

系统要求插入化学结构检索的插件

若要在您的检索中合并结构查询，除了网页浏览器之外，还需要安装以下软件：

- MDL Chime plug-in (推荐使用Version 2.6 Service Pack 6)
- Drawing structures software (推荐使用MDL ISIS/Draw version 2.5 或更高的版本)

MDL Chemscape Chime提供了化学结构检索和功能描述，使您的浏览器可以对您在画图软件里画出的结构进行查询，也可以将结构查询的结果显示出来。MDL Chemscape Chime plug-in可以在MDL站点免费下载<http://www.mdli.com/downloads/downloadable/index.jsp>.

您可以选择下列结构画图软件里的任意一个：

- ISIS/Draw (推荐使用)
- ChemDraw (增强版)
- 任何一款画图软件，都可以将化学结构式以 molfile 的格式复制到剪贴板中，或者以 Molfile 的格式将其保存。

执行结构检索，可以画出一个结构式，也可以插入一个你以前保存的已有的结构式文件。请注意，为了检索到任意结构，粘贴或插入的必须是分子结构式。

结构查询的功能

您可以从下列区域进行结构检索。请注意，当您使用不同区域检索时，结果包含不同类型的报告。

检索区域	报告类型
① 化学模块的快速检索(Structure Search)页面	化学报告
② Form Search – Drugs	药物报告
③ Form Search – Intellectual Property	知识产权报告
④ Form Search–Literature and News	文献和新闻报告
⑤ Guided Search – Biology –ADMET	药物报告，Drugdex中的药物名称，文献和新闻报告

检索举例

如何检索最近一个月新添加到 Thomson Pharma 的包含葱为基础结构的化合物？

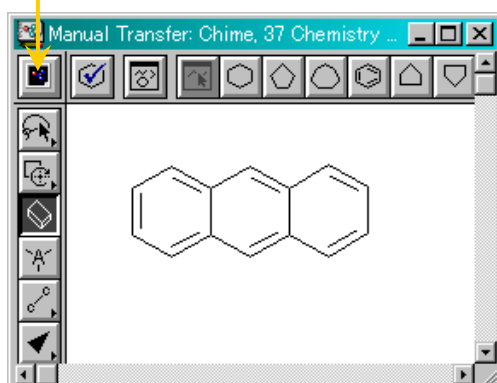


【I】在 Select Speciality 菜单选择“Chemistry”到达结构检索界面。

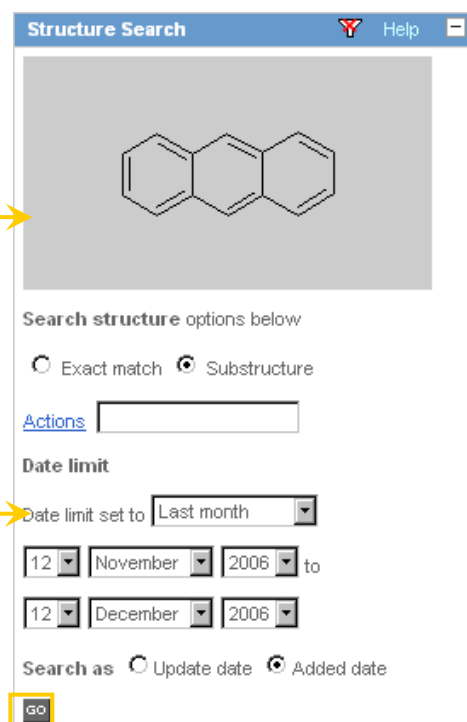


【II】双击灰色框打开 ISIS/Draw。除非使用 ISIS/Draw 软件，其余都需要单独打开画图程序，复制粘贴您画出的结构到灰色框里。

【III】点击左上角的转换模式图标。



结构自动转移到了灰色框



【IV】设置限定日期“Last Month”选择“Added Date”，最后，点击 Go

【III】结果概要显示

The screenshot shows a web interface for report summaries. The top navigation bar includes 'Print', 'Send', 'Export', and 'Add to folder'. On the left, there are three panels: 'Number of Reports' showing 'Chemistry CH 4', 'Display' with radio buttons for 'Summary', 'Summary with abstract', 'Summary with structure', and 'Summary with structure & development status', and 'Rank by' with radio buttons for 'Company', 'Therapy Area', 'Action', 'Author/Inventor', and 'Development Status'. The main content area is titled 'Summary' and features a 'Select all Show Checked' checkbox, a 'Sort by' dropdown menu set to 'Date', and 'Ascending' or 'Descending' order options. Below this is a list of reports, each with a checked checkbox, a title, a date, and a 'CH' label. Annotations in Chinese point to various elements: '输出选项' (Output options) points to the top bar; '报告的类型/数量' (Report type/quantity) points to the 'Number of Reports' panel; '按选项排序' (Sort by options) points to the sorting controls; '选择显示选项并点击, 可以改变结果的显示' (Select display options and click, can change the display of results) points to the 'Display' panel; '选择分析选项 点击 Go' (Select analysis options, click Go) points to the 'Rank by' panel; and '报告类型' (Report type) points to the 'CH' label in the report list.

输出选项

报告的类型/数量

Number of Reports
Chemistry CH 4

Display

Summary
 Summary with abstract
 Summary with structure
 Summary with structure & development status

Go

Rank by

Company
 Therapy Area
 Action
 Author/Inventor
 Development Status

Go

Print | Send | Export | Add to folder

Go to Form Search

Summary

Select all Show Checked

Sort by Date in Ascending or Descending order

[9,10-bis-\(3,5-dimethoxy-phenyl\)-anthracene](#) Updated on 7 December 2006 CH

[11-anthracen-9-ylmethyl-1,4,7-trithia-11-aza-cyclotetradecane](#) Cited in: Lit&News 1. Updated on 22 November 2006 CH

[5,12-diethyl-6,11-diphenyl-1,2,3,4-tetrahydro-naphthacene](#) Cited in: Lit&News 1. Updated on 22 November 2006 CH

按选项排序

选择显示选项并点击, 可以改变结果的显示

选择分析选项 点击 Go

报告类型