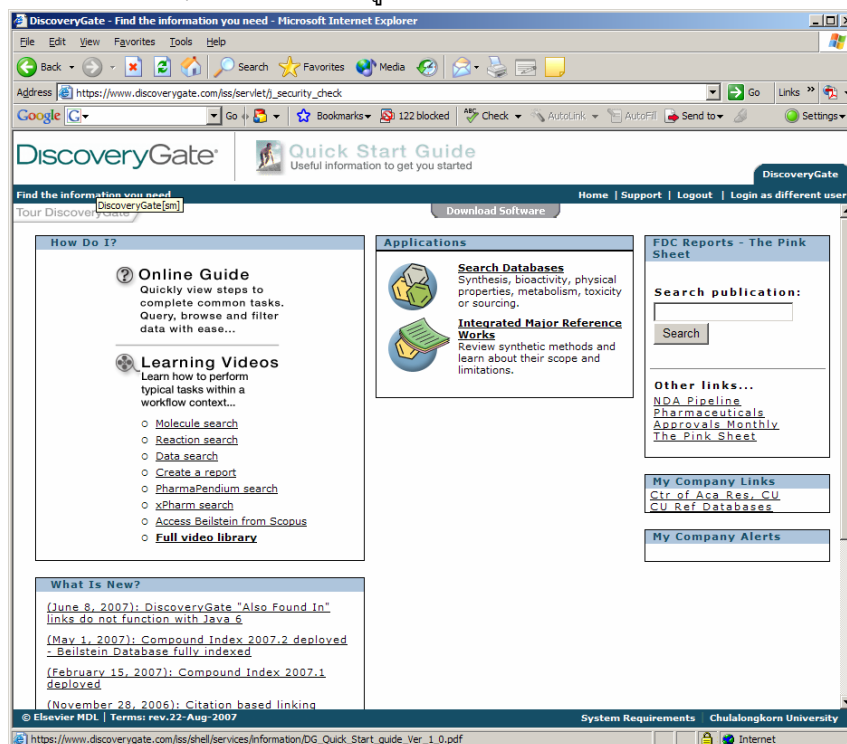


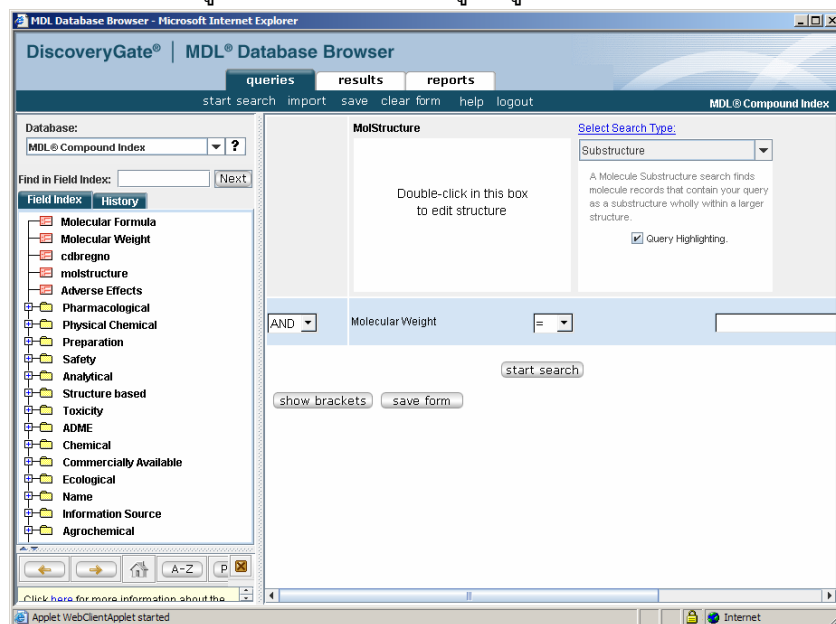
วิธีการใช้ฐานข้อมูล DiscoveryGate ระดับพื้นฐาน (revision 26 Oct 2007)

รศ.ดร.ธีรยุทธ วิไลวัลย์

1. เข้าไปที่เว็บไซต์ของ DiscoveryGate ที่ <http://www.discoverygate.com> (ใช้ได้เฉพาะเครื่องที่อยู่ในระบบ LAN ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัยเท่านั้น) จะเห็นหน้าจอดังรูป

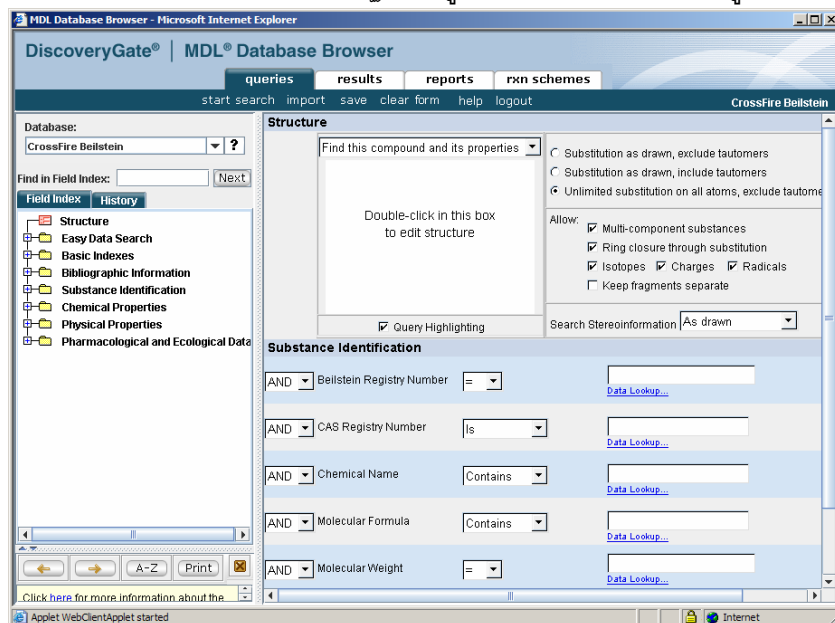


2. คลิกที่ Search Databases รอสักครู่จะเห็นหน้าจอสืบค้นข้อมูลดังรูป

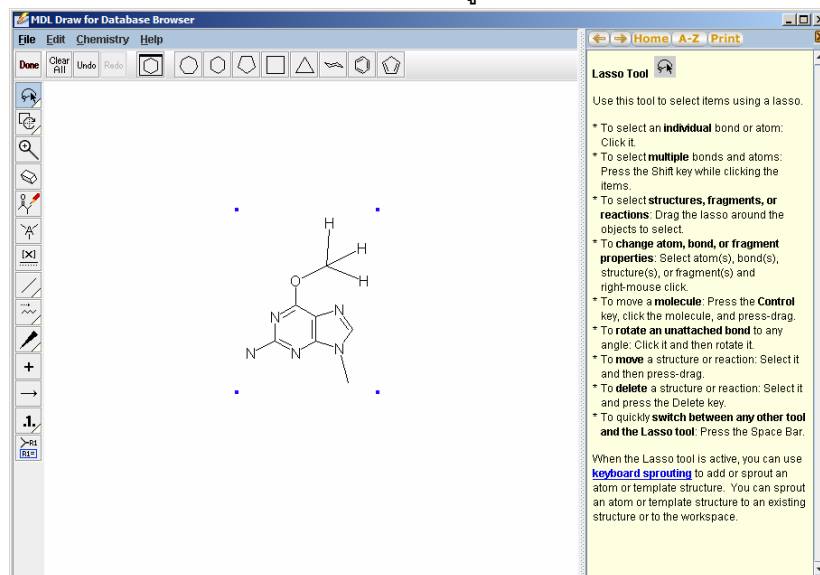


ถ้าไม่พบหน้าจอดังกล่าวอาจเนื่องมาจาก security setting หรือยังไม่ได้ติดตั้ง Java Runtime Environment โปรดปรึกษาผู้ดูแลระบบของท่าน

3. ในกรอบดาว์นลิสต์ภายใต้ Database ให้คลิกเลือกฐานข้อมูล Crossfire Beilstein รอสักครู่จะเห็นหน้าจอดังแสดง

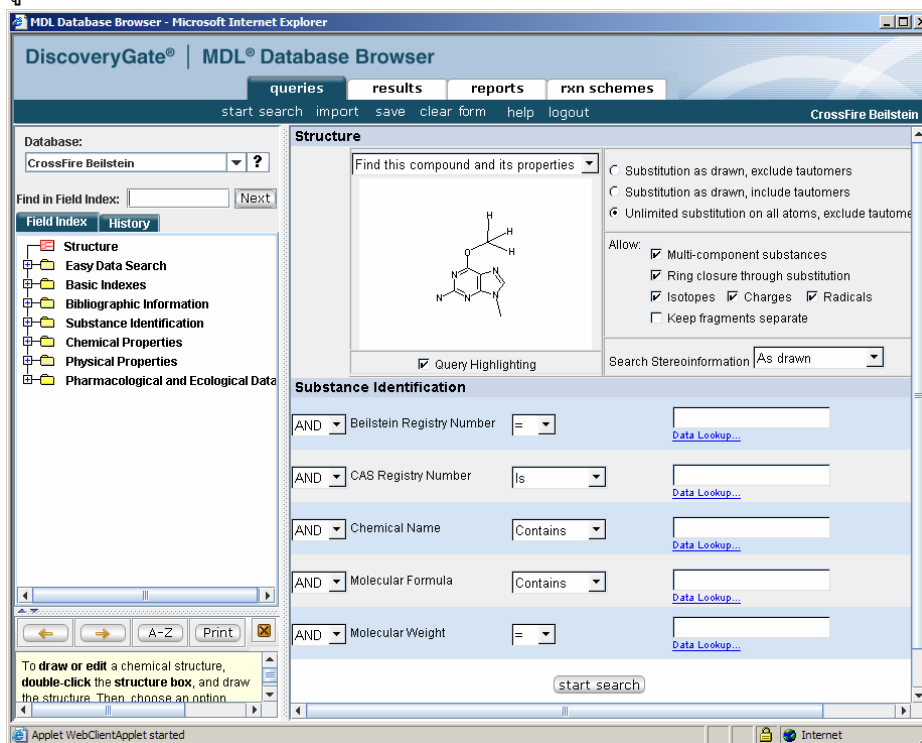


4. ดับเบิลคลิกในช่องที่เขียนว่า Double-click in this box to edit structure จะมีหน้าต่างวาดโครงสร้างเปิดขึ้นมา ให้วาดโครงสร้างสารที่ต้องการจะสืบค้น โดยอาจวาดเพียงบางส่วนก็ได้ ตำแหน่งที่ไม่ต้องการให้มีการแทนที่ควรเติมไฮโดรเจนอะตอมเพื่อบล็อกตำแหน่งนั้นไว้ด้วยจะทำให้ค้นข้อมูลได้เร็วขึ้น เมื่อเสร็จแล้วคลิก Done

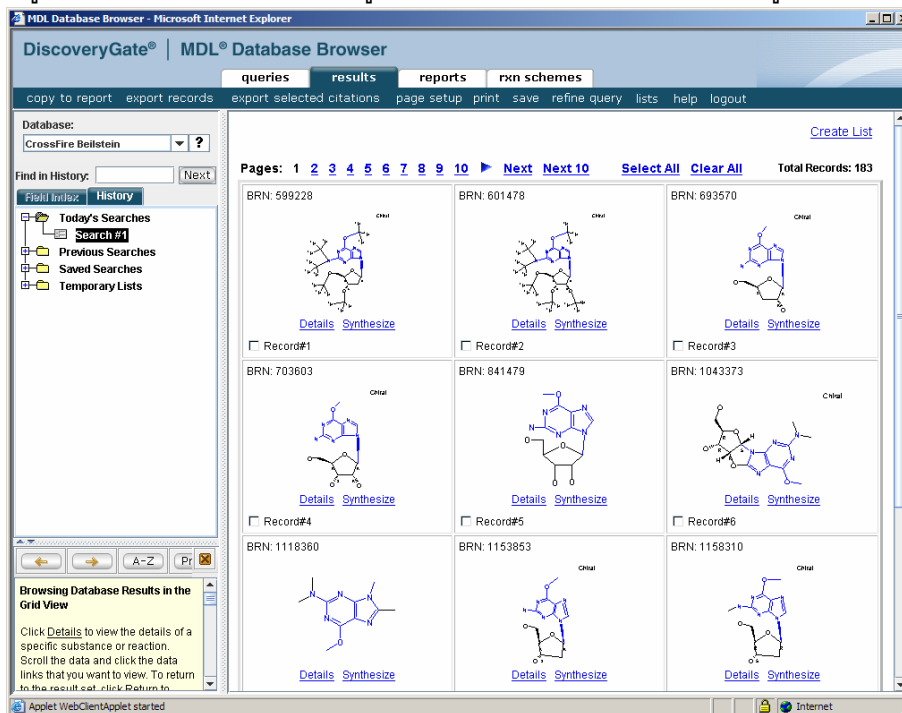


5. เมื่อคลิก Done โครงสร้างที่วาดไว้จะถูกส่งผ่านไปที่ structure query ซึ่งสามารถกำหนดเงื่อนไขการค้นได้ 3 แบบ คือโครงสร้างที่เหมือนกับวาดทุกประการโดยไม่รวมทอโทเมอร์ โครงสร้างที่เหมือนกับวาดทุกประการรวมทอโทเมอร์

ด้วย และโครงสร้างที่มีโครงสร้างที่วาดเป็นส่วนประกอบ (substructure search) ในที่นี้จะเลือกแบบสุดท้าย และยังสามารถกำหนดเงื่อนไขการสืบค้นอื่นๆ ได้อีก เช่น โดยชื่อ สูตรโมเลกุล CAS No. เป็นต้น เสร็จแล้วคลิกปุ่ม start search ซึ่งอยู่ทางด้านล่างของฟอร์ม โปรแกรมจะเริ่มทำงาน



6. หากพบข้อมูลที่ต้องการ โปรแกรมจะแสดงอยู่ใน Tab Results โดยสามารถคลิกเข้าไปดูรายละเอียดได้



7. เช่นเมื่อคลิก Details ของโครงสร้างใน Record ที่ 6 จะพบข้อมูลดังนี้

MDL Database Browser - Microsoft Internet Explorer

DiscoveryGate® | MDL® Database Browser

queries results reports rxn schemes

copy to report export records export selected citations page setup print save refine query lists help logout

Database: CrossFire Beilstein

Find in History: [input] Next

Flight toolbar History

Today's Searches
Search #1
Previous Searches
Saved Searches
Temporary Lists

Use as Query Synthesize
☐ Select current record

Available Data
Click on a link to add the information to this page
☐ Set current view as default
Melting Point (1) Substance Identification (1)
UVVIS Spectroscopy (1)
Show Reactions for this Substance Show Citations for this Substance

Substance Identification (hide)

Substance Identification record 1 of 1

Beilstein Registry Number	1043373
Beilstein Preferred RN	59881-53-7
CAS Registry Number	59881-53-7
Chemical Name	<ul style="list-style-type: none"> (6aR)-2-dimethylamino-8c-hydroxymethyl-4-methoxy-(6a,9a)-6a,7,8,9a-tetrahydro-furo[2,3'-b']pyridine N⁴,N⁶,C⁸-trimethyl-a-9,C^{8'}-cyclo-guanosine
Fragment Molecular Formula	Molecular Weight 323.31
Molecular Formula	C ₁₃ H ₁₇ N ₅ O ₅
Lawson Number	32563, 2817, 289
Structure Keyword	Stereo compound
Type of Substance	heterocyclic
Constitution ID	993789
Tautomer ID	990074
Beilstein Reference	5-27
Entry Date	1988/11/29
Update Date	1.0.0.0/05/11.0

Browsing Database Results in the Single-Record View

Use the check box to select those results that you want to copy to a report, export, or view in another database. Then click the Copy to Report button. Export Records

Applet WebClientApplet started

ซึ่งฟิลด์ที่สำคัญคือสมบัติทางกายภาพ ปฏิกริยา (reactions) วิธีสังเคราะห์ (synthesize) เอกสารอ้างอิงที่เกี่ยวข้อง (citations) โดยแต่ละสารอาจมีข้อมูลไม่เท่ากัน ซึ่งสามารถคลิกที่หัวข้อต่างๆ เพื่อดูรายละเอียดได้

8. เมื่อคลิกที่ synthesize โปรแกรมจะย้ายไปที่ Tab Rxn Scheme และแสดงสมการที่เกี่ยวข้องกับการสังเคราะห์สารนี้ และเมื่อคลิกที่ details ก็จะไปสู่วิธีการโดยละเอียดพร้อมทั้งเอกสารอ้างอิงที่เกี่ยวข้อง

MDL Database Browser - Microsoft Internet Explorer

DiscoveryGate® | MDL® Database Browser

queries results reports rxn schemes

copy to report export records export selected citations page setup print save refine query help logout

Database: CrossFire Beilstein

Find in Rxn Tree: [input] Next

Rxn Tree History

Substance 1043373

Reaction 926883

Substance 1180059

Reaction 1270095

The Rxn Schemes tab displays a hierarchy of reaction pathways beginning with the final product. To expand the reaction tree, click the + sign in front of a substance or a reaction folder. As you expand the reaction tree, you see the full synthetic scheme appear in the workspace on the right.

Click Details below a reaction step to view reaction

Applet WebClientApplet started

Synthetic Scheme for Substance 1043373

Chemical reaction scheme showing the synthesis of Substance 1043373 from precursors.

Details for Reaction 926883

MDL Database Browser - Microsoft Internet Explorer

DiscoveryGate® | MDL® Database Browser

queries results reports rxn schemes

copy to report export selected citations page setup print save refine query help logout CrossFire Beilstein

Database: CrossFire Beilstein

Find in Rxn Tree: [] Next

Rxn Tree History

Substance 1043373

Reaction 926683

Substance 1180059

Reaction 1270095

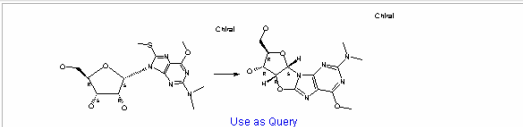
The Rxn Schemes tab displays a hierarchy of reaction pathways beginning with the final product. To expand the reaction tree, click the + sign in front of a substance or a reaction folder. As you expand the reaction tree, you see the full synthetic scheme appear in the workspace on the right.

Click Details below a reaction step to view reaction conditions and citation information.

Return to Reaction Scheme

CrossFire Beilstein Reaction 926683

Select all citations / Deselect all citations



Use as Query

Reaction

Reaction record 1 of 1

Reaction ID	926683				
Reactant	<table border="1"> <tr> <td>Reactant BRN</td> <td>1180059</td> </tr> <tr> <td>Reactant</td> <td>1-(2-dimethylamino-6-methoxy-8-methylsulfanyl-purin-9-yl)-α-D-1-deoxy-ribofuranose</td> </tr> </table>	Reactant BRN	1180059	Reactant	1-(2-dimethylamino-6-methoxy-8-methylsulfanyl-purin-9-yl)-α-D-1-deoxy-ribofuranose
Reactant BRN	1180059				
Reactant	1-(2-dimethylamino-6-methoxy-8-methylsulfanyl-purin-9-yl)-α-D-1-deoxy-ribofuranose				
Product	<table border="1"> <tr> <td>Product BRN</td> <td>1043373</td> </tr> <tr> <td>Product</td> <td>(6aR)-2-dimethylamino-8c-hydroxymethyl-4-methoxy-(6aR,9ac)-6a,7,8,9a-tetrahydro-1H-pyrimido[4,5-b]pyridine</td> </tr> </table>	Product BRN	1043373	Product	(6aR)-2-dimethylamino-8c-hydroxymethyl-4-methoxy-(6aR,9ac)-6a,7,8,9a-tetrahydro-1H-pyrimido[4,5-b]pyridine
Product BRN	1043373				
Product	(6aR)-2-dimethylamino-8c-hydroxymethyl-4-methoxy-(6aR,9ac)-6a,7,8,9a-tetrahydro-1H-pyrimido[4,5-b]pyridine				
No of Reaction Details	1				
Reaction Entry Date	1988/06/27				
Reaction Update Date	1988/06/27				

Top of Page

Reaction Details

Reaction Details record 1 of 1

Citation Pointer	154503
------------------	--------

9. ข้อมูลที่ค้นได้สามารถส่งออกไปที่รายงานได้โดยการคลิก copy to report กด OK จะได้รายงานที่สามารถพิมพ์ออกทางเครื่องพิมพ์หรือเซฟไว้เป็น PDF ไฟล์ได้

MDL Database Browser - Microsoft Internet Explorer

DiscoveryGate® | MDL® Database Browser

queries results reports rxn schemes

copy to report export selected citations page setup print save refine query help logout CrossFire Beilstein

Database: CrossFire Beilstein

Find in Rxn Tree: [] Next

Rxn Tree History

Substance 1043373

Reaction 926683

Substance 1180059

Reaction 1270095

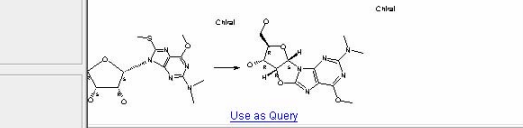
The Rxn Schemes tab displays a hierarchy of reaction pathways beginning with the final product. To expand the reaction tree, click the + sign in front of a substance or a reaction folder. As you expand the reaction tree, you see the full synthetic scheme appear in the workspace on the right.

Click Details below a reaction step to view reaction conditions and citation information.

Return to Reaction Scheme

CrossFire Beilstein Reaction 926683

Select all citations / Deselect all citations



Use as Query

Reaction

Reaction record 1 of 1

Reaction ID	926683				
Reactant	<table border="1"> <tr> <td>Reactant BRN</td> <td>1180059</td> </tr> <tr> <td>Reactant</td> <td>1-(2-dimethylamino-6-methoxy-8-methylsulfanyl-purin-9-yl)-α-D-1-deoxy-ribofuranose</td> </tr> </table>	Reactant BRN	1180059	Reactant	1-(2-dimethylamino-6-methoxy-8-methylsulfanyl-purin-9-yl)-α-D-1-deoxy-ribofuranose
Reactant BRN	1180059				
Reactant	1-(2-dimethylamino-6-methoxy-8-methylsulfanyl-purin-9-yl)-α-D-1-deoxy-ribofuranose				
Product	<table border="1"> <tr> <td>Product BRN</td> <td>1043373</td> </tr> <tr> <td>Product</td> <td>(6aR)-2-dimethylamino-8c-hydroxymethyl-4-methoxy-(6aR,9ac)-6a,7,8,9a-tetrahydro-1H-pyrimido[4,5-b]pyridine</td> </tr> </table>	Product BRN	1043373	Product	(6aR)-2-dimethylamino-8c-hydroxymethyl-4-methoxy-(6aR,9ac)-6a,7,8,9a-tetrahydro-1H-pyrimido[4,5-b]pyridine
Product BRN	1043373				
Product	(6aR)-2-dimethylamino-8c-hydroxymethyl-4-methoxy-(6aR,9ac)-6a,7,8,9a-tetrahydro-1H-pyrimido[4,5-b]pyridine				
No of Reaction Details	1				
Reaction Entry Date	1988/06/27				
Reaction Update Date	1988/06/27				

Top of Page

Reaction Details

Reaction Details record 1 of 1

Citation Pointer	154503
------------------	--------

Copy to Report

Copy current record to the report.

Select copy destination

☒ Create new report

☐ Append to today's report

Select copy result level

☐ View search results in report

☒ View detail results in report

Set the range of copy-to-report records

☐ All records

☒ Current Page

☐ Specify Record Numbers

Enter the record index numbers and/or record ranges, separated by commas. For example, 1,3,5,7-10

☒ View report now

OK Cancel

MDL Database Browser - Microsoft Internet Explorer

DiscoveryGate® | MDL® Database Browser

queries results reports rxn schemes

export page setup print save refine query help logout CrossFire Beilstein Version

Database: CrossFire Beilstein

Find in Outline: Next

Outline History

Today's Report - Report #1

Section 1

Reports combine data from multiple searches in one report. You can print, save, or export reports to an HTML file.

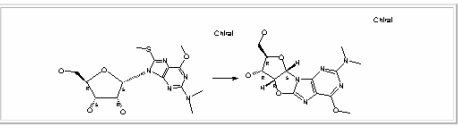
Double-click a report in the History tab to activate and display it.

If you click an "Also found in" link in

Applet WebClientApplet started

CrossFire Beilstein Reaction 926683

Select all citations / Deselect all citations



Reaction

Reaction record 1 of 1

Reaction ID	926683				
Reactant	<table border="1"> <tr> <td>Reactant BRN</td> <td>1180059</td> </tr> <tr> <td>Reactant</td> <td>1-(2-dimethylamino-6-methoxy-8-methylsulfanyl-purin-9-yl)-α-D-1-deoxy-ribofuranose</td> </tr> </table>	Reactant BRN	1180059	Reactant	1-(2-dimethylamino-6-methoxy-8-methylsulfanyl-purin-9-yl)-α-D-1-deoxy-ribofuranose
Reactant BRN	1180059				
Reactant	1-(2-dimethylamino-6-methoxy-8-methylsulfanyl-purin-9-yl)-α-D-1-deoxy-ribofuranose				
Product	<table border="1"> <tr> <td>Product BRN</td> <td>1043373</td> </tr> <tr> <td>Product</td> <td>(6aR)-2-dimethylamino-8c-hydroxymethyl-4-methoxy-(6aR,9aC)-6a,7,8,9a-tetrahydropyrimidin-2(1H)-one</td> </tr> </table>	Product BRN	1043373	Product	(6aR)-2-dimethylamino-8c-hydroxymethyl-4-methoxy-(6aR,9aC)-6a,7,8,9a-tetrahydropyrimidin-2(1H)-one
Product BRN	1043373				
Product	(6aR)-2-dimethylamino-8c-hydroxymethyl-4-methoxy-(6aR,9aC)-6a,7,8,9a-tetrahydropyrimidin-2(1H)-one				
No of Reaction Details	1				
Reaction Entry Date	1988/06/27				
Reaction Update Date	1988/06/27				

Reaction Details

Reaction Details record 1 of 1

Citation Pointer	154503
Reaction Detail ID	926683.1
Reaction Classification	Preparation

10. หากต้องการกลับไปดูรายละเอียดอื่น ให้กลับไป Tab Results แล้วคลิกเลือกหัวข้อที่สนใจต่อไป หากต้องการเปลี่ยนไปดูรายละเอียดของสารตัวอื่นบ้างให้คลิกที่ Return to Search Results

MDL Database Browser - Microsoft Internet Explorer

DiscoveryGate® | MDL® Database Browser

queries results reports rxn schemes

copy to report export records export selected citations page setup print save refine query lists help logout

Database: CrossFire Beilstein

Find in History: Next

Find In History

Today's Searches

Search #1

Previous Searches

Saved Searches

Temporary Lists

Browsing Database Results in the Single-Record View

Use the check box to select those results that you want to copy to a report, export, or view in another database. Then click the Copy to Report button, Export Records button, or View selected records in

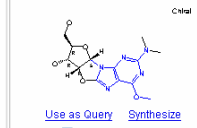
Applet WebClientApplet started

Return to Search Results

Record # 6 of 183

CrossFire Beilstein Substance 1043373

Select all citations / Deselect all citations



Use as Query Synthesize

Select current record

Available Data

Click on a link to add the information to this page

☐ Set current view as default

[Melting Point \(1\)](#) [Substance Identification \(1\)](#)

[UV/Vis Spectroscopy \(1\)](#)

Show [Reactions](#) for this Substance Show [Citations](#) for this Substance

Substance Identification (hide)

Substance Identification record 1 of 1

Beilstein Registry Number	1043373
Beilstein Preferred RN	59881-53-7
CAS Registry Number	59881-53-7
Chemical Name	<ul style="list-style-type: none"> (6aR)-2-dimethylamino-8c-hydroxymethyl-4-methoxy-(6aR,9aC)-6a,7,8,9a-tetrahydro-pyrimidin-2(1H)-one N²,N²,C⁸-trimethyl-e-8,C²-cyclo-guanosine
Fragment Molecular Formula	Molecular Weight
	323.31
Molecular Formula	C13H17N5O5
Lawson Number	32563, 2817, 289
Structure Keyword	Stereo compound
Type of Substance	heterocyclic
Constitution ID	993789
Tautomer ID	990074
Beilstein Reference	5-27
Entry Date	1988/11/29
Update Date	1996/05/11

11. ถ้าต้องการเริ่มสืบค้นใหม่ให้คลิกไปที่ Tab Query และวาดโครงสร้างลงไปใหม่ การสืบค้นข้อมูลนอกจากจะค้นโครงสร้างสารเฉยๆ แล้วยังสามารถสืบค้นในรูปปฏิกิริยาเคมีได้โดยใช้เครื่องหมายลูกศรเข้าช่วย ตัวอย่างเช่นเมื่อป้อน query ดังนี้เข้าไปและคลิก Start Search

The screenshot shows the MDL Database Browser interface. The 'Reaction' tab is active. In the 'Find this reaction and its conditions' section, a chemical reaction scheme is shown. The 'Substance Identification' section has search criteria for Bellstein Registry Number, CAS Registry Number, Chemical Name, Molecular Formula, and Molecular Weight. The 'start search' button is visible at the bottom.

ผลที่ได้จะแสดงปฏิกิริยาที่มีโครงสร้างของสารตั้งต้นและผลิตภัณฑ์ตรงกับที่ป้อนเข้าไป

The screenshot shows the MDL Database Browser interface with the 'results' tab active. It displays a list of search results for chemical reactions. Each result includes a reaction ID and a chemical reaction scheme. The results are: Reaction ID: 2460389, Reaction ID: 2460390, Reaction ID: 2461510, and Reaction ID: 2772940. Each reaction scheme shows the reactants, reagents, and products. The 'start search' button is visible at the bottom.

12. สิ่งที่เราค้นได้จะไม่ใช่ตัวสารเคมีแต่จะเป็นปฏิกิริยา ซึ่งสามารถดูรายละเอียดได้โดยคลิกที่ Details ซึ่งก็จะมีรายละเอียดของปฏิกิริยาพร้อมทั้งเอกสารอ้างอิงที่เกี่ยวข้อง ดังตัวอย่างเมื่อคลิกที่ Details ของ record #1 จะได้

The screenshot shows the MDL Database Browser interface. The left sidebar contains a search history and a list of searches. The main content area displays the details for a specific reaction record.

Reaction

Reaction record 1 of 1					
Reaction ID	2460389				
Reactant	<table border="1"> <tr> <td>Reactant BRN</td> <td>4203402</td> </tr> <tr> <td>Reactant</td> <td>4-(2-amino-6-methoxy-purin-9-yl)-2,5-difluoro-2-hydroxymethyl-cyclopentanol</td> </tr> </table>	Reactant BRN	4203402	Reactant	4-(2-amino-6-methoxy-purin-9-yl)-2,5-difluoro-2-hydroxymethyl-cyclopentanol
Reactant BRN	4203402				
Reactant	4-(2-amino-6-methoxy-purin-9-yl)-2,5-difluoro-2-hydroxymethyl-cyclopentanol				
Product	<table border="1"> <tr> <td>Product BRN</td> <td>4204043</td> </tr> <tr> <td>Product</td> <td>2-amino-9-(2,4-difluoro-3-hydroxy-4-hydroxymethyl-cyclopentyl)-1,9-dihydro-purin-6-one</td> </tr> </table>	Product BRN	4204043	Product	2-amino-9-(2,4-difluoro-3-hydroxy-4-hydroxymethyl-cyclopentyl)-1,9-dihydro-purin-6-one
Product BRN	4204043				
Product	2-amino-9-(2,4-difluoro-3-hydroxy-4-hydroxymethyl-cyclopentyl)-1,9-dihydro-purin-6-one				
No of Reaction Details	1				
Reaction Entry Date	1990/12/31				
Reaction Update Date	1990/12/31				

[Top of Page](#)

Reaction Details

Reaction Details record 1 of 1					
Citation Pointer	5517983				
Reaction Detail ID	2460389.1				
Reaction Classification	Preparation				
Stage	<table border="1"> <tr> <td>Reagent</td> <td>2 M aq. HCl</td> </tr> <tr> <td>Temperature</td> <td>80 C</td> </tr> </table>	Reagent	2 M aq. HCl	Temperature	80 C
Reagent	2 M aq. HCl				
Temperature	80 C				
Entry Date	1990/12/31				
Comment	Yield given				
Reaction Details Citations	<p>Export</p> <p><input type="checkbox"/> Journal, Biggadike, Keith, Borthwick, Alan D., JCCCAT, J. Chem. Soc. Chem. Commun., EN, 19, 1990, 1380-1382.</p>				

[Top of Page](#)

13. และสามารถเลือกที่ Synthesize reactant(s) เพื่อดูรายละเอียดของการสังเคราะห์ย้อนไปถึงสารตั้งต้นแต่ละตัวได้ โดยต้องคลิกที่ Rxn Tree ย้อนกลับไปเรื่อยๆ ข้อมูลทั้งหมดสามารถจัดเก็บเป็นรายงานหรือพิมพ์ออกมาได้

The screenshot shows the MDL Database Browser interface with the 'rxn schemes' tab selected. The left sidebar displays a hierarchical 'Rxn Tree' showing the synthesis path from Substance 4203402 down to Substance 397363. The main content area displays the 'Synthetic Scheme for Substance 4203402', which is a chemical reaction diagram showing the synthesis of the target molecule from its precursors. The diagram includes chemical structures and reaction arrows, with links to 'Details' for each reaction step.

Synthetic Scheme for Substance 4203402

The diagram shows the synthesis of Substance 4203402 from its precursors. The reaction steps are as follows:

- Substance 4203402 is synthesized from Substance 427729 and Substance 4229422.
- Substance 427729 is synthesized from Substance 2470349 and Substance 4229422.
- Substance 4229422 is synthesized from Substance 2471065 and Substance 4234175.
- Substance 4234175 is synthesized from Substance 4225428 and Substance 397363.

Links to 'Details' are provided for each reaction step: [Details for Reaction 2470349](#), [Details for Reaction 2471065](#), and [Details for Reaction 2434175](#).