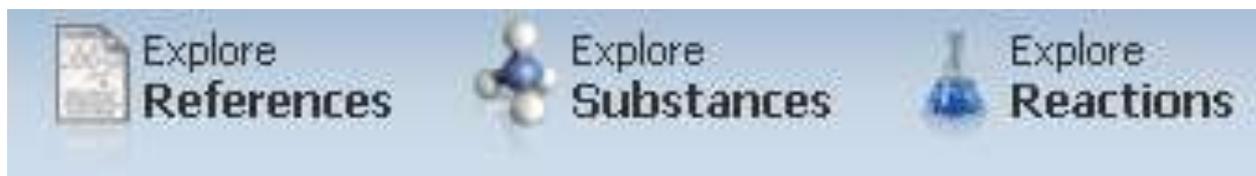


Поиск в ИПС SciFinder

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



Explore References:

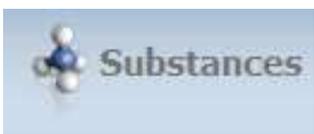
библиографический поиск в реферативных БД CAPlus и MedLine

Explore Substances:

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

Explore Reactions:

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

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

Поиск в библиографических БД – Explore References

Тематический поиск – бланк *Research Topic*

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

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

Рекомендации:

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

Explore References

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

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

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

Поиск следует начинать с более широкого запроса или применять ограничения.

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

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

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

Research Topic Candidates

5 Topics 1 Selected

Select All Deselect All

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

Get References

Рекомендации:

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

3. Оценка ответов.

Поисковые термины в заголовках и реферате выделены цветом.

References Get Substances Get Reactions Get Related Tools Send to SciPlanner

94 References 0 Selected Save Print Export

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

Display: [icon]

1. **New Highly Active Heteroscorpionate-Containing Lutetium Catalysts for the Hydroamination of Aminoalkenes: Isolation and Structural Characterization of a Dipyrrolidinide-Lutetium Complex** Full Text

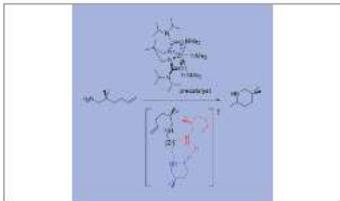
By Otero, Antonio; Lara-Sanchez, Agustin; Najera, Carmen; Fernandez-Baeza, Juan; Marquez-Segovia, Isabel; Castro-Osma, Jose Antonio; Martinez, Javier; Sanchez-Barba, Luis F.; Rodriguez, Ana M.
From Organometallics (2012), 31(6), 2244-2255. | Language: English, Database: CAPLUS

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

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

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

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



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

Quick View

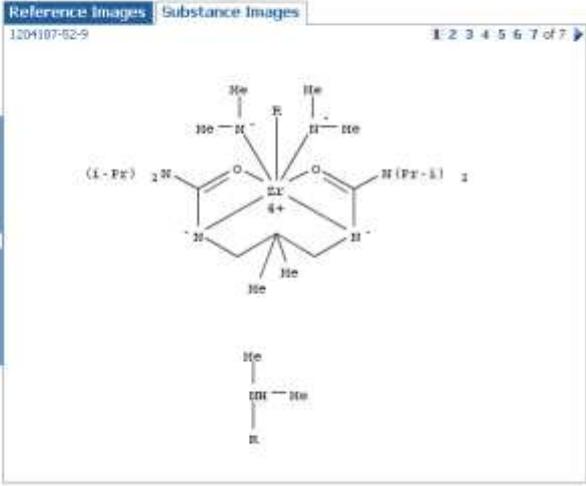
Intramolecular Aminoalkene Hydroamination Mediated by a Tethered Bis(ureate)zirconium Complex: Computational Perusal of Various Pathways for Aminoalkene Full Text

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

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

Reference Images Substance Images

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



Рекомендации по проведению тематического поиска (Research Topic)

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

Определение темы поиска

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

Ограничения, налагаемые на вводимую фразу

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

Примеры:

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

Предлоги

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

Языковые особенности

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

Использование операторов AND и OR

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

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

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

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

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

Используйте AND только для обозначения присутствия обоих терминов.

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

Распределенные модификаторы

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

Использование отрицания

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

Сокращения и орфографические ошибки

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

Синонимы

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

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

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

Усеченные слова и символы усечения

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

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

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

Булевы поиски

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

Поиск по автору – бланк Author Name

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

Рекомендации:

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

Explore References

Research Topic Author Name CHISHOLM MALCOLM H Search

Author Name Last * First Middle

Company Name

Document Identifier

Journal

Patent

Tags

Look for alternative spellings of the last name

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

Author Name Candidates

5 Authors 3 Selected

Select All Deselect All

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

Get References

3. Оценка ответов.

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

868 References | 0 Selected | Save | Print | Export

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

Display: [icon]

1. Photophysical properties of quadruply bonded(MM = Mo2, MoW or W2) supported by carboxylate ligands: Lifetimes and charge distribution in S1 and T1 states [Full text](#)

By Chisholm, Malcolm H.

From Abstracts of Papers, 244th ACS National Meeting & Exposition, San Diego, CA, United States, March 25-March 29, 2012 (2012), INOR-591. | Language: English, Database: CAPLUS

The transient absorption spectra and time resolved infra-red (fs and ns) spectra of MM(O2CR)4 and trans-MML2(O2CR)2 compds. where MM = Mo2, MoW and W2 and R = alkyl or a conjugated org. group reveal relatively long-lived S1 and T1 states that can be characterized as MLCT or MM delta - delta star. The MLCT states can be characterized as mixed valence ions where the charge on the ligand is either delocalized or trapped on one ligand. R. groups containg IR reporter groups such as CCC and CN triple bonds allow interesting distinctions of charge distribution as well is compds. with trans O2CC6H5(Cr(OO3))3.

2. Furan- and selenophene-2-carboxylate derivatives of dimolybdenum and ditungsten (M quadruple bond M): a comparison of their chemical and photophysical properties [Full text](#)

By Brown-Yu, Samantha E.; Chisholm, Malcolm H.; Gallucci, Judith C.; Ghosh, Yagnaseni; Gustafson, Terry L.; Reed, Carly R.

From Dalton Transactions (2012), 41(8), 2257-2263. | Language: English, Database: CAPLUS

From the reactions between M2(TPB)4, where TPB = 2,4,6-trisopropylbenzoate and two equiv. each of 2-furan carboxylic acid, FuCO2H, and 2-selenophene carboxylic acid, SpCO2H in toluene, trans-M2(TPB)2(O2CFu)2 (1a M = Mo, 2a M = W) and trans-M2(TPB)2(O2CSp)2 (1b M = Mo, 2b M = W) were formed. These new compds. were characterized by 1H NMR, steady-state UV-visible-NIR absorption and emission spectroscopy, cyclic and differential pulse voltammetry, and fs and ns transient absorption spectroscopy. The compd. Mo2(TPB)2(O2CSp)2 (1b) was characterized by single crystal x-ray crystallog. These data are compared with those previously reported for related 2-thiophene carboxylate deriv.: M2(TPB)2(O2CTh)2. The physicochem. data correlate well with electronic structure calcs. performed on model compds. All compds. have detectable S1 photoexcited states with lifetimes that vary from ~5 ps to < 1 ps. The Mo compds. have T1 states with microsecond lifetimes that are assigned as MM55* whereas the T1 states for W are 3MLCT with lifetimes on the order of nanoseconds. In all cases, shorter lifetimes were seen in complexes contg. heavier atoms.

Analysis | Refine

Analyze by: Author Name

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

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

Show More

Рекомендации:

Для уточнения ответов можно использовать имена соавторов, если известны.

Поиск по названию организации – бланк *Company Name*

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

Рекомендации:

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

Explore References

Research Topic

Author Name

Company Name

Document Identifier

Journal

Patent

Tags

Company Name

Battelle Labs

Search

Examples:

3M

DuPont

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

2. Оценка ответов.

References

7116 References

Get Substances

Get Reactions

Get Related

Tools

Send to SciPlanner

Select All

Deselect All

Sort by: Accession Number

Answers per Page [20]

1 2 3 4 5 6 ... 356

Display: [icon]

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

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

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

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

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

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

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

By Rokatep, Aashish; Stephens, Elizabeth V.; Davies, Richard W.; Smith, Mark T.; Soulehi, Ayoub; Alrai, Saïd

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

Analysis

Refine

Analyze by:

Company-Organization

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

Battelle Pac Northwest Lab, USA	1907
BATTELLE Columbus Lab, USA	1520
Battelle Mem Inst, USA	1075
Battelle Northwest, USA	456
BATTELLE, USA	419
Battelle Pacific Northwest Lab, USA	262
Battelle's Columbus Lab, USA	147
Battelle Northwest Lab, USA	111
Battelle Pac Northwest Labs, USA	104
Battelle Columbus Labs, USA	94

Show More

Рекомендации:

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

Поиск по названию журнала – бланк *Journal*

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

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

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

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

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

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

2. Оценка ответов.

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

В библиографическом описании поисковые термины выделены жирным шрифтом.

Поиск конкретных патентов – бланк Patent

Конкретный патент можно найти с помощью имеющейся библиографической информации.

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

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

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

2. Оценка ответов.

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

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

On the right side, the "Analysis" sidebar is open, showing the "Analyze by:" dropdown set to "Author Name". Below this, a list of authors and their corresponding counts is displayed:

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

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

Анализ и оценка набора ответов

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

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

The screenshot displays a web interface for a research database. The main area shows a list of references, with the first one selected. The reference title is "1. New Highly Active Heteroscorpionate-Containing Lutetium Catalysts for the Hydroamination of Aminoalkenes: Isolation and Structural Characterization of a Dipyrrolidinide-Lutetium Complex". The author list includes Otero, Antonio; Lara-Sanchez, Agustin; Najera, Carmen; Fernandez-Baeza, Juan; Marquez-Segovia, Isabel; Castro-Ojeda, Jose Antonio; Martinez, Javier; Sanchez-Barba, Luis F.; Rodriguez, Ana M. The abstract discusses the reactions of hybrid scorpionate/cyclopentadiene compounds and the isolation of a lutetium complex.

The right sidebar is titled "Analysis" and contains a table of authors and their corresponding number of references. The table is as follows:

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

Below the table are buttons for "Show More" and "Categorize".

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

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

Опция Categorize

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

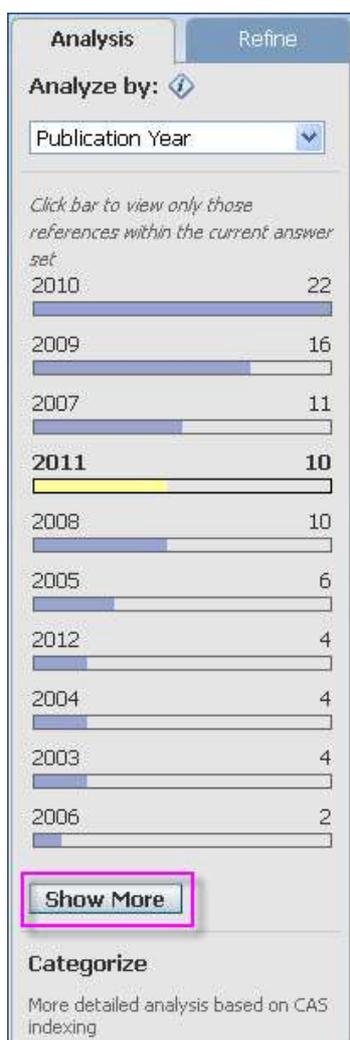
2. Для изменения критериев анализа следует выбрать другую опцию в ниспадающем меню *Analyze by:*, например, год публикации *Publication year*.



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

Вывод результатов анализа

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



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

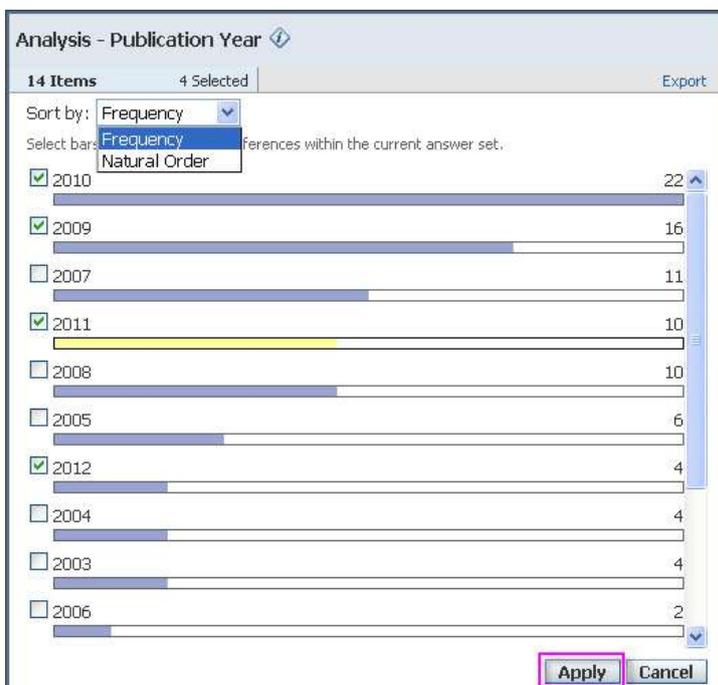
Рекомендации:

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

Frequency (по умолчанию) – вывод только 500 результатов;

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

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



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

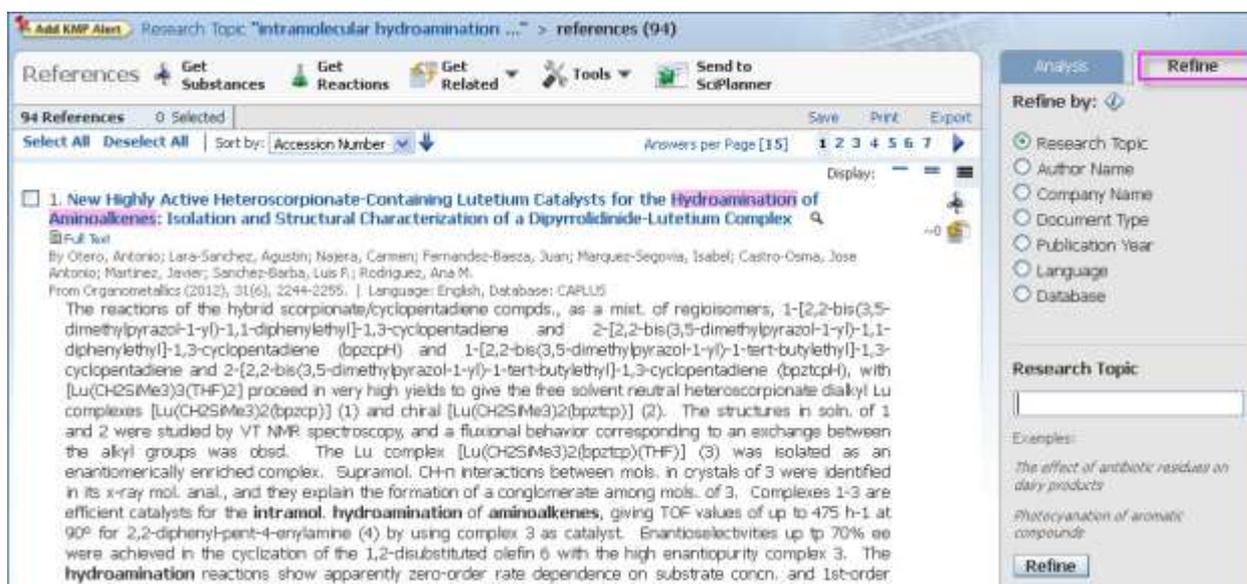


Для создания нового набора ответов, содержащего ссылки только из анализируемого набора, используется команда **Keep Analysis**; для возвращения к исходному набору – команда **Clear Analysis**.

Уточнение набора ответов

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

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



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

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

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

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

1. **Intramolecular hydroamination of aminoalkenes**

By Takemiya, Akhiro; Liu, Zhijian; Hartwig, John F.
 From U.S. Pat. Appl. Publ. (2009), US 20090156824 A1 20090618. | Language: English, Database: CAPLUS

The invention relates to the method of prep. azacycloalkanes via rhodium/phosphine-catalyzed **intramol. hydroamination of aminoalkenes**. The method of prep. azacycloalkanes via rhodium/phosphine-catalyzed **intramol. hydroamination of aminoalkenes** of formula I wherein R¹ is an org. group; R², R³ and R⁴ are independently H, Me, and an org. group; are claimed. In a typical example, compd. II was prepd. via rhodium /phosphine-catalyzed **intramol. hydroamination** of N-(4-chlorobenzyl)-2,2-diphenylpent-4-en-1-amine.

I

II

Доступ к полному тексту

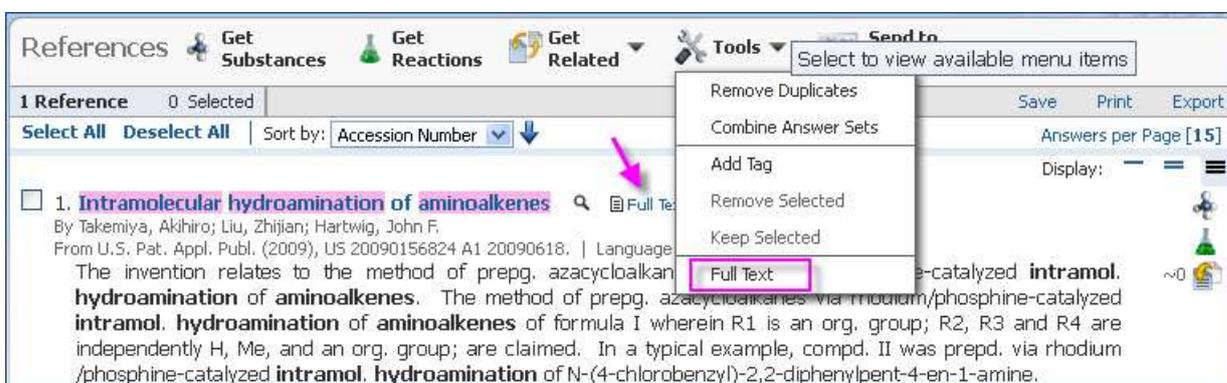
ИПС SciFinder позволяет быстро получить доступ к полным текстам:

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

Перейти к полному тексту интересующей ссылки можно 3 способами.

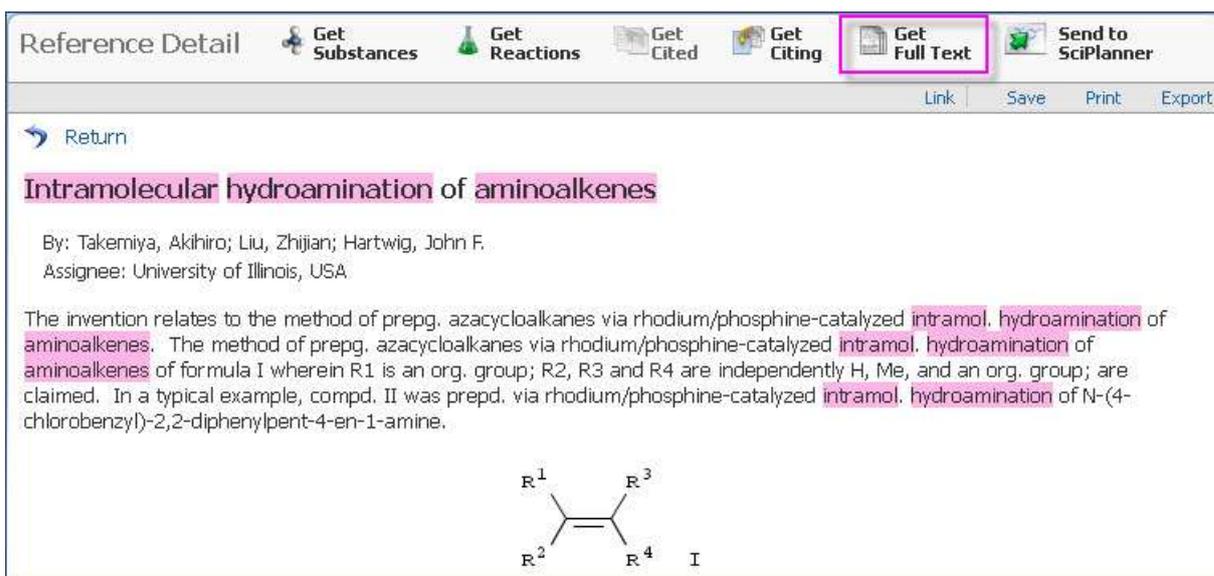
При просмотре набора ответов:

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



При просмотре конкретного ответа:

3. по команде **Get Full Text**.



Reference Detail

Get Substances Get Reactions Get Cited Get Citing **Get Full Text** Send to SciPlanner

Link Save Print Export

Return

Intramolecular hydroamination of aminoalkenes

By: Takemiya, Akihiro; Liu, Zhijian; Hartwig, John F.
Assignee: University of Illinois, USA

The invention relates to the method of prepg. azacycloalkanes via rhodium/phosphine-catalyzed intramol. hydroamination of aminoalkenes. The method of prepg. azacycloalkanes via rhodium/phosphine-catalyzed intramol. hydroamination of aminoalkenes of formula I wherein R1 is an org. group; R2, R3 and R4 are independently H, Me, and an org. group; are claimed. In a typical example, compd. II was prepd. via rhodium/phosphine-catalyzed intramol. hydroamination of N-(4-chlorobenzyl)-2,2-diphenylpent-4-en-1-amine.

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

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

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

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

Print

Hydroamination of Alkenes

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

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

Applicant(s): UNIV ILLINOIS [US] ±

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

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

Application number: US20080251062 20081014

Priority number(s): US20080251062 20081014; US20070979652P 20071012

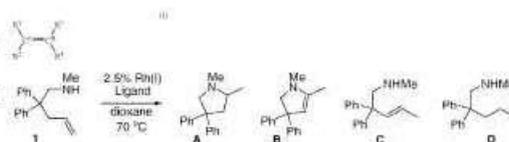
Abstract of US2009156824 (A1)

Translate this text into **i**

German

patenttranslate powered by EPO and Google

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



Идентификация родственных ссылок

ИПС SciFinder позволяет легко идентифицировать цитирующие и цитируемые публикации.

Цитирующие ссылки

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

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

4 References 0 Selected Save Print Export

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

1. **2,5-Bis(N-(2,6-diisopropylphenyl)iminomethyl)pyrrolyl Complexes of the Heavy Alkaline Earth Metals: Synthesis, Structures, and Hydroamination Catalysis** **~7**

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

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

2. **Aminotroponimate zinc complexes as catalysts for the intramolecular hydroamination** **~4**

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

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

3. **Rare-Earth Metal Alkyl, Amido, and Cyclopentadienyl Complexes Supported by Imidazolin-2-iminato Ligands: Synthesis, Structural Characterization, and Catalytic Application** **~20**

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

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

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

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

(4) > citing references (31)

References

31 References 0 Selected Save Print Export

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

Display:

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

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

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

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

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

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

Рекомендации:

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

Цитируемые ссылки

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

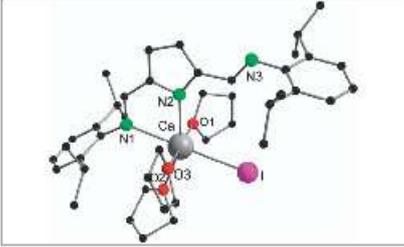
References **Get Substances** **Get Reactions** **Get Related** Select to view available menu items

4 References 0 Selected Save Print Export

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

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

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



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

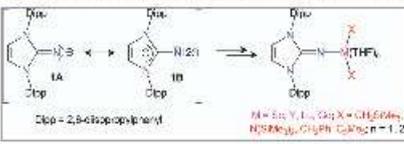
2. **Aminotroponimate zinc complexes as catalysts for the intramolecular hydroamination** Full Text

By Jenter, Jelena; Luehl, Anja; Roesky, Peter W.; Blechert, Siegfried
From *Journal of Organometallic Chemistry* (2010), Volume Date 2011, 696(1), 406-418. | Language: English, Database: CAPLUS

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

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

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



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

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

4) > cited references (342)

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

342 References 0 Selected Save Print Export

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

Display: — = ≡

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

By Neal, Steven R.; Ellern, Arkady; Sadow, Aaron D.
From Journal of Organometallic Chemistry (2010), Volume Date 2011, 696(1), 228-234. | Language: English, Database: CAPLUS

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

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

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

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

Рекомендации:

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

Сортировка цитирующих ссылок

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

References

Get Substances Get Reactions Get Related Tools Send to SciPlanner

94 References 0 Selected Save Print Export

Select All Deselect All Sort by: Accession Number

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

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

Display: [icon]

1. **New Highly Active Hetero... Aminoalkenes: Isolation and... terization of a Dipyrrolidinide-Lutetium Complex**

Full Text

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

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

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

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

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



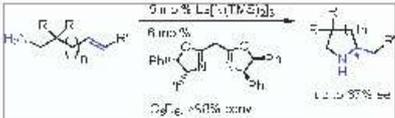
Набор цитирующих ссылок будет отсортирован в порядке уменьшения частоты цитирования – самые цитируемые документы будут выведены первыми.

References Get Substances Get Reactions Get Related Tools Send to SciPlanner

94 References 0 Selected Save Print Export

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

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

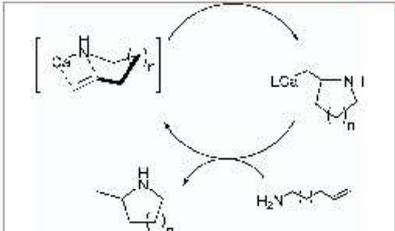


By Hong, Sukwon; Tian, Shun; Metz, Matthew V.; Marks, Tobin J.
From Journal of the American Chemical Society (2003), 125(48), 14768-14783.
| Language: English, Database: CAPLUS

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

~197

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



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

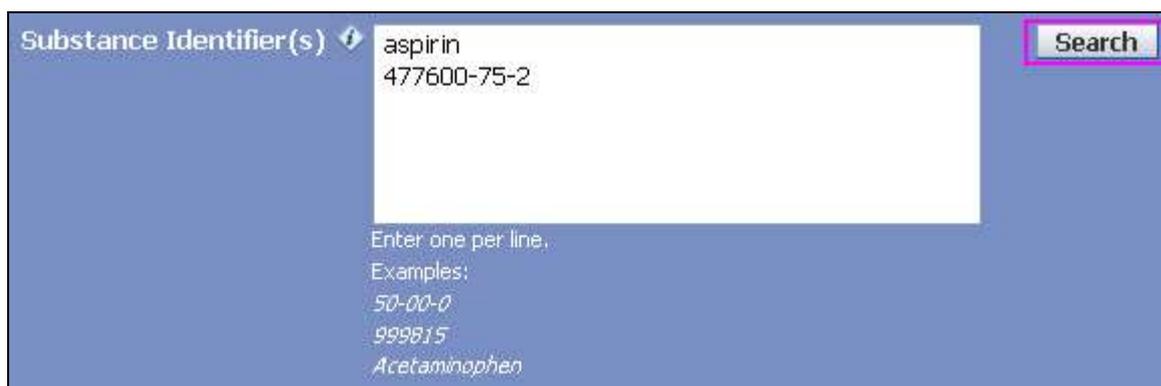
The calcium-catalyzed **intramol. hydroamination** of alkenes and alkynes is reported. The β -diketiminato complex [(HC(C(Me)2N-2,6-iPr2C6H3)2)-Ca{N(SiMe3)2}(THF)] affected the catalytic cyclization of a range of **aminoalkenes** and aminoalkynes with activities that were broadly commensurate to those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

~161

Поиск веществ с помощью идентификатора *Substance Identifier*

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

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



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

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

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

Substance Detail

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

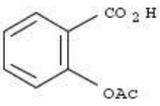
Link | Save | Print | Export

Return

CAS Registry Number: 50-78-2

C₉ H₈ O₄

Benzoic acid, 2-(acetyloxy)-



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

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

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

▶ **Bioactivity Indicators** NEW ▶ **Target Indicators** NEW

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

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

Рекомендации:

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

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

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

Рекомендации:

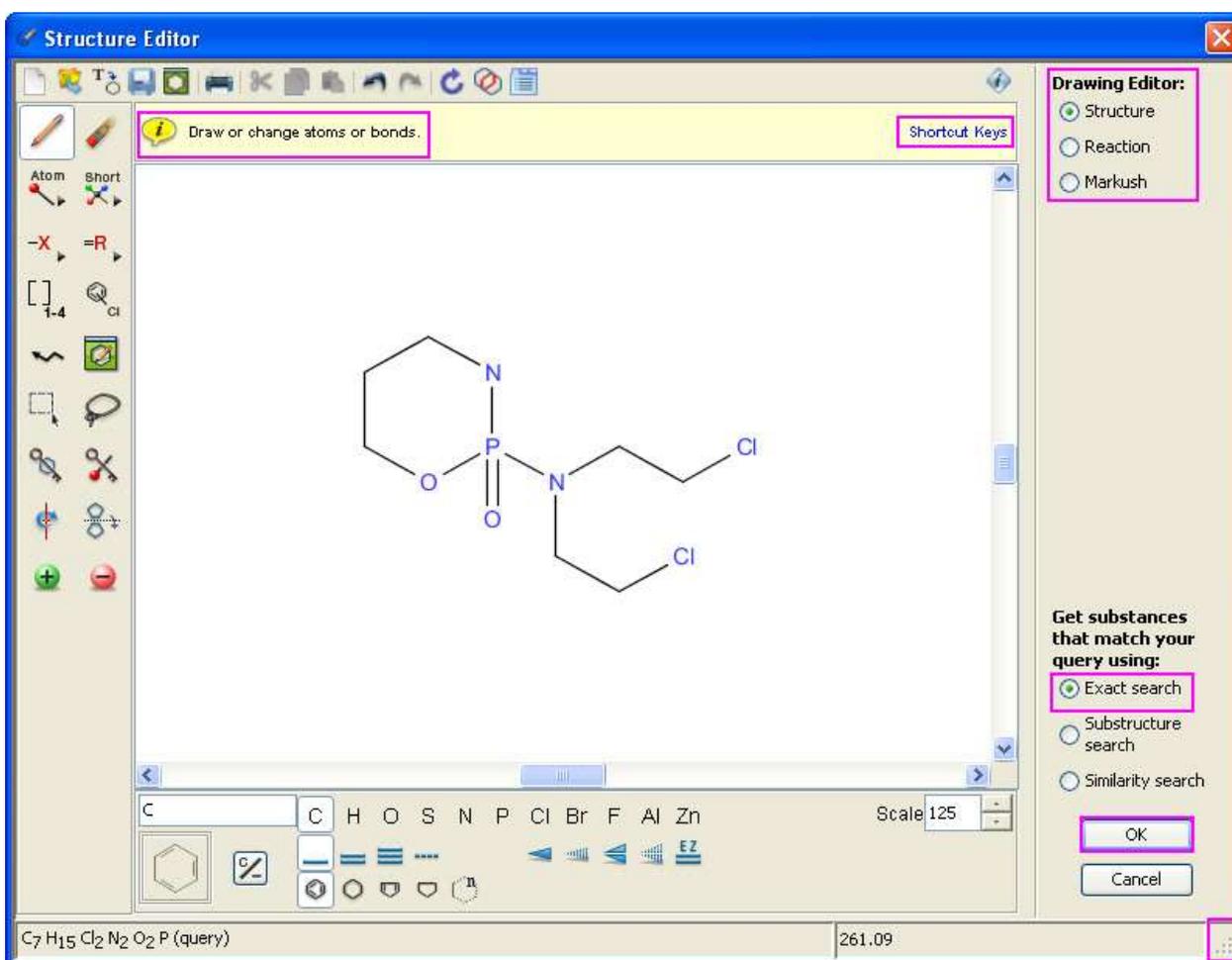
Для вывода источника информации о приведенных свойствах следует выбрать соответствующие сноски в колонке **Note**.

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

Поиск вещества по его структуре

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

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



Рекомендации:

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

Результаты поиска *Exact* могут включать:

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

Структура для поиска загружается в окно *Chemical Structure*.

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

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

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

Explore Substances

Chemical Structure Chemical Structure

Markush
Molecular Formula
Property **NEW**
Substance Identifier

Search

Click image to change structure or view detail

Search type: Exact Structure
 Substructure
 Similarity

Show precision analysis

Characteristic(s)

Class(es)

Studies

Single component
 Commercially available
 Included in reference(s)

Alloys
 Coordination compounds
 Incompletely defined

Analytical
 Biological

Mixtures
 Polymers
 Organics, and others not listed

Preparation
 Reactant or reagent

6. Оценка ответов.

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

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

Рекомендации:

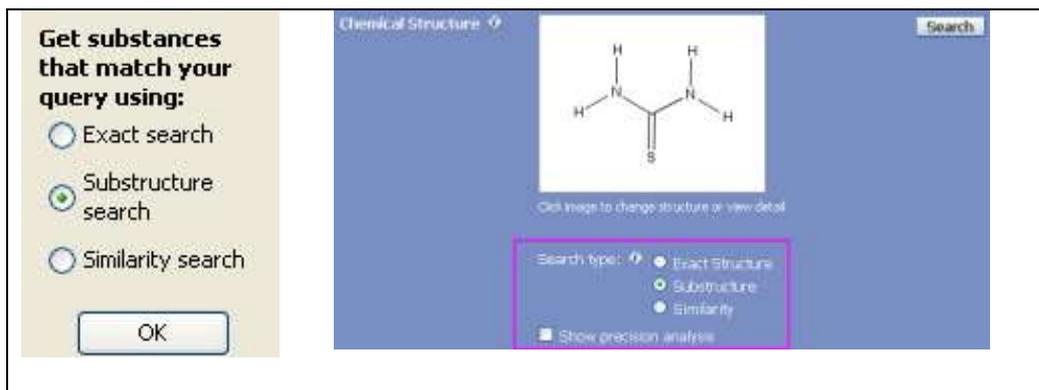
- Для изменения порядка вывода веществ следует использовать команду **Sort by**;
- Для вывода результатов поиска в две, три или четыре колонки следует выбрать соответствующую опцию команды **View**. Если структуры большие, предпочтительно использование меньшего количества колонок.

Выбор типа структурного поиска

Имеется три типа структурных поисков:

- Exact Structure
- Substructure
- Similarity

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



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

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

Дополнительные критерии поиска

Можно задавать дополнительные критерии, которым должны отвечать целевые вещества:

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

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

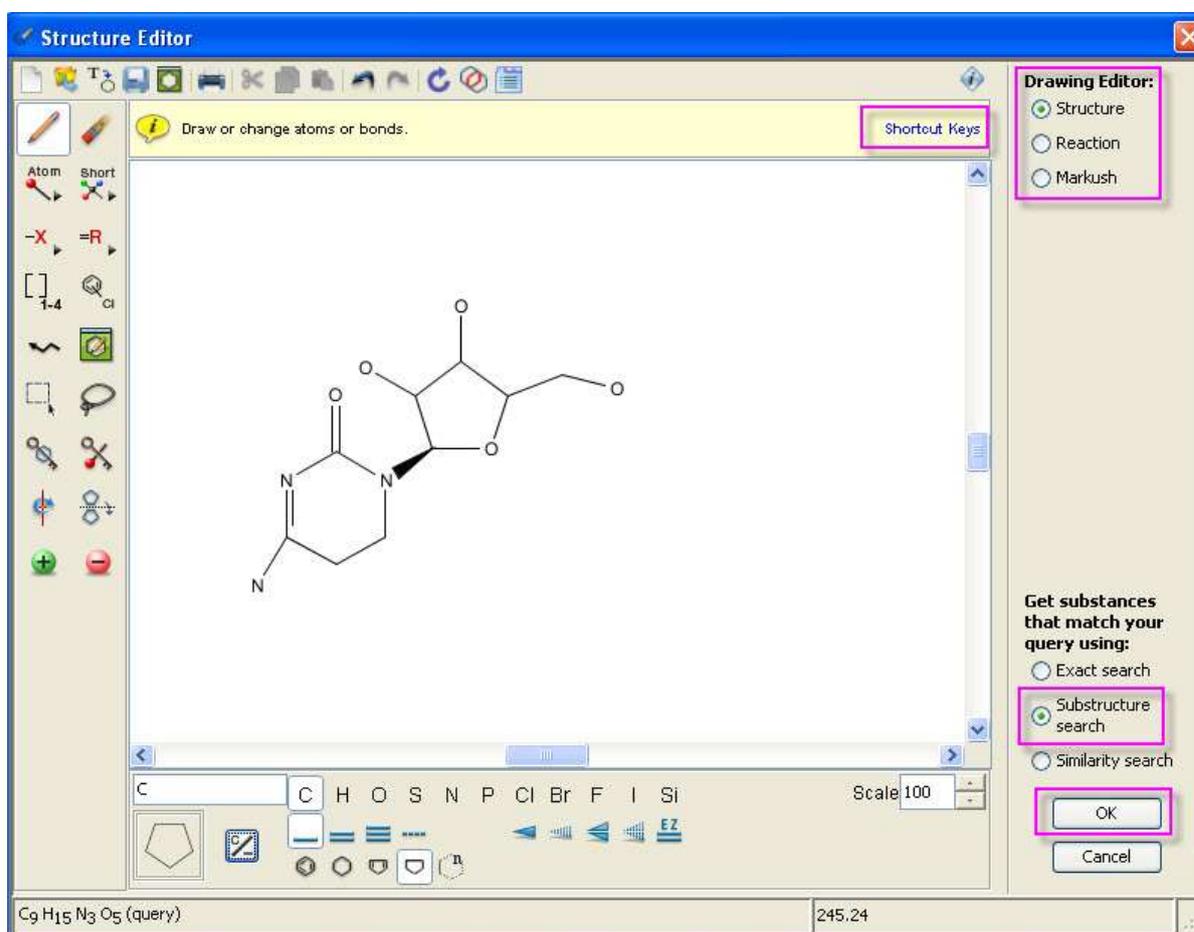
Characteristic(s)	<input type="checkbox"/> Single component	
	<input type="checkbox"/> Commercially available	
	<input type="checkbox"/> Included in reference(s)	
Class(es) 	<input type="checkbox"/> Alloys	<input type="checkbox"/> Mixtures
	<input type="checkbox"/> Coordination compounds	<input type="checkbox"/>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

Поиск по фрагменту структуры

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

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

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



Рекомендации:

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

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

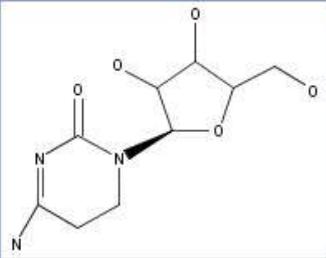
- изменение типа поиска **Search Type** – опции **Exact Structure** (поиск точной структуры), **Substructure** (поиск фрагмента структуры) и **Similarity** (поиск подобных структур);
- просмотр анализа точности – опция **Show precision analysis** (не доступна для поисков со стерео характеристиками или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

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

Explore Substances

Chemical Structure Chemical Structure 

Markush
Molecular Formula
Property **NEW**
Substance Identifier



Click image to change structure or view detail

Search type:  Exact Structure
 Substructure
 Similarity

Show precision analysis

Search

Characteristic(s) 

Single component
 Commercially available
 Included in reference(s)

Class(es) 

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

Studies 

Analytical
 Biological
 Preparation
 Reactant or reagent

4. Вывод вариантов ответов.

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

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

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

6. Оценка ответов.

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

Substances 448 Substances 0 Selected

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

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

Chemical structures and names are shown for each substance, including C₉H₁₅N₃O₅ Cytidine, 5,6-dihydro- (6CI,9CI) and C₉H₁₄N₃O₅ 5-Pyrimidinyl, 4-amino-1,2,5,6-tetrahydro-2-oxo-1-β-D-ribofuranosyl- (9CI).

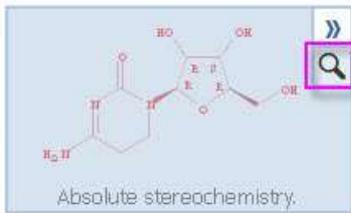
7. Для детального просмотра информации следует поместить курсор на найденное вещество и выбрать опцию *Quick View* .

Substances  Get References  Get Reactions  Tools  Send to SciPlanner

448 Substances 0 Selected Save Print Export

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

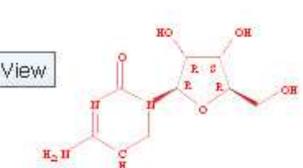
1. Substance Detail
51860-53-8



Absolute stereochemistry.

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

2. Substance Detail
107672-19-5



Absolute stereochemistry.

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

3. Substance Detail
107672-20-8



Absolute stereochemistry.

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

Quick View 

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

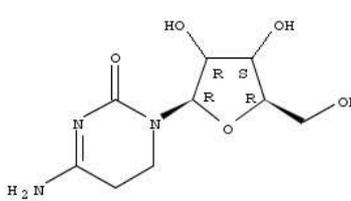
Other Names
5,6-Dihydrocytidine

Number of References
~6

Document Types
Journal

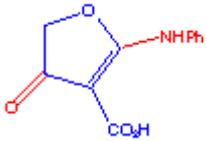
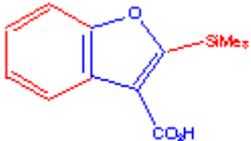
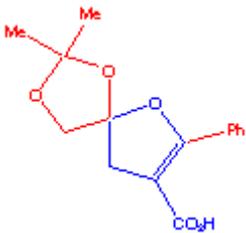
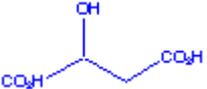
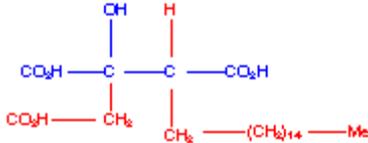
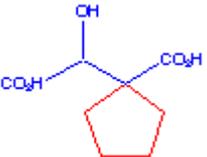
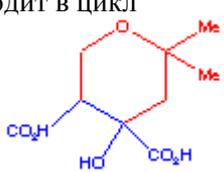
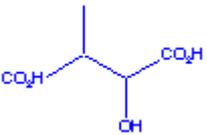
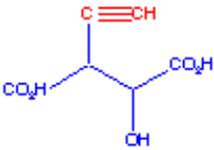
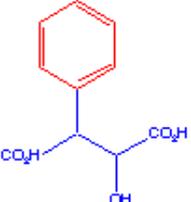
Properties
Predicted

Commercial Sources
Not Available



Absolute stereochemistry.

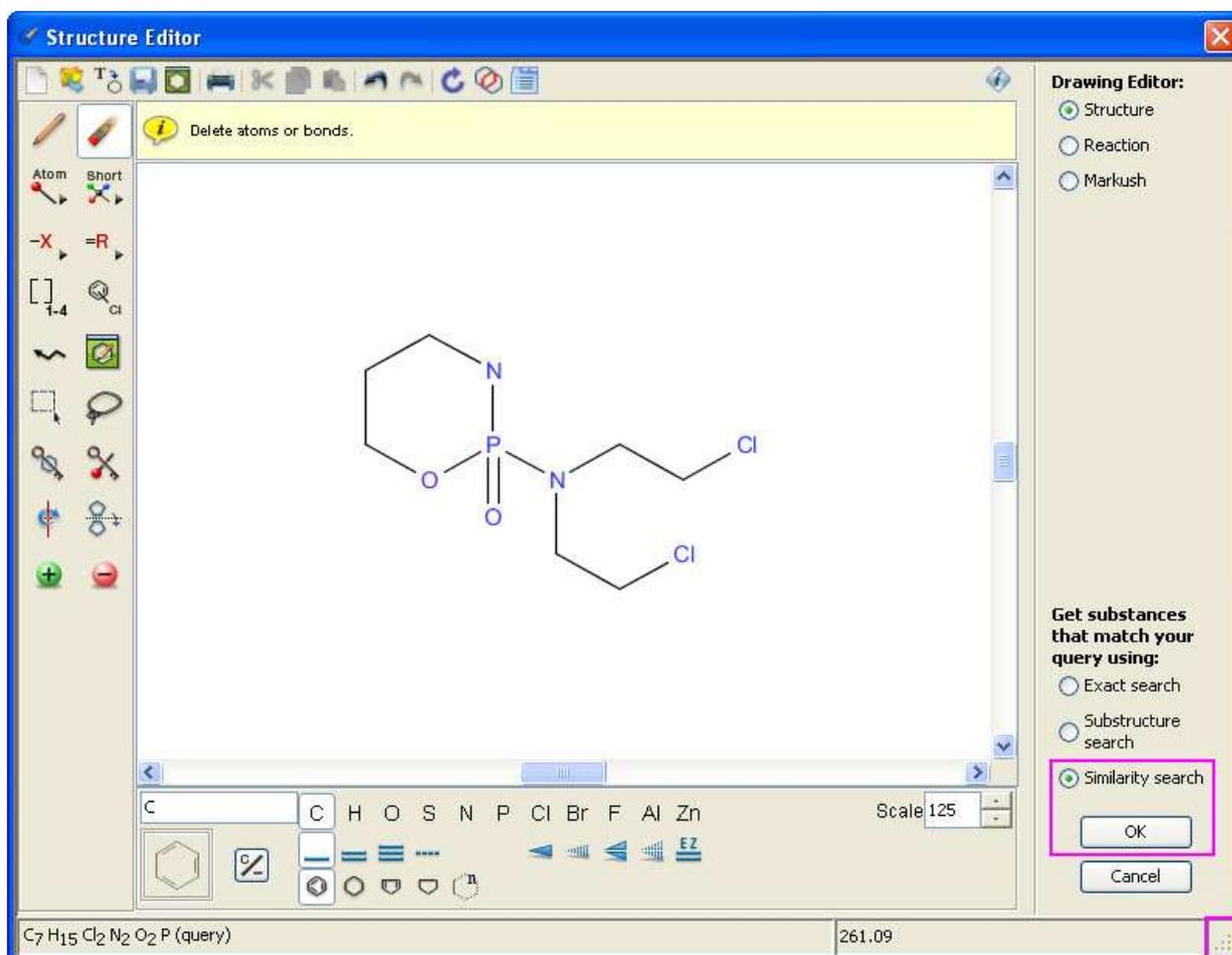
Некоторые возможности, полезные при поиске по фрагменту структуры

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

Поиск структурно-подобных веществ

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

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



Рекомендации:

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

Ограничения:

Поиски структурного подобия нельзя провести для структур, содержащих:

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

Структура загружается в окно поиска *Chemical Structure*.

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

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

5. Поиск выполняется по команде *Search*.

Explore Substances

Chemical Structure Chemical Structure ⓘ

Markush
Molecular Formula
Property **NEW**
Substance Identifier

ClCCN(CCCl)P(=O)(OCC1OCCO1)O

Click image to change structure or view detail

Search type: ⓘ

- Exact Structure
- Substructure
- Similarity

Show precision analysis

Characteristic(s)

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

Class(es) ⓘ

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

Studies ⓘ

- Analytical
- Biological
- Preparation
- Reactant or reagent

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

Similarity Candidates

9 Candidates 4 Selected

Select All Deselect All

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

Get Substances

7. Оценка ответов.

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

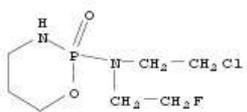
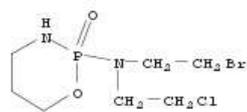
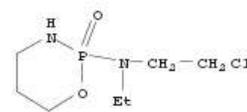
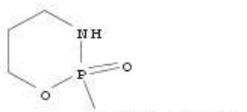
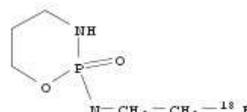
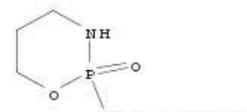
88 Substances 0 Selected

Select All Deselect All

Sort by: Similarity Score

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

View: [Icons]

<input type="checkbox"/> 1. Substance Detail 5001-29-6  C ₇ H ₁₅ Cl F N ₂ O ₂ P 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N-(2-chloroethyl)-N-(2-fluoroethyl) tetrahydro-, 2-oxide Score: 95	<input type="checkbox"/> 2. Substance Detail 13036-62-9  C ₇ H ₁₅ Br Cl N ₂ O ₂ P 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N-(2-bromoethyl)-N-(2-chloroethyl) tetrahydro-, 2-oxide Score: 95	<input type="checkbox"/> 3. Substance Detail 50650-73-2  C ₇ H ₁₆ Cl N ₂ O ₂ P 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N-(2-chloroethyl)-N-ethyltetrahydro-, 2-oxide Score: 95
<input type="checkbox"/> 4. Substance Detail 863331-87-7  C ₇ H ₁₅ Cl I N ₂ O ₂ P 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N-(2-chloroethyl)tetrahydro-N-(2- iodoethyl)-, 2-oxide Score: 95	<input type="checkbox"/> 5. Substance Detail 891203-08-0  C ₇ H ₁₅ Cl F N ₂ O ₂ P 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N-(2-chloroethyl)-N-[2-(fluoro-18F) ethyl]tetrahydro-, 2-oxide Score: 95	<input type="checkbox"/> 6. Substance Detail 1348384-36-0  C ₆ H ₁₃ Cl ₂ N ₂ O ₂ P 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N-(2-chloroethyl)-N-(chloromethyl) tetrahydro-, 2-oxide Score: 94

Анализ набора веществ

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

Вывод результатов

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

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

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

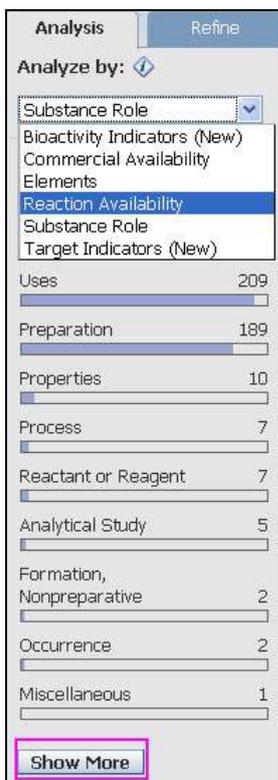
- 1. Substance Detail 50-18-0**: Shows the chemical structure of 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N,N-bis(2-chloroethyl) tetrahydro-, 2-oxide. The structure is a six-membered ring containing one nitrogen and one oxygen atom, with a phosphorus atom double-bonded to an oxygen and single-bonded to the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

On the right side, there is an "Analysis" sidebar. It has a dropdown menu for "Analyze by:" set to "Substance Role". Below this is a table of analysis results:

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

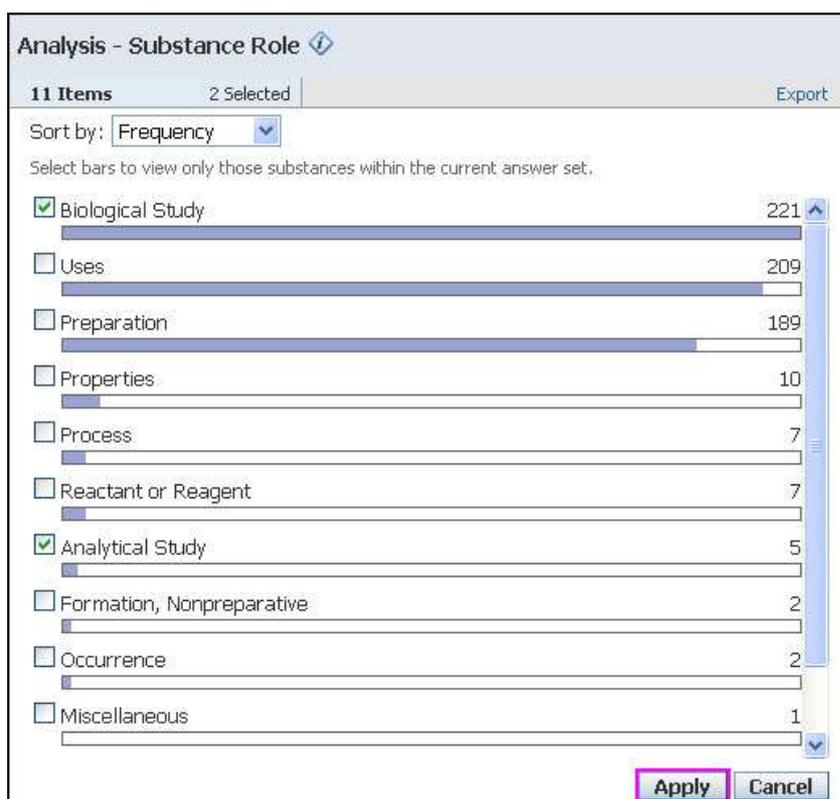
At the bottom of the sidebar, there is a "Show More" button.

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



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

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



Рекомендации:

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

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

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

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

The screenshot displays a software interface for chemical analysis. At the top, there are navigation tabs: Substances, Get References, Get Reactions, Tools, and Send to SciPlanner. Below the tabs, a status bar indicates '254 Substances' and '0 Selected'. A yellow banner highlights the message: '223 substances with the Substance Roles: Analytical Study, Biological Study are displayed'. Below this, there are buttons for 'Keep Analysis' and 'Clear Analysis'. The main area shows two substance detail panels. The first panel, labeled '1. Substance Detail 50-18-0', displays the chemical structure of 2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N,N-bis(2-chloroethyl) tetrahydro-, 2-oxide. The second panel, labeled '2. Substance Detail 6055-19-2 (Component: 50-18-0)', displays the chemical structure of the same compound as a hydrate (1:1) with H₂O. On the right side, there is an 'Analysis' panel with a 'Refine' button. It shows 'Analyze by:' set to 'Substance Role'. Below this, a table lists various roles and their counts:

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

A 'Show More' button is located at the bottom of the analysis panel.

Уточнение набора ответов веществ

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

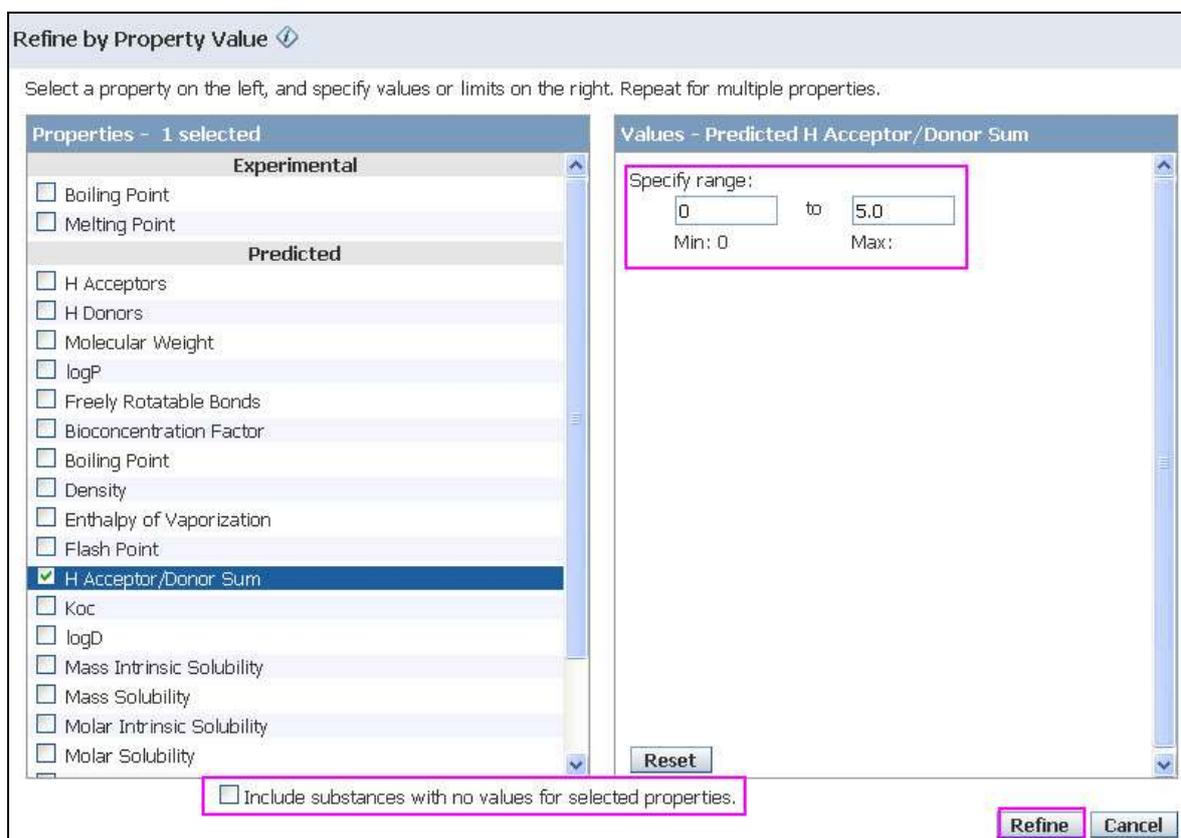
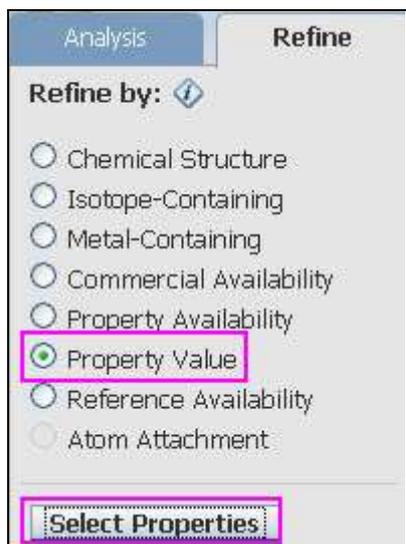
1. Для выбора критериев уточнения набора ответов используется закладка **Refine** справа от выведенных веществ.

The screenshot shows a web interface for a chemical database. At the top, there are navigation tabs: 'Substances', 'Get References', 'Get Reactions', 'Tools', and 'Send to SciPlanner'. Below this, there are search and sorting options. The main area displays six substance detail cards, each with a chemical structure and text description. On the right side, there is a 'Refine' sidebar with a 'Refine by:' section containing radio buttons for various criteria: Chemical Structure, Isotope-Containing, Metal-Containing, Commercial Availability, Property Availability, Property Value, Reference Availability, and Atom Attachment. Below this is a 'Chemical Structure:' section with a structure viewer and a 'Search type: Exact Structure' dropdown. At the bottom of the sidebar, there is a section 'Only retrieve substances that:' with several checkboxes for filtering results.

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

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

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



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

Рекомендации:

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

Include substances with no values for selected properties.

4. Оценка ответов.

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

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

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

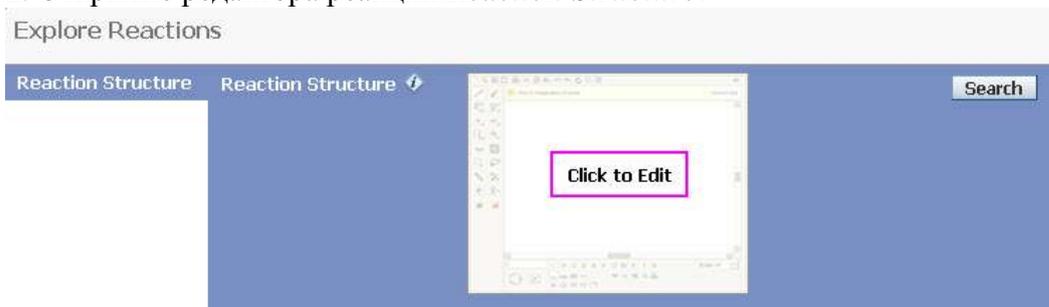
2. Substance Detail 60007-96-7
~38
ClCCN(CCCl)P(=O)(O)O
Absolute stereochemistry.
C₇ H₁₅ Cl₂ N₂ O₂ P
2H-1,3,2-Oxazaphosphorin-2-amine, N,N-bis(2-chloroethyl)tetrahydro-, 2-oxide, (2S)-
Experimental Properties

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

Поиск информации по реакциям

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

1. Открытие редактора реакций *Reaction Structure*:



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

Рекомендации:

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

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

4. Выбор типа поиска:

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

Возможности дальнейшего уточнения запроса в Scifinder:

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

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

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

Explore Reactions

Reaction Structure Reaction Structure

Search

C1=CC=C(C=C1)[N+](=O)[O-] (reactant) → C1=CC=C(C=C1)N (product)

Nitro (reactant) → AMINES (product)

Click image to change structure or view detail

Search type:

- Allow variability only as specified
- Substructure

Solvent(s) Select Solvents
Non-participating Functional Group(s) Select Groups
 Number of Steps
 Classification(s)

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

Source(s)

- Any source
- Patents only
- Sources other than patents

Publication Year(s)
 Examples: 1995, 1995-1999, 1995-, -1995

6. Оценка ответов.

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

Рекомендации:

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

The screenshot displays a web interface for chemical reactions. At the top, there are navigation buttons: 'Get References', 'Tools', and 'Send to SciPlanner'. Below this, a header indicates '220 Reactions' and '0 Selected'. A 'Sort by' dropdown menu is open, showing options: 'Relevance', 'Accession Number', 'Experimental Procedure', 'Number of Steps', 'Product Yield', and 'Publication Year'. To the right, there are buttons for 'Save', 'Print', and 'Export', along with a 'Display' menu showing icons for list, grid, and other views. The main content area shows two reaction entries. Each entry consists of a chemical reaction scheme (3-nitrobenzonitrile to 3-aminobenzonitrile), a yield percentage (86% and 91%), and a small icon. Below each reaction, there are two expandable options: 'Overview' and 'Experimental Procedure'. The interface also includes 'Select All' and 'Deselect All' buttons, and a pagination control showing 'Answers per Page [15]' with page numbers 1 through 15.

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



220 Reactions 0 Selected Save Print Export

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

Display:

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

▼ Overview

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

References

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

▼ Experimental Procedure

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

Quick View X

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

Reference Images **Substance Images**

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

Анализ набора реакций

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

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

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

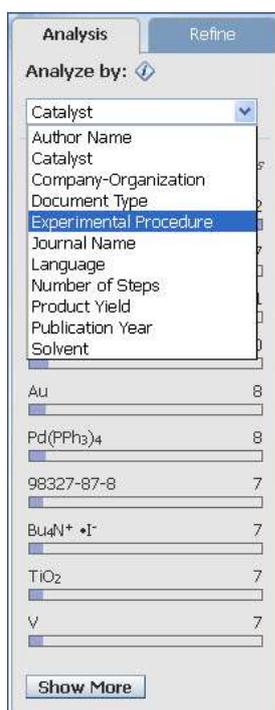
При анализе не создается новый набор ответов – создается временный фокус текущего набора.

The screenshot shows the SciFinder interface. The main window displays a chemical reaction: 4-nitrochlorobenzene is reduced to 4-chloroaniline with a 99% yield. Below the reaction, there is an 'Overview' section with 'Steps/Stages' and 'Notes'. The 'Notes' section describes the reaction as a solid-supported catalyst, green chemistry, chemoselective, and catalyst recyclable. A 'References' section is also visible. On the right side, there is an 'Analysis' panel with a 'Catalyst' dropdown menu and a list of catalysts with their respective counts. The 'Show More' button is highlighted with a pink box.

Catalyst	Count
Pd	122
Pt	17
Ni	11
Pd(OAc) ₂	10
Au	8
Pd(PPh ₃) ₄	8
98327-87-8	7
Bu ₄ N ⁺ Cl ⁻	7
TiCl ₄	7
V	7

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

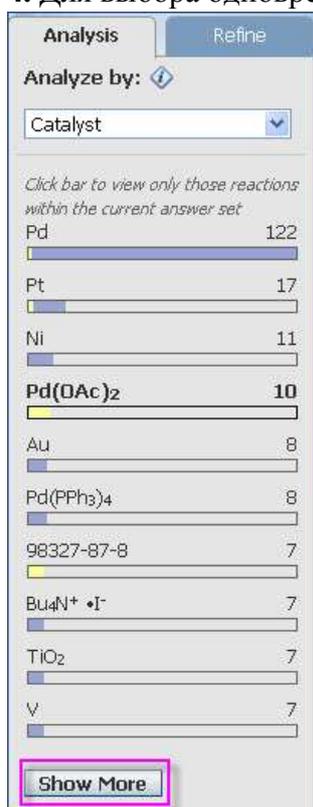
2. Для изменения категории анализа следует выбрать другие опции из ниспадающего меню *Analyze by*:



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

3. Для вывода реакций следует активировать соответствующий результат (планка окрасится в желтый цвет). Если эти реакции входят также в другие наборы, соответствующие планки также станут желтыми. В примере 10 реакций включают катализатор Pd(OAc)₂ и входят во множество из 122 реакций, катализируемых Pd и (или) его производными.

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

The screenshot displays the SciFinder interface. At the top, the 'Send to SciPlanner' button is highlighted with a pink box. Below it, a yellow banner indicates '131 reactions with the Catalysts Pd, Pd(OAc)2 are displayed'. The main area shows a reaction: 4-nitrophenol is reduced to 4-aminophenol with a 93% yield. The reaction details include reagents (R:Ethidine, C:Pd, S:PhMe), conditions (2 h, reflux; reflux → rt), and a reference to a 2009 paper by Niu, Wujin et al. On the right, the 'Analysis' panel shows a bar chart of catalyst counts: Pd (122), Pt (17), Ni (11), Pd(OAc)2 (10), Au (8), Pd(PPh3)4 (8), 08327-87-8 (7), Bu4N+ +I- (7), TiO2 (7), and V (7).

Уточнение набора реакций

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

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

The screenshot shows a web interface for a chemical reaction database. The main area displays a reaction: 4-nitrophenol is reduced to 4-aminophenol with a 99% yield. Below the reaction is an 'Overview' section with 'Steps/Stages' and 'Notes'. The 'Notes' mention a solid-supported catalyst and green chemistry. A 'References' section lists a paper by Jagadeesh, Rajenahally V. et al. from 2011. On the right, a 'Refine' sidebar is active, showing options to filter reactions by 'Reaction Structure', 'Product Yield', 'Number of Steps', 'Reaction Classification', 'Excluding Reaction Classification', and 'Non-participating functional groups'. A 'Reaction Structure' section shows a substructure of the product and a 'Refine' button.

Набор можно уточнять многократно при помощи любой комбинации следующих критериев:

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

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

Analysis Refine

Refine by: ▼

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

Product Yield:

100 %
Upper Limit
Example: 80

80 %
Lower Limit
Example: 20

Include answers that have no product yield

Refine

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

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

Add KMP Alert Reaction Structure substructure > reactions (423) > refine "80 - 100% yield" (351)

Reactions Get References Tools Send to SciPlanner

351 Reactions 0 Selected Save Print Export

Select All Deselect All Sort by: Relevance

- Relevance
- Accession Number
- Experimental Procedure
- Number of Steps
- Product Yield
- Publication Year

Answers per Page [15] 1 2 3 4 5 6 ... 24

Display: [Icons]

1. View Reaction Detail Single Step Hover over any step

O=[N+]([O-])c1ccc(NC(=O)N)cc1 → Nc1ccc(NC(=O)N)cc1 99%

Overview

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

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

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

Ресурсы сети Интернет

Химические ресурсы

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

Патентные ресурсы

1. Патенты Австралии: <http://pericles.ipaustralia.gov.au/ols/auspat/>
2. Патенты Канады: <http://brevets-patents.ic.gc.ca/opic-cipo/cpd/eng/introduction.html>
3. Патенты Германии:
<http://depatisnet.dpma.de/DepatisNet/depatisnet?window=1&space=menu&content=index&action=recherche>
4. Патентные заявки Индии: <http://www.indianpatents.org.in/db/testmaina.asp>
5. Патенты Индии и других стран: <http://patinfo.nic.in/>
6. Патентная информационно-поисковая система Индии: <http://ipindia.nic.in/ipirs1/patentsearch.htm>
7. Платформа Espacenet (БД Worldwide – опубликованные заявки 90+ стран, БД EPespacenet – полные тексты опубликованных европейских заявок, БД WIPO-espacenet – полные тексты опубликованных заявок Patent Cooperation Treaty):
http://worldwide.espacenet.com/quickSearch?locale=en_EP
8. Российские патентные документы на русском и английском языках (БД рефератов Федерального института промышленной собственности):
<http://www.fips.ru/cdfi/Fips2009.dll/DB>
9. Поисковая машина FreePatentsOnline (патентные документы European Patent Office, Word Intellectual Property Organization / Patent Cooperation Treaty, США, ФРГ, Японии): <http://www.freepatentsonline.com/search.html>
10. Патентный поиск Google: <http://www.google.com/patents>
11. Патенты Венгрии: <http://epub.hpo.hu/e-kutatas/?lang=EN#>
12. IP.com Intellectual Property Library (международные патентные публикации):
<http://ip.com/search.html>
13. IP.com Prior Art (технические раскрытия компаний): <http://priorartdatabase.com/>
14. Патенты Израиля: <http://www.ilpatsearch.justice.gov.il/UI/MainPage.aspx>
15. IPDL (поисковый интерфейс на английском языке патентного ведомства Японии):
http://www.ipdl.inpit.go.jp/homepg_e.ipdl
16. БД патентов и заявок, опубликованных в Сингапуре: <http://www.epatents.gov.sg/PE/>
17. Patent Lens (полные тексты патентов European Patent Office, Word Intellectual Property Organization, Австралии, США): <http://www.patentlens.net/patentlens/structured.html>
18. Patentscope (национальные и международные патентные коллекции):
<http://patentscope.wipo.int/search/en/search.jsf>
19. Патенты Филиппин: <http://patents.ipophil.gov.ph/patsearch2/>

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