HOW TO...

使用新功能

SciFinder®

Fall 2010

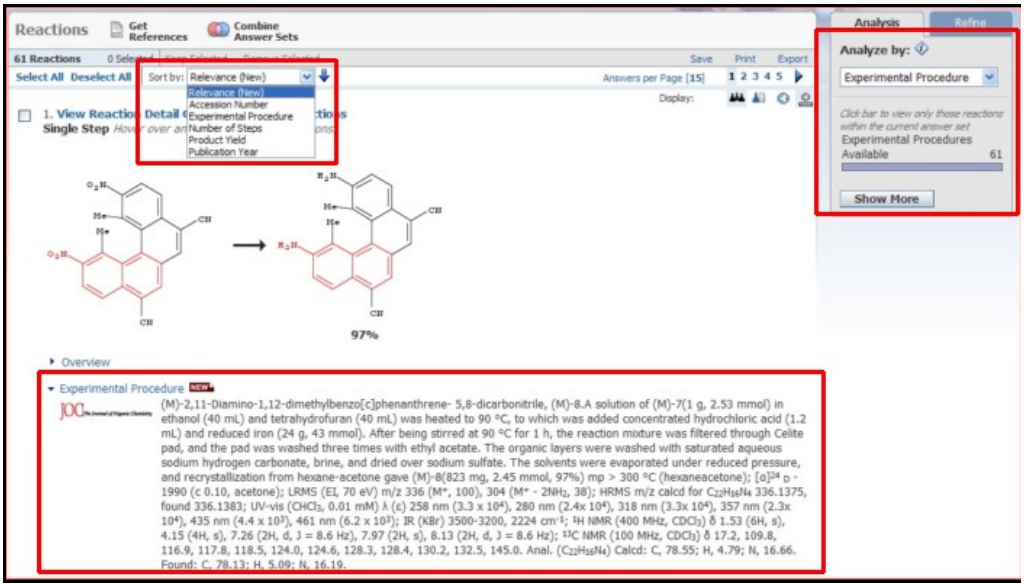
SciFinder推出的新功能包括：使用SMILES和InChi字串输入结构,改善了反应结果的显示，添加了实验过程的信息，添加了反应关联度的排列，并且标准化了物质信息的菜单。

查看结果集

实验过程

1. 来自特定期刊的反应结果集现在包含了完整的实验步骤信息。这一详细资料将有助于快速确定反应或合成策略是否适用。

2. “ 实验过程 ”既是反应结果集的一种排序选项又是一种分析选项。



依据关联度排列反应结果集

1. 关联度排行是反应结果集的新默认排序选项。关联度最高的答案将显示在最先位置。这能加快查看结果集的速度。

2. 关联度是由Tanimoto相似性确定的。

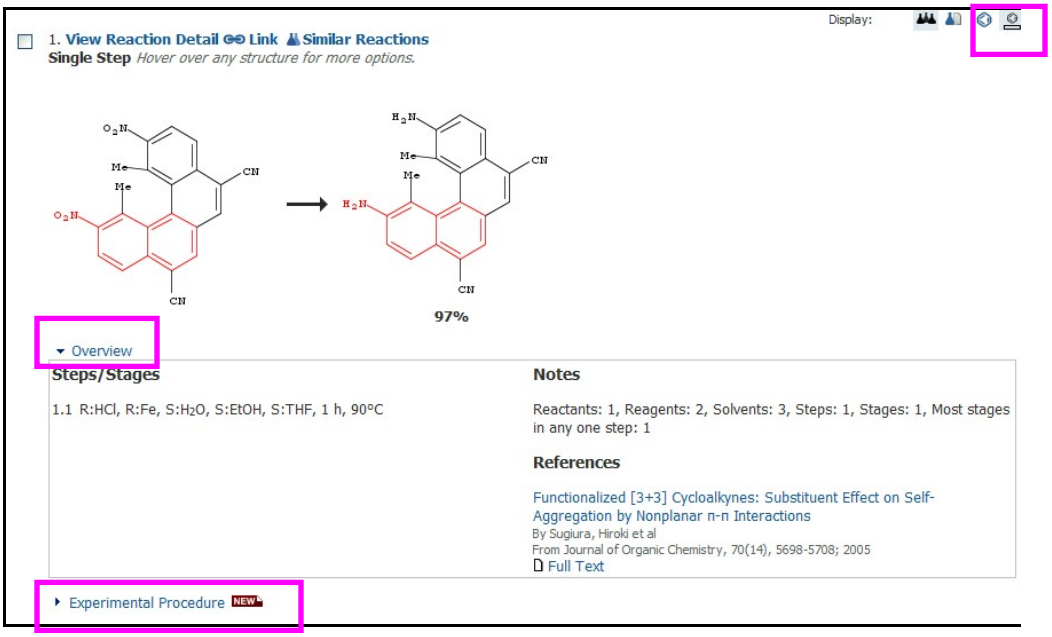
结果显示

改善了反应结果的显示

1. 简洁、流线型的反应显示改善了反应结果集的可读性、允许更快地查看结果，帮助您更快的做决策。

2. 将显示设置为图解和概览或仅图解。

3. 可以查看特定期刊中的实验过程。



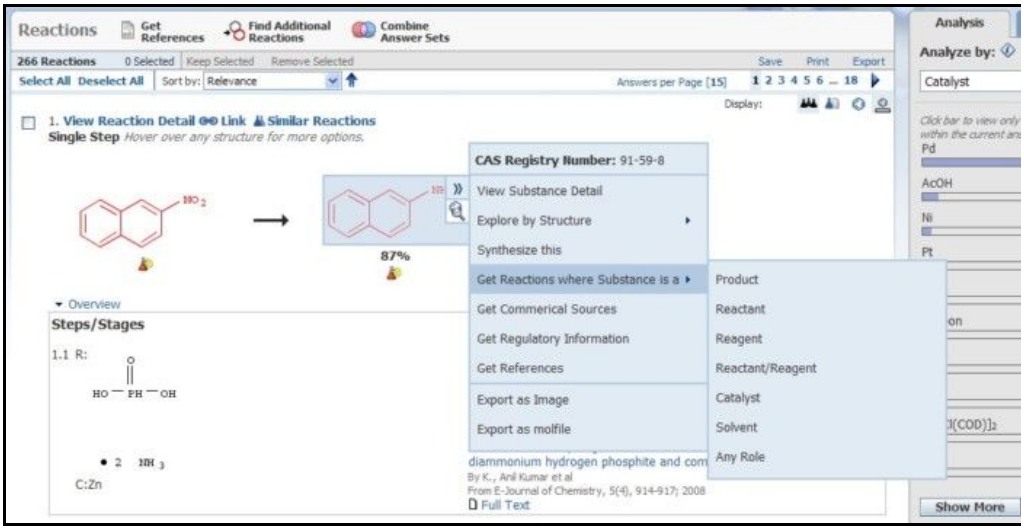
标准化了物质信息菜单

增强和标准化了物质信息菜单，提供对相关信息的一键式访问。

在反应和物质结果集中，都可以使用新的物质标准化菜单。

CAS Registry Number包含在菜单中。Export as Image(导出为图像)和 Export as molfile (导出为molfile)是新的选项。Synthesize this 等同于获取该物质为产物的反应。

放大镜是缩放选项。

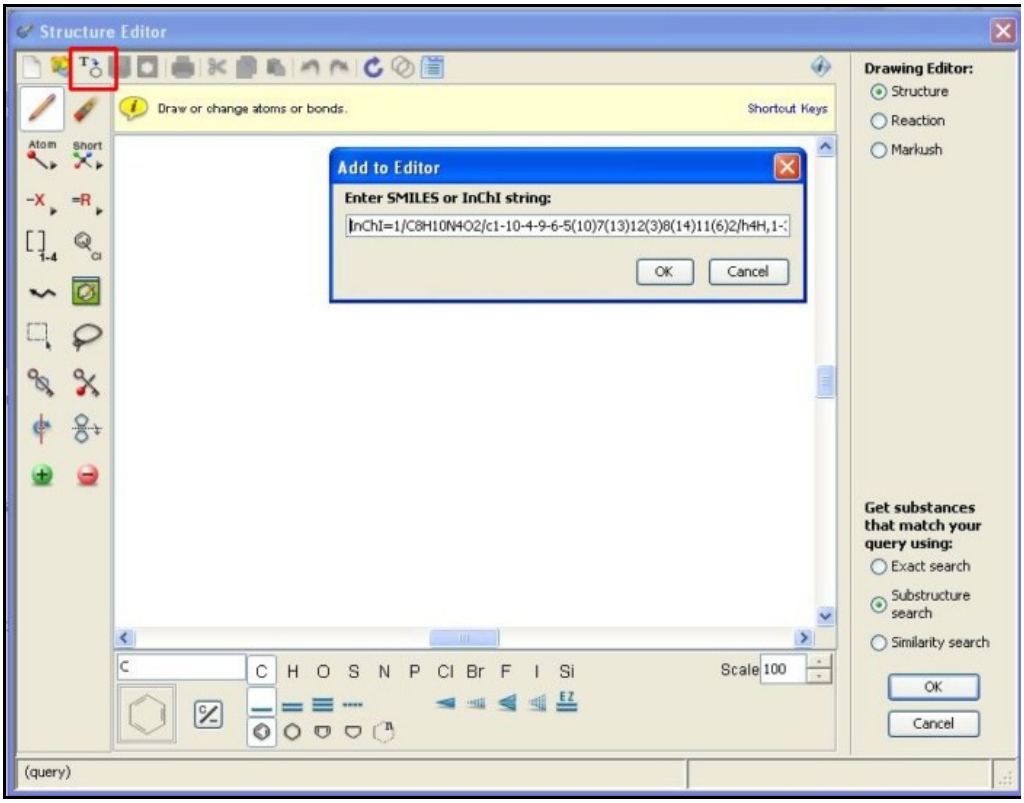


查找信息

通过输入SMILES和InChI字符串检索结构

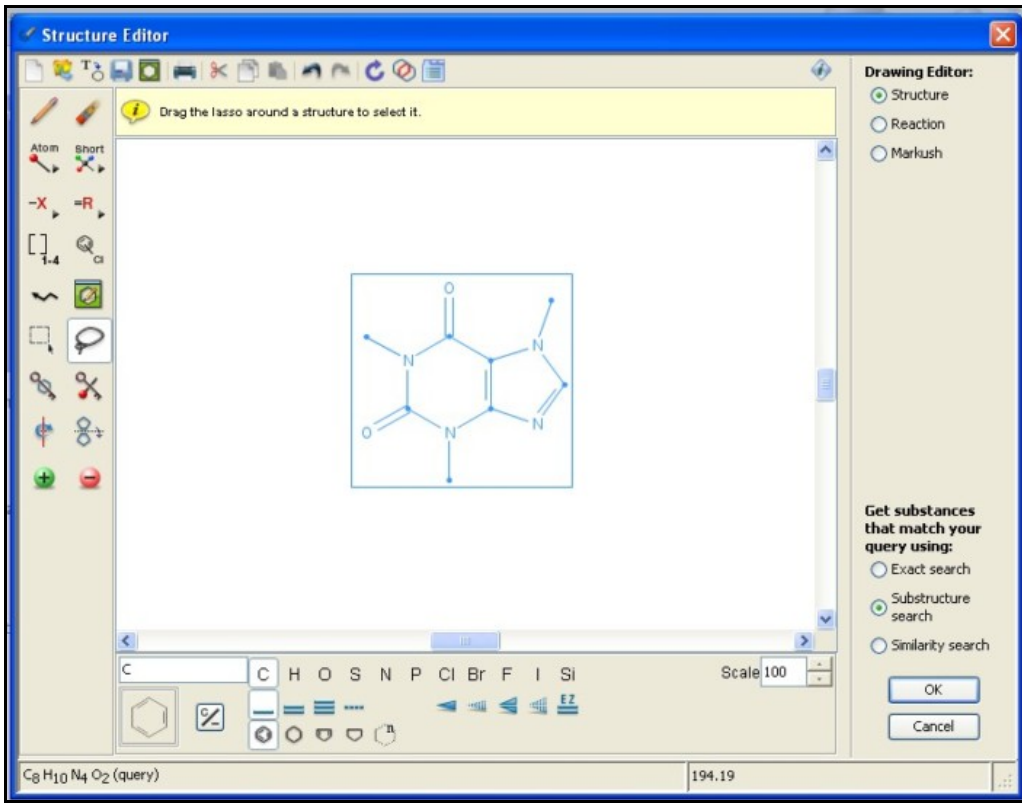
1. 该功能允许用户将 SMILES (简化分子线性输入规范)或 InChI(国际化学识别符)字符串输入到结构绘图编辑器中。

2. 如果SMILES或InChI是用户掌握的唯一信息，现在就可以在SciFinder中进行检索



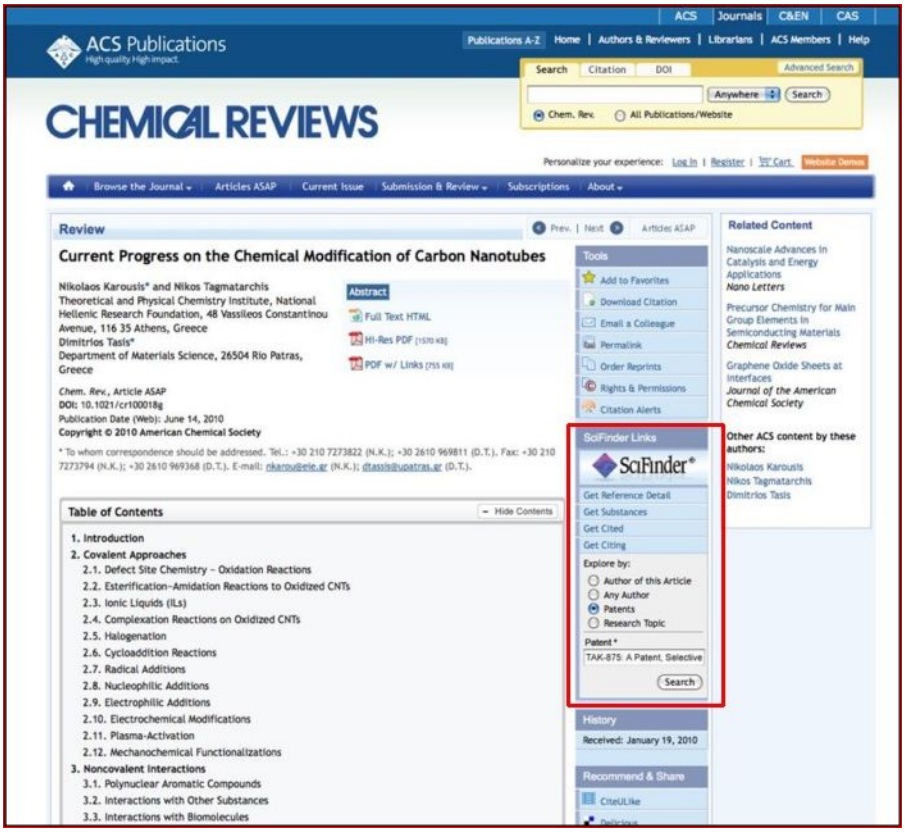
通过输入SMILES和InChI字符串检索结构---续

3. SciFinder将字符串重新转换为一个二维结构，随后可用于检索结构和相关信息，或充当新的(子)结构搜索的基础。



从ACS全文，可直接链接到SciFinder中相关的专利

ACS期刊的订阅者可在一篇文章中使用新的Explore by Patents(按专利搜索)选项查找其他或相关专利信息。(不可在预览时使用)



如有疑问，通过下列联系方式可获取更为详细的信息

北京
北京市海淀区知春路1号
学院国际大厦1213室
电话：010-82335058，82318288
传真：010-82331961
电子邮件：cas_china@igroup.com.cn

上海
上海市徐汇区肇嘉浜路798号
坤阳国际商务广场605室
电话：021-64453167
传真：021-64155180
电子邮件：cas_china@igroup.com.cn

广州
广州市越秀区东风中路318号
嘉业大厦2705室
电话：020-83274076
传真：010-83274076-808
电子邮件：cas_china@igroup.com.cn