

CA on CD 数据库简介及检索方法

一. 数据库简介

美国《化学文摘》，Chemical Abstracts，简称CA，是世界最大的化学文摘库，也是目前世界上应用最广泛，最为重要的化学、化工及相关学科的检索工具。CA 报道的内容几乎涉及了化学家感兴趣的所有领域，其中除包括无机化学、有机化学、分析化学、物理化学、高分子化学外，还包括冶金学、地球化学、药理学、毒物学、环境化学、生物学以及物理学等诸多学科领域。

CA on CD 由美国化学学会 (ACS) 下属部门美国化学文摘社 (CAS) 编辑出版，内容对应于印刷版《化学文摘》每月更新，提供了高效便捷的检索途径。收录了世界上约 8000 种科技期刊以及 31 个国家和地区的专利，年文献量约 70 万篇。其文献中 74% 为期刊论文，16% 为专利文献，6% 为会议论文，2% 为学位论文，技术报告和图书各占 1%。期刊文献中 82.5% 为英文文献，中文文献占 5.9%。专利文献中 54.5% 为日本专利，9.7% 为美国专利，中国专利占 0.9%。现有第 10—13 次累积索引及文摘光盘，包括了 1977—1996 年的所有数据，第 14 次累积索引及文摘光盘将于 2002 年出版。

					
25 Years of CA on CD	14CI on CD	13CI on CD	12CI on CD	11CI on CD	10CI on CD
1977-2001	1997-2001	1992-1996	1987-1991	1982-1986	1977-1981

二、检索方法

CA on CD 提供四种基本检索途径：


索引浏览式检索 (Index Browse)

词条检索 (Word Search)

化学物质分级名称检索 (Substance Hierarchy)

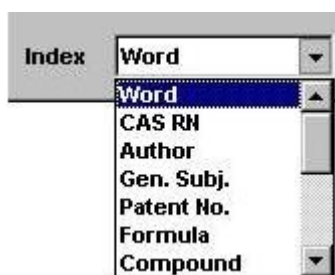
分子式检索 (Formula)

1、索引浏览式检索 (Index Browse)

1.1 在检索菜单窗口,用鼠标点击命令或在 Search 命令菜单中选择 Index Browse 命令,即可进入索引浏览格式检索。



窗口中 Index 字段的缺省值为 Word。用户可点击索引框中的箭头拉开索引菜单进行选择。



Word（自由词，包括出现在文献题目、文摘、关键词表、普通主题等中所有可检索词汇）、CAS RN（CAS 登记号）、Author（作者及发明者姓名）、General Subject（普通主题）、Patent Number（专利号）、Formula（分子式）、Compound（化合物名称）、CAN（CA 文摘号）、Organization（组织机构、团体作者、专利局）、Journal（刊物名称）、Language（原始文献的语种）、Year（文摘出版年份）、Document Type（文献类型）、CA Section（CA 分类）、Update（文献更新时间或书本式《CA》的卷、期号）。

1.2 Find 对话框用于输入检索术语的前缀，目的是加快拖拉时的定位。

1.3 点击 Search 键或按“Enter”键，开始检索。

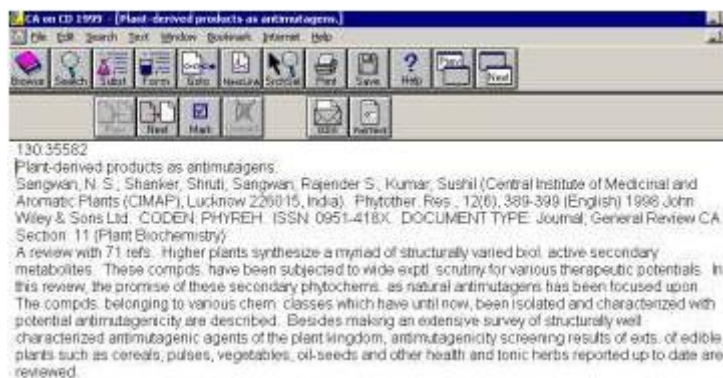
如：我们欲查有关抗致变作用的文献，在“Index”菜单选择 Gen.Subj 项，并在“Find”框输入“mutation”，再从显示的清单选择“mutation inhibitors”，单击“search”可出现检索的中间结果，如下图。检索者可在此判断哪些文章是需要的。



在上图中我们看到有许多图标被释放，成为实图标。

Print	打印检索中间结果
Save	把检索中间结果存入文件
Mark	用于对感兴趣文献做标记，以待下一步的存储和打印
Mark All	对所有中间结果做标记，以待下一步的存储和打印
Unmark	撤消标记
Print MK	打印标记过的文献全记录
Save MK	把标记过的文献全记录储存于文件中
DDS MK	把标记过的记录以标准的 CASDDS 原文索取格式储存
Clear	清屏

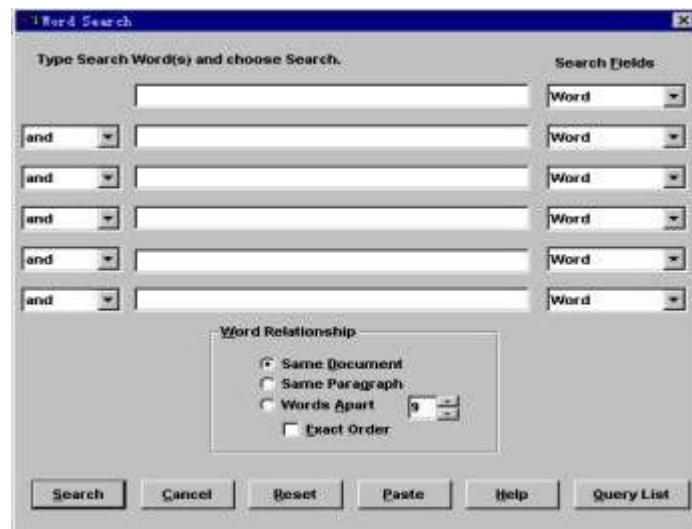
在上图中的文献标题处双击鼠标即可得到一条 CA 的全记录，如下图所示，此时的“Next”和“Prev”按钮用于翻页面到下一记录或前一记录。



2、词条检索 (Word Search)

用逻辑组配方式将检索词、词组、数据、专利号等结合起来进行检索。

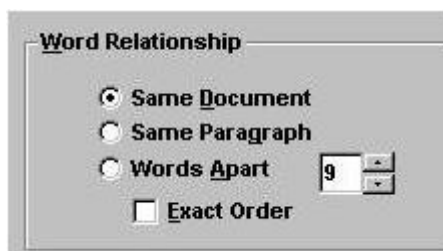
2.1 点击 Search 键或在 Search 命令菜单中选择 Word Search 命令，出现如下界面：



2.2 在屏幕中部的检索词输入方框中输入检索词（词间可用逻辑组配）。

2.3 在右边字段设定方框中选定相应检索词的字段。缺省值为“Word”，左边选项方框中选择词间的关系组配符。此处缺省值“AND”。

2.4 在下图框中设定各检索词在文献记录中的位置关系（同一文献，同一字段或间隔单词数等）。




2.5 用鼠标点击 Search 键，开始检索。检索完毕后，屏幕出现检索结果，显示检中的文献题目。对检索词的输入，系统允许使用代字符“？”及截词符“*”。每一个“？”代表一个字符，如：Base? 代表检索词可为 Bases 或 Based 等，“*”符号表示单词前方一致。另外，还可以输入 OR 组配符连接而成的简单检索式，如：Strength or toughness。

3、化学物质分级名称检索 (Substance Hierarchy)

CA on CD 的化学物质分级名称索引与印刷版的化学物质索引基本相同，是按化学物质的母体名称进行检索的，有各种副标题及取代基。



3.1 在检索窗口中，用鼠标点击  按键或从 Search 命令菜单中选择 Substance Hierarchy 命令，系统即进入化学物质分级名称检索窗口。



屏幕显示物质第一层次名即母体化合物名称索引正文。无下层等级名的化合物条目中直接给出 CA 登录号；有下层名称的物质前则出现“+”符号。

3.2 用户双击选中索引，将分级索引表一层层打开，再用鼠标双击该物质条目即可进行检索。检索完毕后，屏幕给出其相关文献检索结果。

4、分子式检索 (Formula)

分子式索引由 A—Z 顺序排列，检索过程与化合物分级名称检索相似。

5、其它功能

书签功能，是用于把检索到认为是有价值的文献做标记，以备今后需要时调用，只要单击菜单条的“bookmark”，再单击“ADD...”，把感兴趣的文献用这一文献标题作为项目名储存起来。今后如果要看

以前已经检索到的特别有意义的文献，就可以通过“bookmark”直接调用，而不必进行重复的检索过程。

三、检索结果显示

1、可对感兴趣的文献用 Mark 键进行标注，或用 Unmark 键取消标注。

2、击 SaveMk 键存储所标注的检索结果，单击 Save 键存储当前屏幕显示内容。

3、击 PrintMk 可选打印格式来输出检索结果，单击 Print 键打印当前屏幕显示内容。

4、双击选中的文献题目，可得到全记录内容。

ChemPrep 数据库简介及检索方法

一、数据库简介

ChemPrep 数据库是由美国科技信息所 (ISI) 为世界各地的化学家提供的崭新而强大的有机化学反应光盘数据库, 是当今先进的信息技术与迅猛增长的化学反应信息完美结合的典范。它将浩如烟海的有机化学文献尽汇于您的指尖, 新的发现, 仅一步之遥。

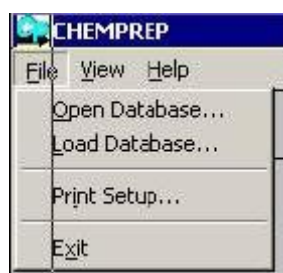
有了 ChemPrep, 就可以清楚地看到每一个新的合成方法和化学反应形象的图解。准确的化学结构、清晰的合成路线、完整的反应流程, 所有的信息一览无余您将以最快的速度确定最适宜的研究方案。ChemPrep 收录了从 1985 年至今超过三十万个化学反应的信息资料, 覆盖化学领域的各个分支学科、各种反应类型, 并专注于选取最具代表性的反应文献和实例, 突出说明 “The Art of the Work”。ChemPrep 收集最新的合成方法, 包括: 新的合成方法与反应, 已知反应的新的应用, 已知合成路线的新发展或修饰, 天然产物的首次实验室合成或全合成。ChemPrep 所收录的期刊均由 ISI 的专家们精心挑选而出。全文照录作者所提供的英文摘要。透过未经删节的摘要, 您可以更深入地理解论文的内涵, 从而节约宝贵的时间和金钱。本数据库每季更新, 即使每年有三万五千多种新的化学反应问世, 您始终可以与世界同步。其它任何类似的数据库或出版物都无法提供如此丰富及时的信息, 在这一点上, ChemPrep 是独一无二的。

ChemPrep 提供了优于其它类似数据库的图形界面及更为强大的功能，而且完全与您的桌面电脑系统兼容整合。譬如，它提供了剪贴板功能，您可以将您所绘制的化学结构剪贴入许多流行的字处理软件所编辑的报告中。同时还提供了化学结构检索功能，确保您的检索结果更有效而相关，因为对一个化合物可以有几个不同的命名，但只有唯一的化学结构，因此利用化学结构检索可以确保检索结果涵盖所有的同义词，提高查全率。

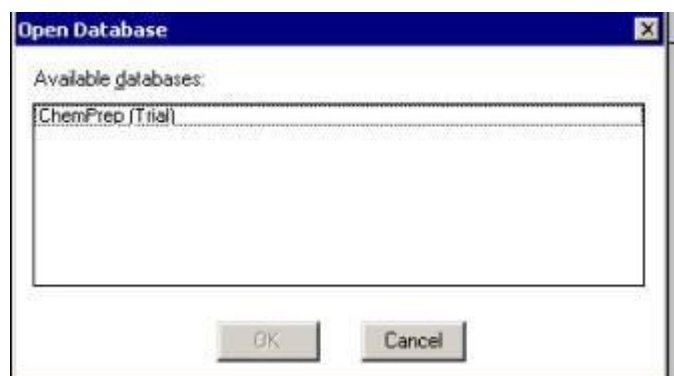
综合全面的数据资料，革命性的检索方法，精确形象的图解，ChemPrep 使您彻底摆脱手工翻检之苦，正确地评价已知，探索新知。

二、检索方法

1. 打开数据库，单击菜单栏上的 file 菜单，出现如下下拉菜单：



单击 Open Database... 出现如下界面：



选择所要检索的数据库，然后单击 OK。则进入到检索界面。

2. ChemPrep 的文本检索功能

a) 单击“Search/Text Search”选择文本检索功能，弹出文本检索菜单。

b) 单击“View/Change Search View”或从工具栏旁



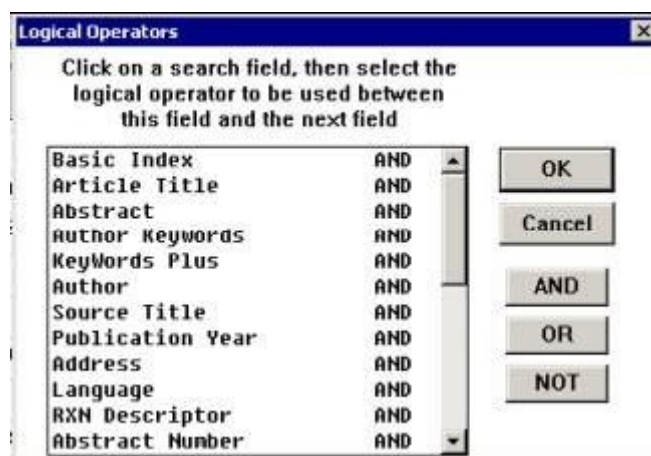
中进行选择文本检索的几种模式：

Article 主要是标题、文摘、关键词等属于基本索引的字段
Reaction 为反应方面的字段 All Data 包括上面二种模式的所有字段。

c) 如检索有关羰基选择性还原的反应实例，要求是二元酮，一个被还原为羟基，另一个不被还原。对这一题目，我们制定了三种检索策略。在 Basic Index 数据项输入 selective and reduction and (ketones or carbonyl)，单击“Search”按钮，检出 14 篇文献；在 Basic Index 数据项输入 selective and reduction and ketones，单击“Search”按钮，检出 9 篇文献；在 Basic Index 数据项输入

selective and reduction and diketones, 点击“Search”按钮, 检出 0 篇文献。一般情况下, 只能以比较宽的方式检索后再通过浏览找到符合要求的文献。

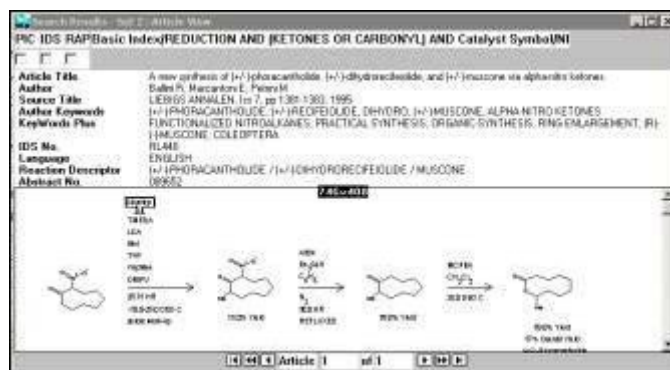
d) 为检索用 Ni 作为催化剂的羰基还原反应, 将检索模式选择为“All Data”, 在 Basic Index 数据项输入 reduction and (ketones or carbonyl), 在 Catalysts symbol 数据项输入 Ni, 并用逻辑与运算符, 点击“Search”按钮, 检出 1 篇。从 c)、d) 的例子看到, 在同一字段的逻辑检索, 运算符自己输入, 在不同字段间的逻辑检索, 画面上缺省的运算符为“AND”, 要变更其运算符要点击菜单条的“Search/Logical Operators”进行设置。如下图:



e) 在实现文本检索时, 还可以利用字典选择检索术语, 当光标停在某一数据项, 点击“Term”按钮可以看到这一数据项的单元词术语, 点击“Phrases”数据项可以看到这一数据项的词组术语。

点击“OK”按钮可以把字典内选中的术语移到相应检索项中。

f) 点击“Show Result”或“Results/Search results”，可以看到检索结果，如下图：



检索结果中，在上方的三个小方框中的 PIC 相当于对这篇文章做标记，IDS 是申请原文投递的 Form，RAP 也是做标记，用于打印时只打印做标记的文献。

g) 为把某次检索的结果储存，点击“File/Export Records”，再根据弹出的画面选择储存的文件名、路径（需要注意的是：选择盘符时要选择 V、U 等，分别对应于用户电脑的 C、D 等）、文件类型等。储存的文件中不包括反应图。

为把某次检索的结果打印，点击“File/Print list”，再根据弹出的画面选择打印机、打印范围等。建议保存后再打印，这样速度上会快点，节约时间。

h) 为把检索提问储存，点击“File/Save Lists”，再根据弹出的画面键入一个以 .lst 为后缀的文件名，并选择储存哪一集合的清单。这一清单可在以后用“File/Restore Lists”调用。调用的 .lst

中包括这一集合的检索提问，调入后形成一个新的集合。如果打开的数据库与原先一样，则结果也一样，下次检索可以直接看结果，如果打开的数据库与原先不同，只能调用提问，再点击“Search”按钮检索，形成一个新集合。“File/Save Lists”储存的内容是提问加结果。如果只要储存提问，点击“Search/Save Text Query”，今后要调用时，点击“Search/Restore Text Query”。

i) 为把检索结果的反应图储存，点击“Edit/Copy Graphical Abstracts”，再调用 Word，利用字处理软件粘贴到 Word 文件中。也可粘贴到 ISIS/Draw 中。建议在拷贝前，用“View/Zoom”放大后拷贝的效果会更好。

j) ChemPrep 的文本检索功能还包括浏览功能，一是按期刊名浏览，另一种是按季度浏览。按季度浏览在新文献检索时还是有一定意义的。

k) ChemPrep 可以限制检索结果只是在某一季度的文献中，它是在前次检索的基础上执行的。点击“Search/Limit”，再从弹出的窗口中点亮所要限定的范围，再点击“Search”按钮检索，即可。

l) ChemPrep 可以处理前几次检索结果间的集合逻辑运算，点击“Search/Combine Search Sets”即可。

3. ChemPrep 的结构检索功能

对于化学反应的检索，结构检索是重要特点。

3.1 结构检索基础操作：如查阅某一化合物的合成，步骤如下：

a) 点击“Search/Reaction Structure Search”进入结构检索的画结构图画面。

b) ChemPrep 提供的是 PSI 画结构程序，画面左边是工具条，底部是键和原子调用工具。画图主要利用工具条的笔、常用环模板、链长定义；利用键和原子调用工具。

c) 点击“Search/Preferences”可进行一些反应方面的定义，如“Exact Search”等。如果定义“Exact Search”表示进行确定结构检索，如果希望在显示结果时，命中一个停顿一下，则选择“Prompt after hits”、“Prompt after screen”。有时这样处理会对评价检索结果有好处。

d) 点击“Search/Start”进行结构检索，完成后弹出一名为“Name Current Search Hitlist”对话框，可以自定义一个命中清单名或利用显示的缺省名，点击 OK。

e) 点击“Search/Return to Main”储存结构提问，可任选一文件名，并注意路径，点击 OK，出现结构证实界面，可选择证实与否。

f) 接着出现“Name Search”对话框，可自定义一个名或用系统显示的缺省名。

g) 进入 ChemPrep 主画面，点击“Results/Search Results”可看到检索结果。

h) 请注意“View”框中的选择：Article、Reaction、Author-Title。选择 Article 显示检出文献的文本信息及这篇文献中的主要反应、选择 Reaction 显示与提问结构匹配的反应。选择 Author-Title 在屏幕上部只显示所有检出文献的作者名和文献标题。

i) 在选择 Reaction 显示时，点击“Search/Reaction Structure Search”可把显示的反应拷贝到 Structure Drawing 的 Query Mode 画面，用作以后的反应检索的提问。

j) 有关检出结果的储存处理与文本检索部分相同。

3.2 某一化合物用作反应产物的检索：

按照 3.1b) 操作，画出提问结构，如果提问结构以前已经画过，可以点击“Search/Open Query”调用提问结构。

a) 点击“Display/Show Reaction”使之成为 Show Reaction 模式，点击工具条“A→B”按钮，点击“Display/Show Reaction”，使解除 show Reaction 模式，点击提问分子任意一点，出现一个对

话框，此时可以定义提问分子为反应物还是反应产物。根据要求，我们定义为 Products，再点击 OK，点击“Display/Show Reaction”使之成为 Show Reaction 模式，在提问分子下显示了 Product。

b) 点击“Search/Start”进行检索，此时检索结果的命中子结构在反应产物一边。

c) 下面操作同 3.1。

Ensemble 数据库简介及检索方法

一、数据库简介

Ensemble 数据库可为药物研发提供超过 167000 种生物活性化合物包括化学结构在内的必要信息。本数据库利用用户容易掌握的界面将数据、文本和图象资料有机地结合起来，便于查询。Ensemble 可从药品专利开始，再通过其临床前和临床研究资料，直至注册信息、市场概况及其他方面的相关资料来跟踪药物。数据库每月更新一次，每年增加约 10000 种新化合物。

数据库中化合物包括以下信息：

分子式，化学名，公司代码，通用名，商标，工业和其它资源，注册信息，药物治疗活性和作用机制，研发阶段，CAS 登记号，专利信息（题目，发明者，应用，编号，出版日期，优先号和出版日期）；相关文献（作者，题目和出版物）和化学结构。

数据库特点

覆盖了全球药物各阶段开发和市场方面的信息。

收载了超过 167000 种已确证生物活性的化合物，超过 275000 篇生物医学的参考资料和会议文章，引用了超过 33000 个专利文献。

详细的与化合物关联的专利、文献和会议资料。

全部药物专论和开发后期化合物的合成方案。

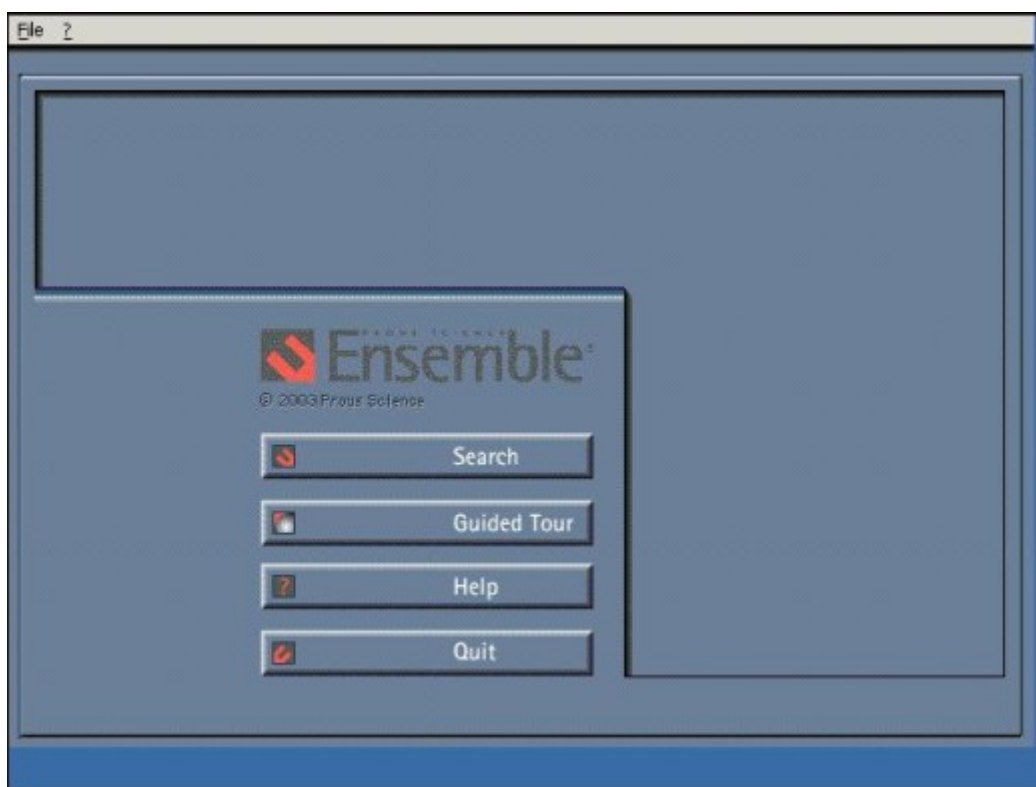
通过药物治疗活性、发明人和开发状态相关联药物化学结构的列表。

在用户容易掌握的菜单界面，用浏览方式来进行有目的搜索；

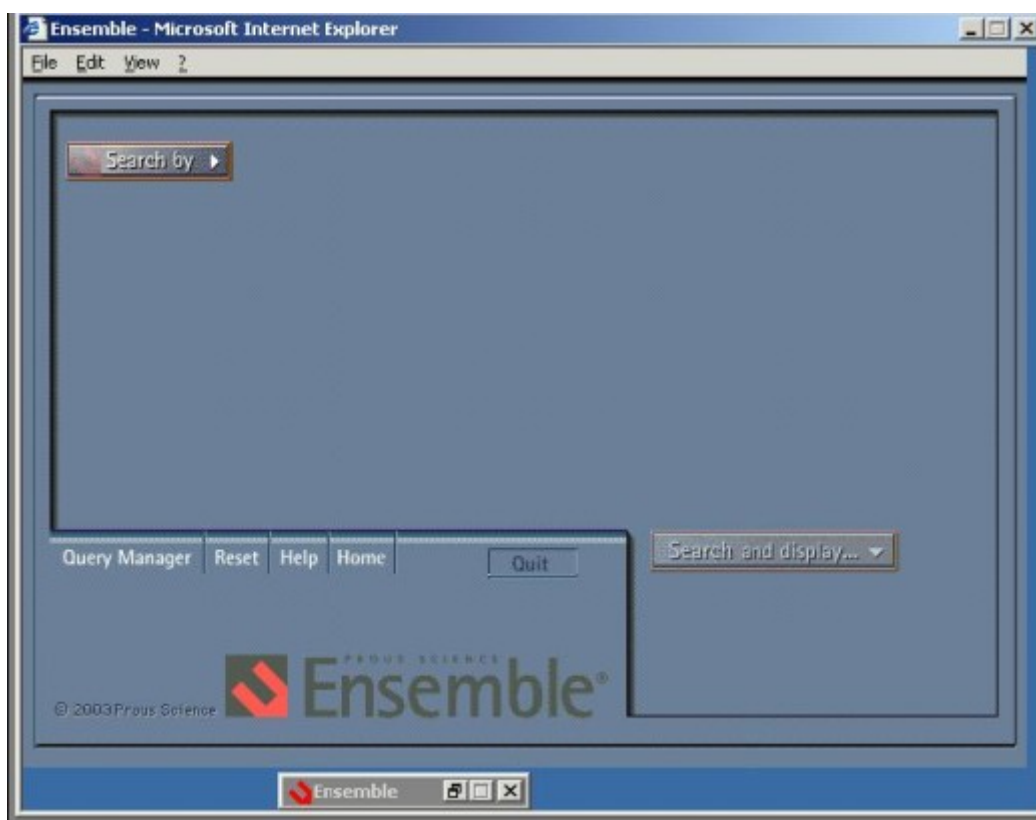
查询管理器可储存和再利用以前的查询方案。

二、检索方法

2. 1 从主界面进入 Ensemble 数据库后，出现如下界面。



点击【Search】后，弹出以下界面。

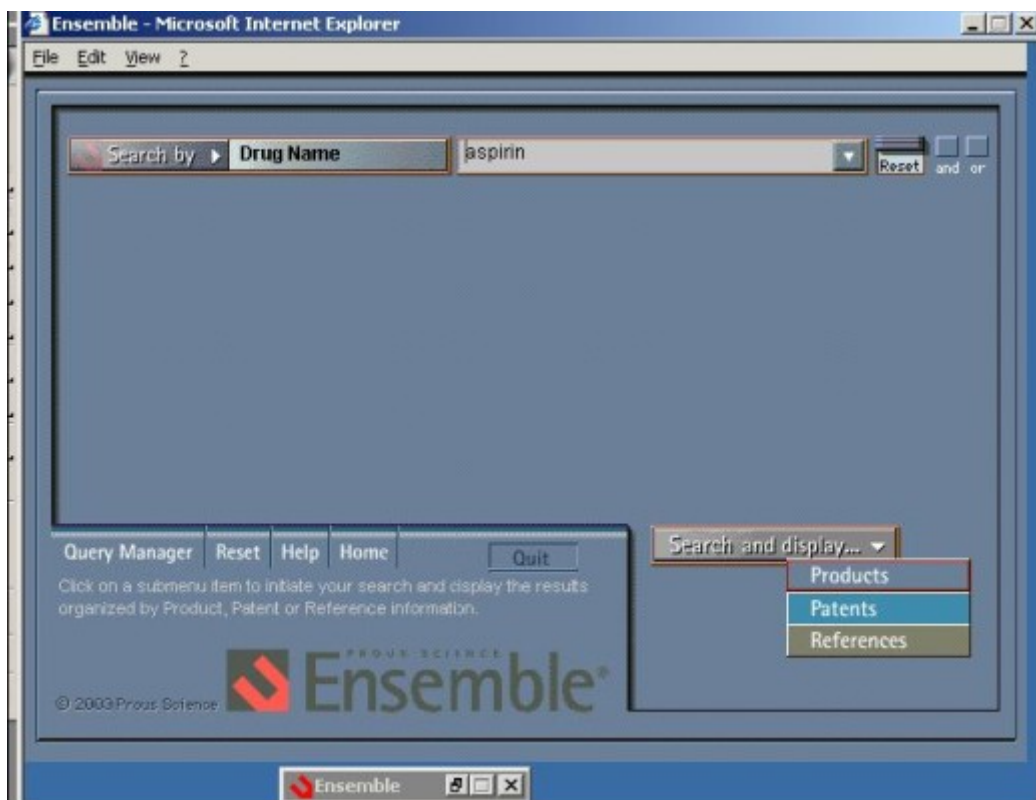


点击【Search by】，其右侧弹出【Product, Patent, Reference, Classsification, Text】选项，选择【Product】后，其右侧弹出如下图所示对话框。选择【Drug Name】选项。

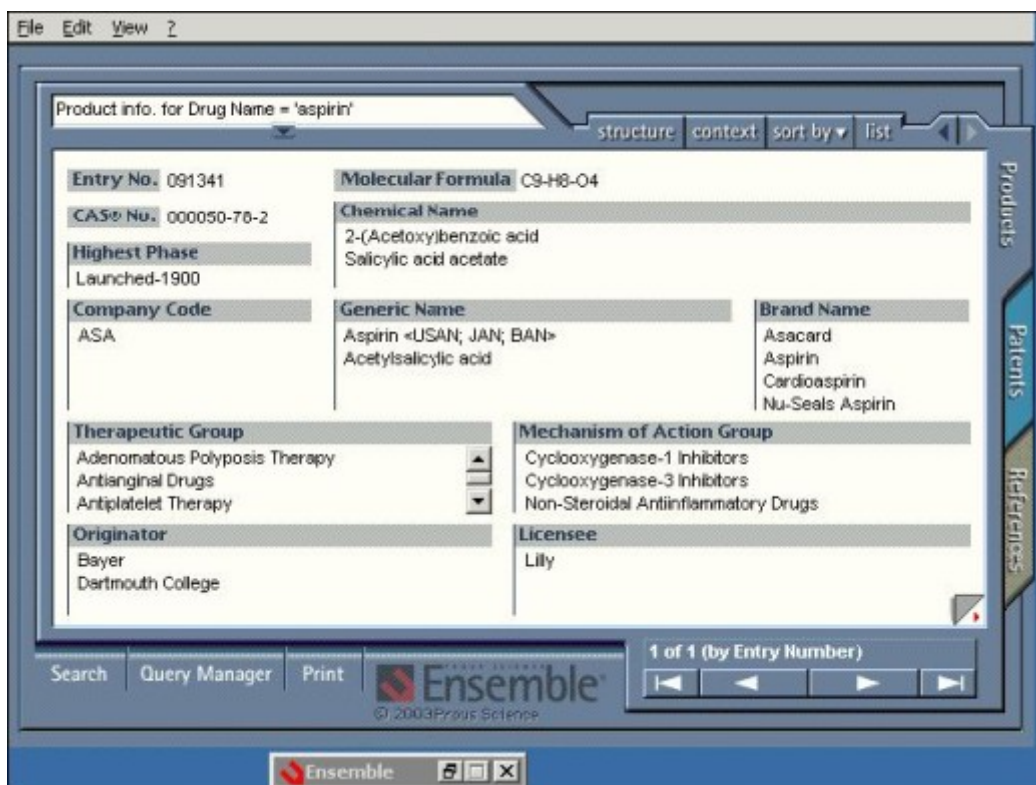
弹出如下图所示对话框后，在对话框内输入关键字，如“Aspirin”。若需重新设置，请输入【Reset】。可通过点击“**And**”或“**Or**”加入其它搜索的选项进行组合查询。



弹出如下图所示对话框后，在对话框内输入关键字，如“Aspirin”。若需重新设置，请输入【Reset】。可通过点击“And”或“Or”加入其它搜索的选项进行组合查询。



点击【Search and display】的【Product】选项，弹出如下界面。此为检索到的具体内容，即为“Aspirin”的一些参数。

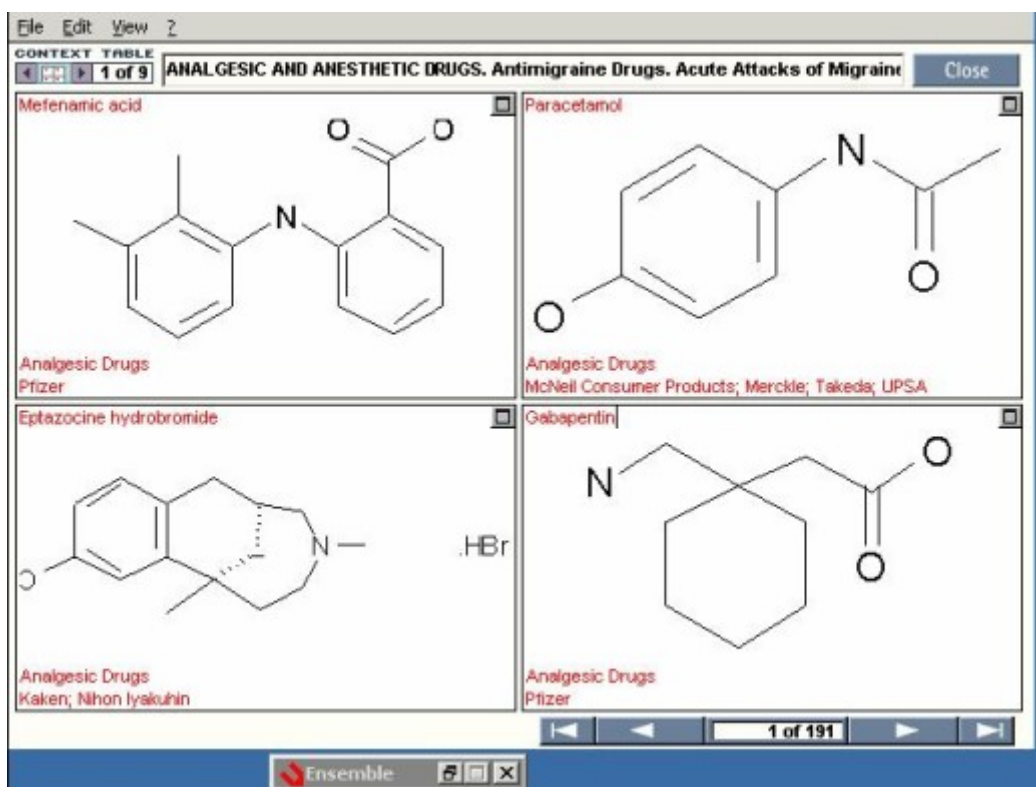


点击【structure】，弹出如下对话框，显示了“Aspirin”的结构。

The screenshot displays the Ensemble database interface for the drug Aspirin. The main window shows product information for 'aspirin' with fields for Entry No. (091341), CAS No. (000050-78-2), Molecular Formula (C9H8O4), and Chemical Name (2-(Acetoxy)benzoic acid). A chemical structure window is overlaid, showing the skeletal structure of Aspirin. The interface includes a search bar, navigation buttons (Search, Query Manager, Print), and a footer with the Ensemble logo and copyright information (© 2003 Probus Science). The right sidebar contains links for Products, Patents, and References.

Field	Value
Entry No.	091341
CAS No.	000050-78-2
Molecular Formula	C9H8O4
Chemical Name	2-(Acetoxy)benzoic acid
Brand Name	Ascard Aspirin Cardioaspirin Nu-Seals Aspirin
Therapeutic Group	Adenomatous Polyposis Th Antianginal Drugs Antiplatelet Therapy
Originator	Bayer Dartmouth College

点击【context】，弹出如下对话框。可利用向左或向右的箭头进行翻页查找，显示的为与“Aspirin”相关的一些物质的信息。



点击“Aspirin”参数界面最右侧的【Patent】选项，弹出以下界面，此为该产品的专利介绍，点击向左或向右的箭头查看内容。

File Edit View ?

Patent info. for NO-aspirin sort by list

Title Comspns. comprising cyclodextrins and NO-releasing drugs

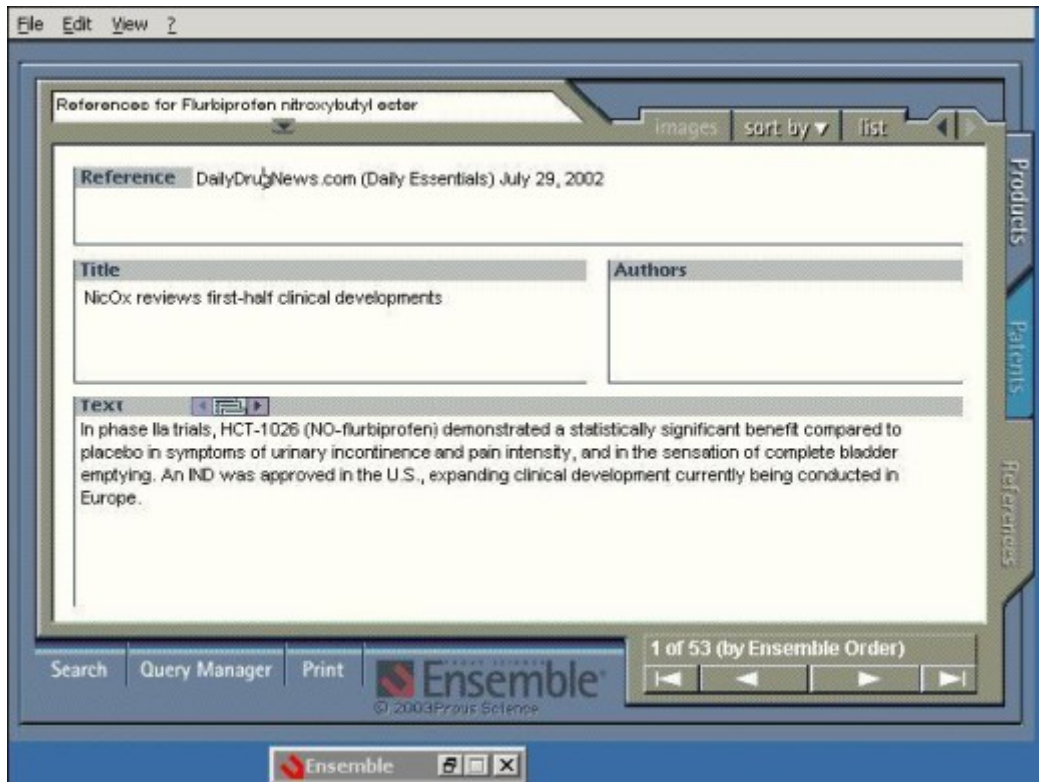
Applicant		Inventor	
NicOx SA		Trespidi, L., Naggi, A., Torri, G.	
Patent Number	Publication Date	Priority Data	Priority Date
WO 0253188	July 11, 2002	2000 EP 403719	December 29, 2000

1 of 6 (by Priority Date)

Search Query Manager Print Ensemble © 2003 ProSci Science

Ensemble

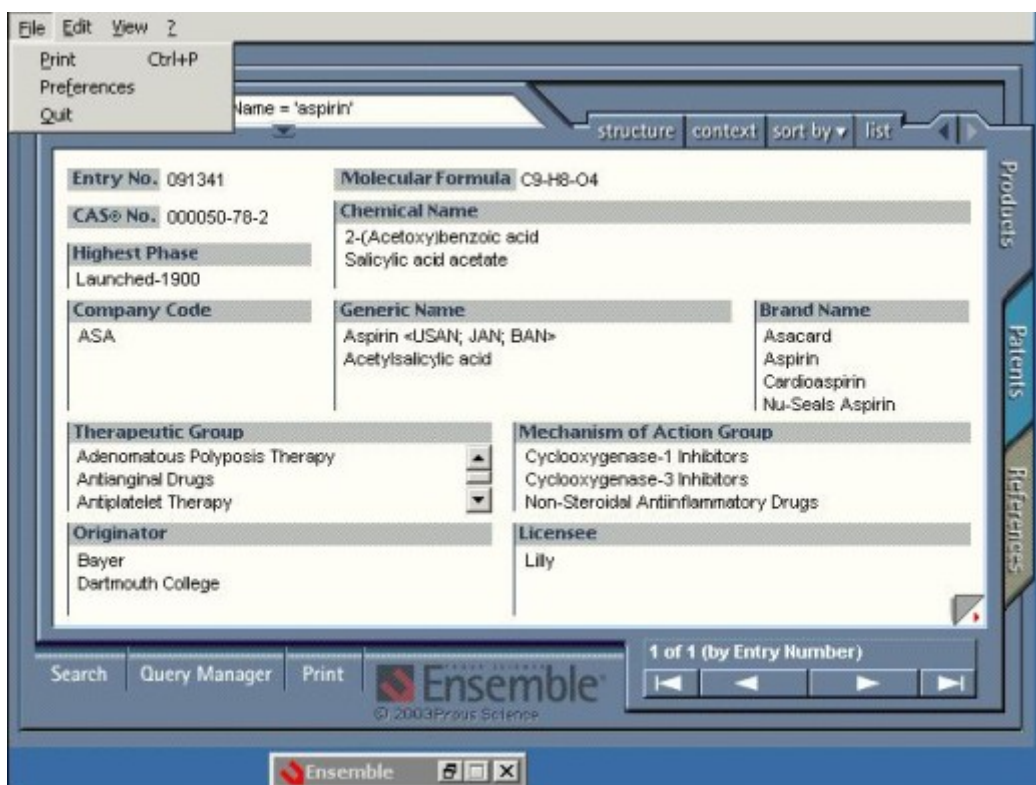
查看相关文献资料，可点击【References】，弹出如下界面。按向左或向右的箭头查看内容。



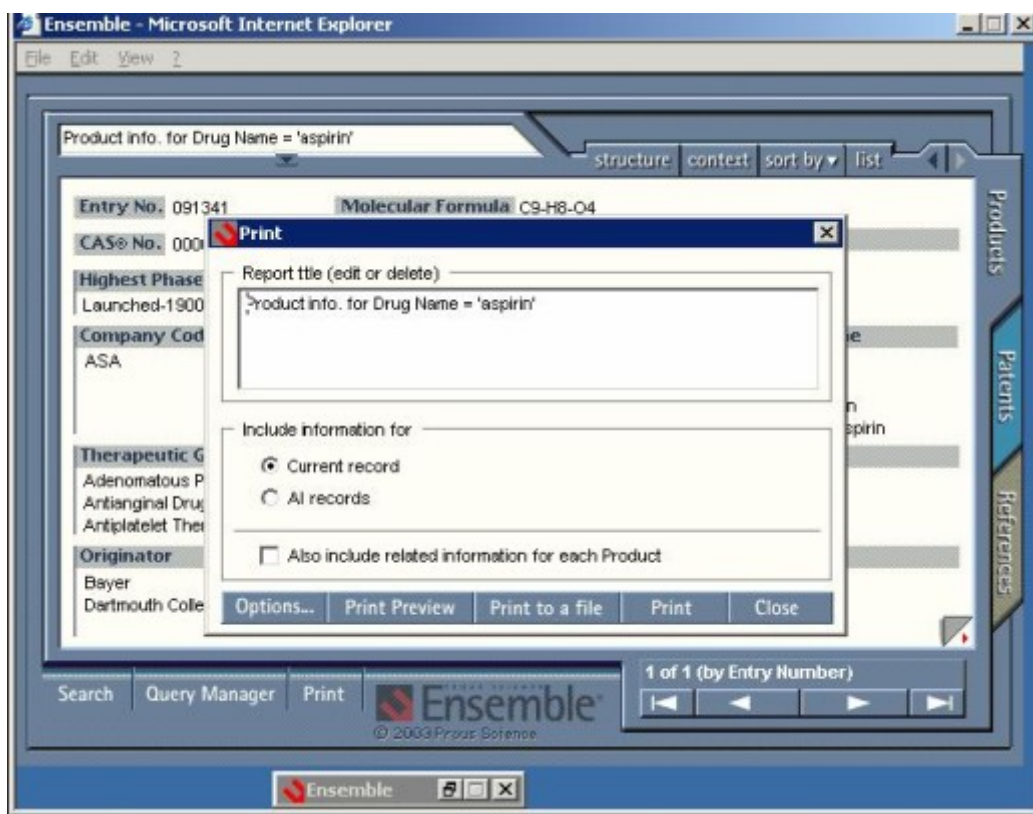
除此以外，还有其它的检索路径，可根据适应的检索途径进行检索，方法同上。

2. 2 打印

运行菜单中【File】中的【Print】命令。



点击【Print】键，即可打印出查询条目的内容。



InfoChem (PC-search) 数据库简介及检索方法

一、数据库简介


本数据库是由 Springer Verlag 出品的 CD-ROM 产品，由前苏联的科技情报研究所 (VINITI) 和原东德的 ZIC 收集整理的，共有 250 万个反应，取自 1000 种国际上重要化学杂志和专利文献。数据库由二个软件部分组成，其一是含有约 41000 个核心反应的反应类型数据库，称为 ChemReact 41。这一部分的数据是从 1975~1991 年间的文献中精选各种不同类型的反应的数据，原则上是一种反应类型一个反应的例子。反应类型的选取原则是至少有 5 个以上的同类反应。至少要有一个例子在重要有机化学杂志 (56 种) 中，至少要有一个例子的得率在 50% 以上，每个反应含有反应式、反应条件、得率和参考文献。它的检索软件名为 PC-Search，允许灵活的分子和反应的子结构检索，并能标记反应中心。还可以进行反应条件检索、关键词检索等。含有 250 万个单步反应的数据库只是一个可显示的数据库，在用 PC-Search 检索后，当需要从 250 万个单步反应数据库中取出数据显示时会自动调用 CD-react 程序。第二部分为 STS (Synthesis Tree Search)，用于检索在 250 万个反应中含有的目标分子，目标分子可以是反应产物，也可以是反应起始物。用户可通过 ChemReact 41 进行反应类型的检索，再利用 InfoChem 反应数据库的数据显示所有同一反应类型的具体例子。据称 250 万个反应中与 ChemReact 41

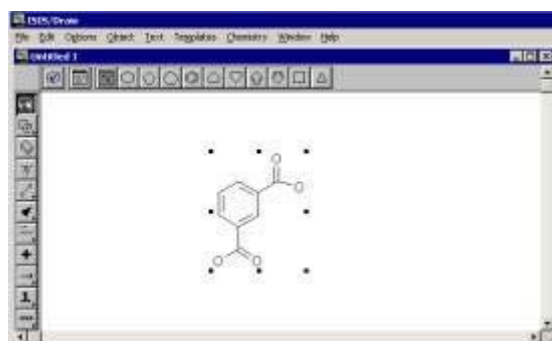
有关的约有 150 万个。用户还可以用 STS 检索具体的分子结构以在 InfoChem CD-ROM 中得到相应的合成方法树形图。


InfoChem 可提供三种检索功能：子结构检索（SSS）、反应子结构检索（RSS）、数据检索。数据检索通过一个数据填充画面进行，可进行多种常规途径检索，如作者、条件、得率、出版物名等。你可在检索中要求得率的范围，如 > 80, 70~90 等。这是在书本式的工具书中所没有的。但是真正富有特色的是 SSS 和 RSS 检索功能。InfoChem 反应数据库的结构提问可以用 ISIS/Draw 或 STN express 画出，然后用 Windows 的剪贴板拷贝到 PC-Search 进行检索。

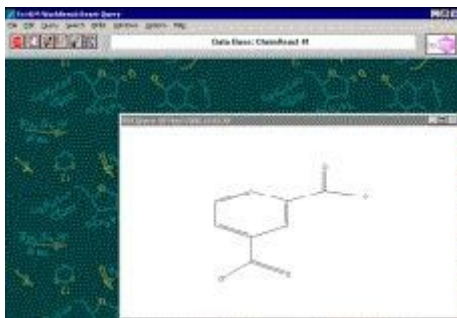
1、通过子结构检索查找具有某种结构类型化合物的反应


举例说明其使用过程：

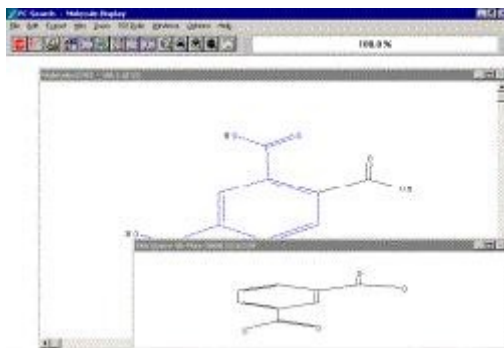
a) 用 ISIS/Draw 画目标分子结构，然后用左侧工具栏中  “lasso select” 选择目标结构，点击菜单栏上的 Edit，再点击其下拉菜单上的“Copy”。



b) 将 ISIS/Draw 窗口最小化，调用 PC Search，点菜单栏上的 Edit 下拉菜单上的 Paste Query 或单击  出现如下界面：如果出现 “No Reaction number in clipboard” 表示画的结构在数据库中没有相匹配的记录，你可以适当简化结构进一步检索。



c) 单击  或用菜单栏上的 “Search” 下拉菜单上的 “Start SSS” 开始提问分子的子结构检索。



d) 用菜单栏上的 “SSS role” 限定检索结果，即提问结构是作为反应物、产物、试剂、催化剂等。选择 “SSS role” 下拉菜单中的 “View substructure as Products” 即显示反应产物中包含提问分子子结构的反应。

e) 在菜单栏的“export”下拉菜单上选择“Reaction to CD-React”，进入“CD-react”的“Reaction Display”模式，显示命中反应的比较具体的文本信息，点击菜单栏上的“DDE-Connect”返回。

f) 在菜单栏的“export”下拉菜单上选择“Reaction type to CD-React”，进入“CD-react”的“Reaction Display”模式，显示与命中反应有相同反应类型号的其它反应及比较具体的文本信息，点击菜单栏上的“DDE-Connect”返回。


g) 在菜单栏的“export”下拉菜单上选择“Document to CD-React”进入“CD-react”的“Reaction Display”模式，显示与命中反应同一篇文献的其它反应及比较具体的文本信息，点击菜单栏上的“DDE-Connect”返回。

检索结果的储存处理，不管是在 PC Search 的反应显示还是在 CD-react 的反应显示中，均可用“Edit”菜单下的拷贝功能把反应图和文本信息粘贴到 Word 文件中，步骤如下：（1）点击菜单栏上的“Edit”，再点击其下拉菜单中的“Copy Data”把文本信息拷贝到粘贴板上，然后粘贴至 word 中。（2）点击菜单栏上的“Edit”，再点击其下拉菜单中的“Copy Diagram”把反应式拷贝到粘贴板上，然后粘贴至附件中的画图中，再在画图中拷贝该反应式，再粘贴至 word 中。

h) 点击菜单上的“File”，点击其下拉菜单中的“End Display-Reset query”，退出 PC Search 程序。

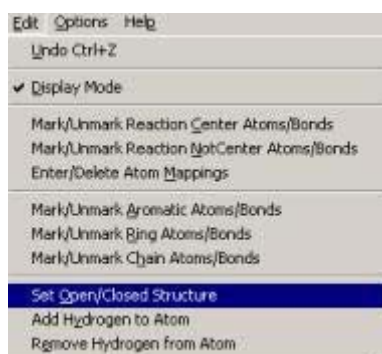
2、子结构检索时的提问编辑

上述只是一个简单的通过子结构检索查找反应类型的例子。由于是子结构检索，查到的机会多，结果准确性差，只能逐个反应浏览，以发现是否需要。为提高检索精度则要利用提问编辑功能。仍以上述画的为例说明提问编辑的作用。

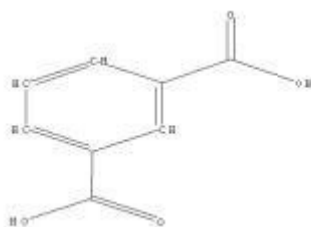
a) 用 ISIS/Draw 画目标分子结构，然后用左侧工具栏中  “lasso select” 选择目标结构，点击菜单栏中的 Edit，再点击其下拉菜单中的“Copy”。

b) 最小化 ISIS/Draw 窗口，调用 PC-Search，点菜单栏上的 Edit 下拉菜单中的 Paste Query，进入 SSS Query 框，引入提问结构。

c) 点击菜单栏上的 Edit，再点击其下拉菜单中的“Edit Query”，进入提问编辑状态。对于物质子结构检索可以对分子中的原子和键进行定义，并可以引入氢原子，以限制这一部位的反应进行。如 Edit 下拉菜单所示：

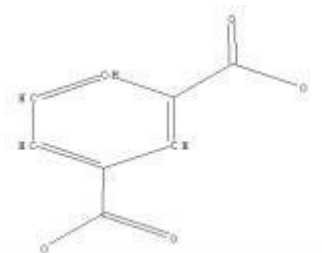


d) 本例中如果选择“Set Open/Closed Structure”，再在提问结构上点击一次，就把所有位置上的空余价键用氢补上，如下图：



此时实际进行的是确定结构的检索。但在 PC Search 中，确定结构命中的机会较少。如本例中上述限定结构未检索到。

现选择“Add Hydrogen to Atom”，在例中的苯环上未取代位置都点击一次，加上一个氢，这样检出的结果就只是苯环上没有取代的二元羧酸衍生物。如：



然后点击菜单栏上 File 下拉菜单中的“Exit Query-edit”返回 PC Search 检索界面。

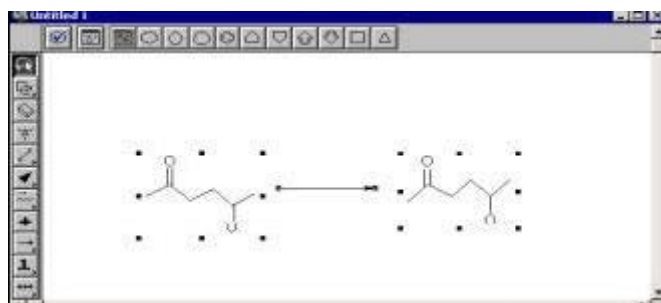
f) 用“SSS role”限定检索结果, 选择“View substructure as Reactant”即显示反应物中包含苯环上没有其它取代的提问分子子结构的反应。

g) 以下操作同前述 1. e) -h) 。

3、反应子结构检索

现举一个二元酮的一个羰基还原成羟基的反应检索的例子。

a) 先用 ISIS/Draw 画出反应, 并粘贴到 PC Search。



b) 点击“Search/Start SSS”, 进行反应子结构检索, 得到 17 个反应。

c) 以下操作同前述 1. d) -h) 。

4、编辑反应提问

4.1 定义键

上例有 17 个结果，实际上有许多结果不是预期的，如果我们通过提问编辑方式把键定义为链键，就只有 1 个反应。

a) 先用 ISIS/Draw 画出反应，并粘贴到 PC Search。

b) 点击 “Edit/Edit Query” 进入提问编辑状态。

c) 点击 “Edit/Mark/Unmark Chain bond/atom”，再点击需要定义为链键的键，这是被定义的键显示标记字符 “q”，表示键已经被定义。不管是定义什么键（芳香、环、链键），只要被定义过，就有这一标记显示。

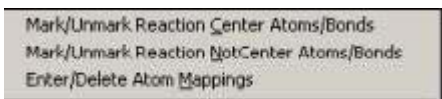
d) 点击 “File/Exit Query-edit” 返回 PC Search 检索界面。

e) 点击 “Search/Start RSS”，进行反应子结构检索，得到 1 个反应。

f) 以下操作同前述 1. d) -h)。

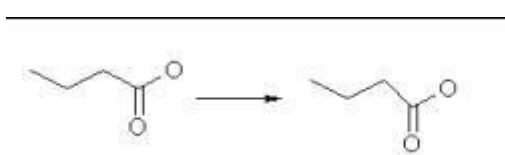
4.2 定义反应中心和综合定义

对于反应子结构检索除了如上述的对原子和键的定义外，还可以对反应中心进行定义。定义反应中心和使用原子匹配可比较确切地找到所需的反应，与反应有关的定义还有：



Mark/Unmark Reaction Center Atoms/Bonds
Mark/Unmark Reaction NotCenter Atoms/Bonds
Enter/Delete Atom Mappings

定义反应中心即是反应物中要求起变化的原子和键，定义非反应中心就是在反应中这些部位不能发生变化，定义原子匹配要求反应物和产物中的这几原子必须完全匹配，原子匹配只限于定义为反应中心的原子，也就是说这部位在反应中有变化，但是反应物和产物中这些定义部位的原子没有变化。



这是一个链羧酸的反应，要求只是羧基的 α -位起反应，其检索和定义过程如下：

- 先用 ISIS/Draw 画出反应，并粘贴到 PC search。
- 点击“Edit/Edit Query”进入提问编辑状态。
- 点击“Edit/Mark/Unmark Chain bond/atom”把反应物和产物的三个键定义为链键，被定义的键显示标记字符“q”。
- 点击“Add Hydrogen to Atom”，再点击反应物和产物的羧酸羟基氧，在上面加氢，这就确保无论是反应物还是产物的单键氧是羟基，排除了这一羧基的酯化反应。点击反应物的碳原子，使 α 位、 β 位的碳上都有二个氢，点击产物的 β 位的碳原子，使之有二个氢。这意味着 α 位的氢可能会有变化。

e) 点击 “Mark/Unmark Reaction Center Bond/Atom”，再点击反应物和产物的 α 位碳原子，把它定义为反应中心。

f) 点击 “File/Exit Query-edit” 返回 PC search 检索界面，检出三个反应。如果不作反应中心的定义，结果就多很多。因为从反应子结构检索的角度看，只要反应物和产物中均有满足条件的子结构，而不管 α 位有无变化，都算命中。

g) 点击 “Search/Start SSS”，进行反应子结构检索。

h) 以下操作同前述 1. d) -h)。

Martindale 2002 数据库简介和检索方法

一、数据库简介

Martindale 数据库提供了世界范围内所使用药品的信息，它给予药品的评价是公正，无偏见的。其覆盖药品的广度和深度是独一无二的。

主要特征：

收录了 5300 个药物专论，95000 个制剂，32000 篇文献和 7800 个生产厂家的全面信息。

200 个植物药的专论和 5000 种制剂。

疾病治疗的大纲。

关于兽药，对照物，诊断试剂，放射性药品，制药辅料，毒物，提炼油以及更多的其它物质的信息。药物专论包括以下信息：

化学名，或其同义字；

分子式，分子量，CAS 登记号，ATC 码；

药典信息；

物理学参数；

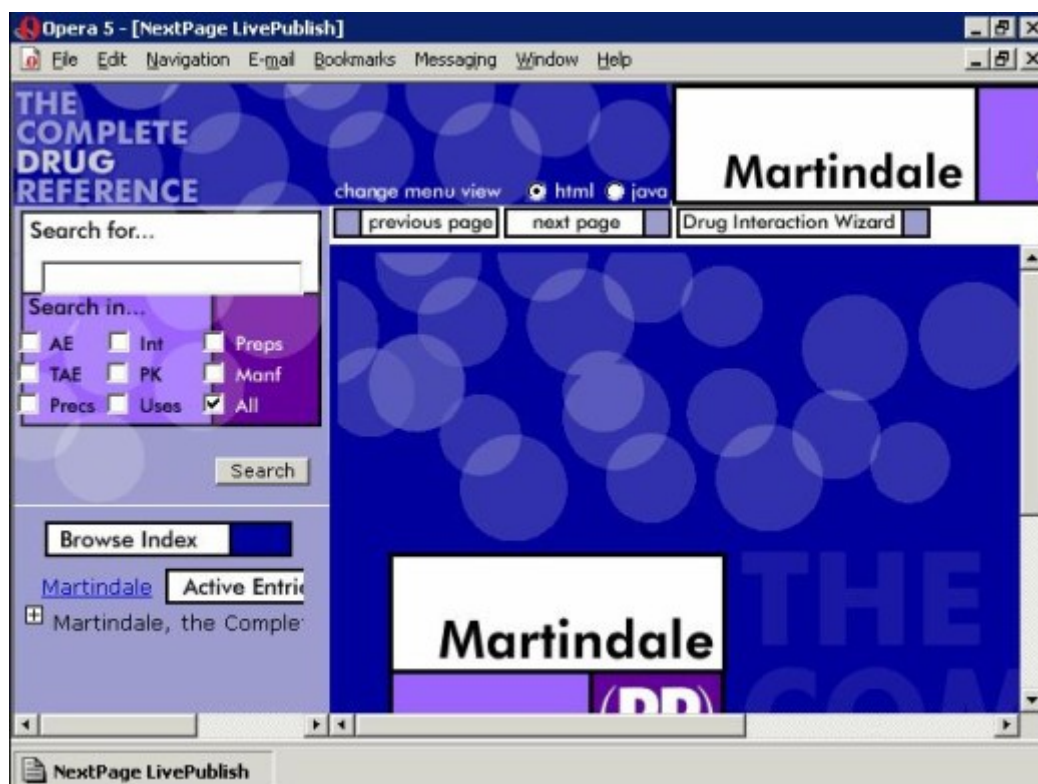
药物的作用机制，副作用，注意事项（包括禁忌症，相互作用），药代动力学，用途和给药方法（包括药理学和给药剂量）。

制剂和商品名。

二、检索方法

2.1 关键词检索

在主界面选择“Martindale 2002”数据库。



在查询对话框中输入一个关键词。

挑选如下一个或几个适宜的检索路径进行检索。

AE: Adverse Effects, 药品的副作用

TAE:

Precs: Precautions, 药品使用时的注意事项。

Int: Interactions, 药品间的相互作用。

PK: Pharmacokinetics, 药代动力学参数。

Uses: Uses and Administration, 药品的用途和给药方法。

Preps: Preperation, 各种制剂。

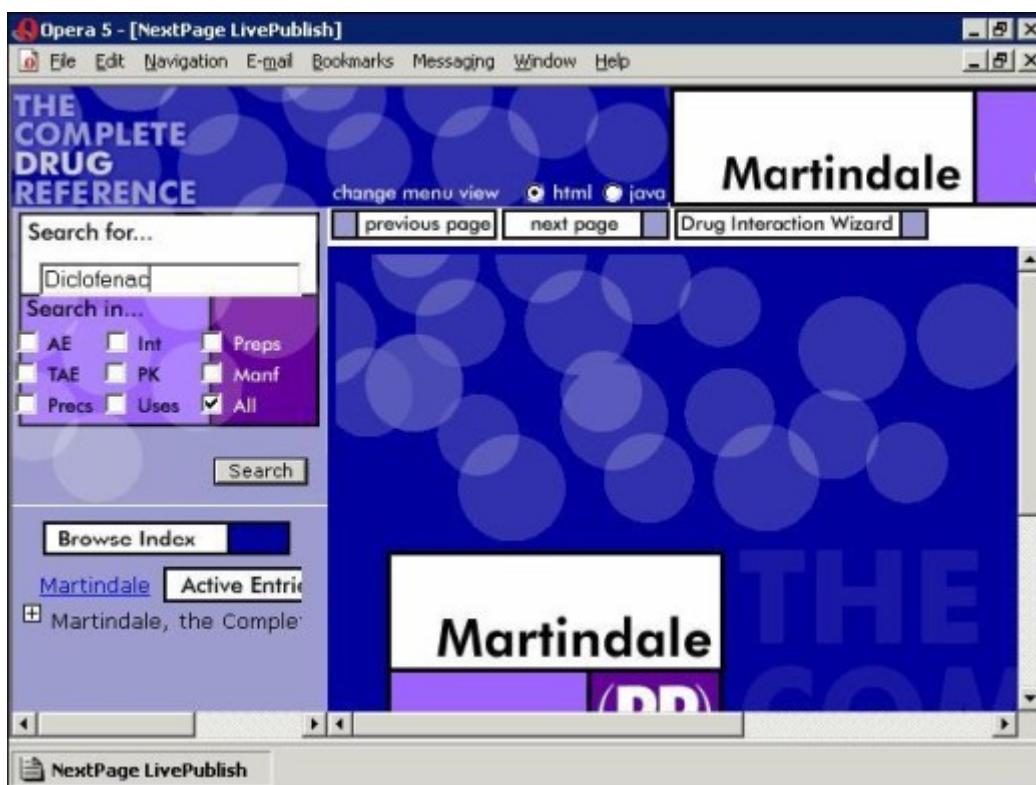
Manf:: Manufactture, 药品的生产厂家。

All: 包括以上所有检索途径。

下面以“Dicfenac”为例，简要介绍该检索方法。

在【Search for】下空白对话框中输入关键词“Dicfenac”，
在【All】范围内进行检索。

单击【Search】键，弹出如下对话框：

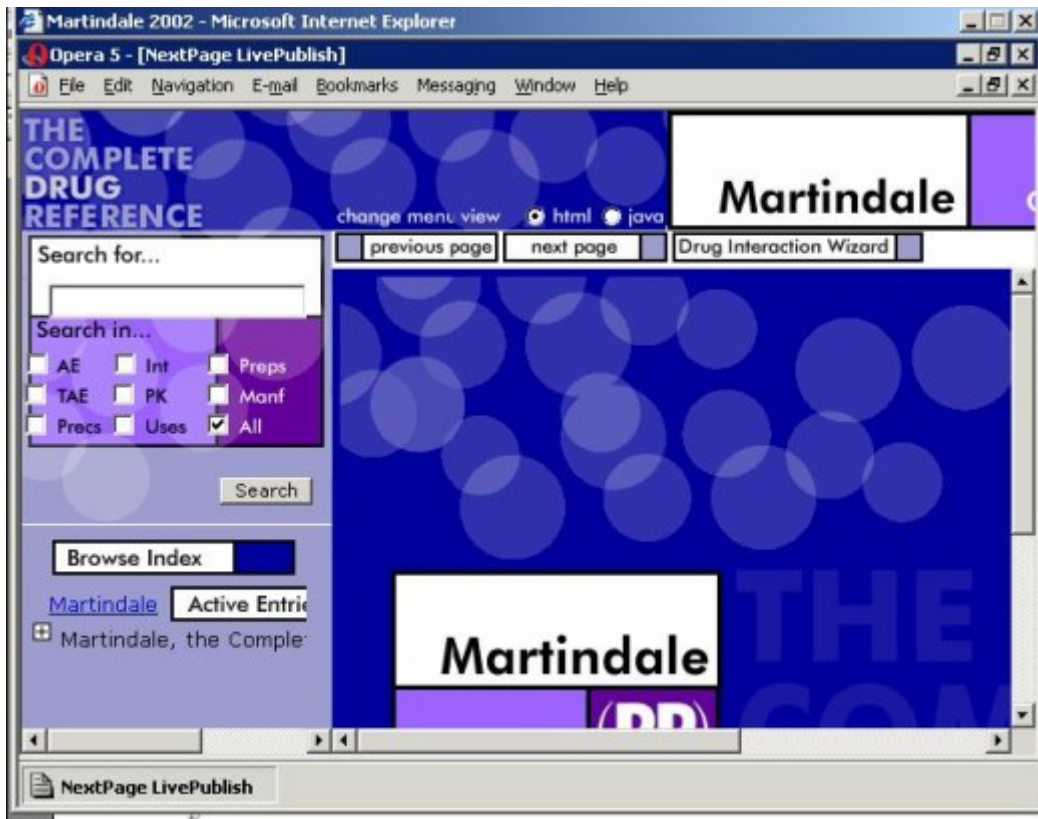



单击【Search】键，弹出如下对话框：

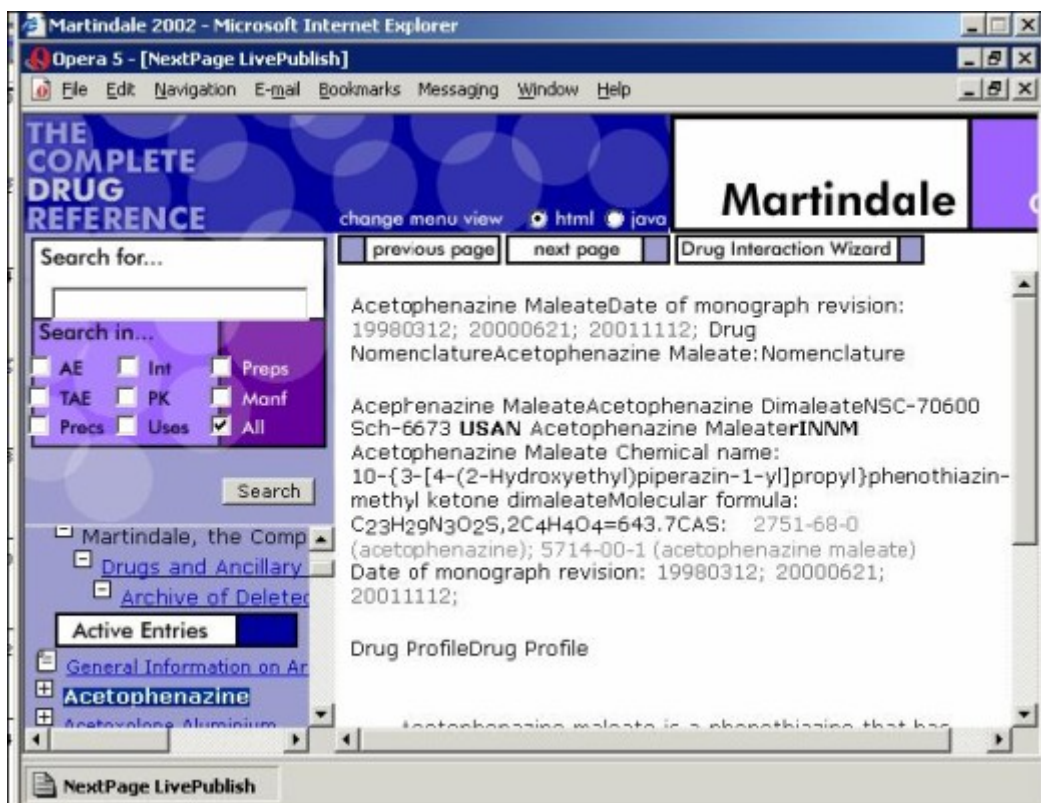


可从查询结果的目录中挑选，或使用【Previous hit】或【Next hit】按钮，以浏览的方式挑选所需的结果。

2. 2 浏览查询



点击【Active Entries】下的依次展开目录，直至检索到所需条目，点击，则在右面对话框中显示检索到的详细内容。



PharmaProjects 数据库简介及检索方法

一、数据库简介

Pharmaprojects 是世界药物研制开发处于领先地位的智能型数据库。它监控着国际上处于开发阶段的每一个重要新药，跟踪着国际上处于研发活跃阶段的候选药物，提供给客户产品开发的全面资料。

Pharmaprojects 数据库包括自 1980 年以来超过 30000 个处于开发阶段的药物，并且每月都有 1000 多个药物的更新信息。

Pharmaprojects 中的每个药物都包含以下信息：

- 1、主要信息：包括药物名称、开发阶段、各国上市情况。
- 2、该药物开发公司的情况：包括原始开发公司、国家、开发状况、上市国家。
- 3、药理依据：包括药效分类及代号、药物用于该适应证的开发状况、药理作用描述、适应证描述、给药途径等。
- 4、学依据：包括化合物代号、CA 注册号、分子量、分子式、化学名、结构式。
- 5、专利情况：包括专利国家、专利号码、专利优先号、优先日期等。

6、各国上市情况：包括上市国家、上市情况、上市时间、批准情况等。

7、主要事件：记录了该药物开发过程中的重大事件。

8、开发进度：记录了药物开发的进度、市场评测。

9、细节信息：详细记录了该药物的市场和临床前以及临床情况。

10、除了药物信息之外，Pharmaprojects 还提供了世界上 1300 余家主要制药和生物技术企业的相关文件，通过组合查询，可以轻松地获得所需的开发信息。

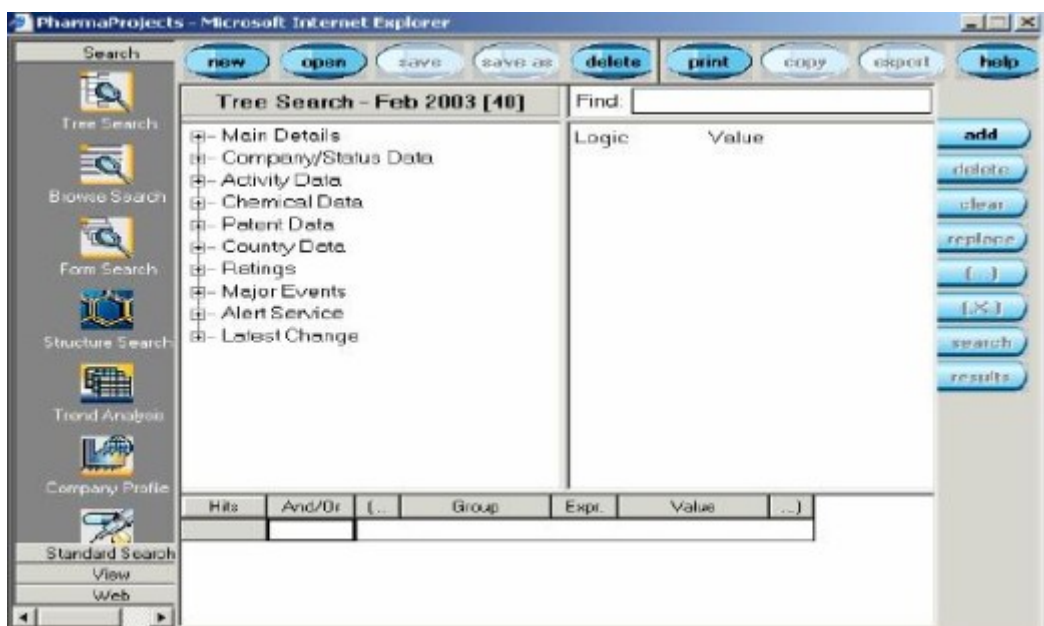
总之，Pharmaprojects 是跟踪国际上的新药开发动态、寻找新药报批机会及市场合作开发伙伴和分析市场收益的最佳工具！

二、检索方法

打开主界面

选中【Pharmaprojects】，双击鼠标左键，出现界面

点击【accept】进入检索主界面，如下图，左栏是主要的检索途径；中间栏为【Tree Search】（目录树检索）；右栏是检索框。



1、目录树检索

在目录树检索中包括 10 种路径：

- (1) Main Details (4) Chemical Data (7) Ratings
- (2) Company/Status (5) Patent Data (8) Major Events
- (3) Activity Data (6) Country Data (9) Alert Service
- (10) Latest Change

点击各路径前 (+) 可以看见每个路径又分为许多分支路径，如点击“Main Details ” 可见其包括：

Drug Name

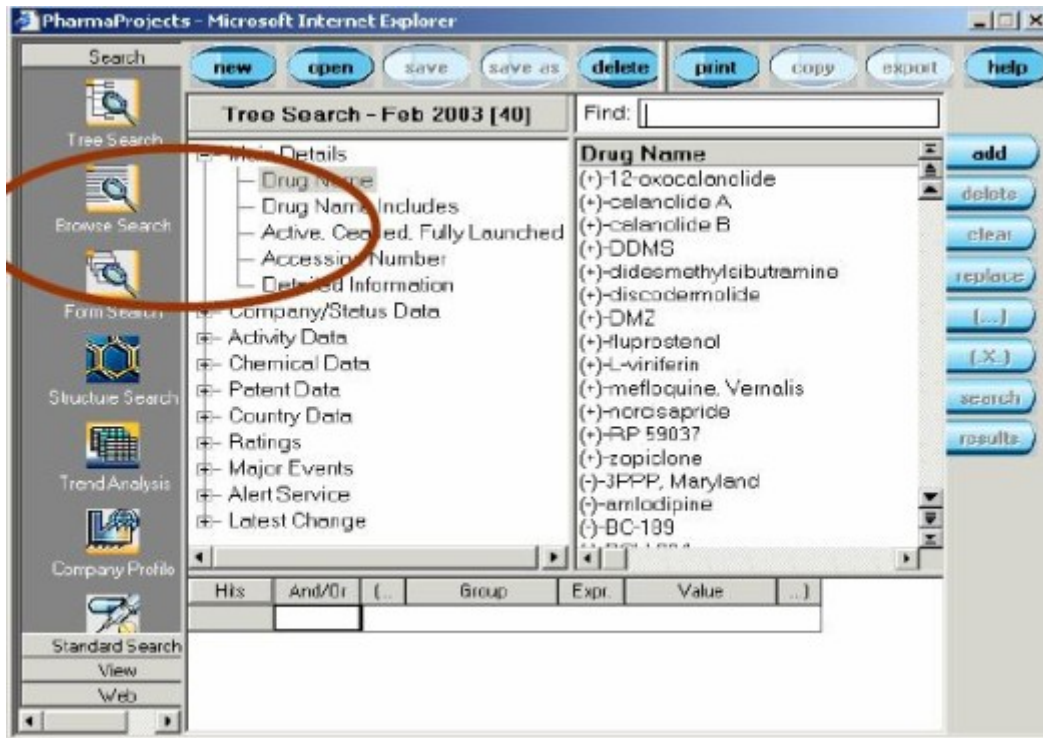
Drug Name Includes

Active, Ceased, Fully Launched

Accession Number

Detailed Information

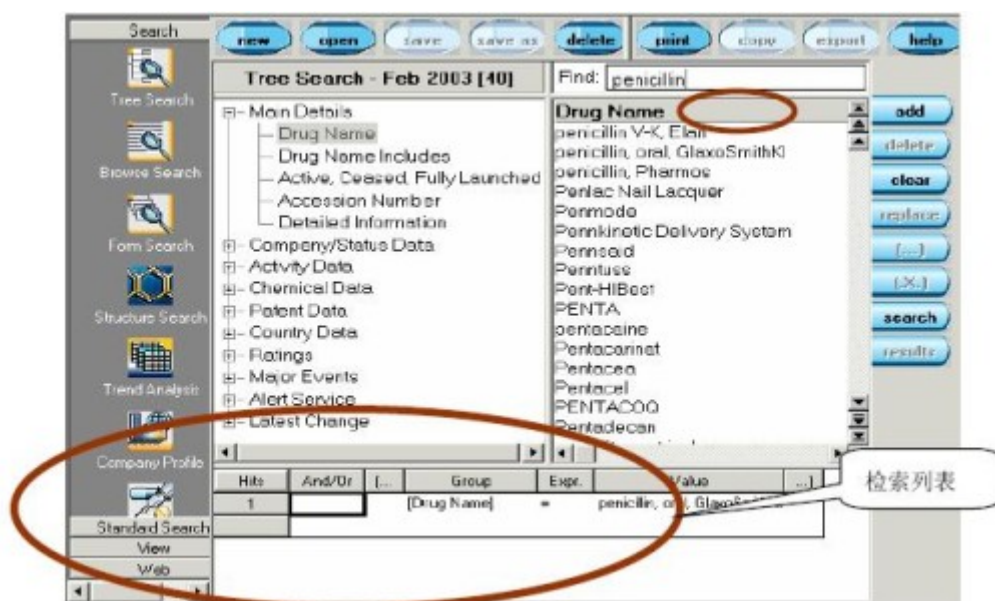
如下图



每一个子标题都可以作为一个检索途径。

还可以使用组合检索即使用“and”、“or”。如果要查找某个药物目前是否上市，可以通过药名（Drug Name）和完全上市（Fully Launched）进行组合检索。

以 Drug Name 检索为例，选中【Drug Name】双击鼠标左键，右侧检索框列出数据库中的所有药名，可以在检索框【Find】中输入要检索的药名如“Penicillin”，出现如下界面。



也可以通过移动药名列表选择要检索的药名，然后双击选中的项目或点击右侧的【add】将此项加入到检索列表。点击【Search】得到检索结果。点击【results】浏览每个结果的简要介绍，如下图所示。

点击【profiles】，可浏览检索到的全部内容。



可以在【Logic】中选择“=”进行准确检索，也可以选择【LIKE】，在【Value】框中输入要检索的词或词的某一部分。以下同“Drug Name”检索。

Pharmaprojects 还提供了其他的检索方式，方法同上。

1) 通过国家组 (Country Grouping)、适应症组 (Indication Grouping) 进行检索。

2) 通过 (Activity Data) 项下的代码 (显示代码的具体描述和同义词) 检索某一类药的情况。

3) 通过公司及药品市场状况 (Company/Statuns Data) 检索某公司的情况或者某一特定的市场被批准的所有药物。

4) 通过 Activity Data 中的 Therapy Grouping 可以选定某一特定的治疗类别，检索到在这一特定范围内的处于研制活跃阶段的药物。

5) 通过化学名 (Chemical Name) 或化学同类物 (Chemical Name Includes) 进行检索。

6) 通过 Major Events 对处于两个日期之间的重要事件进行检索 (如药物上市的时间或药物研制阶段的时间)。

7) 通过 Alert Service 可以检索到每月更新的内容，得到更新内容的详细资料，还可与公司、治疗类别以及适应症进行组合检索，得到所需信息。

2、左栏检索

通过在主界面的左栏中【Company Profile】、【Therapy Profile】等项目也可以检索到主要制药公司的有关信息，可以找到某一适应症市场的所有药物生产厂商。还可以通过某药物文件中的公司超级链接进入公司或治疗类别的文件。

使用【Search History】可以保存检索方式，方便以后检索同一内容。

3、检索结果

通过上述的各种检索方法得到的检索结果，系统将自动生成一张包含(Originator , Generic Name, World Status, Any Therapy Code, Any Therapy Description) 内容的标准格式的报告。