

第七部分 绘制查询结构

7.1 查询结构

为检索结构信息提供的绘制结构

原子标有特殊属性

第七部分 绘制查询结构

7.2 原子属性

7.2.1 原子属性



原子标有特殊属性

第七部分 绘制查询结构

Atom Properties

Substituents: Unspecified 2

Implicit Hydrogens: Allowed

Ring Bond Count: Any

Unsaturation: Unspecified

Reaction Change: May be anything

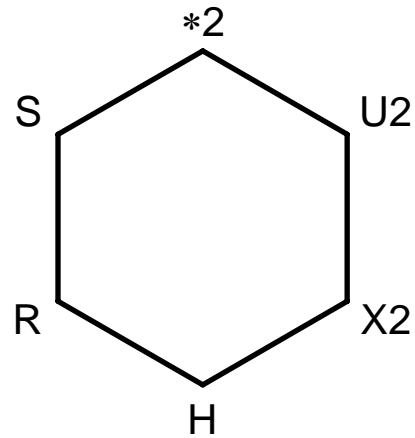
Reaction Stereo: Any

Translation: Equal

Abnormal Valence: Not allowed

Use Defaults OK Cancel

第七部分 绘制查询结构



第七部分 绘制查询结构

指示器

查询属性

*	取代基：自由位(按自由位置数)
U	取代基：最大到(按最大取代数)
X	取代基：精确到(按取代数)
H	含氢
R	环键数
S	不饱和
C	反应变化
T	立体反应
L	转化
I	同位素丰度

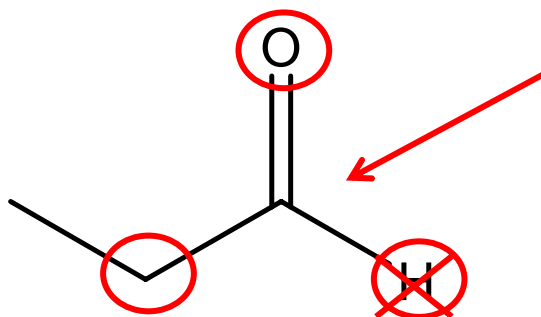
第七部分 绘制查询结构

7.2.2 取代基

取代基属性指被选原子上连接的取代基的数目

ChemDraw中，取代基被定义为任何键连接的非氢原子

第七部分 绘制查询结构



第七部分 绘制查询结构

选项

查询结果

Unspecified

不确定
(默认)

由目标数据库确定

Free Sites
自由位置

找到化合物，其中被选原子可以含有取代基的最大范围是选项[数量]框中的数量加上所绘制键的数量

Up to
最大到

找到化合物，其中被选原子可以含有取代基的最大范围是选项[数量]框中的数量

Exactly
精确到

找到被选原子确切含有微调按钮中指定数目的取代基的化合物，最多可有**15**个取代基

第七部分 绘制查询结构

7.2.2 隐含氢

隐含氢属性是否可在被选原子上连接额外的氢

选项	查询结果
Not allowed 禁用	找到被选原子上没有连接额外氢的化合物
Allowed 允许 (默认)	找到匹配的化合物而不管被选原子上有没有氢连接

第七部分 绘制查询结构

7.2.4 环键数

环键数指任何大小的环上的原子连接的键的数目

第七部分 绘制查询结构

选项	查询结果
Any 任何 (默认)	匹配化合物中被选原子可以是任何环(非环)的成员
No ring bonds 无环键	脂肪族化合物
As draw 同绘制	匹配化合物中被选原子位于所画的相同类型和数目的环中
Simple ring 单一环	匹配化合物中被选原子位于一个环中(该原子有两个环键)
Fusion 稠合	匹配化合物中被选原子位于稠合环中(该原子有三个环键)
Spiro or Higher 螺环或更高键	匹配化合物中被选原子是螺环或更高键连接的一员

第七部分 绘制查询结构

7.2.5 不饱和度

不饱和度属性指被选原子上是否连接多键

选项

查询结果

Unspecified
不确定(默认)

匹配化合物的被选原子不管是否连接多键

Must be absent
必须没有

匹配化合物被选原子没有连接多键

Must be prebsent
必须有

匹配化合物被选原子至少连接一个多键(双键、三键或芳香键)

第七部分 绘制查询结构

7.2.6 反应变化(检索反应)

反应变化属性是指反应后被选原子是否发生变化

选项

查询结果

May be anything
可以任意(默认)

找到被选原子反应后没有发生变化的化合物

Must be specified
必须指定

找到匹配化合物的被选原子反应后发生如所绘制的变化

第七部分 绘制查询结构

7.2.7 立体反应

立体反应属性是指反应后被选原子是否保持立体中心

选项

查询结果

Any任何(默认)

找出忽略被选原子的立体化学的所有化合物

Inversion
反向

找出反应后被选原子变成反向立体构型的所有化合物

Rentention
保留

找出反应后被选原子的立体构型不发生变化的所有化合物

第七部分 绘制查询结构

7.2.8 转化

转化属性是指结构查询中需要匹配的属性和在**Markush DARC**查询中可能的数据库命中率

选项	查询结果
Equal(默认)	对一般项，匹配指定到特殊或者一般性
Broad 广泛的	指定查询原子到相应数据库的超原子
Narrow 精确的	查询相应数据库中相应的原子或基团
Any 任意	对任何项，转化一般或者指定项

第七部分 绘制查询结构

7.2.9 同位素丰度

该属性允许区别不同同位素化合物

第七部分 绘制查询结构

选项

查询结果

Unspecified

默认选项

Any 任何

对**ChemFinder**，默认值相同，包括与其他系统的兼容性

Natural 正常

指示为更改核素的同位素

Enriched 富足

指示同位素取代基混合物和未指定核素的同位素

Deficient 不足

指示删除的标记，其核素含量低于正常比例

Nonnatural 非天然

指示同位素取代核素，化合物中的分子只能由指示的核素组成

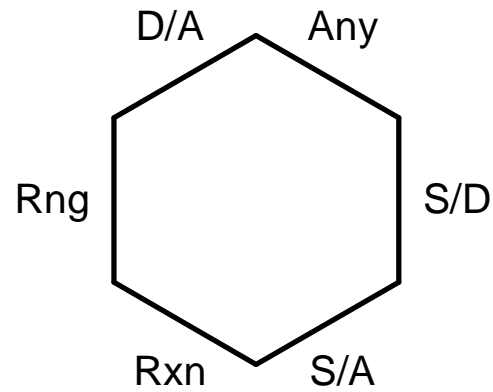
第七部分 绘制查询结构

7.3 键

7.3.1 键属性



第七部分 绘制查询结构



第七部分 绘制查询结构

指示符	查询属性
Any	键类型: 任意
S/D	键类型: 单键/双键
D/A	键类型: 双键/芳香键
S/A	键类型: 单键/芳香键
Rng	拓扑: 环
Chn	拓扑: 链
Rxn	反应中心

第七部分 绘制查询结构

7.3.2 键类型

选项	查询结果
Single (all) and Dative 单键到配键	找到被选键是单键到配键所有类型的化合物
Double or Double Bold 双键	找到被选键是双键的化合物
Double Either 双醚	找到被选键是双键和含醚的顺/反立体化学类型的化合物
Aromatic 芳香键	找到被选键是芳香键的化合物
Tautomeric 互变异构	找到被选键是互变异构立体化学类型的化合物

第七部分 绘制查询结构

选项	查询结果
Triple 叁键	找到被选键是三键的化合物
Any 任意	找到匹配化合物而不管被选键的类型
S/D	找到被选键是单键或双键的化合物
D/A	找到被选键是双键或芳香键的化合物
S/A	找到被选键是单键或芳香键的化合物

第七部分 绘制查询结构

7.3.3 拓扑

拓扑属性是指被选键的周围环境

选项	查询结果
Unspecified (默认)	找到匹配化合物而不管周围环境
Ring 环	找到被选键是环的一部分的化合物
Chain 链	找到被选键是链的一部分(确定不是环的一部分)的化合物

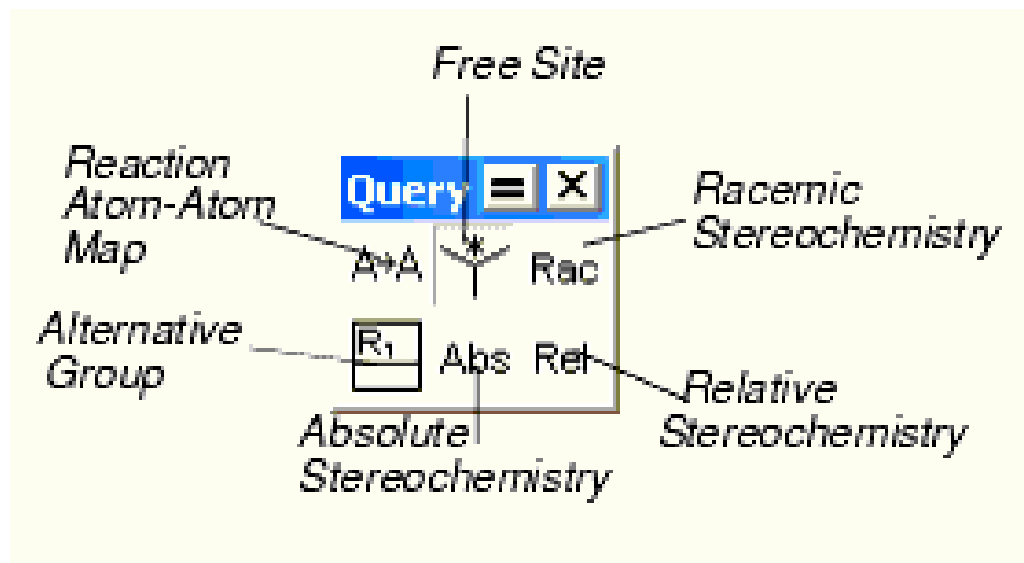
第七部分 绘制查询结构

7.3.4 反应中心——是指被选键在反应中受到的影响

选项	查询结果
Unspecified 默认	找到匹配化合物，不管被选键是否为反应中心
Center 中心	找到被选键是被反应影响的化合物，但改变类型未指定
Make/Break 建立/打开	找到被选键在反应中被建立/打开的化合物
Change 改变	找到被选键的键数在反应中改变的化合物
Make/Change 建立/改变	找到被选键在反应中被建立/改变并且键的类型发生改变的化合物
Not Center 非中心	找到被选键在反应中可改变，但不是反应中心的化合物
Not Modified 不改变	找到被选键在反应中不改变的化合物

第七部分 绘制查询结构

7.4 查询工具面板



ChemDraw 10.0

第七部分 绘制查询结构

7.5 通用俗名 代表一类元素或结构

- “M”可以是所有金属的通用俗名
- “X”可以代表卤代物
- “Ary”可以代表一个芳香子结构

第七部分 绘制查询结构

7.6 元素列标记

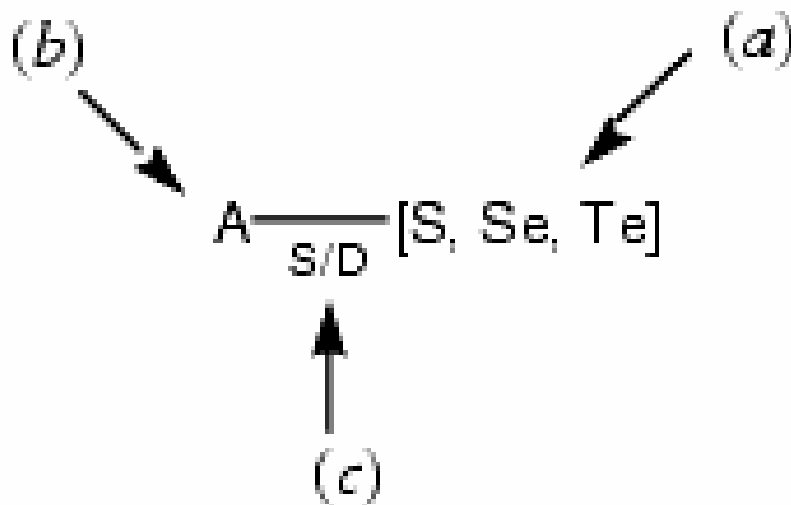
通过标记为元素列标记，可制定“列”中的一个原子必须要与要搜索的结构匹配



中括号

逗号

第七部分 绘制查询结构



- 非氧硫族元素连接在另一原子上
- A 不一定是碳
- 硫族元素和其他原子之间的键类型是单键或双键

第七部分 绘制查询结构

7.7 元素非列标记

通过标记为元素列标记，可制定“列”中的一个原子必须要与要搜索的结构匹配；而非列标记要求元素不匹配

——NOT F,Cl,Br,I

——[-Cl,O,N]

——[NOT F,Cl,Br,I]

——[NOT Cl,O,N]