

**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。

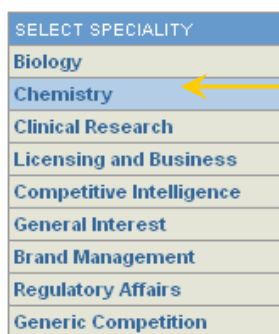
结构查询的功能

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
化学模块的快速检索(Quick Structure)页面	化学报告
Form Search Drugs	药物报告
Form Search - Intellectual Property	知识产权报告
Form Search-Literature and News	文献和新闻报告
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？

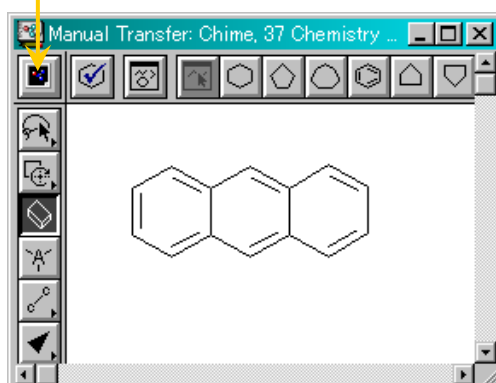


【】在 Select Speciality 菜单选择“Chemistry”到达结构检索界面。

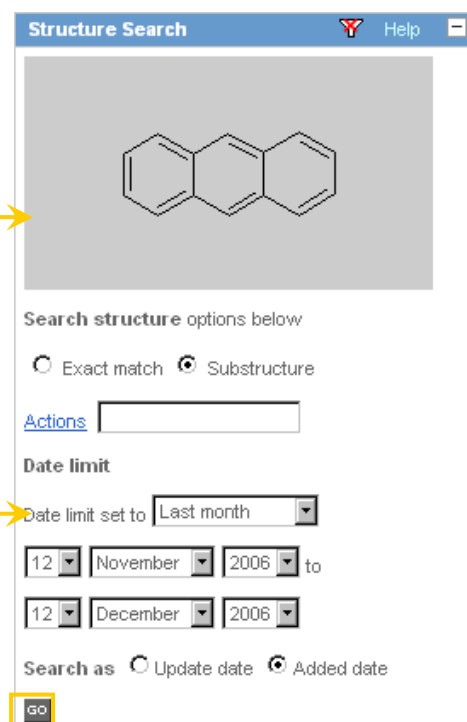


【】双击灰色框打开 ISIS/Draw. 除非使用 ISIS/Draw 软件, 其余都需要单独打开画图程序, 复制粘贴您画出的结构到灰色框里。

【】点击左上角的转换模式图标。



结构自动转移到了灰色框



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

## 【 】结果概要显示

输出选项

Print | Send | Export | Add to folder

Go to Form Search

Summary

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

Select all [Show Checked](#)

Sort by  in  or  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