

ISI Web of
SCIENCE.

ISI Current Chemical Reactions

Powered by ISI Web of KnowledgeSM

Current Chemical Reactions (CCR-EXPANDED) เป็นฐานข้อมูลที่รวบรวมวิธีการสังเคราะห์สารเคมีกว่า 487,000 ปฏิกิริยา จากวารสารและสิทธิบัตรชั้นนำ ตั้งแต่ปี 1994-ปัจจุบัน การสืบค้นทำได้ง่ายเพียงมีโครงสร้างสารและปฏิกิริยาที่ต้องการ

การเข้าใช้ฐานข้อมูล

- 1 สืบค้นออนไลน์ผ่านเว็บเบราว์เซอร์ ไปที่

<http://www.car.chula.ac.th/curef-db/>

- 2 เลือกชื่อฐานข้อมูล Current Chemical Reactions
- 3 คลิกปุ่ม **GO** ที่ตรงกับ Web of Science เพื่อเข้าสู่หน้าจอสืบค้นหลัก

วิธีการค้นหาข้อมูล

- 1 เลือกฐานข้อมูลเคมี โดยคลิกที่ ☐ ฐานข้อมูล Current Chemical Reactions (CCR-EXPANDED)

- 2 เลือก ช่วงระยะเวลาที่ต้องการค้น

- 3 คลิก **STRUCTURE SEARCH** จะได้หน้าจอ Structure Search *

*หากหน้าจอขึ้นข้อความ NOTICE ดังภาพ



NOTICE
A separate program is required to view and draw structures.
You can choose to [download and install our free Chemistry plug-in now](#),
or continue your current session by selecting another search option.

แสดงว่าต้องลงโปรแกรม Chemistry plug-in ที่เครื่องคอมพิวเตอร์ก่อน ให้ทำตามคำแนะนำที่ปรากฏในหน้าจอภาพ หากมีปัญหาโปรดติดต่อ curef@car.chula.ac.th

- 4 คลิก **Draw Query** จะได้หน้าจอวาดโครงสร้าง (Structure Drawing) ดูรายละเอียดที่หัวข้อ **วิธีวาดโครงสร้าง**

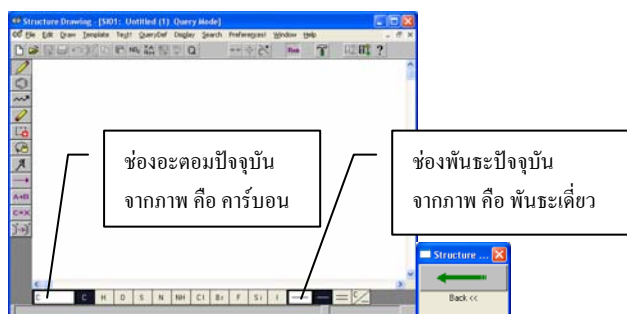
- 5 พิมพ์ข้อมูลสารประกอบ (Compound Data) (ถ้ามี)

- 6 พิมพ์ข้อมูลปฏิกิริยา (Reaction Data) (ถ้ามี)

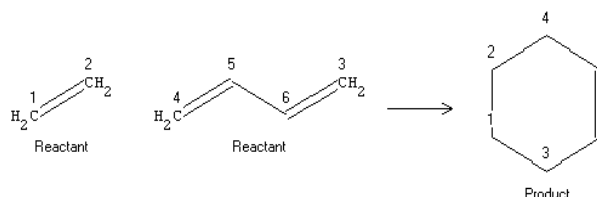
- 7 คลิก **SEARCH** จะได้หน้าจอแสดงผลการสืบค้น

วิธีวาดโครงสร้าง

หลังจากคลิก **Draw Query** ที่หน้าจอ Structure Search จะได้หน้าจอวาดโครงสร้าง



เพื่อให้ง่ายต่อความเข้าใจ จึงใช้ Diels-Alder reaction (ค้นพบโดย Otto Diels และ Kurt Alder ผู้ได้รับรางวัล Nobel Prize ในปี ค.ศ. 1950) เป็นตัวอย่าง ซึ่งมีปฏิกิริยาดังภาพ



การวาดโครงสร้างของปฏิกิริยานี้ ประกอบด้วย 9 ขั้นตอนย่อย คือ

ขั้นตอนที่ 1 – สารตั้งต้นตัวที่หนึ่ง


- 1 คลิกปุ่ม
- 2 คลิกปุ่มพันธะคู่ ที่ด้านล่างของจอ
- 3 เคลื่อนเมาส์ไปด้านในซ้ายของจอ (เปลี่ยนจากหัวลูกศรเป็น) ให้กดปุ่มเมาส์ค้างไว้แล้วลากขึ้นเพื่อวาดพันธะ จากนั้นปล่อยปุ่มเมาส์ จะได้โครงสร้างสารที่บทบาทของสารในปฏิกิริยาเป็นอะไรก็ได้ (Any role)

ขั้นตอนที่ 2. – สารตั้งต้นตัวที่สอง



- 1 คลิกไอคอนอะตอม และกำหนดให้ยาว 4 อะตอม
- 2 คลิกเมาส์ 1 ครั้งที่กลางหน้าจอเพื่อวาดไอคาร์บอน
- 3 คลิกช่องพันธะปัจจุบัน เลือก Double และ คลิกปุ่ม **Multiple Use**
- 4 เคลื่อนเมาส์รูป ไปชี้พันธะเดี่ยวที่ต้องการ (มีเส้นตรงกลาง) แล้วกดปุ่มเมาส์ ทำซ้ำกับพันธะเดี่ยวอีกข้าง

ขั้นตอนที่ 3. – ผลิตภัณฑ์



- 1 เคาะแคร่ยาว (space bar) ที่เป็นพิมพ์ เพื่อให้ ช่องพันธะปัจจุบัน กลับคืนสภาพเป็นพันธะเดี่ยว
- 2 คลิกวงแหวน และ เลือกจำนวน 6 จากนั้นคลิก OK
- 3 คลิกเมาส์ 1 ครั้งทางด้านขวาของจอ เพื่อวาดวงแหวน
- 4 คลิกปุ่ม และคลิกปุ่มพันธะคู่ ที่ด้านล่างของจอ จากนั้นลากเมาส์รูป ไปชี้พันธะเดี่ยวของวงแหวนคาร์บอนที่ต้องการ (มีเส้นตรงกลาง) แล้วกดปุ่มเมาส์

๕ ถ้าต้องการย้ายตำแหน่งรูปโครงสร้างสารเคมี ให้คลิกปุ่ม  จากนั้นกดปุ่มเมาส์ค้างไว้แล้วลากเส้นรอบรูปโครงสร้างที่ต้องการ เคลื่อนเมาส์ไปที่กลางวงกลม (เมาส์จะเป็นรูปมือ) กดปุ่มเมาส์แล้วลากรูปไปตำแหน่งที่ต้องการ

ขั้นตอนที่ 4. – เติมลูกศรปฏิกิริยา



- 1 คลิกปุ่มลูกศรปฏิกิริยา  และเลือก  จากนั้นคลิก OK
- 2 นำเมาส์ที่เป็นรูปลูกศรปฏิกิริยาไปวางระหว่างโครงสร้างที่สองและสาม จากนั้นกดปุ่มเมาส์แล้วลากไปตามแนวนอนเพื่อวาดลูกศร สังเกตว่าทั้งสอง 2 โครงสร้างถูกกำหนดบทบาทใหม่เป็น reactant และ product

ขั้นตอนที่ 5. – กำหนดบทบาทของสารเคมี




- 1 คลิกปุ่มกำหนดบทบาท 
- 2 นำเมาส์ไปคลิกที่อะตอมหรือพันธะของโครงสร้างแรก
- 3 เลือก  จากนั้นคลิก OK สังเกตว่าโครงสร้างนี้จะถูกกำหนดใหม่เป็น reactant

ขั้นตอนที่ 6. – จับคู่อะตอมระหว่างสารตั้งต้นกับผลิตภัณฑ์

(การจับคู่อะตอมระหว่างสารตั้งต้นกับผลิตภัณฑ์ สามารถจับคู่ด้วยระบบมือและระบบอัตโนมัติ)

- 1 คลิกปุ่มจับคู่อะตอมระหว่างสาร 
- 2 เลือก  จากนั้นคลิก OK
- 3 คลิกที่คาร์บอนตัวแรกของสารตั้งต้นตัวที่หนึ่ง จากนั้นคลิกที่คาร์บอนของผลิตภัณฑ์ให้สอดคล้องกัน (ดูรูป Diels-Alder reaction) จากนั้นให้จับคู่คาร์บอนที่เหลือตามลำดับจนครบทั้งในสารตั้งต้นและผลิตภัณฑ์


ขั้นตอนที่ 7. – Query Definition

- 1 คลิกปุ่ม  เพื่อออกจากระบบจับคู่อะตอม
- 2 คลิก  ได้หน้าจอ Query Attributes และเมื่อเคลื่อนเมาส์ไปแต่ละอะตอมหรือพันธะ จะเห็นว่าค่าในหน้าจอ Query Attributes จะเปลี่ยนไปด้วย
- 3 คลิก  อีกครั้งเพื่อปิดหน้าจอ Query Attributes

ขั้นตอนที่ 8. – บันทึก Structure Query

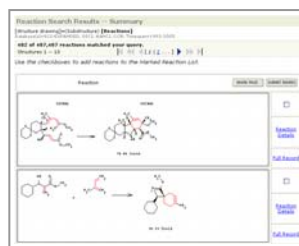
- 1 เลือก Save Query จาก Search Menu จะได้นหน้าจอ Save Query จากนั้นทำตามขั้นตอนเหมือนการบันทึกแฟ้มต่างๆไปแฟ้มที่บันทึกมีนามสกุลเป็น .str

ขั้นตอนที่ 9. – ส่งรูปไปสืบค้น

- 1 คลิก  เพื่อส่งรูปไปที่หน้าจอ Structure Search

การแสดงผลการสืบค้น

ผลการสืบค้น จะแสดง รวมผลการสืบค้นปฏิกิริยา (Reaction Search Results -- Summary)



การดูรายละเอียดปฏิกิริยา (Reaction Details) ให้คลิก [Reaction Details](#)

ที่หน้าจอ Reaction Search Results ได้ผลดังภาพ



การดูระเบียบเต็ม (Full Record) ให้คลิก [Full Record](#) ที่

หน้าจอ Reaction Search Results ได้ผลดังภาพ





การพิมพ์/บันทึก/ส่งผลสืบค้นทาง E-mail

- 1 เลือกระเบียบที่ต้องการ

ถ้าอยู่ที่หน้าจอ Reaction Details หรือ Full Record ให้คลิก 

ถ้าอยู่ที่หน้าจอ Reaction Search Results -- Summary ให้คลิก


ที่ 

- 2 คลิก  จะได้หน้าจอ Web of Science Marked Records

- 3 คลิก [Reactions](#) จะได้หน้าจอ Web of Science - Reactions Marked Records

- 4 เลือกรายละเอียดข้อมูลที่ต้องการในช่อง Select the fields to include in the output


- 5 เลือกตัวเลือกที่ต้องการ ในช่อง Select an option

- 6 ถ้าต้องการพิมพ์ลงกระดาษให้คลิก 


แล้วคลิก 

- 7 ถ้าต้องการส่งข้อมูลทาง E-mail ให้พิมพ์ E-mail Address

ในช่อง E-mail RD File to: และพิมพ์ข้อความที่ต้องการส่งไป

พร้อมกับผลการสืบค้นในช่อง Notes: จากนั้นคลิก 

การออกจากโปรแกรม

กดปุ่ม  ทุกครั้งที่เลิกใช้โปรแกรม