

## MDL CrossFire Commander


Monilla yliopistoilla on akateeminen lisenssisopimus CSC:n kanssa *MDL CrossFire Beilstein* -tietokannan käytöstä. Tietokantaa käytetään CSC:n palvelimelta. Käytössä ovat Beilstein-, Gmelin- ja Ecopharm- tietokannat, joista orgaanisen kemian alalla tärkein on Beilstein. Käyttäjätunnukset haetaan CSC:ltä. Käyttöliittymänä toimii MDL Crossfire -ohjelma, jonka saa ladattua CSC:n Beilstein sivuilta tutkijakäyttöliittymän kautta. Tarkempia ohjeita käyttäjätunnuksien hakemiseen ja ohjelman asentamiseen löytyy osoitteesta: <http://www.csc.fi/chem/progs/beilstein.html.fi>. Epäselvissä tapauksissa kannattaa ottaa yhteys oman yliopiston yhteyshenkilöön.

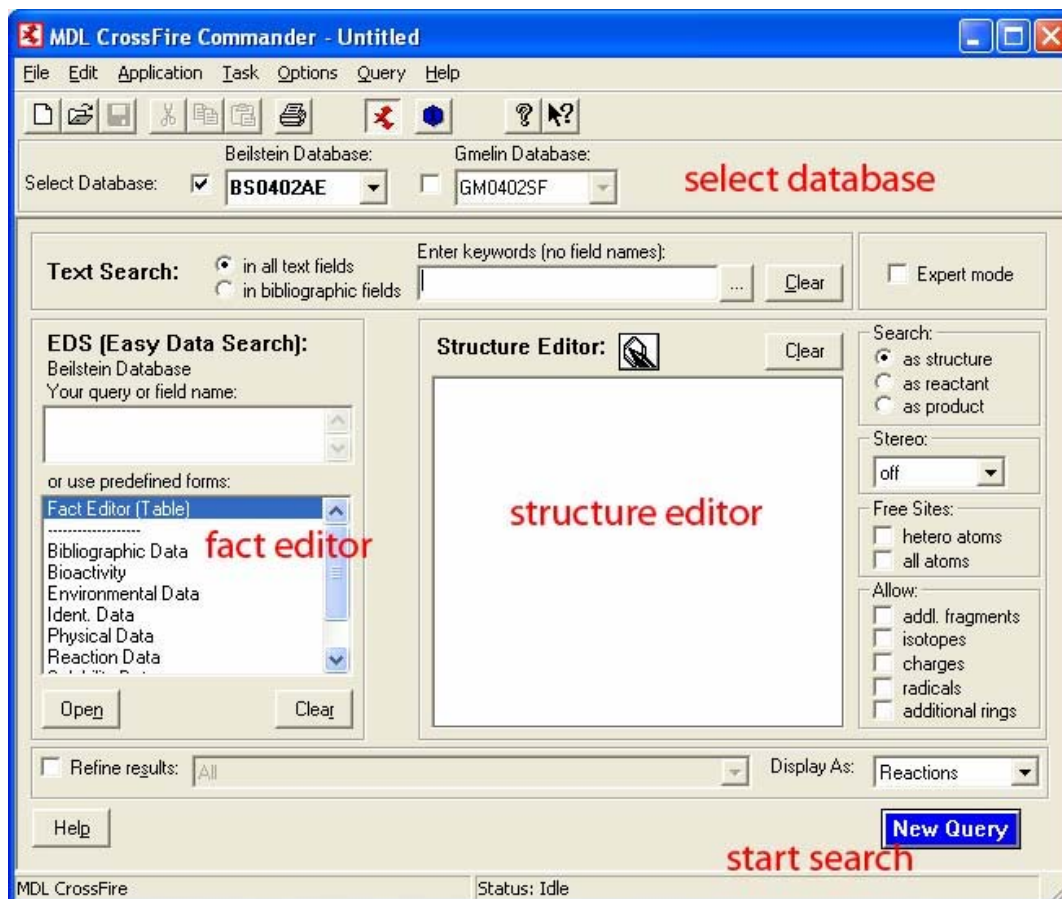
### MDL CrossFire Commander –ohjelman käyttöohjeet

Tässä ohjeessa annetaan vain yksinkertaisia perusohjeita ohjelman käyttöön. Tarkemmat englanninkieliset ohjeet löytyvät osoitteesta:

<http://www.csc.fi/chem/progs/startV6.pdf>

### Ohjelman käynnistys

MDL CrossFire Commander -ohjelma käynnistetään työpöydän  -kuvakkeesta. Kun ohjelma on käynnistetty, avautuu seuraavanlainen sivu.



CrossFire –sovellus käynnistetään painamalla -painiketta. Näytölle aukeaa uusi ikkuna, johon kirjoitetaan käyttäjätunnus ja salasana.



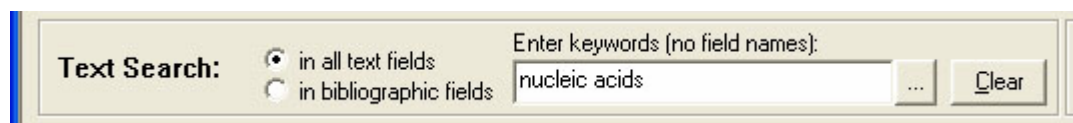
Tietokanta valitaan ohjelman ylävalikon alla olevasta osasta.



## Tiedon haku

### *Hakusanat*

Tietokannoista voidaan hakea hakusanoilla kirjoittamalla sanat *Text Search* -kenttään.



Etsiminen aloitetaan painamalla F7, return tai Start Search –painiketta. Jos Text Search -kentstä valitsee *in all text fields* -valinnan ohjelma kysyy seuraavaksi, miltä alueelta haluat hakea. *In bibliographic fields* –valinnalla haetaan vain perusindeksi viitteistä.

### *Fact Editor*

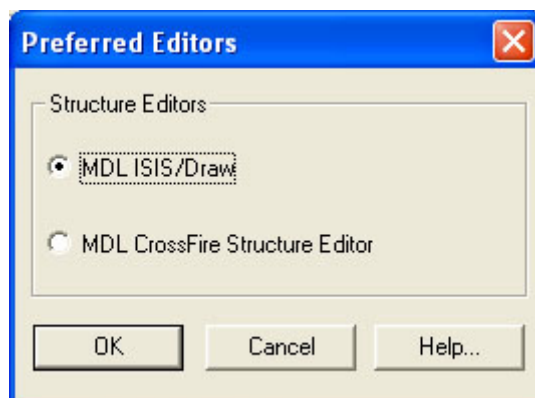
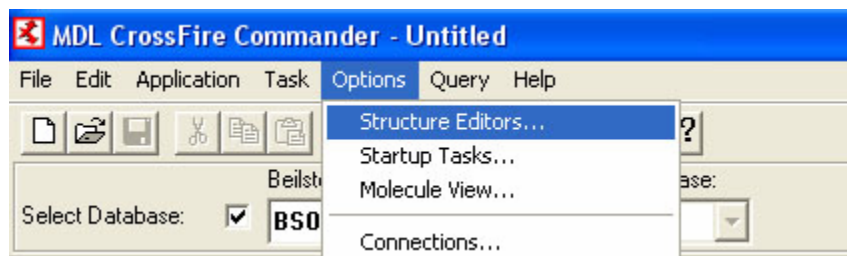
Fact Editor osiossa voidaan määrittellä erilaisia hakuehtoja haettaville yhdisteille esim. sulamispiste. Tarkempia ohjeita tämän ominaisuuden käyttöön löytyy osoitteesta:

<http://www.csc.fi/chem/progs/startV6.pdf>

### *Hakeminen reaktioyhtälön tai rakenteen avulla*

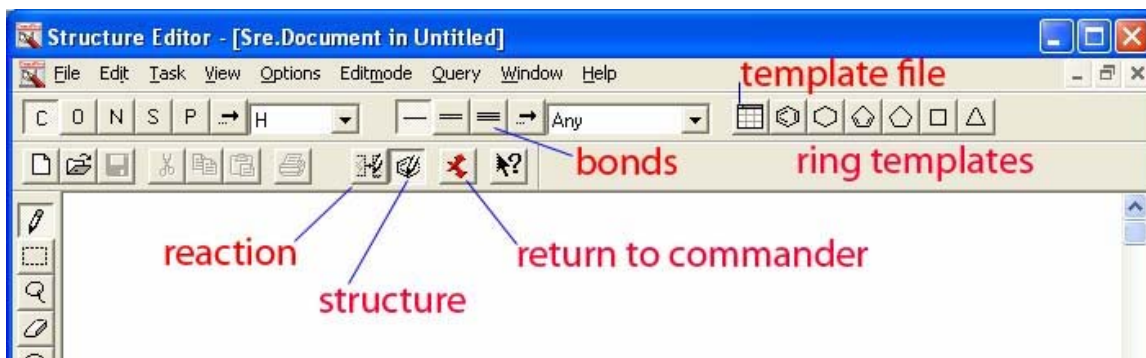
Haku voidaan suorittaa myös reaktioyhtälön avulla. Rakenteiden piirtämiseen on käytettävissä kaksi ohjelmaa: ISIS/Draw tai MDL CrossFire Structure Editor. Editori valitaan ohjelman Options -valikosta:




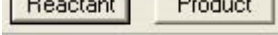


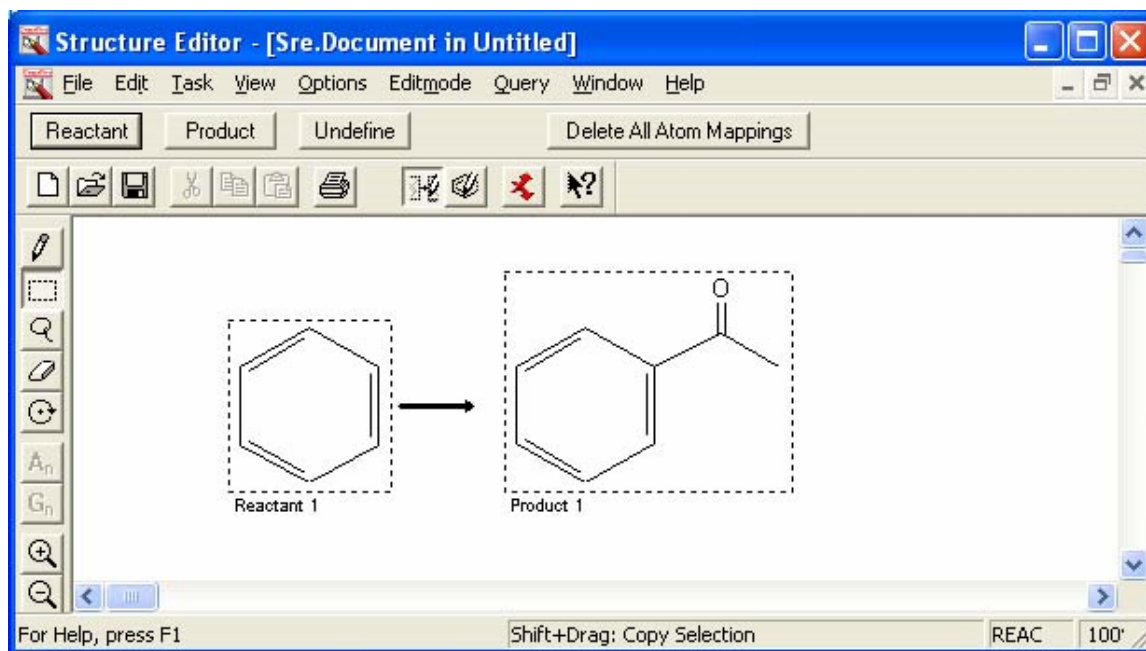
Molemmat rakenne-editorit ovat hyvin yksinkertaisia käyttää. ISIS/Draw:n käyttöön löytyy lisäohjeita tämän oppaan kohdasta ISIS/Draw.

### MDL CrossFire Structure Editor:

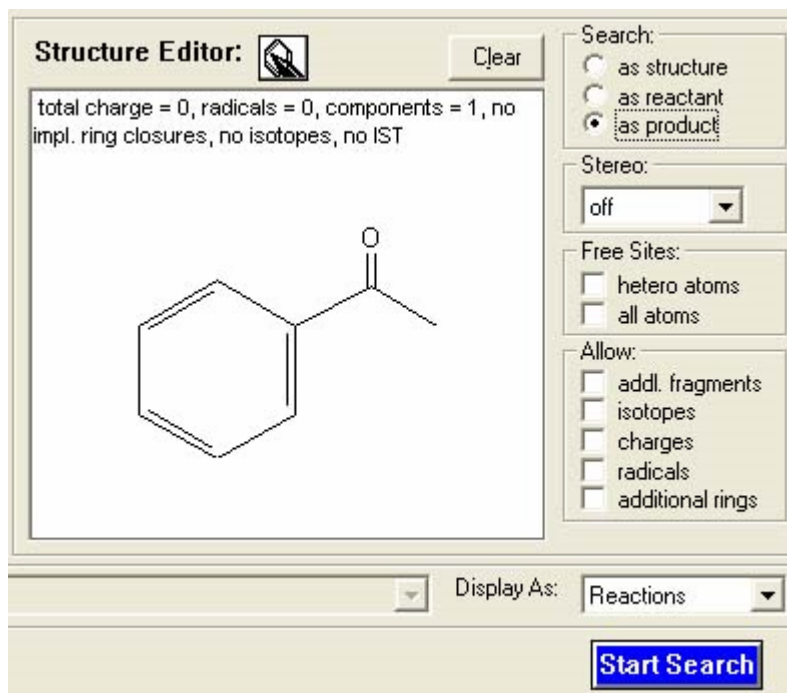


MDL CrossFire Editorissa piirretään rakenne käytettävissä olevilla työkaluilla ja tämän jälkeen käytetään Reaction Attributes -toimintoa  määrittelemään, onko rakenne reagenssi vai tuote.

Aktivoituasi halutun rakenteen valitse valikosta  "Reactant" tai "Product" tarpeen mukaan. Reagensseja ja tuotteita voi olla useita.



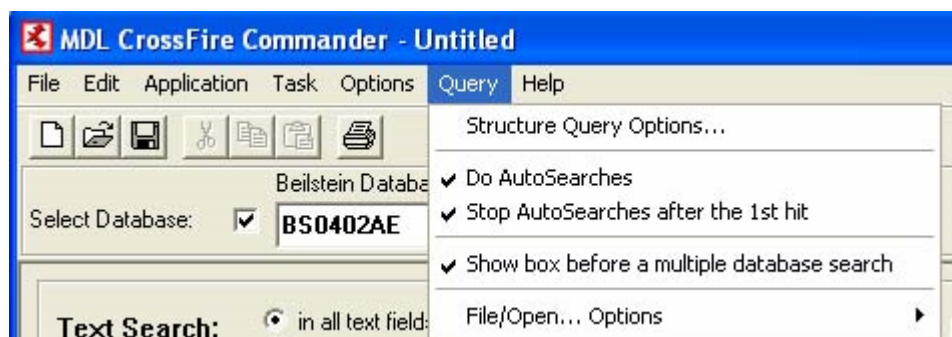
Jos haetaan vain yhtä yhdistettä, se voidaan määritellä tuotteeksi tai reagenssiksi myös **Search** –ikkunasta.



Haku aloitetaan Start Search -painikkeella.

**AutoSearch:** jos "AutoSearch" on mahdollistettu, Commander etsii uudelleen viitteitä annetulla hakusanalla tai rakenteella. AutoSearch voidaan pysäyttää ensimmäisen viitteen jälkeen. Jos tätä

valintaa ei ole tehty, etsitään kaikki mahdolliset variaatiot kyselystä. AutoSearch voidaan valita *Query* –valikosta.



### Löydetyjen viitteiden esitys

Your recent search had the following hits in Reactions:

Select	Hits	Note	Query
01 <input checked="" type="checkbox"/>	2284	Original query	total charge = 0, radicals = 0, components = 1, no impl. ring closures, no isotopes, no IST

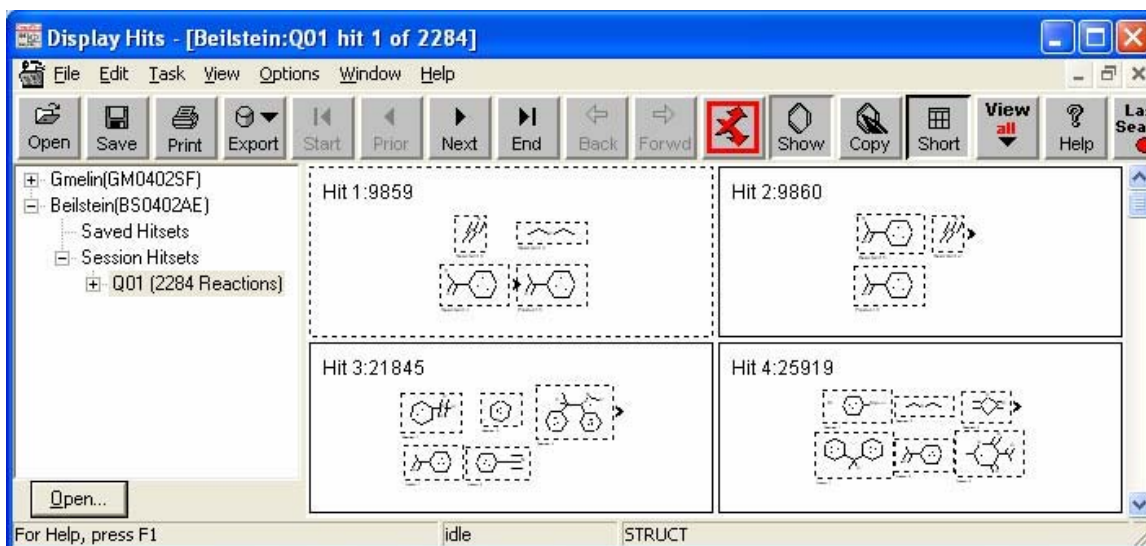
Product 1


View

Back to Query

Tuloksia voidaan tarkastella *View* –painikkeella.

Display Hits ikkunan View -valikosta voidaan muuttaa löytyneiden viitteiden esitystapaa tarpeiden mukaisesti. NEXT ja PREVIOUS -painikkeella pääsee selaamaan viitteitä.



Viitteiden yksityiskohdat pääsee näkemään  -painikkeella.