



華中師範大學

化学信息学 Chemical Informatics

陈加荣

华中师范大学化学学院

2016年9月6日 (第1次课)

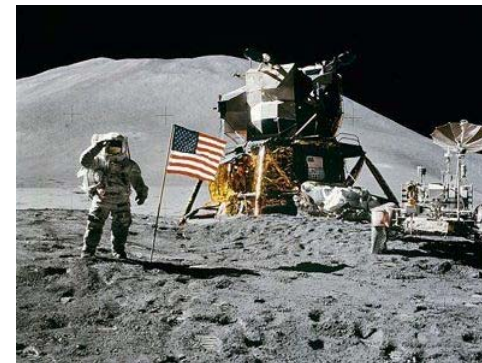
Office: Chem.731

E-mail: chenjiarong@mail.ccnu.edu.cn

Key Laboratory of Pesticide & Chemical Biology, Ministry of Education
College of Chemistry, Central China Normal University



案例1：“阿波罗”登月计划 —信息的经济功能与科学功能



美国在实施“阿波罗登月计划”中，对飞船燃料箱进行压力实验时，发现在一定的应力下，登月舱内胆金属钛会腐蚀（甲醇），结果投入了数千万美元，攻克难关。事后发现，10年前的文献中就有记载（在CA中可检索到），只要在甲醇中加入2%的水即可。



案例2：啤酒与尿布

——信息（数据）挖掘的重要性

美国一家公司对超市中各商品的销售数据进行分析时意外发现：这两种商品被同时购买的比例特别高，原来丈夫们在买尿布时，顺手为自己买了啤酒。最后商场将这两种产品放在一块，结果销量大增。



知识的一半就是知道到哪儿去寻找



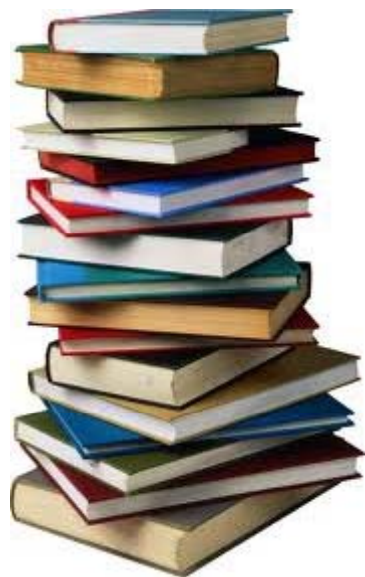
彼得·德鲁克（管理学大师中的大师）在《后资本主义社会》中所说：“在知识社会里，对于任何一个人、组织、企业 and 国家，**获取和应用知识的能力**是竞争成败的关键。”

美国图书馆界权威路易斯·肖：“懂得如何查询到所需要的知识等于掌握了知识的一半。”



为什么要开设这门课？

科技改变了我们获取信息的方式！



《互联网时代》-纪录片





信息时代科技工作者的痛苦！

信息量过载的问题(Information Overload)！

- 网络环境下，越来越多的电子信息的生产，并为信息共享提供了优越的条件。
- 信息资源质量的严重不均衡。
- 过量的信息与没有信息引起的**困惑**同样是问题。
- 人们必须在有限的时间范围，有效地获得自己所需要的信息，排除不相关的信息。
- 需要专门的工具来帮助人们完成这些工作。



信息资源与学术研究

据美国科学基金会统计，一个科学研究人员花费在**查找和消化**学术资料上的时间需占全部科研时间的**51%**，计划思考占**8%**，实验研究占**32%**，**书面总结**占**9%**。

——美国科学基金会 NSF(National Science Foundation)



科研工作中与信息相关的问题

- 如何在海量的信息中快速检索到**相关的、高质量的**信息？
- 如何有效地分析目前的研究进展并确定**新的研究方向**？
- 如何及时跟踪某研究方向的**最新进展**？
- 如何有序**管理**所检索到的大量文献？
- 如何迅速提高**论文写作**的效率？
- 如何全面了解所发表**论文及其期刊的影响力**？
- 确定**投稿**方向？

信息检索贯串整个科研过程！



如何获取我们所需要的信息？



Is Google or Baidu enough???



学术研究不能完全依赖Web网络资源

- 学术资源数据库是一个经过一定权威学术审核和选择，并按照著录标准和规范进行分类组织标引的、可用于检索的学术信息集合。
- Web上发布的信息没有经过一定审核和某种组织，它是动态的、变化的，网站增加、关闭、地址变更、更新、改版等都是不确定和不可遇见的。
- Web网站可以提供一个文献信息检索的补充，但是绝不能是学术研究的唯一文献检索途径。



课程目的



收集、阅读、处理各种信息能力



熟练使用检索工具

快速检索信息资源

有效识别信息资源

充分利用信息资源

课程目的：掌握各种文献检索方法，快速准确获取所需要的资料信息；并有效地管理利用.....



课程主要内容

- 化学信息学导论
 - 科技文献基础知识
 - 期刊/专利检索
 - 物性数据库简介
- 化学信息的获取-如何检索文献
 - SciFinder Scholar使用简介
 - Reaxys数据库使用简介
 - ISI Web of Knowledge使用简介
- 化学绘图软件使用简介 (ChemBioDraw2008 11.0)
- 计算机文献管理 (EndNote X5使用简介)



课程安排

总学时：**8周（32学时）**

授课方式

课堂讲授**(16学时)**

课堂上机实习**(16学时)**

课后练习

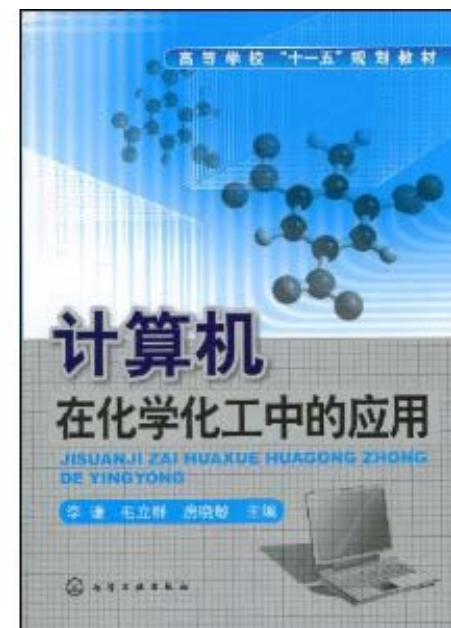
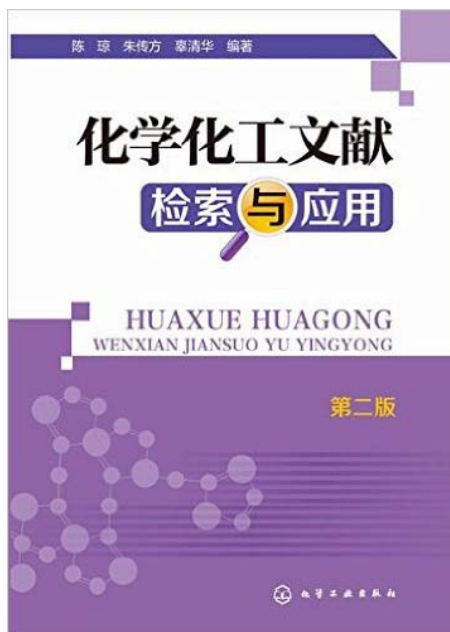
课程成绩

平时成绩**50%**（出勤率，作业）

期末成绩**50%**（课程论文或报告）



课程参考书



参考资料:

- 《化学化工文献检索与应用》（第二版）陈琼，朱传方，辜清华，化工出版社，2015
- 《化学文献及查阅方法》余向春，科学出版社，2011
- 《计算机在化学化工中的应用》李谦，毛立群，房晓敏，2011
- An Introduction to Chemoinformatics, Springer, 2005**



第一章 化学信息学导论

1.1 基本概念

- **信息**: 客观事物存在的方式或运动状态以及关于客观事物存在方式或运动状态的**陈述**。

(ALA, American Library Association)

All ideas, facts and imaginative works of the mind which have been communicated, recorded, published, and/ or distributed formally or informally in any format.

- **知识**: 人脑意识的产物,带有主观性。信息是产生知识的原料, 知识是大脑对信息加工后形成的产品。



第一章 化学信息学导论

1.1 基本概念

➤ **情报**：人们在一定时间内为一定目的而传递的有使用价值的**知识和信息**。

案例：朝鲜战争与兰德咨询公司故事

朝鲜战争前，兰德公司向美国国防部推销一份秘密报告，其主题词只有**7**个字，要价**150**万美元。但是，在这一句话结论后附有长达**600**页的剖析报告，详尽地剖析了中国的国情，以充分的证据表明中国不会坐视朝鲜的危机而不救，必将出兵并置美军于进退两难的境地。美国国防部以为是讹诈，不予理睬，结果“在过错的时间，在过错的地点，与过错的敌人进行了一场过错的战争”。战争停滞之后，国防部才想起那份报告，要来一看，追悔莫及。

克阿瑟将军感慨道：“我们最大的失策是猜忌咨询公司的价值，舍不得为一条科学的结论付出不到一架战斗机的代价，成果是我们在朝鲜战场上付出了**830**亿美元和十多万名士兵的生命。

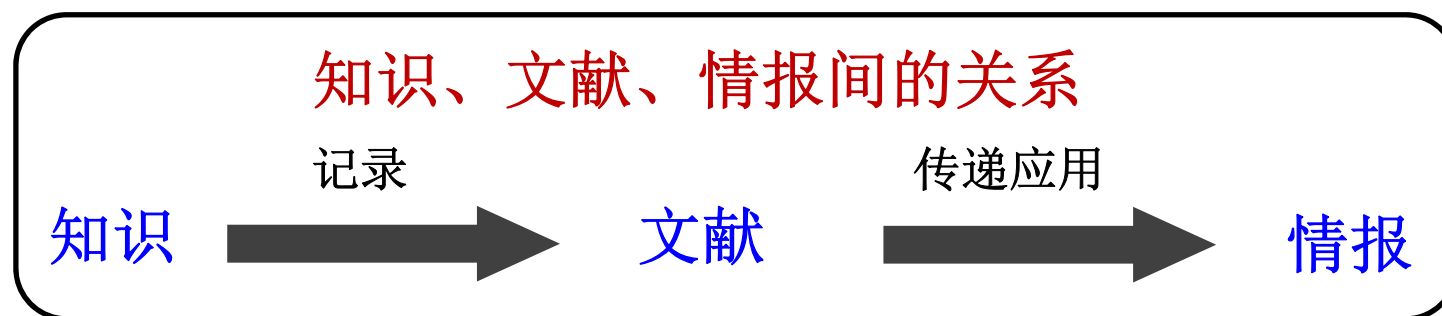


第一章 化学信息学导论

1.1 基本概念

➤ **文献**: 一切记录有知识的**载体**。

载体（文献的形态）：如甲骨、青铜器、纸介型、胶片，磁带，磁盘，光盘等。记录构成文献的重要手段。





第一章 化学信息学导论

1.2 什么是化学信息学

是一门应用信息学方法解决**化学问题**的学科！

Chemoinformatics, Chemical Informatics

The mixing of information resources to transform **data** into **information**, and **information** into **knowledge**...[Brown 1998]

A generic term that encompasses the **design, creation, organization, management, retrieval, analysis, dissemination, visualisation, and use** of chemical information into knowledge [Paris 2000]

以化学、化工、计算机与信息技术为基础的边缘学科，它涉及化学化工信息的**获取、管理、处理与控制、计算推演与模拟**和**图形表示**的技术与方法。



1.2 化学信息学领域范围

涵盖六个方面的内容！

■ 化学、化工文献学

文献信息检索

个人资料管理

■ 化学知识体系的计算机表示、管理与网络传输

化学结构、化学反应的计算机表示、化学数据库技术

化学信息的网际通讯语言

■ 化学图形

化学信息可视化和虚拟技术，化工制图



1.2 化学信息学领域范围

■ 化学信息的解析与处理

化学实验设计，实验数据处理，图谱分辨与解析
生物分子的信息解析，多元分析和数据挖掘技术

■ 化学知识的计算机推演

结构与性质关系，分子及其聚集体系的计算机计算与模拟，
分子与材料设计，化学反应分析与设计，化工过程计算与模仿

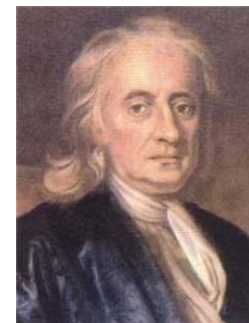
■ 化学教育与教学的现代技术与远程信息资源

化学信息学自1987年首次被诺贝尔化学奖获得者J. M. Lehn 教授提出以来，学科就一直处于迅速的发展。



1.3 本课程重要性

牛顿：“如果我比笛卡尔看得远些，那是因为我站在巨人们的肩上的缘故。”（1676年）



不仅掌握资料信息，更重要的是掌握研究的思路

- 调查研究，立足创新
- 拓宽知识面，改善知识结构，启迪创新性思维
- 提高自学和独立工作能力
- 节省时间，提高科研效率



1.4 学习化学信息学的目的

- 培养信息意识和提高获取信息的能力
- 科学研究的基本素质



快速获取信息的决定因素

- **Know - where**

到什么地方去找自己需要的信息，即了解掌握现有的信息源。

- **Know - how**

用什么方法找，即如何获得信息。



第二章 化学文献及检索概论

2.1 化学文献的发展

■ 文献的功能与属性

文献是记录知识内容的信息集合体，是人类进步和发展的经验总结，是科技情报的源泉。

三大属性：知识性、记录性、物质性

功能：继承功能、传递交流功能

■ 科技文献分类

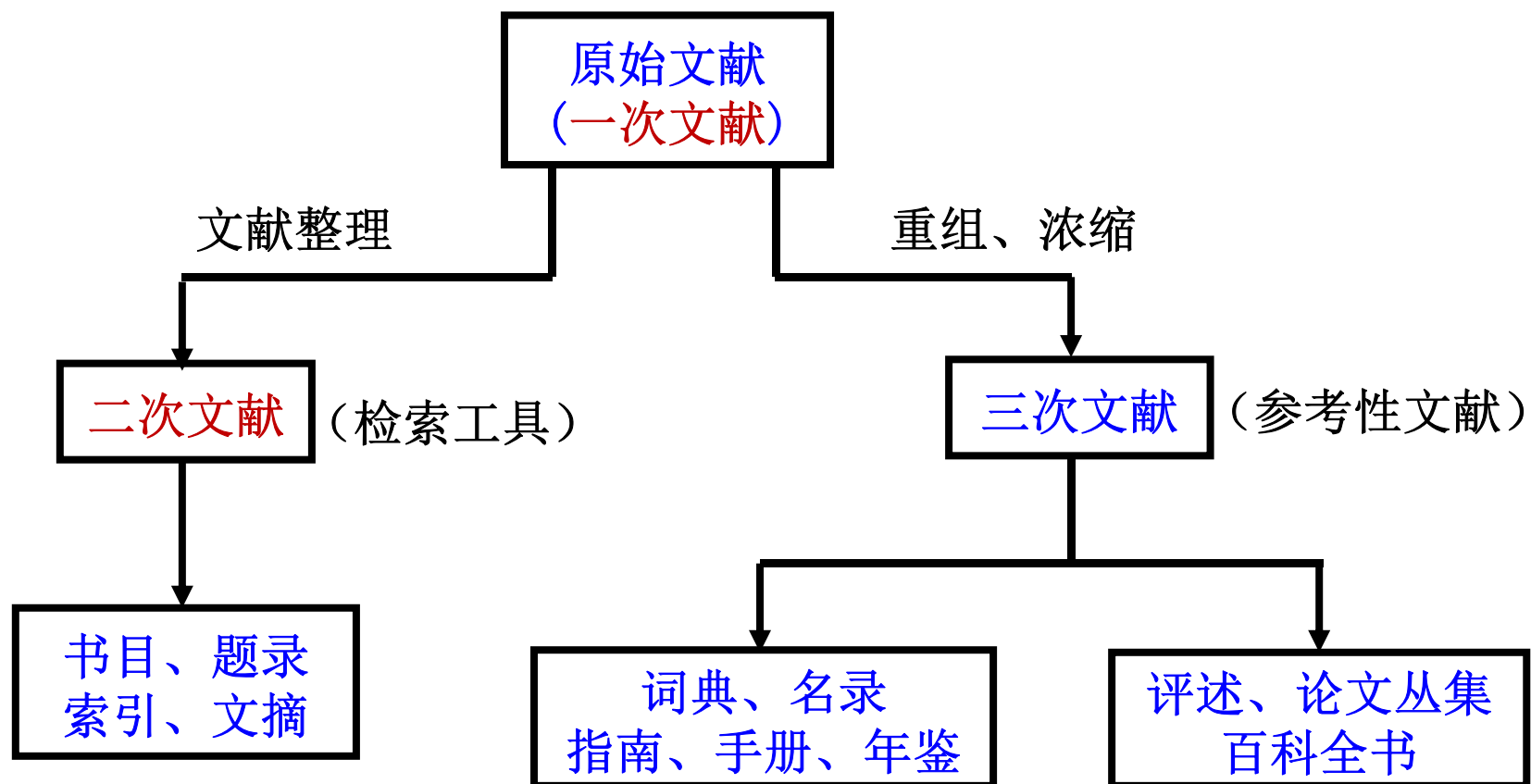
文献载体：印刷型、缩微型、声像型、机读型

文献性质：一次文献、二次文献、三次文献

出版形式：图书、期刊杂志、科技报告、学位论文、会议资料、专利、标准等



文献结构示意图





2.2 现代化学文献特点

1. 文献数量迅猛增加

- 早先，口授、传抄或通讯联系
- 17世纪末，科技协会，科技杂志

最早出版的科技杂志：1665年，英国皇家学会哲学汇刊

第一种化学杂志：1778年，**Crell's Chemisches Journal**

- 17世纪后半期，专利局，专利文献
- 19世纪中叶，各种学会会志
- 20世纪60年代，科技文献剧增，种类和数量



2.2 现代化学文献特点

1. 文献数量迅猛增加

表 1-1 美国化学文摘历年收录文献件数表^{* [6]}

年 份	收 录 文 献 件 数	累 计 件 数
1907	11847	11847
1916	16108	191730
1926	30238	409964
1936	64572	953926
1946	39578	1466736
1956	92396	2130163
1966	220303	3708096
1976	390905	6793295
1986	474429	11297458
1996	706269	16910895
2001	755915	20510122

* 表中数据摘自美国化学文摘社(CAS)1907~2001 统计表。



2.2 现代化学文献特点

2. 文献种类繁多，形式多样

类型：图书、期刊杂志、科技报告、学位论文、会议资料

文献载体：印刷型、缩微型、机读型

文献性质：一次文献、二次文献、三次文献

3. 电子文献与网络检索异军突起

化学结构数据库

全文数据库（Elsevier数据库、Wiley InterScience数据库，ACS，RSC）



2.2 现代化学文献特点

4. 文献交叉重复，发表分散

化学是基础学科，与其它基础学科一样，渗透到工、农、医、甚至文、法等许多领域，形成边缘学科，交叉学科学科的出现，所以直接相关的专业期刊上发表的文献只占总数的一半，而另外一些则发表在其它间接的专业期刊上。

5. 电子文献与网络检索异军突起

知识老化周期：

18世纪，80~90年

19世纪，30年

20世纪上半叶，15年

目前，3~5年

半衰期：基础学科为8~10年，工程技术文献为3~5年，化学为8.1年，化学工程为4.8年。



2.3 化学文献源概述

1) 图书(Book)

对已有的研究成果或生产经验作概括论述。

特点:带有总结性、成熟定型; 出版周期长, 信息传递慢;
传授知识, 而不是报道最新情报。

图书一般分为两类:

阅读型: 教科书、专著等

工具型: 字典、百科全书、年鉴、手册



图书分类法

- 《中国图书馆图书分类法》（中图法）
- 《中国科学院图书馆图书分类法》（科图法）
- 《中国人民大学图书馆图书分类法》（人大法）
- 《Dewey Decimal Classification System》
(杜威十进分类法)
- 《Library of Congress Classification》
(美国国会图书馆图书分类法)
- 《Universal Decimal Classification》
(国际十进分类法)



中国图书馆分类法（第四版）

马、列、毛、邓.....A	马克思主义、列宁主义、毛泽东思想、邓小平理论
哲学.....B	哲学、宗教
社会科学.....C	社会科学总论
	D 政治、法律
	E 军事
	F 经济
	G 文化、科学、教育、体育
	H 语言、文字
	I 文学
	J 艺术
	K 历史、地理
自然科学.....N	自然科学总论
	O 数理科学和化学
	P 天文学、地球科学
	Q 生物科学
	R 医药、卫生
	S 农业科学
	T 工业技术
	U 交通运输
	V 航空、航天
	X 环境科学、劳动保护科学（安全科学）
综合性图书.....Z	综合性图书

22大类



中国图书馆分类法（第四版）

O 数理科学和化学大类进一步分为：

O3 力学

O4—O57 物理学

O6 化学

O7 晶体学



O6 化学下的类目有：

O61 无机化学

O62 有机化学

O63 高分子化学

O64 物理化学、化学物理学

O65 分析化学

O69 应用化学



2.3 化学文献源概述

2) 期刊 (journal, periodicals)

大多为原始一次文献。

特点：名称固定，有连续的卷、年月顺序号，出版周期短，
报道速度快；数量大，内容丰富。

据估计，从期刊获取的科技情报占整个情报来源的60%-70%。

目前，全世界每年出版各类期刊达15万种以上，科技期刊约占10万种。我国现有期刊8000多种，其中科技期刊占54%。据统计，科研人员从期刊中得到的信息约占70%以上，是十分重要的情报源。



2.3 化学文献源概述

3) 专利文献 (patent document)

专利文献从**狭义上**讲是指与专利有关的专利文件，包括专利申请说明书、专利说明书、专利证明书以及申请、批准专利的其他文件等。从广义上讲，专利文献除上述内容外，还包括专利局和有关机构出版的各种专利文献检索工具，如专利公报、专利索引、专利分类表等。

专利文献的核心是**专利说明书**。专利说明书一是**公开技术信息**；二是**限定专利权的范围**。平时所说的专利文献，一般是指专利说明书。专利说明书是公开的文献，但只能由各国专利局发行，它反映了当前最新的技术成果。

其他文献源：

科技报告、学位论文、会议资料、技术标准、政府出版物、技术档案、产品样本等



2.3 化学文献源概述

举例：

例 1 期刊

Marder, S. R., Cheng, L.-T., Tiemann, B. G., et al. Large First Hyperpolarizabilities in Push-Pull Polyenes by Tuning of the Bond Length Alternation and Aromaticity. *Science*, **1994**, 263, 511-514.

例 2 专利文献

Zaccarin, A.; Liu, B., Method and Apparatus for Determining Motion Vectors for Image Sequences. U. S. Patent 5210605, 1993.



2.4 科技文献检索

面对日益增长的文献资源，如何通过一种有效的方法，以最少的时间与精力来获取自己所要的信息。

——这就是文献检索所要解决的问题。

科技人员必备的基本技能

Information literacy (信息素养):

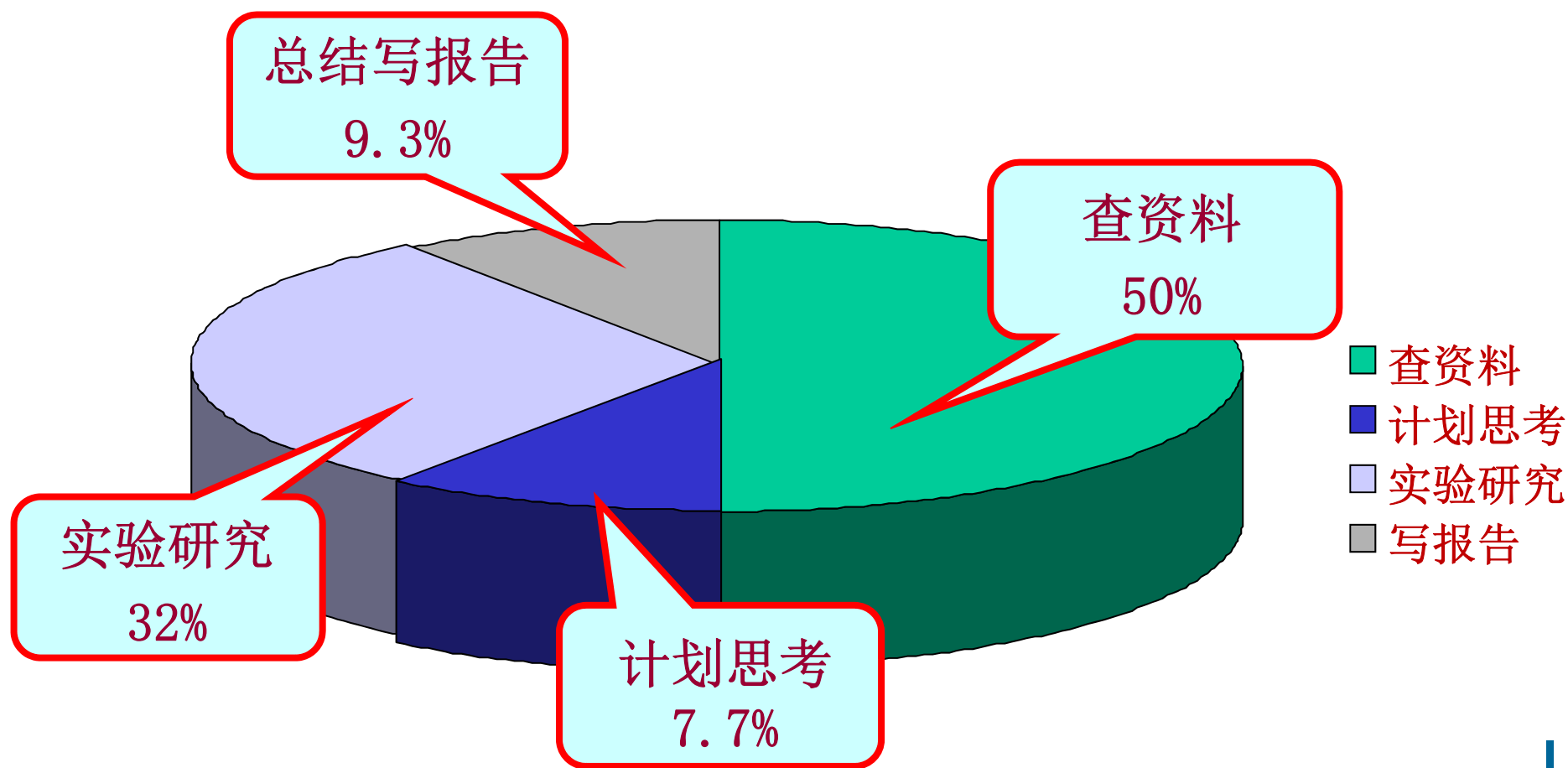
(by ACRL: Association of college & research libraries)

Information literacy is a set of abilities requiring individuals to “recognize when information is needed and have ability to locate, evaluate and use effectively the needed information.”



科研人员的时间分配表

文献检索是科学研究的先期工作!!!





2.4 科技文献检索

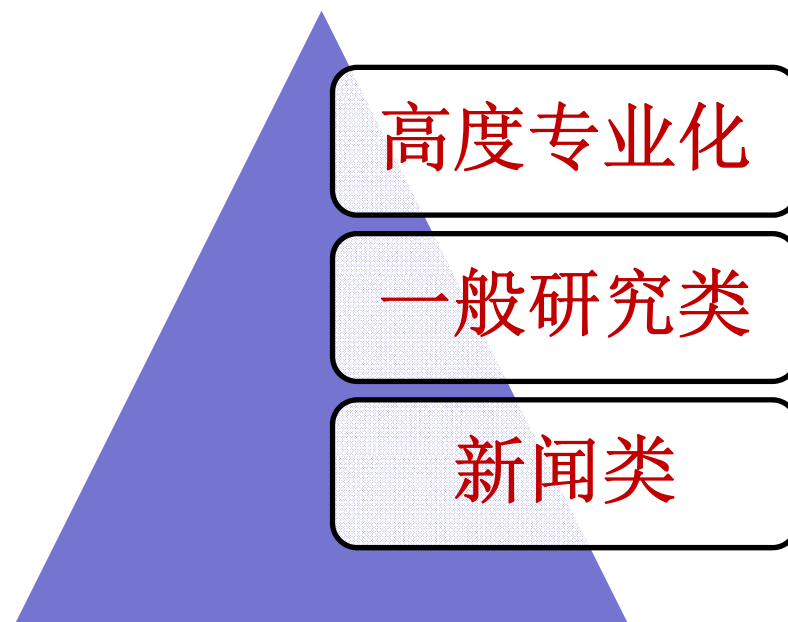
引言

- 养成定期阅读文献的习惯
把查阅文献纳入到自己整个科研活动和学习计划之中，养成习惯
- 熟悉化学情报源及检索的基本知识
- 检索前的思考
- 科技文献检索的意义



化学情报源模型

Maizell, R.E.





化学情报源一般分类

■ 新闻类

Chemical & Engineering News, Chemical Week, Chemistry and Industry

■ 广泛的化学领域

Science, Nature, Journal of American Chemical Society, Chemical Abstracts

■ 专业化学领域

Inorganic, Organic, Analytical, Polymer, Physical, Materials Sciences, Nanomaterials



科技文献检索的意义

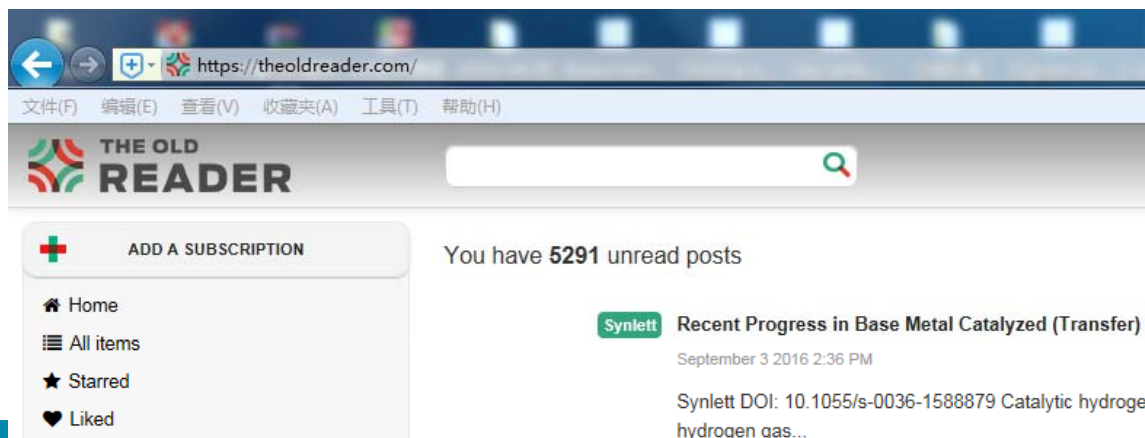
假如一个化学家懂30国语言，每小时读4种杂志，一周阅读40小时，从年初开始，要读完全年化学文献，需要10年以上的時間。

——美国前化学文摘总编Bernler

合理地计划和安排文献查阅(建立在线个人图书馆)

精选重点和核心刊物，跟踪相关领域最新进展

<https://theoldreader.com/>





文献检索前的思考

1. 明确待查情报的目的
2. 是否已掌握了一定的情报资料？
3. 查找的时间范围？
4. 查找的地域范围？
5. 准备查哪些文献？CA?专利？期刊论文？所有？
6. 用什么样的检索工具？（SciFinder, Reaxys）



文献检索途径

- 主题途径
- 作者途径
- 引文途径
- 其他途径

号码途径（专利号索引、登记号索引）、
分类途径、关键词途径等

- 1) 手工检索、光盘检索、网络检索、其他途径
- 2) 确定自己必须随时跟踪浏览的重要期刊
(如**RSS**阅读器、**the Older Reader**定制服务)



文献检索方法

- 直接法

浏览原始文献直接查出与课题相关的文献线索

- 追溯法

根据文献所附的参考文献线索查找文献(可利用WOS)
(查全率、查准率较低, 易误检漏检)

- 工具法

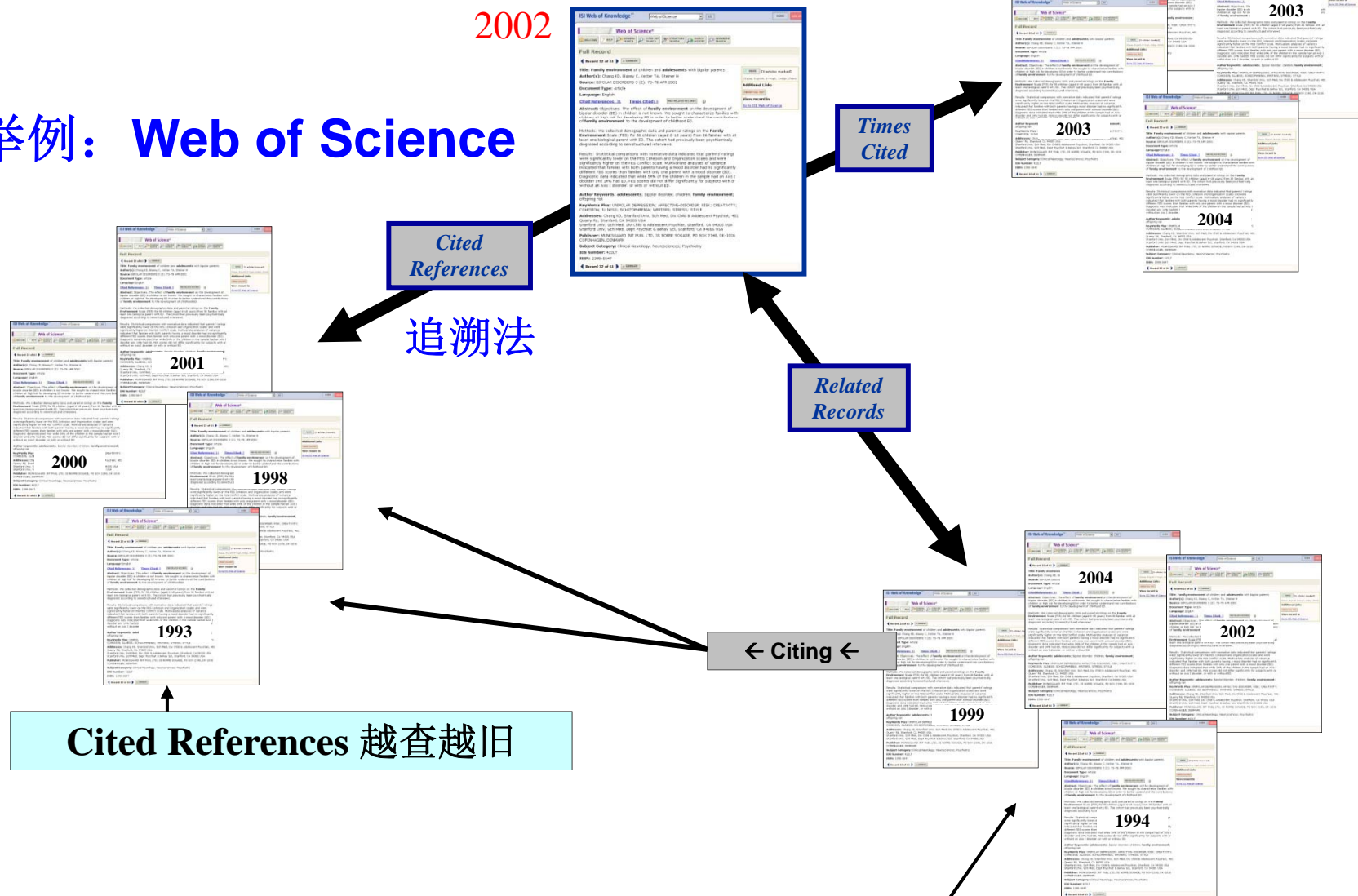
利用文摘和索引工具进行检索, 快速、方便



从一篇高质量的文献出发
沿着科学研究的发展道路...

Times Cited 越查越新

举例: Web of Science

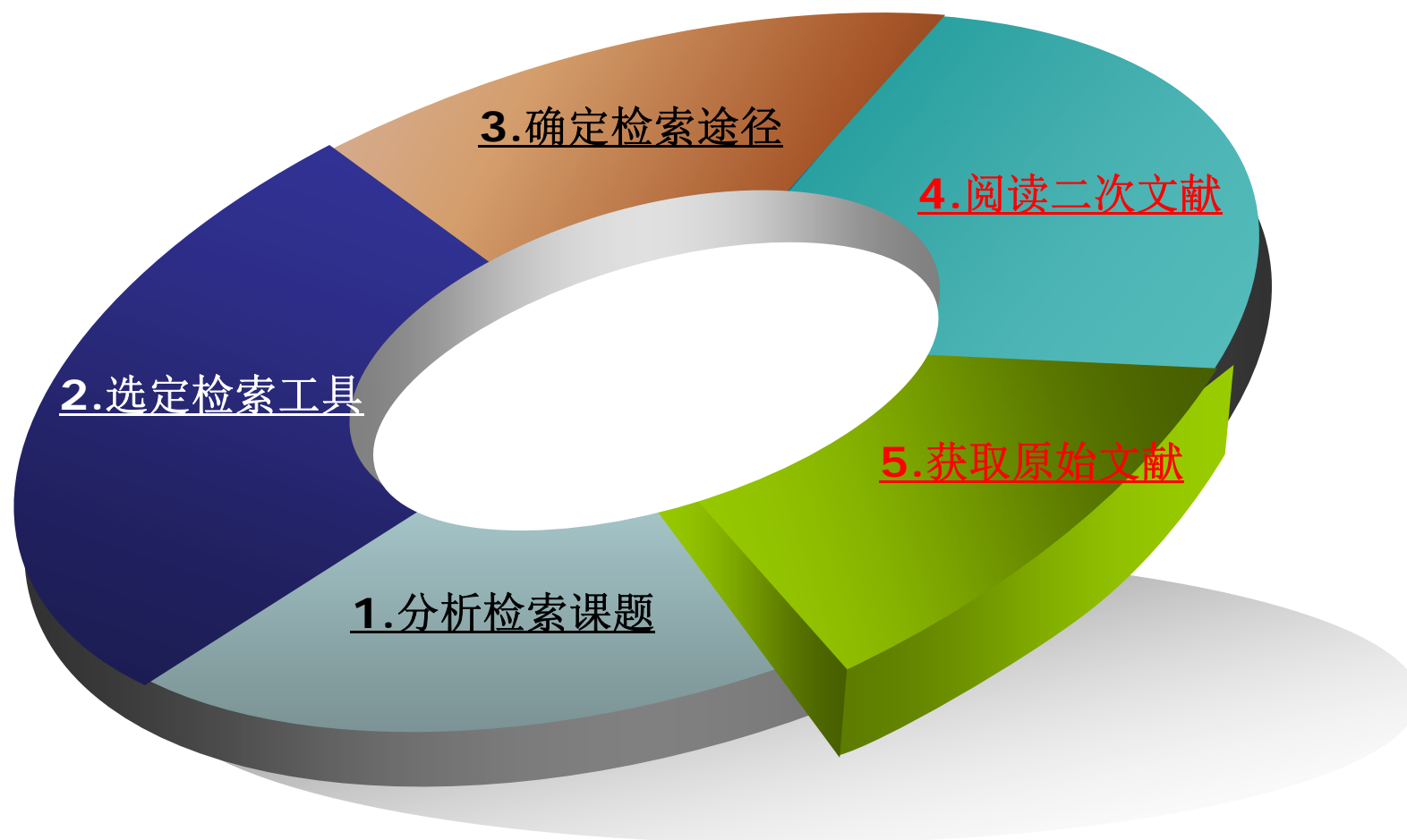


Cited References 越查越旧

Related Records 相同参考文献或同时被引用的文献, 越查越深



科技文献检索步骤





科技文献检索效果判断

	相关文献	不相关文献	总计
检出文献	A	B	A+B
未检出文献	C	D	C+D
总计	A+C	B+D	A+B+C+D

查全率 (Recall Ratio): $R = \frac{A}{A+C} * 100\%$

查准率 (Precision Ration): $P = \frac{A}{A+B} * 100\%$



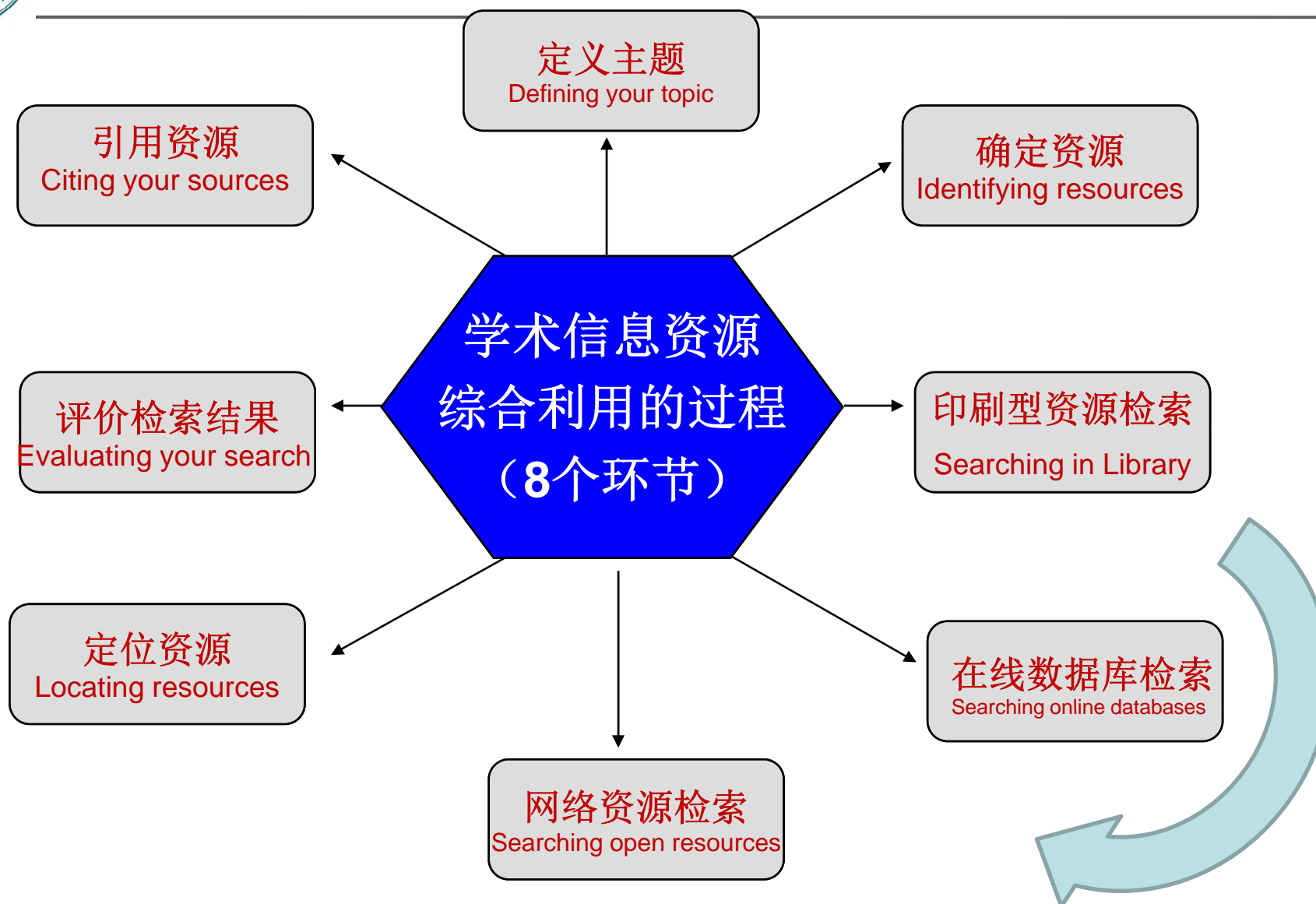
利用文献的一般规律

- 1、**掌握课题概况：**一般利用图书、专业辞典、百科全书、年鉴、手册等。
- 2、**了解党和国家对该课题的方针、政策及有关规定：**利用政府出版物、报纸等。
- 3、**了解该课题有无开发价值：**利用专利资料查新，查清以前是否有人研究过、研制过。
- 4、**通过名人录：**了解本领域有哪些著名的学者，他们供职的单位和主要贡献，个人网站、博客等。
- 5、**通过机构指南：**了解本领域内重要的科学研究机构、企业和厂家，以及这些机构的一般情况。



利用文献的一般规律

- 6、通过专业文献指南：掌握本领域的基本情况及重要检索工具和核心期刊。
- 7、利用产品资料、科技档案：了解竞争对手对该项技术或产品的开发、研制情况。
- 8、通过统计部门的统计资料：掌握课题研究所需要的各种数据。
- 9、利用各种检索工具：查找文献线索。
- 10、查阅资料：
 - a、基础类课题：侧重于科技期刊、科技报告、学位论文、会议录和文集等；
 - b、开发研究类：侧重于期刊、专利、样本、标准、产品说明书等；
 - c、技术经济类：期刊、手册、年鉴、报纸、政府出版物；
 - d、攻关项目的研究课题：重点查专利；
 - e、科学实验上的攻关课题：重点查有关科技报告和各种会议录。





第三章 科学研究方法与科技论文写作

什么是科学研究？

广义上讲，就是在科学理论的指导下，通过一定的科研实践，去创造知识和综合整理知识的过程，使科学技术在现有水平上更进一步。

科学研究必须具有**原始性和创新性**，是一种创造性的劳动。

科研课题的选题

在总结前人科学研究的基础上提出新的问题和新的设想以及实现这些设想的可能性。

有创见的研究课题的提出，往往是科学发展和取得成果的指路标。

选题原则：必须具有创新性和先进性；注意实际性；科学上可行性；考虑时机

调查研究：历史和现状调查；实地考察；**文献调查；资料整理利用；**研究方案制定



一般科学研究的方法

科研实验中的基本步骤



<http://www.nsf.gov.cn/>

<https://isisn.nsf.gov.cn/egrantweb/>



国家自然科学基金委员会
National Natural Science Foundation of China



科学基金网络信息系统
Internet-based Science Information System





科技论文写作与参考文献引证

科技论文的写作

- 1) **标题**（扼要说明文章内容，体现文章内涵和重要性）
- 2) **摘要**（一般50-300字，简要反映内容和工作结构）
- 3) **引言**（背景）（进行本项目研究的原因，你要做什么？做了什么？为什么做？）
- 4) **正文**（论文主体，工作方法，结果与讨论，你怎样做的？你发现了什么？你对所获结果的解释）
- 5) **结论**（必须精确、有条理、清晰与简要，由结果得出）
- 6) 致谢
- 7) 参考文献引证

参考文献的引证

- 1) 引证原则（及时性；珍贵性；准确、相关性）
- 2) 引用格式（不同杂志要求不同，关注每种杂志的投稿须知）



科技论文写作与参考文献引证

实例

Readily Tunable and Bifunctional L-Prolinamide Derivatives: Design and Application in the Direct Enantioselective Aldol Reactions

ORGANIC
LETTERS

2005
Vol. 7, No. 20
4543–4545

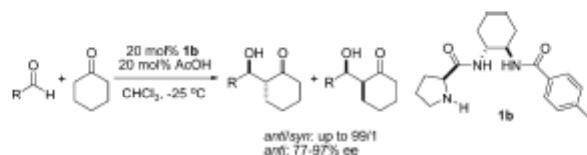
1. 标题

Jia-Rong Chen, Hai-Hua Lu, Xin-Yong Li, Lin Cheng, Jian Wan, and Wen-Jing Xiao*

*The Key Laboratory of Pesticide & Chemical Biology, Ministry of Education,
College of Chemistry, Central China Normal University, 152 Luoyu Road,
Wuhan, Hubei 430079, China
wxiao@mail.ccnu.edu.cn*

Received August 23, 2005

ABSTRACT



2. 摘要

Readily tunable and bifunctional L-prolinamides as novel organocatalysts have been developed, and their catalytic activities were evaluated in the direct asymmetric Aldol reactions of various aromatic aldehydes and cyclohexanone. High isolated yields (up to 94%), enantioselectivities (up to 99% ee), and *anti*-diastereoselectivities (up to 99:1) were obtained under the optimal conditions.

3. 引言

Enantioselective organocatalysis has recently provided a research avenue in which to explore the fundamental chemical parameters such as reactivity, selectivity, and mechanism and in doing so has led to the discovery of many valuable reactions and catalysts.¹ In this endeavor, the design

derivative catalysts were made by List and Barbas,³ Mac-Millan,⁴ Jorgensen,⁵ Gong,⁶ and Yamamoto.⁷ According to the Houk–List model,⁸ the catalysts are believed to stabilize the transition state through hydrogen bonding in proline and



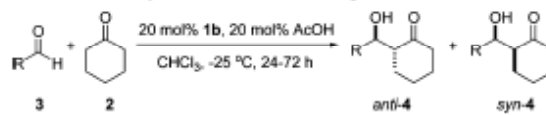
实例

4. 论文主体

results in better yield but poorer selectivity (Table 1, entry 10 vs entry 9). We concluded that the 1:1 ratio of AcOH to 1b gave the optimal performance, where the ee value was the most satisfactory (Table 1, entry 2 vs entries 8–10).

A representative selection of aldehydes was evaluated under the optimized conditions and the results obtained are summarized in Table 2. The reactions of various substituted

Table 2. Scope of the Aldehydes **3** for the Direct Aldol Reaction with Cyclohexanone **2** under Optimal Conditions^a



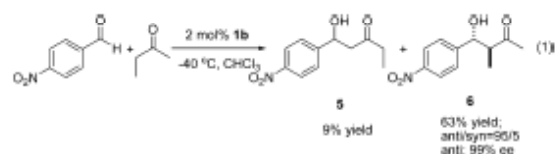
entry	R	product	yield ^b (%)	dr (anti/syn) ^c	ee (%, anti) ^d
1	4-NO ₂ C ₆ H ₄	4a	89	96/4	92
2	4-NO ₂ C ₆ H ₄	4a^e	83	97/3	87
3	4-NO ₂ C ₆ H ₄	4a^f	81	98/2	97
4	2-NO ₂ C ₆ H ₄	4b	94	99/1	96
5	3-NO ₂ C ₆ H ₄	4c	78	96/4	94
6	4-CNC ₆ H ₄	4d	89	97/3	92
7	4-ClC ₆ H ₄	4e	88	96/4	94
8	2-ClC ₆ H ₄	4f	83	97/3	92
9	4-BrC ₆ H ₄	4g	76	98/2	97
10	Ph	4h	73	83/17	87
11	1-naphthyl	4i	41	97/3	90
12	2-furfuryl	4j^g	53	87/13	93
13	4-MeC ₆ H ₄	4k	53	80/20	77

^a The reactions were conducted with **1b** (20 mol %), AcOH (20 mol %), **3** (0.5 mmol), and 2/CHCl₃ (1:1) (2 mL) for 24–72 h (see the Supporting Information) at –25 °C. ^b Isolated yield of the mixture of *anti*/*syn*. ^c Determined by analysis of the mixture of *anti*/*syn* product. ^d Determined by HPLC. ^e In the presence of 2 mol % of **1b** and 2 mol % of AcOH. ^f In the presence of 20 mol % of **1d** and 20 mol % of AcOH at –40 °C.

benzaldehydes, which bear an electron-withdrawing group on the benzene ring, proceeded smoothly in excellent diastereoselectivities (up to 99:1) and enantioselectivities (up to 97%) to furnish the Aldol adducts **4a–g** (Table 2, entries 1 and 3–9), while the stereoselectivities of the reactions with benzaldehyde and *p*-tolualdehyde were somewhat lower possibly due to their electron-rich character (Table 2, entries 10 and 13). Similarly, other aromatic aldehydes, such as 1-naphthaldehyde and 2-furaldehyde, underwent clean reactions as well, and gave the corresponding adducts in 90 and 93% ee, respectively (Table 2, entries 11 and 12). Furthermore, it is noteworthy that even with as little as 2 mol % catalyst loading of **1b** and 2 mol % AcOH, the reaction took place in high diastereoselectivity, although there was a slight decrease in enantioselectivity (Table 2, entry 1 vs entry 2). Very recently, Gong et al. reported a highly efficient

organocatalyst for the same reaction as entries 1 and 2. They achieved a 83% yield with a diastereomeric ratio of *anti*/*syn* = 95:5 and an ee (*anti*) of 79%.⁶

The reaction of 4-nitrobenzaldehyde with butanone was also investigated (eq 1) to examine the scope of the Aldol donors. Significantly, the reaction preferentially occurred at the C-3 position to afford the Aldol product **6** as the major product in remarkably high diastereoselectivity (95:5) and enantioselectivity (99% ee). Interestingly, we noticed that with Gong's catalyst yields of 56% for **5** and 42% for **6** were obtained.⁶



Based on the L-proline catalysis model,⁸ we believe that the two N–H groups of the diamide group play a key role in stabilizing the transition state, where these two tunable functionalities not only activate the aldol acceptor but also locate the *re*-face of the acceptor proximate to the attack by the enamine. AcOH also plays an important role, as it may provide a proton to accelerate the formation of enamine; whereas the excessive AcOH may have a negative effect on the hydrogen bonding of diamide, which in turn depresses the catalytic efficacy.

In conclusion, we have developed a series of novel L-prolinamide organocatalysts with readily tunable bifunctionalities. Their catalytic activities were evaluated for the direct asymmetric Aldol reactions of various aromatic aldehydes and cyclohexanone. High isolated yields (up to 94%), enantioselectivities (up to 99% ee), and anti-diastereoselectivities (up to 99:1) were obtained using our catalytic system. Studies directed to the extension of this tunable hydrogen bonding–Lewis base dual-activation strategy to other reactions as well as the mechanistic aspects are currently underway.

Acknowledgment. We are grateful to the National Science Foundation of China (200472021), the National Basic Research Program of China (2004CCA00100), and the Hubei Province Science Found for Distinguished Young Scholar (2004ABBC011) for support of this research. We thank Professor Xin Xu for fruitful discussions.

Supporting Information Available: Experimental details and characterization data. This material is available free of charge via the Internet at <http://pubs.acs.org>.

OL0520323

5. 结果与讨论

6. 致谢



实例：侵犯版权和著作权

一篇有关XX分析的英文文章

作者：ZH & CH



发表

寄给W

翻译成中
文+5%

作者：W&ZH
&W的研究生

在国内发表



思考题（课堂上机实践）

1. 请从网上查阅你感兴趣的与化学有关的研究性文章（一篇中文，一篇英文），并写出它们的论文组成部分以及参考文献的引证次序。
2. 根据你的研究兴趣，网上搜索1-2个你感兴趣的研究小组的网站和相关内容截屏。
3. 科技试验中的物理常数主要有哪些(查阅文章的Supporting information)?
4. 你对本课程的期待、要求或建议？（可选）
5. 请大家提前安装chem office 11.0和EndNote等化学专业软件。
6. 预习体验Web of Science数据库。

Word版本电子版作业请发送到以下邮箱：

chenjiarong@mail.ccnu.edu.cn

作业命名：学号-名字-上课日期.doc