



Katedra za farmacevtsko kemijo

Podatkovne baze – načrtovanje sinteze

15. Vaja

Cilji vaje

- ◆ Seznaniti študente z možnostjo brskanja po *CA – Chemical Abstracts* s pomočjo *SciFinder Scholar*.
- ◆ Seznaniti študente z dostopnostjo znanstvene literature iz področja farmacevtske kemije in organske sinteze.
- ◆ Kritično vrednotenje informacij iz podatkovnih baz.

Brskanje/iskanje po podatkovnih bazah

- ◆ preverjanje že znanih sintez; izogibanje odkrivanju že odkritega, izogibanje patentni zaščiti
- ◆ pridobivanje novih sinteznih idej – iskanje reakcijskih poti za prekurzorje
- ◆ iskanje dostopnosti izhodnih reagentov, vključno s cenami

Chemical Abstracts (Service) - CAS

- ◆ *CA* (najobsežnejša) podatkovna baza znanstvene literature na področju kemije in sorodnih znanosti
- ◆ *CPlus*
 - ◆ bibliografski podatki in izvlečki člankov iz več kot 9000 revij iz 150 držav od leta 1907 dalje, podatki o disertacijah, konferenčnem gradivu, tehničnih publikacijah in knjigah
 - ◆ preko 4 milijone zapisov o patentih, podeljenih pri več kot 45 patentnih uradih, z izvlečki v angleškem jeziku
- ◆ *Registry*
 - ◆ seznam CAS registrskih števil kemijskih substanc, proteinskih in nukleotidnih zaporedij

Chemical Abstracts (Service) - CAS

- ◆ Kemijske podatke pripravlja t. i. CAS Registry System
- ◆ identificira vsako novo spojino:
 - ◆ *CAS registry number* oz. *CAS registrsko številko*
 - ◆ ime ali *CAS index name* (ni enako IUPAC imenu)
 - ◆ grafična slika oz. kemijska struktura

SciFinder Scholar

- ◆ *SciFinder* - programska oprema namenjena profesionalnim kemikom v komercialnih organizacijah
- ◆ *SciFinder Scholar* - namenjen uporabi na akademskih ustanovah
- ◆ grafični vmesnik, omogoča iskanje po kemijskih strukturah

SciFinder Scholar

Zbirke:

◆ Registry in CPlus

- ◆ že predstavljena

◆ CASREACT

- ◆ informacije o eno- in večstopenjskih kemijskih reakcijah

◆ CHEMLIST

- ◆ podatki o registriranih ali nevarnih snoveh od 1979 dalje

◆ CHEMCATS

- ◆ zbirka podatkov o komercialno razpoložljivih kemikalijah

◆ MEDLINE

Praktično delo

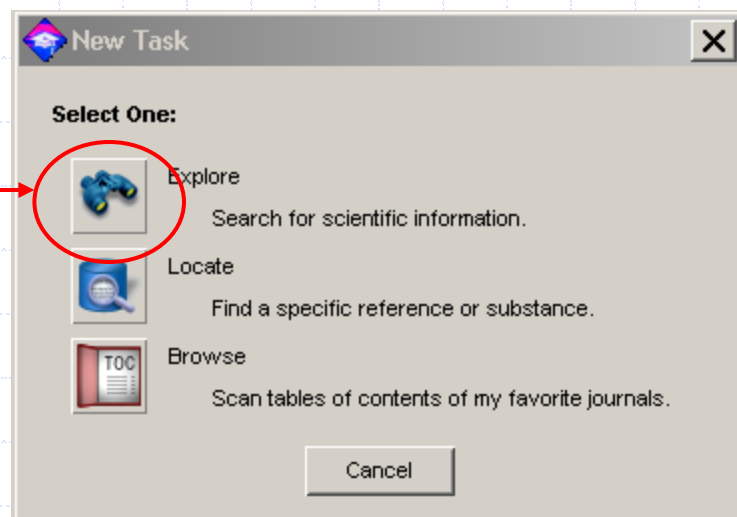
- ◆ s pomočjo *SciFinder Scholar* iskati vsaj 2 alternativni sintezi: *S*-propranolol, lidokain, enalapril in kloramfenikol
- ◆ Alternativne sinteze ovrednotimo:
 - ◆ število stopenj
 - ◆ čas izvedbe
 - ◆ praktičnost izvedbe (število uporabljenih reagentov/katalizatorjev, zahtevnost postopka)
 - ◆ izkoristki posameznih stopenj in celokupen izkoristek
 - ◆ toksičnost izhodnih reagentov
- ◆ Rezultate iskanja vnesemo v priložene dnevnike za izpolnjevanje

Praktično delo

- ◆ *SciFinder Scholar* dostopimo preko <http://www.ctk.uni-lj.si/>
- ◆ Izberemo meni **podatkovne zbirke**
- ◆ Izberemo **SciFinder Scholar**
- ◆ Še 1x izberemo **SciFinder Scholar**

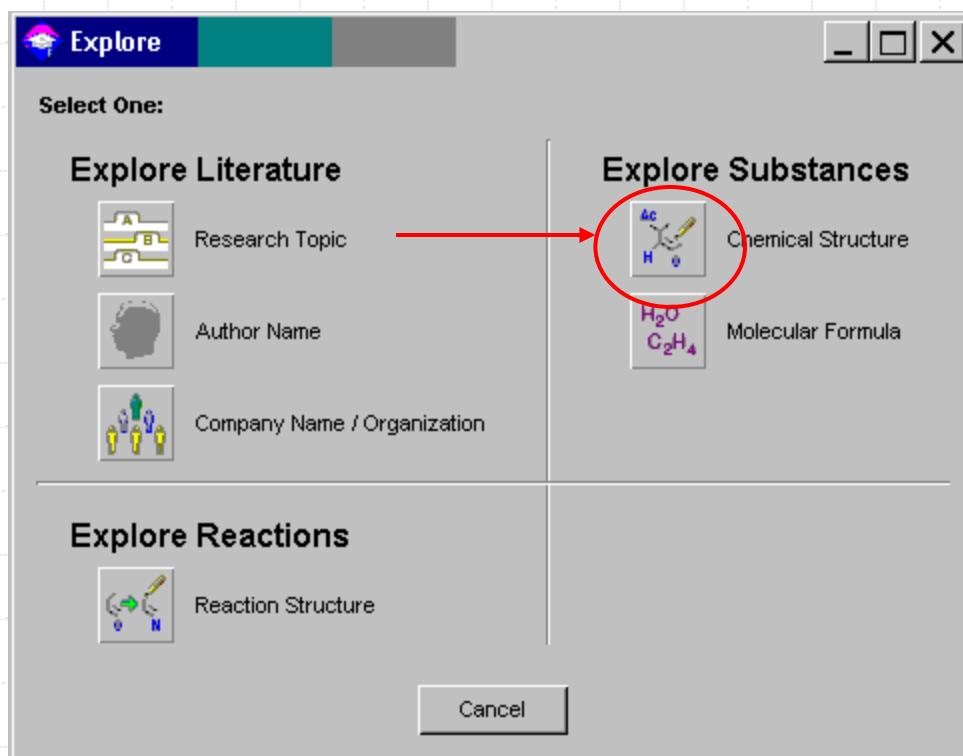
Praktično delo

◆ Odpre se okno:



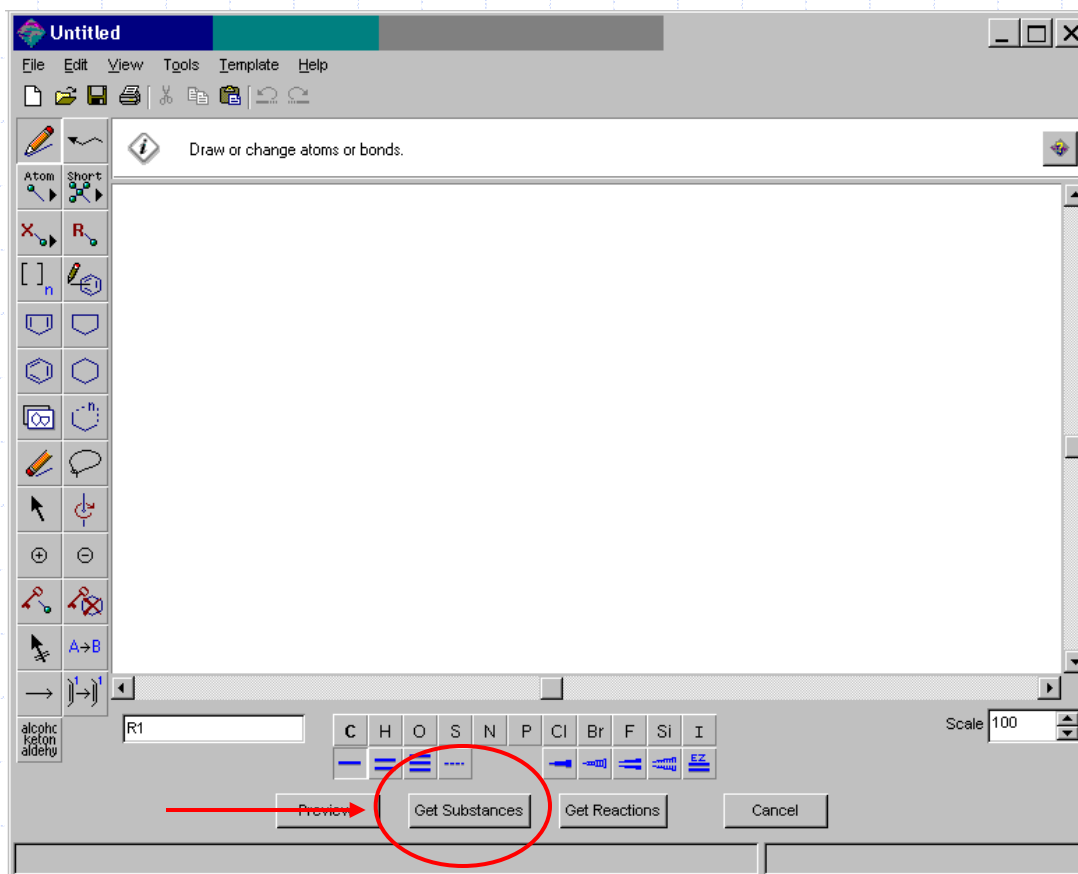
Praktično delo

◆ Odpre se okno:



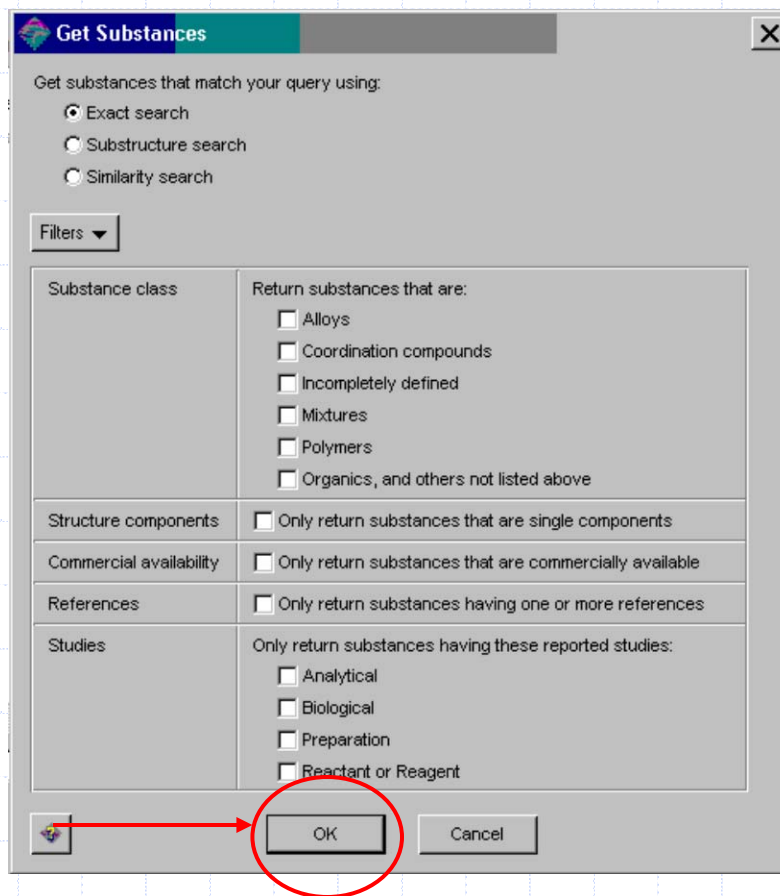
Praktično delo

◆ Odpre se okno:



Praktično delo

◆ Odpre se okno:



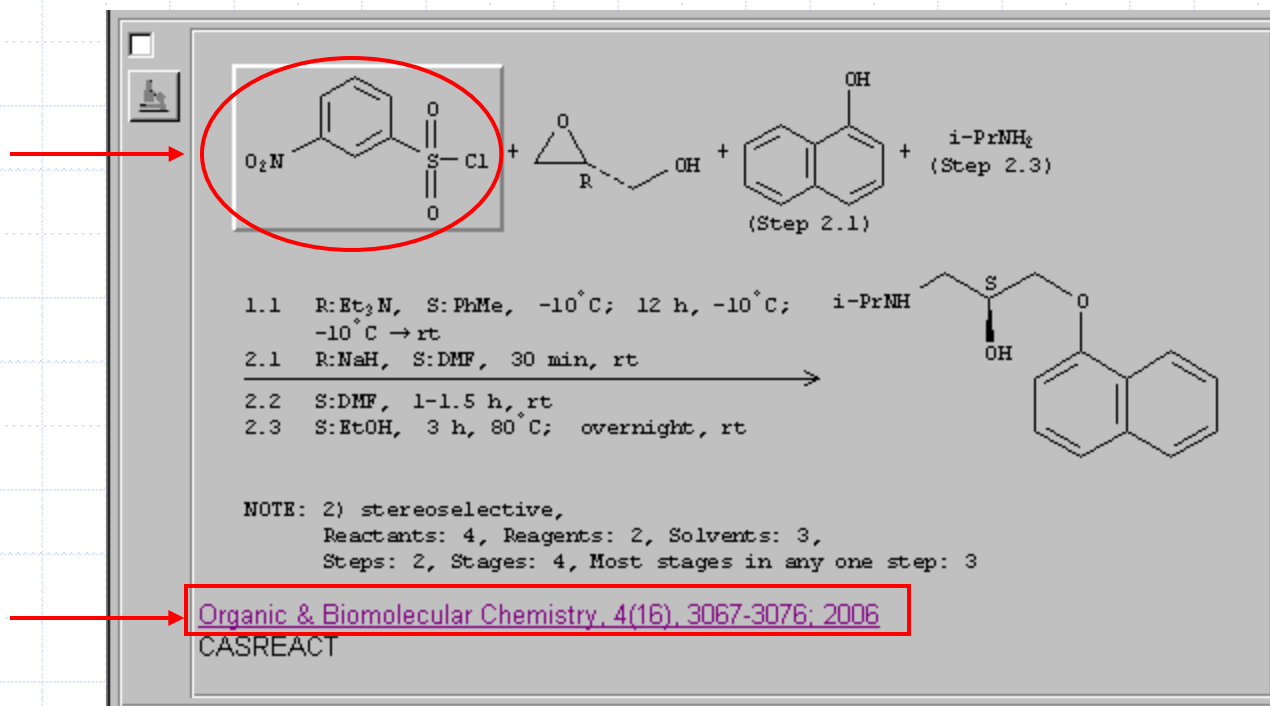
Praktično delo

- ◆ Med zadetki iščemo tiste, kjer so opisane reakcije, produkt

The image shows two overlapping windows from a software application. The left window is a search result entry for '702699-44-3'. It contains the text 'Component Number 1', 'No Structure Diagram Available', 'Component Number 2', and a chemical structure of a complex organic molecule. At the bottom, it says '~1 Reference REGISTRY'. A red circle highlights the 'A+B' icon in the top right corner of this window, with a red arrow pointing to the 'Reaction Role' dialog box on the right. The 'Reaction Role' dialog box has a title bar 'Reaction Rol' and a close button. It contains the text 'Select a reaction role:' followed by a list of radio button options: 'Product', 'Reactant', 'Reagent', 'Reactant or Reagent', 'Catalyst', 'Solvent', and 'Any role'. The 'Product' option is selected and circled in red. At the bottom of the dialog are 'OK' and 'Cancel' buttons.

Praktično delo

- ◆ Stereokemijske lastnosti učinkovine, ali je spojina v obliki soli ali ne
- ◆ Reakcija:

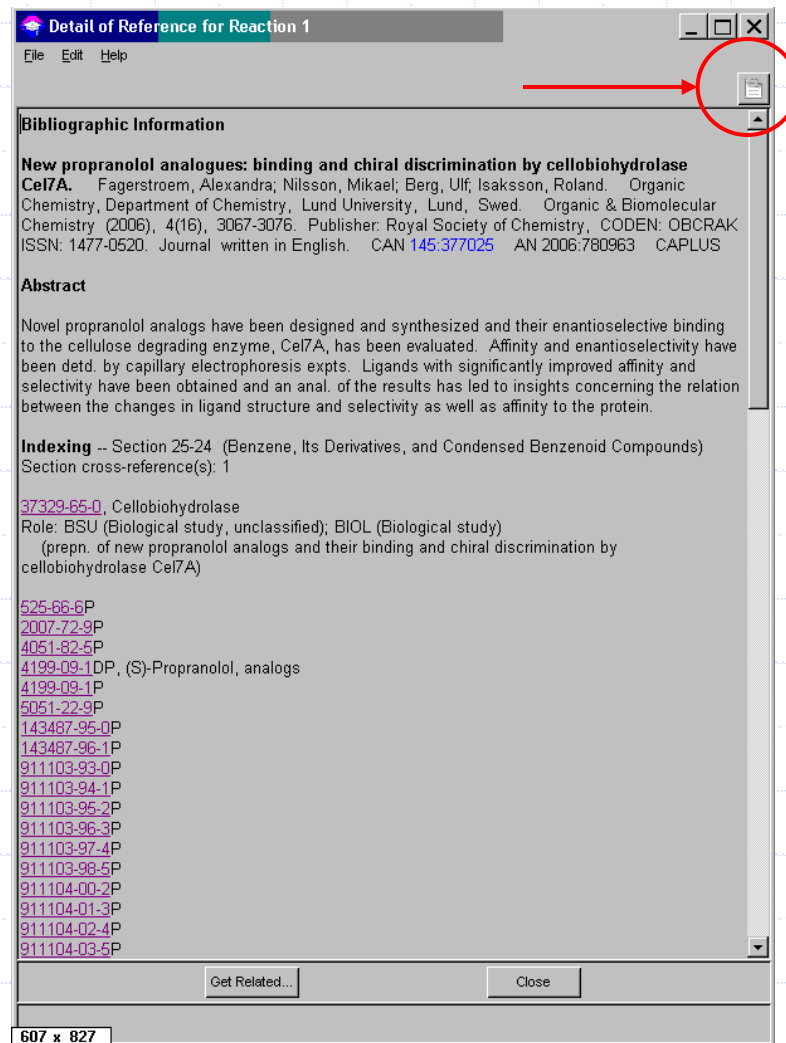


Praktično delo

- ◆ Zapišite si reakcijsko shemo, število in časovno trajanje posameznih reakcijskih stopenj
- ◆ S klikom na posamezno spojino oz. na njeno strukturo lahko poiščemo podatke o tej spojini
- ◆ Poiščite literaturni vir s klikom na pobarvani del teksta

Praktično delo

◆ dostopite do referenčnega članka/patenta preko klika na ikono knjige v zgornjem desnem kotu



Detail of Reference for Reaction 1

File Edit Help

Bibliographic Information

New propranolol analogues: binding and chiral discrimination by cellobiohydrolase Cel7A. Fagerstrom, Alexandra; Nilsson, Mikael; Berg, Ulf; Isaksson, Roland. Organic Chemistry, Department of Chemistry, Lund University, Lund, Swed. Organic & Biomolecular Chemistry (2006), 4(16), 3067-3076. Publisher: Royal Society of Chemistry, CODEN: OBCRAK ISSN: 1477-0520. Journal written in English. CAN [145.377025](#) AN 2006:780963 CAPLUS

Abstract

Novel propranolol analogs have been designed and synthesized and their enantioselective binding to the cellulose degrading enzyme, Cel7A, has been evaluated. Affinity and enantioselectivity have been detd. by capillary electrophoresis expts. Ligands with significantly improved affinity and selectivity have been obtained and an anal. of the results has led to insights concerning the relation between the changes in ligand structure and selectivity as well as affinity to the protein.

Indexing -- Section 25-24 (Benzene, Its Derivatives, and Condensed Benzenoid Compounds)
Section cross-reference(s): 1

[37329-65-0](#), Cellobiohydrolase
Role: BSU (Biological study, unclassified); BIOL (Biological study)
(prepn. of new propranolol analogs and their binding and chiral discrimination by cellobiohydrolase Cel7A)

[525-66-6](#)P
[2007-72-9](#)P
[4051-82-5](#)P
[4199-09-1](#)DP, (S)-Propranolol, analogs
[4199-09-1](#)P
[5051-22-9](#)P
[143487-95-0](#)P
[143487-96-1](#)P
[911103-93-0](#)P
[911103-94-1](#)P
[911103-95-2](#)P
[911103-96-3](#)P
[911103-97-4](#)P
[911103-98-5](#)P
[911104-00-2](#)P
[911104-01-3](#)P
[911104-02-4](#)P
[911104-03-5](#)P

Get Related... Close

607 x 827

Praktično delo

- ◆ Če ni dostopa:
- ◆ <http://ejournals.ebsco.com/home.asp>
- ◆ <http://cobiss.izum.si/>
- ◆ Preverite dostopnost v Sloveniji

Praktično delo

- ◆ Podatki o toksičnosti oziroma varnostni listi (t. i. MSDS ali »material safety data sheet«)
- ◆ Sigma-aldrich-fluka:
http://www.sigmaaldrich.com/Local/SA_Splash.html.
- ◆ Acros Organics: <http://www.acros.be/>
- ◆ Merck KgaA:
<http://www.merck.de/servlet/PB/menu/1001723/index.html>.

Praktično delo

- ◆ Podatke vnesite v pripravljen dnevnik

