HOW TO...

使用新功能

SciFinder®

2010 年秋季

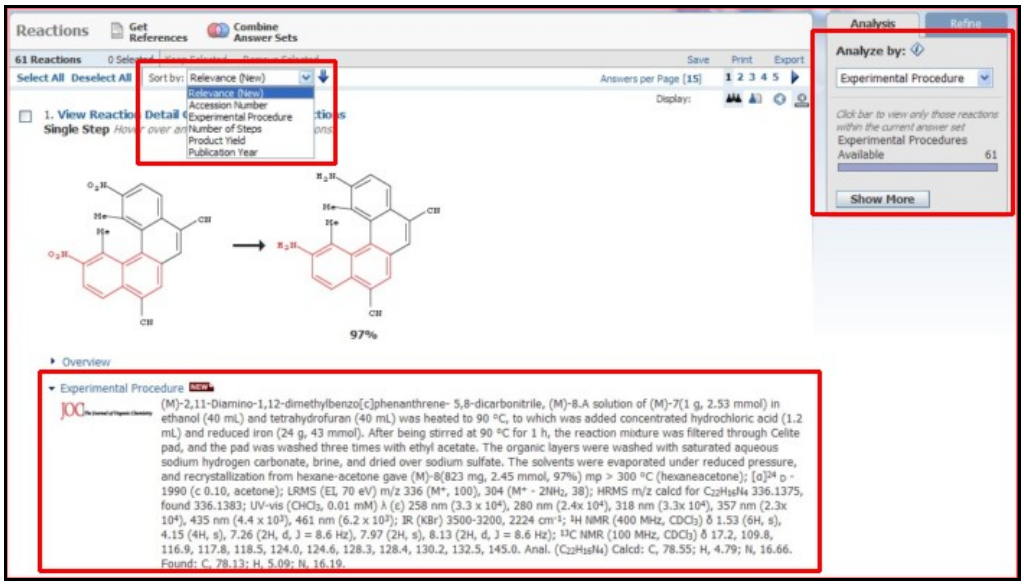
SciFinder® 的增强功能包括一个通过 SMILES 和 InChI™ 字符串检索结构的新选项、改善了反应答案集(结果集)显示、添加了实验步骤信息、反应答案集(结果集)的关联度排行以及标准化的物质上下文菜单。

使用答案集(结果集)

实验步骤

1. 来自精选（特定）期刊的反应答案集(结果集)现在包含了完整的实验步骤信息。这一（些）详细资料将有助于快速确定反应或合成策略（方案）是否适用。

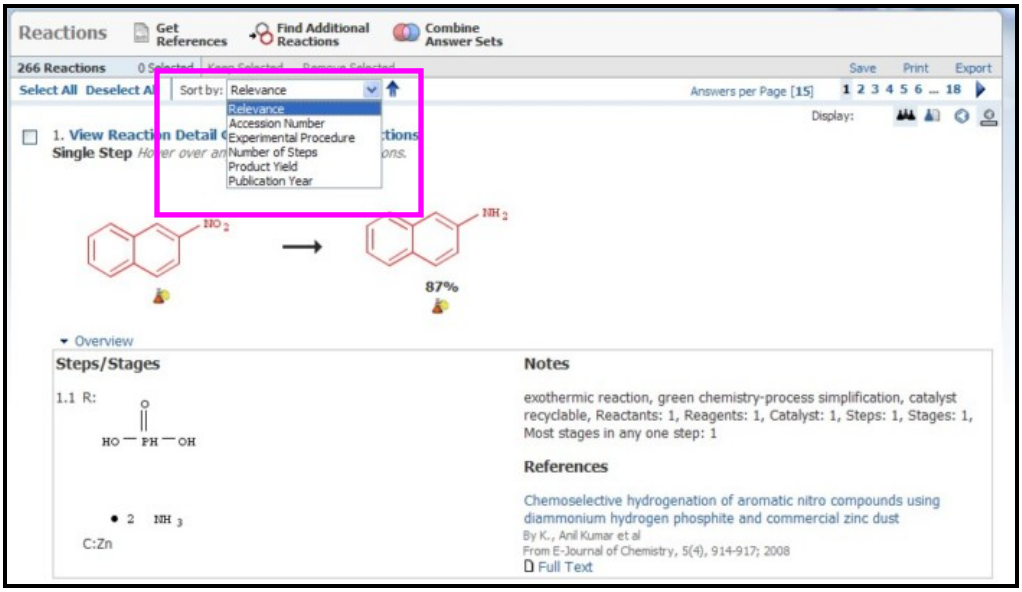
2. “实验步骤” 既是 **Sort（排序）**选项又是 **Analyze（分析）**选项，都包含反应答案集(结果集)。



*反应*答案集(结果集)*的关联度（相似度）排行*

1. ***关联度（相似度）***排行是反应答案集(结果集)的新默认 **Sort（排序）**选项。***关联度（相似度）***最高的答案将显示在最先位置。这能加快查看答案集(结果集)的速度。

2. ***关联度（相似度）***是由 Tanimoto 相似性确定的。



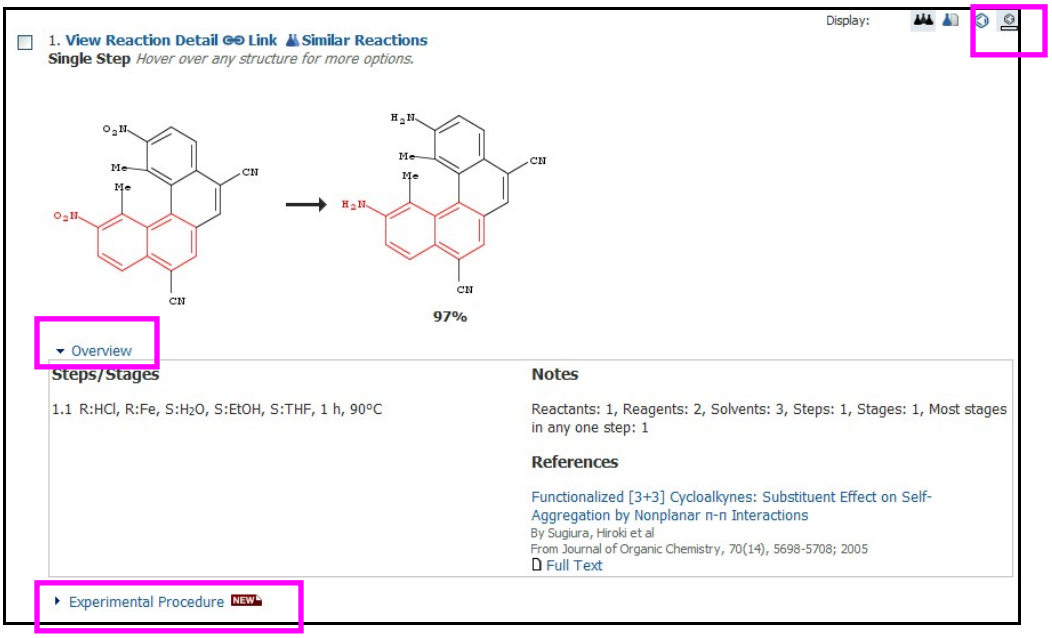
检索结果显示

增强的反应显示

1. 更简洁、流线型反应显示改善了可读性、允许（便捷您）更快地查看答案，并加快决策速度（提升您的决策能力）。

2. 看将显示设置为 Schema（图解）和 Overview（概览）或 Schema Only（仅图解）。

3. 可使用精选期刊中的 Experimental Procedure（实验步骤）。



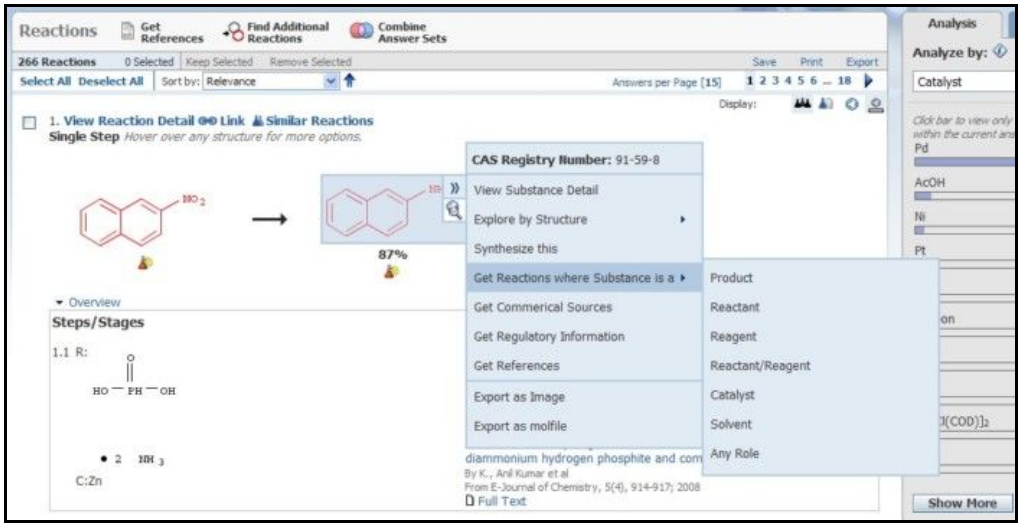
一致（标准）的物质上下文菜单

物质上下文菜单已得到增强和标准化，提供对相关信息的直接一键式访问。

在物质和反应答案集(结果集)中都可使用新的物质上下文菜单。

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）是新选项。Synthesize this（合成此物质）**相当于 **Get Reactions where Substance is a Product（获取反应，其中物质是一种产品）。**

放大镜是缩放选项。

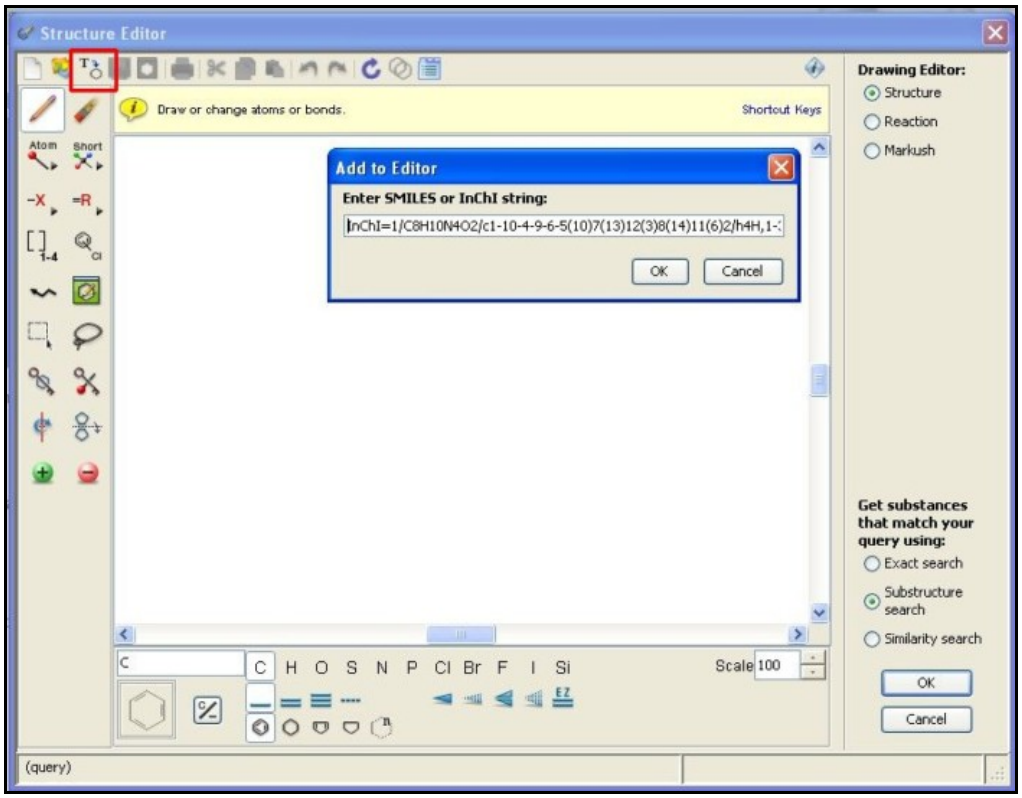


查找信息

通过输入 SMILES 和 InChI 字符串检索结构

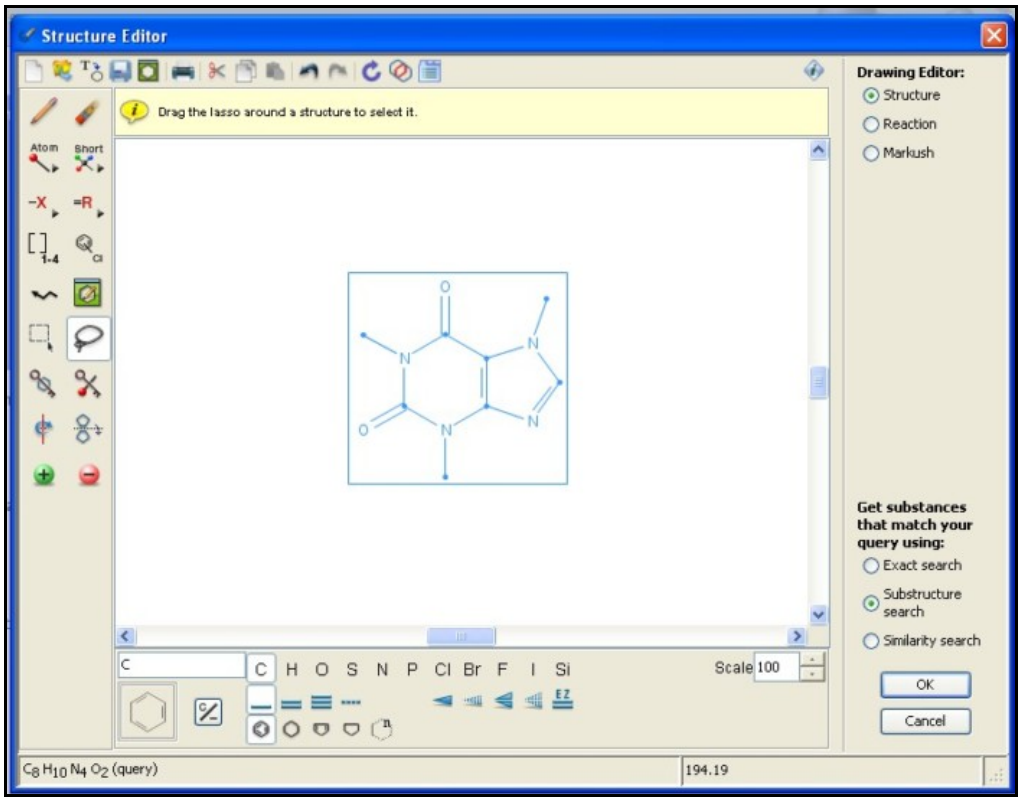
1. 该功能允许用户将 SMILES（Simplified Molecular Input Line Entry Specification，简化分子线性输入规范）或 InChI（International Chemical Identifier，国际化学识别符）字符串输入到结构绘图编辑器中。

2. 如果 SMILES 或 InChI 是用户掌握的唯一信息，则其仅可用于 Explore in SciFinder（在 SciFinder 中检索）。



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，随后可被用于检索结构和相关信息，或充当新（子）结构搜索的基础。



CAS 客户中心
電話: 800-753-4227 (北美地區)
614-447-3700 (全球其他地區)
傳真: 614-447-3751
電子郵件: help@cas.org
互聯網: www.cas.org

美国化学学会
分支机构