



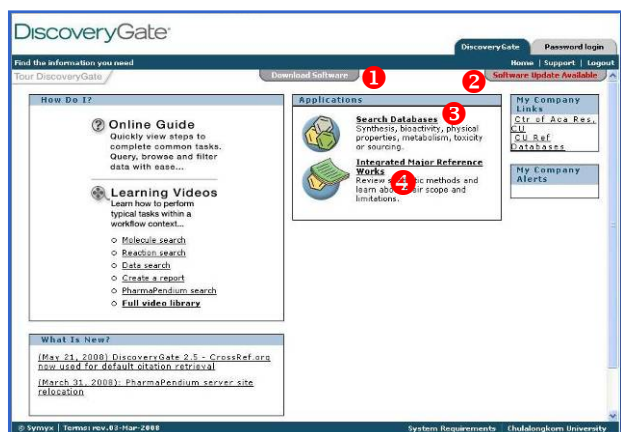
DiscoveryGate เป็นชุดฐานข้อมูลทางเคมีจำนวน 17 ฐานที่ให้บริการโดย Elsevier MDL และ Symyx Technologies ครอบคลุมโครงสร้างทางเคมีมากกว่า 20 ล้านรายการ ปฏิริยาเคมีกว่า 11 ล้านรายการ และ คุณสมบัติเกี่ยวกับวิธีการสังเคราะห์สารกว่า 350 ล้านรายการ ประกอบด้วย CrossFire Beilstein; CrossFire Gmelin; MDL® Available Chemicals Directory; MDL® Screening Compounds Directory; MDL® Reference Library of Synthetic Methodology; MDL® Solid-Phase Organic Reactions; ORGSYN Database; Comprehensive Organic Functional Group Transformations; Comprehensive Asymmetric Catalysis; MDL® Comprehensive Medicinal Chemistry; MDL® Drug Data Report; MDL® Metabolite Database; MDL® Toxicity Database; ChemInform Reaction Library; Current Synthetic Methodology; Derwent Journal of Synthetic Methods, and National Cancer Institute Database นอกจากนี้ยังเชื่อมโยงถึง Integrated Major Reference Works ซึ่งให้ข้อมูลเกี่ยวกับวิธีการสังเคราะห์สารกว่า 26,000 วิธี พร้อมขอบเขตและข้อจำกัด สถาบันวิทยบริการ จุฬาฯ บอกรับ DiscoveryGate เพื่อให้ประชาคมจุฬาฯ ได้ใช้งานแบบไม่จำกัดจำนวนผู้ใช้ ตั้งแต่เดือนกันยายน 2550

การใช้งาน

เลือกชื่อฐาน DiscoveryGate จากทางเลือกภายใต้ URL :

<http://www.car.chula.ac.th/curef-db/slist.html#science>

จะพบหน้าจอหลักที่มีทางเลือกใช้งานดังภาพ

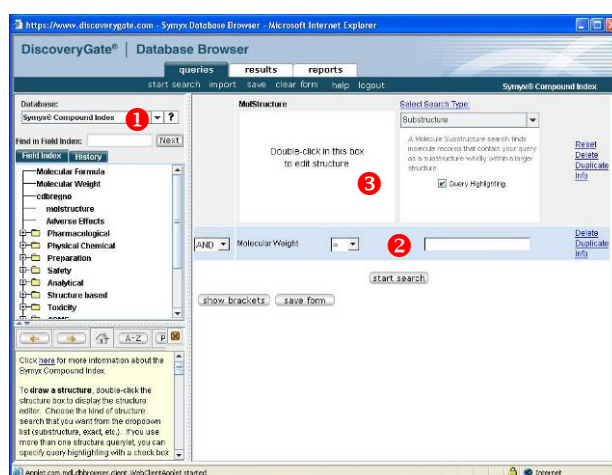


- ❶ เพื่อ download โปรแกรมมาติดตั้งที่เครื่องในครั้งแรก ก่อนการใช้งาน ดูคำแนะนำการติดตั้งที่ <http://www.car.chula.ac.th/curef-db/dg3.html>
- ❷ หากเคยติดตั้งโปรแกรมแล้วเมื่อมีการปรับปรุงโปรแกรม ระบบจะให้ทำการปรับปรุงการลงโปรแกรม
- ❸ สำหรับค้นหาข้อมูลจากฐานข้อมูล และจาก Integrated Major Reference Works
- ❹ เมื่อต้องการค้นหาข้อมูลจากสิ่งพิมพ์

การค้นหา/จัดการผลลัพธ์

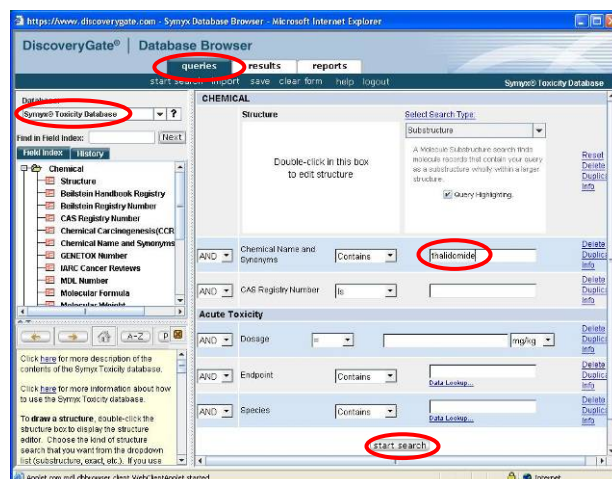
- เลือก Search Databases เมื่อต้องการค้นหาข้อมูลเกี่ยวกับ Synthesis, bioactivity, physical properties, metabolism, toxicity หรือ sourcing
 - เลือก Integrated Major Reference Works ในกรณีที่ต้องการค้นหาเกี่ยวกับ Review synthetic methods รวมถึงขอบเขตและข้อจำกัด
- สามารถค้นหาได้ดังนี้

Search Databases จะพบหน้าจอ ดังภาพ

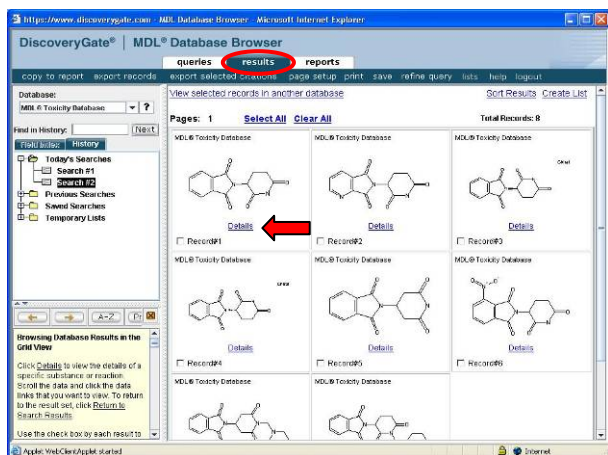


- ❶ เลือกฐานข้อมูลที่ใช้ เช่น Symyx® Toxicity Database
- ❷ หน้าจอการค้นหาวจะเปลี่ยนไปตามฐานที่เลือก
- ❸ สำหรับเขียนสูตรโครงสร้างเพื่อใช้เป็นคำค้น

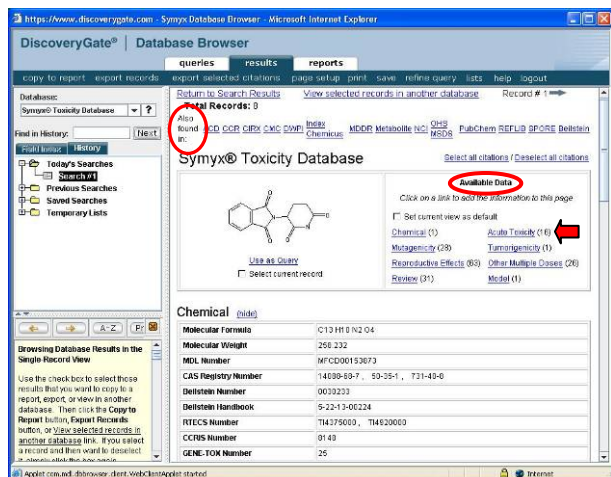
สามารถพิมพ์คำค้นใน ❷ โดยเลือกเขตข้อมูลที่สัมพันธ์กับคำค้น หรือเขียนสูตรโครงสร้างใน ❸ จากนั้นคลิก start search เพื่อให้ระบบค้นหา เช่น พิมพ์คำค้น thalidomide ดังตัวอย่าง



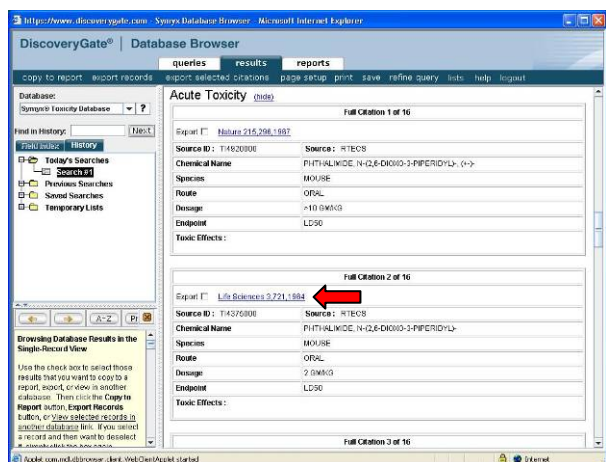
ได้ผลลัพธ์ดังตัวอย่าง



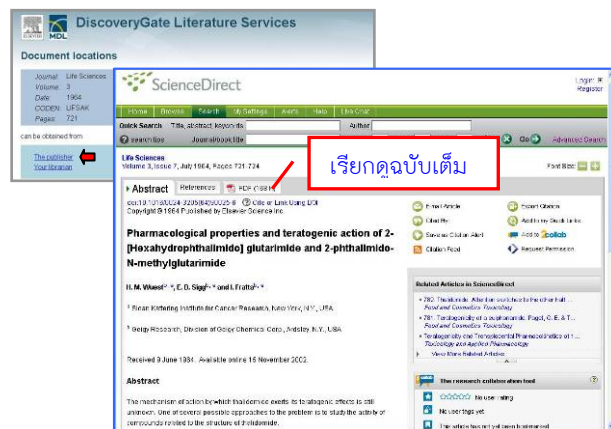
คลิกที่ **Details** ตรงรายการที่ต้องการ เช่น Record#1 เพื่อดูรายละเอียดของสารนั้นดังตัวอย่าง



⇒ ในกรอบ Available Data มีทางเลือกต่างๆ ให้คลิกเพื่อให้ระบบนำข้อมูลที่ต้องการดูนั้นมาเพิ่มต่อท้ายหน้าจอแสดงผลที่กำลังดูอยู่ได้ เช่นคลิก Acute Toxicity เมื่อเลื่อนลงมาด้านล่างของจอ จะแสดงข้อมูลเพิ่มเติมดังตัวอย่าง

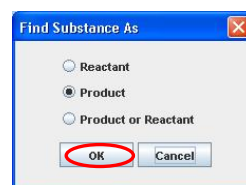


คลิกที่รายชื่อวารสารเพื่อดูเอกสารฉบับเต็ม (ถ้ามีการบอกรับ) เช่น คลิกข้อมูลที่สนใจที่ **Life Sciences 3,721,1964** จะพบการเชื่อมโยงไปยังเอกสารฉบับเต็มดังตัวอย่าง

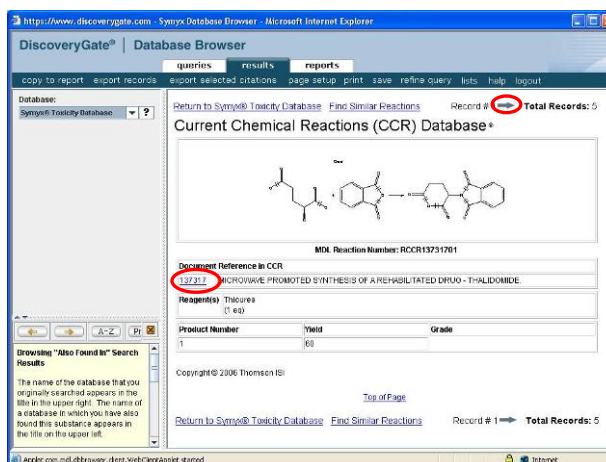


⇒ ที่ Also found in จะแสดงรายชื่อฐานข้อมูลอื่นๆ ที่มีข้อมูลในเรื่องเดียวกันนี้ เช่น เลือก CCR (Current Chemical Reactions Database) จะมีหน้าต่างขึ้นมาให้เลือกว่าต้องการข้อมูลของสารนั้นในลักษณะใด

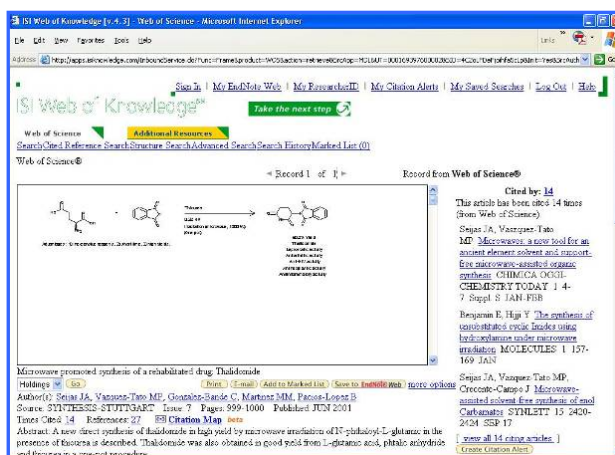
ให้เลือกตามต้องการแล้วคลิก **OK** เช่น จากตัวอย่างใน Record#1 เลือกให้ thalidomide เป็น Product ดังภาพ



จะได้ผลลัพธ์เป็นปฏิกิริยาเคมีที่มี thalidomide เป็น Product ดังตัวอย่าง

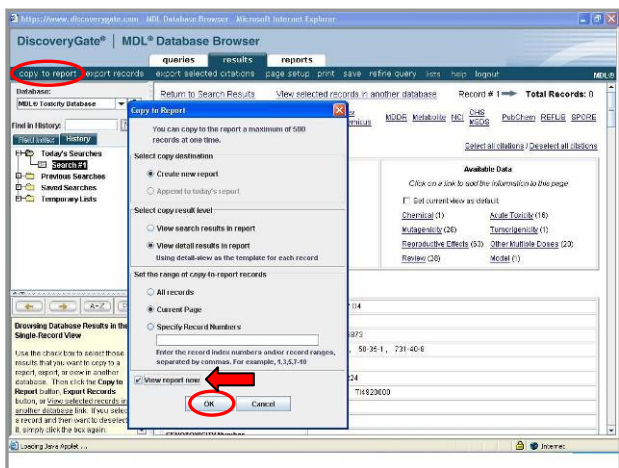


คลิกที่หมายเลขในกรอบ Document Reference in CCR เพื่อดูรายละเอียดของปฏิกิริยาในฐาน CCR ต่อไปดังตัวอย่าง

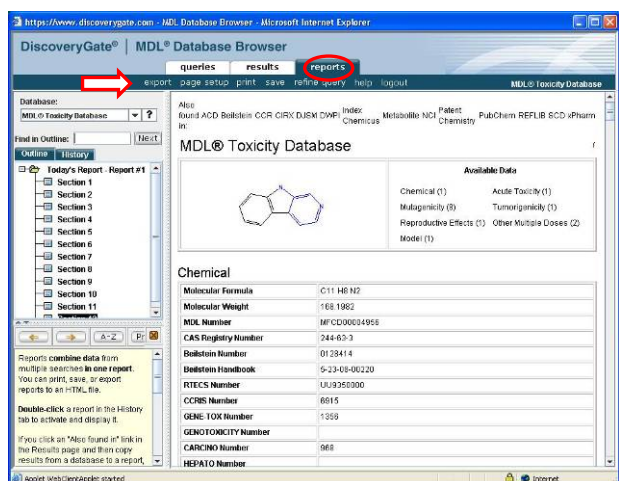


ในกรณีที่ผลลัพธ์มีหลายรายการ ให้คลิกที่ ➡️ หลัง Record# เพื่อดูรายการถัดไป

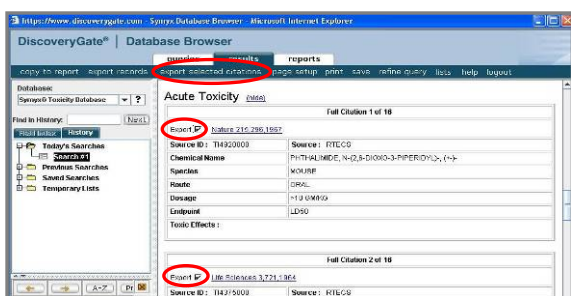
ในกรณีที่ต้องการสั่งพิมพ์ หรือจัดเก็บผลลัพธ์ทำได้โดยคลิก copy to report ทางด้านบนของหน้าจอแสดงผลผลลัพธ์ จะมีหน้าต่างขึ้นมาให้ระบุความต้องการแล้วคลิก **OK** เช่น ที่หน้าจอการดู **Details** ใน Record#1 ดังตัวอย่าง



ให้ทำเครื่องหมาย ☒ ที่ View report now ระบบจะไปยังแถบ reports ดังตัวอย่าง



เลือกทางเลือก export, print, save ทางด้านบนตามต้องการ หากต้องการส่งข้อมูลบรรณานุกรม (export citation) ไปยังโปรแกรม EndNote สามารถทำได้โดยคลิกเพื่อทำเครื่องหมายในกรอบสี่เหลี่ยม ☒ หลัง Export ของรายการที่ต้องการ จากนั้นคลิกทางเลือก export selected citations ที่อยู่ทางด้านบนดังตัวอย่าง

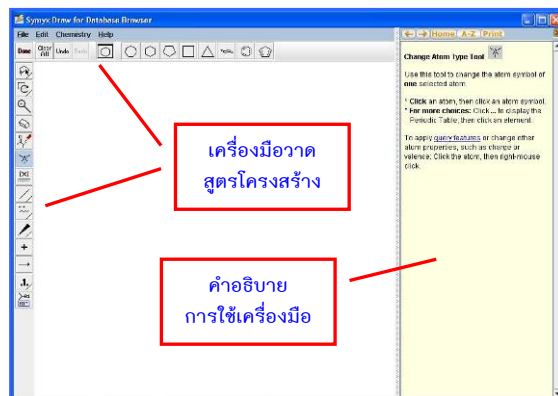


จะพบหน้าต่างให้ระบุรูปแบบของข้อมูลที่ต้องการดังภาพ

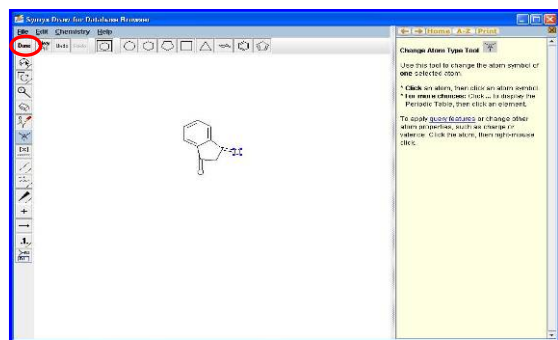


เลือก RIS File แล้วคลิกที่ Export ระบบจะเปิดโปรแกรม EndNote ที่มีอยู่ในเครื่องเพื่อส่งข้อมูลไปยัง library ที่ต้องการ

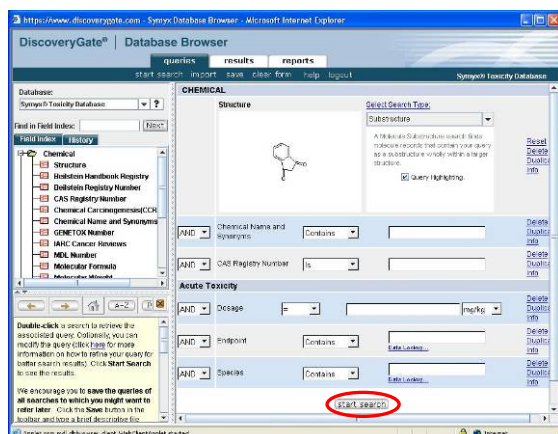
ในกรณีที่ต้องการค้นหาจากสูตรโครงสร้าง ทำได้โดยคลิกสองครั้งที่กรอบ Structure ③ จะพบหน้าต่างใหม่ให้วาดสูตรโครงสร้างโดยมีคำอธิบายการใช้งานอยู่ทางด้านขวาของจอภาพดังภาพ



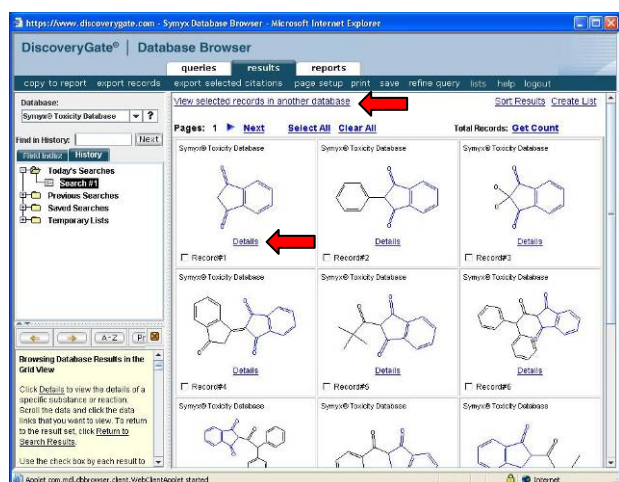
คลิกที่ไอคอนทางด้านบนและด้านข้างที่เป็นเครื่องมือที่ต้องการใช้งานเพื่อเขียนสูตรโครงสร้างที่ต้องการค้นหา จากนั้นคลิก Done เพื่อส่งโครงสร้างไปยังหน้าจอการค้นหา ดังตัวอย่าง



โครงสร้างจะถูกส่งมายังกรอบรับโครงสร้างที่หน้าจอการค้นหา อาจกำหนดเงื่อนไขการค้นหาเพิ่มเติม และคลิก start search เพื่อให้ระบบประเมินผลดังตัวอย่าง

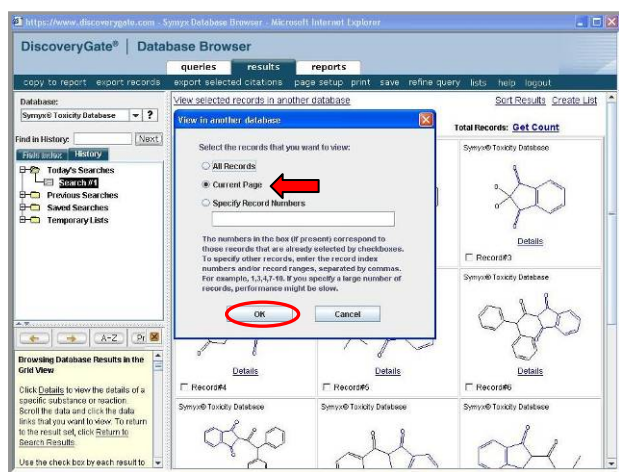


จะได้ผลลัพธ์ดังตัวอย่าง

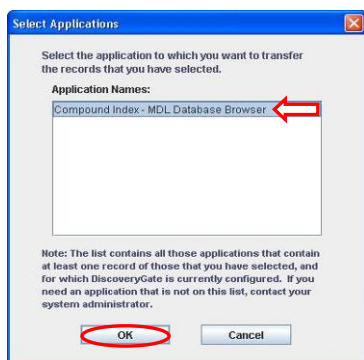


คลิกที่ [View selected records in another database](#) เพื่อดูข้อมูลของรายการผลลัพธ์ที่เลือกในฐานอื่น หรือคลิกที่ [Details](#) ได้สารเคมีที่ต้องการเพื่อดูรายละเอียดของสารนั้น

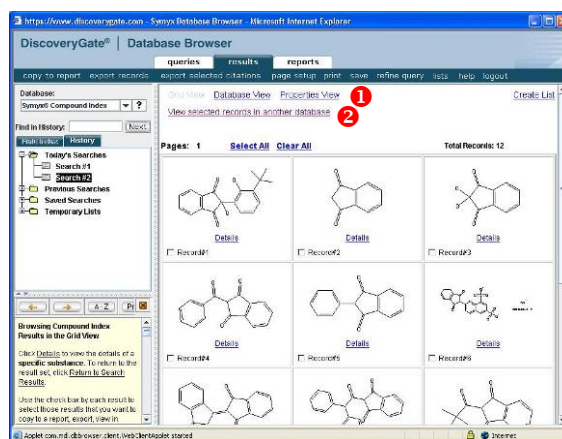
⇒ กรณีคลิกที่ [View selected records in another database](#) ระบบจะแสดงหน้าต่างให้ระบุรายการของสารเคมีที่ต้องการดูข้อมูลในฐานอื่น เช่น เลือกดูเฉพาะสารเคมีที่แสดงผลในหน้าจอบริเวณ (Current Page) แล้วคลิก OK ดังตัวอย่าง



ระบบจะแสดงหน้าต่างที่มีรายชื่อฐานข้อมูลที่มีข้อมูลของสารดังกล่าวให้คลิกเลือก (ตัวอย่างนี้ 1 ฐาน) จากนั้นคลิก OK ดังภาพ



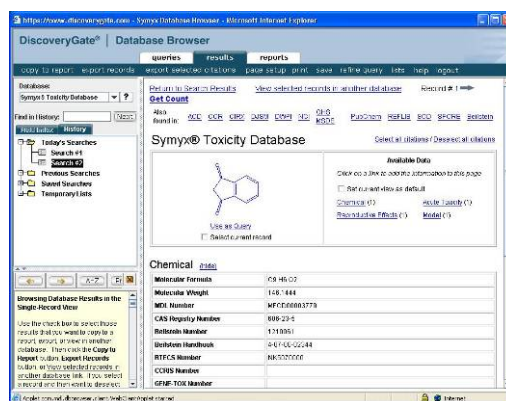
ระบบจะแสดงผลลัพธ์ของสารที่เลือกในฐานข้อมูลอื่นที่เลือกดูในแบบ Grid View คือ แสดงเป็นรายการสารเคมีดังตัวอย่าง



① สามารถเลือกดูข้อมูลที่ได้ในแบบ Database View (แสดงข้อมูลของสารแยกตามฐานข้อมูล) หรือ Properties View (แสดงข้อมูลของสารแยกตามคุณสมบัติของสาร)

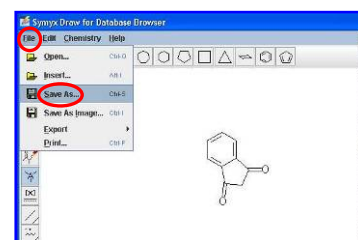
② ใช้ค้นหาข้อมูลของสารที่แสดงผลที่หน้าจอนั้นในฐานข้อมูลอื่นๆ ต่อไป

⇒ หากเลือกดู [Details](#) ของสารใด ก็จะแสดงรายละเอียดของสารนั้น เช่น เลือกรายการที่ 1 จะแสดงข้อมูลดังตัวอย่าง



การเรียกดูข้อมูลและจัดการผลลัพธ์ สามารถทำได้ในลักษณะเดียวกับการค้นด้วยคำค้นข้างต้น

*** หากต้องการจัดเก็บโครงสร้างสารเคมีที่วาดไว้ เพื่อใช้งานครั้งต่อไป ทำโดยใช้คำสั่ง File -> Save As ... ที่หน้าต่างการวาดสูตรโครงสร้างดังตัวอย่าง



Integrated Major Reference Works (IMRW) ให้ข้อมูลเกี่ยวกับวิธีการสังเคราะห์สาร ขอบเขตและข้อจำกัดของวิธีการนั้นๆ จากสิ่งพิมพ์ Comprehensive Asymmetric Catalysis (CAC) และ Comprehensive Organic Functional Group Transformations (COFGT) ค้นได้จากคำค้นหรือโครงสร้างในลักษณะเดียวกับการค้นฐานข้อมูลข้างต้น หากต้องการค้นทั้งโครงสร้างและคำค้นพร้อมกันต้องระบุเงื่อนไขของโครงสร้างที่ต้องการก่อนในบรรทัดแรก หากค้นโดยใช้คำค้นอย่างเดียวให้ระบุคำค้นในบรรทัดแรกเช่นกัน

จัดทำโดย กัลยา ยังสุขยิ่ง

ฝ่ายบริการช่วยค้นคว้าวิจัย สถาบันวิทยบริการ จุฬาฯ
(ฉบับพิมพ์ครั้งที่ 1) กรกฎาคม 2551