

美国化学文摘社

SciFinder 2007 / SciFinder Scholar 2007

用户指南



By iGroup (Asia Pacific) Limited, February 2007

目 录

	SciFinder 2007 新功能	P. 1
	组合答案集(Combine)	P. 2
	输出 CHMECATS 供货商品目录数据至 Microsoft Excel (Export to Microsoft Excel)	P. 14
	从物质进一步进行检索 (Quick Explore of Substance)	P. 18
	打印物质检索结果 (Substance Print Grid Format)	P. 19
	以谱图形式进行显示和精炼 (Display and Refine by Spectra)	P. 19
第一章	SciFinder 结构图标 (Structure Drawing)	P. 1 – 1
	绘制结构窗口(Structure Drawing Screen)	P. 1 – 2
	垂直的工具板 (Vertical Tool Palette)	P. 1 – 8
	水平的工具板 (Horizontal Tool Palette)	P. 1 – 21
	结构检索(The Structure Query Drawing)	P. 1 – 23
	保存结构和再用结构 (Save and Reuse Structure)	P. 1 – 26
	检索多个结构碎片(Search Multiple fragments)	P. 1 – 26
第二章	完全相同化学结构检索 (Exact Chemical Structure Search)	P. 2 – 1
	完全相同化学结构检索 (Exact Chemical Structure Search)	P. 2 – 2
	实验特性 (Experimental Properties)	P. 2 – 6
	计算特性 (Predicated Properties)	P. 2 – 6
	保留物质 (Keep Substances)	P. 2 – 7
	分析和细化结果 (Analysis / Refine)	P. 2 – 7
	物质的相关文献 (Reference Information related to Substances)	P. 2 – 8
	检索更多相关数据 (Get Related...)	P. 2 – 9
	物质立体结构模型 (3D Structure Model of Substances)	P. 2 – 10
	物质供应目录数据 (Catalog Information of Substances)	P. 2 – 11
	物质管制和注册数据 (Regulatory Information of Substances)	P. 2 – 12
	物质反应数据 (只限有亚结构 SSM 的账号) (Reaction Information of Substances)	P. 2 – 13
	结束完全相同化学结构检索 (Ending Exact Chemical Structure Search)	P. 2 – 14
第三章	亚结构检索 (Substructure Search)	P. 3– 1

	亚结构检索 (Substructure Search)	P. 3-2
	预览亚结构检索 (Preview of Substructure Search)	P. 3-4
	进行亚结构检索 (Performance of Substructure Search)	P. 3-9
	分析结果 (Analyzing Answer)	P. 3-11
	分析取代原子 (Analyzing Substitution Atom)	P. 3-12
	分析可变基团 (Analyzing Variable Group (A, Q, X, M))	P. 3-13
	分析 R 基团的组合原子 (Analyzing Composition Atoms of R Group)	P. 3-14
	分析检索的准确性 (Analyze by Search Accuracy)	P. 3-15
	分析环结构 (Analyze by Ring Structure)	P. 3-16
	分析立体结构 (Analyze by Stereo)	P. 3-21
	细化答案 (Refining Answers)	P. 3-25
	结束亚结构检索 (Finish Substructure Search)	P. 3-28
第四章	相似结构检索 (Similarity Search)	P. 4-1
	相似结构检索简介 (Introduction of Similarity Search)	P. 4-2
	进行相似结构检索 (Performance of Similarity Search)	P. 4-4
	比较: 完全相同结构检索、亚结构检索和相似结构检索 (Differences between Exact Chemical Structure Search, Substructure)	P. 4-6
	结束相似结构检索 (Finish Similarity Search)	P. 4-10
	相似结构检索的参考文献 (Reference Data of Similarity Search)	P. 4-10
第五章	化学反应检索 (Reaction Search)	P. 5-1
	从结构去检索反应式 (Search from One Side of Reaction)	P. 5-2
	进行化学反应检索 (Performance of Reaction Search)	P. 5-3
	多步反应显示 (Display Multi-steps Reaction)	P. 5-5
	化学反应的文献 (References of Reaction)	P. 5-6
	分析反应结果 (Analyze Reaction Result)	P. 5-7
	细化反应结果 (Refine Reaction Result)	P. 5-9
	指定反应物/试剂和产物 (Define the Reactants/Reagents and Products)	P. 5-13
	以官能团检索 (Search by Functional Group)	P. 5-15
	组合官能团和结构检索 (Search by Combination of Functional Group and Structure)	P. 5-19
	进行反应检索 (Performance of Reaction Search)	P. 5-20
	结束反应检索 (Finish Reaction Search)	P. 5-21

Appendix A	智能检索：SciFinder 怎样去检索结构	P. A - 1 - P. A - 4
Appendix B	CAS Registry：物质特性参考表	P. B - 1 - P B - 5

SciFinder 2007 新功能

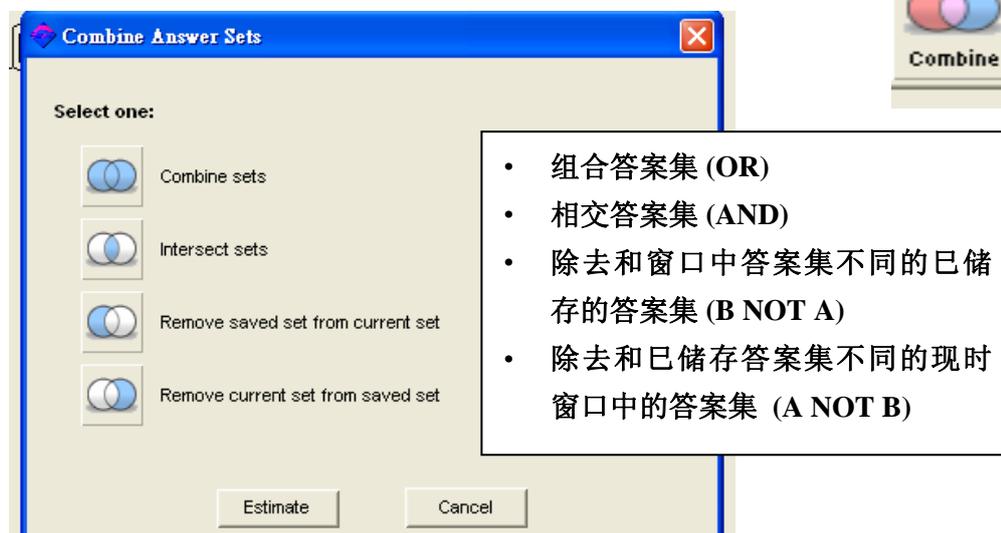
为了更好地满足广大 SciFinder 用户的需要，SciFinder2007 在 SciFinder2006 的基础上增加了以下更强大的功能。

- 组合答案集将使文献, 物质, 反应等查找的结果变得更加有序. 您可以通过组合交叉或移出方法来获得所需要的文献
- 商业化学品记录可以导入到 **Excel** 表格中, 以方便对检索结果进行分类和操作
- 用户现在可以快捷地从物质检索结果中获取结构进行进一步检索
- 各种结构缩印在一个页面上方便进行有效地比较
- 以谱图形式进行显示和细化

这个章节会说明 SciFinder2007 的新功能。

组合答案集(Combine)

SciFinder 可让用户以四种不同的方式进行组合检索，用户便能作出更多检索策略和变化。这功能有以下的好处：



- 在进行各种组合变化后，用户很容易地便可得到需要的检索结果。
- 用户可以组合不同作者和公司的研究，再用后处理功能进行分析。
- 用户很容易地便可检索出需要的合成路线，不需要花时间细看和比较每条合成路线。
- 除去没有需要的检索答案，节省阅读时间。

组合答案集的应用:

- 组合文献检索结果
- 组合物质检索结果
- 组合反应检索结果

功能要点:

- λ 用户每次可以组合两组参考文献答案集 (在一次 SciFinder 的查询期间，可以进行多次的组合)。其中一组结果必须先储存在计算机上 (desktop answer)，另一组便是在 SciFinder 窗口的当前检索结果 (active answer)。
- λ 只可组合两组的参考文献答案集 (不可以是化合物或化学反应的答案集)。
- λ 操作特色:
 - v 没有突显功能 (如关键词突显会消失)。

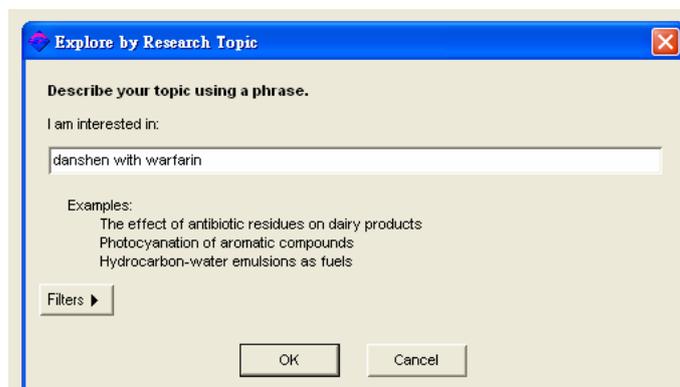
- v 不可使用自动提示(KMP Now)和网络查询相关数据(eScience)的功能。
- v 组合文献结果排列和当前检索答案集 (active answer)相同。
- v 可使用再检索(refine) 分析(analysis)和取得相关信息(get related...)功能。
- v 最多可显示, 储存和打印 20,000 个结果。
- v 任务的使用记录包括组合的进行, 例如: 组合类型、储存结果组的档名、文献结果数目、和组合后的结果数目等。

注意: 组合功能并不需要开始一个新的任务, 所以组合前正在查询的当前答案集记录仍然保留。

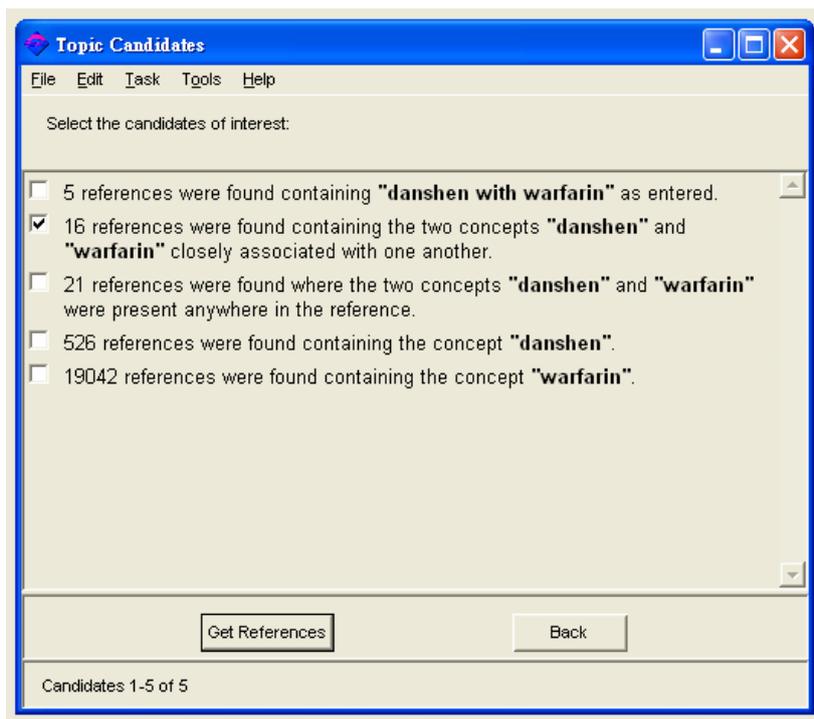
组合文献的演示例子:

查询华法林和草本植物的相互作用, 但不包括中药丹参。

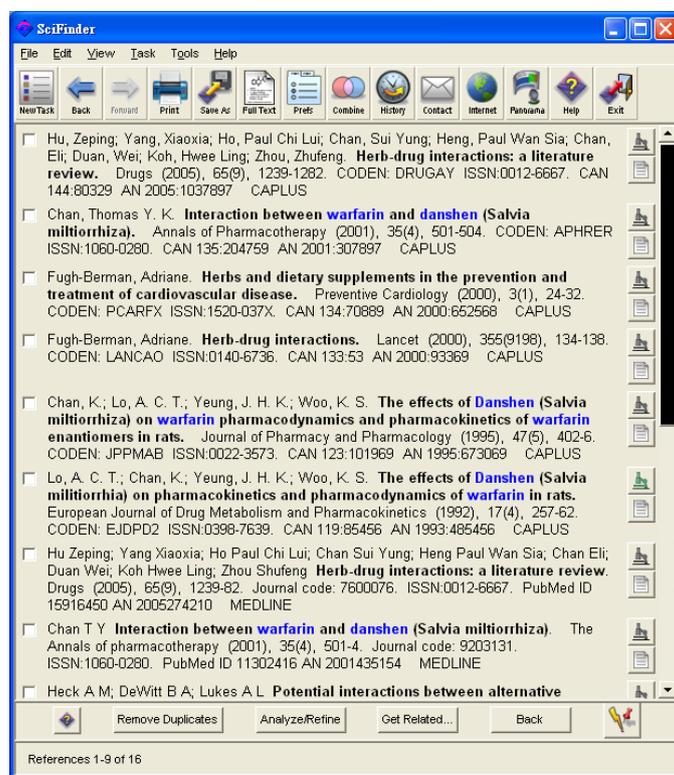
1. 开始新的任务, 点选研究课题, 便出现以下的对话框。输入 “Danshen with warfarin” 后, 点击 OK。



2. 以下的窗口将会出现, 给用户选择不同的检索结果组合, 选择 “closely associated” 的检索结果组合. 因为和输入的课题关系较高. 之后, 点选 Get Reference 便可取得检索结果。



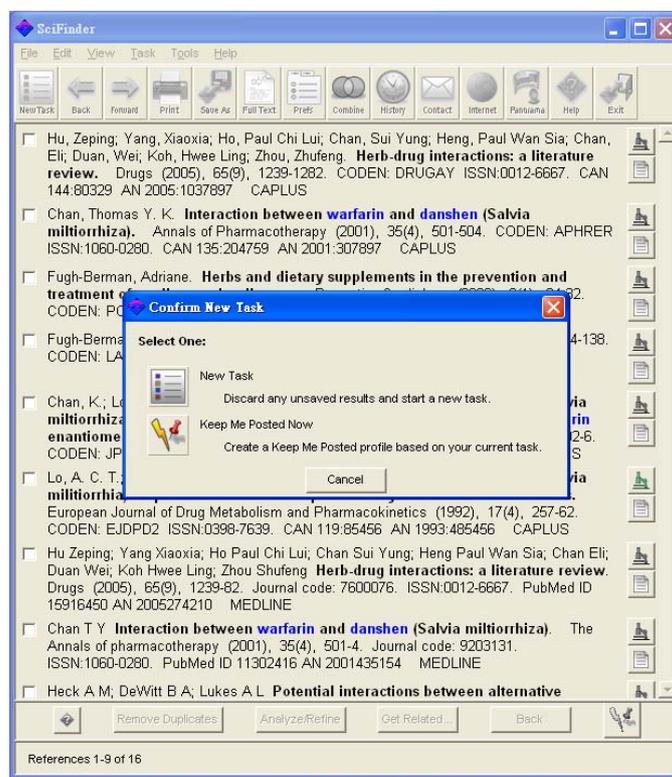
3. 结果显示 16 个检索结果，点击主工具列的 File> Save Answer Set 储存检索答案集。



4. 输入文件名称并选择存档类型为 (*.sfr)，最后点击储存。

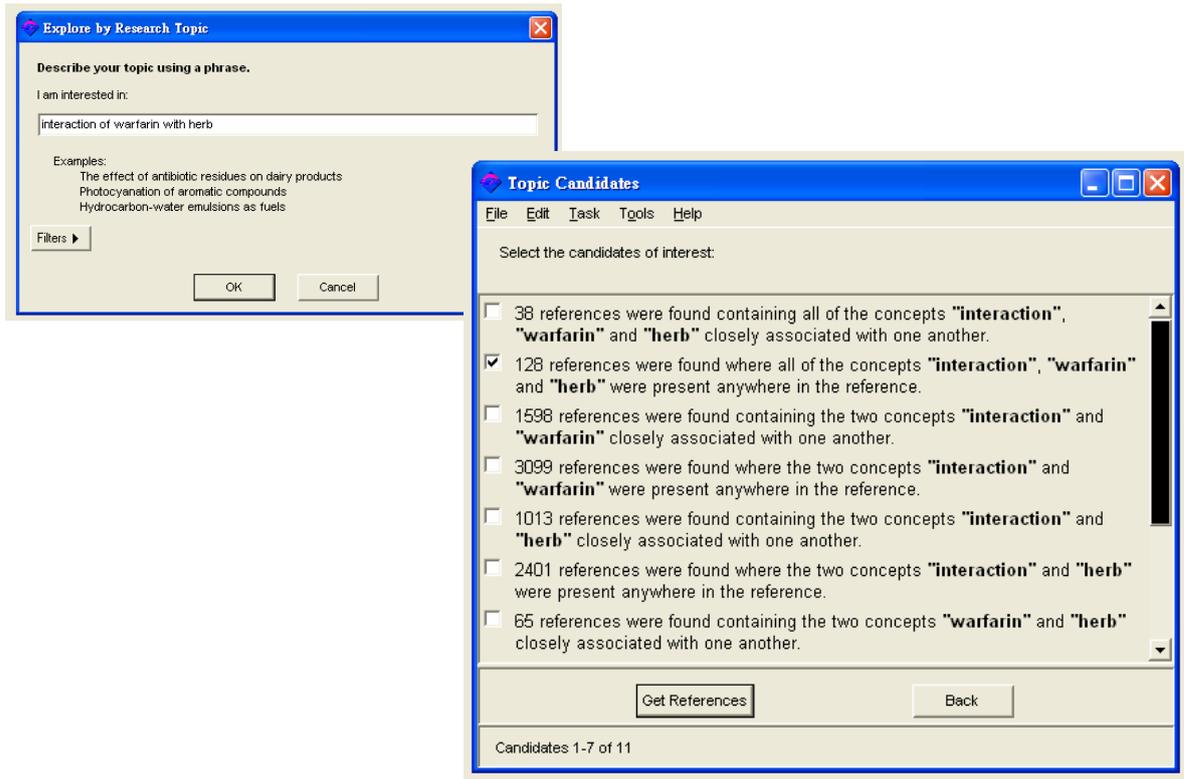


5. 开始新的任务, 进行第二组的研究主题检索。

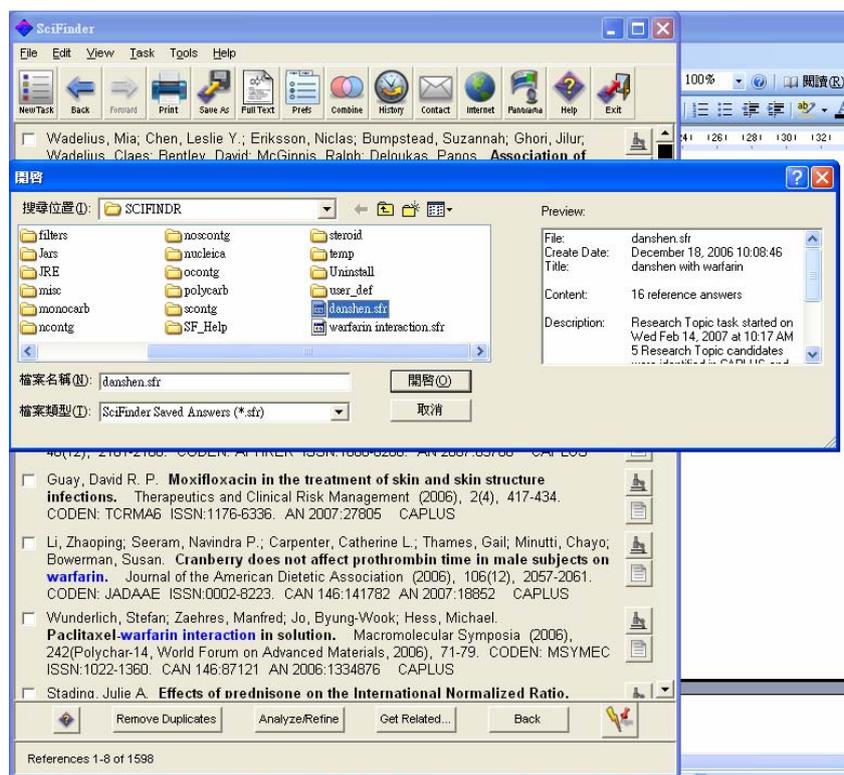


6. 输入研究主题 “Interaction of warfarin with herb” ，之后点击 OK。选择 “closely associated” 的检索结果组合。再点选 Get Reference 便可取得检索结。

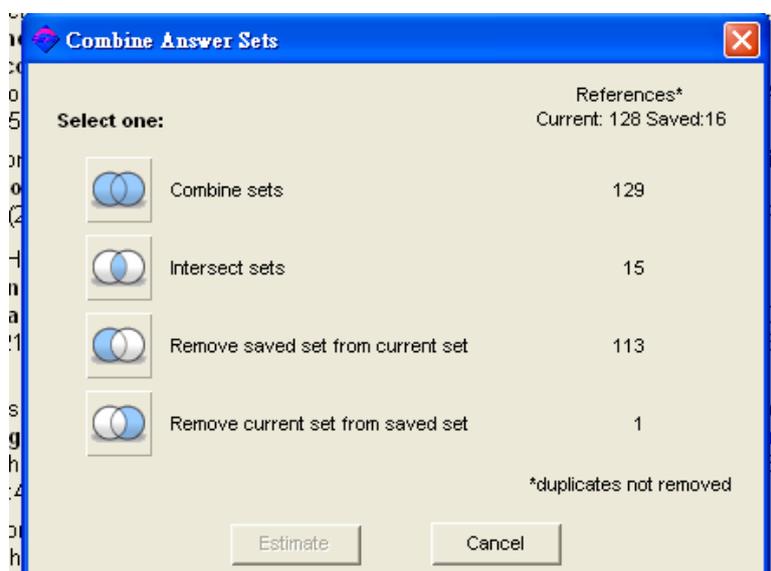
提示: 用户是可以组合从不同检索方式取得的文献答案集 (如由物质检索取得的文献 Get reference from structure search)



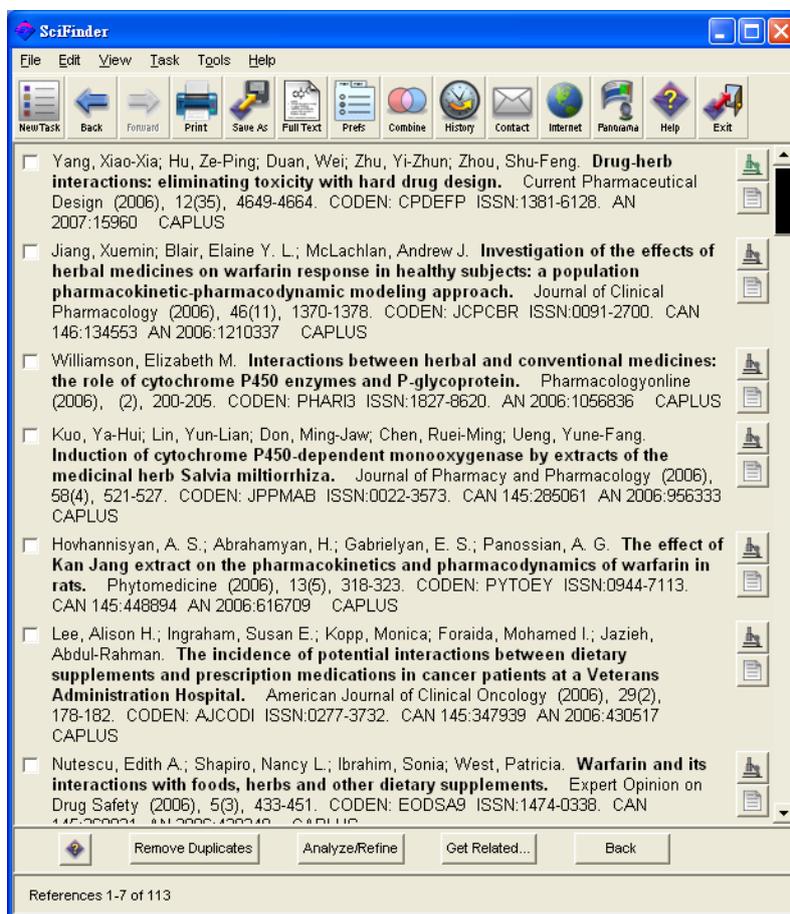
7. 这为当前文献检索答案集，点  击图像，开始进行组合，便会出现以下的窗口。选择早前储存的文献检索答案集 (Saved answer set)，在右边可预看其详细描述，如进行了什么检索和结果数目。选好后按开始。



8. 选择以下其中一种的组合方式，点击 Estimate 便可看到预计的组合结果。



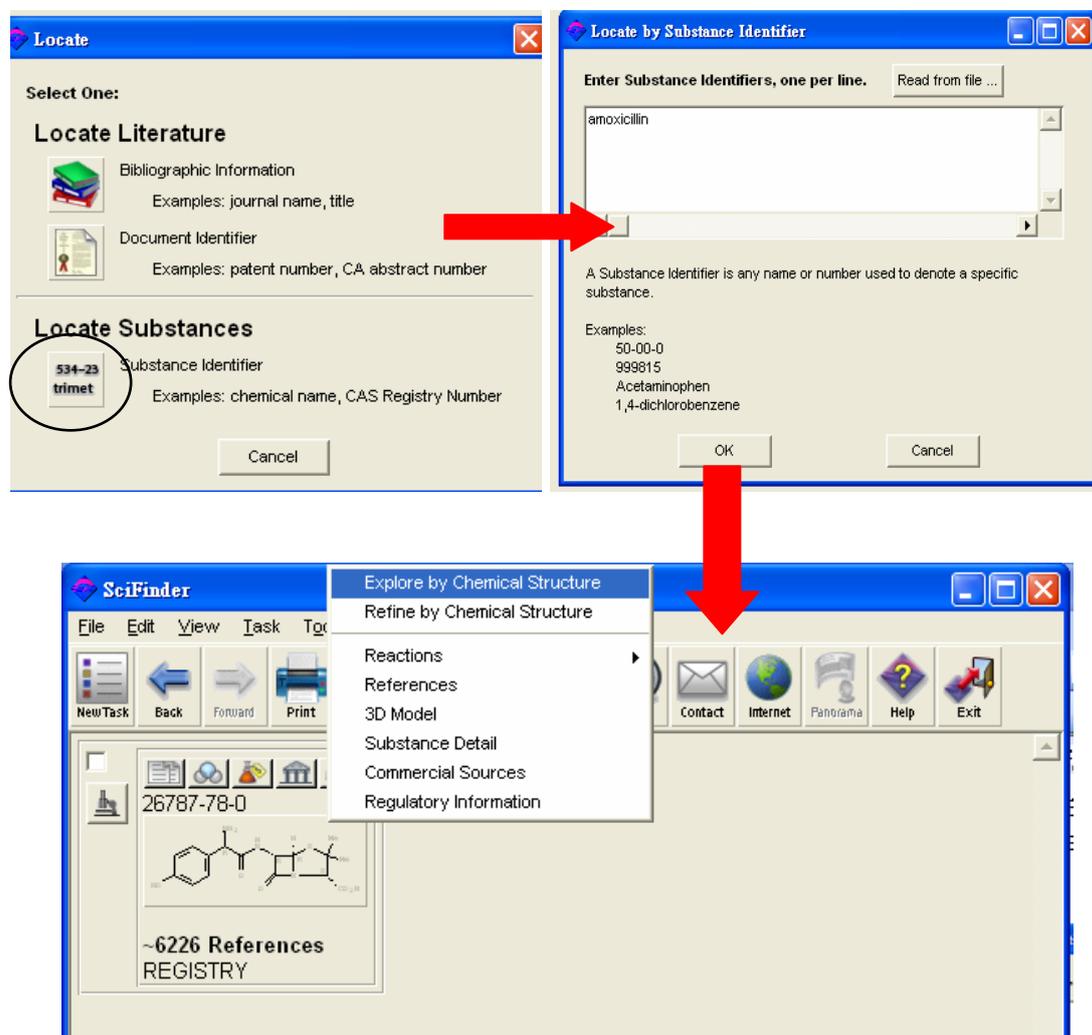
9. 现在除去华法林和中药丹参的文献(Saved answer set)，选择“Remove saved set from current set”，便可成功地取得需要的文献答案如下，共有 113 条文献。



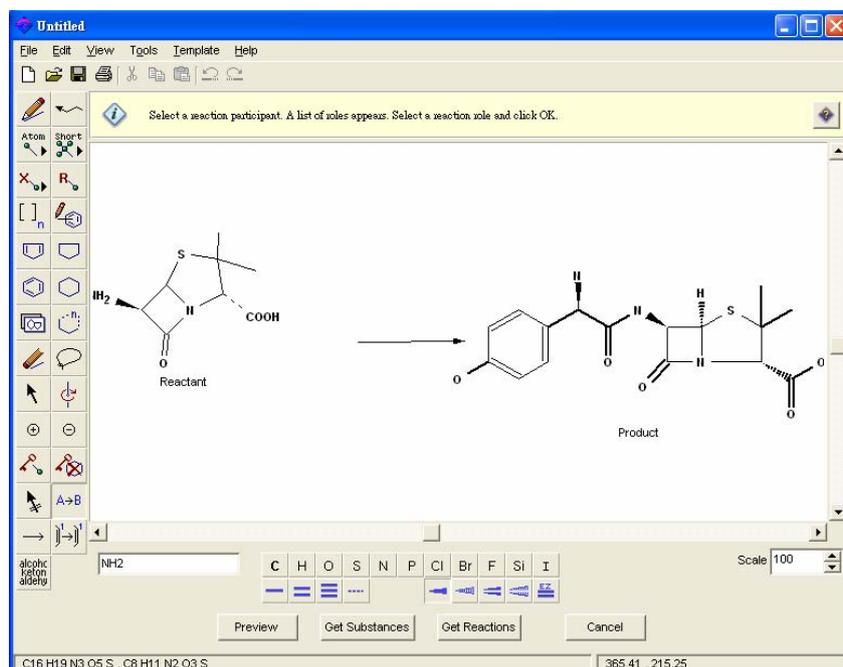
组合反应的演示例子:

查询阿莫西林 (Amoxicillin)的合成, 但不包括以 6-氨基青霉烷酸 (6-aminopenicillanic acid, 6-APA) 为原料的合成路线。

1. 用户可以按 Explore> Reaction 开始反应检索, 并在绘图窗口画出反应式。此外, 用户可用 Locate 找出阿莫西林, 再按 Explore by chemical structure 将阿莫西林的结构输入绘图窗口, 这是 ScFinder 2007 的其中一个新功能。好处是让用户快捷地实时输入结构再作查询。还有, 可以节省绘画复杂结构的时间。

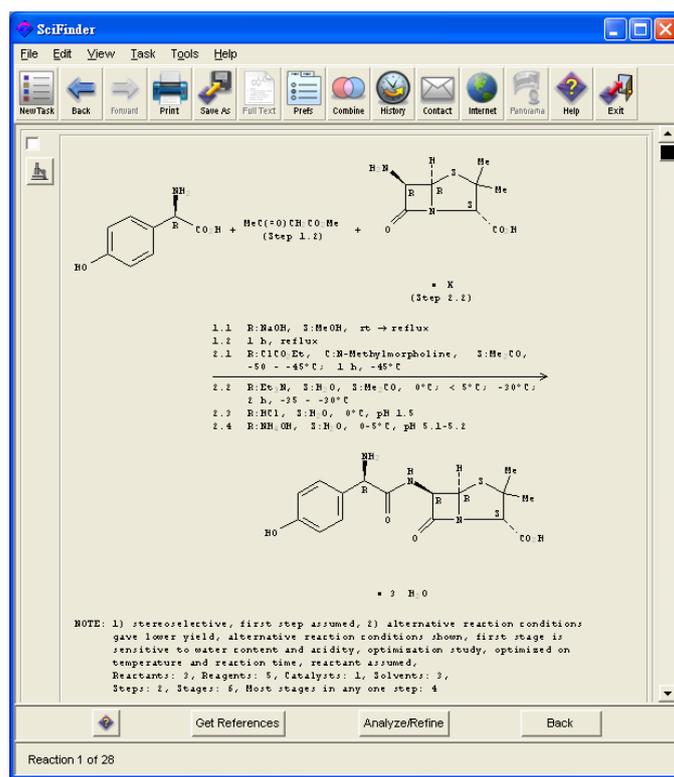


- 先检索 6-氨基青霉烷酸 (6-aminopenicillanic acid, 6-APA) 开始的阿莫西林合成。阿莫西林的结构已绘画在右边，用户只需在左边绘画 6-氨基青霉烷酸，再点选反应箭头工具，用鼠标从左至右拖曳，设定反应物和产物。

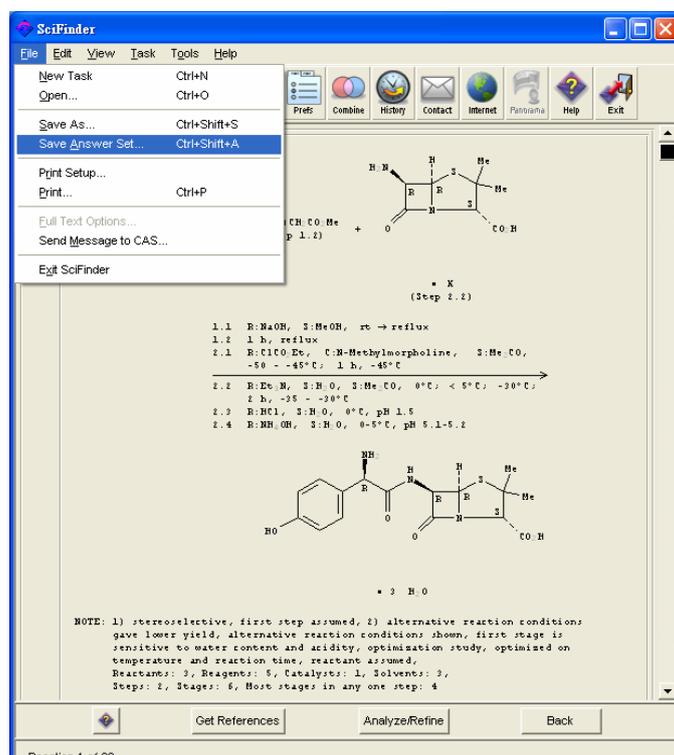


- 点选 Get Reactions，开始查询。
- 选择 “variable only at the specified positions” 的检索方法，即反应变化只适用于指定的结构位置。点击 Filters 过滤，可输入更多的检索条件。

- 按 OK 进行查询。共检索出 28 条反应。



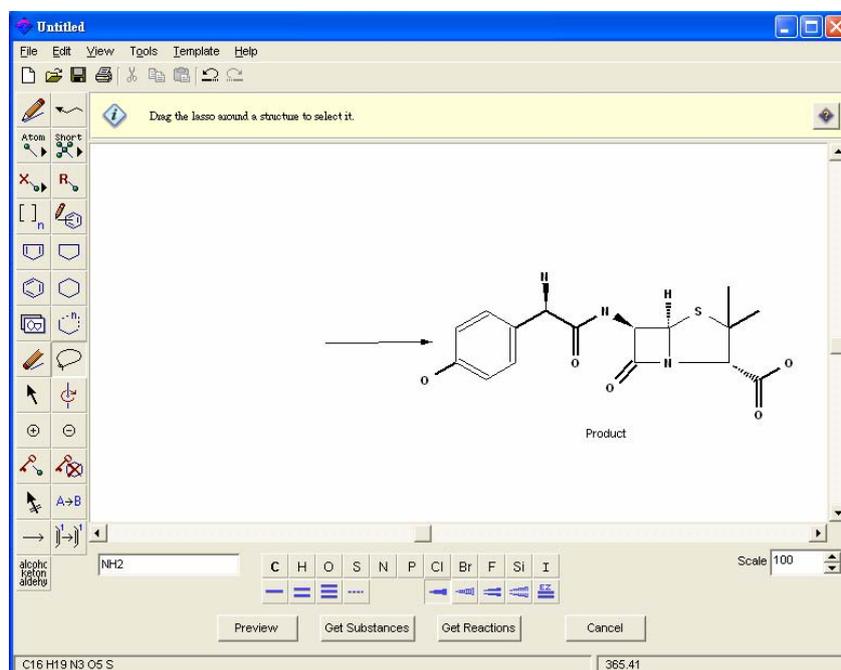
6. 点击主工具列的 File> Save Answer Set 储存反应检索答案集。



7. 输入文件名称并选择存档类型为 (*.sfr), 最后点击储存。这档案便可在组合功能上用到。

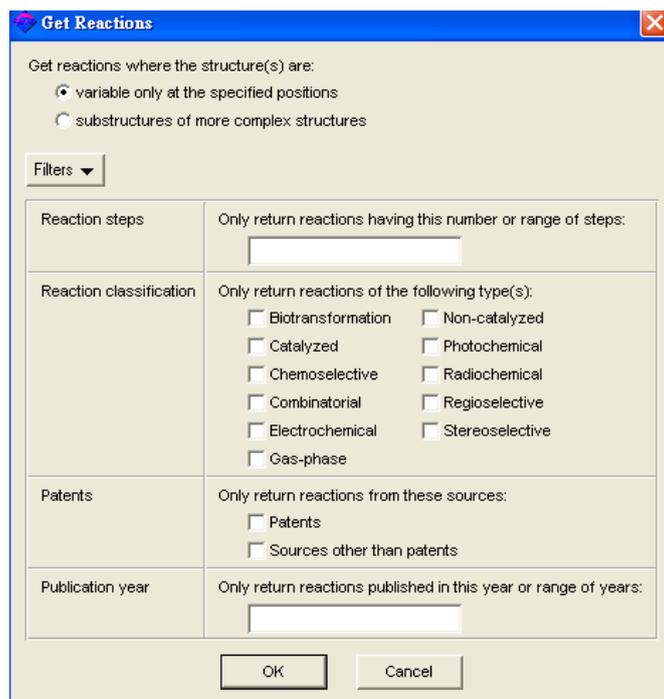


8. 当前检索所有阿莫西林(Amoxicillin)的合成反应。点选反应箭头工具，用鼠标从左至右拖曳，阿莫西林会自动被指定为产物。

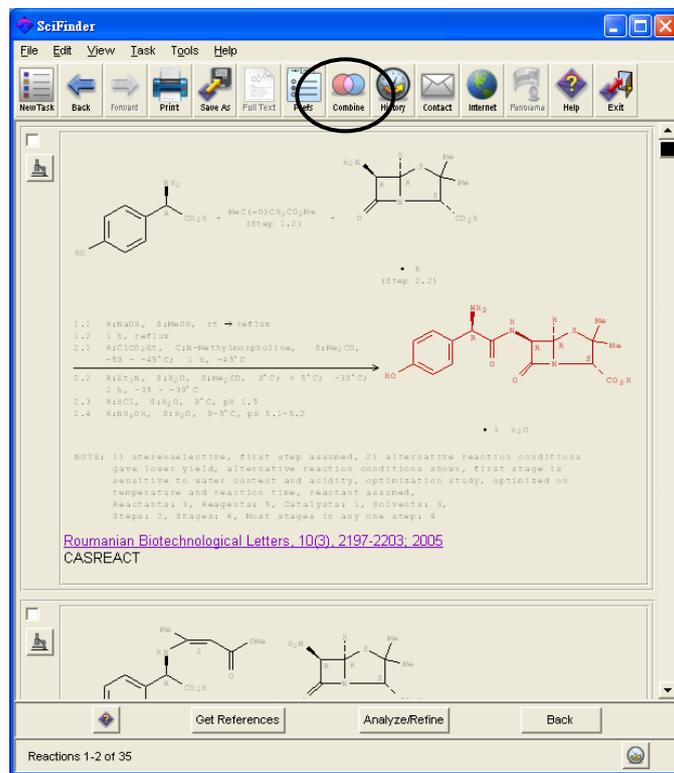


9. 点选 Get Reactions，开始查询。

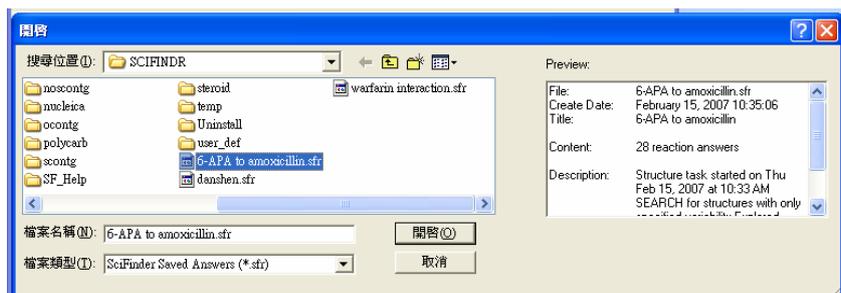
10. 选择 “variable only at the specified positions” 的检索方法，按 OK 进行查询。



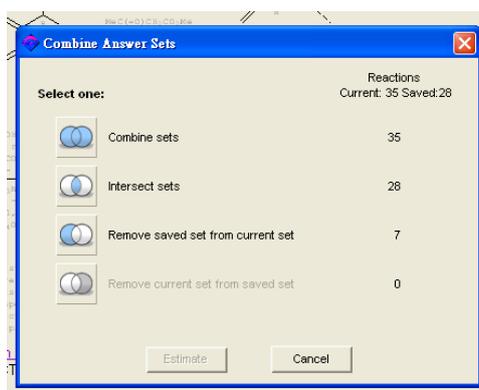
11. 共检索出 35 条阿莫西林(Amoxicillin)的合成反应 (Active answer set)。现在可进行组合，点击 Combine。



12. 选择早前储存的反应检索答案集 (6-APA to amoxicillin.sfr)，在右边可预看其详细描述，如进行了什么检索和结果数目。选好后按开启。

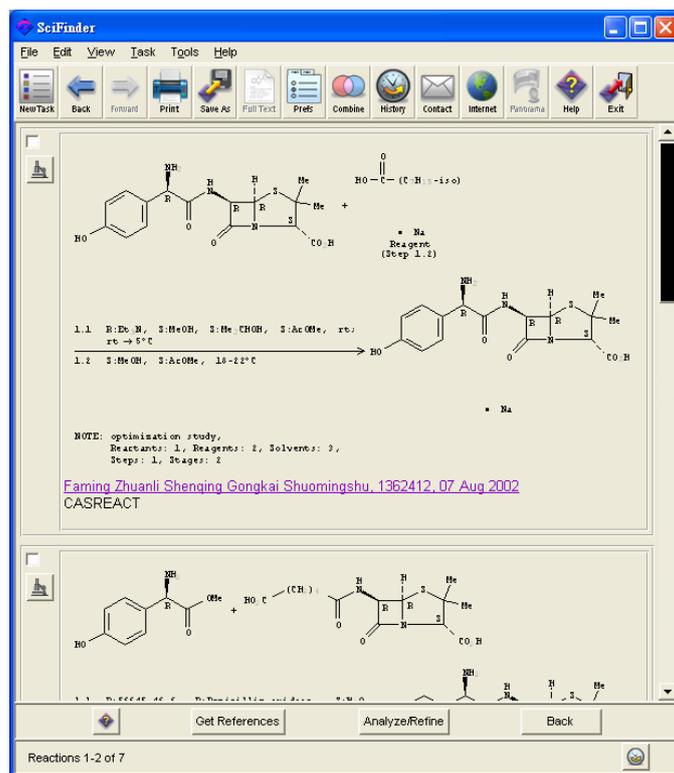


13. 选择以下其中一种的组合方式，可按 Estimate 便可看到预计的组合结果。



13. 选择 Remove saved set from current set，除去以 6-氨基青霉烷酸 (6-aminopenicillanic acid, 6-APA) 开始的合成。

14. 最后检索出 7 条反应路线。



输出 CHMECATS 供货商品目录数据至 Microsoft Excel (Export to Microsoft Excel)

这功能可以将 CHEMCATS 数据输出至 Microsoft Excel 表格，方便处理、分类和过滤。用户更容易地找出合适的供货商信息。

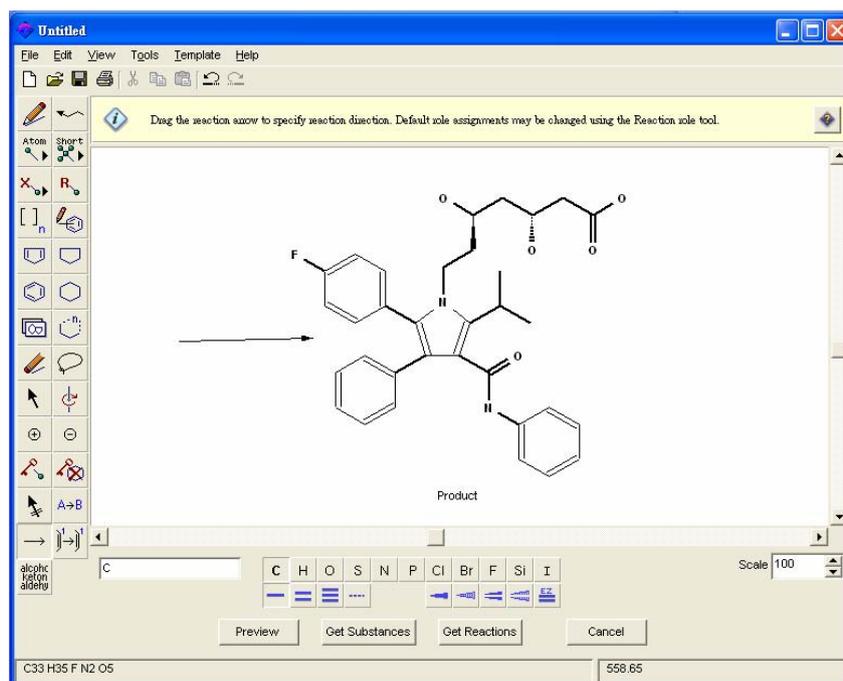
用户计算机必须已装好 Microsoft Excel 软件。如果没有，用户可选择以下格式储存。

- ASCII (*.txt)
- Rich Text Format (*.rtf)
- Quoted Format (*.txt)
- Tagged Format (*.txt)

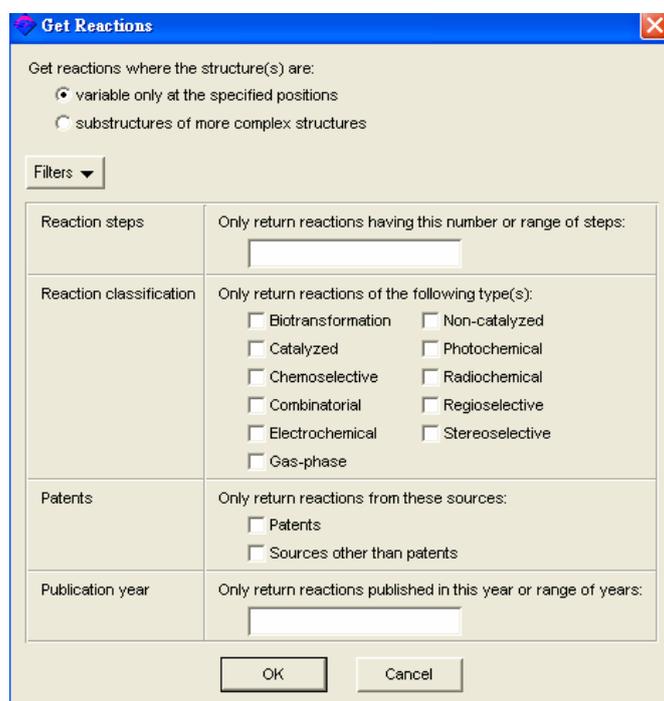
功能演示例子:

查询降血脂药阿托伐他汀（Atorvastatin）合成的中间体供应信息

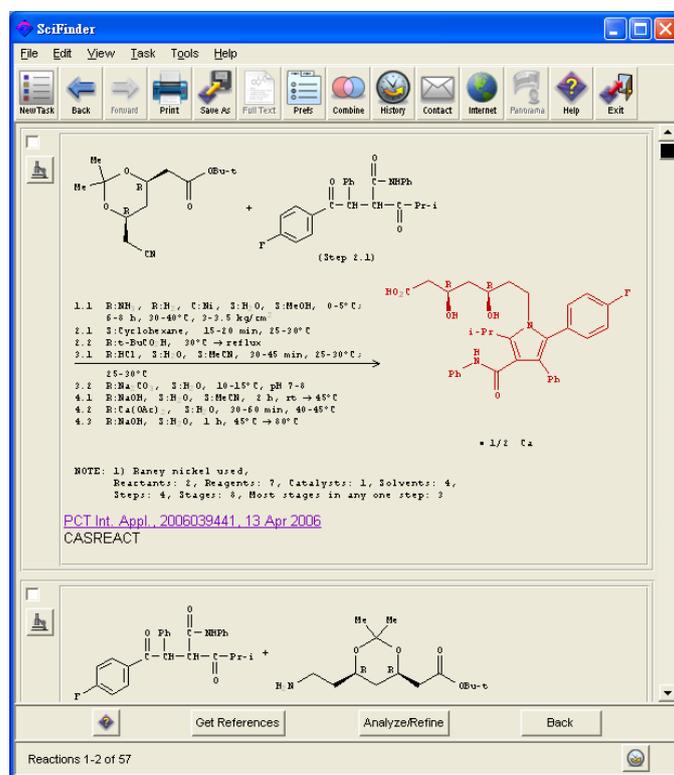
1. 开始 SciFinder，选择 Explore> Reaction，输入阿托伐他汀的化学结构。
2. 點選反应箭头工具，用鼠标从左至右拖曳，阿托伐他汀会自动被指定为产物。
3. 點選 Get Reactions，开始查询阿托伐他汀（Atorvastatin）的合成。



- 选择 “variable only at the specified positions” 的检索方法，即反应变化只适用于指定的结构位置。
- 点击 Filters 过滤, 可输入更多的检索条件。

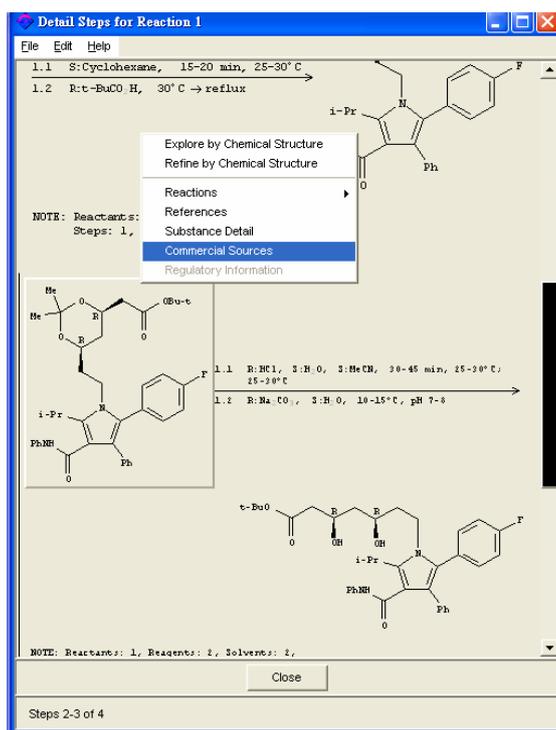


- 输入所有检索条件后, 按 OK 进行查询。



- 共检索出 57 条相关反应式。在每一个反应记录中, 用户可查询到反应物, 详细反应条件和重点等资料。点击链接, 可查询其文摘。

7. 点击显微镜图像，即显示多步反应式。



8. 如对任何一个物质式或中间体有兴趣，可用鼠标右键点选反应式，用户便可继续查询该物质的数据。

9. 这个例子中，选择了查看其一个中间体的供货商数据 (commercial source)。

Sources for 125971-95-1

Catalog Name: Aurora Screening Library
Quantity: milligram quantities
Publication Date: 1 Jan 2007
Order Number: kasf166650
Chemical Name: 1,3-Dioxane-4-acetic acid, 6-[2-[2-(4-fluorophenyl)-5-(1-methylethyl)-3-phenyl-4-[(phenylamino)carbonyl]-1H-pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-, 1,1-dimethylethyl ester, (4R,6R)-
Registry Number: 125971-95-1
CHEMCATS

Catalog Name: Bosche Scientific Product List
Quantity: N/A
Publication Date: 1 Jan 2007
Order Number: D3216
Chemical Name: (4R-cis)-1,1-dimethylethyl-6-[2-[2-(4-fluorophenyl)-5-(1-isopropyl)-3-phenyl-4-[(phenylamino)carbonyl]-1H-pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-1,3-dioxane-4-acetate
Registry Number: 125971-95-1
CHEMCATS

Catalog Name: AK Scientific Product Catalog
Quantity: various quantities
Publication Date: 19 Dec 2006
Order Number: 1935
Chemical Name: (4R-cis)-6-[2-[2-(4-fluorophenyl)-5-(1-methylethyl)-3-phenyl-4-[(phenylamino)carbonyl]-1H-pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-1,3-Dioxane-4-acetic acid, 1,1-dimethylethyl ester
Registry Number: 125971-95-1
CHEMCATS

Catalog Name: ChemPacific Product List

Export to Microsoft Excel Close

Sources 1-4 of 10

10. 供货商数据便会显示在窗口中。用户可按显微镜图像查阅详细的数据。

11. 或选择 Export to Microsoft Excel，将 CHEMCATS 数据输出至 Microsoft Excel 表格作整理。用户可选择输出全部数据，也可选择输出已选的数据。



12. 输出数据可用依 Company Name 公司名 或 Country 国家排列。
 13. 最后点击 OK，数据便输出至 Microsoft Excel 中。用户便可轻易查看和找出供货商的相关信息。点选 Excel 表中的供货商连结，便可连结到该网站。

	A	B	C	D	E	F	G	
1	SciFinder							
2	Chemical Name	Catalog Name	Company Name	Street Address	City	State or Province	Country	Zip
5	(4R-Cis)-1,1-Dimethylethyl-6-[2-Fuorophenyl]-5-(1-Methylethyl)-3-Phenyl-4-[(Phenylamino) carbonyl]-1H-Pyrazol-1-yl]ethyl]-2,2-Dimethyl-1,3-Dioxane-4-Acetate	Hongda Group Product List	Hongda Group Limited	29 Dongdu Road Rm A12 5F Ningbo World Trade Centre Bldg	Ningbo		People's Republic of China	31500
6	(4R-cis)-6-[2-[2-(4-fluorophenyl)-5-(1-methylethyl)-3-phenyl-4-[(phenylamino)carbonyl]-1H-pyrazol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-1,3-dioxane-4-acetic acid, 1,1-dimethylethyl ester	AK Scientific Product Catalog	AK Scientific, Inc	897-4G Independence Ave.	Mountain View	CA	USA	94043
7	(4R-cis)-1,1-dimethylethyl-6-[2-[2-(4-fluorophenyl)-5-(1-isopropyl)-3-phenyl-4-[(phenylamino)carbonyl]-1H-pyrazol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-1,3-dioxane-4-acetate	Agno Pharma Product List	Agno Pharma	683 N. Mountain Road	Newington	CT	USA	06111

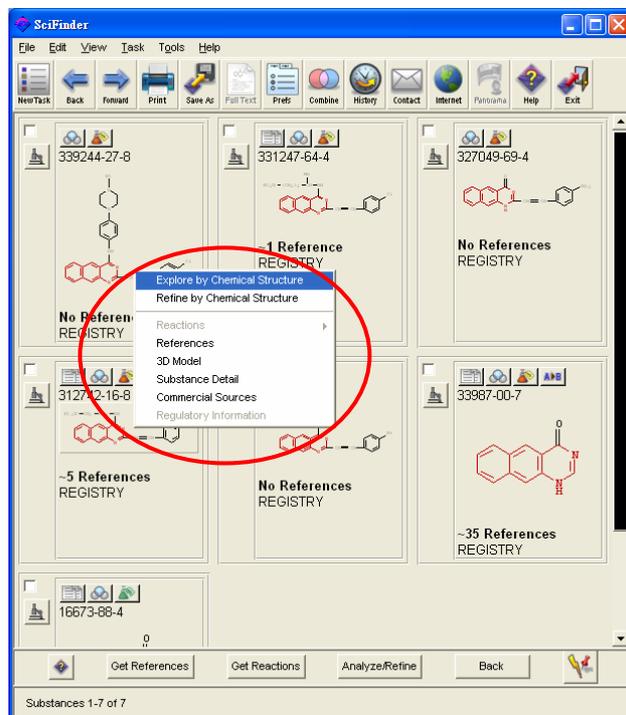
从物质进一步进行检索 (Quick Explore of Substance)

SciFinder 提供两种方法从物质开始作进一步的检索:

1. 复制(Copy)和粘贴(Paste) CAS 注册号到绘图窗口, 便可将该结构输入。
2. 点击结构图像, SciFinder 便会开启绘图窗口并自动粘贴结构 (SciFinder 2007 新功能!). 这功能的好处是可实时用物质结构答案作新的检索或细化。还有, 可以节省绘画复杂结构的时间。

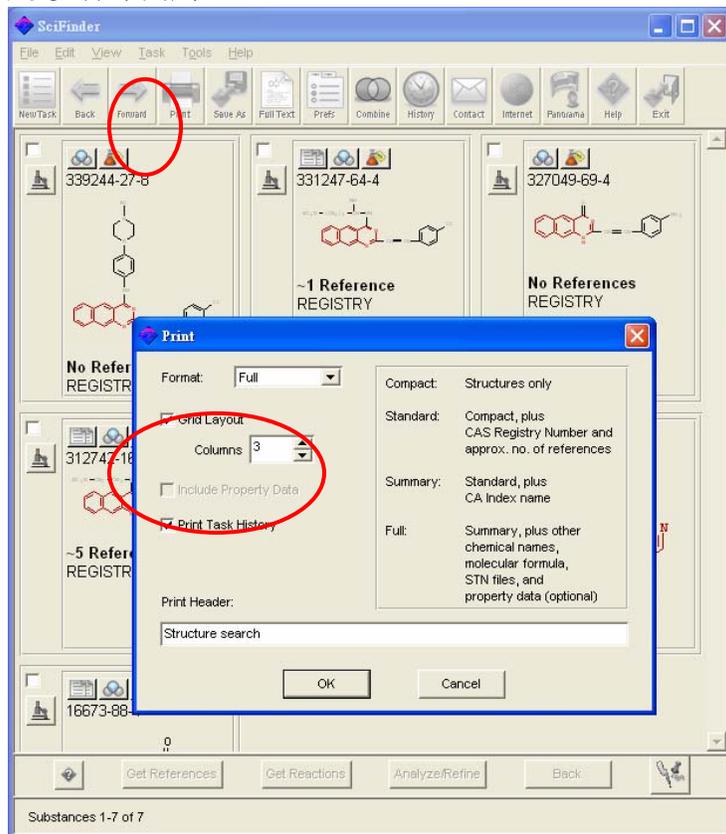
从结构图像作进一步的检索

1. 点击任何一个结构图像显示 (在物质, 文献或反应检索得到的结构), SciFinder 便会显示内容清单。如果点选结构是多成份物质的其中一种成份, 用户可选择查询那种成份或整个物质。
2. 选择 Explore by chemical structure, 开启绘图窗口并自动粘贴结构, 进行新的结构检索。
3. 选择 Refine by chemical structure, 开启绘图窗口并自动粘贴结构, 以该结构再作细化。



打印物质检索结果 (Substance Pint Grid Format)

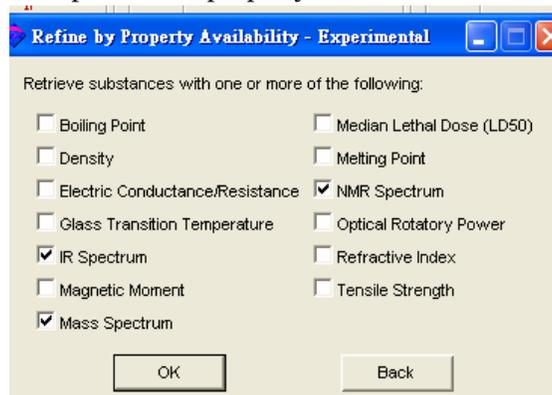
以表格形式打印物质检索结果, 方便查看。点选 Print > Grid Layout, 也可选择打印栏的数目。每次可最多打印四列。



以谱图形式进行显示和精炼 (Display and Refine by Spectra)

从物质记录中, 点击实验物性, 便可取得物质谱图或资料。

通过含有谱图的数据来精选物质结果, 选取 Analyze/Refine > Refine > Property availability > Any selected experimental property



第一章 SciFinder 结构图标 Drawing) (Structure Drawing)

用户可用化学结构图标来检索化学物质和化学反应，找出有关化学物质的特性、文件、供货商、管制品名单和化学反应等资料。

使用 SciFinder 可以从以下不同的方式进行检索。

- 完全相同结构检索 (Chapter 2)
- 亚结构检索 (Chapter 3)
- 相似结构检索 (Chapter 4)
- 化学反应检索 (Chapter 5)

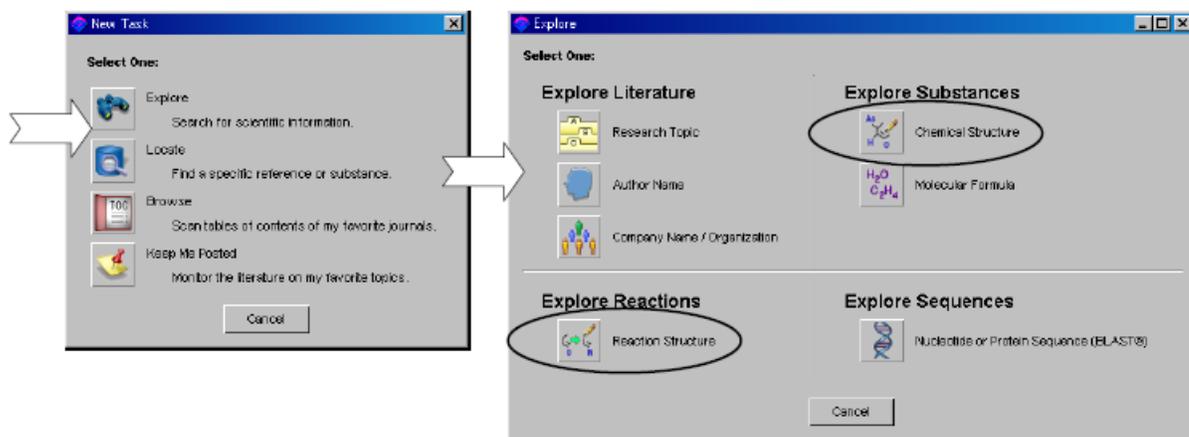
这个章节会说明怎么使用 SciFinder 的结构图标。

- 结构图标窗口
- 结构图标菜单
- 结构图标工具

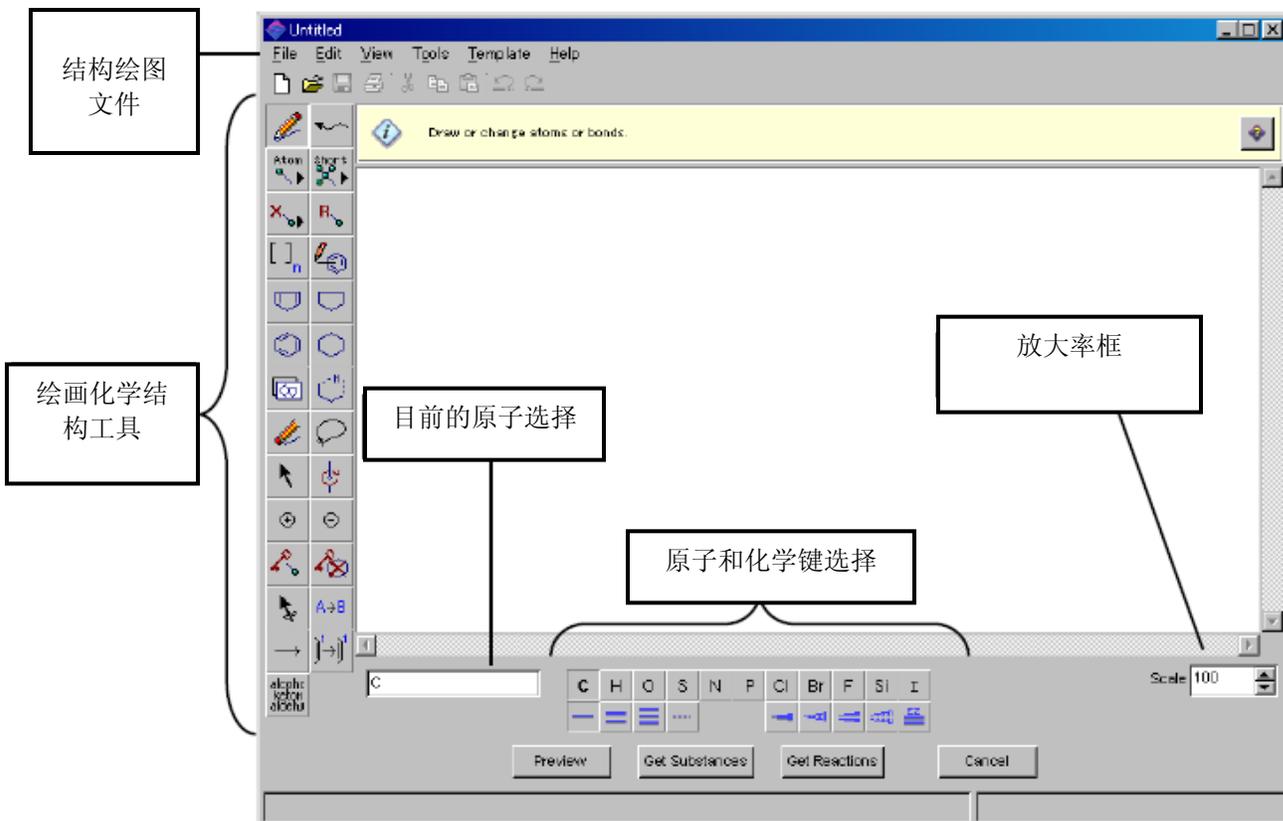
绘画结构窗口(Structure Drawing Screen)

■ 启动结构图标屏幕

1. 按下 New Task 窗口中的 Explore, 然后选择 Chemical Structure (物质结构)或 Reaction Structure (反应结构)。



2. 绘画结构窗口 Untitled (未命名)开启。



- 结构图标菜单显示绘制结构所需的工具。



- 文件菜单(File Menu)

文件菜单(File Menu)有以下基本的结构图标和窗口控制指令。

菜单标题	定义
New	开启新的结构图标窗口
Open	打开已保存之结构
Close	关闭结构图标窗口，并开始新的任务(New Task)窗口
Save	保存正在开启的结构图标 (不会显示对话框)
Save as	另存结构，以不同的格式或文件名字保存 (如: MDL molfile)
Revert	取消所有改变，并回复到最后所保存的状况
Get Substances	搜寻与已绘制的化学结构及其相关的物质，包括互变异构体和离子
Get Reactions 	搜寻化学反应
Preview 	预览结构检索所得的答案
Print Setup (Windows) Page setup (Macintosh)	设定打印
Print	打印所显示的结构
Exit SciFinder (windows) Quit (Macintosh)	退出 SciFinder

 只适用于反应检索。

 只适用于有亚结构检索的账号。

■ 编辑菜单(Edit Menu)

SciFinder 的编辑菜单拥有标准的编辑功能。

菜单标题	定义
Undo	复原之前的编辑情况，能使用多次
Redo	复原到 Undo 之前的情况
Cut	剪下已选的结构或文本，并保存到剪贴板
Copy	复制已选的结构或文本到剪贴板上
Paste	将剪贴板的内容, 剪贴到鼠标所指示的位置
Clear	清除已选的图或文本
Select All	选择所有在结构图标窗口中的数据
Unselect All	不选择所有在结构图标窗口中的数据
Clear All	清除在结构图标窗口中的所有数据
Repaint	更新结构图标窗口
Delete All Mappings 	删除所有化学反应中的原子绘图

■ 视图菜单 (View Menu)

可以在浏览菜单中选择不同方式去浏览原子结构图和工具列。

菜单标题	定义	默认设置
Dot Atoms	展示(或不展示)碳原子	不展示
Position Number	展示(或不展示)原子位置数字	不展示
Status Bar	展示(或不展示)状态区的分子式和分子量	不展示
Show variable attachment positions	展示(或不展示) 可变的原子附件位置	不展示
Toolbars - Standard	展示(或不展示)标准工具列	不展示

注：Dot Atoms和Position Number不能同时使用。选取其中一方会使另外一方无效。

注：可以用SciFinder 的主工具列的 Tool> Edit Preference Editor>Drawing标签改变默认设定。

■ 工具菜单 (Tool Menu)

可以从结构图标窗口的工具菜单 (Tool) 选择改变 SciFinder 的最初设定。可以选择三大项目：Valency Checking (化合价检查)，Fix Drawing Angles (固定键的角度)，和 Fix Drawing Length (固定键的长度)。也可以用 Edit Preference (编辑选择) 中的 Drawing 标签改变这些默认设定。

菜单标题	定义
Valency Checking	检查已绘制的结构中的化合价
Fix Drawing Angles	固定或改变键的角度，可以改变默认设定，只适用于分开绘制的角度
Fix Drawing Length	固定或改变键的长度，可以改变默认设定，只适用于绘制链或环
Check Overlaps	检查交迭的结点和键
Unlock All Positions	解锁所有已被锁定原子或环取代的结点
Lock All Positions	锁定所有结构图标的结点取代
Reverse Shortcut	倒转已选的快捷方式表示 (如：COOH \diamond HOOC)
Flip Horizontal	水平地翻转已选的结构图
Flip Vertical	垂直地翻转已选的结构图
Fuse Fragments	融合两个已选的结点或碎片
Edit Preferences...	开启 Preference Editor (编辑选择)
Database Settings...	开启 Preference Editor(编辑选择)的数据库(Database)设定

■ 模板菜单 (Template Menu)

当你从菜单中选取模板，便能够在结构图标窗口中轻易绘图。

菜单标题	定义
Monocarbocyclic...	由碳原子组成的单环结构
Bicarbocyclic...	由碳原子组成的双环结构
Polycarbocyclic...	由碳原子组成的多环结构
N-containing...	含有氮 (N)原子的结构
O-containing...	含有氧 (O)原子的结构
S-containing...	含有硫磺(S) 原子的结构
NOS-containing...	含有氮(N)、氧 (O) 和硫磺 (S) 成分的结构
Alkaloid...	生物碱
Amino Acid...	氨基酸结构
Carbohydrate...	碳水化合物结构
Nucleic Acid...	核酸结构
Steroid...	类固醇结构
Coordination...	配位化合物
Misc...	其它各种各样的结构
User Defined...	使用者界定的构造模板

若果要设立使用者设定的模板 (User Defined Template)，请将已绘制的结构保存于 User_Def 活页夹中。可以从 Preference Editor(编辑选择) 的 Drawing 选择已保存的活页夹。

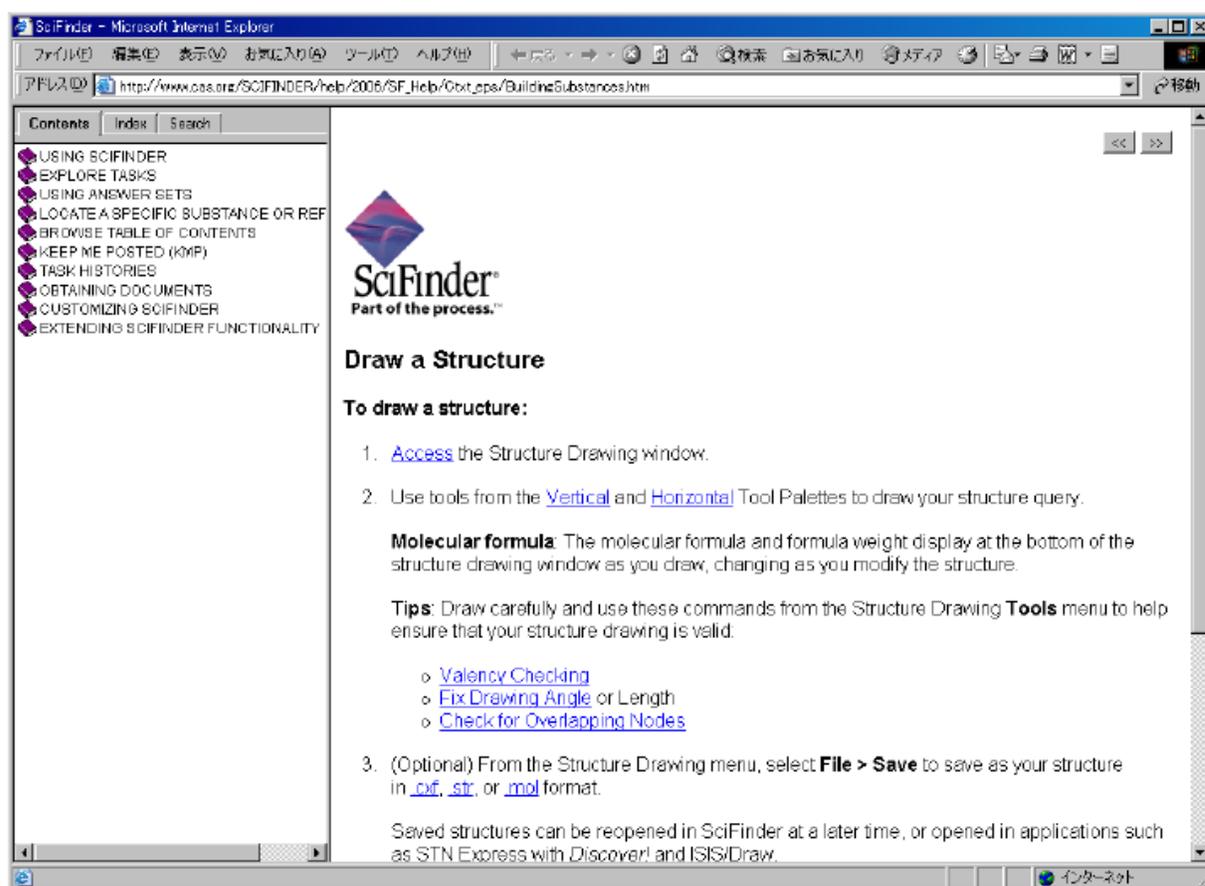
使用使用者设定的模板的方法与使用其它模板一样。从主工具列的 Template Menu 中选取 User Defined，并选出你想要绘制的模板，然后往结构图标窗口点击。

■ 说明 (Help)

此菜单显示怎样使用 SciFinder 和其它信息。

菜单标题	定义
SciFinder Help	开启 SciFinder 使用说明文件
Contents and Index	开启 SciFinder 使用说明内容和索引
Message of the Day	显示 CAS 的 "每日消息"
About SciFinder	显示版权和版本信息

使用说明的窗口



垂直的工具板 (Vertical Tool Palette)

■ 垂直的工具板提供绘制和修改化学结构的工具。

要使用工具，先点击图标。再将鼠标点击到结构图标窗口，图标内容便会自动显示。

铅笔工具			链工具
原子菜单工具			快捷方式菜单工具
X 菜单工具 ◎			R 基团设定工具 ◎
重复单元工具 ○			可变的取代位置工具 ○
环戊二烯环工具			环戊烷环工具
苯环工具			环己烷工具
模板工具			n 环工具
橡皮擦工具			套索工具
选择工具			旋转工具
正离子工具			负离子工具
锁定原子取代工具 ◎			锁定环取代工具 ◎
反应位置工具 ▲			转换反应角色工具 ▲
反应箭头工具 ▲			原子配对工具 ▲
官能团工具 ▲			

◎：只可用于亚结构检索或反应检索

○：只有亚结构检索账号才能使用

▲：只可用于反应检索

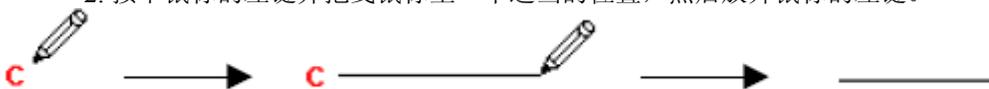
■ 铅笔工具 (Pencil Tool)



这是用来绘制结点和键。先选择出原子和键，点击铅笔工具图标，鼠标会变成铅笔形状，可以开始绘制。

绘制方法:

1. 将鼠标点击在你想开始绘制的位置。
2. 按下鼠标的左键并拖曳鼠标至一个适当的位置，然后放开鼠标的左键。



结点和键可以从水平的工具板、原子菜单、快捷方式菜单和 X 菜单工具中选取。也能将原子输入当前原子框(Atom Box) (这将在之后解释)。

更改现已绘制结点和键的步骤是非常简单。首先，选择新的结点或键，并且将鼠标移向你想要更改的结点或键，然后点击即成。

■ 链工具 (Chain Tool)



这是用于绘制键。当你点击链工具图标，鼠标会变成链形状。

要绘制链子，先将鼠标点击要想开始绘制的位置，然后按着鼠标的左键并拖曳鼠标至你想要的长度。当正在拖曳链子时，你能从鼠标旁的显示中，得知链子的原子数量。完成后，便放开鼠标的左键。此时，链子中所显示的原子数量将会消失。



注： 要改变链的方向，在绘制链子时请按 Shift 键。

■ 原子菜单工具 (Atom Menu Tool)



Atom	Short																		
H																			He
X Li	Be											B	C	N	O	F			Ne
[Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl			Ar
[K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br			Kr
[Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I			Xe
[Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At			Rn
[Fr	Ra	Ac																	
[Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
[Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

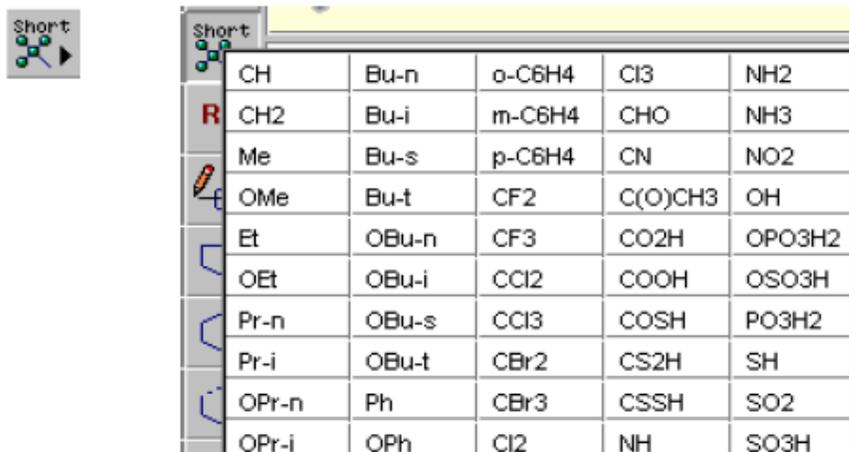
这是用来选择原子的工具。当點選一个原子后，SciFinder 便会将它设定为默认(default)，直到用户點選其它的原子、快捷方式 (shortcut)、R 基团 (R groups)、或官能团(Functional Group)。当你选取这个工具时，鼠标会自动的变成铅笔工具。

当你按下原子菜单图标，并持续按着鼠标的左键，化学元素周期表将会从原子菜单工具中出现。

要选择原子，先在周期表上拖曳鼠标到目标原子，然后放开鼠标的左键。被选取的原子将显示在水平的工具板的当前原子框 (Atom Box)里。

当你使用铅笔工具点击结构图标屏幕或现结点时，便会绘制出所选原子。

■ 快捷方式菜单工具 (Shortcut Menu Tool)



快捷方式菜单工具可令用户简单快捷地绘制结构。SciFinder 会将选取的快捷方式设定为默认 (default)，直到用户點選不同的原子 (atom)、快捷方式 (shortcut)、R 基团 (R groups)、或官能团 (Functional Group)。当你选择这个工具时，鼠标会自动地变成铅笔工具。

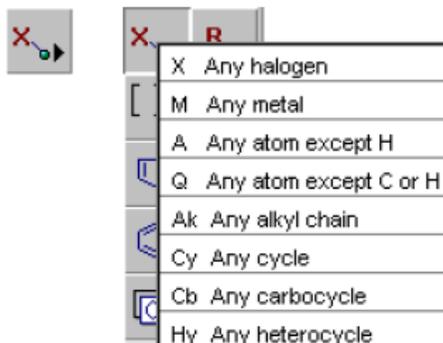
当你按下快捷方式菜单图标，并持续按着鼠标的左键，快捷方式菜单将会出现。

要选取快捷方式，先在快捷方式菜单上拖曳鼠标到目标快捷方式，然后放开鼠标的左键。被选取的快捷方式将显示在水平的工具板的当前原子框 (Atom Box) 里。

每当你使用铅笔工具点击结构图标屏幕或现有的结点，便会绘制出所选快捷方式。

绘制快捷方式后，你可以改变它的方向 (如：MeO \diamond OMe)。先點選在垂直工具板的选择工具 (Selection tool)，再點選屏幕上的快捷方式图标(将在以后解释)，然后从工具菜单中选取 Reverse Shortcut (反向快捷方式)，快捷方式方向便会倒过来。

■ X 菜单工具 (X Menu Tool)



用户可选取 X 菜单工具内的可变原子，绘制结构作亚结构或反应检索。SciFinder 会将选取的可变原子设定为默认 (default)，直到用户点选不同的原子 (atom)、快捷方式 (shortcut)、R 基团 (R groups)、或官能团 (Functional Group)。当你选择这个工具时，鼠标会自动地变成铅笔工具。

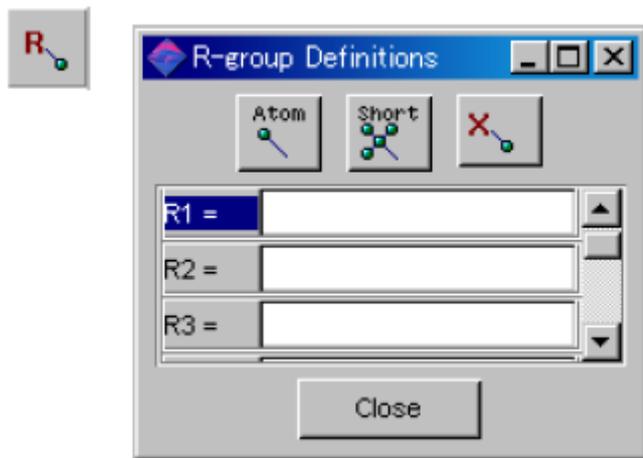
当你按下 X 菜单图标，并持续按着鼠标的左键，可变原子菜单将会显示。

要选择可变原子，先在菜单上拖曳鼠标到目标可变原子，然后放开鼠标的左键。被选取的可变原子将显示在水平的工具板的当前原子框 (Atom Box) 里。

每当你使用铅笔工具点击结构图标屏幕或现有的结点，便会绘制出可变原子。

在 SciFinder 的默认设定 (default) 中，Ak (碳锁链) 被正方格锁着，这表示 Ak 已被锁定，不能有取代。在这情况下，Ak 的检索只适用于直、分支、或不饱和的碳链。如想解除 Ak 的取代锁定，只需点击锁定原子取代工具 (Lock Out Substitution) 并移动鼠标选取 Ak，锁着 Ak 的正方格便会消失。这时，使用者可查询 Ak 在结构中可有不同的取代基。(锁定和解除取代作用的详情，请参阅 Lock Out Substitution 的部份)。

■ R 基团工具 (R Group Tool)



用户可选取 R 基团工具，并设定 R 基团，绘制结构作亚结构或反应检索。在同一 R 小组中，最少输入两个项目 (最多是 10 个)。

当你点击 R 基团工具 (R Group Tool), R-group Definitions Box (R 基团设定框) 便会出现。SciFinder 会将 R1 设定为默认 (default) 直到不同的原子、快捷方式 (shortcut)、R 基团 (R groups)、或官能团 (Functional Group) 被选择。

先点击在 R 基团设定对话框 (R-group Definitions dialog box) 中的原子 (atom)，快捷方式 (Short)，X 菜单 (X) 的图像，并选取要设定为 R 基团的项目。如选择多个项目，可用逗号将项目分开。

当你需设定其它 R 基团，移动鼠标至 R2、R3 等。最多可设定 10 个 R 基团。

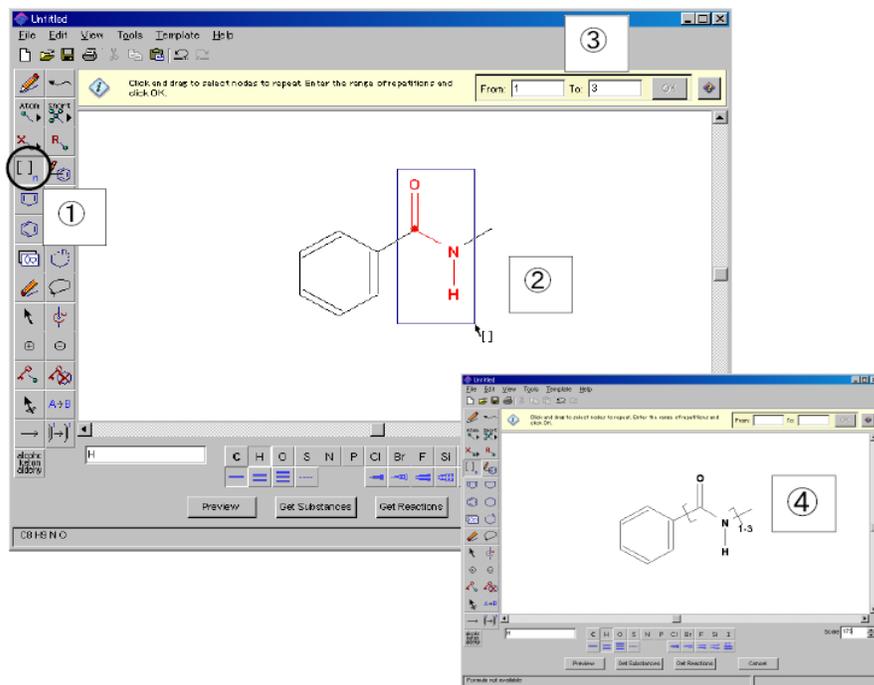
如要将 R 基团绘制到结构中，必须在 R 基团定义对话框内选取 R 基团，并且用铅笔工具将它加到结构中。

■ 重复单元工具 (Repeat Group Tool) (只适用于有亚结构检索的账号)



这工具是用来绘制重复的单元结构。

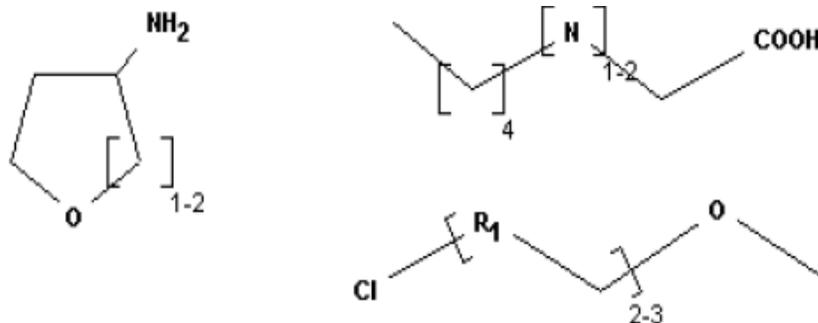
1. 在绘制基本的构造之后 (包括重复的部份)，点击重复单元工具图标(Repeat Group Tool)。
2. 拖曳鼠标并圈上重复的部份。选取的部份会显示为红色。
3. 在位于图标屏幕上方的 **From: To:** 框中输入需重复单元的数目，然后点击 OK。
4. 括号会在重复单元中出现，并在括号下显示重复单元的数目。



注： 重复单元工具的限制

- λ 重复单元的数目需在 0 至 20 之内
- λ 不适用于 Ak 单元
- λ 不适用于立体键
- λ (只用于反应检索) 在重复单元内，不能包括原子绘图 (atom mapping) 和反应位置 (reaction site) 的设置
- λ 作完全相同结构 (Exact Structure) 或亚结构 (Substructures) 检索时，需在 From: 和 To: 框中输入一样的数值，如 From: 2, To: 2)。

图例



■ 可变的取代位置工具 (Variable Attachment Position Tool) (只适用于有亚结构检索的账号)



这工具是用于定义取代基与环上多个点中的任何一个键。

1. 在绘制基本的构造和取代基之后，点击可变的取代位置工具图标 (Variable Attachment Position Tool)。
2. 点击及拖曳取代基至取代位置。取代基将和其位置将显示为红色。在取代基和取代位置之间会出现一条虚线。
3. 当放开鼠标左键，一条实线将出现在环中和取代基团之间。这指示出可变的取代位置。
4. 要指示多个取代位置，重复步骤 2 和 3。这做法要求至少 2 个取代位置被设定。

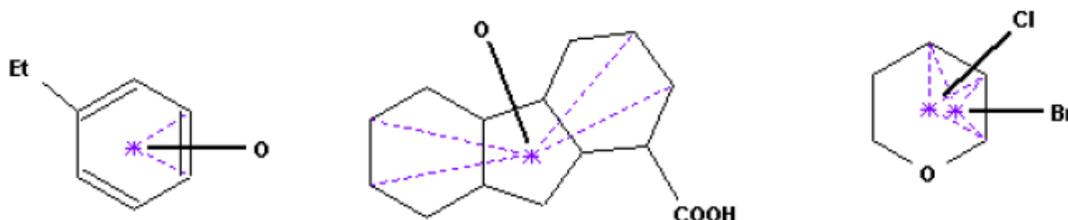
The figure consists of three screenshots of a chemical software interface, illustrating the steps to use the Variable Attachment Position Tool. Each screenshot shows a benzene ring with a methylamino group (-NHCH₃) and a hydroxyl group (-OH) attached to it.

- Screenshot 1:** The software toolbar is visible, and the Variable Attachment Position Tool icon (a red pencil and a blue hexagon) is circled with a white box labeled '1'.
- Screenshot 2:** The hydroxyl group is being dragged towards the benzene ring. A red dashed line connects the oxygen atom of the hydroxyl group to a carbon atom on the ring. A white box labeled '2' is placed near the dashed line.
- Screenshot 3:** The mouse button is released, and a solid black line now connects the oxygen atom of the hydroxyl group to the carbon atom on the benzene ring. A white box labeled '3' is placed near the solid line.
- Screenshot 4:** The process is repeated. A second solid black line is drawn between the oxygen atom of the hydroxyl group and a different carbon atom on the benzene ring. A white box labeled '4' is placed near the second solid line.

使用可变的取代位置工具所需注意事项:

- 取代基最多为 20 个。
- 只能选择环系统中的其中一个环或一个结点, 作为取代基的键点。如结点在链、连环或环系即无法被选择。
- 可绘制多个取代基, 然后个别地指定出它可变的取代位置。
- 可使用锁定取代工具(Lock Out Substitution) 锁定取代。
- 取代位置必须为非金属原子、X (卤素原子)、Q (除了碳和氢原子)和 A (除了氢原子)。
- 可锁定可变的取代位置(Lock Out Substitution)。
- 不能指定环和取代基之间的立体键 (但能指定单键、双键、三键、或未指明的键)。
- 在反应检索中, 可将环和取代基之间的键设定为反应位置。

图例



■ 环戊二烯环工具 (Cyclopentadien ring Tool)



这工具用以绘制环戊二烯环。

先点击图标, 并在结构图标窗口中移动鼠标及点击。

若要在现有的结点或键加上环结构, 只需将鼠标移动至该结点或键, 并点击一下即可。

按着鼠标的左键拖曳, 便能够转动环。当你放开鼠标键, 环的方向将被固定。

■ 环戊烷环工具 (Cyclopentane ring Tool)



这是用来绘制环戊烷环。使用说明与绘制环戊二烯环工具一样。

■ 苯环工具 (Benzene ring Tool)



这是用来绘制苯环。使用说明与绘制环戊二烯环工具一样。

■ 环己烷环工具 (Cyclohexane ring Tool)



这是用来绘制环己烷环。使用说明与绘制环戊烷环工具一样。

■ 模板工具 (Template Tool)



这是用来绘制从模板菜单(Template)中已选取的模板。在模板菜单中取模板之后，这功能才会有效。

在主工具列的模板菜单(Template)中选取任何结构模板，之后，模板表列将会显示出来。点击所需的结构，模板表列便会消失。

在结构图标窗口中点击，选择的结构模板便会加入。

不能将模板结构与现有的结点或键连接起来。

■ n 环工具 (n ring Tool)



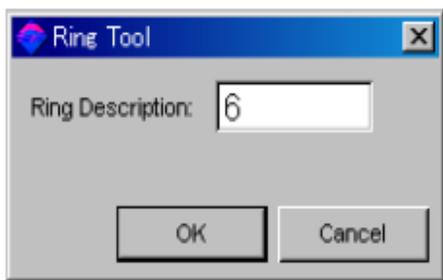
这是用来绘制一个由 3 至 15 个碳原子所组成的单环。只要点击图标，n 环工具对话框便出现。

单环的默认设定为 6。可输入 3 至 15 之间任何一个数字，并点击 OK。鼠标的形状将变成 n 环工具图标。

要绘制环，先将在鼠标移动至结构图标窗口及点击。

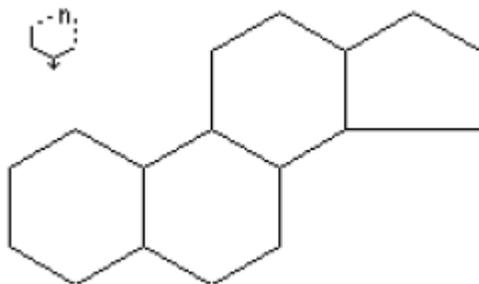
若要将环与现有的结点或键连起，只需将鼠标移动至该结点或键，并点击一下即可。

按着鼠标的左键拖曳，便能够转动环。当你放开鼠标键，环的方向将被固定。



使用 n 环工具，可容易地绘制一个由 4 -、5 -、6 - 环构成的环系。在对话框中加入 U (向上) 或 D (向下) 可以选择改变环系的方向。默认设定的方向是从左到右。

例如，绘制一个类固醇环系统，在对话框中输入“66U6D5”。在结构图标窗口上移动鼠标及点击，以下的结构便绘制出来。



■ 橡皮擦工具 (Eraser Tool)



这是用来删除在结构中的结点或键。当点击橡皮擦工具图标，鼠标会变成橡皮擦形状。

要删除结点，先将鼠标移动至结点及突出显示它们，再点击。然后，这结点与其连接的键将被删除。

要删除键，先将鼠标移动至键的中心位置。突出显示然后点击这键，便可以删除。

■ 套索工具 (Lasso Tool)



这是用来选择结构和结构碎片。能移动(Move)、剪下(Cut)、复制(Copy)、或删除(Delete)。并可从工具菜单 (Tools) 中选取 Reverse Shortcut (反向快捷方式)，快捷方式方向便会倒过来。

选择并点击套索工具图标，鼠标会变成套索形状。

在选择的结构附近按着鼠标的键，并拖曳鼠标包围着结构，将放开鼠标键。

要移动已选取的部份，在已选择的范围之内移动鼠标。此时，鼠标会变成手的形状。按着鼠标的键并拖曳结构至理想位置。

要删除已选取的部份，从编辑菜单(Edit Menu)中选取剪下(Cut)或清除(Clear)，或按<Delete>键。若选择剪下，被删除的结构会先被复制到剪贴板(Clipboard)上。要贴上已选取的结构，必先在编辑菜单中选取 Paste(粘贴)。

要选择结点，可在结点的末端作点击。所选取的结点将被突出显示成正方形。

■ 选择工具 (Selection Tool)



这是用来选择结点、键、碎片和整个结构。能移动(Move)、剪下(Cut)、复制(Copy)或删除(Delete)。并可从工具菜单中选取反向快捷方式 (Reverse Shortcut)，快捷方式方向便会倒过来。

要使用选择工具，首先点击选择工具图标，鼠标会变成箭头的形状。在结点或键上移动箭头，并点击突出显示已选取的项目。

如要选择多个结点和键，可按着 Shift 键并同时点击。每个点击项目将被突出显示。

若要快捷地选取多结点和键，先按着鼠标的左键，并拖曳至需选取的部分。当放开鼠标的键时，方形框中的所有项目将被选取。

想要选择整个结构，双击结构的任何部份。

若要移动被突出显示的部份结构，将箭头的尖端移向那部份。按下鼠标的左键并拖曳所选项目至适当位置，然后才放开鼠标的键。被突出显示的部份将被移动。

移动整个结构的方法与同上一样。突出显示整个结构，并在结构的任何部份上按下鼠标的左键并拖曳所选项目至适当位置，然后才放开鼠标的键。

从编辑菜单中选取剪下(Cut)，便可剪下所选取的项目。被剪下的项目会贴到剪贴板上。

从编辑菜单中选取复制(Copy)，便可复制所选取的项目。被选取的项目会贴到剪贴板上。

若要删除选择的项目，只要按<Delete>键便可。

想要倒转快捷方式(如： $\text{MeO} \diamond \text{OMe}$)，先突出显示快捷方式，并从工具菜单中 (Tools) 选取 Reverse shortcut。

要取消突出显示，在结构图标窗口中，点击已选取的项目以外的任何一个地方便可。

■ 旋转工具 (Rotation Tool)



以某特定的结点为中心点，顺时针或逆时针地转动结构。

要转动结构，首先点击旋转工具图标。鼠标会变成像图标的形状。选择转动的结点中心点上按下鼠标的键，并拖曳转动。

■ 正离子工具 (Positive Ion Tool)



正离子工具是用来放置正离子 (+) 在结点上。当选择图标，鼠标会变成像图标的形状。



想要在结点加上一个正离子，先点击正离子工具图标及点击结点。持续点击便可增加正离子的数量。

若要减少正离子的数量，请使用负离子工具。

■ 负离子工具 (Negative Ion Tool)



负离子工具是用来放置一个负离子 (-) 在结点上。当选择图标，鼠标会变成像图标的形状。



想要在结点加上一个负离子，先点击负离子工具图标及点击结点。持续点击便可增加负离子的数量。

若要减少负离子的数量，请使用正离子工具。

■ 锁定原子取代工具 (Lock Out Atoms Tool)



在结构检索或反应检索中，锁定原子取代工具能禁止原子取代。

想禁止原子取代，首先点击锁定原子取代工具图标。鼠标会变成像图标的形状。

用鼠标的尖端点击结点。该结点便会将被正方形包围。可锁定多个结点。

除 Ak 可用这工具外，不能用上述的方法以锁定其它快捷方式，如甲基(Me)。

■ 锁定环取代工具 (Lock Out Rings Tool)



在亚结构检索或反应检索中，此工具禁止环取代。同时可以禁止链变成为环的一部份。

要禁止环取代，首先点击锁定环工具图标。鼠标会变成像图标的形状。

使鼠标的尖端对准结点，点击并且突出显示它。便可锁定环取代。

■ 反应位置工具 (Reaction Site Tool)



在反应检索中，反应位置工具把反应位置的键进行标记。当点击图标，鼠标会变成像图标的形状。

先点击反应位置工具图标，点击并且突出显示反应位置的键。键会被画上垂直的双重线以作标记。

你可以在反应式中标出多个反应位置，这可缩小答案数量，作更准确的检索。

■ 反应角色工具 (Reaction Role Tool)



在反应检索中，反应角色工具用来设定反应物 / 试剂、产物、或任何一个在反应中的角色。

设定角色，先点击反应角色工具图标，并使鼠标对着结构，然后点击。当反应角色对话框出现，选择角色并且点击 OK。反应角色将会在结构之下显示。

想要转换指定角色，再点击反应角色工具图标，并使鼠标对着结构。在点击以后，反应角色对话框将会出现，然后选择不同的角色并点击 OK。新角色将会在结构之下显示。

用箭头工具，可以自动地设定角色为反应物 / 试剂、产物。

如果你不想设定任何角色，请选取任何一个角色 Any Role。

■ 箭头工具 (Arrow Tool)

RXN



箭头工具用于反应检索，和指定在结构图标窗口中的化学反应角色。

点击箭头工具图标来绘制反应箭头。鼠标变成对水平线的箭头。在适当的位置点击鼠标，并拖曳鼠标至反应的方向。

如果在结构图标窗口中已有一个结构，在加上箭头的位置后，反应角色会自动地被指定，现有的角色也将被重写。若要改变自动设定角色，请使用之前介绍的反应角色工具。

■ 原子配对工具 (Atom Mapping Tool)

RXN



在反应检索中，原子配对工具使用于指定反应物和产物的原子配对位置。反应物和产物的原子配对数将由 1 开始以作表明。

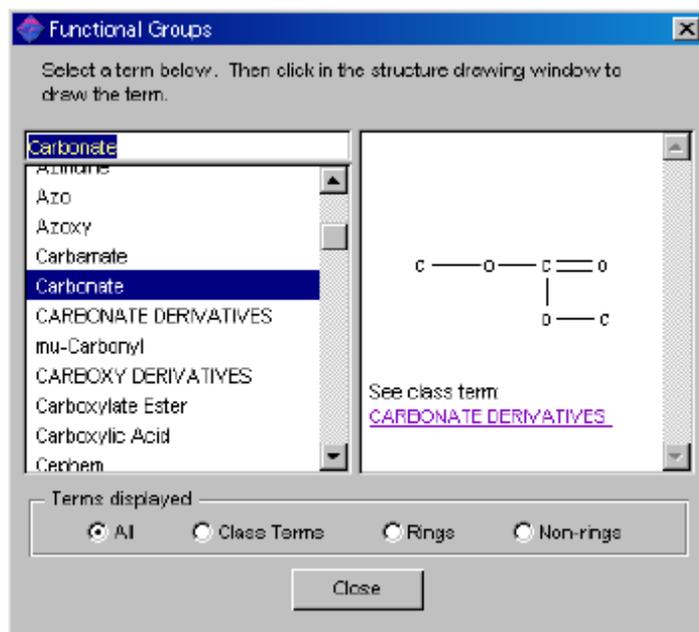
想要指定原子配对，首先绘制反应物和产物。然后，点击原子配对工具图标。当点击图标后，鼠标会变成像图标的形状。将鼠标尖端对着和点击反应物的结点，便能指定配对位置。相同的数字将会被标记在产物的结点上。

要改变或删除配对，先选择橡皮擦工具并点击标签。

你可以在反应式中标出多个原子配对，这可缩小答案数量，作更准确的检索。

■ 官能团工具 (Functional Group Tool)

alcohol
ketone
aldehyde



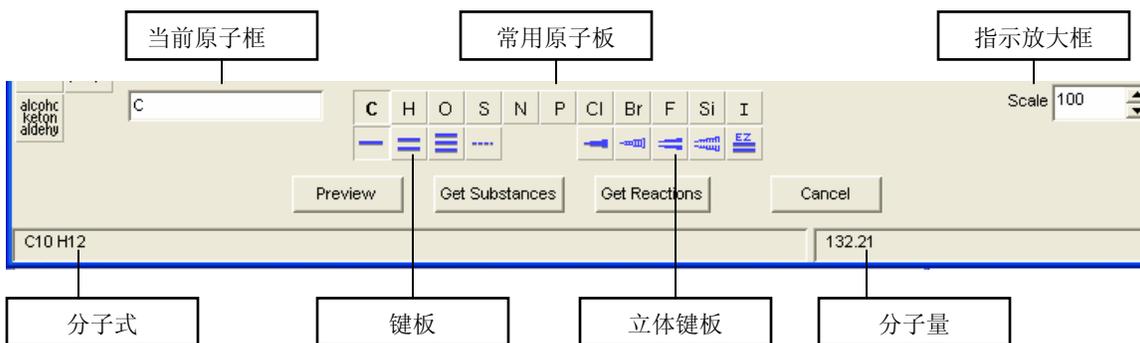
使用官能团工具，你能以官能团名字来绘制反应。当点击官能团工具图标时，官能团的对话框将会出现，然后选取你想要搜寻的官能团。当选取官能团时，它的结构将会出现在右边。

你能使用反应角色工具和箭头工具将角色设定到官能团。还有，你可选取没有作反应 **non-reacting** 作为角色。

你能以官能团和结构作检索组合。请参考第五章有关官能团反应检索。

水平的工具板 (Horizontal Tool Palette)

水平的工具板提供一般原子和键的结构图标。绘制结构的分子式，和分子量也显示在指示框内。



■ 当前原子框(Present Atom Box)

当前的原子框显示目前选择的原子、快捷方式、可变原子、R 基团或官能团。当在结构图标窗口上绘图，表示在当前原子框中的标志将会出现。C (碳) 为默认设定。

想要改变在结构图标窗口中的原子：

1. 使用原子菜单、快捷方式菜单、X 菜单工具或在当前原子框中输入原子。
2. 使用铅笔工具在你想改变的结点点击，之后，结点会改变为在当前原子框中的原子。

■ 常用原子板(Common Atom Palette)

常用原子板包括结构图标中时常被使用的原子。当点击原子图标，这原子将会变成默认，并显示在当前原子框中。

■ 键板 (Bonding Palette)

键的类型有：单键、双键、三键和任何键。默认设定为单键。

当在板中点击键图标，键会成为默认。选择任何键去搜寻所有可能的键类型。

在结构图标窗口中改变键类型：

1. 从键板中选取你想要的键。
2. 移动鼠标，点击突出显示键，键将会改变。

■ 立体键板 (Stereo Bond Palette)

这是用来指定键结构中的立体异构或不对称碳原子的构像。键的类型包括：向前的立体单键、向后的立体单键、向前的立体双键、向后的立体双键和“E、Z 几何双键”。

当点击板上的图标，键会设定为默认并被突出显示。使用 Get Substances 搜寻含有立体键的结构时，SciFinder 会自动分析立体结果 (Stereo Analysis)如下

The screenshot shows the SciFinder interface. The main window displays a chemical structure of a chiral molecule with a hydroxyl group and a carbonyl group. The 'Get Substances' button is highlighted. A 'Stereo Analysis' dialog box is open, showing a histogram of stereo analysis results. The dialog box contains the following text and data:

SciFinder 会自动分析立体结果

Select Histogram Entries of interest:

<input type="checkbox"/> Absolute stereo match	287
<input type="checkbox"/> Absolute stereo mirror image	30
<input type="checkbox"/> Relative stereo match	48
<input type="checkbox"/> Stereo that doesn't match query	47
<input type="checkbox"/> No stereo in answer structure	252

Buttons: Get Substances, Back

Bottom status: Histogram Entries 1-5 of 5

Text annotations on the left side of the dialog box:

- 相同立体结构
- 完全镜像的立体结构
- 部份立体结构相配
- 没有立体结构相配
- 没有立体结构

■ 指示放大框(Indicated Magnification Box)

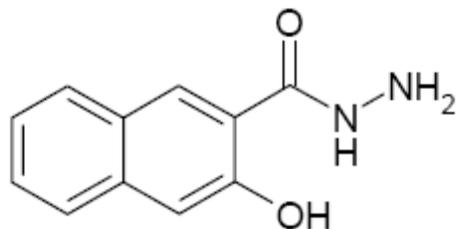
指示放大框能够把结构图标屏幕放大缩小。默认设定是100%。要改变指示的放大率，只要在指示放大框中的按下Enter，然后输入新的放大率。您可以改变指示的放大率从25%至400%之间。

■ 分子式 / 分子量 (Molecular Formula / Molecular Weight)

目前绘制的结构的分子式和分子量将被显示在水平的工具板的底部。

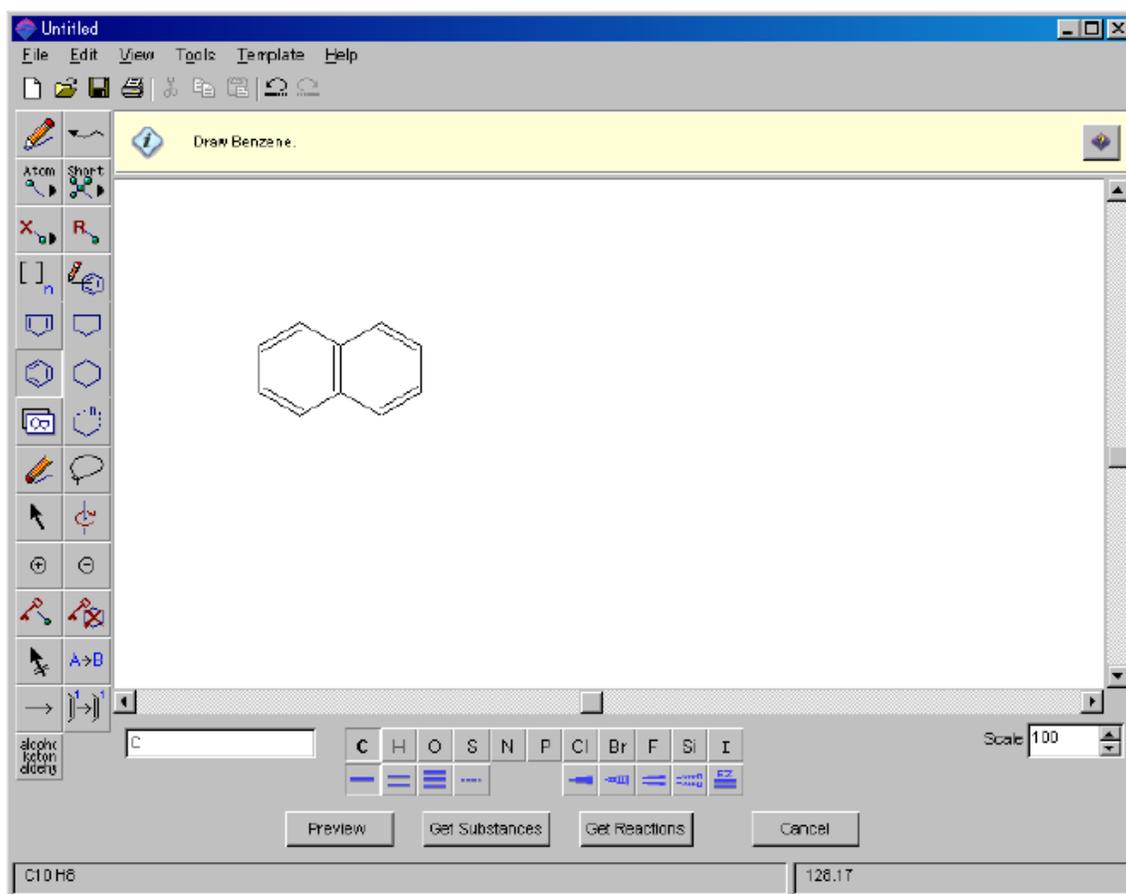
结构检索(The Structure Query Drawing)

■ 图例



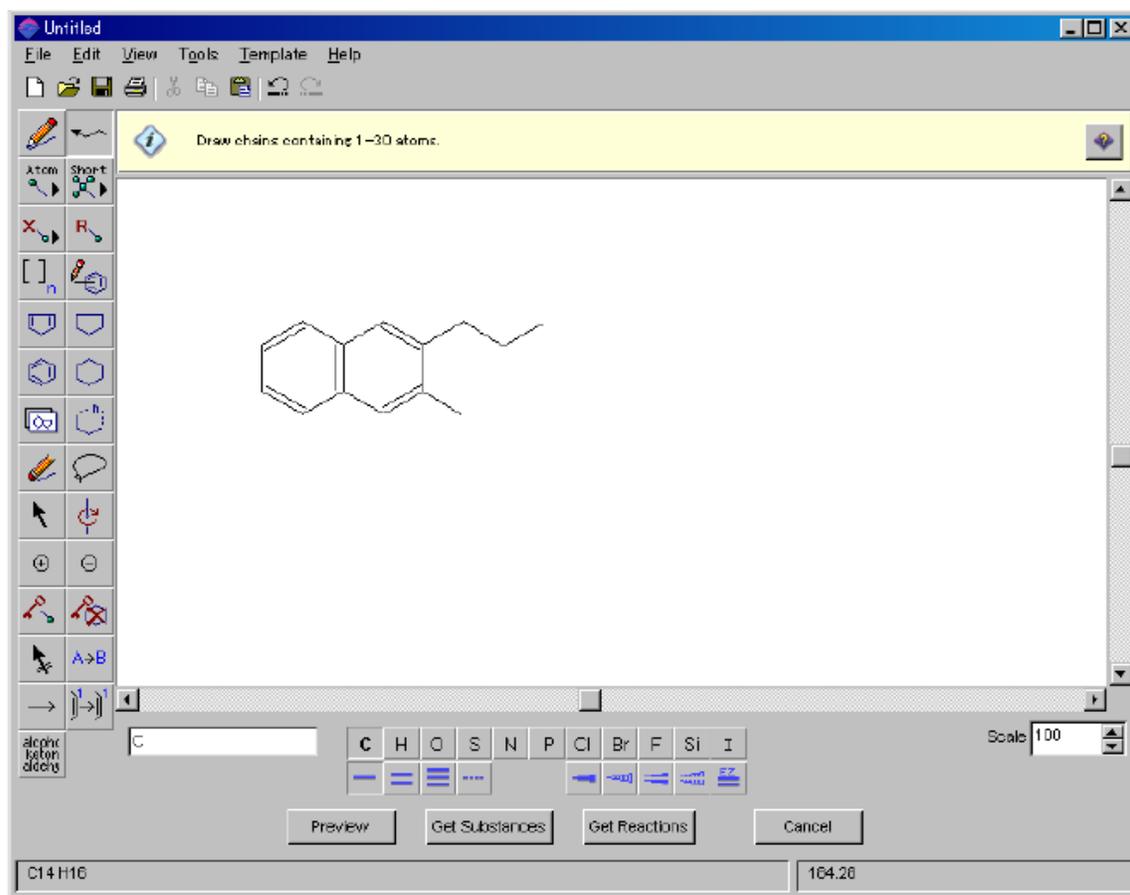
■ 步骤 1 — 使用苯环工具绘制环结构

- 从垂直工具板选取苯环工具图标。
- 在结构图标窗口中绘制苯。
- 若要绘制稠环，先将鼠标移至已绘制的苯环右边之垂直双键，并加以点击，将苯环连合。



■ 步骤 2 — 使用链工具

- 点击链工具图标。
- 拖曳鼠标的键至右边，直至链的长度达至 3 个碳原子。放开鼠标键后，碳原子将被单键所连接。
- 将链状鼠标放在右下边的结点上，并拖曳至右边直到链长度达至 1 个碳原子，然后放开鼠标键。



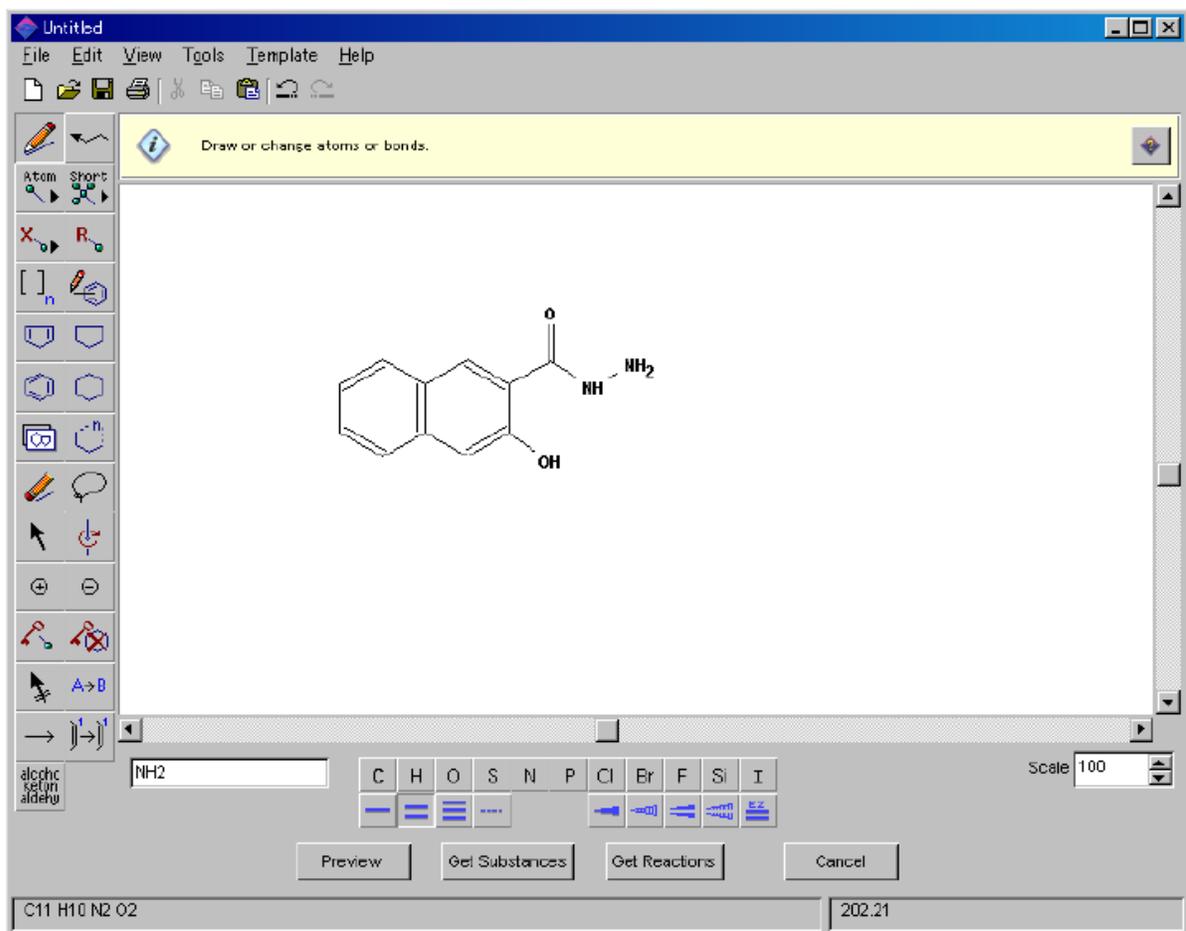
■ 步骤 3 — 绘制一个双键

- 在水平工具板点击双键图标。鼠标变成铅笔工具。
- 将铅笔状鼠标的尖端对着丙基基团中(苯环旁边)的结点。拖曳鼠标键直至链的长度达至 1 个碳原子。一个双键将被增加。

第二个方法是跟据上述再绘制多一个单键。单键将变成一个双键。

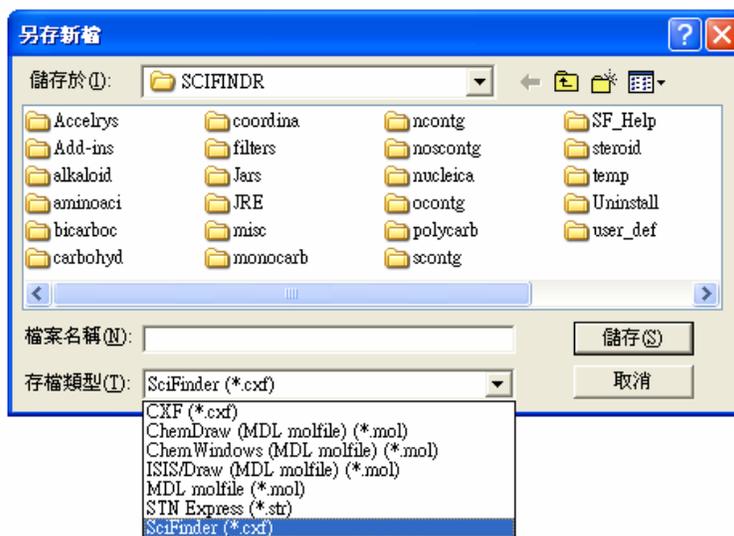
■ 步骤 4 — 绘制原子

- 在当前原子框输入符号“NH₂”以表明氨基。然后，氨基将成为新的默认设定。
- 把铅笔状鼠标的尖端放在丙基基团的末端并点击，原子将被NH₂取代。(若在垂直的工具板里点击快捷方式菜单工具，你也能选取NH₂。详情请参见快捷方式菜单工具。)
- 运用同样方法取代丙基基团结点为 NH， 和取代甲醇基团的末结点为 OH。



保存结构和再用结构 (Save and Reuse Structure)

你能保存由 SciFinder 所绘制的结构，并在 SciFinder 或其它应用系统中使用它。从绘制窗口中的文件菜单中选取 Save 或 Save As...时，对话框将会出现。从窗口下方的“存档类型”拉下菜单，选取文件格式。输入指定文献名称并点击保存。



当保存文献后，你可以在 SciFinder 或其它应用系统中开启并再用此结构文件。

检索多个结构碎片 (Search Multiple Fragments)

当检索多个结构碎片和元素时，只需在屏幕窗口一次绘制多个结构碎片。当点击 Get Substances，像下图所示的警告将会出现 (详情请参阅下个单元)。如果你希望继续搜寻，点击“Yes”。



第二章 完全相同化学结构检索 (Exact Chemical Structure Search)

当绘画好结构后，用户可用相同化学结构检索查询有关物质，并且分析其结构结果。使用这个检索可搜寻以下的物质。

与已绘画的化学结构相同：

- 构造异构体
- 互变异构(包括酮-烯醇互变异构)
- 配位化合物
- 离子化合物
- 原子基和离子基
- 含同位素的物质
- 单体组成之聚合物

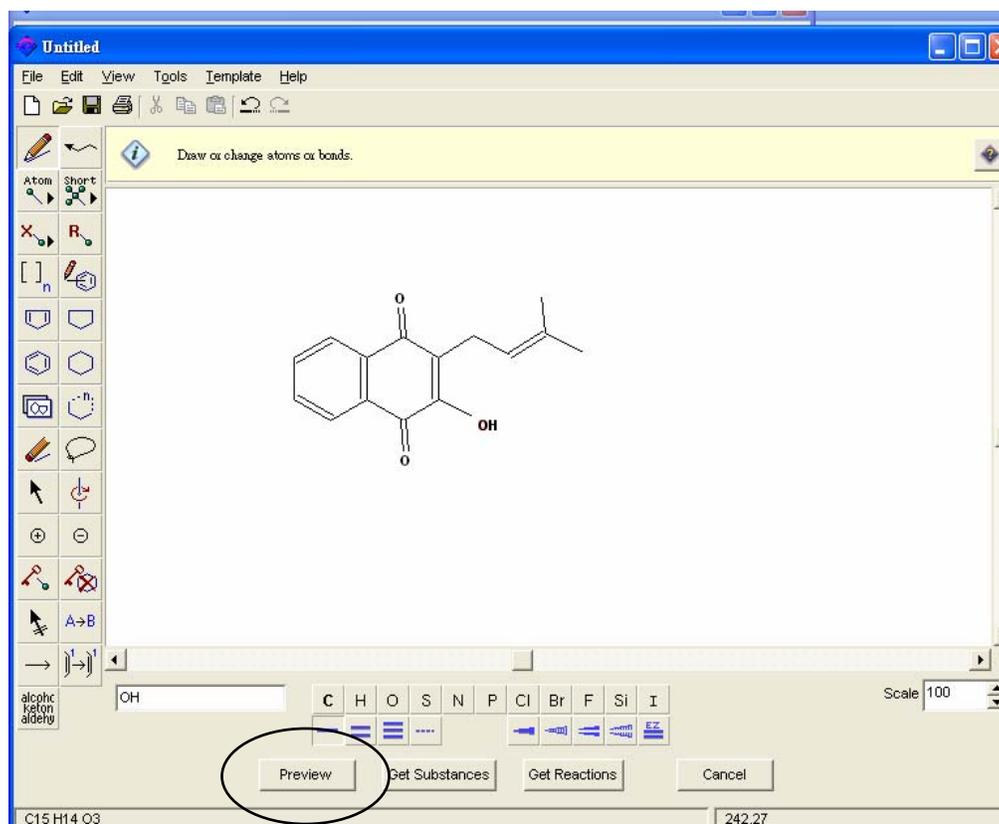
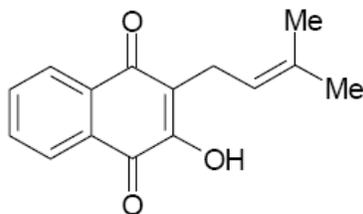
用户可从物质记录文件中，取得以下的数据。

- 物质基本数据 (如名称、结构、CAS 注册号)
- 物质的实验特性和计算特性
- 摘要、相关参考和书目数据
- 供货商目录数据
- 物质管制和注册数据
- 物质的反应资料

完全相同化学结构检索 (Exact Chemical Structure Search)

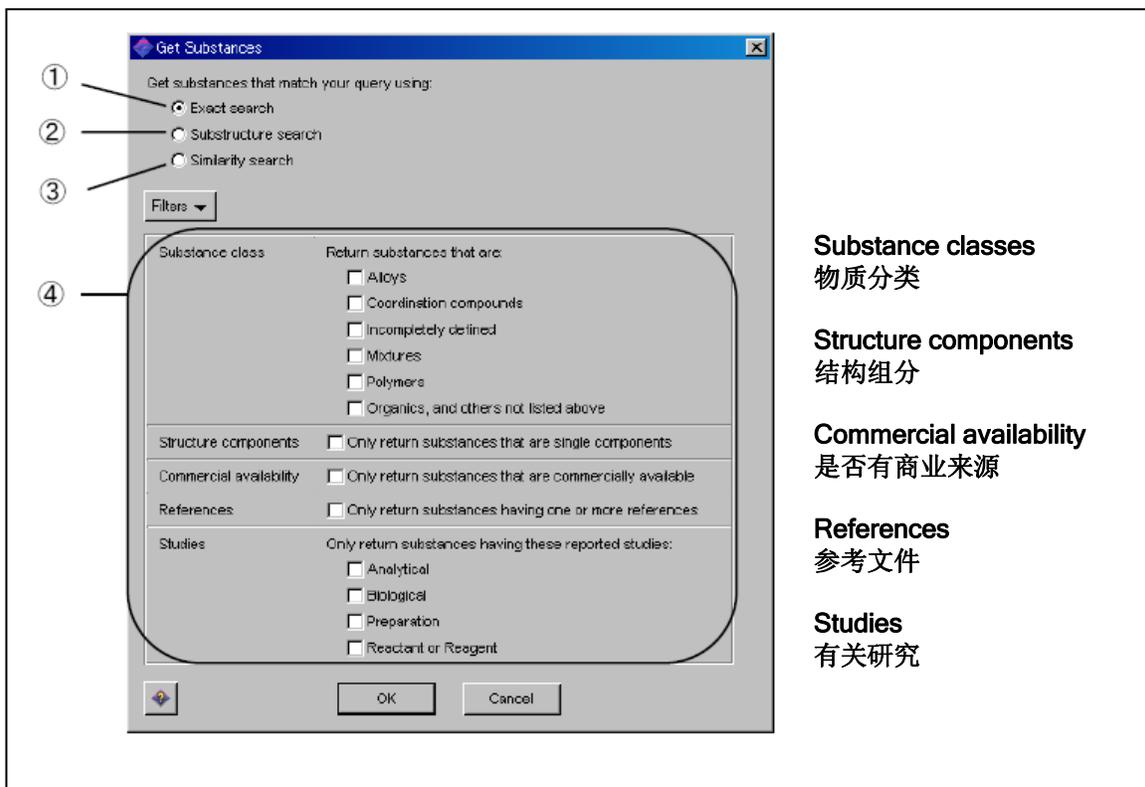
绘好化学结构后，便可以随时开始结构检索。你能使用 SciFinder 工具中的绘制功能或引用由其它应用程序所制备的结构文件。

■ 检索例子
检索结构如下



预览功能只限于有亚结构检索 SSM 账号

点击 Get Substances 开始检索。如果你的账号是有 SSM 亚结构检索，会看到以下的对话框出现。
(* 如果你的账号没有包括 SSM 亚结构检索，请参考结构检索过滤设定。)



选择以下其中一项。

- (1) 完全相同化学结构检索。
- (2) 亚结构检索 (参见第三章)。
- (3) 相似结构检索 (参考第四章)。

在此，选择 (1) 的 Exact Search。

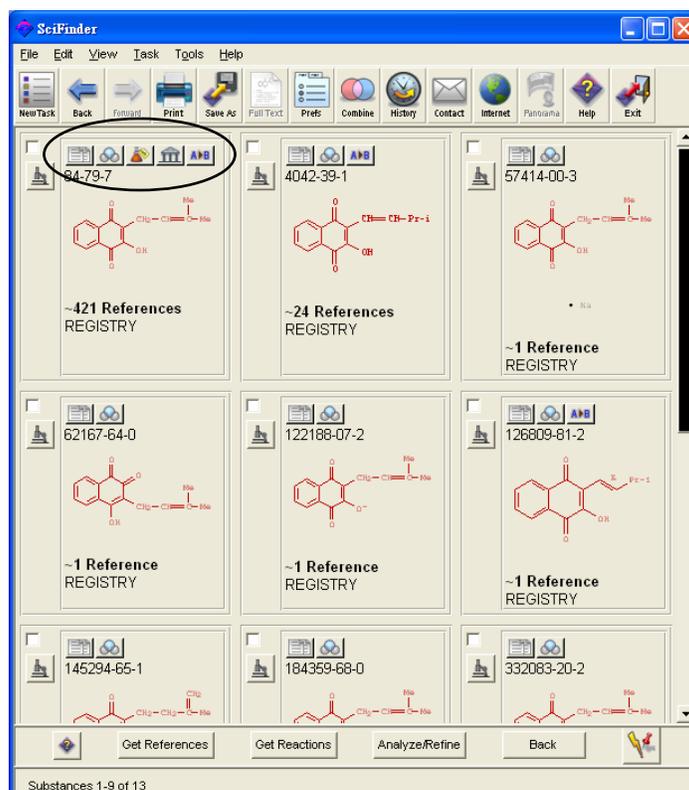
检索已绘制的结构，找出相同物质。得出的结果会包含以下各类型的化合物。

- 与已绘制的结构完全相同的物质
- 同位素化合物
- 配位化合物
- 单体组成的聚合物
- 离子化合物
- 原子基和离子基
- 异构体
- 互变异构体(包括酮-烯醇)

若要缩小检索范围至特定类型，可改变 (4) 的 Filters 过滤选项设定。点击 OK 继续检索。

SciFinder 的检索所得出的结果，是以智能检索 Smartsearch 为基础，一个由 CAS 建立的检索方法，并且通常将”完全相同化学结构检索”的结果数目扩至最大，令用户得到最全面的检索结果，减少遗漏。例如，酮-烯醇互变异构、同位素、和单体组成的聚合物也被包括在检索结果中。用户可按着个人的研究方向和兴趣改变过滤选项 Filters 的设定，便可缩小结果范围至理想结果。有关智能检索 Smartsearch 的详细资料，请参考附录 A。

点击在窗口的右下方的停止 Stop 键以取消检索。结果将在 SciFinder 的窗口上显示出来。



在检索亚结构的结果中，亚结构的部分会被突出显示成红色，让用户很容易地便能辨认出亚结构部分。要改变结果的显示格式，选择主工具列的 Option (简单 Compact, 标准 Standard, 摘要 Summary, 全部 Full) 或用在菜单中 Preference Editor 的 Display 键改变默认设定。

当点击物质记录左上方的显微镜图像 ，你可以看到物质的详细数据。

还有，当点击物质纪录上方任何一个图像标，便会显示相关数据。



显示与物质相关的参考文献 (也可以使用 Get References 键取得文献)。



显示物质的立体结构模型。



显示物质的供货商数据。

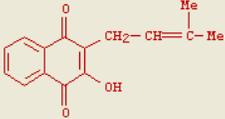


显示物质管制和注册数据。



显示物质的反应数据 (也可以使用 Get Reactions 键)(只限于有亚结构 SSM 的账号)。

先点击物质记录右边的显微镜图像。然后，物质的详细数据 Detail of Substance 的窗口将会出现。物质记录通常包括了 CAS 注册号、化学结构、分子式、名称、物质物性、和相关数据。

CAS 注册号	Registry Number: 84-79-7
化学结构	
分子式	Formula: C15 H14 O3
名称	CA Index Name: 1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)- (9CI) Other Names: 1,4-Naphthoquinone, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)- (7CI,8CI); Lapachol (6CI); 2-Hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-1,4-naphthalenedione; 2-Hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-1,4-naphthoquinone; Bethabarra Wood; C.I. 75490; C.I. Natural Yellow 16; Greenhartin; Ipe-tobacco Wood; Lapachol Wood; NSC 11905; NSC 629756; Surinam Greenheart Wood; Taigu Wood; Taiguic acid; Tecomin
实验特性 计算特性	Experimental Properties Predicted Properties
相关资料	-- Resources -- References: ~421 STN Files: CAPLUS, AGRICOLA, ANABSTR, BEILSTEIN, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CAOLD, CASREACT, CHEMCATS, CHEMINFORMRX, CHEMLIST, CSCEM, DDFU, DRUGU, EMBASE, IPA, MEDLINE, MRCK, NAPRALERT, RTECS, SPECINFO, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL <small>(Additional Information is available through STN International. Contact your information specialist, a local CAS representative, or the CAS Help Desk</small>

物质的详细资料会以默认设定的格式排列显示。可以用 Preference Editor 的 Display 键改变设定。

当点击 Experimental Properties 和 Calculated Properties，其实验特性和计算特性将被显示在新的窗口上。

使用文件的 Print... 打印出所显示的记录，或可以用 Save As... 保存文件。

要返回到 SciFinder 的窗口，点击 Close。

实验特性 (Experimental Properties)

点击 Experimental Properties, 便会显示其物质的实验特性。在这里可以看到 CAS 的注册号、化学结构、分子式、名称、物性和相关数据。由 2005 年 11 月起, 用户可以看到大约 27 万条的实验特性数值。另外, 用户可在参考文献的原文中, 找到大约 180 种特性数据 (如以光谱、计算图、图表、数值等来显示), 500 万条多参考文献数值。从前因这些数值是在原文内, 用户很难检索得到, 但现在只需检索在 SciFinder 的物质记录, 便能很快地找到其实验特性数值 (详情请参考附录 B)。

Experimental Property Values

Registry Number: 84-79-7

Formula: C₁₅H₁₄O₃

CA Index Name: 1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)- (9CI)

Property	Value	Condition	Note
Carbon-13 NMR Spectrum	See spectrum	(1) WSS	
Carbon-13 NMR Spectrum	See spectrum	(2) WSS	
Carbon-13 NMR Spectrum	See spectrum	(2) WSS	
Carbon-13 NMR Spectrum	See spectrum	(3) WSS	
Carbon-13 NMR Spectrum	See full text	(4) CAS	
IR Absorption Spectrum	See full text	(4) CAS	
IR Absorption Spectrum	See full text	(5) IC	
IR Spectrum	See full text	(6) CAS	
Mass Spectrum	See spectrum	(2) WSS	
Mass Spectrum	See full text	(4) CAS	
Median Lethal Dose (LD50)	1600 mg/kg	Organism: rat Route: intraperitoneal	(7) CAS
Median Lethal Dose (LD50)	185 mg/kg	Organism: mouse	(8) CAS

Detail for Reference 142-313051

Bibliographic Information

Selective Growth-Inhibiting Effects of Compounds Identified in *Tabebuia impetiginosa* Inner Bark on Human Intestinal Bacteria. Park, Byoung-Seo; Kim, Jun-Ran; Lee, Sang-Eun; Kim, Kyoung-Soon; Takeloka, Gary R.; Ahn, Young-Ioon; Kim, Jeong-Han. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* (2005), 53(4), 1152-1157. Publisher: American Chemical Society, CODEN JAFCAU ISSN: 0021-8995. Journal written in English. CAN 142-313051 AN 142-313051 CAPLUS

Abstract

The growth-inhibiting activity of anthraquinone-2-carboxylic acid and lapachol identified in the inner bark of *Tabebuia impetiginosa*, toward 10 human intestinal bacteria was evaluated by using a paper disk diffusion bioassay and compared to those of seven lapachol congeners (1,4-naphthoquinone, naphthazarin, menadiolone, lawsone, plumbagin, juglone, and dichlone) as well as two com. available antibiotics, chloramphenicol and tetracycline. Anthraquinone-2-carboxylic acid exhibited very strong growth inhibition of *Clostridium paraputrificum* at 1 µg/disk while 100 µg/disk of lapachol was needed for moderate growth inhibition of the same organism. These two isolates exhibited weak inhibition of *Clostridium perfringens* and *Escherichia coli* at 100 µg/disk while no adverse effects were obsd. on the growth of *Bifidobacterium adolescentis*, *Bifidobacterium bifidum*, *Bifidobacterium infantis*, *Lactobacillus acidophilus*, and *Lactobacillus casei* at 1000 µg/disk. Structure-activity relationships indicate that a Me group in the C-2 position of 1,4-naphthoquinone derivs. might play an important role in antibacterial activity.

Indexing - Section 10-5 (Microbial, Algal, and Fungal Biochemistry)
Section cross-reference(s): 11

Structure-activity relationship
(bactericidal), selective growth-inhibiting effects of compds. identified in *Tabebuia impetiginosa*

计算特性 (Predicated Properties)

点击 Predicated Properties, 便会显示由 Advanced Chemistry Development Inc. 所建立的 ACD/Labs 软件计算出的物性数据。计算特性的窗口如图显示。计算特性只适用于不含金属原子的单一物质(聚合物除了)。

请到以下的网站, 参考更多 ACD/Labs 的详细资料
<http://www.acdlabs.com>

Predicted Property Values

Registry Number: 84-79-7

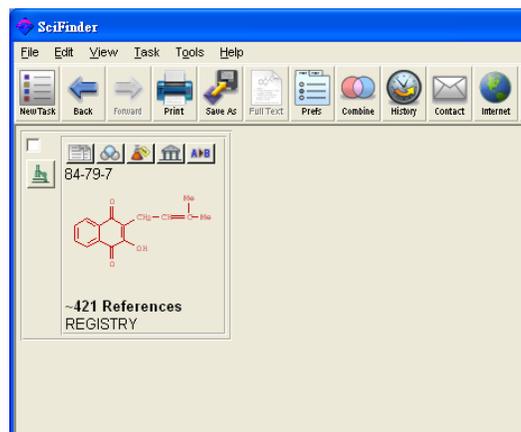
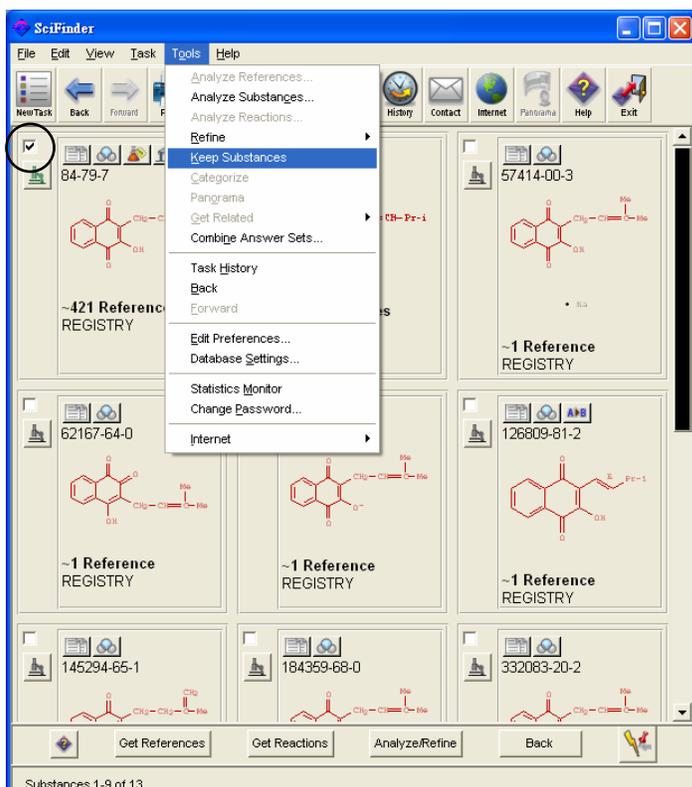
Formula: C₁₅H₁₄O₃

CA Index Name: 1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)- (9CI)

Property	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	730	pH 1	(11)
Bioconcentration Factor	738	pH 2	(11)
Bioconcentration Factor	731	Temp: 25 度	(11)
Bioconcentration Factor	672	pH 4	(11)
Bioconcentration Factor	372	Temp: 25 度	(11)
Bioconcentration Factor	68.3	pH 6	(11)
Bioconcentration Factor	7.66	Temp: 25 度	(11)
Bioconcentration Factor	1.0	pH 8	(11)

保留物质 (Keep Substances)

用户可使用 **Keep Substances** 选项，选择留下有兴趣之物质，作进一步的查阅或检索。点击位于在显微镜上方的选框。然后，从主工具菜单中选择 **Keep Substances**，保留的物质便会在窗口中。

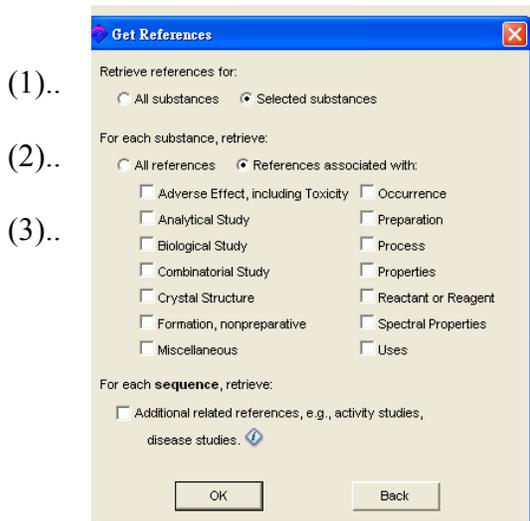


分类和细化结果 (Analysis / Refine)

当检索结果出现后，用户可用 SciFinder 的后处理功能去分析和细化结果。分析结果让用户了解检索结果的结构，而分析其环构造、原子取代和键等，有助找出理想结构。细化功能让用户有效地缩小结果范围，可限定其结构、同位素、文件类等数据 (请参考第 3 章)。

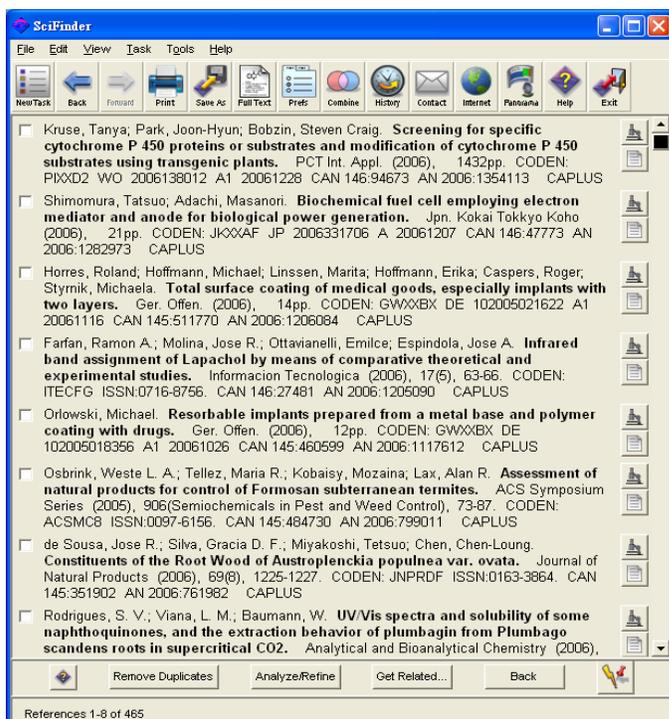
物质的相关文献 (Reference Information related to Substances)

选择了一个或多个的物质后，点击在窗口下方的 Get References 键，取得相关文献。另外，点击物质记录上方的图像  Get References 对话框便会出现，用户可选取所有文献，或只是限定某一类研究课题。



<input type="checkbox"/>	Adverse Effect, including Toxicity	副作用, 包括毒性
<input type="checkbox"/>	Analytical Study	分析研究
<input type="checkbox"/>	Biological Study	生物研究
<input type="checkbox"/>	Combinatorial Study	复合研究
<input type="checkbox"/>	Crystal Structure	晶体结构
<input type="checkbox"/>	Formation, nonpreparative	形成
<input type="checkbox"/>	Miscellaneous	其它
<input type="checkbox"/>	Occurrence	发生
<input type="checkbox"/>	Preparation	制备
<input type="checkbox"/>	Process	过程
<input type="checkbox"/>	Reactant or Reagent	反应物或试剂
<input type="checkbox"/>	Spectral Properties	光谱
<input type="checkbox"/>	Uses	应用

在 ，选择取得所有物质 All substances 的文献资料或只选取已选物质 Selected substances 的文献资料。在 ，当点击 References associated with: 键，指定文献数据的课题范围（如：制备 Preparation）。最后，点击 OK。



所选的物质文献资料会在 SciFinder 的窗口上显示。

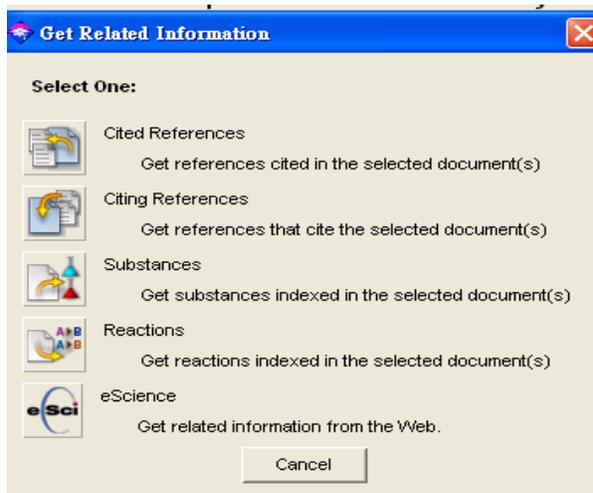
可以使用 Preference Editor 中的 Display 键改变字体和排列显示。

你可以使用文件中的 Save As... 或 Save As Answer Set... 去保存结果，并且选择 Print... 以不同的格式打印。

检索更多相关数据 (Get Related...)

用户可以检索更多相关数据。先点击结果页中的 Get Related...。然后，Get Related Information 对话框便会出现，便可以开始检索以下的数据。

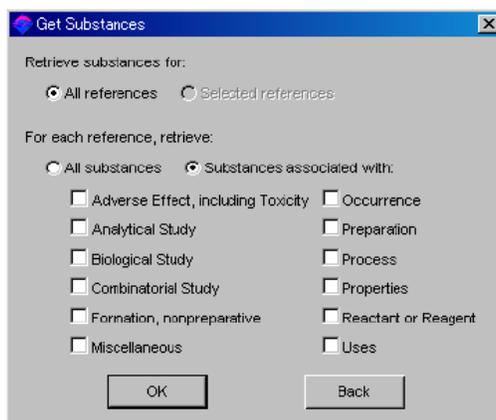
- 引用文件
- 被引用文件
- 文件收录之物质
- 文件收录之反应
- 网络上的数据



SciFinder 只能显示最多500条的引用和被引用的文献，1000个有关的物质和反应式。如果数目太多，会出现以下的窗口讯息。请按OK，先回到结果页减少结果数目。然后，再尝试点击Get Related...。



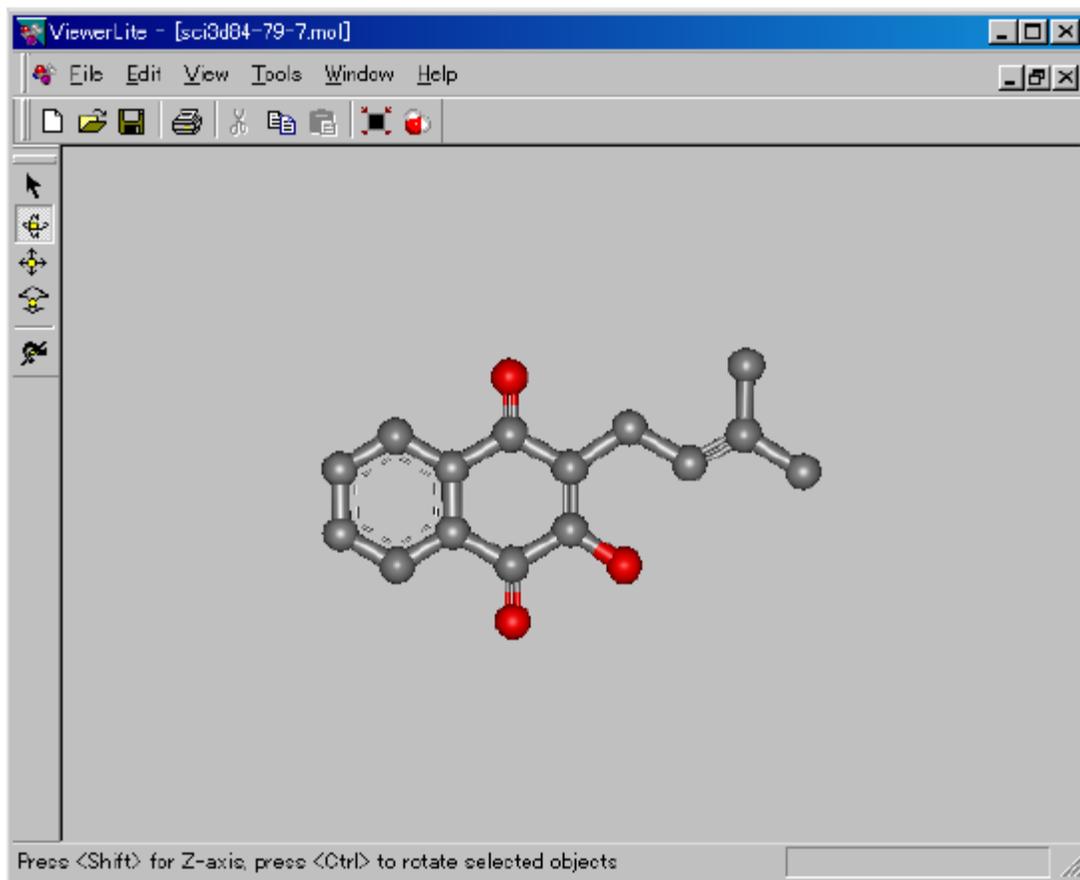
要限制物质现有的参考数据，在Get Substances对话框中，点击Substances associated with: 键，然后选择研究课题。最后，点击OK。



物质立体结构模型(3D Structure Model of Substances)

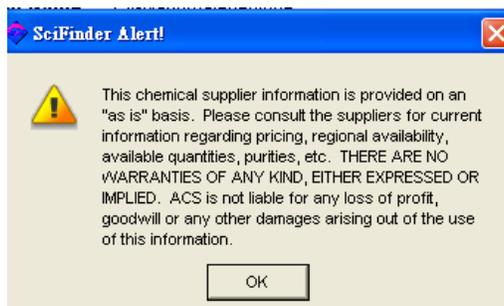
要显示立体结构，必先安装Discovery Studio Viewer Pro或Viewer Lite (只适合Windows使用)。

在安装完毕后，立体结构的图标会在物质记录中出现。 点击，便可以看见物质的立体结构。



物质供应目录数据(Catalog Information of Substances)

点击物质记录的烧瓶图像, 便能看到物质供货商和价格数据。以下的警告讯息会出现, 但不需要理会它, 点击OK便可。然后, 一系列的供货商目录会显示。



在记录中, 可以找出世界各地供货商所提供的化学物质供应数据, 例如目录名称、目录日期、化学品种名称、商品名称、和CAS的注册号等。

除此之外, 点击记录旁的显微镜图像, 便显示价格、结构、供货商名称、地址、联系信息和网址。资料会因应不同供货商而有所不同。

Sources for 84-79-7

- Catalog Name:** ChromaDex Product List
Quantity: 10mg
Publication Date: 22 Aug 2006
Order Number: ASB-00012065
Chemical Name: LAPACHOL
Registry Number: 84-79-7
CHEMCATS
- Catalog Name:** Aurora Screening Library
Quantity: milligram quantities
Publication Date: 10 May 2006
Order Number: kbsa-0145993
Chemical Name: 1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-
Registry Number: 84-79-7
CHEMCATS
- Catalog Name:** ALDRICH
Quantity: 250 MG
Publication Date: 15 Sep 2006
Order Number: 142905
Chemical Name: Lapachol
Registry Number: 84-79-7
CHEMCATS
- Catalog Name:** TimTec Overseas Stock
Quantity: milligram quantities
Publication Date: 1 Aug 2005
Order Number: OVS2484920
Chemical Name: 1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-
Registry Number: 84-79-7
CHEMCATS
- Catalog Name:** Extrasynthese Product List
Quantity: 10 mg
Publication Date: 28 Nov 2006

Export to Microsoft Excel Close

Sources 1-5 of

汇出至电子表格

Detail of Source 1

Catalog Name: ChromaDex Product List
 Publication Date: 22 Aug 2006
 Order Number: ASB-00012065
 Chemical Name: LAPACHOL
 Registry Number: 84-79-7

O=C1C=CC(=O)C=C1C=C(C)C

Pricing: Quantity: 10mg, Price: \$79.5

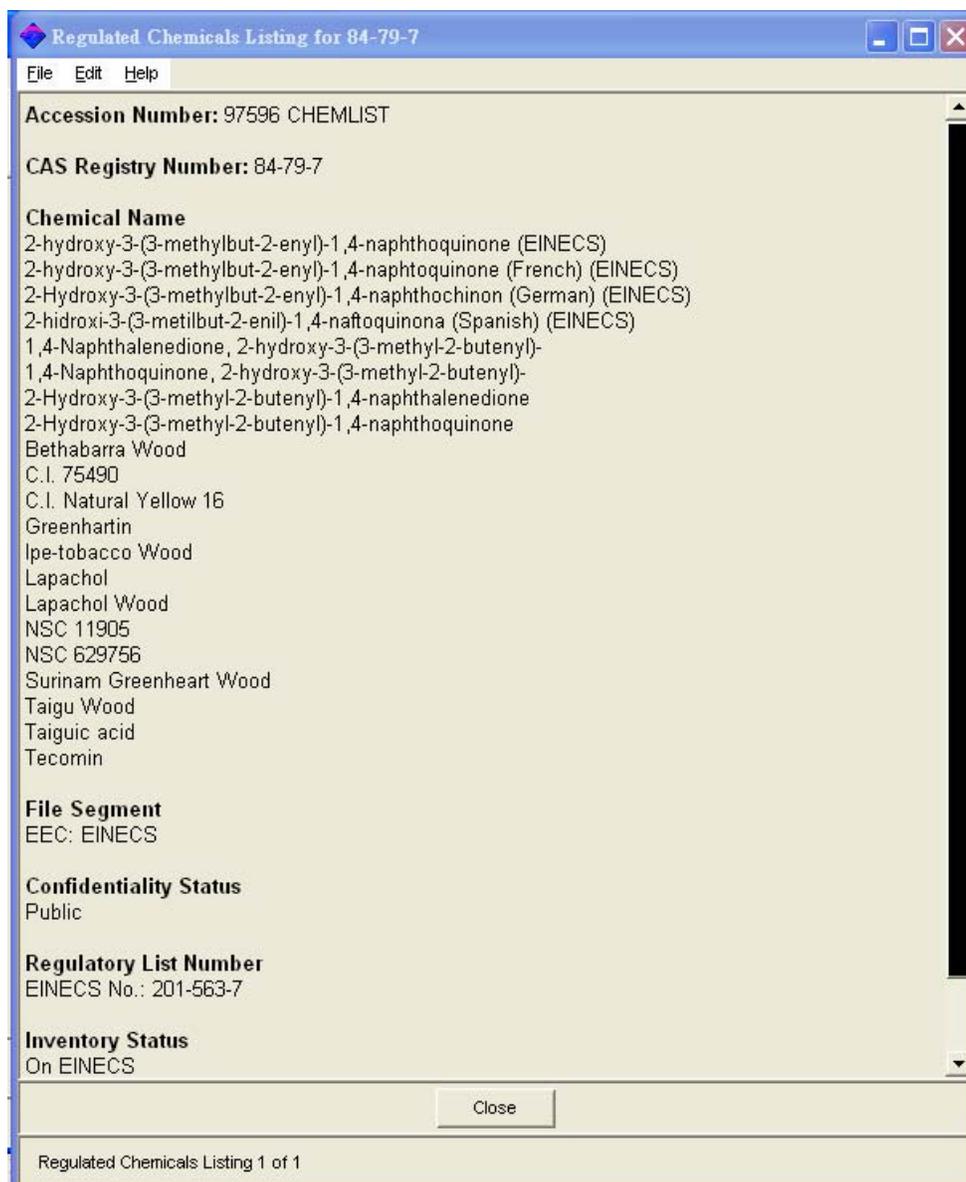
Company Info: ChromaDex, Inc.
 2952 S. Daimler St.
 Santa Ana, CA, 92705
 USA
 Phone: 949-419-0288
 Fax: 949-419-0294
 Email: sales@chromadex.com
 Web: http://www.chromadex.com

Database: CHEMCATS

Chemical Name	Catalog Name	Company Name	Street Address	City	State or Province	Country	Zip or Postal Code	Additional Company Info
LAPACHOL	Apsis Chemicals	Apsis Chemicals, Ltd.	604 Mills Park	Alpharetta	GA	USA	30004-4957	Phone: 404-633-1232 Fax: 404-633-1233 Email: info@apsischemicals.com
1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-	Aurora Screening Library	Aurora Screening Library	10000 Aurora	Scottsdale	AZ	USA	85260	Phone: 480-343-4777 Fax: 480-343-4778 Email: aurora@aurora.com
LAPACHOL	ChromaDex Product List	ChromaDex, Inc.	2952 S. Daimler St.	Santa Ana	CA	USA	92705	Phone: 949-419-0288 Fax: 949-419-0294 Email: sales@chromadex.com
Lapachol	Extrasynthese Product List	Extrasynthese S.A.	22 Lema Road - Import Regional Bldg.	Clearwater	FL	USA	34606	Phone: +1 (813) 781-3623 Fax: +1 (813) 781-3145 Email: info@extrasynthese.com
LAPACHOL	Isidore Product List	Isidore Chemical Company, Inc.	111 South Lane, Bldg. X1, Suite 1	Highwong	MO	USA	65844	Phone: 660-359-6779 Fax: 660-359-6778 Email: info@isidore.com
1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-	Extrasynthese Chemical Library	Extrasynthese S.A.	P.O. Box 233	Monroe	LA	USA	71209	Phone: 504-330-8377 Fax: 504-330-8378 Email: sales@extrasynthese.com
LAPACHOL	Micro-Course Product List	Micro-Course Chemicals, Inc.	10 Orange Walkway Plaza	Daytonville	GA	USA	30535	Phone: 704-885-2000 Fax: 704-885-2001 Email: microcourse@microcourse.com
LAPACHOL	MTI Researchable Product List	MTI Researchable, Inc.	311 Magna	Irwin	CA	USA	94619-2005	Phone: 1 (800) 433-1332 Fax: 1 (800) 433-1333 Email: info@mtiresearchable.com

物质管制和注册数据 (Regulatory Information of Substances)

点击物质记录的  图像，用户可以参考不同国家的物质管制和注册数据，如日本、美国、欧盟各国、加拿大、韩国、澳洲、瑞士、菲律宾、以色列之法规资料。但是，这些数据只限于那些有CAS注册号之化学物质。



Regulated Chemicals Listing for 84-79-7

File Edit Help

Accession Number: 97596 CHEMLIST

CAS Registry Number: 84-79-7

Chemical Name

- 2-hydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)-1,4-naphthoquinone (EINECS)
- 2-hydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)-1,4-naphthoquinone (French) (EINECS)
- 2-Hydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)-1,4-naphthochinon (German) (EINECS)
- 2-hidroxi-3-(3-metilbut-2-enil)-1,4-naftoquinona (Spanish) (EINECS)
- 1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-
- 1,4-Naphthoquinone, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-
- 2-Hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-1,4-naphthalenedione
- 2-Hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-1,4-naphthoquinone
- Bethabarra Wood
- C.I. 75490
- C.I. Natural Yellow 16
- Greenhartin
- Ipe-tobacco Wood
- Lapachol
- Lapachol Wood
- NSC 11905
- NSC 629756
- Surinam Greenheart Wood
- Taigu Wood
- Taiguic acid
- Tecomin

File Segment
EEC: EINECS

Confidentiality Status
Public

Regulatory List Number
EINECS No.: 201-563-7

Inventory Status
On EINECS

Close

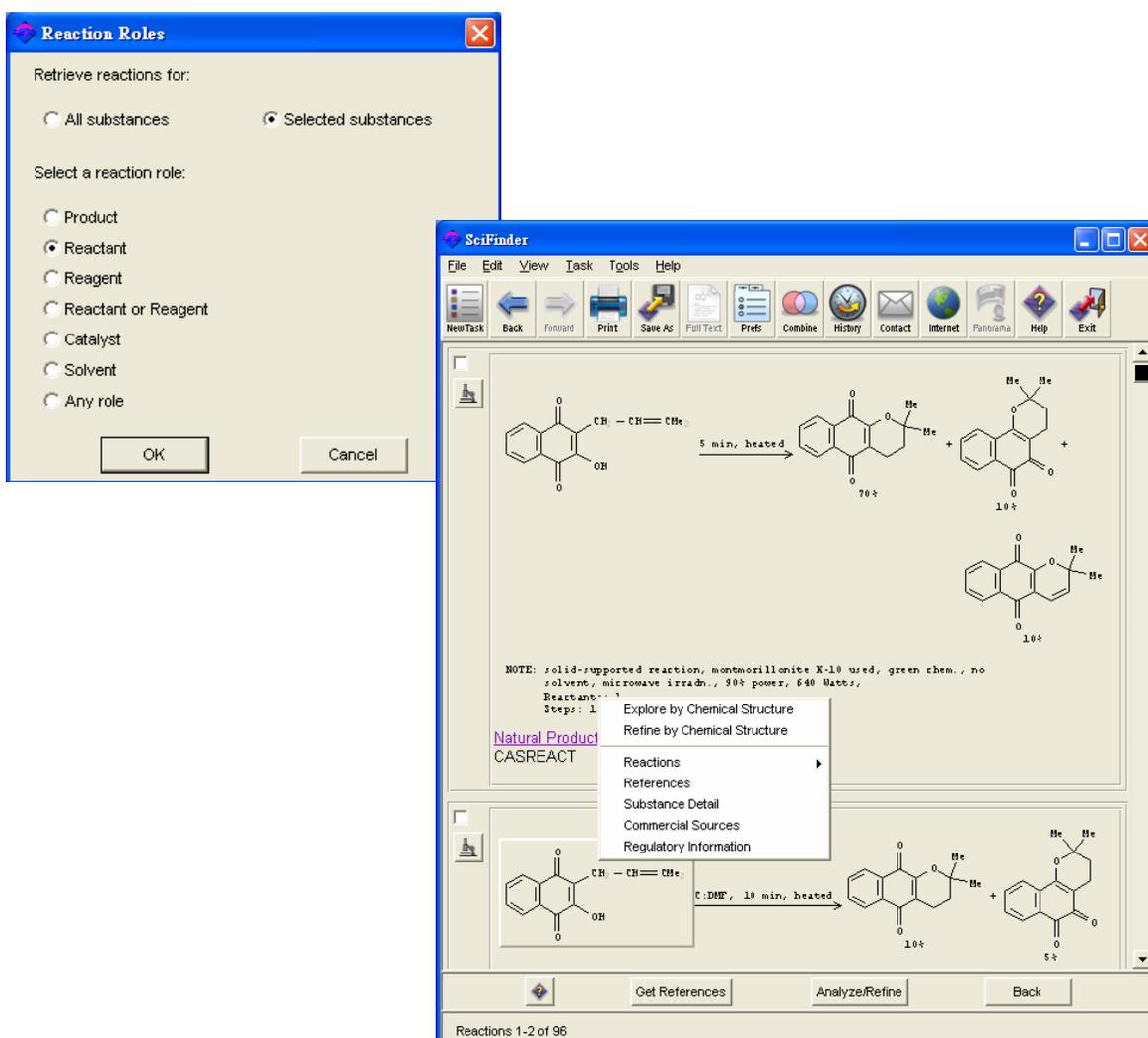
Regulated Chemicals Listing 1 of 1

物质反应资料(Reaction Information of Substances) (只限有亚结构 SSM 的账号)

若要显示一个或多个物质之反应资料，点击Get Reactions键。也可点击在任何一个物质记录上方的 图像。

当反应角色Reaction Roles对话框出现后，从Retrieve reaction for: 选择取得所有物质 All substances 的反应数据，或只选择已选的物质Selected substances的反应数据。然后，从Select a reaction role选择反应之角色。

在此选择Reactant并点击OK。反应式便会显示出来。



The image shows two overlapping windows from the SciFinder software. The top window is a dialog box titled "Reaction Roles". It has a blue header bar with a close button. The main area contains two sections: "Retrieve reactions for:" with radio buttons for "All substances" and "Selected substances" (the latter is selected); and "Select a reaction role:" with radio buttons for "Product", "Reactant" (selected), "Reagent", "Reactant or Reagent", "Catalyst", "Solvent", and "Any role". At the bottom are "OK" and "Cancel" buttons.

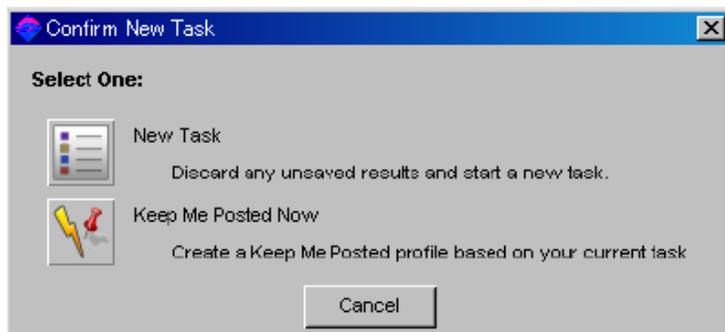
The bottom window is the main SciFinder interface. It has a menu bar (File, Edit, View, Task, Tools, Help) and a toolbar with icons for New Task, Back, Forward, Print, Save As, Full Text, Pref, Combine, History, Contact, Internet, Panorama, Help, and Exit. The main workspace displays a chemical reaction scheme. The reactant is a substituted naphthalenone with a -CH=CHMe group. The reaction conditions are "5 min, heated". The products are two naphthalenone derivatives. Below the reaction, there is a "NOTE" section and a "Steps: 1" section with a context menu open. The menu options are: "Explore by Chemical Structure", "Refine by Chemical Structure", "Natural Product", "CASREACT", "Reactions", "References", "Substance Detail", "Commercial Sources", and "Regulatory Information". At the bottom of the SciFinder window are buttons for "Get References", "Analyze/Refine", and "Back". The status bar at the very bottom says "Reactions 1-2 of 96".

当你点击Get References，这些反应式的文献亦会被显示。

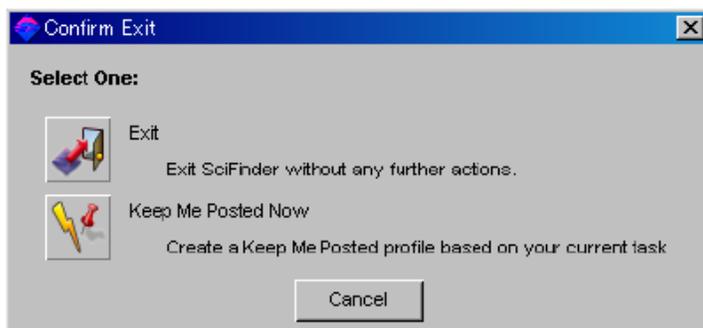
有关反应检索的详情，请参见第五章。

结束相同化学结构检索 (Ending Exact Chemical Structure Search)

若要开始新的检索，点击主工具列的New Task，或从文件菜单中选择New Task。在Confirm New Task对话框中点击New Task即可。在此时，小心未被存盘之答案结果会被删去。



从主工具列中点击Exit，或选择File菜单中的Exit SciFinder，以结束SciFinder。在Confirm Exit对话框中点击Exit。



第三章 亚结构检索 (Substructure Search)

SciFinder Substructure Module (SSM)是SciFinder的一个可选的检索功能。你可以利用此功能检索以下物质。

- 与已绘画的结构完全相同(跟第二章的完全相同结构检索相同)
- 包含检索结构的多元物质, 例如: 聚合物、化合物和盐基等
- 在指定位置有取代基和包含检索结构的物质
- 检索结构之环系为结果物质环系的一部分

检索的结果包括以下的数据。

- 物质基本数据 (如名称、结构、CAS 注册号)
- 实验特性和计算特性
- 摘要、相关参考和书目数据
- 供货商目录数据
- 物质管制和注册数据
- 物质的反应数据 (只适用于有 SSM 账号的用户)

SciFinder Substructure Search提供以下的功能和特点。

- 作完全相同、亚结构检索和相似结构检索
- 可变的取代位置工具指定取代基与环结构上多个点中的任何一点的键合
- 重复单元工具, 可节省绘画重复结点的时间
- 锁定取代工具能禁止取代基附加在结点上, 可作指定结构检索
- 设定R基团为不同原子或组合, 便能检索相关结构变化
- 预览结果功能让用户预知大概有多少个检索结果, 并对检索结构作出适当的修改, 节省检索时间。
- 强大的分析功能, 可分析在点选结点的真正原子附件、可变原子(A, Q, X, M)或R基团的结构成分和相关结果数目。

亚结构检索(Substructure Search)

v 结构图像的默认设定

SciFinder会以以下的设定检索亚结构。

结构	可检索的结果
环	含有取代基的结构 与检索环相同结构 与检索环有稠合的结构
链	含有取代基的结构 是结构链或环的其中一部份
快捷方式结尾	除了烷基(Alkyl group)外，所有取代都被禁止

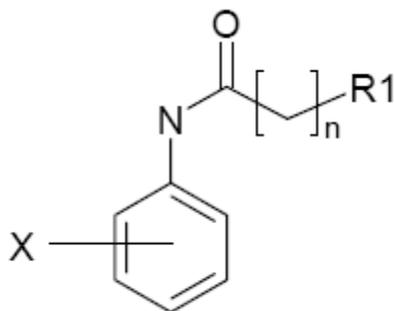
v 变更结构图像的默认设定

可以使用绘制工具去变更结构图像的默认设定。

结构	变更目的	变更方法
环	与其它环隔离或禁止稠合	用锁定环取代工具 Lock Out Rings 工具去锁定环
链	禁止链变成环	用锁定环取代工具 Lock Out Rings 工具去锁定链
原子	禁止取代基	用锁定原子取代工具 Lock Out Atom 工具去锁定链原子

λ 检索例子

以用亚结构检索以下的结构。



- R1 基团= S, P, NH₂
- 重复单元 n = 2-5
- 氮原子(N)不能被取代
- 只有一个卤原子(X)连在苯环
- 结构不能再作稠合

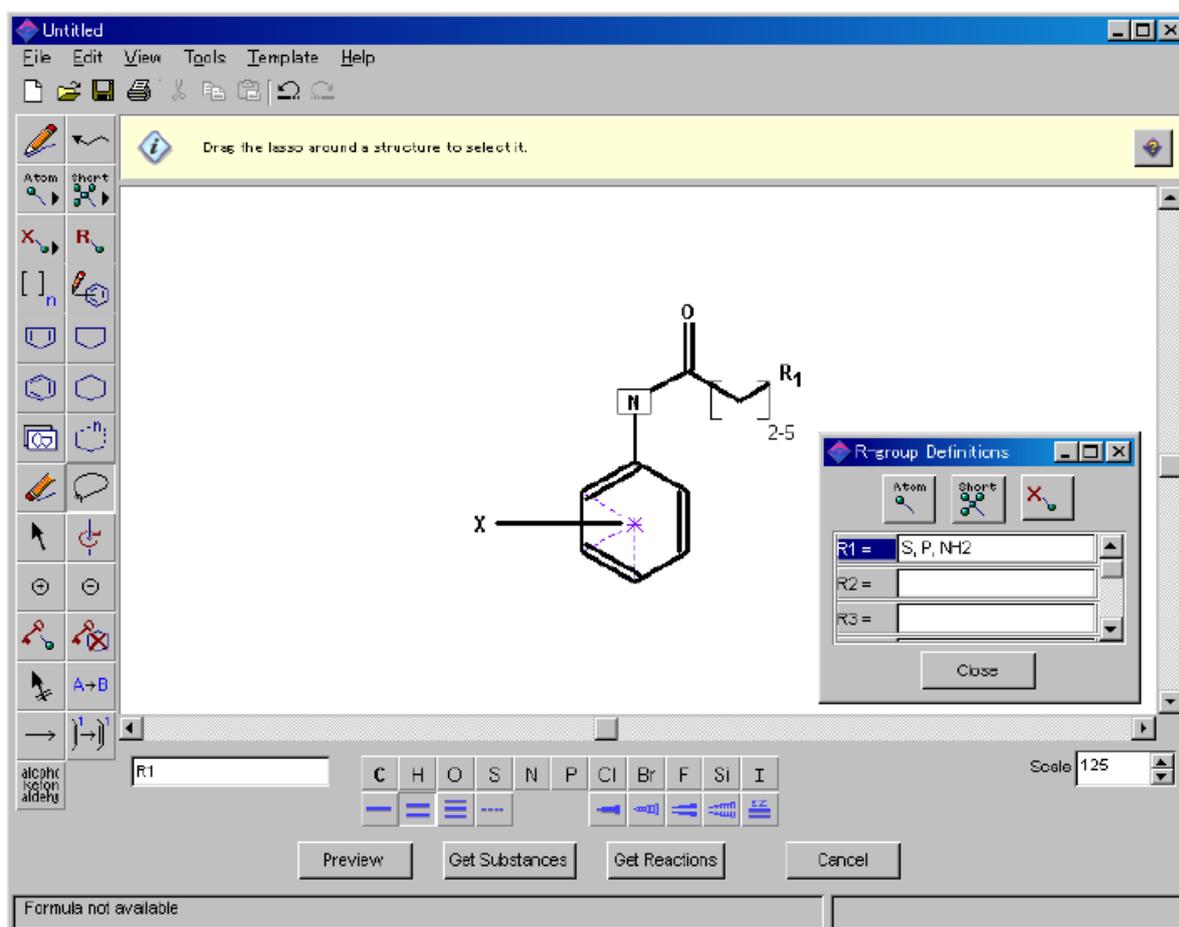
有关绘制结构图的详情，请参阅第一章。绘制工具的使用及解释也可在第一章找到。

要使用已预备好的结构文件，可从文件菜单中选取Open。也可以使用复制及粘贴Copy & Paste将结构图输入。

绘制方法

1. 用苯环工具绘制苯环。
2. 在苯环外围绘制X (卤素原子)后, 选取可变的取代位置工具。在点击X后, 拖曳鼠标至可变的取代位置。
3. 在水平工具板上点击N (氮原子)图像, 拖曳至苯环。
4. 使用链工具从N开始加上三个碳的链。
5. 点击R基团工具, 定义R1基团为S, P, NH₂后, 并把R1加置于碳链的最末端。
6. 点击在原子绘制板中的O (氧原子)图像和双键图标。将铅笔工具移至碳链的结点, 并拖移一个长度单位。便绘出氧的双键。
7. 在选取重复单元工具后, 选取你想要重复的单元。选取的部份会显示为红色。在结构图像窗口上的文字框  输入重复单元的数目, 并且点击OK。
8. 选取Lock Out Substitution工具后点击N。N的取代将会被禁止。
9. 选取Lock Out Rings工具后点击苯环。环的耦合将会被禁止。
10. 点击碳链, 键便会只限于链。

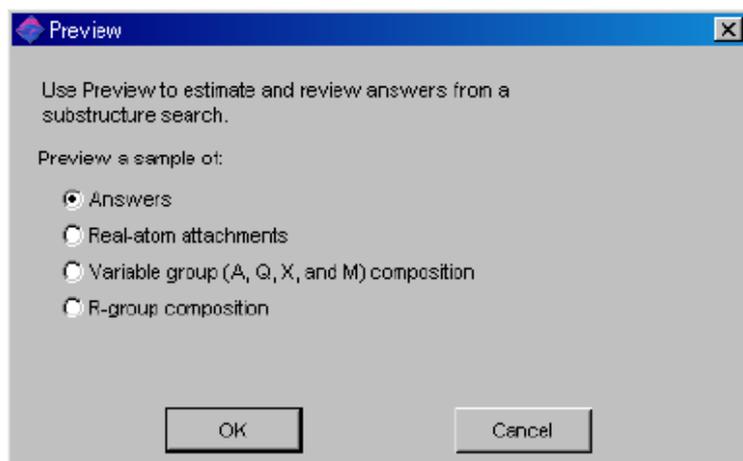
当你完成绘图, 便会像下图所示一样。



预览亚结构检索 (Preview of Substructure Search)

用户在进行真正检索前，可以取得预览结果。

当绘制结构后，点击Preview键。Preview对话框便会被开启。

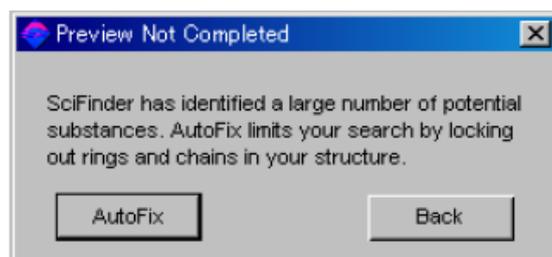


以下是Preview选项和其显示。

选项	显示
结果	λ 典型的检索答案 λ 在 Get Substances 上预计得到的结果数目
真实原子取代	λ 原子上的取代基 λ 在 Get Substances 上预计得到的结果数目
可变基团 (A, Q, X, and M) 成分	λ 可变基团的结构原子 λ 在 Get Substances 上预计得到的结果数目
R 基团成分	λ R 基团包括的原子 λ 在 Get Substances 上预计得到的结果数目

v 当不能完成预览之情况

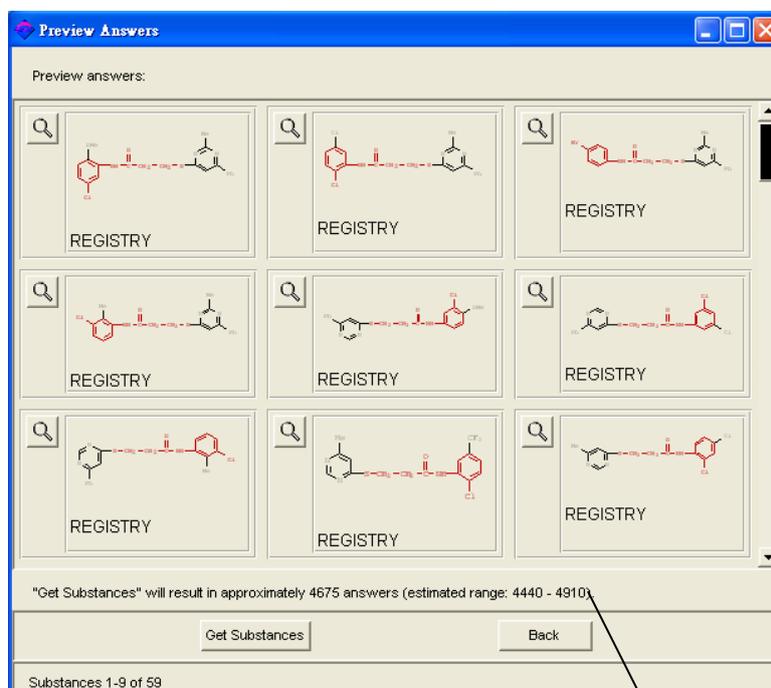
如有太多的检索结果，Preview Not Completed 对话框会出现。



点击AutoFix键，锁定环和链的取代。这结果与使用Lock Out Rings工具一样。在设定后，再一次试用Preview。

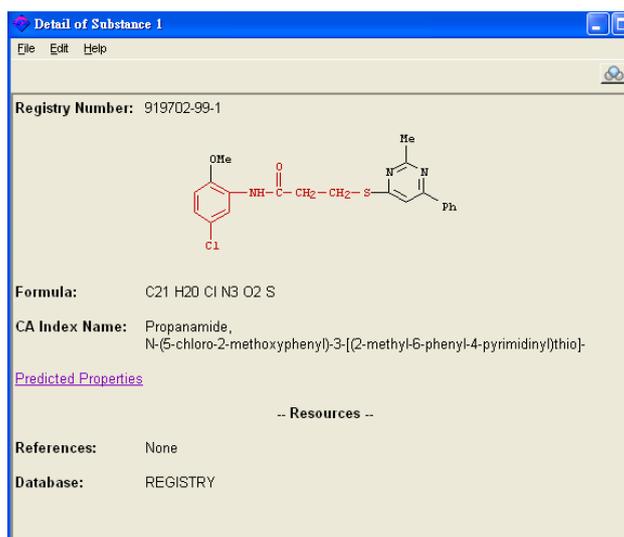
v 预览结果样本

要观看结果样本，选取 **Answers** 并点击 **OK**。当 **Preview Answers** 对话框开启，结果样本及其预计得到的结果数目都会被展示。



预计得到的结果数目

当你点击放大镜图像 ，你可以放大观看其结构。

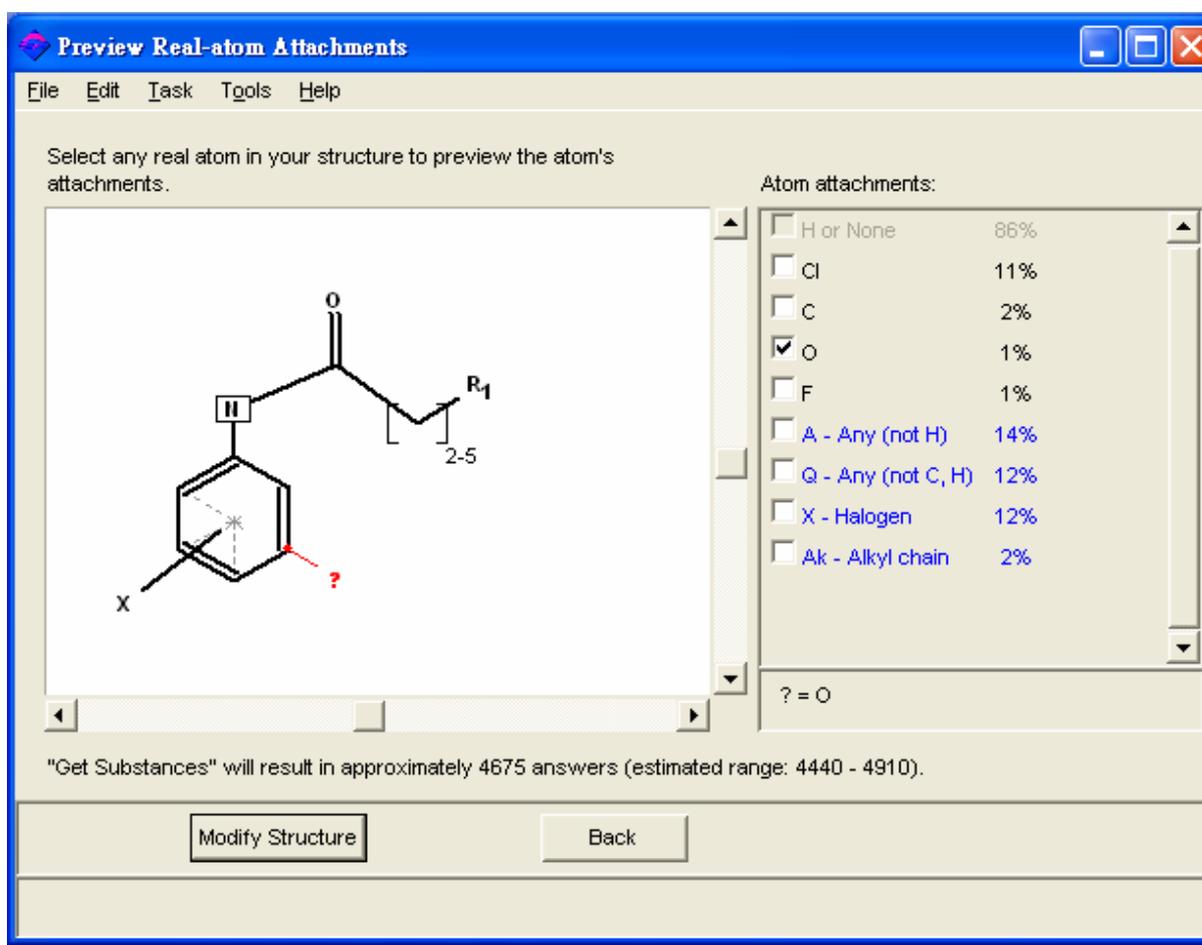


点击 **Close** 返回 **Preview Answers** 的对话框。你可以点击 **Back** 以返回 **Preview** 对话框，并选择其它 **Preview** 选项。

v 预览取代原子

若要预览取代原子的结果，先选取真实原子取代 Real-atom Attachments 选项并点击 OK。Preview Real-atom Attachment 对话框会被开启，输入的结构也会显示出来。

将鼠标放置于你想要确认的取代原子的结点上，并加以点击。这个原子将会被突出显示，在它旁边会有？问号出现。在对话框内的 Atom Attachments 部份，便会看到在这位置有可能出现的取代原子，会以黑色或蓝色原子来显示。



要减少结果数目，只要输入更多检索限制条件。先点击原子旁的方框，并点击Modify Structure。已绘制的结构将会被修正，并包含在指定结点中的取代原子之。

用户也可以点击Back以便返回Preview对话框和选择其它Preview选项。

v 预览可变原子(A, Q, X, M)

要预览可变原子，便选取Variable Group (A, Q, X, and M) Composition选项。该对话框会被开启，检索结构和一系列的可变原子会被显示。

将鼠标移至你想预览的可变原子上并且点击。被选取的可变原子将会被突出显示成红色。

Select any variable group (A, Q, X, or M) in your structure to preview the variable group's composition.

Variable Group Composition:

<input type="checkbox"/>	Cl	78%
<input checked="" type="checkbox"/>	Br	13%
<input checked="" type="checkbox"/>	F	6%
<input type="checkbox"/>	I	3%

? = Br, F

"Get Substances" will result in approximately 4675 answers (estimated range: 4440 - 4910).

Modify Structure Back

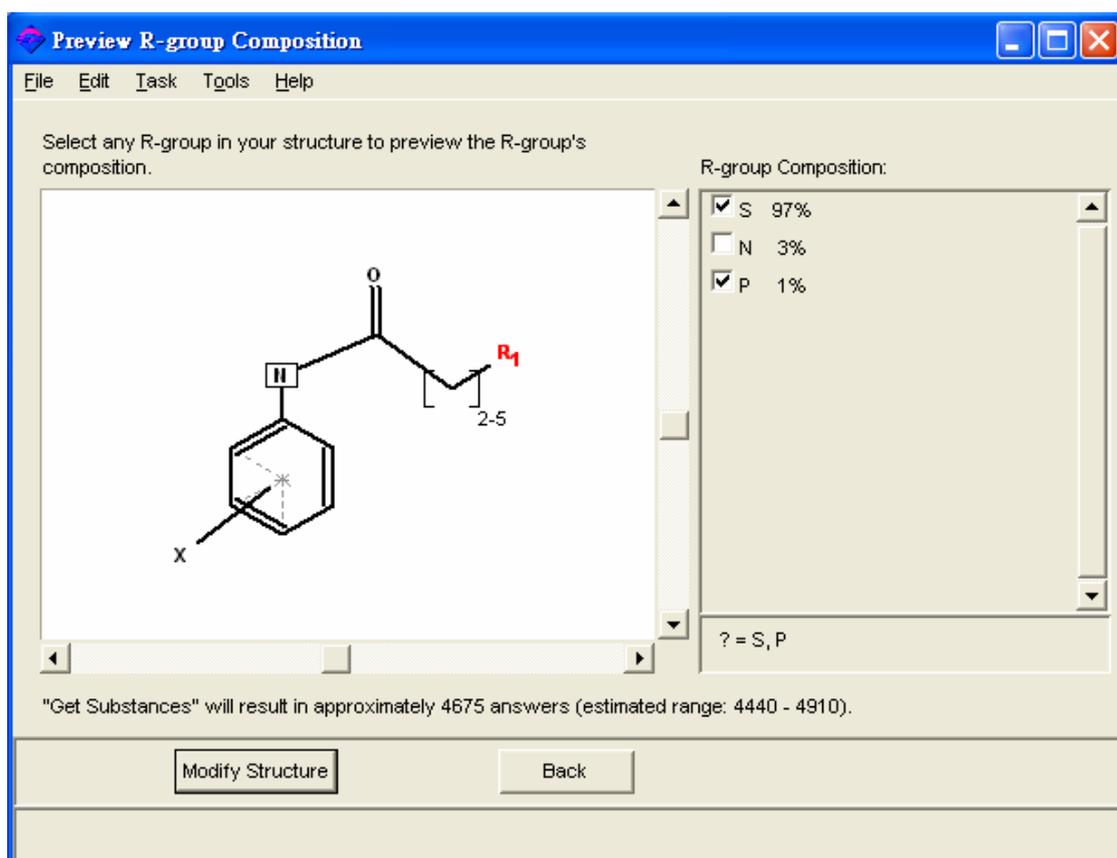
要减少结果数目，只要输入更多检索限制条件。先点击可变原子旁的方框，并点击Modify Structure。已绘制的结构将会被修正，并包含所选的可变原子。

用户也可以点击Back以便返回Preview对话框和选择其它Preview选项。

v 预览R基团

要预览R基团的结果，便选取R-group Composition选项。Preview R-group Composition对话框会被开启，以及检索结构会被显示。

将鼠标移至你想预览的R基团上并且点击。然后，被选取的R基团将会被突出显示成红色，在结果样本中的一列R基团会显示在R-group Composition部份。

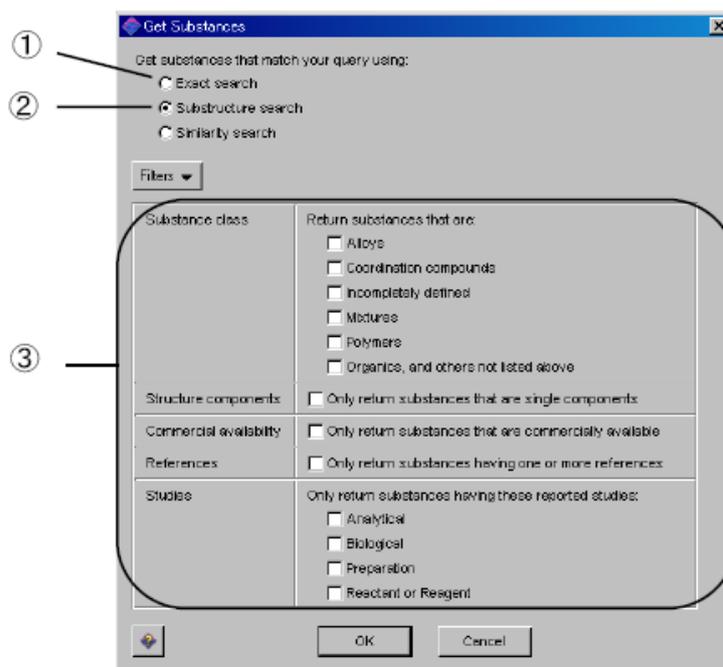


要减少结果数目，只要输入更多检索限制条件。先点击R基团的方框，并点击Modify Structure。已绘制的结构将会被修正，并包含所选的R基团。

用户也可以点击Back以便返回Preview对话框和选择其它Preview选项。

进行亚结构检索(Performance of Substructure Search)

在绘制结构后，点击Get Substances。Get Substances的对话框便会出现。

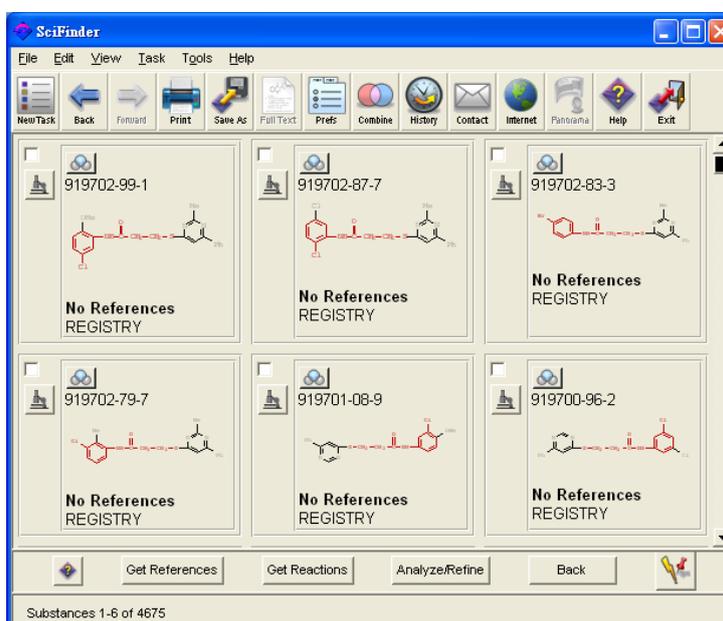


默认设置是Substructure Search。

如果检索结构含有R基团或可变原子(X, Ak, 等.), 但选取 并执行, Structure Drawing Error错误窗口便会出现。

改变 Filters过滤选项的设定, 便可以限制检索结果至指定类型。

点击OK, 便能看到亚结构的检索结果, 包括物质的结构、CAS的注册号和其文献数目, 都会显示在SciFinder的窗口上。

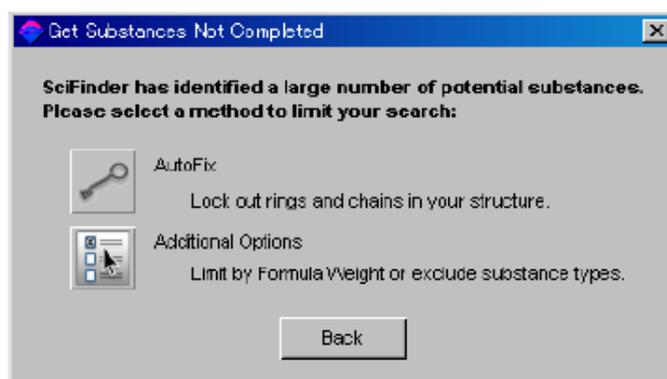


亚结构部分会被突出显示成红色。结果会以默认设定之格式来排列。要改变显示格式，便选取浏览菜单或从Preference Editor之Display键改变默认设定。

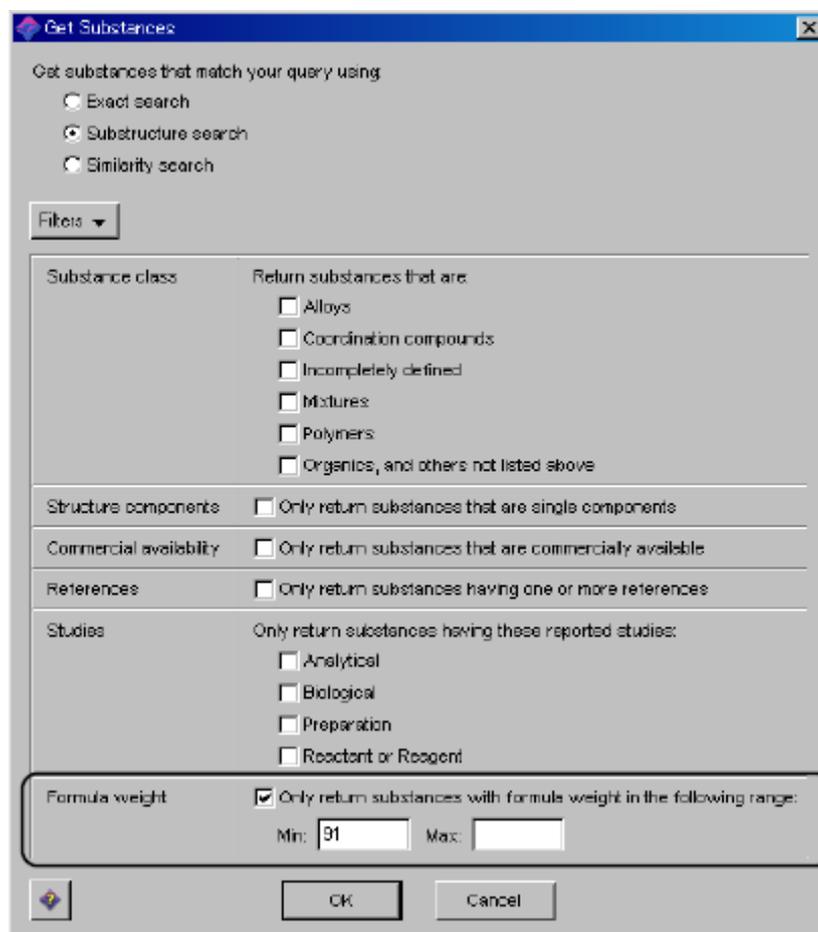
要查阅物质的详细资料，点击放大镜之图样。你又可以使用Get References去查询有关物质的文献资料。详情请参阅第二章。

v 当不能完成检索之情况

当执行Get Substances，如果检索结构太过简单，Get Substances Not Completed对话框便会出现。



点击Autofix键，锁定环和链的取代。这结果与使用Lock Out Rings工具一样。在设定后，再一次试用Preview。或点击Additional Option。以下窗口便会出现。

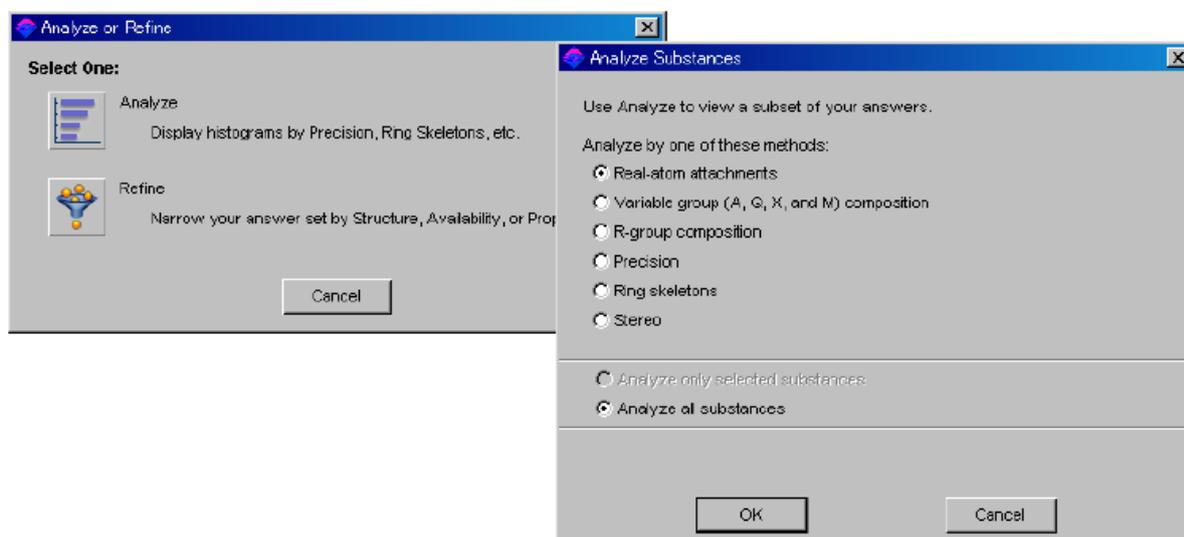


用户可输入分子量Formula Weight，限制结果物质的分子量至特定范围内。在Min框中，检索结构的分子量已被输入。用户可以输入Min最少和Max最大的分子量至想要的结果，如多元物质的其中一个物质符合分子量的要求，这多元物质也会显示出来。

在输入分子量范围后，点击OK。

分析结果 (Analyzing Answer)

要分析和细化结果，便点击Analyze/Refine图像。当你点选Analyze后，Analyze对话框便会出现。



以下便是每一个选项的作用。

选项	作用
Real-atom Attachments SSM	分类/细化取代原子
Variable group (A, Q, X, and M) composition SSM	分类/细化可变基团
R-group composition SSM	分类/细化 R 基团
Precision	分类/细化结构的精确性
Ring skeletons	分类/细化结构的的基本骨架、原子、和键
Stereo SSM	分类/细化立体结构

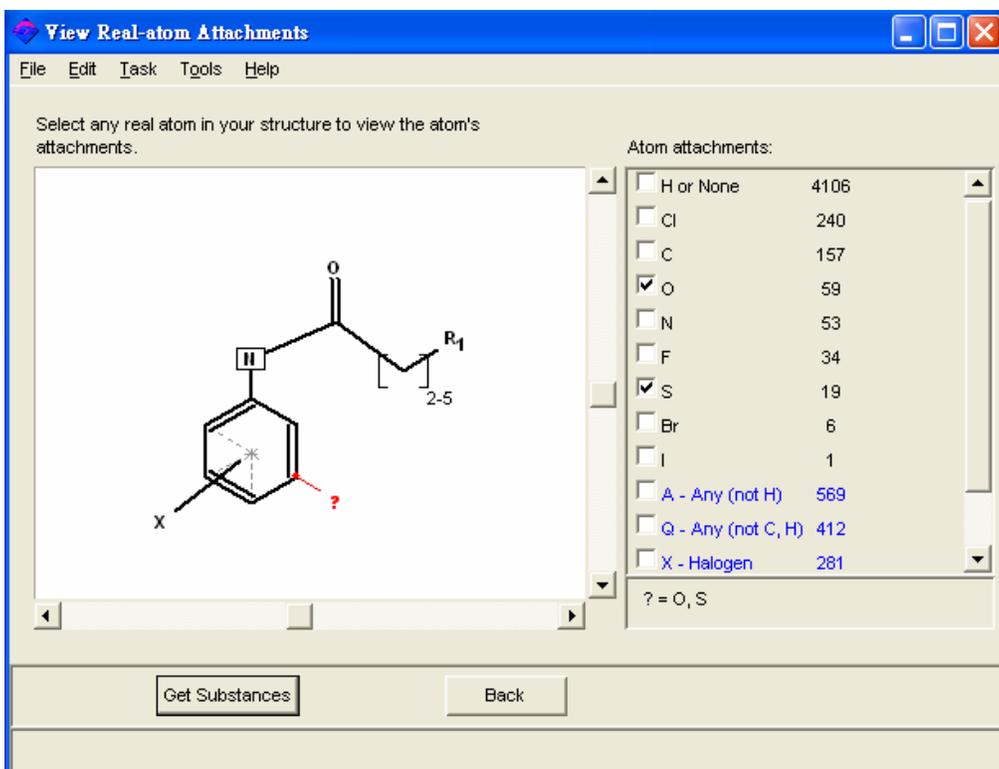
SSM: (只适用于有亚结构检索 SSM 账号)

用户可以分析所有结果或部份答案。若只分析某一部份，要先返回检索结果的窗口，并且点击想要分析的物质旁的方框。再一次点击 Analyze/Refine 中的 Analyze。确定只分析已选物质 Analyze only selected substances，然后按下点击 OK。

分析取代原子 (Analyzing Substitution Atom)

分析在结果结构中的指定原子的取代原子，选取Analyze 中的Real-atom attachments选项，并点击OK。View Real-atom Attachments对话框会被开启，检索结构也会被显示出来。

将鼠标放置于你想要确认的取代原子的结点上，并加以点击。这个原子将会被突出显示，在它旁边会有? 问号出现。在对话框内的Atom Attachments部份，便会看到在这位置的取代原子，会以黑色或蓝色原子来显示。



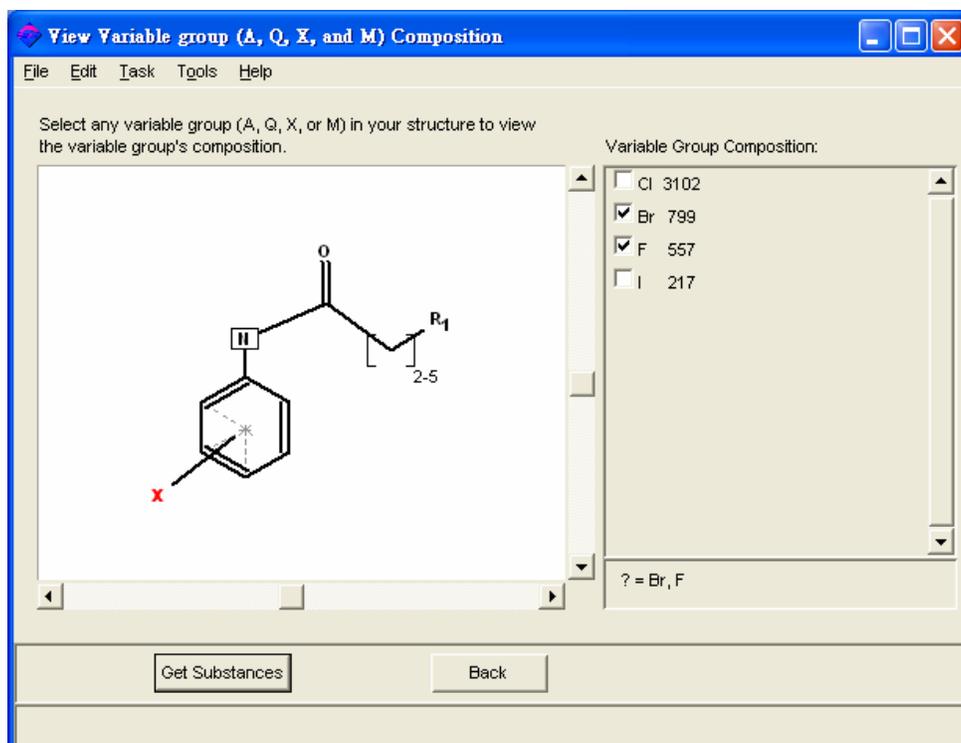
要限制和选择指定取代原子，便从Atom Attachments表列中选取，并且点击Get Substances。

点击Back以便返回Analyze对话框和选择其它Analyze选项。

分析可变基团 (Analyzing Variable Group (A, Q, X, M))

分析在结果中的指定原子的可变基团，选取Analyze 中的 Variable Group (A, Q, X, and M) Composition选项，并点击OK。View Variable Group (A, Q, X, and M) Composition 对话框会被开启，检索结构也会被显示出来。

将鼠标放置于你想要确认的可变原子的结点上，并加以点击。这个原子将会被突出显示成红色。在对话框内的Variable Group Composition部份，便会看到在这位置的可变原子。



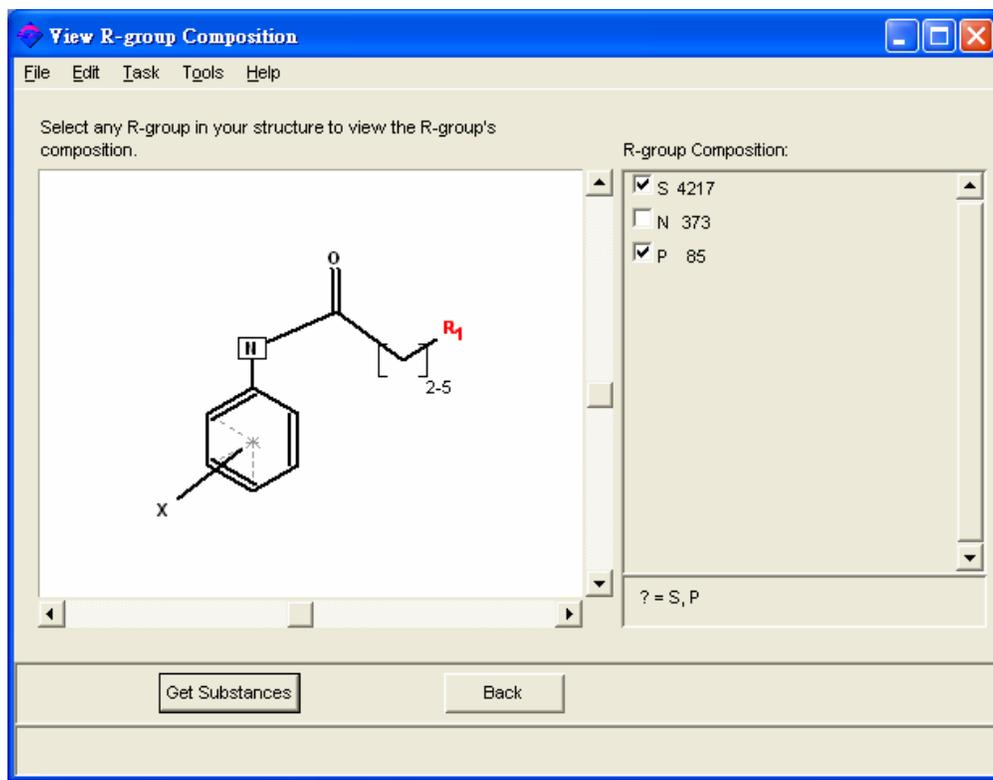
要限制和选择指定可变基团一起的物质，便从Variable Group Composition表列中选取，并且点击Get Substances。

点击Back以便返回Analyze对话框和选择其它Analyze选项。

分析R基团 (Analyzing Composition Atoms of R Group)

分析结果中的R基团，选取Analyze 中的R-group Composition选项，并点击OK。View R-group Composition对话框会被开启，检索结构也会被显示出来。

将鼠标放置于你想要确认的R-group的结点上，并加以点击。R-group将会被突出显示成红色。在对话框内的R-group Composition部份，便会看到在这位置R-group的原子。



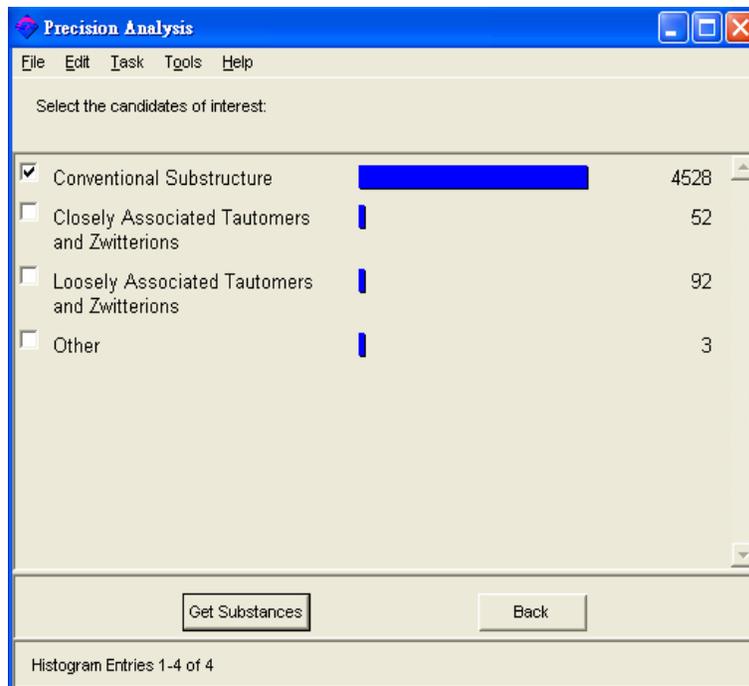
要限制和选择指定的R基团一起的物质，便从R-group Composition表列中选取，并且点击Get Substances。

点击Back返回Analyze对话框和选择其它Analyze选项。

分析检索的准确性(Analyze by Search Accuracy)

分析检索的准确性，便知道结果有关的结构，选取在Analyze对话框内的Precision选项。Precision Analysis对话框会被开启。

普通的亚结构
相关的互变异构和离子
不太相关的互变异构和离子
其它



要限制与选择结构，点击Get Substances。

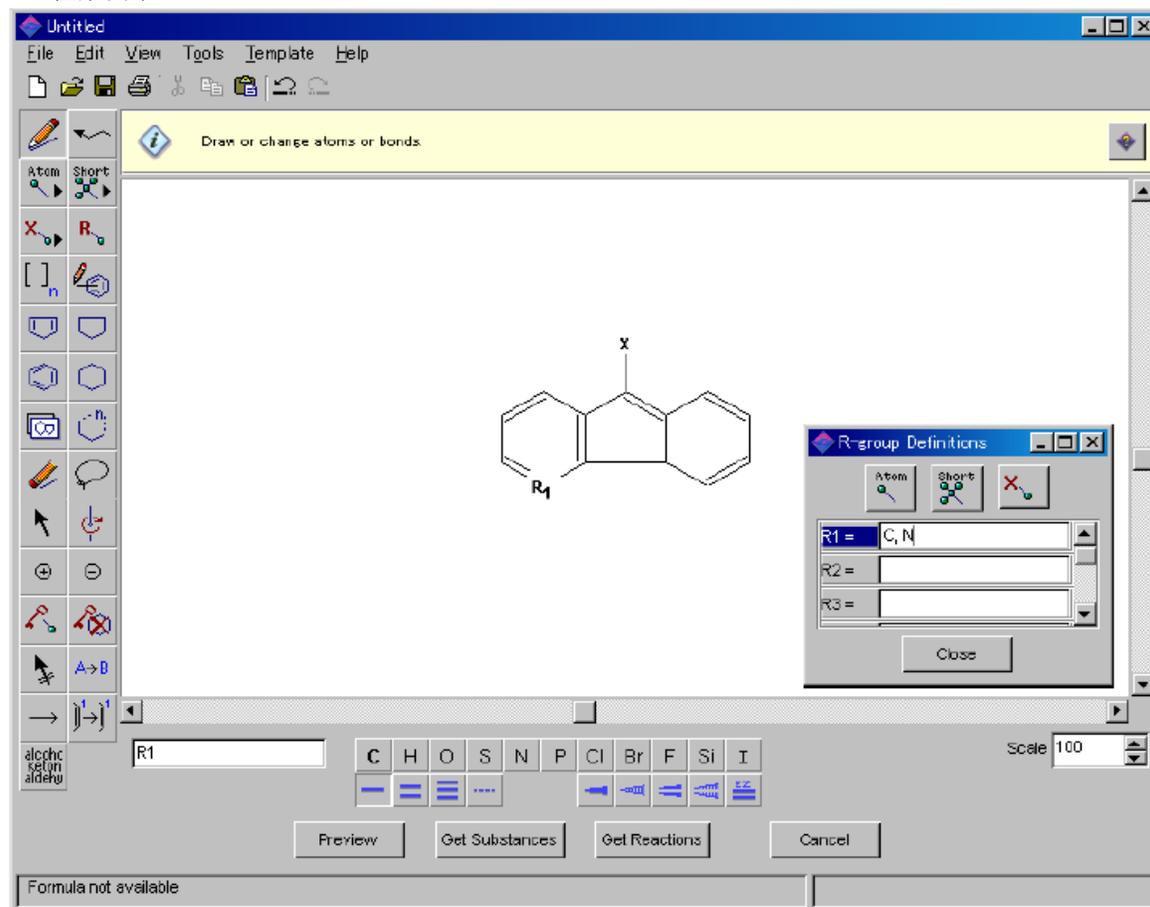
点击Back返回Analyze对话框和选择其它Analyze选项。

分析环结构(Analyze by Ring Structure)

可以分析和限制结构中的环骨架。

- 只有基本骨架
- 基本骨架和成份元素
- 基本骨架、组成元素、和键

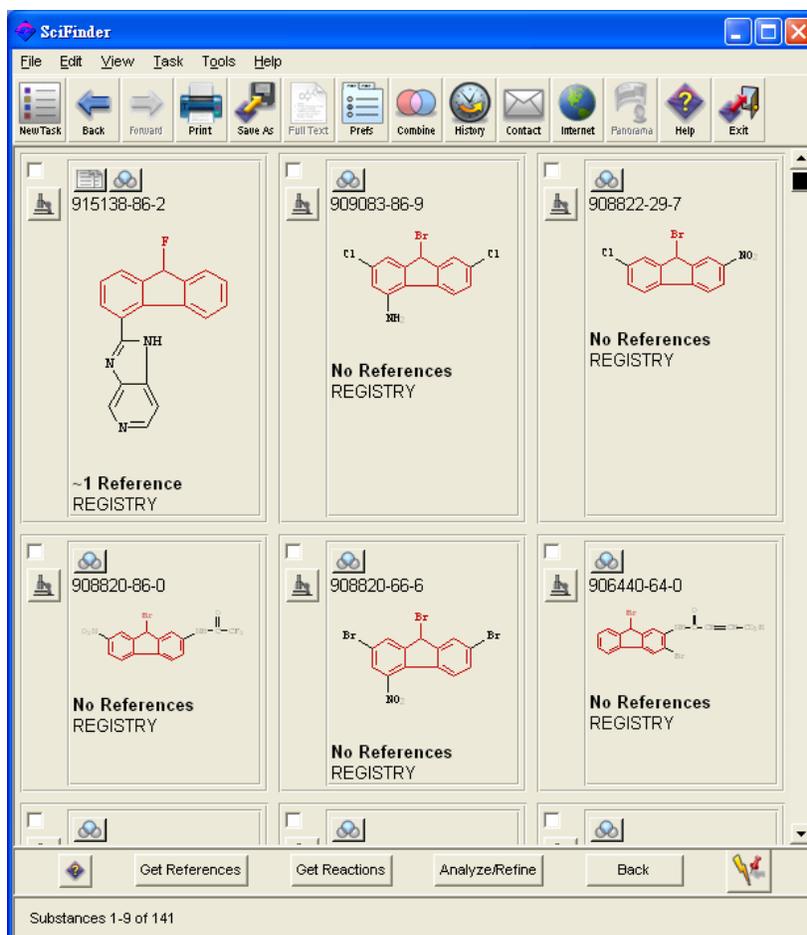
检索例子



可以在亚结构检索，取得有取代基，并和与其它环稠合的物质。使用Lock Out Rings工具或Lock Out Substitution工具，便可以禁止取代和稠合。

要进行Substructure Search，在点击Get Substances后选取Substructure Search，并且点击OK。

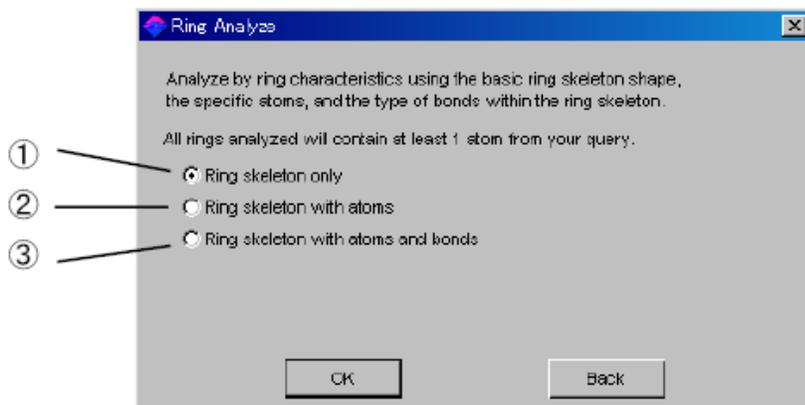
注：以环结构分析的目的是分析亚结构的基本骨架，并不可以分析整个骨架。



在结果中，与检索相配的结构部份会被突出显示成红色。依据环结构的分析中，结果会以不同的基本环骨架来分类。

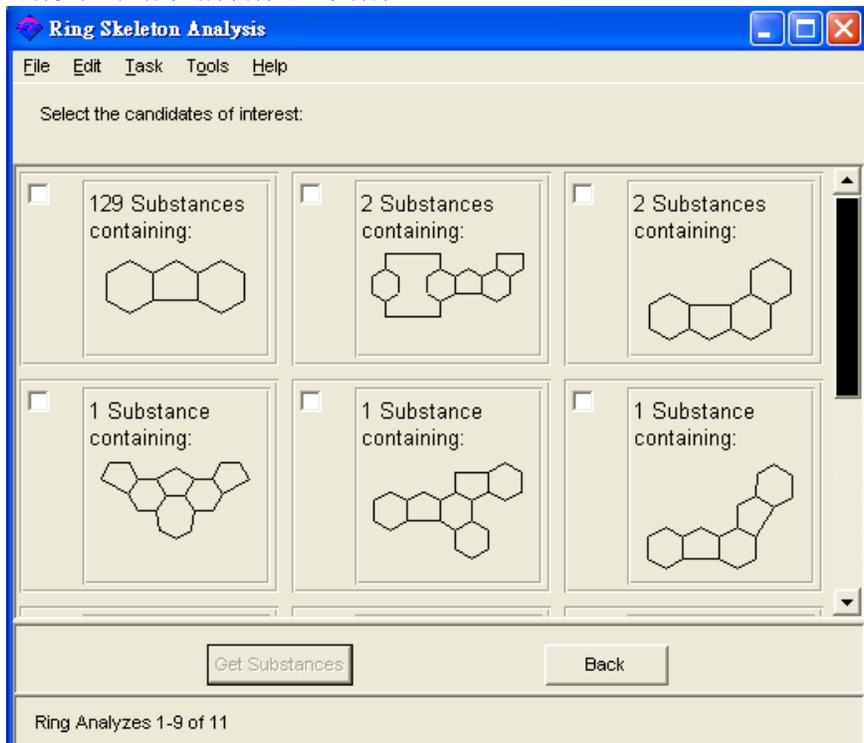
点击Analyze/Refine图像的Analyze。若要分析，要先返回检索结果的窗口。Analyze对话框会出现，然后选取Ring Skeletons 选项，及选取分析所有答案或一部份的答案。点击OK。

Ring Analyze对话框会被开启，然后选取选项(1)-(3)并点击OK。



(1) 依据环结构进行分类 (Classification by ring structure only)

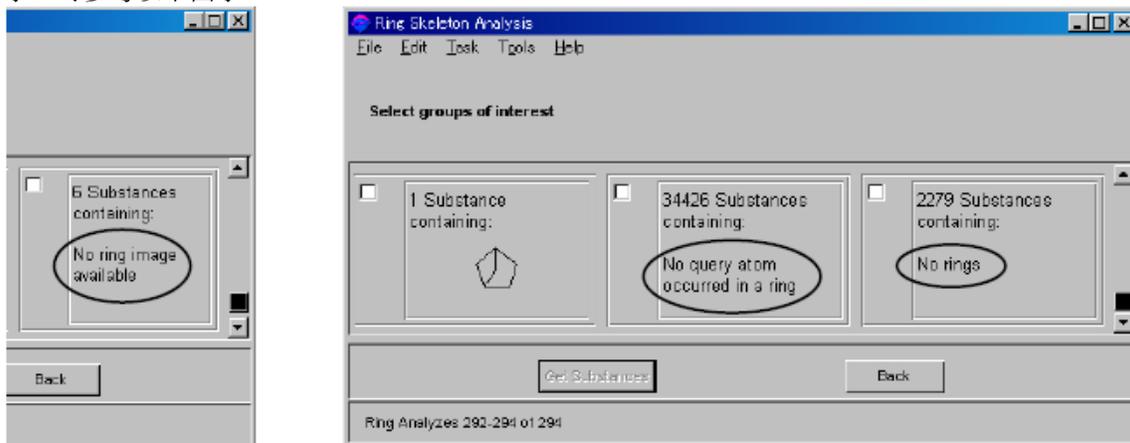
当以环结构去分类时，只会以基本骨架去分类，并不理会其成分和键。在Ring Analyze对话框中选取Ring skeleton only并点击OK。Ring Skeleton Analysis对话框会出现，最少有一个基本骨架会被显示，并可知道有多少个结果结构有其基本骨架。



要限制指定基本骨架，在点击Get Substances后，点击核对框。

点击Back以便返回Analyze对话框，选择其它Analyze选项。

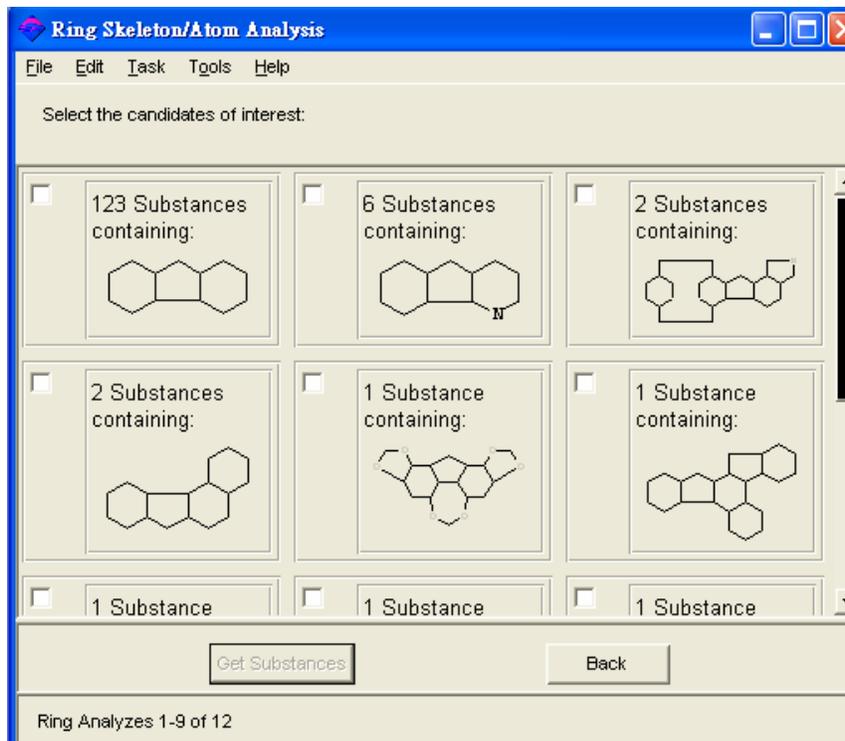
补充：很少出现不能显示基本骨架之情况。若果这情况出现，“no ring image available”将会被显示。可参考以下图示。



- No query atom occurred in a ring: 结果虽有环结构存在，但环中并没有查询原子
- No Rings: 没有环的物质
- Other: : 不能完成环的基本骨架之分析

(2) 分析环的基本骨架和组成元素 (Classification by ring skeleton and composition element)

当以环的基本骨架和元素去分类时，只会以基本骨架去分类，并不理会其成分和键。在Ring Analyze对话框中选取Ring skeleton with atoms并点击OK。Ring Skeleton Analysis 对话框会出现，有最少一个基本骨架和元素会一起显示，并可知道有多少个结果结构有其基本骨架和元素。

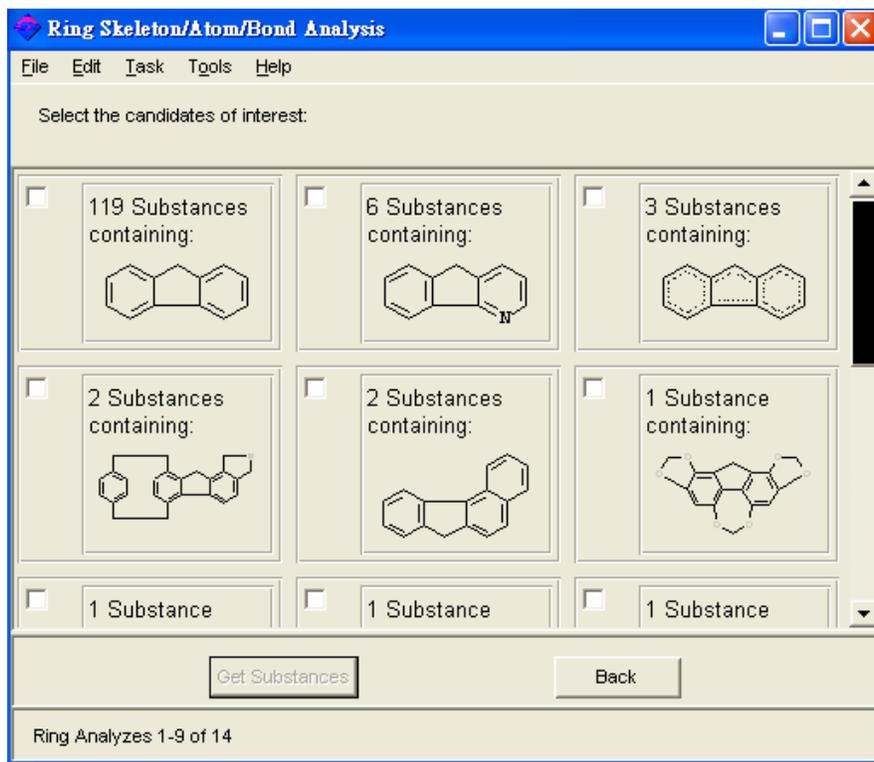


要限制指定基本骨架和元素，在点击Get Substances后，点击核对框。

点击Back以便返回Analyze对话框和选择其它Analyze选项。

(3) 分析环的基本骨架、组成元素、和键的分类(Classification by ring skeleton, composition element, and bond)

在Ring Analyze对话框中选取Ring skeleton with atoms and bonds并点击OK。以环的基本骨架、组成元素、和键去分类。Ring Skeleton/Atoms/Bond Analysis 对话框会出现，有最少一个基本骨架和组成元素/键会一起显示，并可知道有多少个结果结构有其基本骨架，元素和键。



要限制特定元素或键构成之基本骨架，在点击Get Substances后，点击核对框。

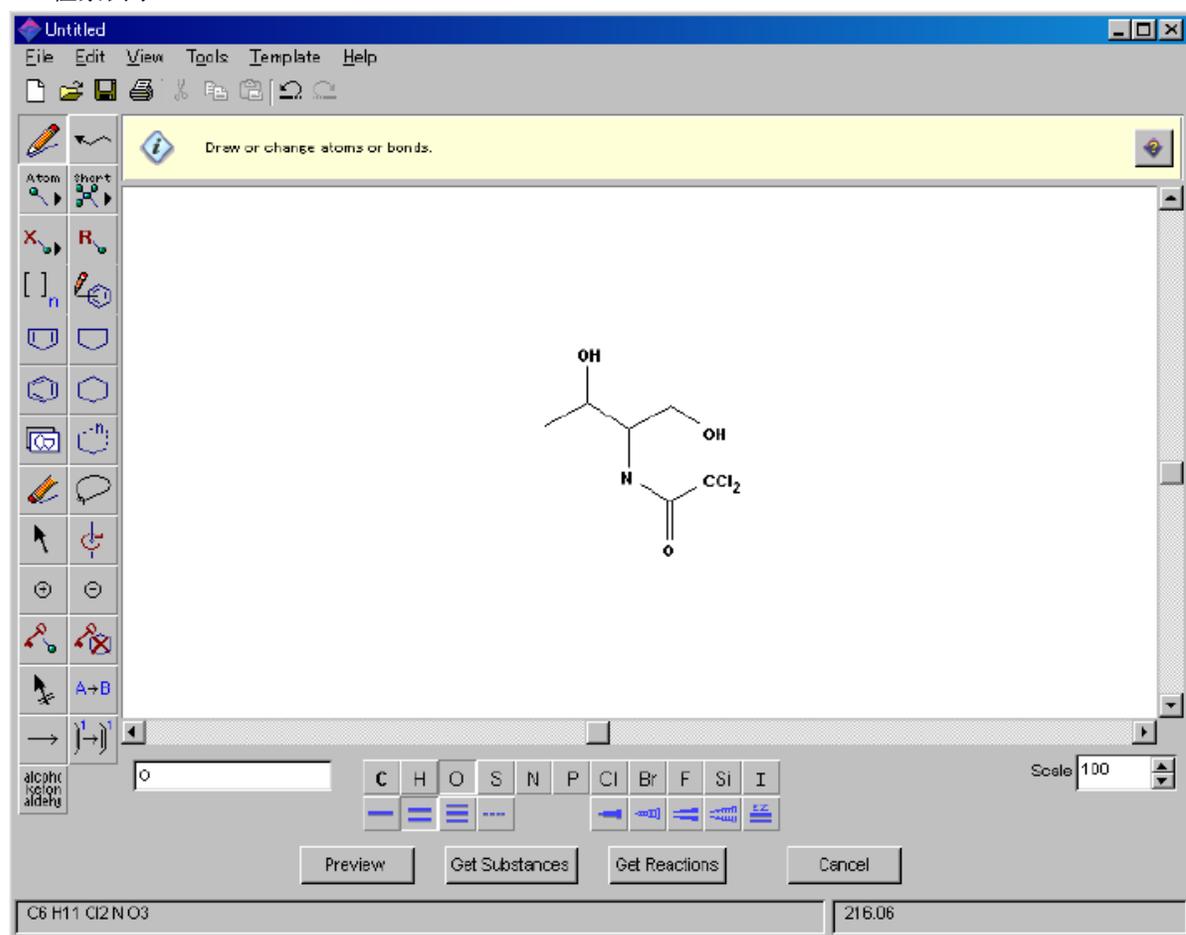
点击Back以便返回Analyze对话框和选择其它Analyze选项。

分析立体结构(Analyze by Stereo)

SciFinder可以分析以下的立体结构。

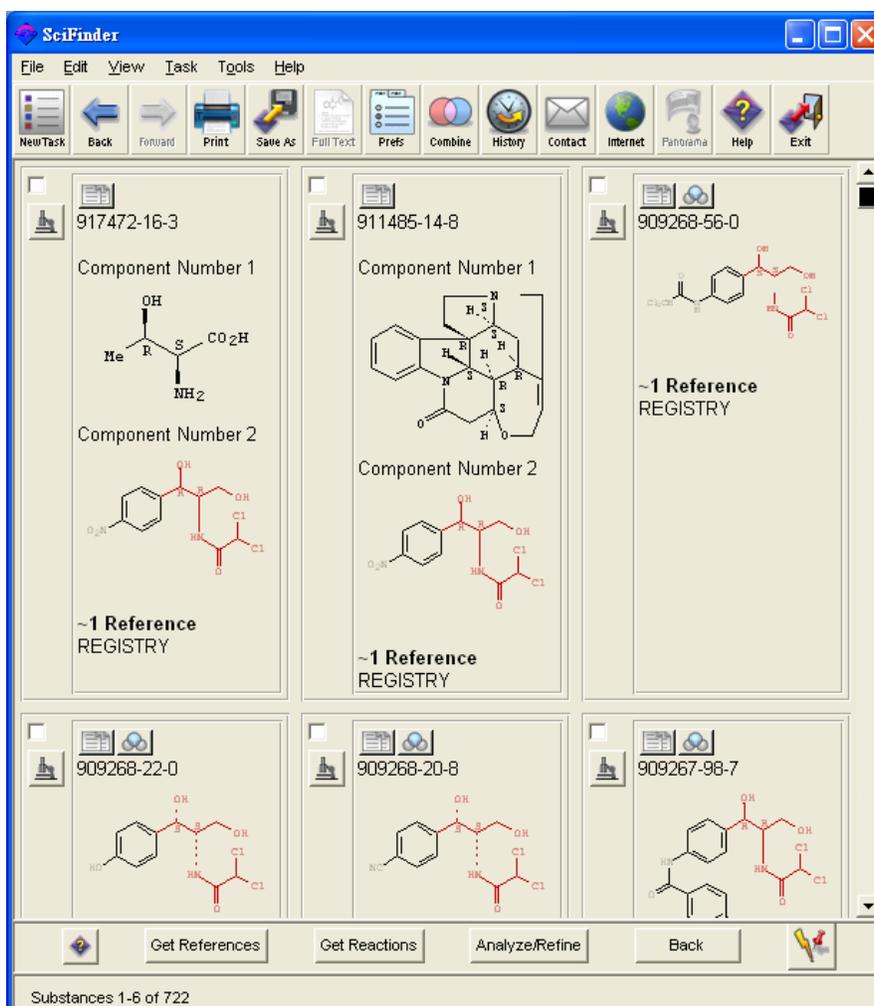
- v 含立体键之结构
 - 完全相同的立体结构
 - 完全镜像的立体结构
 - 部份立体结构相配
 - 没有立体结构相配
 - 没有立体结构
- v 不含立体键之结构

检索例子 - 1



作亚结构检索，会查出有取代基和与其它环稠合的物质。使用Lock Out Rings工具或Lock Out Substitution 工具，便可以禁止取代和稠合。

要进行Substructure Search， 在点击Get Substances后选取Substructure Search， 并且点击OK。



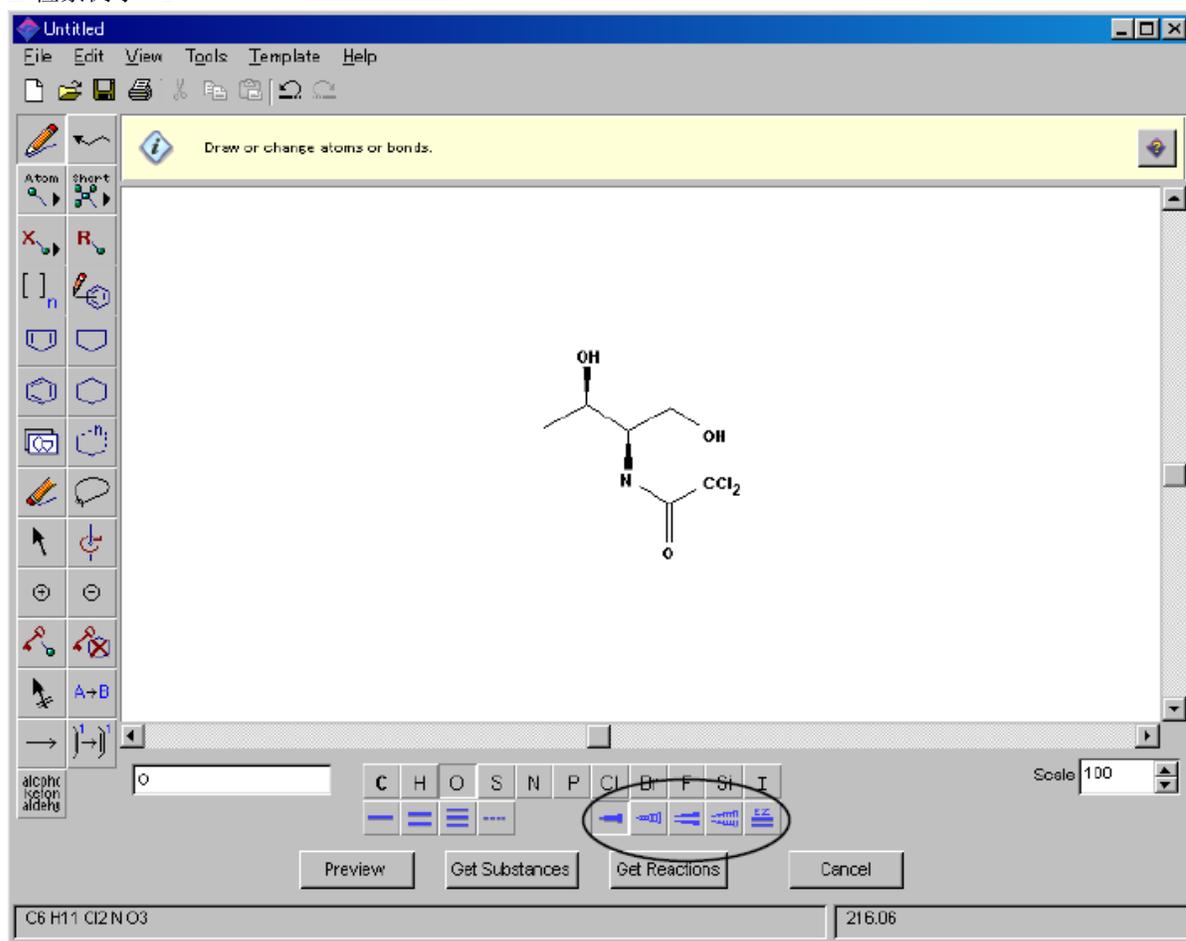
在这答案中，与检索相配的部分会被突出显示成红色。现在以立体结构去分析。

点击Analyze/Refine图像的Analyze。若要分析只有某一部份的答案，要先返回检索结果的屏幕，并且点击你想要分析的物质旁的核对框。Analyze对话框会出现，然后选取Stereo选项，点击OK，Stereo Analysis对话框会出现。

Option	Count
<input type="checkbox"/> Stereo in answer structure	460
<input type="checkbox"/> No stereo in answer structure	262

物质会被分类成“有”或“没有”立体结构两类，选择方框，并且点击Get Substances选取物质。

检索例子 - 2



点击Get Substances并进行亚结构检索，立体分析 (Stereo Analysis) 对话框会从开始检索时出现。分类的模式如下。

完全相同的立体结构
 镜像异构的立体结构
 部份立体结构相配
 没有立体结构相配
 没有立体结构

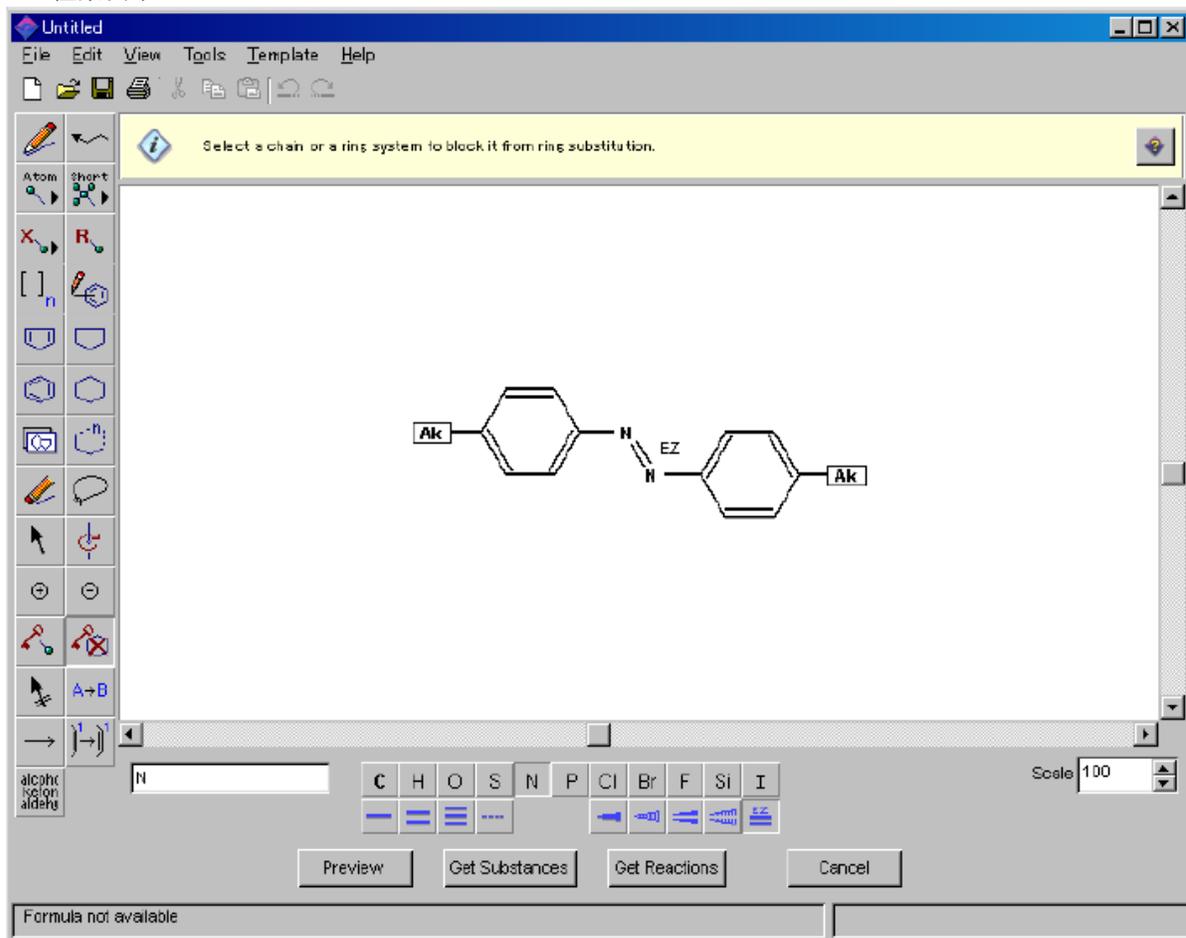
Select Histogram Entries of interest:		
<input checked="" type="checkbox"/>	Absolute stereo match	287
<input type="checkbox"/>	Absolute stereo mirror image	30
<input type="checkbox"/>	Relative stereo match	48
<input type="checkbox"/>	Stereo that doesn't match query	47
<input type="checkbox"/>	No stereo in answer structure	252

Get Substances Back

Histogram Entries 1-5 of 5

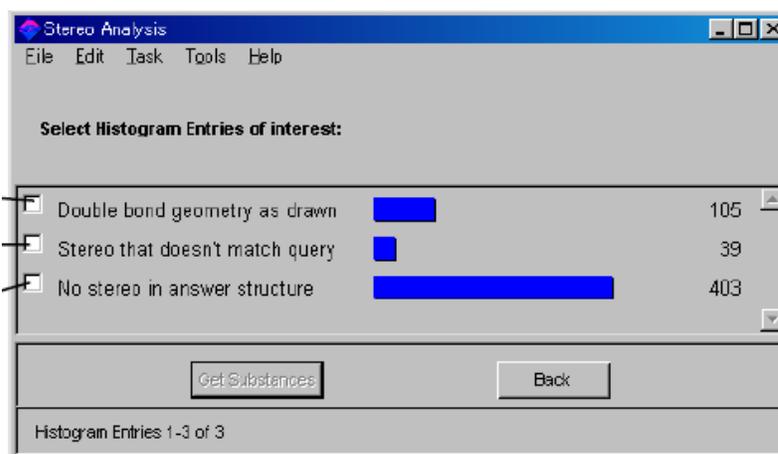
检索立体异构体点选绘制去绘制一个双键。这双键旁便会因而被加上字母“E，Z”注明是立体部分。

■ 检索例子-3



点击Get Substances并进行亚结构检索，Stereo Analysis对话框会从开始检索时出现。在此时，分类的模式显示如下。

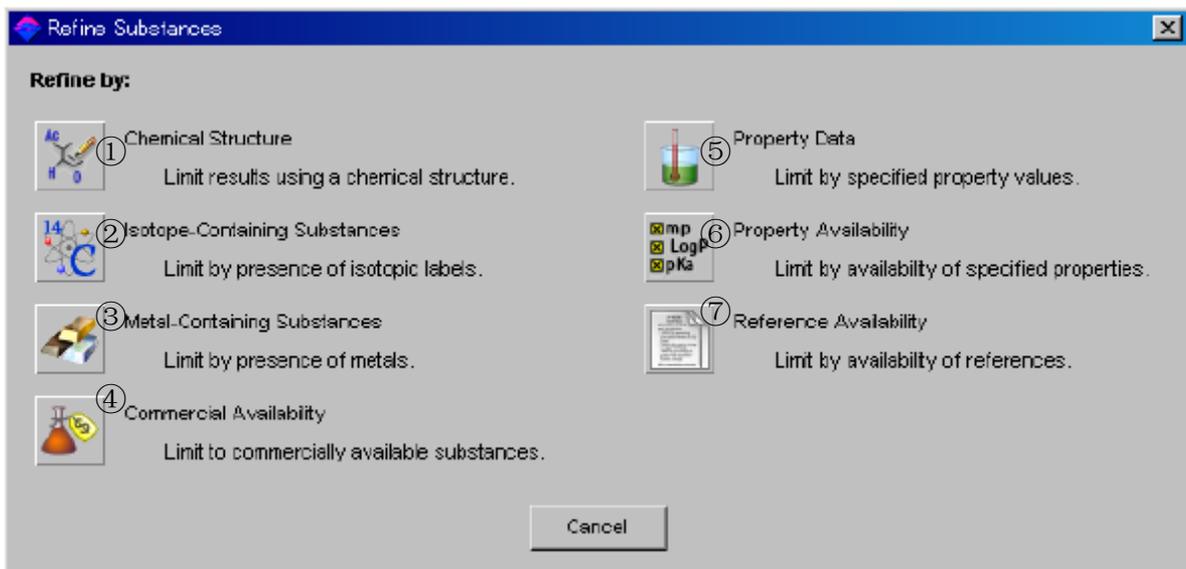
和检索结构一样的几何双键
不匹配的立体键
无立体键的结构



细化答案 (Refining Answers)

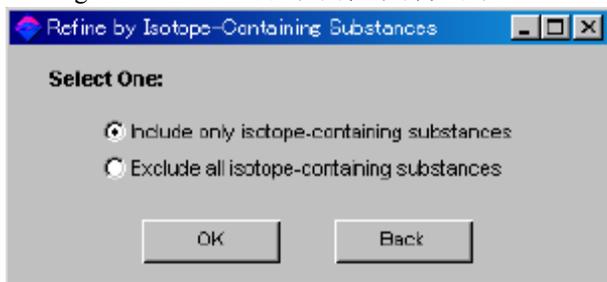
当有太多答案出现时，你可以使用Refine功能去限制并简化这些答案。

进行细化，点击Analyze/Refine键，并选举Refine。Refine Substances对话框会出现。

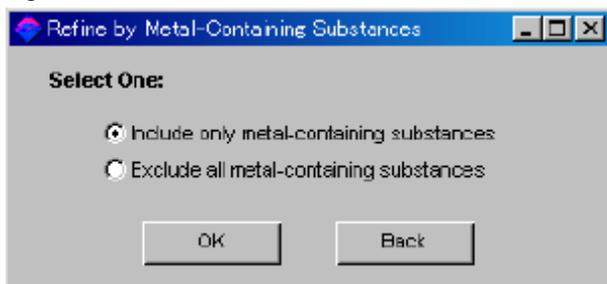


①当你选取化学结构 (Chemical Structure)，绘制板便会出现。这里请在已检索的结构旁绘制取代基团或其它碎片结构，点击Get Substances。之后，结果会被限制至与新加入的条件匹配。用户可以看到其细化的结果结构含有绘制之前输入的两个结构。

②当你点击 Isotope-Containing Substances，可以从同位素物质细化。



③当选取Metal-Containing Substances，可只选含金属原子的物质。



④当选取Commercial Availability，可只选有供货商目录记录的物质。

⑤ 选取Property Data, Refine by Property Data对话框便会出现, 可以从物质特性数值来细化。(只限有亚结构SSM账户)

Hydrogen Acceptors	氢受体
Hydrogen Donors	氢供体
Molecular Weight	分子量
LogP	分配系数(辛醇/水)
Freely Rotatable Bonds	自由转动键
Bioconcentration Factor	生物浓缩因子
Boiling Point	沸点
Enthalpy of Vaporization (*1)	蒸发焓
Flash Point	闪点
Koc	有机物质吸收常数
LogD	离子化合物的分配系数(辛醇/水)
Molar Solubility (*2)	摩尔溶解度
pKa (= -Log Ka) (*2)	-Log(酸碱离解常数)
Vapor Pressure (*2)	气压
Melting Point	熔点

*1 以 760 Torr 计算

*2 以 25 °C 计算

选取需限定的特性, 并且输入或选取数值。你也可以同时选定多个特性。

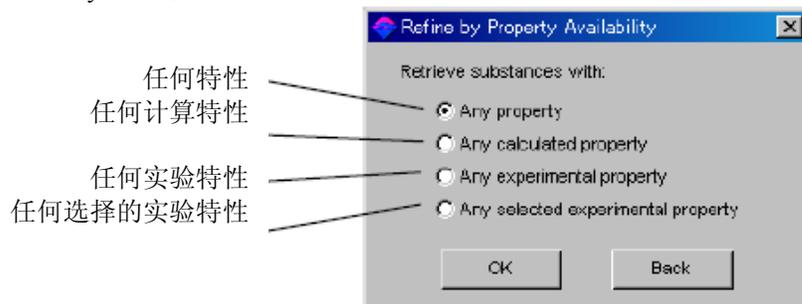
若在方框中选取 Include substances with no value for the specified properties, 结果中没有已选特性数值提供的物质亦会被显示出来。用户可不选择这方框, 则只显示有其特性数值的物质。

在选取Refine by Property Data对话框时，用户会发现4种特性已被选择(Hydrogen acceptors和donors, molecular weight, 和LogP value)。这些特性都是由Pfizer公司的Dr. Christopher A. Lipinski提议的参数(*), 并广泛用于制药行业中，作为口服药物的基本特性。这些数值都包括在Preference Editor之Analyze tab的默认设定。

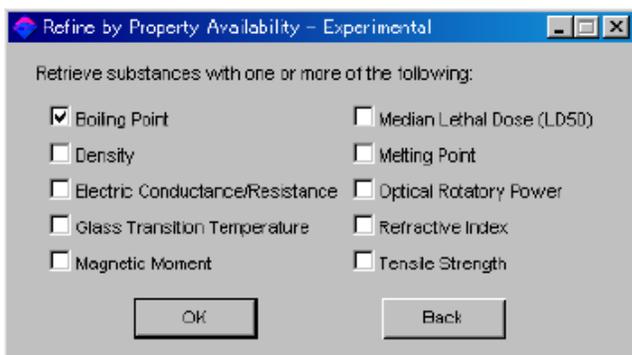
* C.A. Lipinski; F. Lombardo; B.W. Dominy; P.J. Feeney, Adv. Drug Delivery Rev. , 23, 3-25 (1997).

要改变这默认设定，点击Change Preference键。输入所有条件，并以真实的特性数值细化后，点击OK。

⑥选取Property Availability，以现有的特性数据去细化。

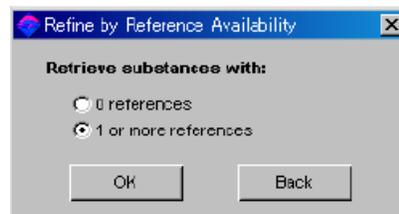


当选择Any selected experimental property，便可检索出有该物性提供之特性，如选择沸点，那结果的物质全都有其沸点的数值提供。



物性	单位
Boiling Point 沸点	(°C)
Density 密度	(g/cm ⁻³)
Electric Conductance/ Resistance 电导率/电阻率	(S) (Ω)
Glass Transition Temperature 玻璃转移温度	(°C)
Magnetic Moment 磁矩	(μB)
Median Lethal Dose (LD50) 致命剂量中位数	(mg/kg)
Melting Point 熔点	(°C)
Optical Rotatory Power 旋光本领	
Refractive Index 折射率	
Tensile Strength 拉力强度	(MPa)

⑦选取Reference Availability，便可选择有相关文献的物质。



结束亚结构检索 (Finish Substructure Search)

点击文件菜单的 New Task (新任务)或主工具列的 New Task (新任务)图像，结束亚结构检索。

如想退出 SciFinder，请选择文件菜单的 Exit (退出)或主工具列的 Exit(退出)图像即可。

第四章 相似结构检索 (Similarity Search)

若用户的账号附有 SciFinder Substructure Module (SSM) 的功能，就能用相似结构检索以下的物质。

- λ 与已绘画的结构完全相同 (跟第二章的完全相同结构检索相同)
- λ 包含检索结构的多元物质，例如: 聚合物, 配合物等
- λ 结构相似的物质，但元素成份、取代基和其位置有所不同
- λ 结构相似的物质，但只有少部分与检索结构互相符合
- λ 与检索结构相似，但有不同大小的环结构

检索的结果包括以下的数据库。

- λ 物质基本数据 (如名称、结构、CAS 注册号)
- λ 实验特性和计算特性
- λ 摘要、相关参考和书目数据
- λ 供货商目录数据
- λ 物质管制和注册数据
- λ 物质的反应数据 (只适用于有 SSM 账号的用户)

用户可以用细化(Refine) 的功能令检索的结果更加精确。而只有在以结构进行细化后，才能使用分析 (Analyze) 的功能。

预览 (Preview) 和自动提示 (Keep me posted - 只适用于 SciFinder 的用户) 的功能不能在此使用。

相似结构检索简介 (Introduction of Similarity Search)

在相似结构的检索中，SciFinder 会用 Tanimoto 程序来进行检索与查询物质相似的结构，并给予相似评分。

v 相似结构评分

相似结构检索能找出与查询结构最为相似的结构，其 2-D 小分子的相似度会以 Tanimoto 程序来计算。

v 以下是 Tanimoto 的计算公式，评分是以 CAS 的结构描述子为基本：

$$\text{Tanimoto Score} = \frac{100 \times C}{(QS + FS) - C}$$

C = 代表检索结构和结果结构相同的描述子数目

QS = 代表在检索结构中的描述子数目

FS = 代表在结果结构中的描述子数目

v 结构描述子的介绍

- 原子数
- 环数
- 原子排列
- 键排列
- 周边原子
- 相连原子数
- 元素成份
- 环类型

v 相似性的计算中并不考虑以下因素

- λ 氢原子的数目
- λ 离子
- λ 同位素标识
- λ 立体结构

v 多元物质的处理

- λ 每一个多元物质的成份，都会被给予相似评分 (Tanimoto score)。最高评分的成份物质，将会在分析相似的结果中显示。
- λ 用户检索单一物质时，点击 Get Substance 后，按下 Filter 中的 Structure components 即可。

v 注意事项

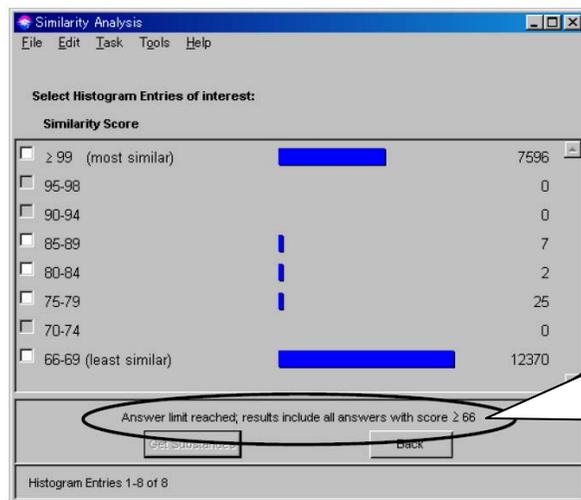
- λ 相似检索并不适用于 R 基团、可变的原子、重复单元和可变的取代位置工具。
- λ 分析和细化不适用于相似结构检索。
- λ 在细化结果时，相似评分将不会显示。
- λ 相似评分不能以 sfr 形式保存 (只适用于 SciFinder)。
- λ 不能使用预览功能。

v 相似评分的显示

- λ 以整数显示，不设小数点。

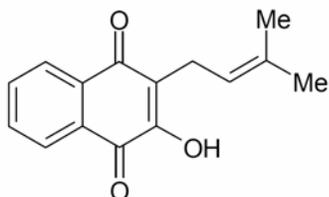
v 系统限制

- λ 只会显示 60 分以上的相似结构结果。
- λ 最多只能显示 20,000 个相似结果。

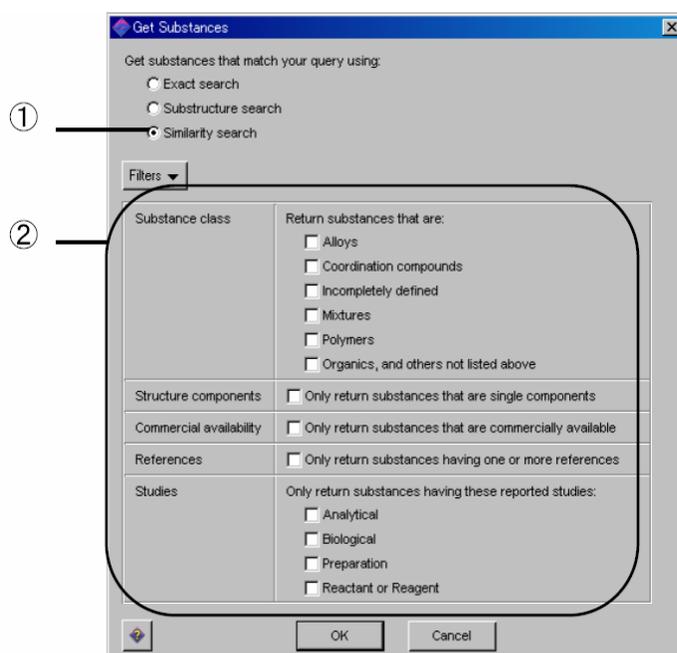


进行相似结构检索(Performance of Similarity Search)

v 例子：
检索以下的相似结构



当绘制结构后, 点击 Get Substance。Get Substance 对话框将会出现。

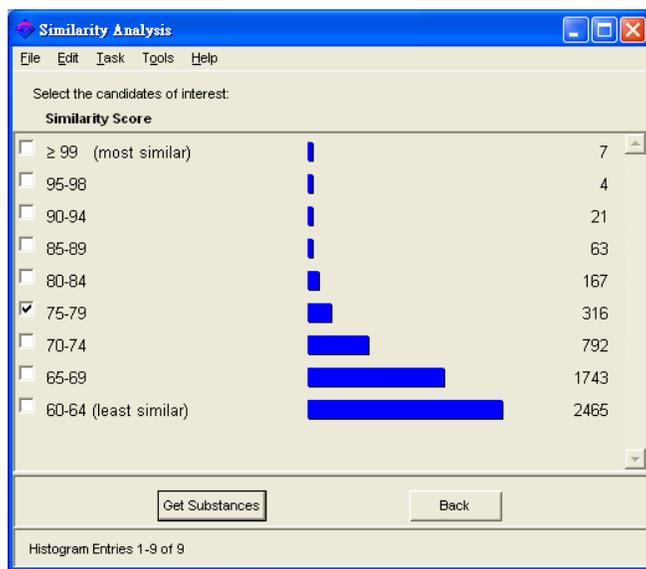


□ 选择 Similarity Search 开始进行相似结构检索。

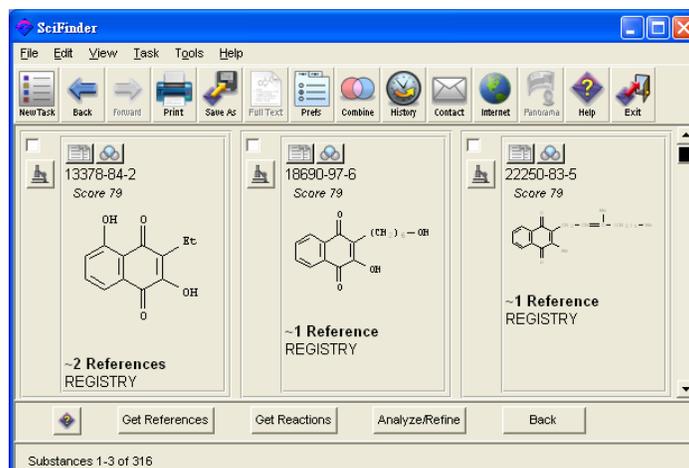
若绘制的结构含有 R 基团或可变原子 (X, Ak), 按下 OK 后, 便会出现以下的结构绘图错误窗口。



☐可点选 Filters，来限制检索结果到指定选择。按下 OK 后， Tanimoto 的相似评分会以统计图表来显示。



选择合适的评分，然后按 Get Substances 查看相似之结构。



相似评分会于 CAS 注册号下显示。

用户可作细化，按下 Analyze/Refine 中的 Refine，细化对话框便会出现结果。

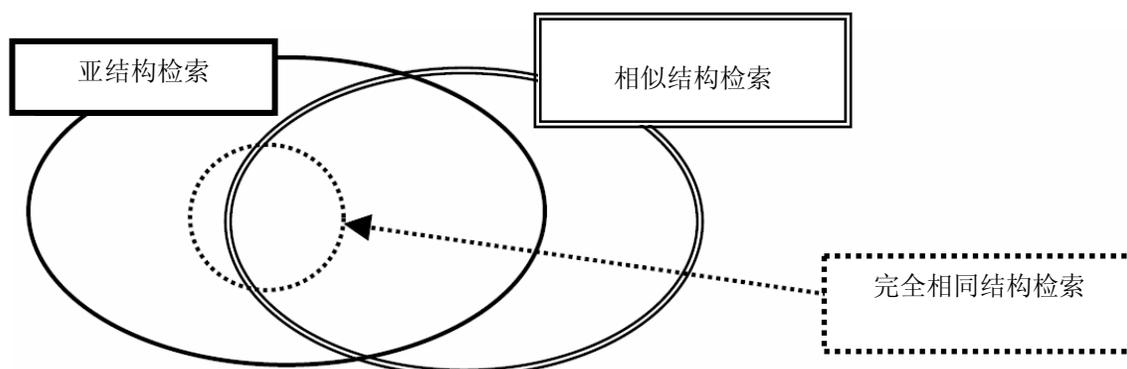
注意：相似结构检索不能直接使用分析功能 (Analyze)，用户必须先以结构进行细化 (Refine)

比较: 完全相同结构检索、亚结构检索和相似结构检索 (Differences between Exact Chemical Structure Search, Substructure)

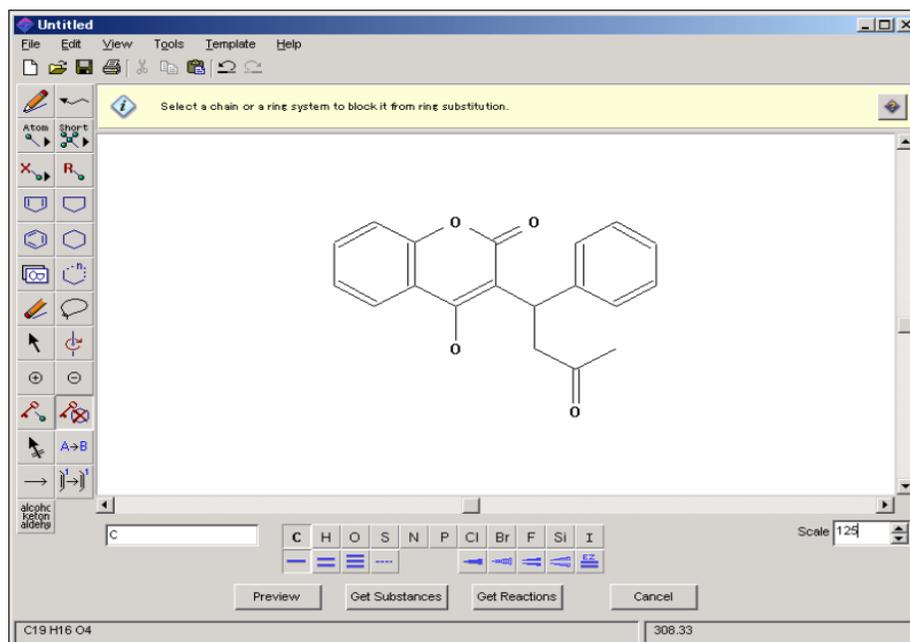
v 不同类型的检索、会得到不同的结果

检索类型	能检索得到的结果	不能检索得到的结果
Exact Search 完全相同结构检索	<ul style="list-style-type: none"> λ 与检索的结构完全相同, 以及其多元物质 (盐、聚合物、化合物) λ 互变异构体 (Tautomers) 	<ul style="list-style-type: none"> λ 含取代基的物质
Substructure Search 亚结构检索	<ul style="list-style-type: none"> λ 与检索的结构完全相同, 以及其多元物质 (盐、聚合物、化合物) λ 互变异构体 (Tautomers) λ 含取代基的物质 	<ul style="list-style-type: none"> λ 两者的结构相似, 但并不是其亚结构, 如乙烷基 (甲基的结果便不会出现)
Similarity Search 相似结构检索	<ul style="list-style-type: none"> λ 与检索的结构完全相同, 以及其多元物质 (盐、聚合物、化合物) λ 有相似结构的物质, 但其元素成份、取代基和其位置与检索的结构不同 λ 两者的结构相似, 但并不是其亚结构, 如乙烷基 (甲基的结果便不会出现) λ 物质含有的环数目和检索的结构不同 (输入 6 - 5 环时, 有可能获得 6 - 6 环的结果) 	<ul style="list-style-type: none"> λ 结果的结构有较大的取代基 (相似程度低)

三种检索的相互关系



v 具体例子：利用不同的检索方法来查询华法林 (Warfarin) 的结构



v 检索结果的数目

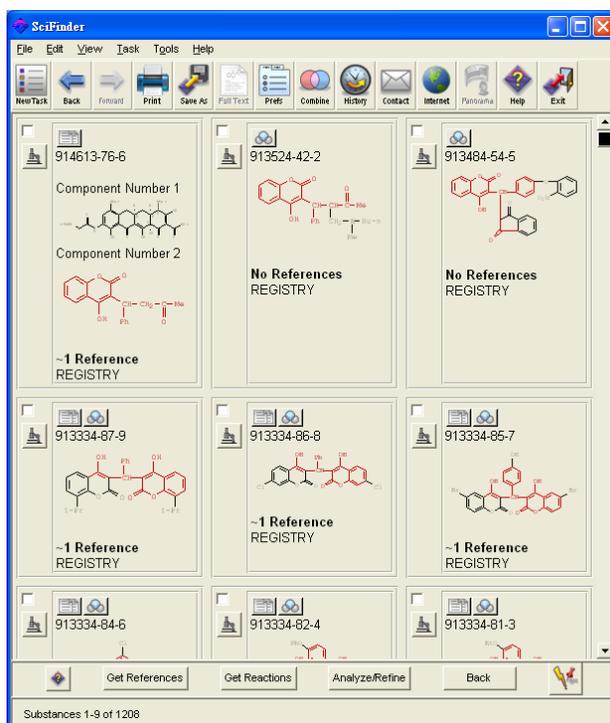
↔ 完全相同结构检索 (137 项)

可检索得到的结果：华法林和其盐、离子、立体异构体、互变异构体、含氘的标识化合物

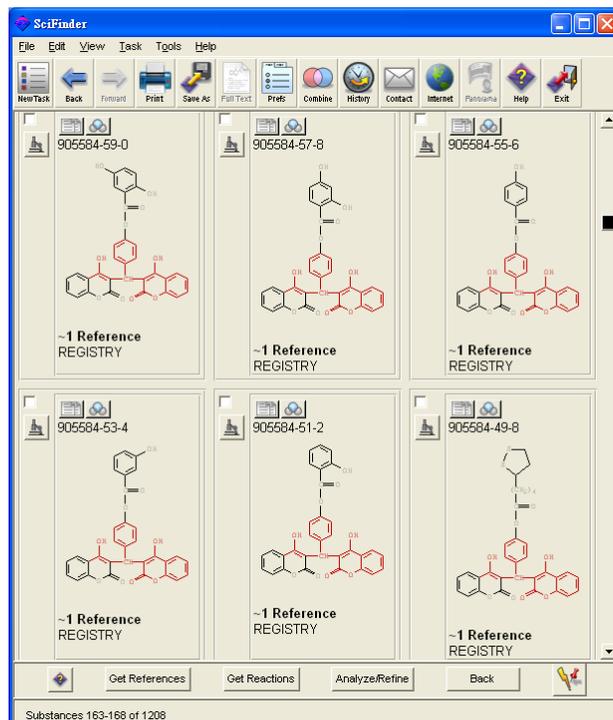
以上环形结构亦会被检索出来

↔ 亚结构检索 (1208 项)

可检索得到的结果：包括结构相同物质，以华法林为取代基的物质，以及其多元物质(盐、化合物、附加物)



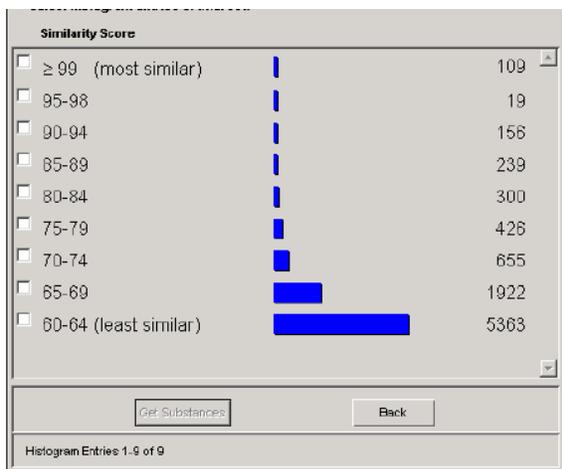
亦可同时查出以下的异构体



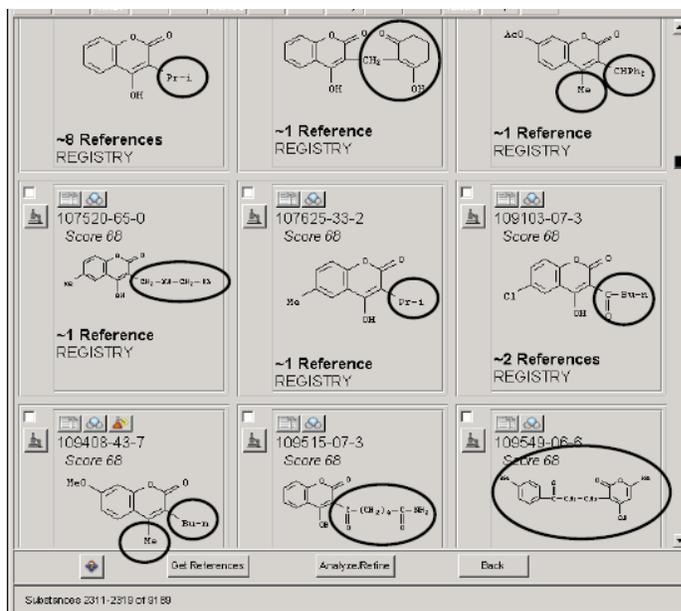
↔ 相似结构检索

可检索得到的结果：包括结构相同物质，以及用 Tanimoto 方法计算相似评分分值超过 60

相似度分布

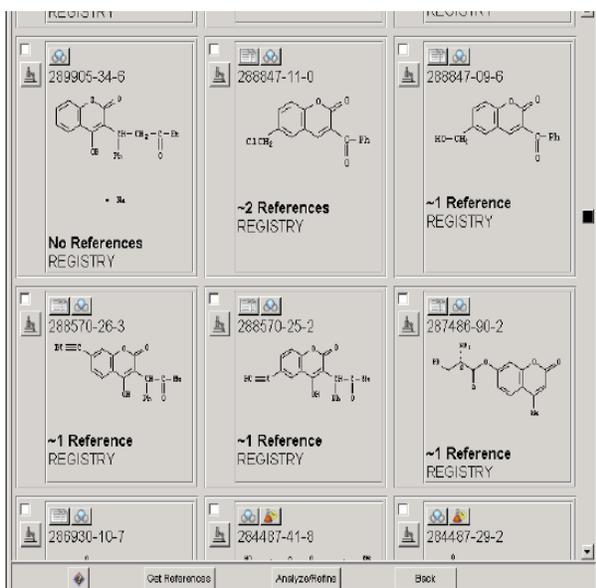


只有用相似结构检索才能取得的结果 (请注意圆圈部分!)



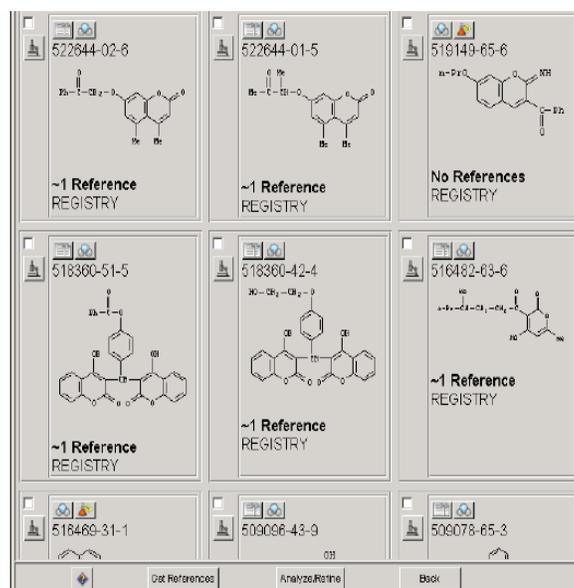
v 完全相似结构检索与其它检索方法的比较

与完全相同结构检索比较



不能在完全相同结构检索中得到 288570-06-9 和 288570-07-0.

与亚结构检索比较



不能在亚结构检索中得到 518360-49-1, 518360-50-4 和 518360-52-6

结束相似结构检索(Finish Similarity Search)

完成相似结构检索后，从文件菜单 File Menu 中选择新任务 New Task，或在主菜单条中按下 New Task 的图像。

结束 SciFinder，从文件菜单 File Menu 中选择离开 Exit SciFinder，或在主菜单条中按下 Exit 的图像。

相似结构检索的参考文件 (Reference Data of Similarity Search)

- λ SciFinder Scholar 的 Help
(按下 Index 和进入 Similarity Searching)
- λ P. Willett, J.M. Barnard, and G.M. Downs, "Chemical Similarity Searching", J. Chem. Inf. Comput. Sci. , 38, 983-996 (1998).
- λ P. Willett, "Similarity-based approaches to virtual screening." Biochem. Soc. Trans. , 31, 603-606. (2003).

第五章 化学反应检索 (Reaction Search)

在 SciFinder 中，用户可用化学结构图标来检索化学反应，并设定物质在反应式中的角色(反应物、试剂、产物或任何角色)。用户也可以用反应位置工具和原子绘图工具作精确的反应检索。

这个章节会说明怎么检索化学反应:

化学结构

- 只指定反应物或产物
- 不指定反应物和产物

官能团

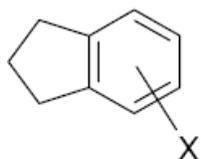
- 只用官能团作检索
- 以官能团和结构一起作检索

在检索化学反应的结果中，用户可以得到以下数据:

- 含有绘画结构和官能团的化学反应式
- 怎样做合成物质物质的合成方法
- 供货商的资料
- 管制化学品目录及其法规
- 文摘、目录数据等和反应式相关的数据

从结构去检索反应式 (Search from One Side of Reaction)

v 检索例子



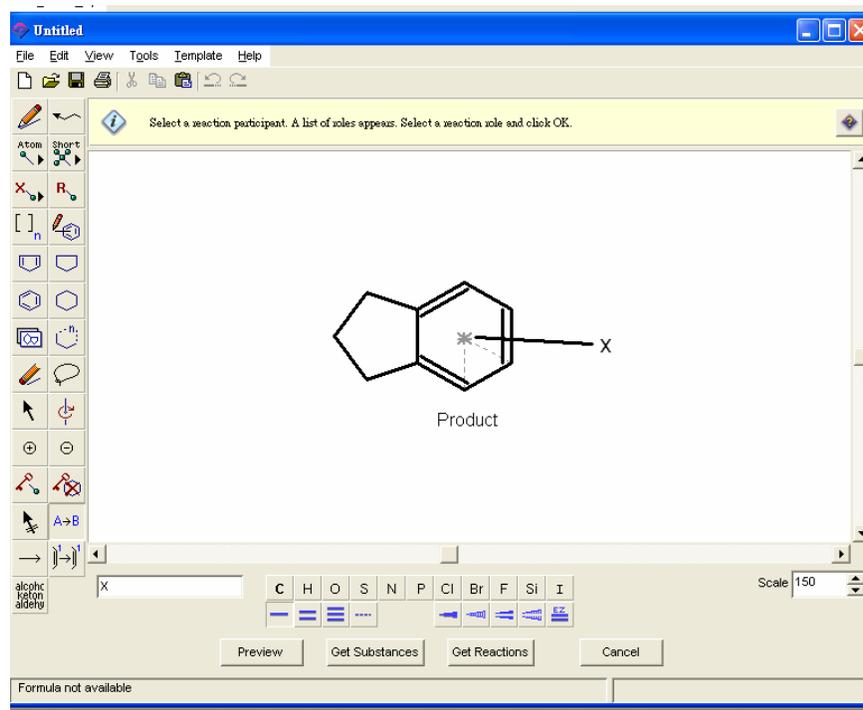
检索左面结构的相关反应

- 产物
- 有一个卤原子连接苯环
- 没有环取代

请参考第一章的说明, 有关怎样绘制结构和绘制结构工具的功能。
用户可从文件菜单中的按下开启旧档, 开启之前保存的结构文件。

绘图方法:

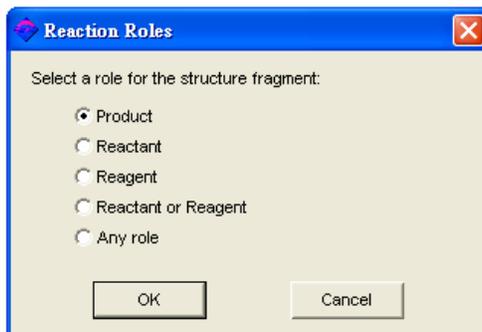
- 用苯环工具绘制苯环。
- 点击环戊烷环工具, 将鼠标移至已绘制的苯环的左边并加以点击, 将苯环和环戊烷连合。
- 点击 X 菜单工具(选择 X: Any halogen 任何卤原子), 在环结构以外的地方点击。
- 点击可变的取代位置工具。
- 点击及拖曳 X 取代基至取代位置。取代基将和其位置将显示为红色。在取代基和取代位置之间会出现一条虚线。
- 最后, 点击锁定环取代工具。



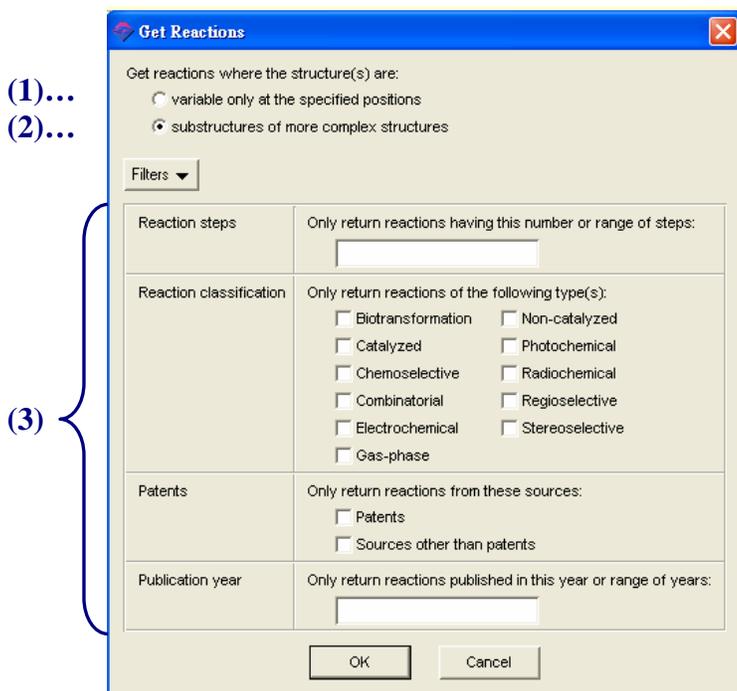
进行化学反应检索(Performance of Reaction Search)

在绘制结构之后，点击反应角色工具和要设定的结构，反应角色对话框将会出现，请设定物质在反应式中的角色。

产物
反应物
试剂
反应物或试剂
任何角色



选取产物，点击 OK，然后在绘制板中点击 Get Reaction。反应检索窗口会出现如下。



Reaction Steps 反应步骤

限制反应步骤

Reaction classification 反应分类

限制反应类型

- Biotransformation 生物转化
- Catalyzed 催化
- Chemoselective 化学选择
- Combinatorial 组合
- Electrochemical 电气化学
- Gas-phase 气相
- Non-catalyzed 无催化
- Photochemical 光化学
- Radiochemical 放射化学
- Regioselective 区域选择性
- Stereoselective 立体选择性

Patents 专利

限制专利文件

Publication year 出版年份

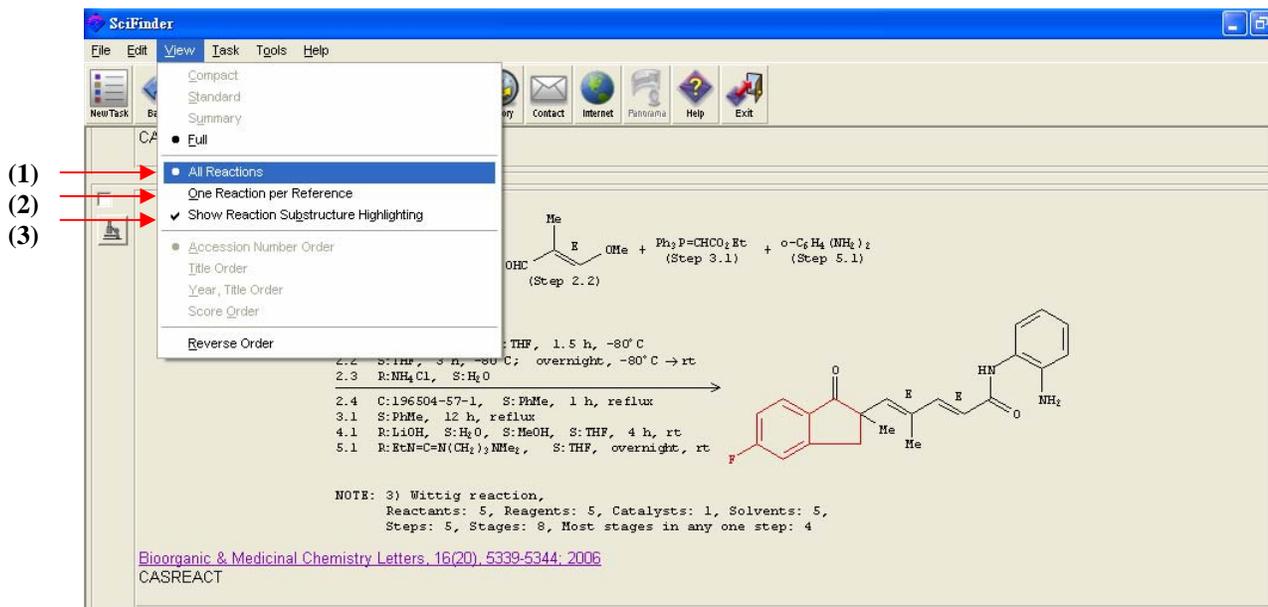
限制出版年份

请选择任何一个检索方法：

- (1) 变化只适用于指定的结构的位置
- (2) 为复杂结构中的亚结构

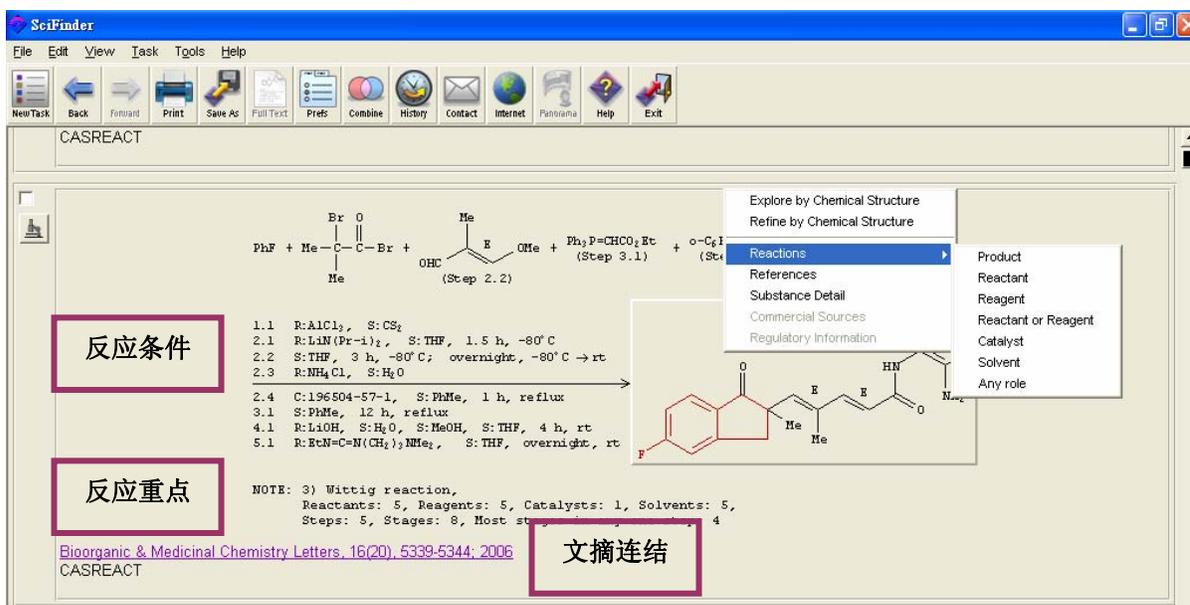
在这个例子中选择 (2) substructures of more complex structures，点击 OK。如想限制检索范围，可点击 (3)Filters 选择。

检索结果便会出现在 SciFinder 的窗口中，用户可从主工具列中的浏览，选择显示所有反应式 (1)或以文摘做单位 (2)。



检索的亚结构部份显示为红色(3)，方便查看。检索结果是按入藏号顺序来排列(最新文献开始)，用户可在主工具列的浏览中选择反序排列。

用户可以从结果中看到反应式、详细反应条件、CAS 的编者写下的重点 (NOTE)和文摘连结。除此之外，以鼠标右键点击反应式中的任何物质，便可轻易取得有关资料。用户可以打印 (Print)和保存 (Save As)检索结果。



多步反应显示 (Display Multi-steps Reaction)

点击显微镜图像，便可看到多步反应式。

The image displays two windows from the SciFinder software interface. The top window shows a multi-step reaction scheme with a microscope icon circled in red. Below the reaction, a list of steps is provided:

- 1.1 R: AlCl₃, S: CS₂
- 2.1 R: LiM(Pr-i), S: THF, 1.5 h, -80°C
- 2.2 S: THF, 2 h, -80°C; overnight, -80°C → rt
- 2.3 R: NHCl, S: H₂O
- 2.4 C: 136504-57-1, S: PhMe, 1 h, reflux
- 3.1 S: PhMe, 12 h, reflux
- 4.1 R: LiOH, S: H₂O, S: MeOH, S: THF, 4 h, rt
- 5.1 R: EtM=C(CH₃)Me₂, S: THF, overnight, rt

A note below the steps reads: "NOTE: 3) Wittig reaction, Reactants: 5, Reagents: 5, Catalysts: 1, Solvents: 5, Steps: 5, Stages: 8, Most stages in any one step: 4". A reference is cited: "Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 16(20), 5339-5344, 2006 CASREACT".

The bottom window, titled "Detail Steps for Reaction 2", provides a closer look at the first three steps:

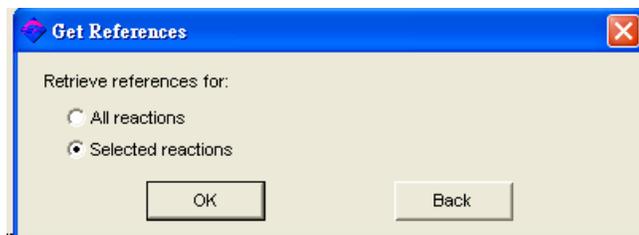
- Step 1: Reaction of PhF with a brominated ketone using R: AlCl₃ and S: CS₂ to form a fluorinated ketone (100% yield).
- Step 2: Reaction of the fluorinated ketone with a lithium salt (R: LiM(Pr-i), S: THF, 1.5 h, -80°C), followed by a second THF step (S: THF, 2 h, -80°C; overnight, -80°C → rt), and a final step with NHCl (R: NHCl, S: H₂O).
- Step 3: Reaction of the intermediate with a Wittig reagent (C: 136504-57-1, S: PhMe, 1 h, reflux).

The bottom window also includes a note: "NOTE: Reactants: 2, Reagents: 2, Catalysts: 1, Solvents: 2, Steps: 1, Stages: 4".

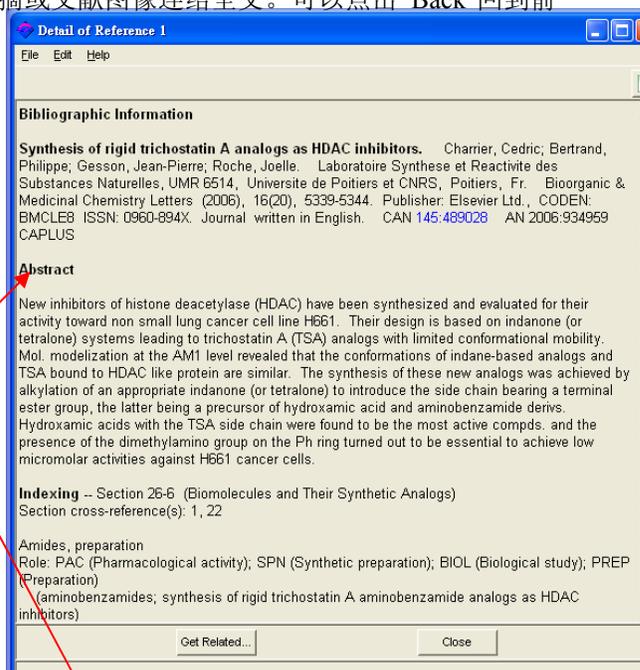
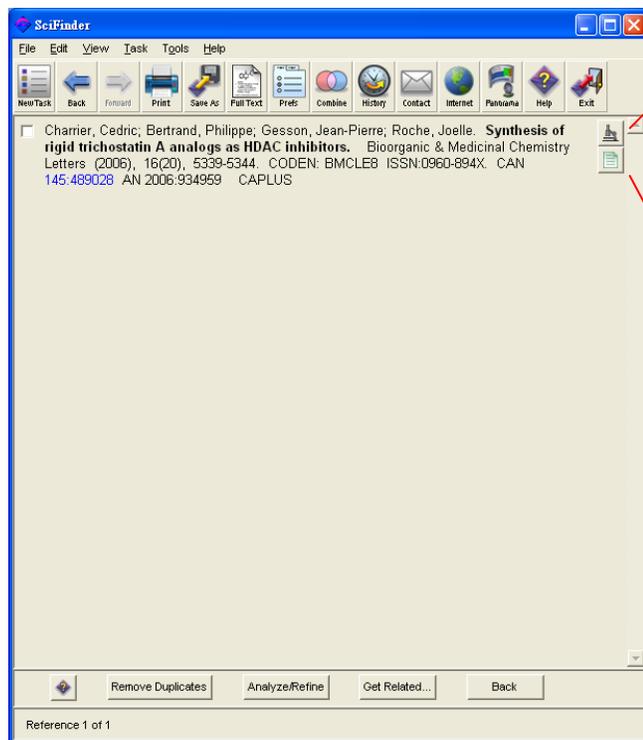
现显示的为第一步至第三步(共有五步)

有关化学反应之文献 (References of Reaction)

用户可选择显示全部或已选取之化学反应的相关文献，点击 OK。

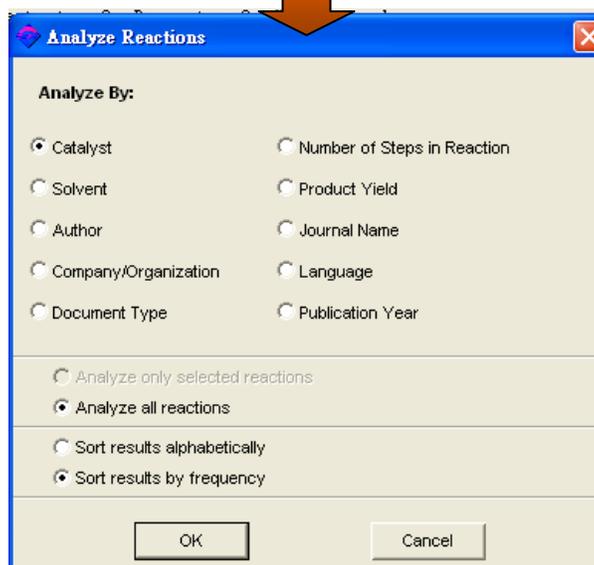
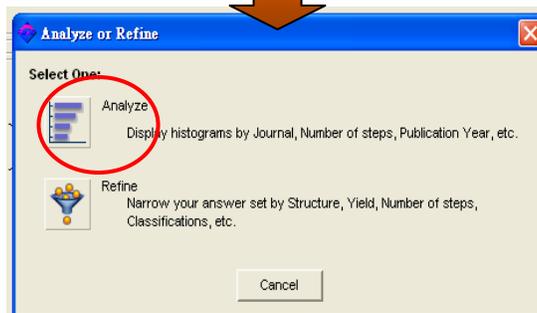
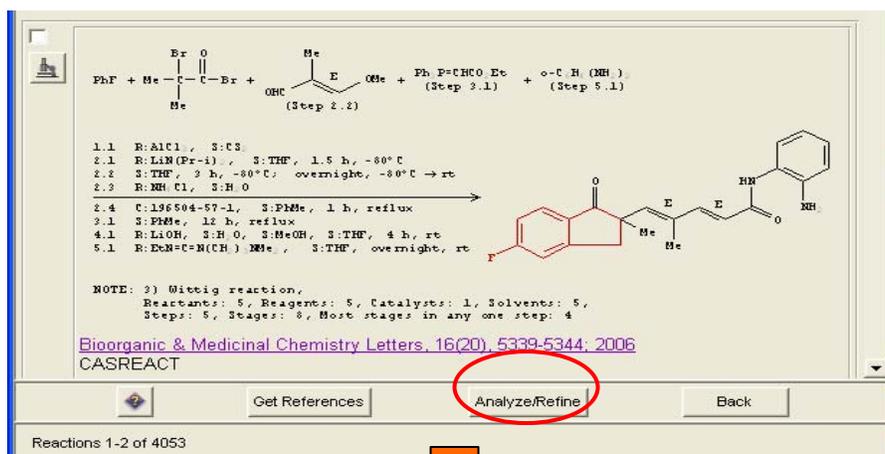


相关的文献结果便会显示出来，点击显微镜阅读文摘或文献图像连结全文。可以点击 Back 回到前一页的反应结果。



分析反应结果 (Analyze Reaction Result)

共有十个反应分析的功能，帮助缩小检索结果范围，取得更精确和合适的结果。点击分类/细化 (Analyze/Refine) 中的分类 (Analyze)，分析反应对话框便会会出现。用户可选择以下不同的选项作反应分析。



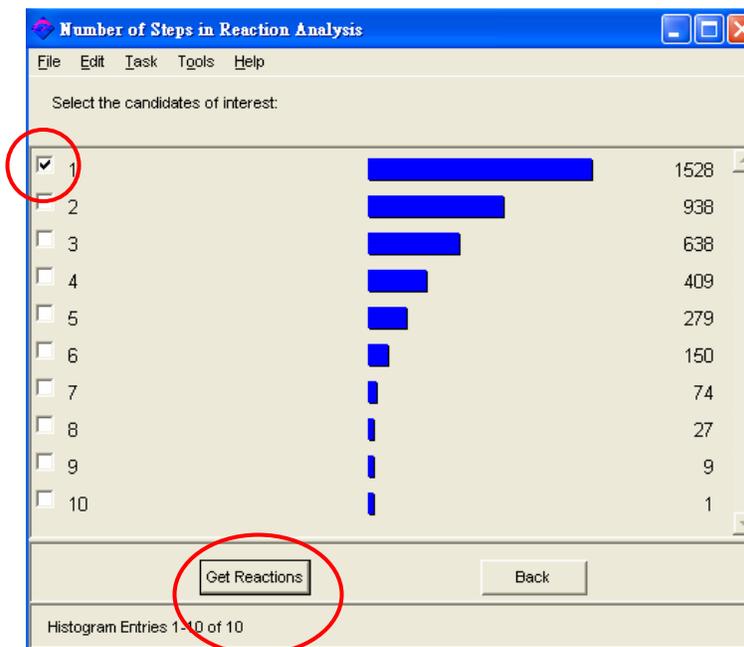
反应分析的定义如下：

选择	定义
Catalyst	以催化剂作分析
Solvent	以溶剂作分析
Number of Steps in Reaction	以反应步骤数目作分析
Product Yield	以产率作分析
Author	以文摘作者姓名作分析
Company/Organization	以公司/团体名称作分析
Document Type	以文献类型作分析
Journal Name	以期刊名称作分析
Language	以原文的语言作分析
Publication Year	以文摘出版年份作分析

更多的选择：

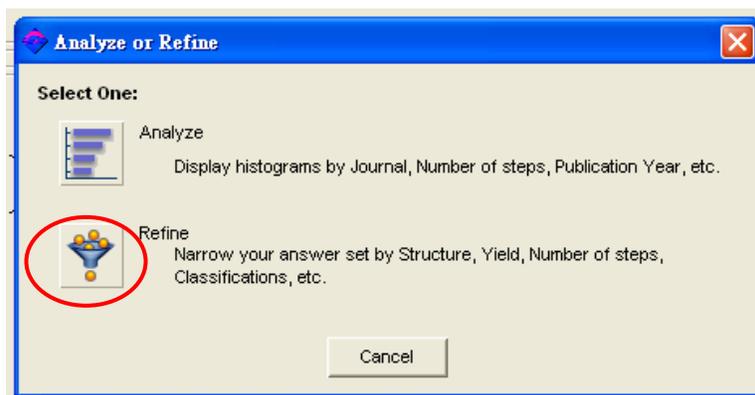
选择	定义
Analyze by selected reactions	只分析已选之反应
Analyze all reactions	分析所有反应
Sort results alphabetically	以英文字母排列
Sort results frequency	以次数多少排列

例子：以反应步骤数目作分析，请点选 Number of Steps in Reaction。在分析之后，点选有兴趣的反应步骤之数目，按下 Get Reactions 便可浏览相关反应式。

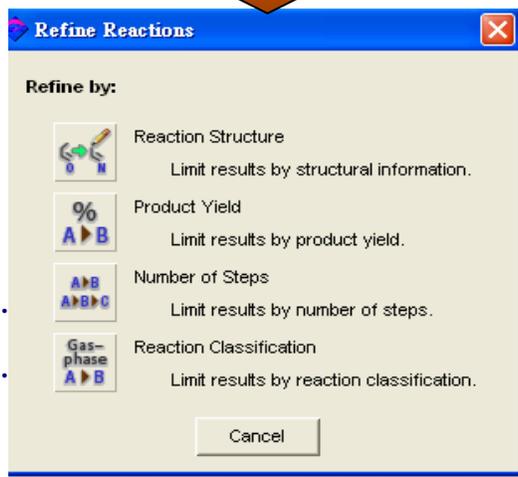


细化反应结果 (Refine Reaction Result)

细化(Refine)功能能有效地缩小反应检索结果。点击分类/细化(Analyze/Refine)中的细化(Refine)，细化反应对话框便会出现。用户可选择以下不同的方向作细化。



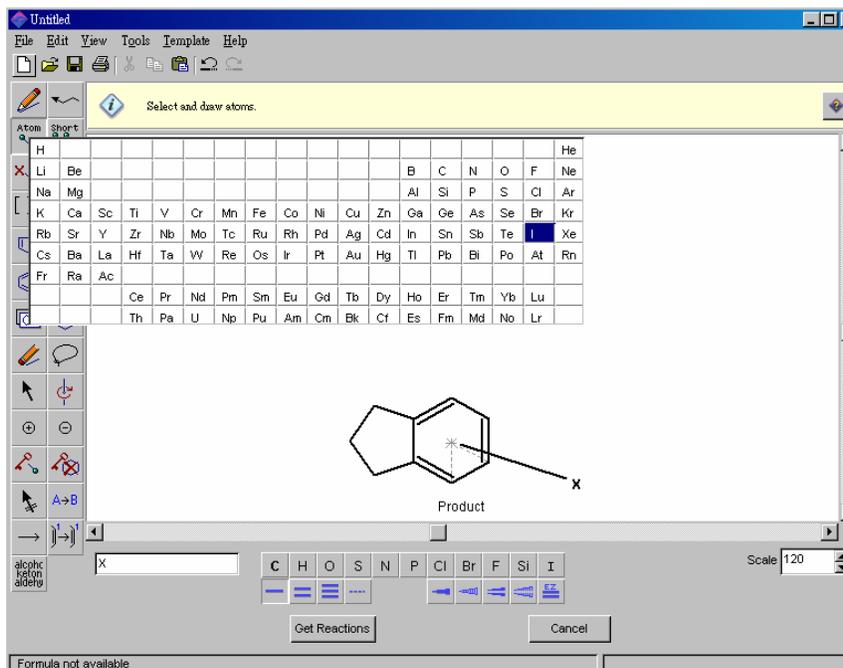
- (1) 反应结构.....
- (2) 产率.....
- (3) 反应步数.....
- (4) 化学分类.....



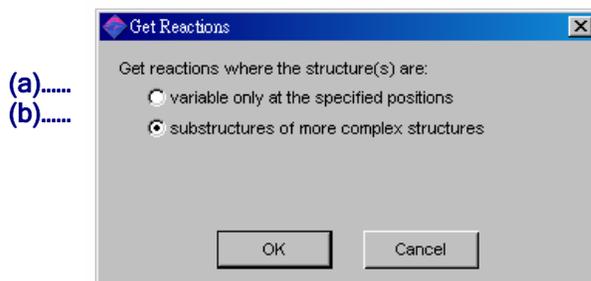
(1) 以反应结构细化

使用反应结构细化 (Refine by Reaction Structure), 用户可在原本已绘制的结构中再加以修改和限制, 重新检索反应式。点选 Reaction Structure 之后, 原本已绘制的结构图标窗口便会再开启。

例子: 如想在限制卤 (X)只是碘(I), 可点击原子菜单工具中的碘。再将鼠标点击到结构图标窗口的卤 (X)上, 卤 (X)即转变为碘(I)。



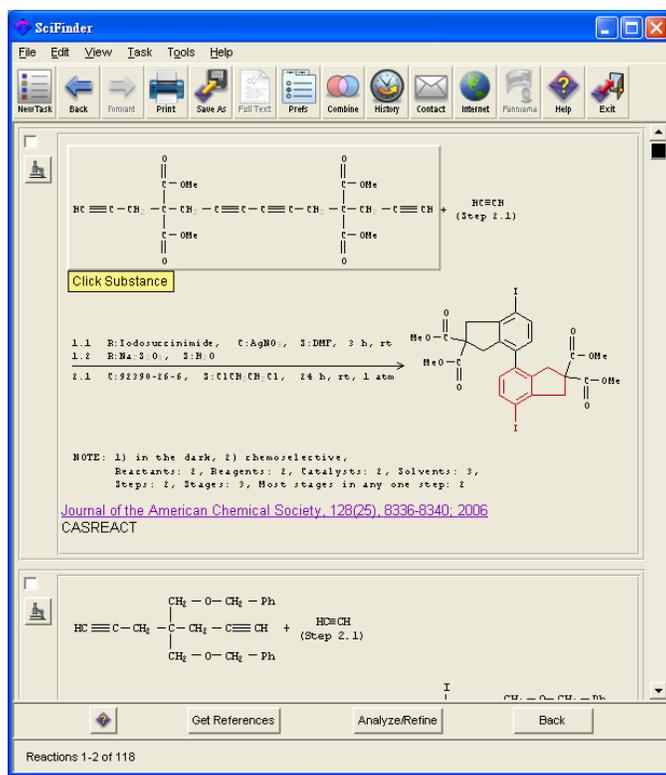
修改反应结构后, 点击 Get Reactions, 反应检索窗口会出现如下。



请选择任何一个检索方法:

- (a) 变化只适用于指定的结构的位置
- (b) 为复杂结构中的亚结构

在这个例子中选择 (b) substructures of more complex structures, 点击 OK。



当确认结果后，用户可以点击 **Back** 回到前一页的绘制结构图标窗口。再点击在窗口中的 **Cancel**，便回到最初的反应检索结果。用户可再选择其它的 **Analyze/Refine** 功能。

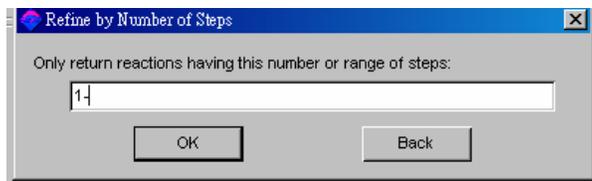
(2) 以产率细化

在 **Refine Reaction** 中，点击 **Product Yield**，便能限制检索反应的产率范围或指定产率。以下为产率细化对话框。

输入最高和最低的产率范围。因有些反应没有产率资料提供，用户可点选 **Include reactions that do not have yield data**，将有关的反应包括在结果内。再按下 **OK** 取得结果。

(3) 以反应步骤数目细化

分别列出单步和多步反应，点击 **Number of Steps**，便能限制检索反应的步骤数目。以下为反应步骤数目产率细化对话框。输入想限制的步骤数目或范围，点击 **OK**，结果将会显示。



点击在窗口中的 **Back**，便回到上一页的反应检索结果。用户可再选择其它 **Analyze/Refine** 功能。

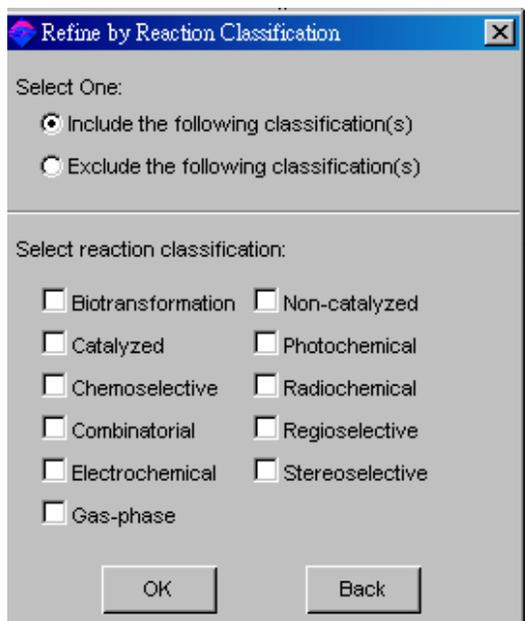
(4) 以反应分类细化

SciFinder 能让用户简便地将反应分类，只选出相关的反应查看。反应分类有：生物转化、催化、组合、电气化学、气相、立体化学等。可选择一个或以上的分类。

点击 **Reaction Classification**，选择包括的分类或不包括的分类。

包括以下分类...

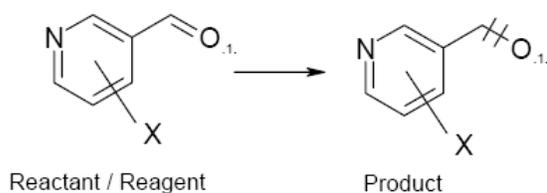
删去以下分类...



指定反应物/试剂和产物的化学反应 (Define the Reactant/Reagent and Product)

检索举例:

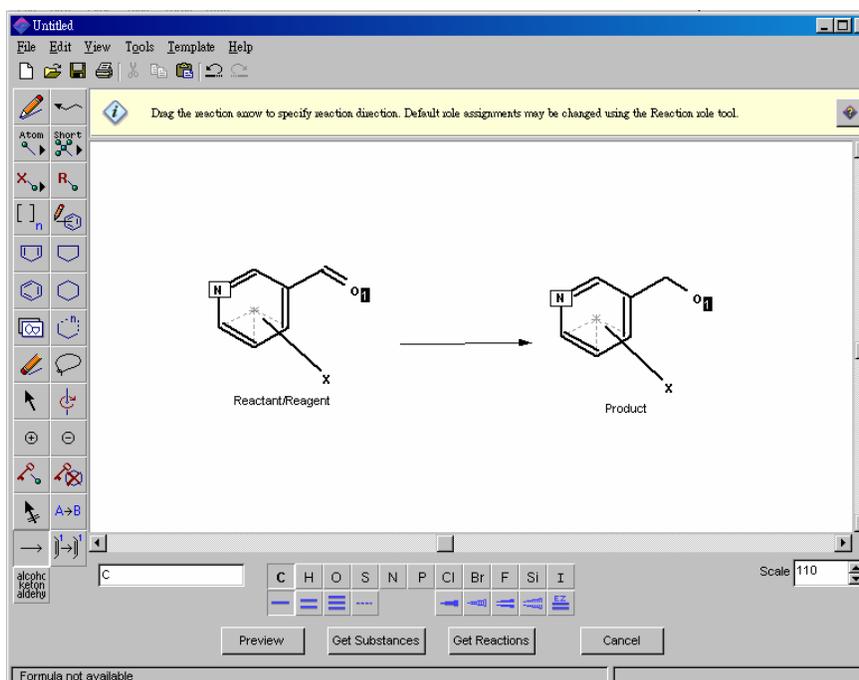
反应位置以双重线显示



- 氮原子不能有取代
- 苯环只连一个卤原子
- 不能有环取代
- C-O 键是反应位置
- 在反应物和产物的氧原子必需配对

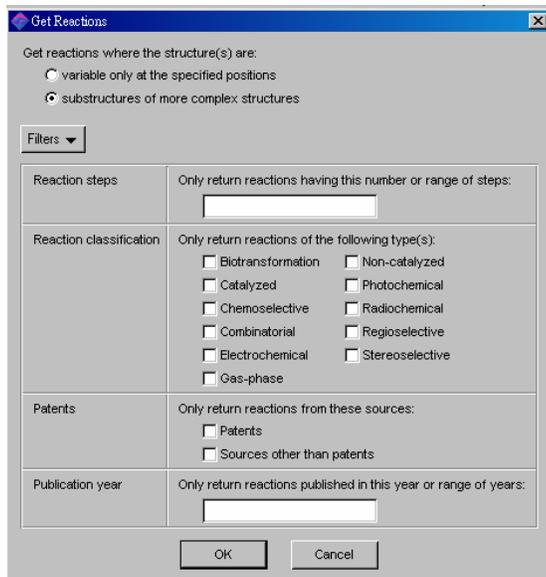
绘制方法:

- 使用苯环工具绘制苯环
- 在原子工具板中选择氮原子, 点击要取代的结点, 碳原子将被氮取代。
- 点击 X 菜单工具(选择 X: Any halogen 任何卤原子), 在环结构以外的地方点击。
- 点击可变的取代位置工具, 点击及拖曳 X 取代基至取代位置。
- 用链工具在苯环画上两个碳原子的链。在末端加上双键。
- 在原子工具板中选择氧原子, 点击链的未结点, 碳原子将被氧取代。
- 用锁定原子取代工具禁止氮原子取代。
- 用锁定环取代工具, 锁定苯环和链子的环取代。
- 点击箭头工具图标来绘制反应箭头。在加上箭头的位置后, 反应角色会自动地被指定。
- 点击原子绘图工具图标, 将鼠标尖端先点击在反应物的氧原子, 然后, 点击在产物的氧原子, 便能指定配对位置为 数 1。
- 最后, 选择反应位置工具图标, 点击 C-O 键反应位置。

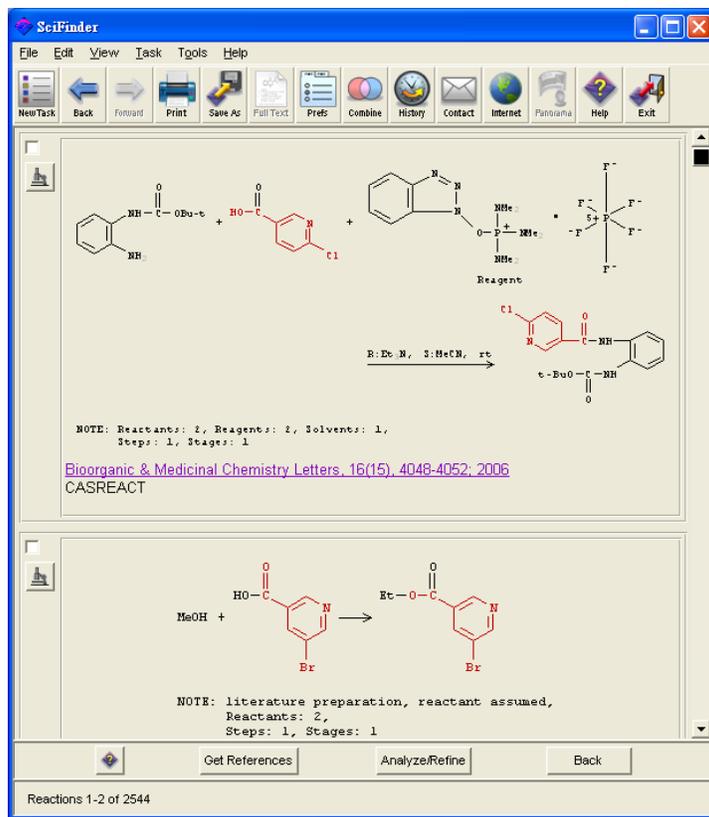


v 进行反应检索

在绘制结构之后，按下 Get Reaction，反应检索窗口会出现。选择 Substructure of more complex structure(检索为复杂结构中的亚结构)，点击 OK。如想限制检索范围，可点击 Filters (请参看第三页)。



SciFinder 的检索结果会出现如下。查看反应式、文摘、使用 Analyze/Refine 的方法和之前介绍的一样。用户也可保存或打印结果。

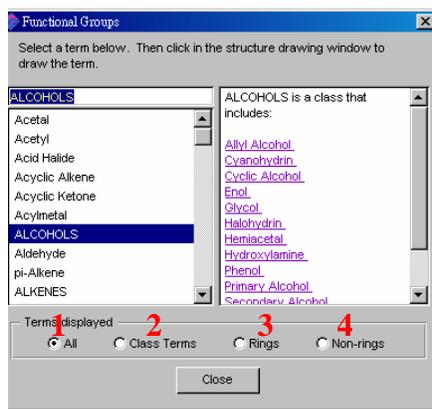


以官能团检索 (Search By Functional Group)

SciFinder 可让用户使用官能团的名称去检索反应。用户可用官能团检索去查询用什么的催化剂或在什么样的实验条件下去进行相关官能团的反应，也可用来限制反应结果，详情可参考 Analyze/Refine 部份。

选择官能团

点击官能团工具图标时，官能团的对话框将会出现。



有四种不同显示形式可供选择：

- (1) 所有官能团 (All)
- (2) 主要官能团分类 (Class terms)
- (3) 有环的官能团 (Rings)
- (4) 没有环的官能团 (Non-rings)

(1) 默认设定是显示所有官能团 (All)，所有官能团分类和官能团都会以英文字母顺序排列。

(2) 主要官能团分类 (Class terms)显示官能团的大分类。用户可点选官能团分类的名称(如图示选择酒精)，便可选择其下的小分类。

(3) 检索有环的官能团，请点击Rings。选择了有环的官能团后，其结构便会在右边显示。如 1,2 C₄NS 官能团，可用在以官能团检索反应中。

(4) 检索没有环的官能团，请点击 Non-Rings。选好之后，其结构便会在右边显示。

用户可直接点选官能团名称或输入名称，官能团的结构便会在右边显示。选好官能团后，点击 Close 回到绘制结构图视窗。用鼠标点击窗口，加入已选的官能团名称。

	化学分类	包括在内的官能团
醇	ALCOHOLS	Allyl Alcohol, Cyanohydrin, Cyclic Alcohol, Enol, Glycol, Halohydrin, Hemiacetal, Hydroxylamine, Phenol, Primary Alcohol, Secondary Alcohol, Tertiary Alcohol
烯	ALKENES	Acyclic Alkene, Allene, Allyl Alcohol, Allyl Halide, Cyclic Alkene, Diene, Enamine, Ketene, Ketenimine, Vinyl Halide
炔	ALKYNES	pi-Alkyne, Alkyne, Enyne
胺	AMINES	Amine Oxide, Aziridine, Chloramine, Cyanamide, Enamine, Hydroxylamine, Imine, Primary Amine, Secondary Amine, Tertiary Amine
碳酸脂	CARBONATE DERIVATIVES	Carbamate, Carbonate, Guanidine, Haloformate, Thiourea, Urea
羧基	CARBOXY DERIVATIVES	Acid Halide, Amide, Amidine, Anhydride, Carboxylate Ester, Carboxylic Acid, Haloformate, Imide, Lactam, Lactone, Peroxy Acid, Peroxy Ester, Thioamide, Thiocarboxy, Unsaturated Acid, Unsaturated Ester
卤化物	HALIDES	Acid Halide, Alkyl Halide, Allyl Halide, Aryl Halide, Chloramine, gem-Dihalide, vic-Dihalide, Haloformate, Halohydrin, Metal Halide, Sulfenyl Halide, Sufinyl Halide, Sulfonyl Halide, Trihalide, Vinyl Halide
杂环	HETEROCYCLES	Aziridine, Cephem, Episulfide, Epoxide, Penam, Purine, 1,2-C ₃ N ₂ , 1,2-C ₃ NO, 1,2-C ₃ NS, 1,2-C ₃ O ₂ , 1,2-C ₃ OS, 1,2-C ₃ S ₂ , 1,2-C ₄ N ₂ , 1,2-C ₄ NO, 1,2-C ₄ NS, 1,2-C ₄ O ₂ , 1,2-C ₄ OS, 1,2-C ₄ S ₂ , 1,3-C ₃ N ₂ , 1,3-C ₃ NO, 1,3-C ₃ NS, 1,3-C ₃ O ₂ , 1,3-C ₃ OS, 1,3-C ₃ S ₂ , 1,3-C ₄ N ₂ , 1,3-C ₄ NO, 1,3-C ₄ NS, 1,3-C ₄ O ₂ , 1,3-C ₄ OS, 1,3-C ₄ S ₂ , 1,4-C ₄ N ₂ , 1,4-C ₄ NO, 1,4-C ₄ NS, 1,4-C ₄ O ₂ , 1,4-C ₄ OS, 1,4-C ₄ S ₂ , 1,4-C ₅ N ₂ , C ₂ S, C ₃ N, C ₃ O, C ₃ S, C ₄ N, C ₄ O, C ₄ S, C ₅ N, C ₅ O, C ₅ S, C ₆ N, C ₆ O, C ₆ S
酮	KETONES	Acyclic Ketone, Cyclic Ketone, <i>o</i> -Quinone, <i>p</i> -Quinone, Unsaturated Ketone
有机金属	ORGANOMETALLICS	Acylmetal, pi-Alkene, pi-Alkyne, pi-Allyl, mu-Carbonyl, Metal Arene, Metal Carbene, Metal Carbonyl, Metal Cyclopentadienyl, Metal Halide, Metal Hydride, Metal-metal Bond, Metal Nitrogen, Metal Nitrosyl, Metal Phosphine, Metal Sulfur, Metallocarbocycle, Organometal

v 以绘制的官能团检索

在结构图标窗口中绘制好官能团后(可多于一个), 必须指定其在反应式中的角色。可用反应角色工具用来指示角色。

用户可以用官能团和化学结构一起作检索 (在以后部分说明)。

λ 检索例子： 转化仲醇至酮，但伯醇在反应中没有被转化。

绘制方法：

1. 点击官能团工具，官能团的对话框将会出现。
2. 拉下菜单，点击仲醇，仲醇的名字将会出现在右边。用鼠标点击窗口，加入仲醇。
3. 绘制酮和伯醇，都是用同一的方法。将酮画在仲醇的右方，伯醇画在仲醇的上方。
4. 点击箭头工具图标来绘制反应箭头，从仲醇至酮，反应角色会自动地被指定。
5. 点击反应角色工具图标，指定伯醇的角色为 **Non-reacting** 没有不参与反应。

反应角色工具的可选角色：

Product	产物
Reactant	反应物
Reagent	试剂
Reactant or Reagent	反应物或试剂
Any role	任何角色
Non-reacting	不参与反应

*Non-reacting 只可用于官能团检索中

以下是以官能团检索的一些限制

- 结构不能结合官能团
- 不能指定官能团中的离子
- 不能指定原子对应位置和反应位置
- 官能团不能旋转
- 最多只可绘制 253 个结点

v 进行官能团检索

在绘制结构之后，按下 **Get Reaction**，反应检索窗口会出现。选择 **Substructure of more complex structure**(检索为复杂结构中的亚结构)，点击 **OK**。

如想限制检索范围，可点击 **Filters**。

Get Reactions

Get reactions where the structure(s) are:

variable only at the specified positions

substructures of more complex structures

Filters ▼

Reaction steps: Only return reactions having this number or range of steps:

Reaction classification: Only return reactions of the following type(s):

Biotransformation Non-catalyzed

Catalyzed Photochemical

Chemoselective Radiochemical

Combinatorial Regioselective

Electrochemical Stereoselective

Gas-phase

Patents: Only return reactions from these sources:

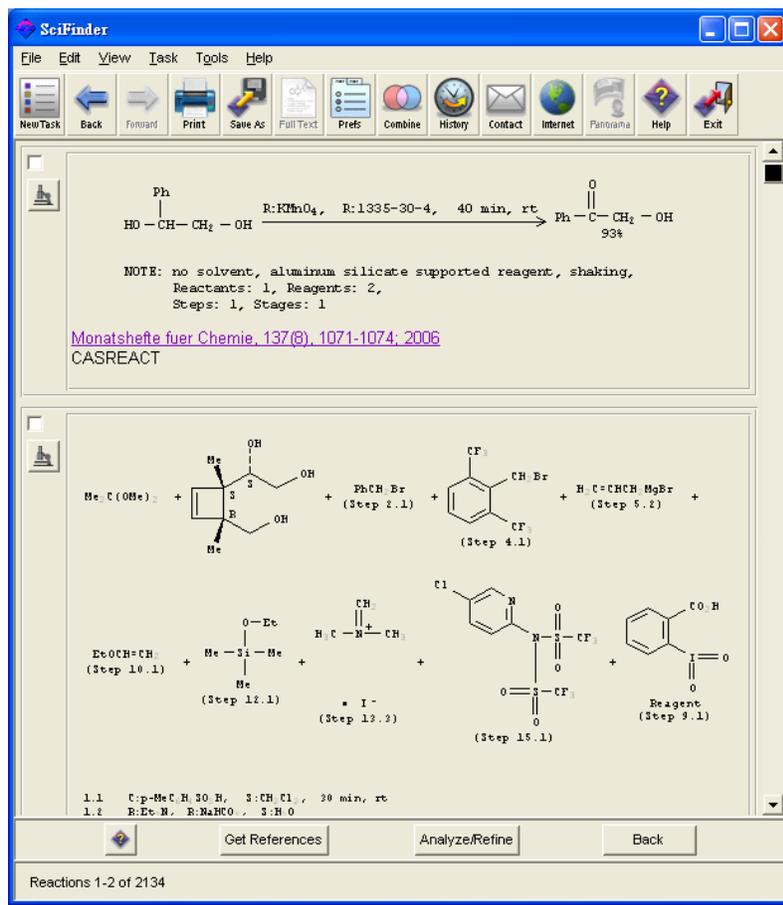
Patents

Sources other than patents

Publication year: Only return reactions published in this year or range of years:

OK Cancel

SciFinder 的检索结果会出现。以官能团检索通常会出现较多的结果。用户可用 Analyze/Refine 细化，其中，结构细化也是一个好的方法。



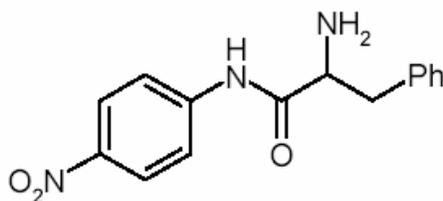
点击显微镜的图像，观看反应式和实验条件。点选小方格选择感兴趣的化学反应，再按下 Get Reference 取得有关文摘参考。之后，用户可以连结观看全文， Get Related 选择更多的相关资料，用 Analyze/Refine 来分析和细化功能。

组合官能团和结构检索 (Search by Combination of Functional Group and Structure)

用户可组合官能团和结构一起作检索，只需在结构图标窗口上绘制功能基和化学结构，并指定其角色便可。

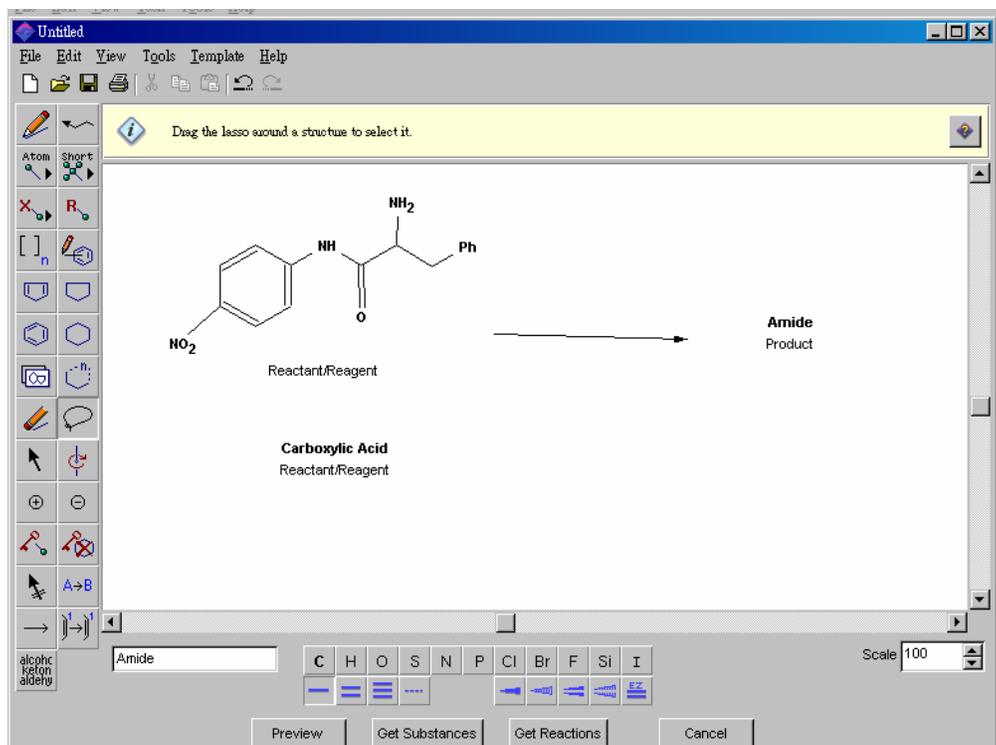
检索例子：

找出由以下物质和羧酸 (Carboxylic acid) 所合成的氨基化合物 (Amide)。



怎样绘制：

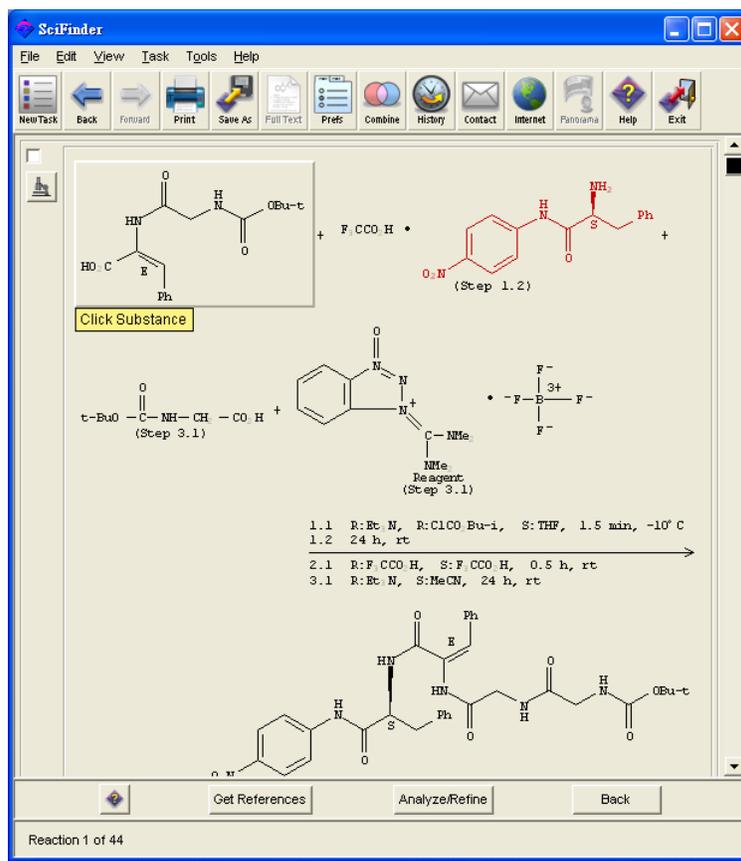
1. 在结构图标窗口上绘制化学结构。
2. 点击官能团工具，选择羧酸，并加到结构图标窗口上的左下方。点击官能团工具，选择氨基化合物，并加到窗口上的右方。
3. 点击反应箭头工具，拖曳鼠标从羧酸到氨基化合物。反应角色将会被指定。



进行反应检索 (Performance of Reaction Search)

当绘制好结构后，点击 Get Reactions，Get Reactions 的对话框便会显示。选择 Variable only at the specified position (只变化指定位置)，然后按下 OK。

反应检索结果会在 SciFinder 的窗口中显示。



如有太多的结果，可用 Analyze/Refine 的功能分析和细化来缩小结果数目。

点击 Get References 显示化学反应的相关文献，文献是以默认设定来排列。用户可在浏览工具列中选取反向排列，文献的排列便倒过来。

点击显微镜查阅反应式的详细资料。用 Analyze/Refine 作分析和细化结果。Get Related 可取得更多的相关信息。

结束反应检索 (Finish Reaction Search)

点击文件菜单的 New Task (新任务)或主工具列的 New Task (新任务)图像，结束反应检索。

如想退出 SciFinder，请选择文件菜单的 Exit (退出)或主工具列的 Exit(退出)图像即可。

Appendix A:

智能检索: SciFinder 怎样去检索结构

什么是智能检索?

SciFinder 有很多计算工具帮助用户进行检索, 找出令人满意的结果。SciFinder 的智能检索能理解结构询问, 检索出最全面的和最多的相关结构结果。

- v 智能检索会理解在结构图标窗中的结构, 并考虑其不同的结构形式, 包括任何有关这结构的物质, 都会显示在结果内。

注意: 智能检索适用于完全相同的结构检索和亚结构检索。

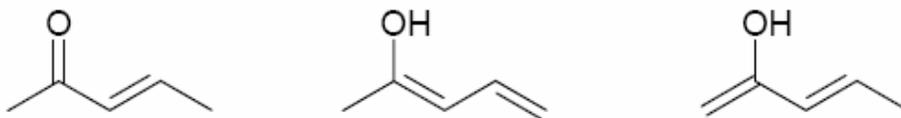
智能检索能找出什么的结构结果?

- v 智能检索系统会自动检索出所有有关的物质, 其原子排列和键与输入的结构相同。检索结果会包括以下物质。

- 相同结构
- 结构同分异构体
- 互变异体 (包括酮-烯醇互变异体)
- 配位化合物
- 含有电荷的化合物
- 离子基
- 含有同位素的物质
- 其高分子

- v 具体的例子:

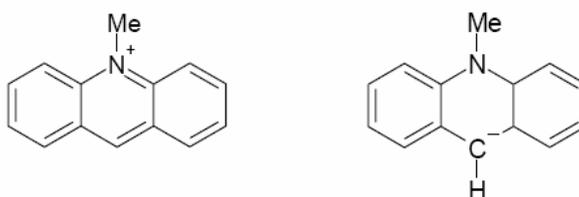
- 在互变异性体 (如酮-烯醇互变异体和共轭键系) 中, 虽然其单键和双键的位置不同, 但 SciFinder 的智能检索也会自动包括这些结构在结果内。只需输入以下任何一个结构, 便能检索全部有关的结构。



不同的氢键的互变异性体会自动被检索。只需输入以下任何一个结构, 便能检索全部有关的结构。



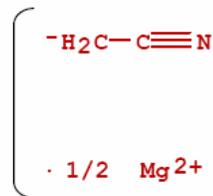
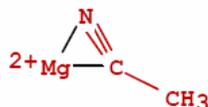
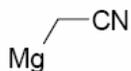
- 如分子为离子物，其电荷附在不同原子的结构会自动被检索。只需输入以下任何一个结构，便能检索全部有关的结构。



- 如结构含有金属原子，其金属原子在结构的不同位置会自动被检索。只需输入以下任何一个结构，便能检索全部有关的结构。

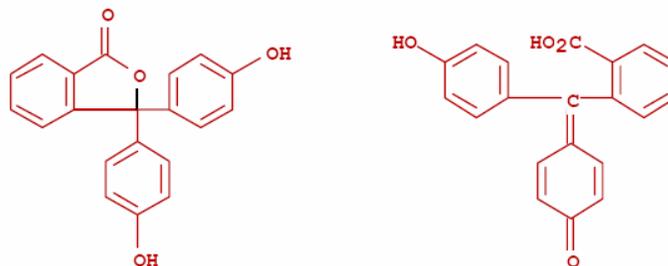
不论怎样绘制含有金属的结构，智能检索也会自动检索其分离结构和环结构。此外，它的水合离子也会被检索。定义：金属原子不包括以下的原子：H, B, C, N, O, F, Si, P, S, Cl, As, Se, Br, Te, I, At, He, Ne, Ar, Kr, Xe

例子：左面的结构为 (HMg-CH₂-CN)，其它右面六个结构也会被检索

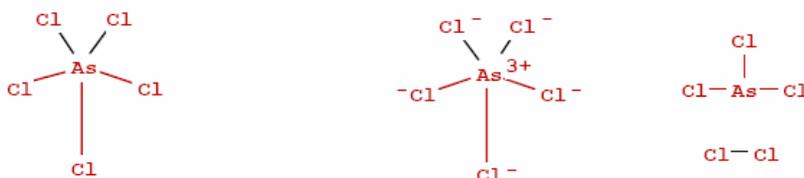


- 在荧光素或邻苯二甲酸的化合物检索中，所有其开环和闭环的结构也会被检索。糖和半缩醛都是一样。

例子：检索左面的结构，右面结构也会被检索。



- 在五卤化磷和卤化砷中，不论怎样绘图结构，以下三种结构也会被检索。其卤原子是 1) 自由离子 2) 连接磷键和砷键 3) 连接其它的卤原子键。



如检索结构有立体键，其立体异构物会被自动分析和显示。如没有立体键，结果会显示所有物质。

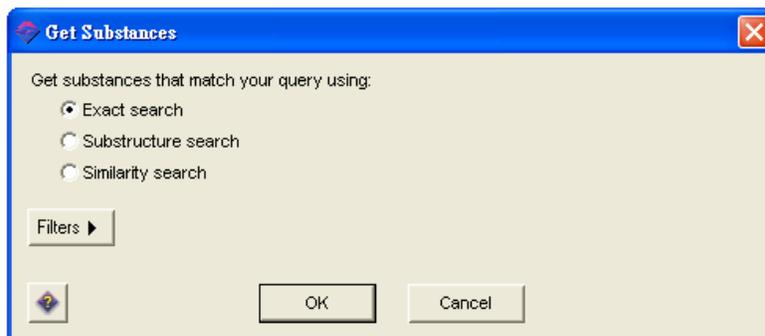
以下物质不包括在智能检索结果内：高分子、复合碳水化合物、生物分子序列、合金、无机物、离子基等。但用户可以直接检索这些物质。

在SciFinder中，结构检索的概念是找出最全面最多的结果，避免有遗漏。用户会在结果中会发现一些意想不到的资料，有助研发。用户可利用Analyse/Refine (分类/细化)的功能去处理结果，作更精确、更合题的检索。

在检索结构后，通常会有多个结果出现。这些结果是有不同的：如其立体结构、盐、电荷或其它因素。用户可按显微镜图像来查看物质的名称、化学结构和物性，确认检索结果。

完全相同结构检索和亚结构检索

如用户的账号有亚结构检索功能，在绘制结构并点击 Get Substance后，便可选择三种不同的结构检索方式。



如用户的账号没有亚结构检索功能，窗口只会显示完全相同结构检索。以下会介绍智能检索怎样在完全相同结构检索和亚结构检索中应用。

完全相同结构检索

在进行完全相同结构检索时，智能检索功能会自动执行，同时检索有关结构的高分子、化合物、盐等。如想结果只显示特定的物质，可在主工具列的 Preference Editor 中选择或点击 "Get Substance" 窗口中的 "Filters"。

所有输入结构的原子在完全相同结构检索下，是不会被加以取代，所有结点可看为“闭”结点。另外，用户也不需要再在结构上划上氢原子 (H)，智能检索会自动分辨。

亚结构检索

当进行亚结构检索时，其智能检索功能和进行完全相同结构检索相似。如想结果只显示特定的物质，可在主工具列的 Preference Editor 中选择或点击 "Get Substance" 窗口中的 "Filters"。

在检索亚结构时，输入结构的原子可以被取代。所有结点可看为“开”结点。而结构中的环和链的取代默认设定是不同的：

- SciFinder会找出以下的环系统取代： 1) 与输入的完全一样 2) 原子被取代 3) 其环系统被另一较大的环系统包住。
- SciFinder会找出以下的链取代： 1) 原子被取代 2) 取代为环部份 3) 取代为链部份。

有关怎样锁定取代和设定取代基(X 菜单工具和R基团工具)，可参阅第三章。

Appendix B

CAS Registry: 物质特性参考表

物质特性	内容
NMR	核磁共振
NMR SOLUTION STRUCTURE (COMPLETE)	核磁溶液组成
NMR SPECTRA	核磁光谱
TWO-DIMENSIONAL NMR SPECTRA	二维核磁共振谱
BORON-11 NMR SPECTRA	硼-11核磁共振谱
CARBON-13 NMR SPECTRA	碳-13核磁共振谱
FLUORINE-19 NMR SPECTRA	氟-19核磁共振谱
METAL NMR SPECTRA	金属核磁共振谱
NITROGEN-15 NMR SPECTRA	氮-15核磁共振谱
PHOSPHORUS-31 NMR SPECTRA	磷-31核磁共振谱
PROTON NMR SPECTRA	质子氢核磁共振谱
SILICON-29 NMR SPECTRA	硅-29核磁共振谱
红外光谱	
IR ABSORPTION SPECTRA	红外吸收光谱
IR EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	红外发射发光光谱
IR REFLECTANCE SPECTRA	红外反射光谱
IR SPECTRA	红外光谱
紫外可见光谱	
UV AND VISIBLE SPECTRA	紫外可见光谱
UV AND VISIBLE ABSORPTION SPECTRA	紫外可见吸收光谱
UV AND VISIBLE EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	紫外可见发射发光光谱
UV AND VISIBLE REFLECTANCE SPECTRA	紫外可见反射光谱
X光	
X-RAY SPECTRA	X光谱
X-RAY ABSORPTION SPECTRA	X吸收光谱
X-RAY EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	X发射发光光谱
X-RAY REFLECTANCE SPECTRA	X光反射光谱
其它光谱	
CIRCULAR DICHROISM SPECTRA	圆二色光谱
ELECTRON SPECTRA	电子光谱
EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	发射发光光谱
ESR SPECTRA	回声光谱
GAMMA RAY SPECTRA	伽马光光谱
MASS SPECTRA	质谱

MOSSBAUER SPECTRA	穆斯堡尔谱
PHOTOELECTRON SPECTRA	光电子光谱
RAMAN SPECTRA	拉曼光谱
散射	
NEUTRON DIFFRACTION PATTERN	中子衍射图
NEUTRON SCATTERING	中子散射
X-RAY DIFFRACTION PATTERN	X光衍射图
X-RAY SCATTERING	X光散射

材料 (力学)	
HYDRODYNAMIC RADIUS	流体半径
ADHESIVE STRENGTH	粘合强度
BENDING STRENGTH	弯曲强度
CONTACT ANGLE	接触角
DUCTILITY	柔性
COMPRESSIBILITY	压缩率
COMPRESSIVE STRENGTH	压缩强度
COMPLEX MODULUS	复数模量
CREEP RATE	坡度
CREEP STRENGTH	抗蠕变强度
ELONGATION AT BREAK	纱线断裂强力
ELONGATION AT YIELD	伸长率
FATIGUE STRENGTH	疲劳强度
FLEXURAL MODULUS	弯曲模量
FRACTURE STRENGTH	断裂应力
FRACTURE TOUGHNESS	断裂韧度
FRICITION COEFFICIENT	摩擦系数
IMPACT STRENGTH	冲击强度
INTERFACIAL TENSION	界面张力
LOSS MODULUS	损耗模量
POISSON RATIO	泊松比率
RESIDUAL STRESS	残余应力
SHEAR MODULUS	剪切弹性系数
SHEAR STRENGTH	切变强度
STORAGE MODULUS	储能模量
SURFACE TENSION	表面张力
TEAR STRENGTH	引裂强度
TENSILE STRENGTH	抗张强度
THERMAL ANALYSIS	热分析
THERMAL CONDUCTIVITY	导热性

THERMAL EXPANSION COEFFICIENT	热膨胀系数
THERMAL FATIGUE	热疲劳
WEAR RATE	磨损率
材料 (电)	
BREAKDOWN VOLTAGE	破坏电压
DIELECTRIC CONSTANT	介电常数
DIELECTRIC LOSS	介电损失
DIELECTRIC STRENGTH	绝缘强度
PIEZOELECTRIC COEFFICIENT	压电系数
材料 (温度·硬度)	
HARDNESS	硬度
MELT FLOW INDEX	熔体流动速率
MICROHARDNESS	微小硬度
SOFTENING POINT	软化点
VISCOSITY	粘度
YOUNG'S MODULUS	弹性模量
材料	
FLASH POINT	闪点
IGNITION POINT	着火点
材料 (形状、透过性)	
PERMEABILITY	透过性
PORE SIZE	孔径
POROSITY	多孔性
PARTICLE SIZE	粒子大小
SPECIFIC SURFACE AREA	比表面积
材料	
MOLECULAR WEIGHT (POLYMERS)	分子量 (聚合物)
MOLECULAR WEIGHT DISTRIBUTION	分子量分布
REACTIVITY RATIO IN POLYMERIZATION	聚合反应率
原子、分子	
BAND GAP	带隙
BOND ANGLE	键角
BOND LENGTH	键长
CRYSTAL LATTICE PARAMETERS	晶胞常数
CRYSTAL STRUCTURE	晶体结构
CRYSTALLIZATION TEMPERATURE	结晶温度
ELECTRON AFFINITY	电子亲和势
ELEMENTARY PARTICLE MASS	基本粒子
IONIZATION POTENTIAL	电离电势
MOLECULAR STRUCTURE	分子结构
MOLECULAR ELECTRIC DIPOLE MOMENT	分子电偶极矩
NUCLEAR BINDING ENERGY	原子核结合能

NUCLEAR ENERGY LEVEL	核能级
NUCLEAR TRANSITION PROBABILITY	核转移率
RADIUS OF GYRATION	回转半径
液体 溶液 化学反应	
ACID NUMBER	酸值
ACID/BASE DISSOCIATION CONSTANT (KA/KB)	酸碱解离常数
CRITICAL MICELLE CONCENTRATION	临界胶束浓度
CLOUD POINT	浊点
DISSOCIATION CONSTANT	解离常数
LOGD	离子化合物的分配系数(辛醇/水)
LOGP	分配系数(辛醇/水)
PARTITION COEFFICIENT	分配系数
POTENTIAL OF ELECTRODE REACTION	电极反应电势
SOLUBILITY	溶解度
VAPOR PRESSURE/VOLATILIT	蒸气压、挥发性
WATER SORPTION CAPACITY	水吸附能
相变化	
BOILING POINT	沸点
DENSITY	密度
DIFFUSION COEFFICIENT	扩散系数
FREEZING point	凝固点
GLASS TRANSITION TEMPERATURE	玻璃转化温度
HEAT CAPACITY	热容量
LIQUID CRYSTAL TRANSITION TEMPERATURE	液晶转化温度
MELTING POINT	熔点
PHASE DIAGRAM	相图
SUBLIMATION TEMPERATURE	升华点
热力学	
DEBYE TEMPERATURE	德拜温度
ENTHALPY	焓
ENTROPY	熵
FORMATION ENTHALPY	生成焓
FORMATION ENTROPY	生成熵
FUSION ENTHALPY	溶解焓
FUSION ENTROPY	溶解熵
GIBBS FREE ENERGY	吉布斯自由能
HELMHOLTZ FREE ENERGY	亥姆霍兹自由能
音 声波	
ACOUSTIC IMPEDANCE	声阻抗
SOUND ATTENUATION COEFFICIENT	音衰减系数
SOUND VELOCITY	音速
电气	
ELECTRIC CONDUCTANCE AND ELECTRIC RESISTANCE	电导率和电阻抗

ELECTRIC CURRENT-POTENTIAL CURVE	电流电位曲线
SUPERCONDUCTIVITY	超导
磁性	
CURIE TEMPERATURE	居里温度
HALL EFFECT COEFFICIENT	霍尔效应
MAGNETIC ANISOTROPY	磁各向异性
MAGNETIC COERCIVITY	磁矫顽性
MAGNETIC DOMAIN (WALL LENGTH, ENERGY, ETC.)	扇区 (墙长度 能量 等)
MAGNETIC MOMENT	磁距
MAGNETIC SUSCEPTIBILITY	磁化率
MAGNETIZATION	磁化
MAGNETOELASTIC COUPLING COEFFICIENT	磁性弹性结合系数
MAGNETORESISTANCE	磁性抵抗
MAGNETOSTRICTIVE CONSTANT	磁性常数
MARTENSITIC TRANSITION TEMPERATURE	磁转化温度
REMANENCE	残留磁
光学	
FARADAY EFFECT	法拉第效应
HAZE	烟雾
KERR EFFECT (MAGNETOOPTICAL)	科尔效应
LIGHT SCATTERING	光散射
OPTICAL ROTATION	旋光度
REFRACTIVE INDEX	折射率
BIREFRINGENCE	双折射
NONLINEAR OPTICAL SUSCEPTIBILITY	非线性光学感应
放射线	
HALF-LIFE (RADIONUCLIDES)	半衰期 (放射性元素)
RADIATION ATTENUATION/TRANSMISSION COEFFICIENT	辐射衰减和透射系数
生物毒性	
ADME (ABSORPTION, DISTRIBUTION, METABOLISM, EXCRETION)	分布、吸收、代谢、排泄
BIOCONCENTRATION FACTOR	生物浓度指数
HALF-LIFE (BIOLOGICAL)	半衰期 (生物)
LC50 50%	半致死浓度
LD50 50%	半致死剂量
MINIMUM INHIBITORY CONCENTRATION	最小抑制浓度
NOAEL/LOAEL	NOAEL/LOAEL值
TOXIC EQUIVALENCE FACTORS	毒性等量因子

详情请参阅

<<http://www.cas.org/ONLINE/UG/taggedproperties.pdf>>