

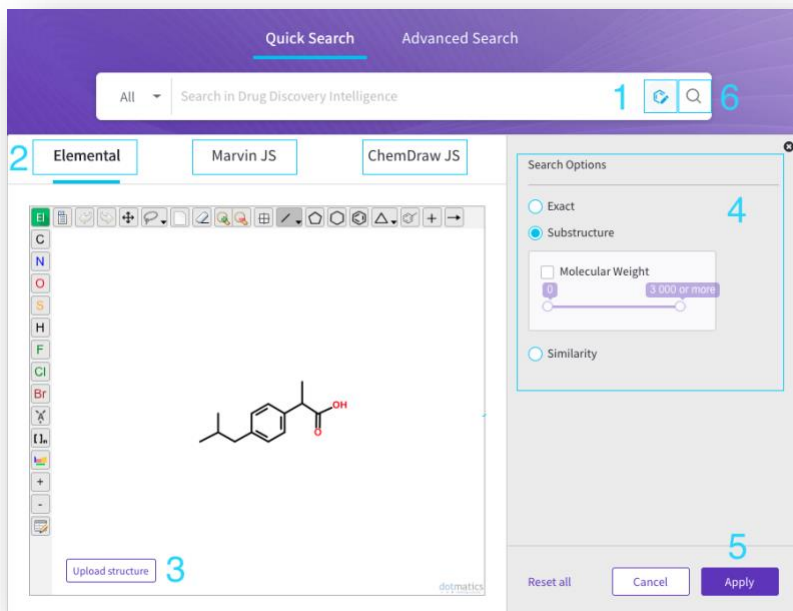
Cortellis Drug Discovery Intelligence

使用结构式检索 (Structure Search) 搜索特定的化学分子

您想通过精确结构、相似性结构或子结构检索获取您所需的目标化合物信息吗？

结构式检索 (Structure Search) 功能能够通过精确结构检索、相似性检索或子结构检索得到您所需的目标化合物。相似性检索与子结构检索的不同之处在于它依赖于分子描述符、指纹图谱和逻辑算法 (详见附录)。相似性检索是精确结构和子结构检索的补充，它获得的结果与使用化学结构搜索策略所得到的结果不同。例如：您是一位从事疼痛领域研究的学者，您希望通过 *Cortellis Drug Discovery Intelligence* 的相似性检索功能，获取与您的候选化合物相关的研究进展。

在快速检索 (Quick Search) 中运行结构式检索 (Structure Search)

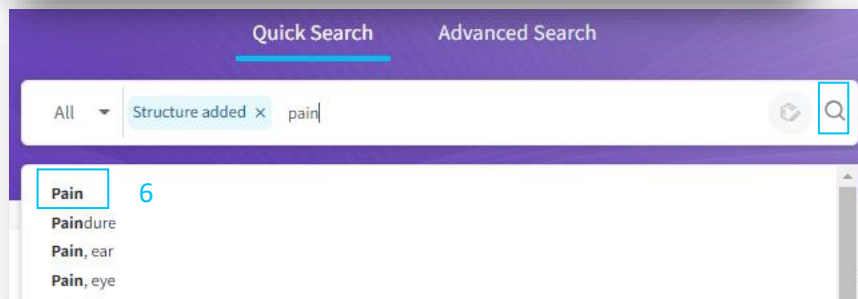


The screenshot shows the 'Quick Search' interface. At the top, there are tabs for 'Quick Search' and 'Advanced Search'. Below them is a search bar with a dropdown menu set to 'All' and the text 'Search in Drug Discovery Intelligence'. To the right of the search bar are icons for 'Structure Search' (1) and a search icon (6). Below the search bar are three buttons for structure editors: 'Elemental' (2), 'Marvin JS', and 'ChemDraw JS'. The main area is a drawing tool with a toolbar on the left and a canvas in the center. The canvas shows a chemical structure of a carboxylic acid derivative. Below the canvas is an 'Upload structure' button (3). To the right of the canvas is a 'Search Options' panel (4) with three radio buttons: 'Exact', 'Substructure' (selected), and 'Similarity'. The 'Substructure' option has a sub-panel for 'Molecular Weight' with a range from 0 to '3,000 or more'. At the bottom right of the panel are 'Reset all', 'Cancel', and 'Apply' buttons (5).

在首页的 Quick Search 输入栏右端点击 **Structure Search** 图标。

可选择您偏爱的结构编辑器 (Elemental (默认), Marvin JS, 或 ChemDraw JS)[2], 使用画图工具绘制化学结构, 此外, 您也可以使用 **Upload** 工具上传已经绘制好的 .mol 类型的结构文件[3]。

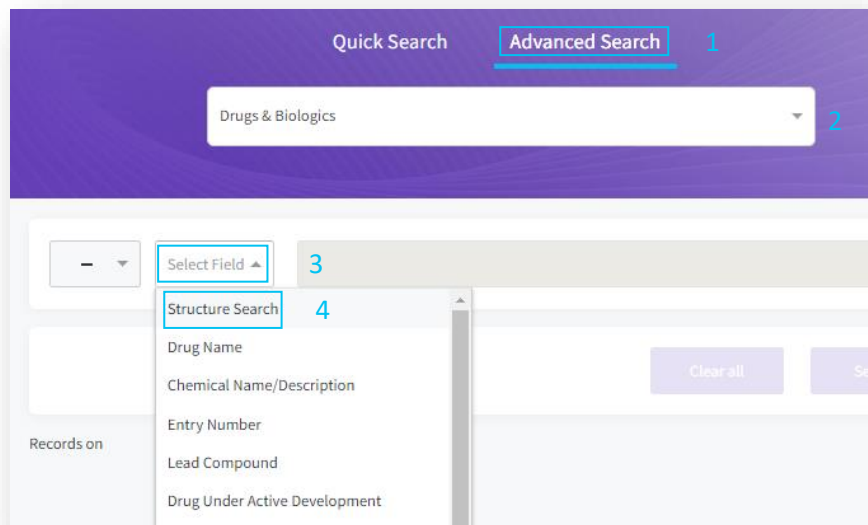
在右侧的 **Search Options** 中选定您的检索方式, 包括 **Exact** (精确结构检索), **Substructure** (子结构检索, 可限定分子量范围) 或者 **Similarity** (相似性检索, 可限定相似性百分比 [4])。



The screenshot shows the search results for 'Pain'. The search bar now contains 'Structure added x pain' and a search icon (6). Below the search bar is a list of results: 'Pain' (6), 'Paindure', 'Pain, ear', and 'Pain, eye'. The 'Pain' result is highlighted with a blue box.

当结构式绘制完毕后, 点击 **Apply** [5] 将您的结构提交至 Quick search 输入栏中, 然后运行检索功能或增加其他检索词进行合并检索 [6]。

在高级检索(Advanced Search)中运行结构式检索(structure search)



在首页点击 **Advanced Search** [1]。

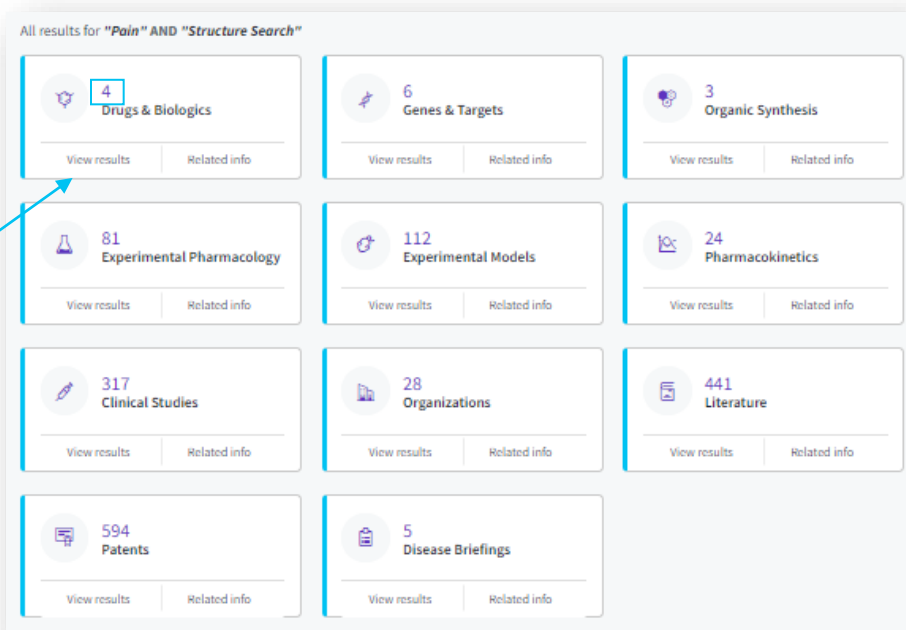
在下拉菜单中选定知识领域 [2]。

在 **Select Field** 目录中 [3] 点选 **Structure Search** [4] 打开结构式编辑器。绘制并提交结构式后，您可以继续选择其他检索项，最后点击 **Search** 运行检索。

小贴士：

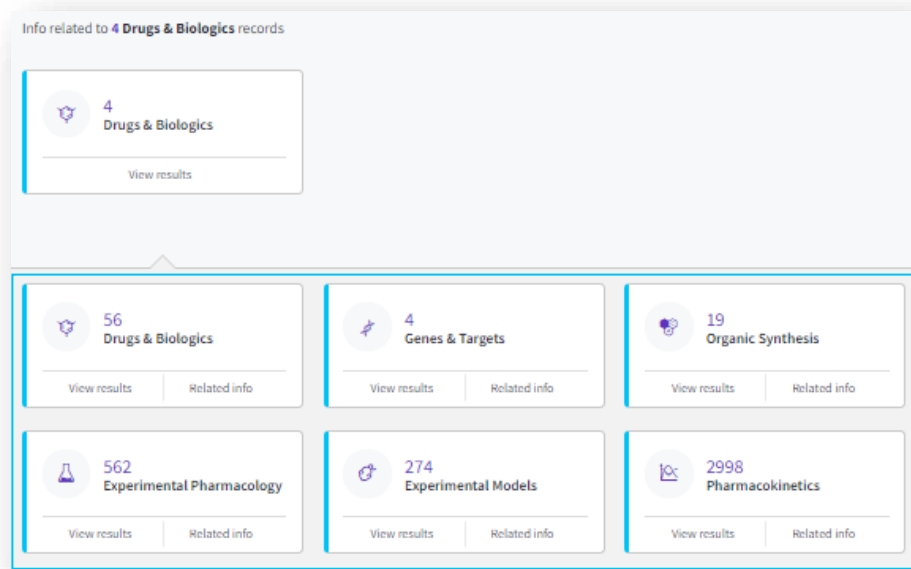
- 当您首次使用结构式检索功能时，请阅读附录了解结构式编辑器的使用方式。ChemDraw JS 结构式编辑器已于 2019 年底上线。
- 精确结构检索，将会检索出匹配您所绘制的精确化学结构的化学分子；
子结构检索，将会检索出包含您所绘制的化学结构母核或片段的化学分子，并可以通过分子量对结果进行限定；
相似性检索，将会检索出与您所绘制的化学结构最具相似性的化学分子。其中，默认的相似度阈值为 80%，即检索结果的相似度至少为 80%。您也可自行限定相似度阈值。

应用检索结果



在运行检索后 (例如检索条件为 80% 的结构相似性检索 AND 疼痛), 返回的命中记录将以知识领域进行分类展示。

想要查看在 **Drug & Biologics** 领域内的检索结果, 可以点击 **Drug & Biologics** 卡片上端的数字, 或点击卡片下方的 **View results** 按钮。



或者, 若想了解与检索结果关联的其他记录, 可点击卡片下方的 **Related Info** 按钮。

此时相关记录会即刻出现在该页面的下半部分。

The screenshot displays a web interface for drug discovery. At the top, there are tabs for 'Product List', 'Development Status', and 'Milestones'. A 'View related info' link is visible in the top right. Below the tabs, there is a search bar with 'Apply Filters' and 'Sorted by relevance'. The main area shows a table of drug records. The first record is for Ibuprofen (Entry Number 133198, Similarity 100.0%, Launched - 1969). The table columns include Entry Number, Similarity, Highest Phase, Code Name, Generic Name, Brand Name, Product Category, Therapeutic Group, Mechanism of Action, and Organization. A blue arrow points to the 'Entry Number' column. A '3 Apply Filters' dialog box is open on the right, showing a list of filter categories: Highest Phase, Under Active Development, Development Status, Milestones, Product Category, Drug Type, Lead Compound, Mechanism of Action, and Therapeutic Group.

在相似性检索中，结果会以相似度百分比排序；在精确结构和子结构检索中，结果会以相关程度从高至低排序 [1]。点击 **Development status** 或 **Milestones** 选项卡，检索结果会以不同的方式呈现 [2]。若您希望对结果进行精炼，可以使用 **Apply Filters** [3] 功能，点选相应的筛选条件对已有结果进行筛选。想要了解一个化学分子的具体信息，可以点击左侧的 **Entry Number** 将打开该药物的信息页面 [4]。

The screenshot shows the 'Ibuprofen' product information page. It has tabs for 'Product', 'Development Status', and 'Milestones'. The 'Product' tab is active. The page is divided into 'Product Properties' and 'Related Content' sections. The 'Product Properties' section includes a chemical structure of Ibuprofen and the following data:

Code Name	BC-1054; ST-1482; SST-0225; ZAG-1701; OXP-001; TIB-200
Generic Name	Ibuprofen
Brand Name	Nurofen; Spedifen; Nurofen Meltlets; Brufen Retard; Brufen; Aktren; Advil; Motrin; Ibuprox; CDT-Ibuprofen; Algiflor; Amelior; Caldolor; Pedea; OXpzero ibuprofen; Dolgit
Molecular Formula	C ₁₃ H ₁₈ O ₂
Molecular Weight	206.281
Chemical Name/Description	(S)-2-(4-(4-isobutylphenyl)propionic acid; alpha-Methyl-4-(isobutyl)phenylacetic acid
CAS Registry Number*	527688-20-6 (sodium salt) 015687-27-1

The 'Standard InChI' is InChI=1S/C13H18O2/c1-9(2)8-11-4-6-12(7-5-11)10(3)13(14)15/h4-7,9-10H,8H2,1-3H3,(H,14,15) and the 'Standard InChIKey' is HEFNW5XXWATRW-UHFFFAOYSA-N. The 'Related Content' section on the right lists various knowledge domains and their associated record counts:

Drugs & Biologics	55
Genes & Targets	4
Organic Synthesis	19
Experimental Pharmacology	559
Experimental Models	274
Pharmacokinetics	2983
Clinical Studies	796

药物信息页面展示了该产品的概况，包括产品信息、产品特性、开发阶段、注册信息等内容。您可点击上方的 **Development Status** 和 **Milestones** 选项卡了解该药品的其他信息。

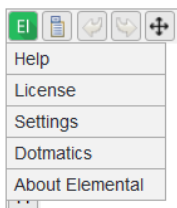
在此页面的右侧可以方便的查询与该产品相关的其他知识领域的记录。

附录

结构式编辑器

想进一步了解 *Cortellis Drug Discovery Intelligence* 中提供的结构式编辑器，请您访问下方的链接以获取用户指南：

- Elemental: <https://www.dotmatics.com/products/elemental>



此外，点击 Elemental 编辑器中的 Help 按钮将会打开该编辑器的使用帮助 PDF 文档。

- Marvin JS: <https://docs.chemaxon.com/display/docs/Marvin+JS+User%27s+Guide>
- ChemDraw JS: <http://media.cambridgesoft.com/support/manuals/16/ChemDrawHelp.pdf>

相似性检索- 分子描述符、指纹图谱和逻辑算法

相似性检索工具能够检索与查询结构最具相似度的化学分子。相似度的计算方法采用 Tanimoto 系数算法，它包含两个参数：

- 查询结构的指纹图谱 (一组记录化学分子结构的字符串)
- 数据库中现有结构的指纹图谱

Tanimoto 系数由以下公式计算得出：

$$NA \& B / (NA + NB - NA \& B)$$

其中 NA 和 NB 分别表示结构 A 与结构 B 的字符串数量，NA&B 表示双方共有的字符串数量。

相似度阈值限定了 Tanimoto 系数的下限。当 Tanimoto 系数大于所设定的阈值时，检索结果将被判定为与查询结构具有相似性。

命中记录将会按照相似度从高到低的顺序进行排序。

相似度阈值介于 0 至 100% 之前。

设置较大的相似度阈值会使命中的记录更少，但命中记录与查询结构的相似度的更高。

想要获取更多信息，请联系 [LS Product Support](#) 的服务支持。