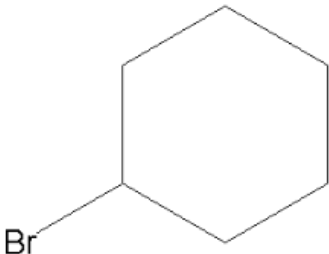


ChemSynthesis

В своей основе **ChemSynthesis** - это библиографическая база данных, обогащенная химическими структурами, возможностью структурного поиска и некоторыми полезными вспомогательными инструментами.

Область применения ChemSynthesis — обнаружение библиографического описания той статьи, в которой приведена методика синтеза заданного вещества.

Типичная запись в базе данных имеет вид:

Cyclohexyl bromide		
Molecular Formula:	C ₆ H ₁₁ Br	
Molecular Weight:	163.057 g/mol	
Ads by Google	Synthesis MSDS CAS Number Mountain Bromo	
Cas Number:	108-85-0	
InChIKey:	AQNQQHJNRPDOQV-UHFFFAOYAD	
Smiles:	BrC1CCCCC1	
		
Synthesis Reference		
Canadian Journal of Chemistry, 50, p. 3109, 1972 Journal of the American Chemical Society, 112, p. 8212, 1990 The Journal of Organic Chemistry, 45, p. 1638, 1980		
Synonym Name(s)		
bromo-cyclohexane bromocyclohexane		
Properties		
Melting Point: n/a	Boiling Point: 166-167 °C	Density: 1.33 g/cm ³
H1 NMR Spectrum:	Predict NMR spectrum	
Associated Data Sources		
ChemSpider ID: 7672 PubChem Compound ID: 7960		

Рекламная вставка

Полезная справочная информация

Ссылки на статьи, где содержатся методики синтеза

Полезная справочная информация

По состоянию на февраль 2012 г., в базе данных содержатся сведения из следующих журналов:

Journal of the American Chemical Society
Canadian Journal of Chemistry
Chemical and Pharmaceutical Bulletin
Synthetic Communications
Journal of Heterocyclic Chemistry
Journal of Medicinal Chemistry

The Journal of Organic Chemistry
Organic Syntheses
Synthesis
Chemistry Letters
Tetrahedron
Tetrahedron Letters

В режиме *Browse* можно просмотреть все записи, извлеченные из каждого из журналов; записи, сгруппированные по классам соединений и по функциональным группам. Эти списки никак не структурированы, поэтому в обычной поисковой работе ценность их невелика.

В режиме *Text Search* возможен поиск:

- по названию вещества (и тривиальному, и систематическому),
- по *CAS RN* и некоторым иным регистрационным номерам,
- по *InChIKey* (и по полному, и по первой части кода),
- по брутто-формуле (и по полной, и по ее фрагменту).

Простейший бланк находится на Главной странице:

| [Home](#) | [Text Search](#) | [Structure Search](#) | [About](#) |

Ссылка *Text Search* ведет к еще двум бланкам текстового поиска.

Простой бланк:

Усложненный бланк:

<input type="text" value="Chemical Name"/>	<input type="text" value="Cas Number"/>	<input type="text" value="Synthesis Reference"/>
<input type="text" value="Molecular Formula"/>	<input type="text" value="Molecular Weight"/>	<input type="text" value="InChIKey"/>
<input type="button" value="Search!"/>		

Графа для записи названия журнала

Структурный поиск

Для формирования структурного запроса используется апплет *JME*.

Апплет содержит полезное дополнение: меню с функциональными группами.

Для того, чтобы нарисовать функциональную группу, следует выбрать ее в меню, а затем щелкнуть в структуре по тому атому, к которому эта группа должна быть присоединена.

Контрольное задание

Проведите поиск в базе данных, найдите ссылку на методику синтеза, найдите соответствующую статью, загрузите статью и покажите преподавателю то место в статье, где описывается методика синтеза следующего соединения:

