

Beilstein

CrossFire Commander V7

*Kurzanleitung
Wie suche ich was?*

Heike Göbel
Informationsvermittlungsstelle
Chemisch-Geowissenschaftliche Fakultät
Friedrich-Schiller-Universität Jena
Humboldtstr. 11
07743 Jena
Tel.: 03641/948020
Fax :03641/948002
Email: Heike.Goebel@uni-jena.de

Inhalt

1.	Was ist Beilstein CrossFire Commander V7?	3
2.	Welchen Inhalt hat die Datenbank?	3
3.	Welche Verbindungen findet man im Beilstein?	4
4.	Für welche Fragestellungen eignet sich CrossFire?	4
5.	Kann man das Programm auf dem eigenen Rechner nutzen?	5
6.	Wie startet man das CrossFire-Programm?	5
7.	Welche Möglichkeiten zur Suche hat man? Predefined Search Forms (PSF), Textsuche oder Struktursuche	6
8.	Übersicht: Was geht alles mit PSF?	7
9.	Wie sucht man mit dem Namen einer Verbindung? (bzw. mit Summenformel oder CAS-Registry-Nummer)	8
10.	Wie sieht ein Beilstein-Eintrag einer Substanz aus?	9
11.	Wie sieht man sich die Suchergebnisse an?	11
12.	Wie druckt man einzelne Suchresultate aus?	12
13.	Wie exportiert man Suchresultate in eine WORD-Datei ?	13
14.	Wie exportiert man Suchresultate in eine HTML-Datei ?	14
15.	Wie sucht man nach Arbeiten eines bestimmten Autors ?	15
16.	Wie sucht man Präparationen/Reaktionen mittels "Predefined Search Forms"?	16
17.	Wie zeichnet man eine Struktur?	17
18.	Wie importiere ich Strukturen aus ISIS Draw ?	21
19.	Wie sucht man eine exakte Struktur ?	22
20.	Wie sucht man Halb-Reaktionen ($A \rightarrow ?$ bzw. $? \rightarrow B$)?	23
21.	Wie sucht man vollständige (einstufige) Reaktionen ($A \rightarrow B$)?	24
22.	Wie sucht man mehrstufige Reaktionen ? ($A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D \dots$)	25
23.	Vergleich der Datenbanken Beilstein CrossFire und SciFinder	28
24.	Beilstein CrossFire - Hilfen und Übungen im Internet	29
25.	Übungen zu CrossFire	30

1. Was ist Beilstein CrossFire Commander V7 ?

- **Faktendatenbank**, nach chemischen Verbindungen geordnet
- Inhouse-Version der Beilstein-Datenbank der Organischen Chemie
- mehr als **9,8 Millionen Verbindungen** mit ihren Strukturen, chemischen und physikalischen Daten sowie den zugehörigen **Literaturzitate ab 1771**
- **10 Millionen Reaktionen** dieser Verbindungen
- Suche möglich über (Sub)strukturen bzw. in ca. 400 Eigenschaftsfeldern
- Hyperlinks zwischen den chemischen Verbindungen, Reaktionen und Literaturzitate
- **Vierteljährliche Aktualisierung** unter Auswertung von ca. 150 Zeitschriften
- Jährlich kommen ca. 500.000 neue Exzerpte hinzu, Rückstand zur aktuellen Literatur ca. 1 Jahr

2. Welchen Inhalt hat die Datenbank?

Nicht nur für Organiker interessant → auch Physikochemiker, Physiker, Chemieingenieure, Pharmazeuten, Biochemiker, Biologen, Mediziner finden in 8 Millionen einzelnen Stoffdatendossiers vielfältige Informationen:

Informationen zur Identifizierung	- Struktur
	- Chemischer Name
	- Beilstein Registrierungs Nummer
	- Summenformel
Chemische Informationen	- Angaben zur chemischen Reaktion
	- Angaben über Derivate
	- Isolierung aus Naturstoffen
	- Daten zur Konstitution
Physikalische Eigenschaften	- Struktur- und Energiegrößen des Moleküls
	- Physikalische Eigenschaften
	- Weitere Zustandsbeschreibungen und mechanische Eigenschaften
	- Thermochemische Daten
	- Optische Eigenschaften
	- Spektren
	- Magnetische Eigenschaften
	- Elektrische Eigenschaften
	- Elektrochemisches Verhalten
Eigenschaften von Mehrkomponentensystemen	- Lösungsverhalten
	- Flüssig/Flüssig Systeme
	- Flüssig/Fest Systeme
	- Flüssig/Gasförmig Systeme
	- Mechanische und physikalische Eigenschaften
	- Transportphänomene
	- Energetische Daten
	- Grenzflächenphänomene
	- Adsorption
	- Assoziation
	- Pharmakologische Daten
Pharmakologische, toxikologische und ökologische Chemie	- Ökologische Daten
	- Mobilität (Verteilung in der Umwelt)
	- Reaktivität (Transformation)
	- Verwendung
Bibliographische Informationen	- Literaturzitate
	- Patentzitate

Ca. 400 Eigenschaften können vom Beilstein erfasst werden.

3. Welche Verbindungen findet man im Beilstein?

- **Alle Verbindungen des Kohlenstoffs** mit:
Wasserstoff
Nichtmetallen (Halogene, Chalkogene, N, P, As, Si, B)
Alkali- und Erdalkalimetallen
auch die Salze organischer Verbindungen sind enthalten
- **Nicht** im Beilstein sind:
C-Oxide
Kohlensäure und deren Thio-Analoga
HCN, HOCN, HSCN
Dicyan, Phosgen
Metallsalze von: HCOOH, AcOH, Oxalsäure
- **Oligopeptide** mit bis zu 12 Aminosäureeinheiten sind **enthalten**
- größere **Biomoleküle (EiweiÙe, Cellulose...)** und **Polymere** erst seit 2000 - und **nur in sehr geringem Umfang** - in der Datenbank enthalten
- Charge-Transfer-Komplexe, π -Komplexe, **Koordinationsverbindungen** sind nur **sehr eingeschränkt** vorhanden → bessere Quelle: Gmelin-Datenbank

4. Für welche Fragestellungen eignet sich CrossFire?

- Suche nach **Substanzen** über die Verbindungsnamen, CA-Registry-Nummern oder durch die graphische Eingabe der Struktur oder von Strukturelementen

Beispiel: Welches weit verbreitete Medikament verbirgt sich hinter der Chemical-Abstracts-Registry-Nummer 50-78-2?

→ **Ergebnis:** alle gespeicherten Daten, Präparationen und Reaktionen von Aspirin

- Suche nach Substanzen, die bestimmte **Kriterien** erfüllen sollen mit physikalischen Daten und anderen Eigenschaften als Suchargument

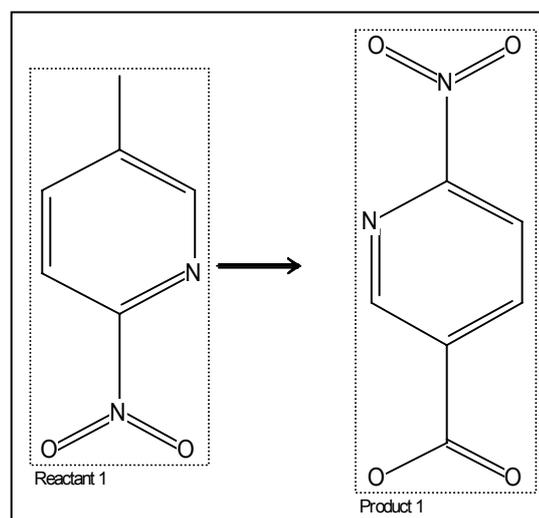
Beispiel: - alle Bromphenole mit Siedepunkten zwischen 177 bis 200 Grad Celsius
- Verbindungen, die aus bestimmten Pflanzen extrahiert werden
- Substanzen mit antiviralen Wirkungen

→ **Ergebnis:** alle gespeicherten Daten, Präparationen und Reaktionen zu den gefundenen Verbindungen

- Suche nach **Reaktionen** über die Verbindungsnamen oder durch die graphische Eingabe der Struktur oder von Strukturelementen

Beispiel:

→ **Ergebnis:** Reaktionsdetails und 2 Textstellen zur Herstellung von 6-Nitro-Nicotinsäure



5. Kann man das Programm auf dem eigenen Rechner nutzen?

- Bei Nutzung der Beilstein-CrossFire-Datenbank von den Arbeitsplatzrechnern der Fakultätsinstitute oder von zu Hause aus **muss das Beilstein-Programm lokal installiert werden!**

Von zu Hause aus: zusätzlich **VPN-Client** installieren!

Hinweise: <http://pinguin.biologie.uni-jena.de/fachinformationsportal/beilstein.html>

- **Voraussetzung für lokale Installation:**

Ausfüllen eines Webformulars unter

http://ulblin01.thulb.uni-jena.de/thulb_beilstein/sc_form.php

Mit dem Webformular bestätigen Sie die Anerkennung der Lizenz- und Nutzungsbedingungen und werden über einen Link zum Download der Software weitergeleitet.

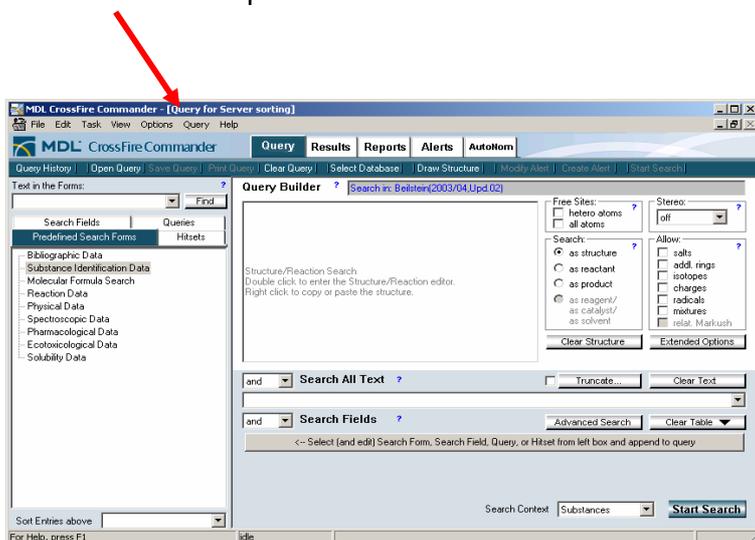
Für den Download der Software ist ein **UNIX-Account des Rechenzentrums** erforderlich.

6. Wie startet man das Beilstein-CrossFire-Programm?



- Doppelclick auf Beilstein-Commander-Icon bei lokaler Installation
 - auf dem **eigenen Rechner**
 - an folgenden Rechnern der **Zweigbibliotheken** der ThULB:
 1. ZWB Chemie Humboldt-Str. 11 am PC 495 ; PC 536 ; PC 548 ; PC 509
 2. ZWB Physik Max-Wien-Platz 1 am PC 507
 3. Multimedialesesaal Bibliotheksplatz 2 am PC1320
 4. ZWB Natwi I Ernst-Abbe-Platz2 am PC 535
 - an allen Rechnern der **ZWB Beutenberg**, "Abbe Zentrum", Hans-Knöll-Str.1
- - im **Rechenzentrum/MMZ:**
über Start → Programme → Datenbanken → Crossfire Commander V7

Der Commander-Hauptbildschirm erscheint.



Verlassen von CrossFire: **<File> Exit**

7. Welche Möglichkeiten zur Suche hat man? Predefined Search Forms (PSF), Textsuche oder Struktursuche

Struktureditor: Fenster für eine Suche, die auf einer zu zeichnenden Struktur aufbaut

Zugang: Doppelklick in dieses Fenster

oder Auswahl aus Menüzeile <Task> Draw Structure

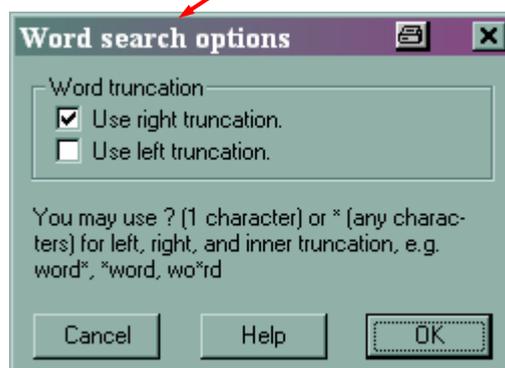
Predefined Search Forms: Fenster für Suche, die auf Fakten aufbaut

→ Name, Namensfragmente, Summenformel, CAS-Registry Number, Autor ...

Zugang: Doppelklick auf die gesuchte Datenart
→ Spezielle Eingabefenster öffnen sich

Textsuche: Fenster für Suche nach bestimmten Worten aus Titel bzw. Abstract der Publikationen bzw. nach Erläuterungen bei den einzelnen Fakten

Maskierung (Truncate): bei den gesuchten Worten ist auch eine Maskierung des Wortanfangs bzw. Wortendes möglich (wichtig z.B. für automatisches Mitsuchen der Mehrzahl)



8. Übersicht: Was geht alles mit PSF? ("Predefined Search Forms")

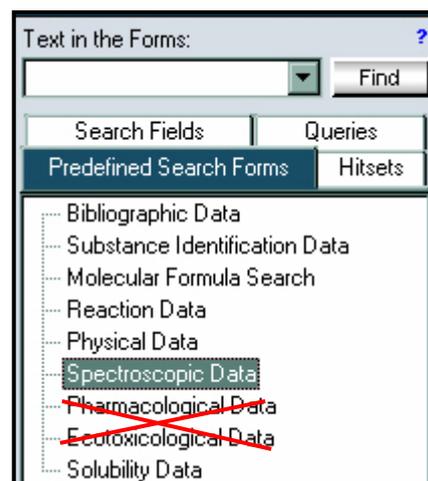
Die Verwendung der "Predefined Search Forms" ist eine bequeme und nutzerfreundliche Möglichkeit, Suchfragen perfekt zu formulieren.

Abhängig vom konkreten Suchkriterium wird die fertige Suchmaske ausfüllen, O.K. angeklickt und die abschließende Frage wird automatisch im Hintergrund erstellt.

Man kann wie ein Experte suchen, ohne sich um Feldbezeichnungen, Boolesche Operatoren und die Trunkierung der Wortenden kümmern zu müssen

Mit den PFS sind **folgende Suchen** möglich:

- Suche nach Autoren
- Vereinfachte Suche nach Substanzen mit der Substance Identification -Tabelle (Name, CAS-RN-Nummer)
- Suche mit der Summenformel
- Suche nach Reaktionen
- Suche nach Substanzen mit bestimmten physikalischen Eigenschaften (Mp, Bp, pK)
- Suche nach Spektrennachweisen (NMR, ESR, IR, UV, MS)



Die PSF-Suche nach pharmakologischen und toxikologischen Daten funktioniert leider noch nicht.

Beispiel: PSF für Suche mit der Summenformel

9. Wie sucht man mit dem Namen einer Verbindung? (bzw. mit Summenformel oder CAS-Registry-Nummer) ("Predefined Search Forms")

1. Doppel-Klick auf **<Substance Identification Data>** bei „ **Predefined Search Forms**“
2. Es öffnet sich eine Maske, in der die Suchfelder schon vorgegeben sind.
Tragen Sie Namen, Summenformel bzw. RN-Nummer in das entsprechende Feld ein.

Cancel Clear Help OK

Substance Identification Data

Registry Numbers

Compound Registry Number (..RN) = 34805-19-1

Chemical Abstracts Registry Number (RN) is

Identification Properties

Chemical Name Segments is

Chemical Name is

Molecular Formula starts with ends with contains

Fragment Molecular Formula

Number of Fragments =

Element Counts

Element Count is

list list list list list list

RN-Nummer (z. B. aus Chemikalienkatalogen) mit den Bindestrichen eintragen

Die Registry Nummer ist nicht für alle Verbindungen eingetragen, d.h. führt eine Suche mit RN nicht zum Erfolg, sollte die Recherche mit dem Verbindungsnamen, der Summenformel oder als Struktursuche wiederholt werden.

Vergewissern Sie sich vor der Suche, ob das Gesuchte in der gewählten Schreibweise überhaupt im Beilstein enthalten ist. Benutzen Sie dazu die jeweilige „Lupe“.

Summenformel muss in Hill-Order eingegeben werden:
1.Kohlenstoff, 2. Wasserstoff, 3. alle anderen Elementen in alphabetischer Reihenfolge, z.B. C28H6F50N6O4.

3. Mit dem **<OK>-Button** kehrt man in den Commander zurück. Dabei erscheint im unteren Fenster „Search Fields“ die „verbale“ Suchfrage.
4. Mit Drücken der **Start Search** Taste wird die Suche begonnen.
5. Nach abgeschlossener Suche erscheint der „**Search Status Report**“. Klicken Sie auf „**View**“. Dann werden die Suchergebnisse angezeigt.

Hinweise zur Suche mit Verbindungsnamen:

- Beilstein verwendet IUPAC-Namen, d.h. die Namen sind **in englisch!**
- Deutsche Verbindungsnamen sind selten, Trivialnamen werden nur unvollständig aufgeführt.
- Handelsnamen sind kaum enthalten.

→ Deshalb kann **Namensrecherche nur als orientierender Einstieg** empfohlen werden.

→ **Vorschlag:**

- Zerlegen Sie den chemischen Namen in geeignete Fragmente und verknüpfen Sie diese mit **and** zur Suche im Feld „Chemical Name Segments“
- Dabei sind Maskierungen der Wortenden mit * möglich.
- Oft erhält man so eine kleine Trefferzahl, die für die weitere Auswahl geeignet ist.

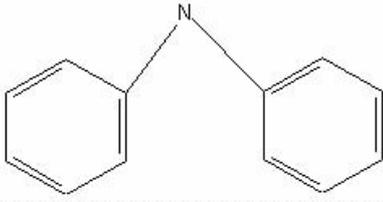
→ **Ist eine Suche mit CAS-Registry-Nummern oder dem Namen bzw. Namensfragmenten ergebnislos, sollte eine Struktursuche durchgeführt werden!!!**

10. Wie sieht der Beilstein-Eintrag einer Substanz aus?

1. Nach abgeschlossener Suche erscheint ein Fenster, aus dem die Zahl der gefundenen Substanzen hervorgeht.

Search Status Report

Your recent search(es) had the following results: Hitset Family (4 of 4):

No.	Select	Hitset	Hits	Context	Database	Query	Options
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Q05	1	Substances	Beilstein Abstracts (2004/02)	total charge = 0, radicals = 0, components = 1, no impl. ring closures, no isotopes, no IST 	original structure

Nach Anklicken von **<View>** ist ein Anschauen der Treffer möglich.

2. Zunächst sehen Sie nur die Struktur der Verbindung. Klicken Sie auf **<List>**, dann wird der vollständige Eintrag geöffnet.

MDL CrossFire Commander - [Beilstein Abstracts(2004/02):Q05 Substance 1 of 1]

File Edit Task View Options Window Help

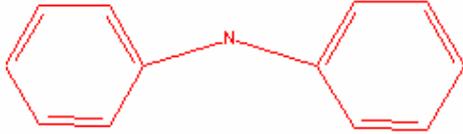
MDL CrossFire Commander **Query** Results Reports Alerts AutoNom

History | Print Hits | | View hit | Show | Grid | **List** | Get | Sort Hits | Copy | Export Hits

Beilstein Abstracts(2004/02)

- ... Saved Hitsets/Alert Hitsets
- Session Hitsets
 - Q: Q01 (1654 Reactions)
 - Q: Q02 (1604 Reactions)
 - Q: Q03 (451 Reactions)
 - Q: Q04 (2497 Citations)
 - Q: Q05 (1 Substances)**

Hit 1 BRN=508755 C₁₂H₁₁N



3. Im Full-Display-Modus erscheint rechts oben die Struktur der Substanz in einem kleinen Fenster. Ist das nicht der Fall, dann klicken Sie auf **Show**.
Durch das große Fenster, das alle vorhandenen Felder zeigt, kann mit dem rechten Rollbalken gescrollt werden.

The screenshot shows the MDL CrossFire Commander interface. The 'Substance' section displays details for Beilstein Registry Number 6665957, including its chemical name, formula (C₁₇H₁₇F₃NO₂), and molecular weight (353.34). A chemical structure window titled 'Q34: Hit 1' shows the structure of [3-phenyl-3-(4-trifluoromethyl-phenoxy)-propyl]-carbamic acid methyl ester. The 'Field Availability List 1-4 of 4' table is shown below. The 'Reaction 1 of 4' section details the reaction of (S)-norfluoxetine hydrochloride with carbonochloridic acid methyl ester to form the product. A reference entry is shown at the bottom: 'Ref 1: 5850701, LitLink; Journal; Koenig, Thomas M.; Mitchell, David; TELEAY; Tetrahedron Lett.; EN; 35; 9; 1994; 1339-1342.' A diagram with red boxes and arrows identifies parts of this reference: 'Autoren' points to the authors; 'Band (Volume)' points to '35'; 'Seiten' points to '1339-1342'; 'Zeitschrift' points to 'Tetrahedron Lett.'; 'Sprache' points to 'EN'; 'Jahrgang' points to '9'; and 'Heft (Issue)' points to '9'.

Code	Field Name	Occ.
RX	Reaction	4
NMR	Nuclear Magnetic Resonance	4
IR	Infrared Spectra	1
CNR	Reference	3

4. In der **Field Availability List** sieht man die für die jeweilige Verbindung verfügbaren Datenfelder.
→ Jetzt weiß man, welche Informationen zu der Verbindung enthalten sind.

Field Availability List 1-4 of 4		
Code	Field Name	Occ.
RX	Reaction	4
NMR	Nuclear Magnetic Resonance	4
IR	Infrared Spectra	1
CNR	Reference	3

11. Wie sieht man sich die Suchergebnisse an?

1. Blättern zwischen den einzelnen Treffern im Hitset



Mit Hilfe dieser Tasten ist es möglich, in den Suchergebnissen zu blättern. Die linke/rechte Taste ist die Sprunganweisung zum ersten/letzten Treffer, die mittleren Tasten blättern jeweils einen Hit vor bzw. zurück.

2. Navigationshilfe innerhalb eines Treffers: <View>

Viele Dokumente enthalten sehr viele Felder oder auch sehr viele Einträge in einem Feld, so dass bloßes Durchscrollen bis zur gesuchten Eigenschaft zu langwierig ist.

Benutzen Sie hier einfach die Hyperlinks der „**Field Availability**“.

Beim Klick auf die gewünschte Eigenschaft springt der Cursor zu den entsprechenden Einträgen.

View	Options	Window	Help
Grid View / List View			F4
<input checked="" type="checkbox"/> Open Hitset in Grid View			
• All Fields			
Identification Data only			
Hit only			
Select User View			
Define User View...			
<input checked="" type="checkbox"/> Highlight Hit Terms			
Selected Hits only			
Goto Hit			
<input checked="" type="checkbox"/> Structures included			
Structure in separate window			F2
All Reactions			
Substance as Reactant only			
• Substance as Product only			
Update Dates included			
<input checked="" type="checkbox"/> Field Availability included			
Field Availability in separate window...			F5
Show Hitset History...			F6
Show Tree View			F3
<input checked="" type="checkbox"/> Show Status Bar			

Field Availability List	
Code	Field Name
RX	Reaction
NMR	Nuclear Magnetic
IR	Infrared Spectra
CNR	Reference

Unter <View> sollten für eine optimale Ansicht nebenstehende Häkchen gesetzt werden.

All Fields: Vollanzeige: Alle Felder mit Strukturformeln der Substanz und aller Reaktionen

User View: Selbstdefinierte Displayvariante, die nur die benötigten Felder enthält

Achtung: Wichtig bei Suche nach Präparationen!

Reaction View: Hier kann ausgewählt werden, welche Reaktionen der gesuchten Verbindung angezeigt werden:

- alle Reaktionen
- Substanz als **Ausgangsstoff** bzw.
- Substanz als **Produkt** von Reaktionen

12. Wie druckt man einzelne Suchresultate aus?

1. Klicken Sie in der Menüleiste auf das Druck-Icon.



2. Wählen Sie aus, **wieviele gedruckt** werden soll:

- nur ausgewählte /Reaktionen/Eigenschaften des speziellen Treffers, der gerade betrachtet wird (**Selected Facts**)
- alle Reaktionen/Eigenschaften dieses Treffers (**Current Hit**)
- mehrere/alle Treffer mit allen Reaktionen/Eigenschaften (**Range...**)

Empfehlung:

Drucken Sie **nur ausgewählte Fakten** aus!

Dazu setzen Sie bei der (den) ausgewählten Eigenschaft(en) ein Häkchen.

Dabei ist zu beachten, dass die Auswahl der „Selected Facts“ nur für den gerade betrachteten Treffer gilt. Bei mehreren Treffern jedes Mal neu anklicken!

Grundsätzlich gilt:

Wenn nicht spezielle Felder angeklickt wurden, werden alle dargestellten Reaktionen und Eigenschaften ausgedruckt!!!

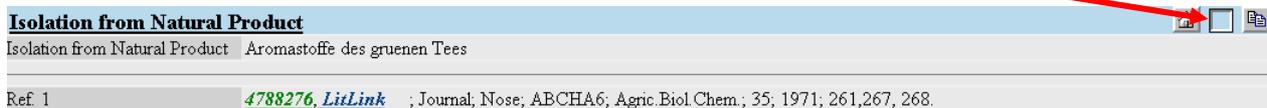
Da Dokumente häufig sehr lang sind und viele Einträge enthalten, sollte man sich **gut überlegen**, **ob wirklich alles ausgedruckt werden soll**.

Oftmals ist ein Export der gewünschten Daten in ein Word bzw. HTML-Dokument besser.

Achtung: Wenn Sie die Rechner **in der Chemiebibliothek** nutzen, ist **ein Ausdruck nicht möglich!** Hier bleibt nur der **Export** der Daten als Ausweg!

13. Wie exportiert man Suchresultate in eine WORD-Datei?

1. Setzen Sie bei der (den) ausgewählten Eigenschaft(en) ein Häkchen.



2. Ein Klick auf diesen Button  öffnet folgendes Fenster:

3. Klicken Sie unter „Options“ bitte „Include the Structure or Reaction Picture“ an, damit der Export auch die Strukturen einschließt.

4. Nochmaliges Anklicken von  und mit „Copy facts to Word“ wird der Export gestartet.

- Include the Structure or Reaction Picture
- Convert Structures to Bitmaps
- Convert Structures to Molfiles

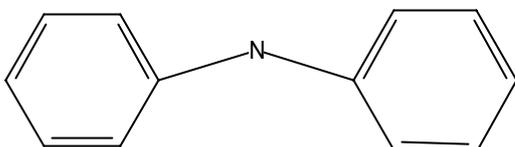
Copy Fact to Report report.html
Open the Report
Set Report File...
Set Report Title...
Clear Report File

Copy Fact to Clipboard
Copy Fact to Word

Options

Select all the Facts: Related Structure
Select all Facts
Unselect all Facts selected

5. So sieht das dann im Word-Dokument aus:



Isolation from Natural Product (BS0203PR:Substances:Q01 hit 1, BRN 508755)

Isolation from Natural Product	Aromastoffe des gruenen Tees
Ref. 1	4498533;LitLink ; Journal; Nose et al.; ABCHA6; Agric.Biol.Chem.; 35; 1971; 261,267, 268.

6. Das **Exportieren nach Word** funktioniert nur für ausgewählte Eigenschaften oder Reaktionen innerhalb **eines** Hits.

Sollen Eigenschaften/Reaktionen von **mehreren Treffern** exportiert werden, muß das Setzen der **Häkchen** bei den benötigten Fakten eines jeden weiteren Treffers **wiederholt werden**.

Dabei werden die neu exportierten Daten bzw. Reaktionen automatisch am Ende der geöffneten Word-Datei angehängt!

7. Vergessen Sie nicht, die Word-Datei unter einem selbst gewählten Namen abzuspeichern! **Wenn Sie an Rechnern der ThULB arbeiten, bitte so vorgehen:** Speichern Sie die Datei auf „V\$ on Client(S):“ im Ordner „**Export**“ (Manchmal ist es ein anderes Laufwerk, U oder W, aber es **muss** der Ordner „Export“ sein!!!!). Öffnen Sie nun das Programm „Netman“ mittels des Icons auf dem Desktop, „**Öffentlicher PC-Arbeitsplatz**“ links oben anklicken, dann rechts oben Klick auf „**Exportdatei mailen**“. Geben Sie Ihre Email-Adresse an, bestätigen Sie die Eingaben. Die Email wird an Sie verschickt.

14. Wie exportiert man Suchresultate in eine HTML-Datei?

1. Setzen Sie bei der (den) ausgewählten Eigenschaft(en) ein Häkchen.

Isolation from Natural Product

Isolation from Natural Product Aromastoffe des gruenen Tees

Ref. 1 [4788276, LitLink](#); Journal; Nose; ABCHA6; Agric.Biol.Chem.; 35; 1971; 261,267, 268.

2. Ein Klick auf diesen Button  öffnet folgendes Fenster:

3. Klicken Sie unter „Options“ bitte „Include the Structure or Reaction Picture“ an, damit der Export auch die Strukturen einschließt.

4. Nochmaliges Anklicken von  und mit „Selected Facts to Report ...“ wird der Export gestartet.

Include the Structure or Reaction Picture
Convert Structures to Bitmaps
 Convert Structures to Molfiles

Selected Facts to Report report11.html

Open the Report

Define Report File...

Set Report Title...

Clear Report File

Copy Fact to Clipboard

Selected Facts to Word

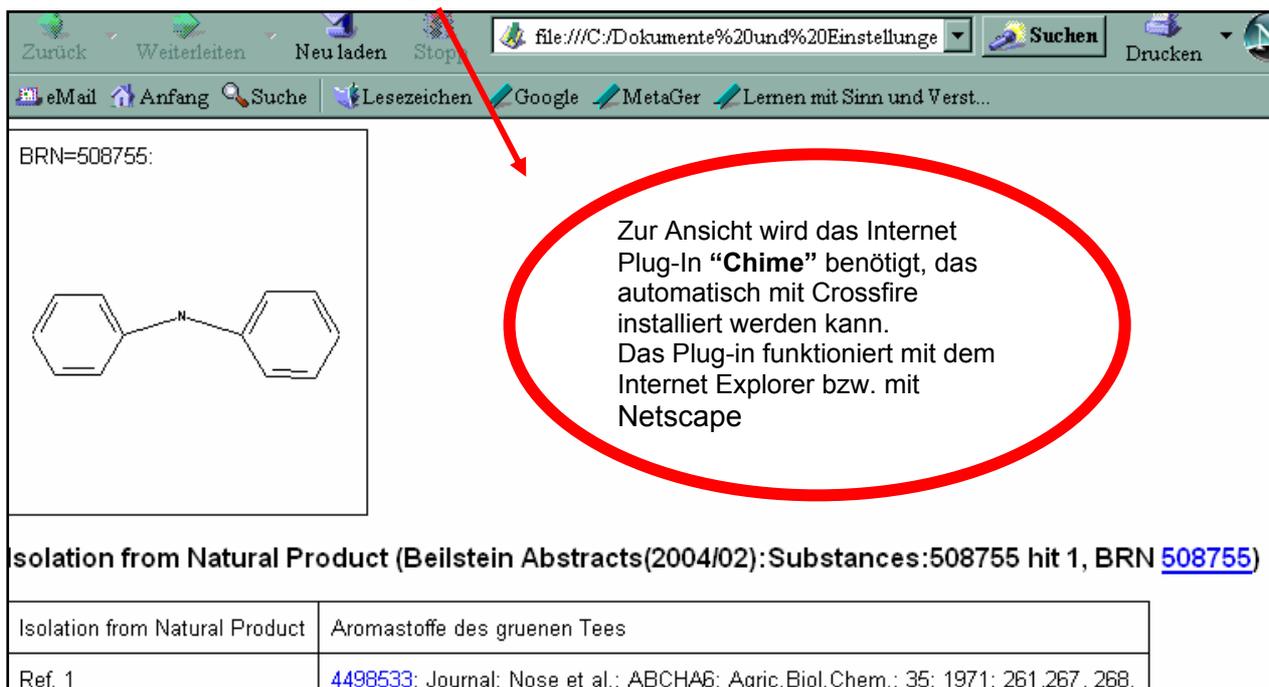
Options

Select all the Facts: Substance

Select all Facts

Unselect all Facts

5. So sieht das dann als HTML-Dokument aus:



BRN=508755:

C1=CC=C(C=C1)N(C2=CC=CC=C2)C3=CC=CC=C3

Zur Ansicht wird das Internet Plug-In „Chime“ benötigt, das automatisch mit Crossfire installiert werden kann. Das Plug-in funktioniert mit dem Internet Explorer bzw. mit Netscape

Isolation from Natural Product (Beilstein Abstracts(2004/02):Substances:508755 hit 1, BRN [508755](#))

Isolation from Natural Product	Aromastoffe des gruenen Tees
Ref. 1	4498533 ; Journal; Nose et al.; ABCHA6; Agric.Biol.Chem.; 35; 1971; 261,267, 268.

6. Das **Exportieren in die HTML-Datei** funktioniert nur für ausgewählte Eigenschaften oder Reaktionen innerhalb **eines** Hits.

Sollen Eigenschaften/Reaktionen von **mehreren Treffern** exportiert werden, muß das Setzen der **Häkchen** bei den benötigten Fakten eines jeden weiteren Treffers **wiederholt werden**.

Dabei werden die **neu exportierten Daten** bzw. Reaktionen automatisch am Ende des Reports **angehängt!** Damit Sie das aber auch sehen, muß beim Betrachten der Seite mit dem Browser auf den „**Reload**“-Button (Neu laden bzw. Aktualisieren) geklickt werden.

7. Wenn Sie für jeden Hit eine eigene Datei möchten, vergeben Sie unter „Define Report File“ jeweils einen neuen Namen vor dem Export.

15. Wie sucht man nach Arbeiten eines bestimmten Autors?

1. Doppel-Klick auf **<Bibliographic Data>** bei „Predefined Search Forms“
2. Es öffnet sich eine Maske, in der der Name des gesuchten Autors/Erfinders eingegeben werden kann.

Mit den Suchfeldern „Zeitschriftentitel“ bzw. „Publikationsjahr“ kann die Suche **eingeschränkt werden**.

Bibliographic Data

Find all citations where

Author: starts with [] list

Patent Assignee: is [] list

Journal Title: starts with [] list

CODEN: starts with [] list

Article Title: starts with [] list

Publication Year: = [] list

Search in Citation Basic Index

Search any keyword in all citation fields (author, title, abstract) which: starts with [] list

- Den gesuchten Autor mit dem Nachnamen zuerst eingeben, nach einem Komma (und meistens - aber nicht immer! - einem Leerzeichen) können Initial(en) bzw. Vorname(n) folgen. Beispiele:
brooks, b.r.
brooks, Bernard
brooks, bernard r.
brooks, Bernie
 - Um sicherzustellen, dass möglichst alle Arbeiten eines bestimmten Autors ermittelt werden, sollte man mit der „Lupe“ die alphabetische Liste der vorhandenen Autoren überprüfen. So findet man auch abweichende Schreibweisen, z.B. Litschew oder Litchev.
→ **Achtung:** Diese verschiedenen Schreibweisen müssen dann einzeln gesucht werden!
 - **Achtung** bei deutschen Namen mit Umlauten!!!
Diese müssen auch „aufgeloest“ gesucht werden: **ö** bzw. **oe** oder **o**
 - Die Maskierung des Wortendes mit * kann hilfreich sein bei der Suche von Nachnamen. Allerdings können hier auch falsche Autoren mit gefunden werden, wenn zu viele Buchstaben vom Namen maskiert sind.
3. Mit dem **<OK>-Button** kehrt man in den Commander zurück. Dabei erscheint im unteren Fenster „Search Fields“ die „verbale“ Suchfrage.
 4. Mit Drücken der Taste **<Start Search>** wird die Suche begonnen.
 5. Nach abgeschlossener Suche erscheint der „**Search Status Report**“. Klicken Sie auf „**View**“.
Dann werden die Suchergebnisse angezeigt.
 - Jeder gefundene Hit ist der Nachweis eines Artikels des gesuchten Autors, meist mit allen in diesem Artikel aufgeführten Substanzen und Reaktionen.
 - Über die farbigen Hyperlinks in kursiver Schrift ist es möglich, sofort zu Reaktionen bzw. Verbindungen zu gelangen
 - **Rot** (unterstrichen und kursiv) - Reaktionen
 - **Schwarz** (unterstrichen und kursiv) - Ausgangsstoffe
 - **Blau** (unterstrichen und kursiv) - Reaktionsprodukte

16. Wie sucht man Präparationen/Reaktionen mittels „Predefined Search Forms“?

1. Doppel-Klick auf **<Reaction Data>** bei „**Predefined Search Forms**“ (linke obere Box)
2. Es öffnet sich eine Maske, mit der nach Ausgangsstoffen, Produkten, Ausbeuten, Katalysatoren und Lösungsmitteln für Reaktionen gesucht werden kann. Tragen Sie den Produktnamen (und eventuell einen Ausgangsstoff) in das entsprechende Feld ein.
3. Mit dem **<OK>**-Button kehrt man in den Commander zurück. Dabei erscheint im Fenster des Fakteneditors die Reaktions-Suchfrage.
4. Mit Drücken der **<Start Search>**-Taste wird die Suche begonnen.
5. Nach abgeschlossener Suche erscheint der „**Search Status Report**“. Klicken Sie auf „**View**“. Dann werden die Suchergebnisse angezeigt.

Reaction Data	
Find all reactions where	
Reactant name	starts with <input type="text"/>
Product name	starts with <input type="text"/>
Reagent/Catalyst/Solvent	starts with <input type="text"/>
Yield	= <input type="text"/>
Search in Reaction Basic Index	
Search any keyword in all fields related to reactions or chemical data which	starts with <input type="text"/>

Mit Hilfe des Rollbalkens können Sie zwischen unterschiedlichen Möglichkeiten wählen.

Vorschlag:
Wählen Sie „contains“ und zerlegen Sie den chemischen Namen in geeignete Fragmente, die mit **and** zur Suche verknüpft werden. Dabei sind Maskierungen der Wortanfänge und -enden mit * möglich.

Beispiel:
chloro **and** *benzene*

Hinweis: Sollten Sie bei einer solchen Suche keine Ergebnisse erhalten, so suchen Sie die Reaktionen noch einmal über eine Struktursuche!

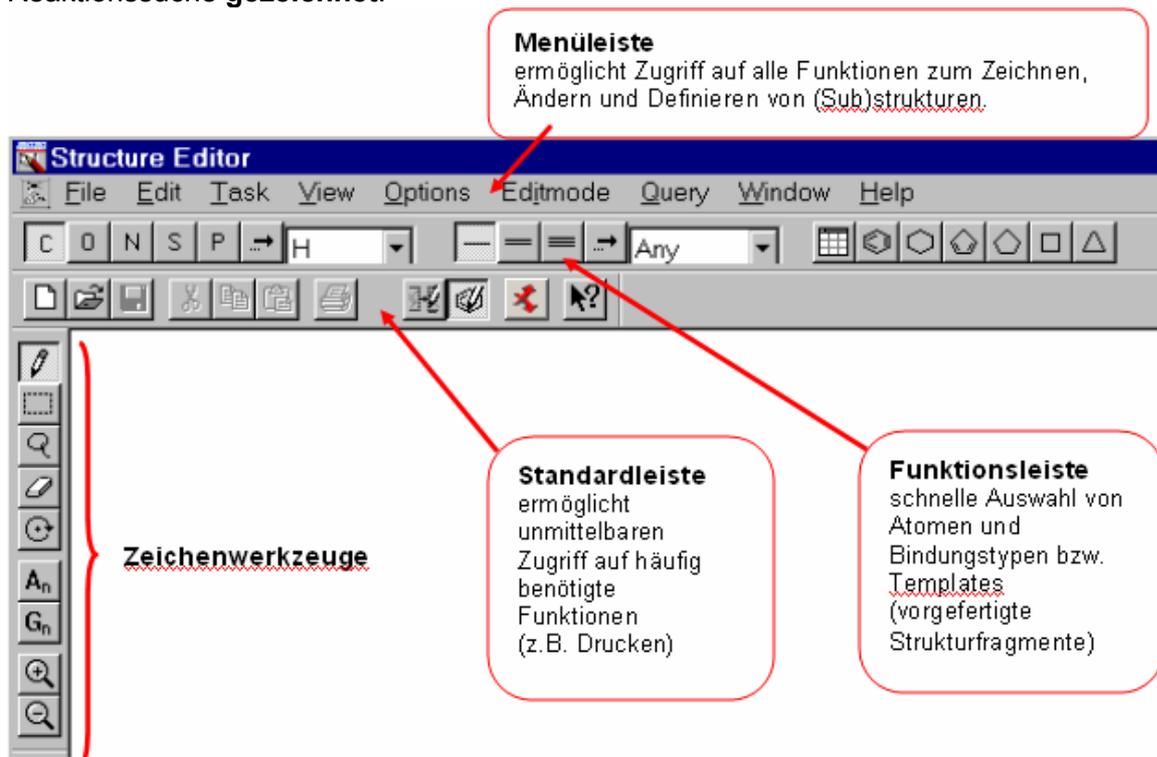
17. Wie zeichnet man eine Struktur?

17.1 Zeichenwerkzeuge und Hilfsmittel

Achten Sie darauf, daß das **CrossFire-Zeichenprogramm** ausgewählt ist.



Mittels Tasten und der Maus werden **Strukturen** für eine anschließende Struktur- oder Reaktionssuche **gezeichnet**.



Schaltet in Reaktionseditor

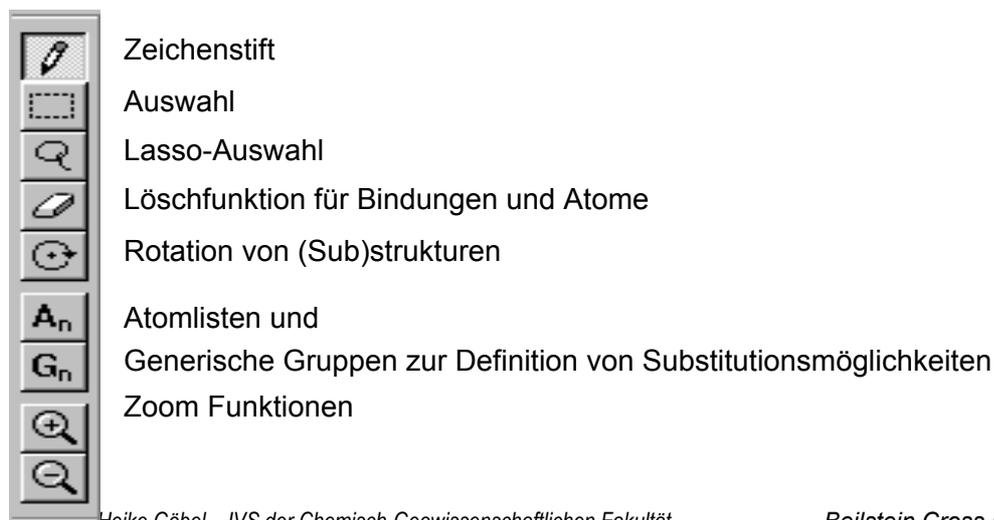


Schaltet in Struktureditor

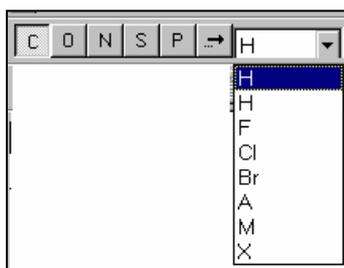


Schaltet in Commander

Zeichenwerkzeuge

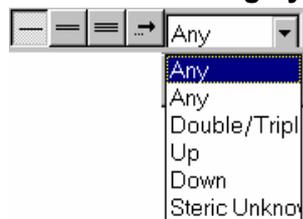


Auszuwählende **Atomarten** für den Zeichenstift



Mit der Pfeiltaste → wird das rechts im Fenster ausgewählte Atom voreingestellt.

Wählbare **Bindungstypen** für den Zeichenstift



Mit → wird die rechts im Fenster definierte Bindung voreingestellt

Templatefile und Templates



Durch Anklicken eines der Symbole wird diese Struktur in das Zeichenfenster kopiert.

Mit diesem Button lässt sich eine Sammlung von vorgefertigten Strukturen und funktionellen Gruppen (**Templates**) öffnen.

Diese Sammlung muss allerdings vorher im Struktureditor unter **<File><Template>** ausgewählt werden. (Dabei Pfad beachten c:/Bc/Template)

Vorhandene vorgefertigten Strukturen (Templates)

AMINACID.BSD

Aminosäuren

AROMATIC.BSD

Aromaten

CHAINS.BSD

Ketten

CYC_ALK.BSD

Cycloalkane

HETEROCY.BSD

Heterocyclen

NATPRN.BSD

Naturstoffe, die N im Ring

enthalten

NATPRNOS.BSD

Naturstoffe, die S im Ring
enthalten

NUCLEOSI.BSD

Nucleoside

POLYATOM.BSD

Coordinationsverb.

PORPHYR.BSD

Porphyrine

RESIDUE.BSD

Funkt. Gruppen

STEROIDS.BSD

Steroide

SUG_OPEN.BSD

Zucker (offen)

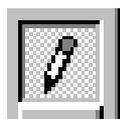
SUG_RING.BSD

Zucker (zyklisch)

TERPEN.BSD

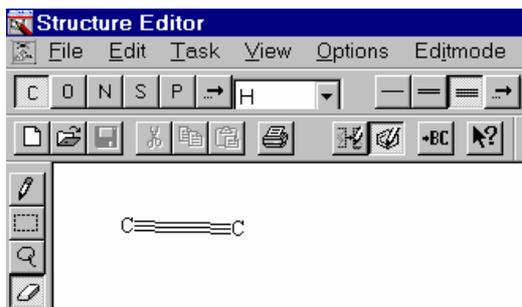
Terpene

17.2 Zeichnen von Strukturen



Die Bildung von Strukturen erfolgt entweder mit den Templates oder durch freihändiges Zeichnen mit dem Zeichenstift, der durch Anklicken aktiviert wird.

Der Cursor wird auf das „Zeichenbrett“ gestellt. Die linke Maustaste klicken und gedrückt halten, um das erste Atom zu positionieren, dann die Maus zum gewünschten Endpunkt der Bindung ziehen, Maustaste loslassen um dort das zweite Atom zu setzen usw.



Bindungsordnung und Endatom sind durch die Voreinstellungen in der Funktionsleiste bestimmt, z.B. C-Atom und Dreifachbindung.

Um den Bildschirm übersichtlicher zu halten, wird per Voreinstellung das Formelzeichen **C** für die Kohlenstoffatome unterdrückt. Sollen die **C-Atome** doch erscheinen oder **als Punkte** dargestellt werden, wird das unter **<Options><Molecule View> <Atom View>** eingestellt.

Falsche oder nicht mehr benötigte Atome bzw. Bindungen kann man mit dem Radiergummi einzeln auslöschen. Größeren Teilstrukturen mit dem Lasso markieren und **<Entf>** drücken (oder **<Edit><cut>**) wählen.

Wasserstoff-Atome müssen normalerweise **nicht gezeichnet** werden. Sie werden automatisch für jede freie Valenz angenommen.

Ausnahmen

- H-Atome zur **Definition von Stereozentren** müssen gezeichnet werden. ("Stereo Search" unter <Options> im "Commander"-Hauptmenü muss bei der Suche eingeschaltet sein!)
- H-Atome zum **Ausschluss von mit H-Isotopen markierten Verbindungen** müssen gezeichnet werden.
(Mit dem **<Select>**-Tool die entsprechenden H-Atome markieren, dann **<Query> <Exclude Isotopes>**)

Sowohl die gezeichneten **Atome (A)** als auch die **Bindungen (B)** lassen sich im Nachhinein durch Anklicken des Atoms oder der Bindung **ändern**.

Der Stift zeigt ein **A** oder **B**, wenn er richtig positioniert ist.

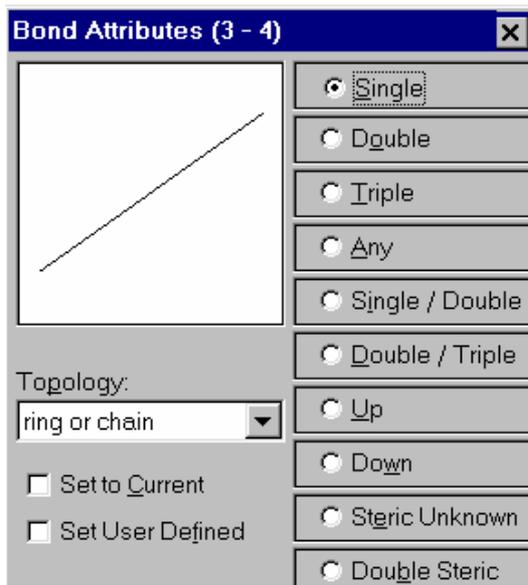
Es öffnen sich Fenster, die eine Definition der Atom- oder Bindungseigenschaften erlauben: **Atomattribute- bzw. Bindungsattribute-Box**.

Atomattribute-Box

Hier ist es möglich, u.a. die **Atomart** zu definieren.

Free Sites: MAX (beliebige Anzahl von Substituenten oder H-Atomen **möglich**).

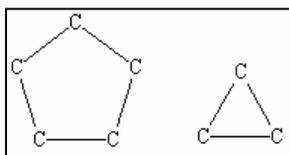
Soll Substitution **erzungen** werden, H-Count-Min/Max festlegen).



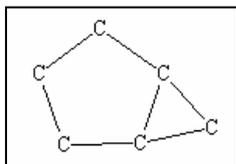
Bindungsattribute-Box

Hier ist es möglich, die Art der **Bindungen festzulegen** oder den Bindungstyp ganz offen zu lassen (Any).

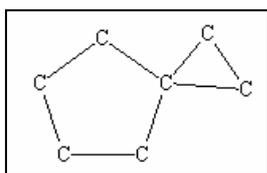
Verknüpfen von Teilstrukturen



Ersten Ring in der Funktionsleiste oben aussuchen, anklicken und positionieren, zweiten Ring daneben legen.



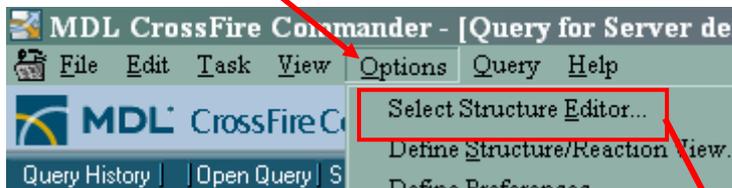
Erfasst man eine ausgewählte Teilstruktur an einer Bindung und schiebt diese über eine Bindung der anderen Teilstruktur, so verschmelzen beide Bindungen unter Drehung einer Teilstruktur miteinander.



Erfasst man eine ausgewählte Teilstruktur an einem Atom und verschiebt es auf ein Atom der anderen Teilstruktur, so verschmelzen nur diese beiden Atome miteinander. Eine Drehung einer Teilstruktur erfolgt nicht.

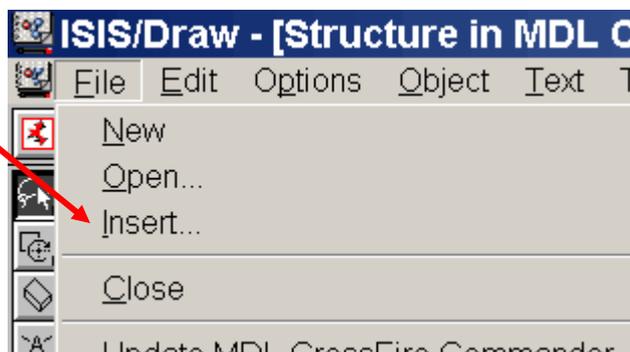
18. Wie importiert man Strukturen aus ISIS Draw?

1. Zeichnen Sie die gesuchte Verbindung mit ISIS Draw.
2. Mit **<File><Save>** die Verbindung als **.skc**-File abspeichern.
3. Im **Beilstein Commander** unter **<Options><Select Structure Editors>** MDL ISIS/Draw als bevorzugten Editor auswählen.



4. Zum Öffnen des Struktureditors „ISIS Draw“ Doppelklick im rechten Fenster des Hauptbildschirms .
5. Mit **<File><Insert>** wird die abgespeicherte Struktur importiert.

Bitte nicht **<Open>** verwenden.
Damit wird die Datei der gespeicherten Verbindung zwar geöffnet, lässt sich aber nicht mit dem Beilstein suchen!!



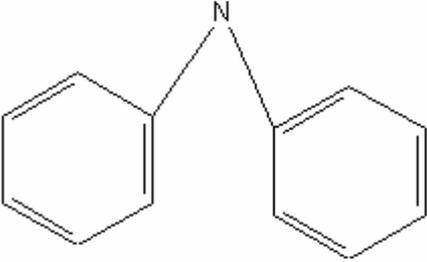
6. Mit dem  - Button zurück zum Beilstein Commander.
7. Die gezeichnete Struktur erscheint in der Strukturbox.

19. Wie sucht man eine exakte Struktur?

1. Ist die zu suchende Struktur fertiggezeichnet, schaltet man mit  in den Beilstein-Commander zurück.
2. Die gezeichnete Struktur erscheint in der Strukturbox.

Query Builder ? Search in: Beilstein Abstracts(2004/02)

total charge = 0, radicals = 0, components = 1, no impl. ring closures, no isotopes, no IST



Free Sites: hetero atoms all atoms

Stereo: off

Search: as structure as reactant as product as reagent/
as catalyst/
as solvent

Allow: salts addl. rings isotopes charges radicals mixtures relat. Markush

Clear Structure Extended Options

3. Rechts neben der gesuchten Verbindung kann der **Umfang einer Recherche** eingestellt werden. Für eine **Exakte Suche** darf bei „Free Sites“ bzw. „Allow“ kein Haken stehen! Nur dann erfolgt eine Suche genau nach der vorgegebenen Struktur.

4. Vergewissern Sie sich, dass unter <Query> bei „AutoSearch ON“ **kein** Häkchen gesetzt ist.

Query Help

Extended Structure Query Options...

External Query Handling

AutoSearch ON

Stop AutoSearches after 1st result

Show results of a multiple search

Show Warning 'Multiple Database Search'

Clear Query History on Exit

5. Wählen Sie links neben der Schaltfläche <Start Search> den <Search Context> <Substances> aus.

Search Context Substances Start Search

Substances

Reactions

Citations

Sollten Sie das vergessen, empfiehlt der Beilstein-Commander den richtigen Suchkontext. Folgen Sie der Empfehlung.

Select Search Context

The context of your query is different from the context you selected.

Recommended context: Substances

Or search in this context: Citations

Help Cancel

6. Mit Klick auf die Schaltfläche <Start Search> beginnt die Suche.
7. Nach abgeschlossener Suche erscheint der „Search Status Report“. Klicken Sie auf „View“. Dann werden die Suchergebnisse angezeigt.

Erweiterung des Suchumfangs:

Durch Klick auf die gewünschten Möglichkeiten bei „Allow“ kann man die Suche z.B. auf Stoffgemische, Mehrkomponentenverbindungen (Salze), geladene bzw. radikalische Verbindungen oder Stereoverbindungen ausweiten.

Lässt man auch noch Ringschlüsse bzw. <Free Sites> (unspezifische

Substitutionsmöglichkeiten an allen Atomen) zu, erreicht man eine umfassende **Substruktursuche**.

20. Wie sucht man Halb-Reaktionen (Präparationen von A, Reaktionen von B) ($? \rightarrow A$ bzw. $B \rightarrow ?$) ?

1. Ist die zu suchende Struktur fertiggezeichnet, schaltet man



mit in den Beilstein-Commander. zurück.

2. Die gezeichnete Struktur erscheint in der Strukturbox.

3. Rechts neben der gesuchten Verbindung wird eingestellt, ob die Substanz als Reaktant oder als Reaktionsprodukt gesucht werden soll.

4. Stellen Sie auch wieder den Suchumfang ein. Soll z.B. die nur Herstellung der exakten Verbindung ohne mögliche Substitutionen gesucht werden, darf bei „**Free Sites**“ bzw. „**Allow**“ kein Haken stehen! Nur dann erfolgt eine Suche nach Präparationen / Reaktionen genau der vorgegebenen Struktur.

5. Vergewissern Sie sich, dass unter **<Query>** bei „**AutoSearch ON**“ kein Häkchen gesetzt ist.

6. Wählen Sie links neben der Schaltfläche **<Start Search>** den **<Search Context>** **<Reactions>** aus.

Sollten Sie das vergessen, empfiehlt der Beilstein-Commander den richtigen Suchkontext. Folgen Sie der Empfehlung.

7. Mit Klick auf die Schaltfläche **<Start Search>** beginnt die Suche.

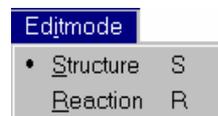
8. Nach abgeschlossener Suche erscheint der „**Search Status Report**“. Klicken Sie auf „**View**“.

Dann werden die Suchergebnisse angezeigt.

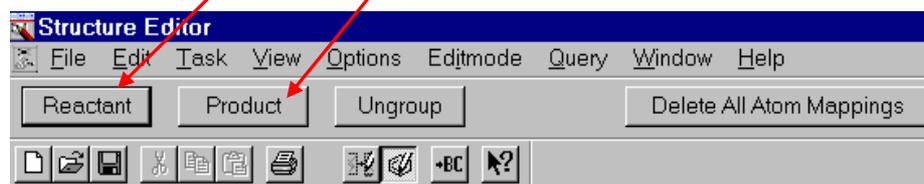
21. Wie sucht man vollständige (einstufige) Reaktionen (A → B)?

1. Für eine Suche nach Reaktionen **zeichnet** man im **Struktureditor** nicht nur eine Struktur, sondern sowohl **Ausgangsstoff(e)** als auch **Produkt(e)**.

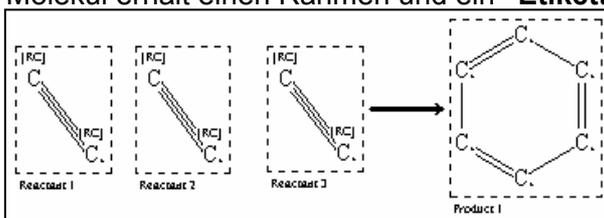
2. Mit dem  - Knopf oder unter **<Editmode><Reaction>** wird in den **Reaktionseditor** gewechselt.



Es erscheint eine neue Funktionsleiste (Reactant, Product...)



Mit dem Select-Tool  **markiert** man eine **Struktur**. In der Funktionsleiste hat man die Möglichkeit, für diese Teilstruktur die **Rolle** als Reaktant bzw. Produkt **auszuwählen**. Das Molekül erhält einen Rahmen und ein „**Etikett**“, es erscheint ein **Reaktionspfeil**.



Bei mehreren Ausgangsstoffen (Produkten) sollte jeder einzeln (nacheinander) als „Reactant“ („Product“) definiert werden.

Soll die **Struktur** von Reaktant oder Produkt nochmals **verändert** werden, muss wieder in den **Struktureditor zurückgegangen** werden (mit **<Editmode> <Structure>**).

3. Mit dem **<OK>**-Button kehrt man in den Commander zurück. Dabei erscheint im rechten Fenster Reaktions-Suchfrage. Rechts daneben kann wieder der Suchumfang eingestellt werden.

4. Vergewissern Sie sich, dass unter **<Query>** bei „**AutoSearch ON**“ **kein** Häkchen gesetzt ist.

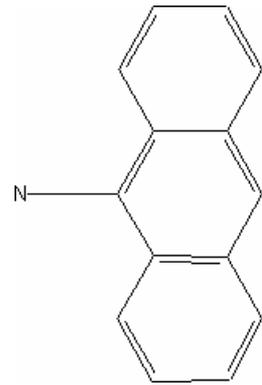
5. Wählen Sie links neben der Schaltfläche **<Start Search>** den **<Search Context> <Reactions>** aus.

6. Mit Klick auf die Schaltfläche **<Start Search>** beginnt die Suche.

7. Nach abgeschlossener Suche erscheint der „**Search Status Report**“. Klicken Sie auf „**View**“. Dann werden die Suchergebnisse angezeigt.

22. Wie sucht man mehrstufige Reaktionen? (A → B → C → D...)

Beispiel: Herstellung von **Anthracen-9-amin** aus Propan über die Zwischenstufen Anthracen und Anthracen-9,10-diol.



1. Suchen Sie das **Endprodukt** Ihrer mehrstufigen Synthese wie in Punkt 20 angegeben.

2. Für unser Beispiel Anthracen-9-amin erhalten wir **12 Reaktionen zur Herstellung:**

Search Status Report

Your recent search(es) had the following results: Hitset Family (6 of 6): [Previous](#) [Next](#)

No.	Select	Hitset	Hits	Context	Database	Query	Options
1	<input checked="" type="checkbox"/>	Q06	12 Reactions		Beilstein Abstracts (2004/04)	 Product1	original structure

3. Suchen Sie in den Treffern nach Reaktionen mit Anthracen-9,10-diol als Ausgangsstoff.
(Reaktion **272834**, Treffer 2)

Hier finden Sie die Literaturangaben von Textstellen, die die Herstellung Ihrer letzten Stufe beschreiben. Exportieren Sie alle benötigten Angaben, wie in Punkt 12 beschrieben, in eine Word-Datei.

Reaction Hitset Family [Print](#)

Reaction ID	272834
Reactant BRN	1875799 anthracene-9,10-diol
Product BRN	2209405 [9]anthrylamine
No. of Reaction Details	1
Find similar reactions	click here

Reaction Details

Reaction Classification	Preparation
Reagent	aqueous NH ₃
Temperature	150 C
Pressure	18387.7 - 20594.2 Torr

Note 1 Handbook

Ref. 1	1815033, LitLink ; Journal; Lauer; Aoyama; Shingu; CHBEAM; Chem. Ber.; 71; 1938; 1151, 1157.
Ref. 2	1815044, LitLink ; Journal; Shingu; KGKZA7; Kogyo Kagaku Zasshi; Spl. 42 <1939> 173; Chem.Abstr.; 1943; 3083.

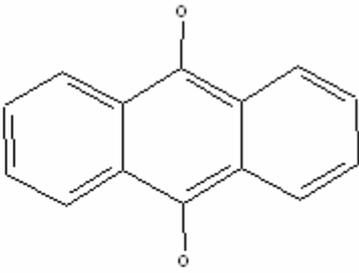
Q06: Hit 2 [Print](#) [Close](#)

4. Klicken Sie auf den **schwarzen Hyperlink** beim Anthracen-9,10-diol als Ausgangsstoff.

5. Sie werden zum **Substanzeintrag** von Anthracen-9,10-diol geleitet. Hier finden Sie neben allen Reaktionen (Eigene Reaktionen sowie Reaktionen zur Herstellung) auch alle verfügbaren Eigenschaften.

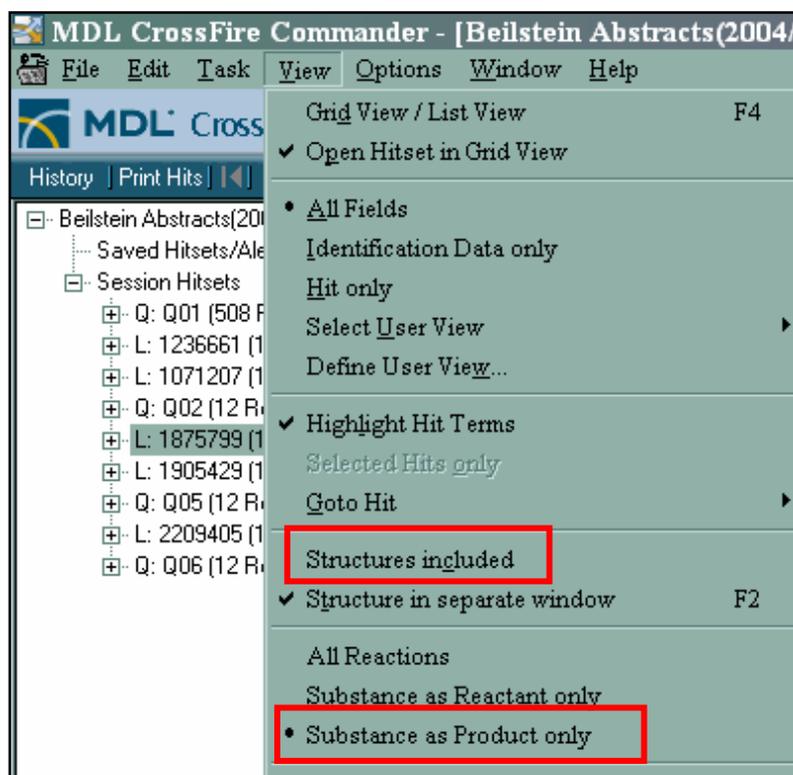
Substance Identification	
Beilstein Registry Number	1875799
Beilstein Preferred RN	4981-66-2
CAS Registry Number	4981-66-2
Chemical Name	anthracene-9,10-diol
	Anthrahydrochinon
Autoname	anthracene-9,10-diol
Molecular Formula	C ₁₄ H ₁₀ O ₂
Molecular Weight	210.23
Lawson Number	6208
Type of Substance	isocyclic
Constitution ID	1693076
Tautomer ID	1799290
Beilstein Reference	0-08-00-00190, 1-08-00-00578, 2-08-00-00215, 3-08-00-01452, 4-0

1875799: Hit 1



Field Availability List 1-10 of 14		
Code	Field Name	Occ.
RX	Reaction	33
RSTR	Related Structure	2
CDER	Derivative	4
CPD	Crystal Property Description	1

6. Vergewissern Sie sich, daß unter **<View>** „**Substance as Product only**“ ausgewählt ist, damit nur **Herstellungsverfahren** für Anthracen-9,10-diol angezeigt werden, aber nicht seine Reaktionen. Weiterhin sollte „**Structures included**“ ausgewählt sein, damit die Reaktionsschemata angezeigt werden.



7. Scrollen Sie sich durch die **Präparationen**: Suchen Sie eine Herstellung aus Anthracen. Sie werden bei der zweiten Reaktion fündig (Reaktion **279351**).

8. Klicken Sie auf den **roten Hyperlink** der Reaktionsnummer. Es öffnet sich ein neues Fenster, das alle vorhandenen Angaben zu dieser Reaktion liefert. Exportieren Sie wieder alle benötigten Angaben, wie in Punkt 21 beschrieben, in eine Word-Datei.

Reaction	
Reaction ID	279351
Reactant BRN	1905429 anthracene
Product BRN	1875799 anthracene-9,10-diol
No. of Reaction Details	1
Find similar reactions	click here

Reaction Details	
Reaction Classification	Preparation
Reagent	glacial acetic acid PbO ₂
Other Conditions	anschl. mit NaOH
Note 1	Handbook
Ref. 1	1966783, LitLink ; Journal; Schulze; CHBEAM; Chem. Ber.; 18; 1885; 3037.

9. Jetzt gehen Sie **analog Schritt 4-8** vor.

Reaction 12 of 755	
Reaction ID	208810
Reactant BRN	1730718 propane
Product BRN	1905429 anthracene
No. of Reaction Details	1
Reaction Classification	Preparation
Reagent	chromium steel tube
Temperature	800 - 810 C
Other Conditions	unter Druck
Find similar reactions	click here

Note 1	Handbook
Ref. 1	1730983, LitLink ; Journal; Cadman; IECHAD; Ind. Eng. Chem.; 26; 1934; 315, 319.
Ref. 2	1708338, LitLink ; Journal; Dunstan; Hague; Wheeler; IECHAD; Ind. Eng. Chem.; 26; 1934; 307, 309.
Ref. 3	1724880, LitLink ; Journal; Cambron; Bayley; CJREAE; Can. J. Res.; 10; 1934; 145, 154.

Mit Klick auf den schwarzen Hyperlink beim Anthracen als Ausgangsstoff kommen Sie zu dessen Substanzeintrag. Hier suchen Sie eine Herstellung von Anthracen aus Propan (Reaktion **208810**, Treffer 12). Nach Klick auf die rote Reaktionsnummer, speichern Sie wieder die benötigten Angaben als Word-Datei ab (wie in Punkt 12 beschrieben)

10. Sind bei einer solchen „retrospektiven Synthesepaltung“ die Zwischenstufen nicht bekannt, d.h. nur Ausgangsstoff, Produkt und Anzahl der Synthesestufen wurden vorgegeben, dann ist die Suche etwas mühsamer. Bei allen Reaktionen zum Zielprodukt müssen die Ausgangsstoffe untersucht werden, ob diese ihrerseits Produkt einer geeigneten Reaktion aus einem geeigneten Ausgangsstoff sind.

23. Vergleich der Datenbanken Beilstein CrossFire und SciFinder

	Beilstein CrossFire	SciFinder
Art der Datenbank	Faktendatenbank	Literaturdatenbank (Bibliographische DB)
Gebiet	Verbindungen und Reaktionen der organischen Chemie	alle Bereiche der Chemie und chemische Aspekte angrenzender Gebiete (Physik, Lebenswiss., Geowiss., Ingenieurwiss., Medizin)
Inhalt	Stoffdatendossiers - für jede Substanz zusammengestellte Daten: Eigenschaften und Reaktionen	Literaturhinweise (bibliographische Angaben, Abstracts und normierte Indexbegriffe)
Besonderheit	<ul style="list-style-type: none"> · umfangreichste Sammlung spektroskopischer Datenverweise · imposante Anzahl physiko-chemischer, pharmakologischer, ökologischer und toxikologischer Daten von Naturstoffen sowie Informationen zur Nutzung 	enthält weitere Datenbanken: Chemcats – Chemikalien-Anbieter EINECS - Regulatorische Daten
Zeitraum	1771 - heute	1907 - heute
Update	vierteljährlich	täglich
Rückstand zur Primärliteratur	1 Jahr	2-3 Monate
Abstracts	für Artikel ab 1980; ca. 900.000	für alle Publikationen ab 1907; ca. 26,3 Mio.
Patente	nur bis 1980	ab 1907 - heute
(Bio)-Polymere	erst seit kurzem	ja
Datensuche	in ca. 400 Feldern (in mehr als 180 auch numerisch)	nein
Textsuchen/ Schlagwortrecherchen	nur eingeschränkt	ja
Struktursuchen	ja	ja
Substruktursuchen	ja	ja
Reaktionssuchen	ja	ja
Vorteile	reicht weiter zurück	vollständiger und aktueller

→ Beilstein und SciFinder ergänzen einander und sollten trotz teilweiser Überlappung für eine möglichst vollständige Recherche beide durchsucht werden.

24. Beilstein CrossFire - Hilfen und Übungen im Internet

Sie finden diese Liste im Internet unter:

<http://www2.uni-jena.de/chemie/ivs/beilhilf.htm>

Dokumentationen

[Beilstein Dictionary: German-English and English-German](http://www-sul.stanford.edu/depts/swain/beilstein/bedict1.html)

<http://www-sul.stanford.edu/depts/swain/beilstein/bedict1.html>

[German-English Terms for Physical Properties in Beilstein](http://www.indiana.edu/cheminfo/tab10-05.html)

<http://www.indiana.edu/cheminfo/tab10-05.html>

[German-English Terms for Reaction Chemistry in Beilstein](http://www.indiana.edu/cheminfo/tab11-01.html)

<http://www.indiana.edu/cheminfo/tab11-01.html>

[MIMAS: CrossFire Documentation](http://www.mimas.ac.uk/crossfire/docs.html)

<http://www.mimas.ac.uk/crossfire/docs.html>

Allgemeine Tips und Hinweise, FAQs

[ETH Zürich: Tips und Tricks \(FAQ\)](http://www.infochembio.ethz.ch/Xfire_tips.html) (deutsch)

http://www.infochembio.ethz.ch/Xfire_tips.html

[UB Basel: Beilstein Crossfire FAQ](http://www.ub.unibas.ch/online/beilfaq.htm) (deutsch)

<http://www.ub.unibas.ch/online/beilfaq.htm>

[MIMAS: CrossFire Problem and Query FAQ](http://www.mimas.ac.uk/crossfire/faq.html) (englisch)

<http://www.mimas.ac.uk/crossfire/faq.html>

[MIMAS: Tips For Faster Searching](http://www.mimas.ac.uk/crossfire/search_tips.html) (englisch)

http://www.mimas.ac.uk/crossfire/search_tips.html

[Zusammenstellung von Beilstein-Hilfeseiten](http://www.indiana.edu/cheminfo/beilstein_training.xls) (englisch) mit Bewertung

www.indiana.edu/cheminfo/beilstein_training.xls

Übungen

[FSU Jena: Übungen zur Faktensuche](http://www.uni-jena.de/chemie/ivs/schulung/beilstein/uebungbeil1.htm) (mit Lösungshilfen, deutsch)

<http://www.uni-jena.de/chemie/ivs/schulung/beilstein/uebungbeil1.htm>

[FSU Jena: Übungen zur Struktursuche](http://www.chemie.uni-jena.de/ivs/schulung/beilstein/uebungbeil2.htm) (mit Lösungshilfen, deutsch)

<http://www.chemie.uni-jena.de/ivs/schulung/beilstein/uebungbeil2.htm>

[Uni Manchester, MIMAS: CrossFire training material](http://www.mimas.ac.uk/crossfire/training_material.html)

http://www.mimas.ac.uk/crossfire/training_material.html

Ausführliche Suchanleitungen mit Beispielen/Tutorials

[Beilstein CrossFire Minerva Database Quick Reference Guide - UCSD](http://scilib.ucsd.edu/electclass/Crossfire/)

<http://scilib.ucsd.edu/electclass/Crossfire/>

[UW-Madison Libraries Beilstein and Gmelin Databases](http://www.library.wisc.edu/libraries/Steenbock/beilstein/home.htm)

(Quick Guide, Exporting, Fact Searching, Practice Exercises, Reaction Searching, Saving Property Data from a Personal Computer, Structure Searching)

<http://www.library.wisc.edu/libraries/Steenbock/beilstein/home.htm>

[Uni Manchester, MIMAS: Using Hyperlinks - Retrograde Synthesis](http://www.mimas.ac.uk/crossfire/example_terb.html)

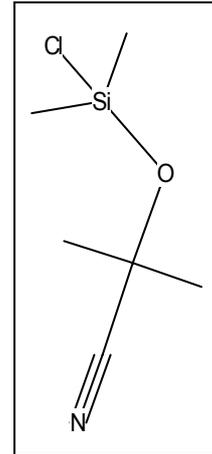
http://www.mimas.ac.uk/crossfire/example_terb.html

25. Übungen zu CrossFire

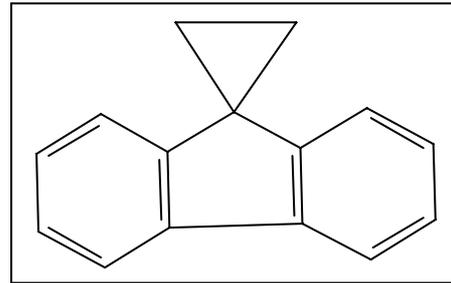
1. Struktursuchen

- 1.1. Zeichnen Sie folgendes Molekül:
(Punkt 17, Seite 17-20)

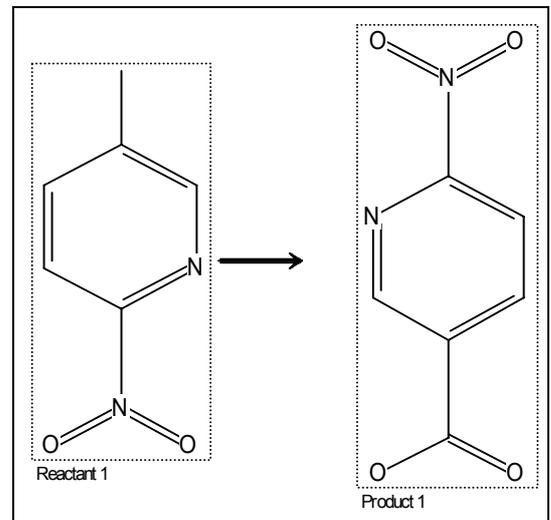
Suchen Sie das Molekül zuerst exakt "wie gezeichnet"
und dann als "Substruktur" mit *Free Sites*.
(Punkt 19, Seite 22)
Wie viele Verbindungen finden Sie maximal?



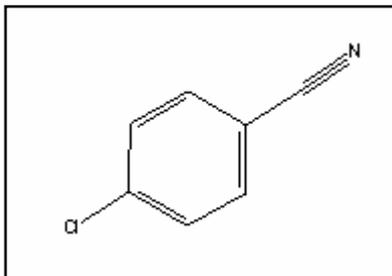
- 1.2. Wie viele Präparationen der nebenstehenden
Verbindung werden im Beilstein beschrieben?
Der Ausgangsstoff ist nebensächlich.
(Punkt 20, Seite 23)



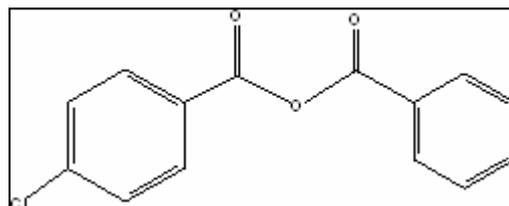
- 1.3. Finden Sie die Herstellung von
6-Nitro-Nikotinsäure aus
5-Methyl-2-nitro-pyridin.
Wie lautet die Reaktionsnummer?
(Reaction ID)
(Punkt 21, Seite 24)



- 1.4 In einer **zweistufigen** Synthese soll aus
4-Chloro-benzonitril



Benzoessäure-(4-chloro-benzoessäure)-anhydrid



hergestellt werden. Machen Sie einen Synthesevorschlag!
(Retrospektive Syntheseplanung Punkt 22, Seite 25-27)

2. Predefined Search Forms

- 2.1.** Wie ist die chemische Struktur von Valium?
Ein anderer Name dieser Verbindung ist Diazepam.
Was fällt Ihnen bei der Namenssuche auf?
Suchen Sie mit „Substance Identification Data „ bei „Predefined Search Forms“
(Punkt 9, Seite 8)
- 2.2.** Welches weit verbreitete Medikament verbirgt sich hinter der
Chemical-Abstracts-Registry-Nummer 50-78-2?
Suchen Sie wieder mit „Substance Identification Data bei „Predefined Search Forms“
(Punkt 9, Seite 8)
- 2.3.** Wie viele Publikationen von Ernst-Gottfried Jäger werden im Beilstein nachgewiesen?
Denken Sie bei der Suche an mögliche Namensvarianten!
Suchen Sie bei den Predefined Search Forms mit <Bibliographic Data>
(Punkt 15, Seite 15)
- 2.4.** Speichern Sie zwei beliebige Textstellen von Jäger als Word-Datei ab!
(Punkt 13, Seite 13)
- 2.5.** Welche Autoren haben für die Substanz Sisymbirine ein IR-Spektrum beschrieben?
Suchen Sie mit „Substance Identification Data“ über den Namen bei „Predefined Search
Forms“ (Punkt 9, Seite 8) dann Feld IR.