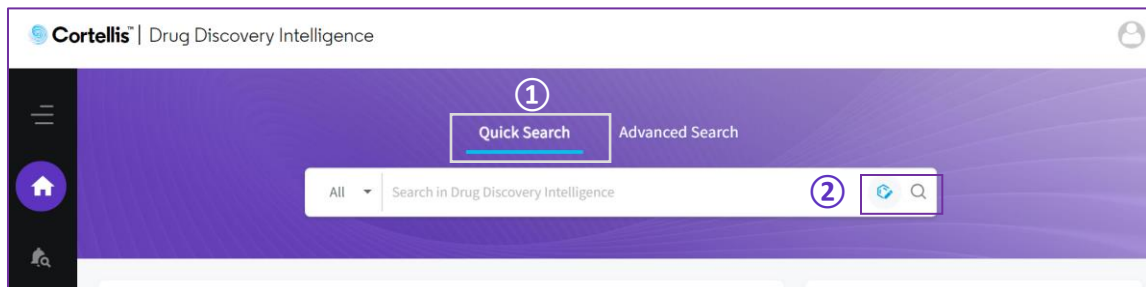


Cortellis Drug Discovery Intelligence™ 药物早期研发情报

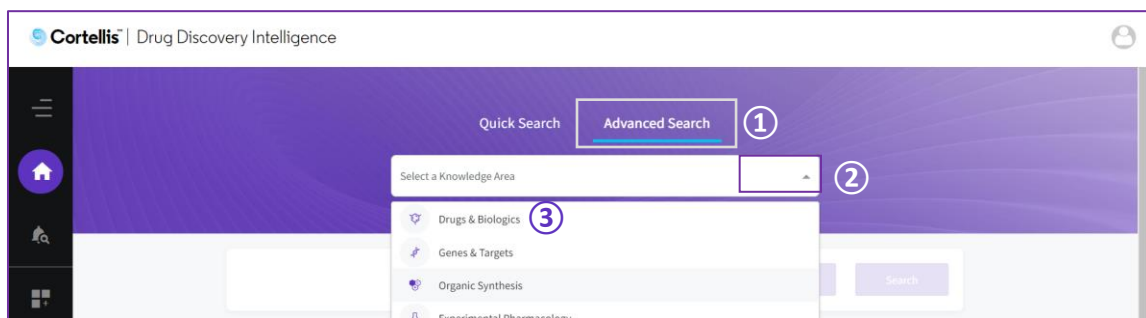
应用案例 3：如何进行结构检索

登录数据库，寻找“结构检索”入口，“快速检索”和“高级检索”中都设有结构检索。具体操作如下：

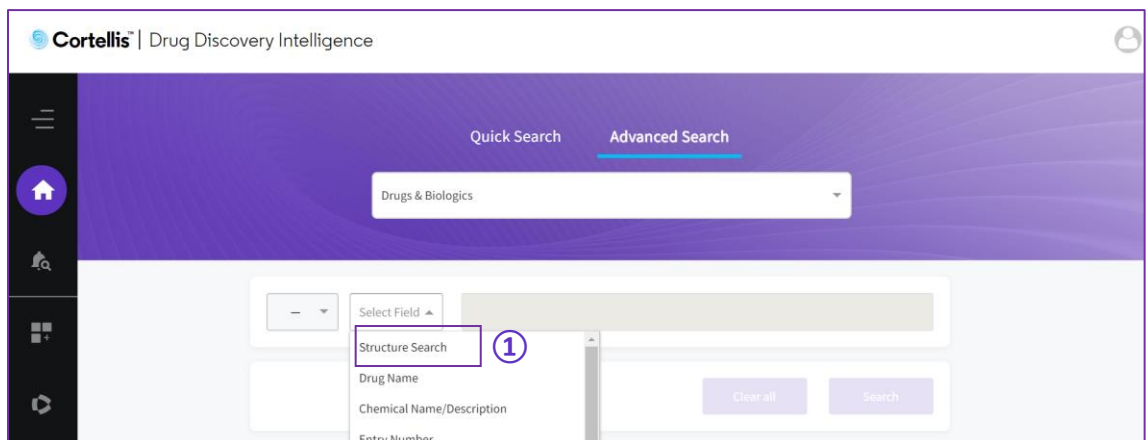
1. 在数据库主页，“快速检索”①中“结构检索”②的入口，点击进入“结构检索”界面。



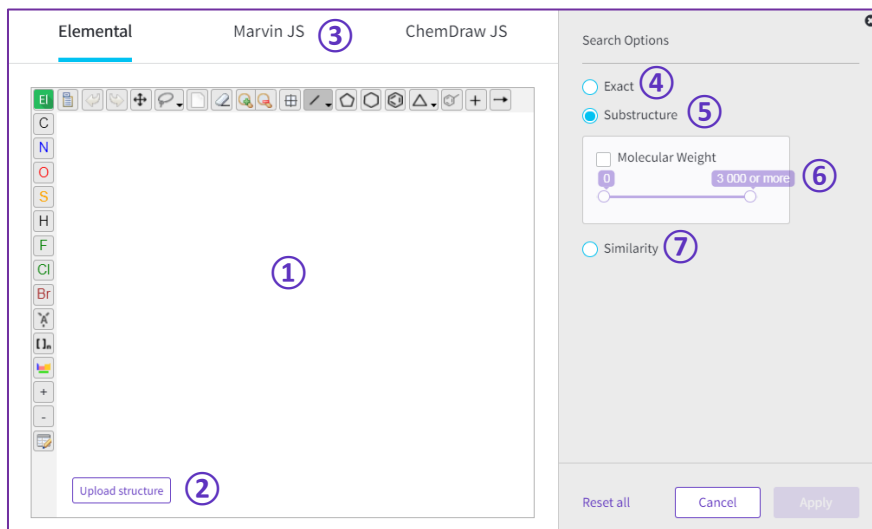
2. 在数据库主页“高级检索”界面①，点击下拉框②，查看高级检索全部模块，每个模块都匹配有结构检索功能。以“Drug & Biologics”③，点击进入该模块。



3. 在“Drug & Biologics”模块，点击下拉框，可查看全部检索项，结构检索如下图①，点击进入结构检索界面。



4. 在结构检索界面，可以绘制化学结构，或者导入 mol 文件进行检索，兼容 Marvin 和 ChemDraw 软件；支持精确检索、亚结构检索和相似度检索；支持限定分子量。



- ① 绘制结构
- ② 上传 mol 文件进行检索
- ③ 可切换兼容的绘图软件如 Marvin、ChemDraw
- ④ 精确检索
- ⑤ 亚结构检索
- ⑥ 亚结构检索，限定分子量
- ⑦ 相似度检索

