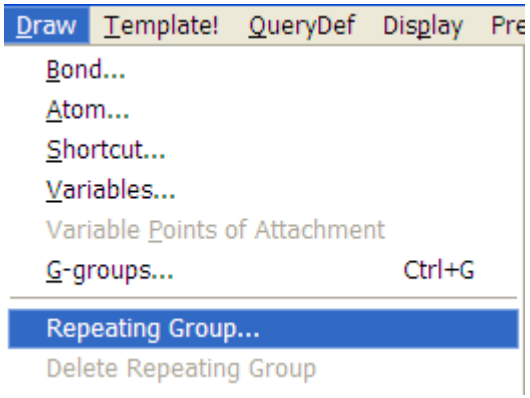
STN

Построение структуры для поиска

Рабочий лист	
Требование	**Действие**
R – моно(гетеро)цикл	Как в предыдущем примере
R имеет 2–7 C и 1–3 N, с любым типом замещения	Как в предыдущем примере
R' – линейная алкильная цепочка	Как в предыдущем примере
Дополнительная конденсации по любой циклической системе нежелательна	Как в предыдущем примере
Может быть любое замещение во все открытые участки	Как в предыдущем примере
Цепочка CH_2 может содержать 1-3 C	Создание повторяющейся группы

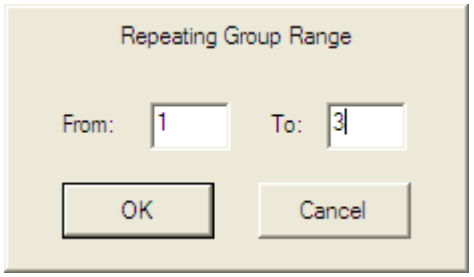
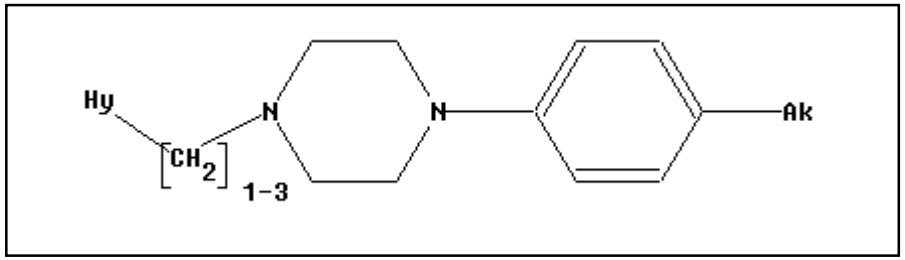
STN

Задание повторяющейся группы

	Действие
1	Инструмент Selection – выбор нужного узла 
2	В меню ***Draw*** выбирается ***Repeating Group*** 

STN

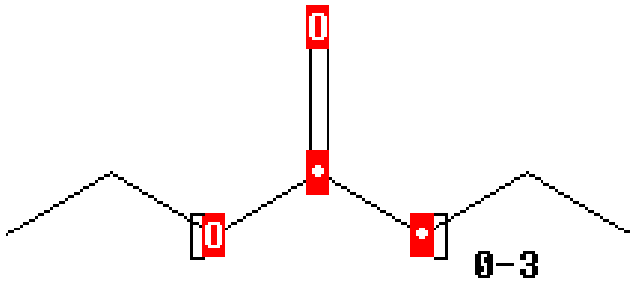
Задание повторяющейся группы

	Действие
3	***Опция Repeating Group Range – ввод нужного интервала значений*** 
4	***Повторяющаяся группа в структуре заключается в квадратные скобки*** 

STN

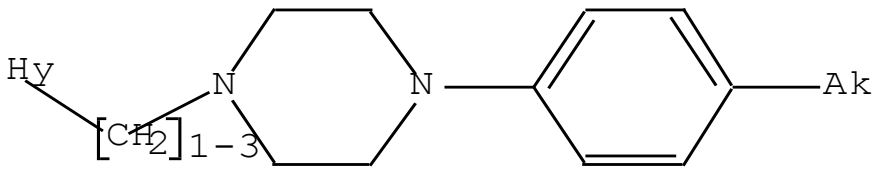
Совет

Если повторяющаяся группа приписывается фрагменту, состоящему из нескольких узлов, то следует отметить все узлы этого фрагмента:



Проведение SSS-поиска

```
=>   FILE REGISTRY
=>
Uploading C:\CASNC\STN Express\Queries\pg 90.str
L1      STRUCTURE UPLOADED


=> D L1
L1 HAS NO ANSWERS
L1                STR
```



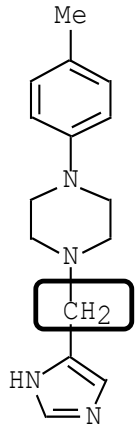

```
Structure attributes must be viewed using STN Express query preparation.
```

Проведение SSS-поиска

```
=> S L1 SSS SAM
SAMPLE SEARCH INITIATED 17:03:46
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -    16105 TO ITERATE
 12.4% PROCESSED     2000 ITERATIONS                          6 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
                        BATCH   **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:       314501 TO   329699
PROJECTED ANSWERS:             549 TO     1383
L2             6 SEA SSS SAM L1
```

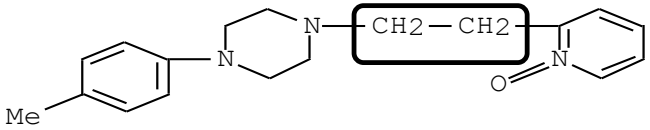
Проведение SSS-поиска

```
=> D SCAN

L2    6 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    Piperazine, 1-(1H-imidazol-4-ylmethyl)-4-(4-methylphenyl)- (9CI)
MF    C15 H20 N4
```



Количество ответов в наборе пробного (sample) поиска увеличилось от 0 до 6; в полном (full) поиске будут найдены ответы с переменной длиной цепочки

```
L2    6 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    Piperazine, 1-[2-(2-pyridyl)ethyl]-4-p-tolyl-, N-oxide (8CI)
MF    C18 H23 N3 O
CI    COM
```




```
HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0
```

Проведение SSS-поиска по всей БД

```
=> S L1 SSS FULL

FULL SEARCH INITIATED 17:04:02
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -   317358 TO ITERATE

100.0% PROCESSED   317358 ITERATIONS                401
ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.04


L3           401 SEA SSS FUL L1
```

G-группы

Пользователь может сам создавать группы заместителей – G-группы

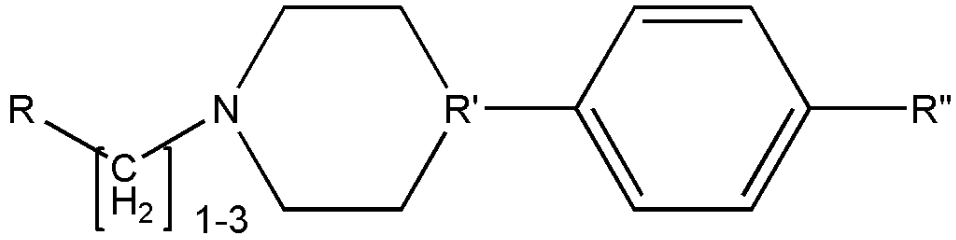
G-группа может иметь до 20 заместителей, представляющих:

- конкретные элементы
- функциональные группы (Shortcuts)
- системные переменные группы (Variables)
- структурные фрагменты
- другие G-группы

STN

Поисковый запрос:

Расширим предыдущий запрос: насыщенная алкильная цепочка может содержать 1-3 атома С



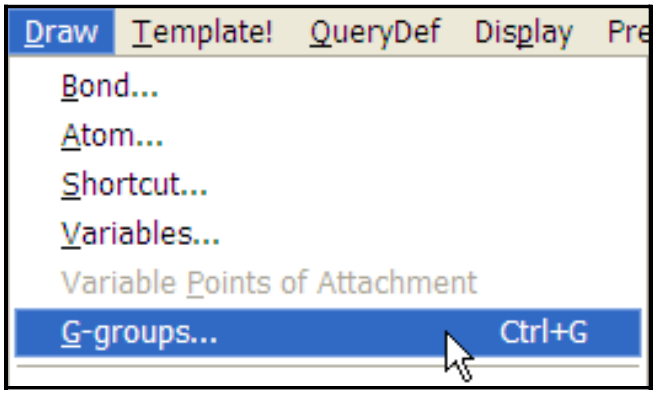
Требования:

- *Заместитель R – **моноцикл**, гетероцикл, **содержащий 2-7 атомов С и 1-3 атома N**. Атомы других элементов также могут присутствовать*
- *Атом R' – **C** или **N***
- *Заместитель R" – амидная группа, связанная с циклом через атом С или атом N*
- *Запрещена конденсация любому из циклов*
- *Возможно любое замещение во всех свободных положениях*

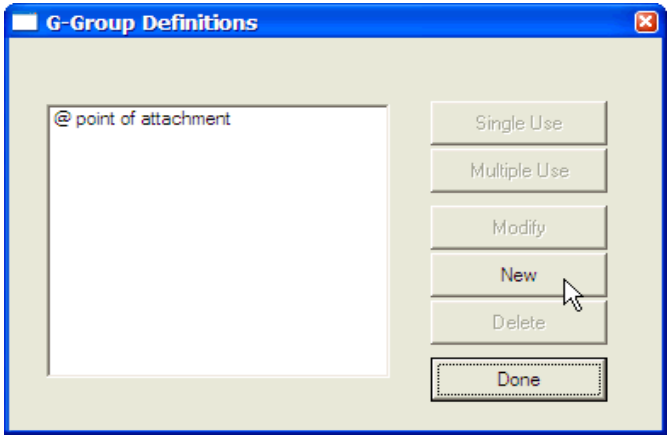
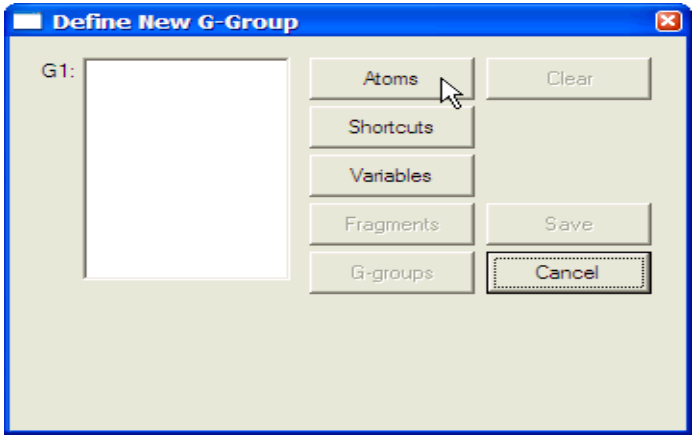
STN

Добавление G-группы

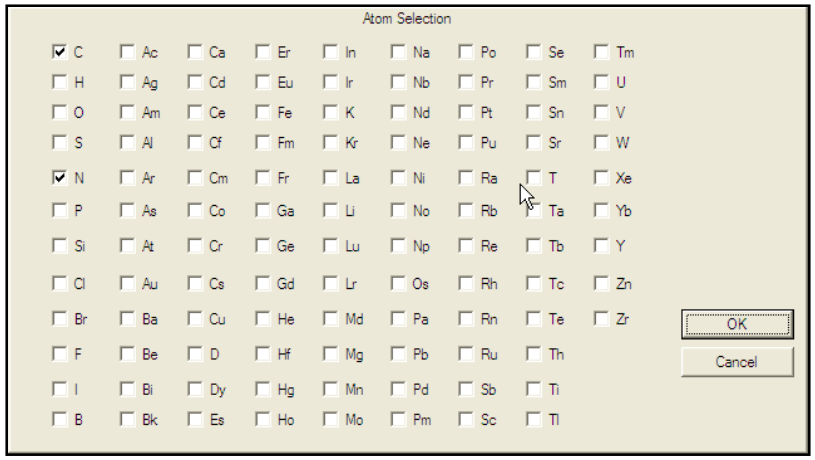
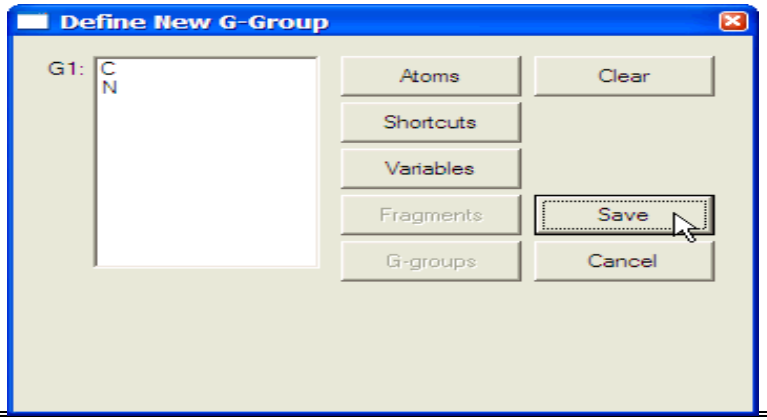
Для определения и добавления G-группы к существующей структуре необходимы следующие действия:

Шаг	Действие
1	**Из меню Draw выбираем опцию *G-groups*.** 

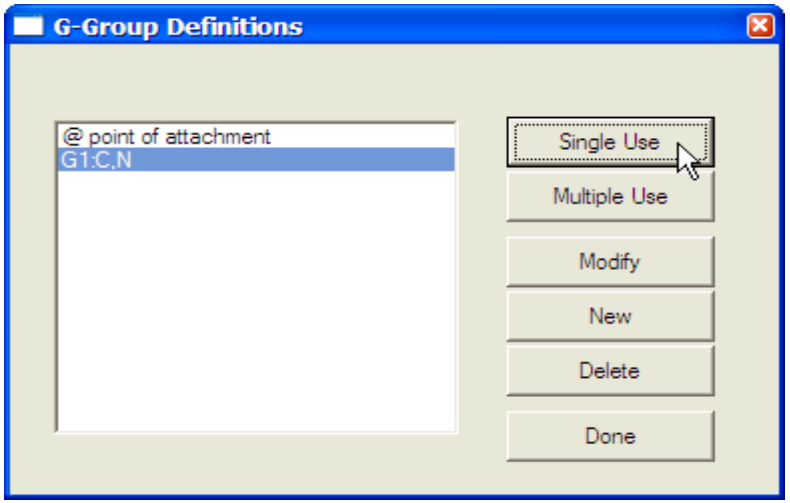
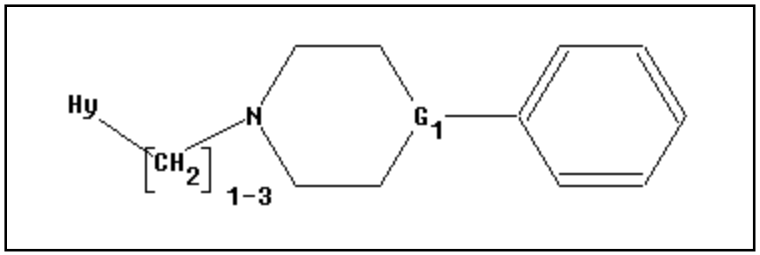
Добавление G-группы

Шаг	Действие
2	**В диалоговом окне G-Group Definitions выбираем опцию *New*.** 
3	**В диалоговом окне Define New G-Group выбираем нужную опцию: *Atoms, Shortcuts*, или *Variables*.** 

Добавление G-группы

Шаг	Действие
4	**В меню Atoms отмечаем интересующие опции. *OK*.** 
5	**В диалоговом окне Define New G-Group сохраняем определение G-групп – опция *Save*.** 

Добавление G-группы

Шаг	Действие
6	**В окне G-Group Definitions выбираем *Single Use*.** 
7	**Помещаем G-группу в структуру.** 

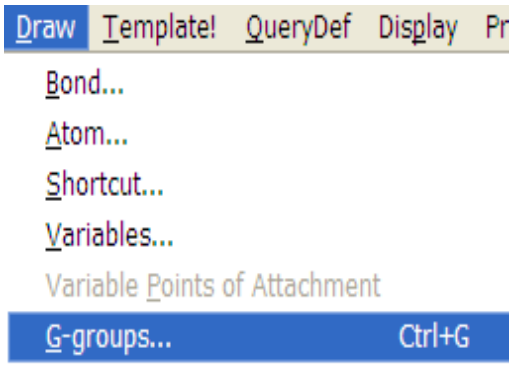
STN

Фрагмент с переменной точкой присоединения

До использования фрагмента в G-группе его следует определить

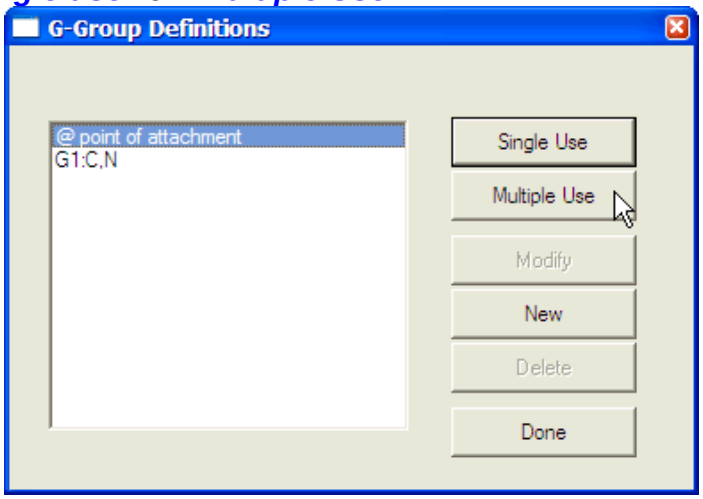
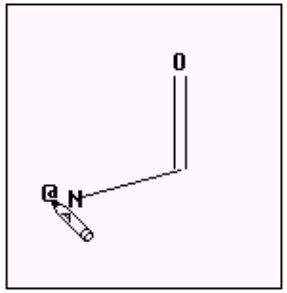
Фрагменты в структурных запросах всегда помечаются символом @ в точке присоединения

Для добавления точки присоединения к фрагменту необходимы следующие действия:

Шаг	Действие
1	**Нарисовать фрагмент(ы) в окне.**
2	**Из меню Draw выбрать опцию *G-groups*.** 

STN

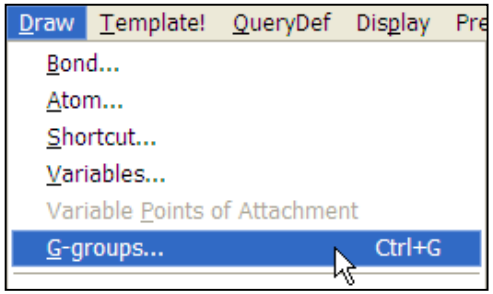
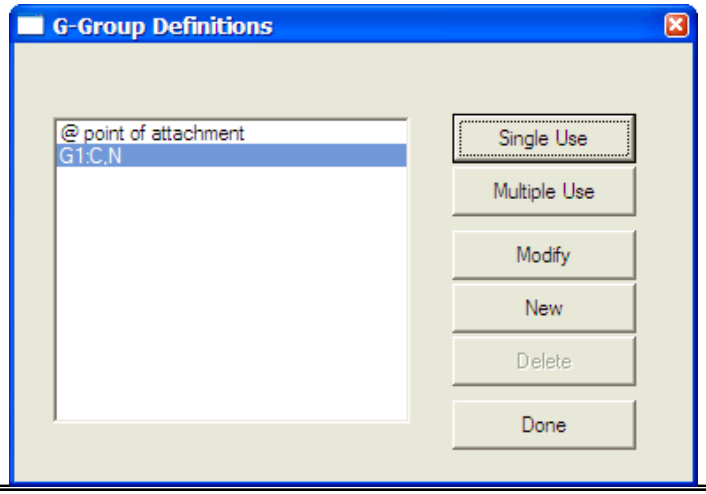
Фрагмент с переменной точкой присоединения

Шаг	Действие
3	**В окне G-Group Definitions выбрать *Point of Attachment*, затем *Single use* или *Multiple Use*.** 
4	**Поместите курсор на атоме, который должен быть присоединен. Символ @ появится рядом с узлом.** 
5	**Повторить шаг 3 для всех других фрагментов.**

STN

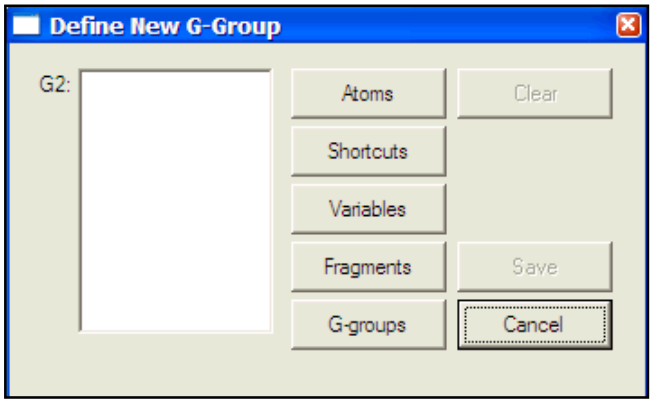
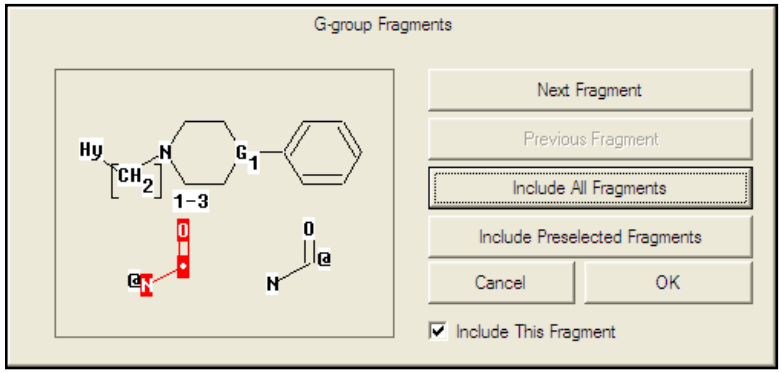
Добавление фрагментов к G-группе

Для определения G-группы, содержащей фрагмент, необходимы следующие действия:

Шаг	Действие
1	**Из меню Draw выбрать *G-группы*.** 
2	**В диалоговом окне G-Group Definitions выбрать *New*.** 

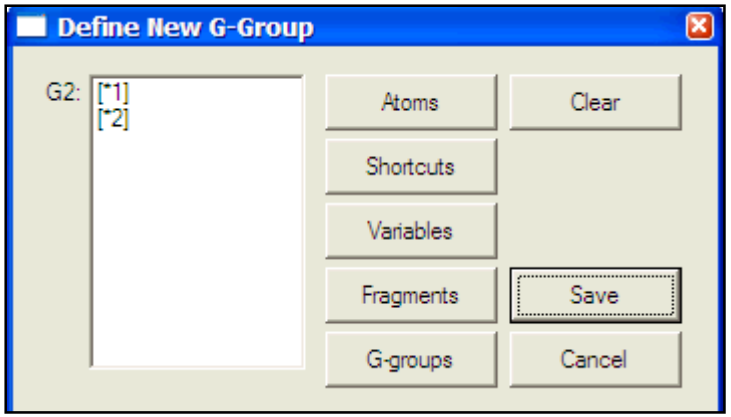
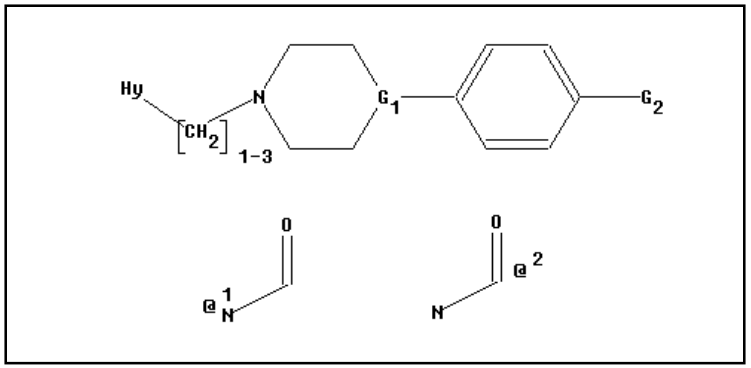
STN

Добавление фрагментов к G-группе

Шаг	Действие
3	**В окне Define New G-Group выбрать Fragments.** 
4	**Появится окно G-group Fragments. Один фрагмент будет выделен. В окне *Include this fragment* выбрать *Next Fragment*. Продолжать, пока все нужные фрагменты не будут включены. *OK*** 

STN

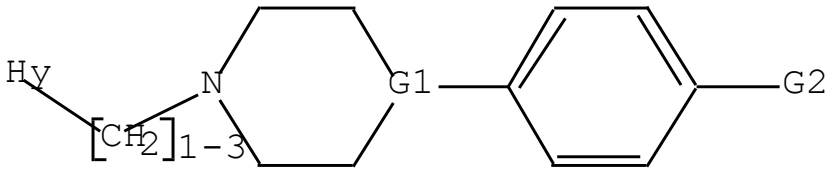
Добавление фрагментов к G-группе

Шаг	Действие
5	**В окне G-Group Definitions выбрать *Single Use*.** 
6	**Поместить G-группу в структуру.** 

STN

Проведение SSS-поиска

```
=> FILE REGISTRY

=>
Uploading C:\Program Files\stnexp\Queries\pg 95.str

=> D L1

L1 HAS NO ANSWERS
L1                STR
```



```
G1 C,N
G2 [@1],[@2]
```

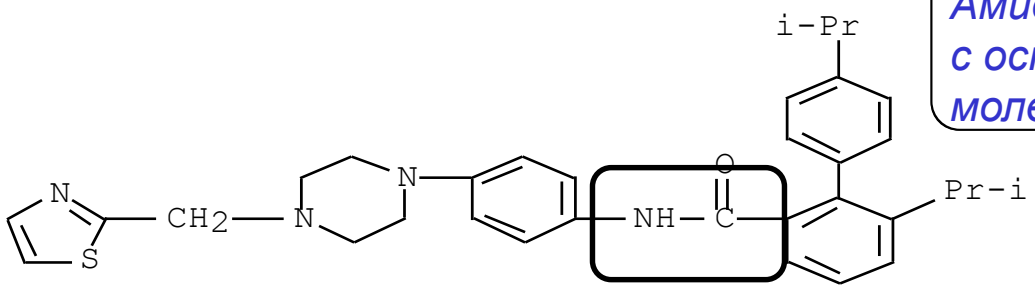
Проведение SSS-поиска

```
=> S L1 SSS SAM
SAMPLE SEARCH INITIATED 17:39:04
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -     9550 TO ITERATE
 20.9% PROCESSED     2000 ITERATIONS                    0 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
                        BATCH   **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:       185144 TO   196856
PROJECTED ANSWERS:               0 TO        0
L2            0 SEA SSS SAM L1

=> S L1 SSS FULL
FULL SEARCH INITIATED 17:39:12
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -   190139 TO ITERATE
100.0% PROCESSED   190139 ITERATIONS                   86 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.07
L3           86 SEA SSS FUL L1
```

STN

Проведение SSS-поиска

```
=> D SCAN

L3    86 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    [1,1'-Biphenyl]-2-carboxamide, 4',6-bis(1-methylethyl)-N-[4-[4-(2-
      thiazolylmethyl)-1-piperazinyl]phenyl]- (9CI)
MF    C33 H38 N4 O S
```



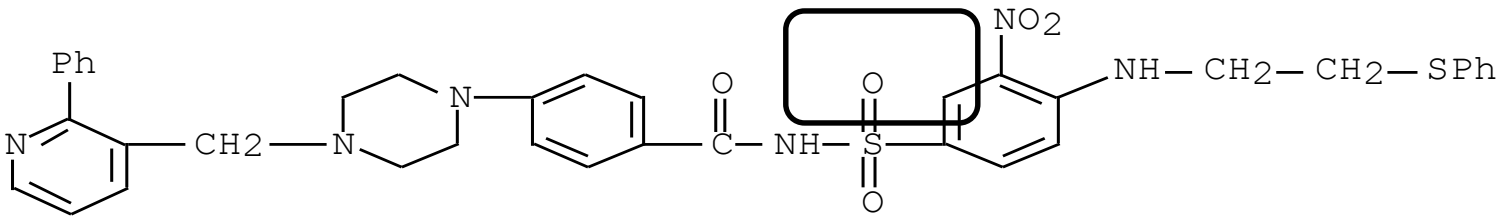
Амидный фрагмент связан с остальной частью молекулы атомом N

```
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):1
```

Проведение SSS-поиска

```
L3    86 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN    Benzamide, N-[[3-nitro-4-[[2-(phenylthio)ethyl]amino]phenyl]sulfonyl]-4-[4-
      [(2-phenyl-3-pyridinyl)methyl]-1-piperazinyl]- (9CI)
MF    C37 H36 N6 O5 S2
```

Амидный фрагмент связан с остальной частью молекулы атомом С




```
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**

HOW MANY MORE ANSWERS DO YOU WISH TO SCAN? (1):0
```

Переменные точки присоединения

Можно задать условие, чтобы заместитель был в различных положениях цикла

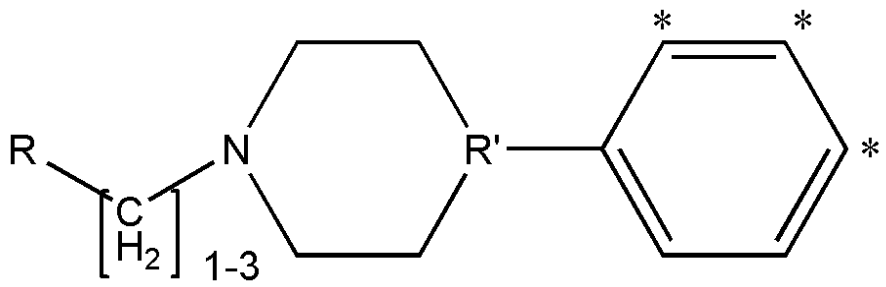
Заместителем может быть

- конкретный элемент
- группа (Shortcut)
- системная переменная группа (Variable)
- структурный фрагмент
- G-группа

STN

Поисковый запрос:

Найти вещества со следующими характеристиками:



R" = amide group

Требования:

- *Заместитель R –* ***моноцикл****, гетероцикл,* ***содержащий 2-7 атомовC и 1-3 атома N****. Атомы других элементов также могут присутствовать в цикле*
- *Атом R‘ – C или N*
- *R” – амидная группа, соединенная с бензольным циклом атомами C или N в положениях, отмеченных звездочками*
- *Запрещена дополнительная конденсация по бензольному или N-содержащему циклу*
- *Возможно замещение во все свободные положения*

Построение структуры для поиска

Рабочий лист	
Требование	**Действие**
R – моноцикл, гетероцикл	
R имеет 2–7 C и 1–3 N, с любым типом замещения	
Не желательно дополнительное замещение по фенилу или N-содержащему циклу	
Может быть любое замещение в открытые положения	
Должна быть по меньшей мере одна амидная группа в фениле, в положениях, отмеченных звездочками	

STN

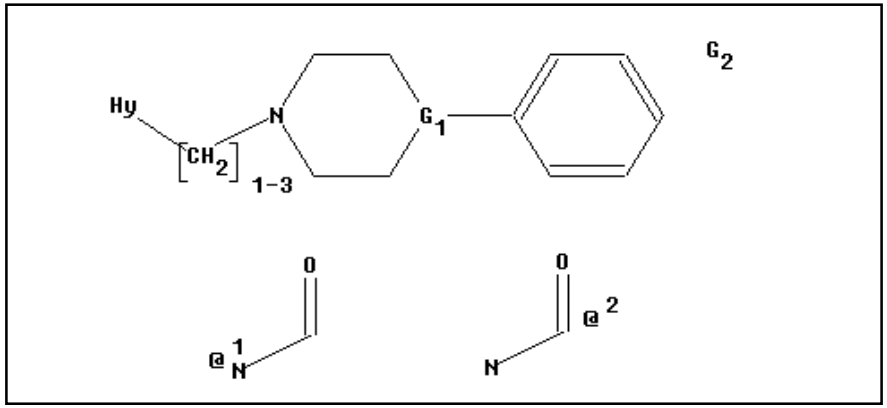
Построение структуры для поиска

Рабочий лист	
Требование	**Действие**
R – моноцикл, гетероцикл	Предыдущий пример
R имеет 2–7 C и 1–3 N, с любым типом замещения	Предыдущий пример
Не желательно дополнительное замещение по фенилу или N-содержащему циклу	Предыдущий пример
Может быть любое замещение в открытые положения	Предыдущий пример
Должна быть по меньшей мере одна амидная группа в фениле, в положениях, отмеченных звездочками	Используем опцию Variable Point of Attachment для присоединения G-группы

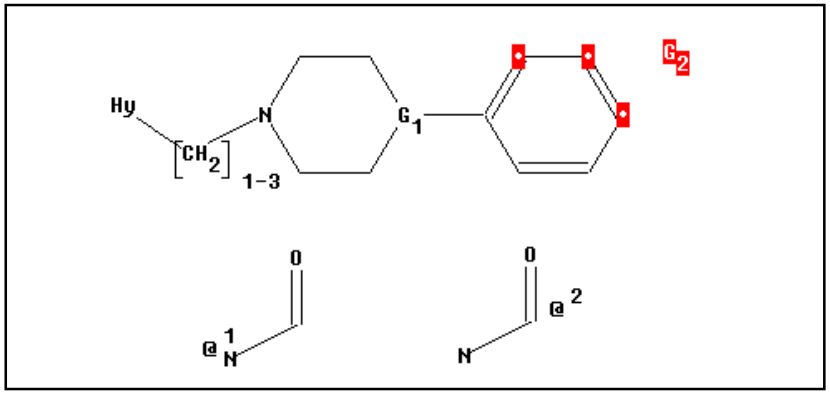
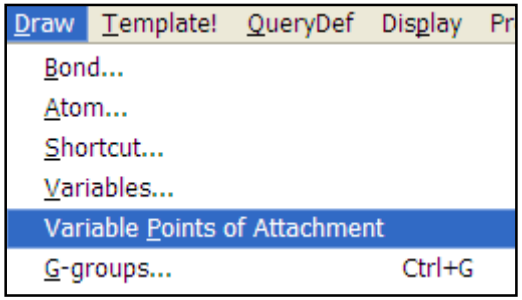
STN

Добавление заместителя с переменной точкой присоединения – Variable point of attachment

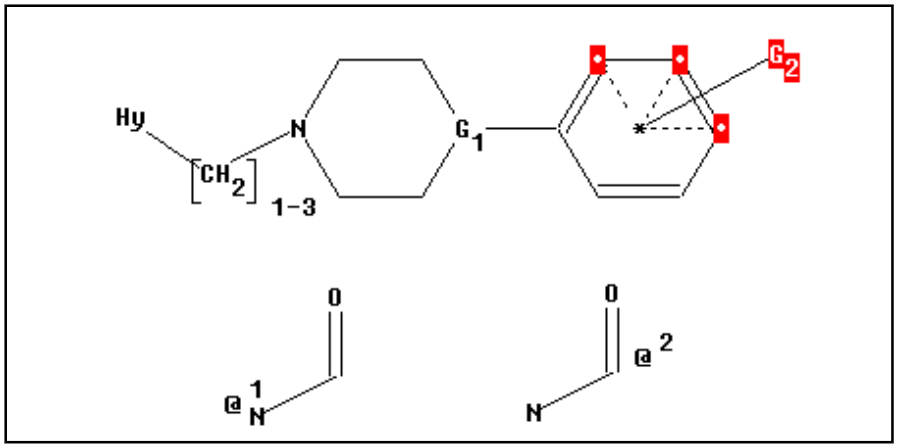
Для добавления к структуре заместителя с переменной точкой присоединения необходимы следующие действия:

Шаг	Действие
1	**Нарисовать цикл и заместитель как отдельные, не связанные компоненты.** 
2	**Выбрать *Инструментп*:**

Добавление заместителя с переменной точкой присоединения – Variable point of attachment

Шаг	Действие
3	Держа нажатой клавишу **SHIFT**, выделить заместитель и каждое положение цикла, куда он должен быть прикреплен. 
4	Из меню **Draw** выбрать ***Variable Points of Attachment***. 

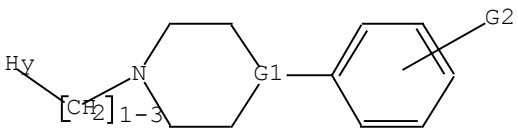
Добавление заместителя с переменной точкой присоединения – Variable point of attachment

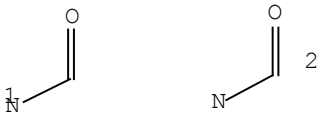
Шаг	Действие
5	**Рисуется "связь"от заместителя к каждому возможному положению цикла.** 

Появились пунктирные линии от центра цикла? Эту установку можно сделать в меню ***Preferences***, закладка ***Chemistry***, проверка – ***Show VPA***

Проведение SSS-поиска

```
=> FILE REGISTRY
=>
Uploading C:\Program Files\stnexp\Queries\sss-vpa.str

=> D L1
L1 HAS NO ANSWERS
L1                STR
```

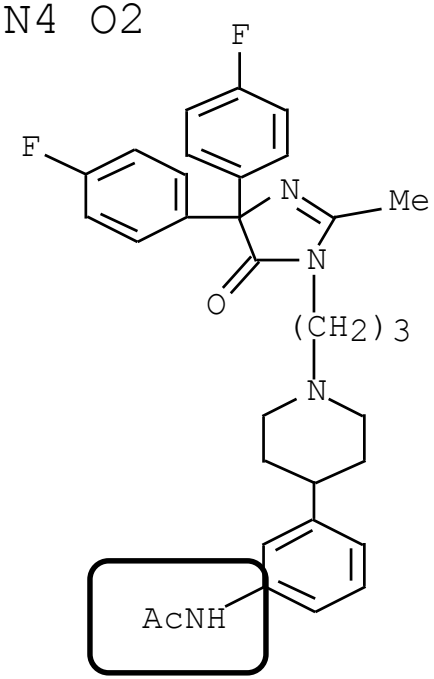





```
G1 C,N
G2 [@1],[@2]

=> S L1 SSS SAM
SAMPLE SEARCH INITIATED 18:24:28
SAMPLE SCREEN SEARCH COMPLETED -    13250 TO ITERATE
 15.1% PROCESSED     2000 ITERATIONS                    1 ANSWERS
INCOMPLETE SEARCH (SYSTEM LIMIT EXCEEDED)
SEARCH TIME: 00.00.01
FULL FILE PROJECTIONS:  ONLINE  **COMPLETE**
                        BATCH   **COMPLETE**
PROJECTED ITERATIONS:       258105 TO   271895
PROJECTED ANSWERS:               1 TO      286
L2            1 SEA SSS SAM L1
```

Проведение SSS-поиска

```
=> D SCAN
L2    1 ANSWERS   REGISTRY  COPYRIGHT 2006 ACS on STN
IN   Acetamide, N-[3-[1-[3-[4,4-bis(4-fluorophenyl)-4,5-dihydro-2-methyl-5-
oxo-1H-imidazol-1-yl]propyl]-4-piperidinyl]phenyl]- (9CI)
MF   C32 H34 F2 N4 O2
CI   COM
```



Амидная группа соединена атомом N с мета-положением бензольного кольца

```
**PROPERTY DATA AVAILABLE IN THE 'PROP' FORMAT**
ALL ANSWERS HAVE BEEN SCANNED
```

STN

Проведение SSS-поиска

```
=> S L1 SSS FULL

FULL SEARCH INITIATED 18:24:36
FULL SCREEN SEARCH COMPLETED -   262707 TO ITERATE

100.0% PROCESSED   262707 ITERATIONS                    168 ANSWERS
SEARCH TIME: 00.00.06

L3          168 SEA SSS FUL L1
```

Резюме
SSS-поиск

Запрос содержит	Умолчание	Дополнительные действия
Атомы с открытыми положениями	Любое замещение в открытые положения	Замещение в эти положения можно заблокировать водородами
Циклические системы	Атрибут Isolated/embedded	Можно изолировать циклы, чтобы конденсированные системы не были найдены
Атомы цепочки	Атрибут Chain node	Можно изменить атрибут на ring/chain – это позволит находить вещества, содержащие в этом положении циклы
Связи цепочки	Атрибут Chain bond	Можно изменить характеристику связи на ring/chain – это позволит находить в наборе ответов вещества с замыканием цикла

STN

Резюме
SSS-поиск

Запрос содержит	Умолчание	Дополнительные действия
Насыщенные 6-членные циклы	Значение связи Exact/Normalized	Значение связи можно изменить на ■ Exact – если нужны насыщенные циклы. ■ Normalized – ароматические циклы
Положения, где нужно определить замещение	Определенные системой переменные (variables)	■ Атрибуты системно-определенных переменных можно модифицировать, используя опции generic definitions и element counts
	Определенные пользователем G-группы	■ Определенные пользователем G-группы могут содержать атомы, переменные или другие G-группы
Цикл с одним или несколькими положениями, где возможно замещение	Переменные точки присоединения – Variable points of attachment	VPA – может использоваться в циклических системах для атомов, переменных или G-групп

STN

SciFinder

Reaxys

Web of Knowledge

Scopus