CAS SCIFINDER^{n}

常见问题解答

2022 年 8 月

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

CAS SciFinder^{n}是美国化学文摘社（CAS）出品的新一代的权威科学研究工具，是化学及相关学科智能研究平台，提供全球全面、可靠的化学及相关学科研究信息和分析工具。CAS SciFinder^{n} 由国际科学家团队追踪全球科技进展，每日收录汇总、标引、管理着世界上的专利、科技期刊等内容，并通过 CAS SciFinder^{n} 平台提供的先进检索技术高效揭示重要的技术信息，确保研究人员及时同步全球重要的研究进展。CAS SciFinder^{n} 涵盖了化学及相关领域，如化学、生物、医药、材料、食品、应用化学、化学工程、农学、高分子、物理等多学科、跨学科的科技信息；收录的文献类型包括期刊、专利、会议论文、学位论文、图书、技术报告、评论、预印本和网络资源等。

CAS SciFinder^{n} 独特内容和特色：

- 提升文献检索效率：业界最先进的检索引擎之一，将文献检索时间缩短一半，获得更精确的结果，提高检索效率。

- 高效设计合成计划：充分利用全球最大的单步和多步反应数据库之一，全面考量反应条件、产率、催化剂和实验步骤，高效设计出合成计划（可节省一半的时间）。

- Synthetic Methods 合成方法解决方案：Synthetic Methods 是CAS SciFinder^{n}中的模块，是世界上最大合成方法合集之一，涵盖顶级期刊及专利中的合成制备信息，提供合成方法的每步详细操作信息，以易于阅读的表格形式展示实验详情，包括实验操作步骤、实验原料、实验条件、实验量级、反应转化类型、合成产物谱图信息、合成产物形态等

- CAS PatentPak®专利分析解决方案: CAS PatentPak 是 CAS SciFinder^{n} 中的模块，服务于科研人员和知识产权人士。PatentPak 在定位和分析大量专利中的化学结构方面，可以为研究人员节省一半以上的时间。PatentPak 是加速化学专利分析最可靠的工具之一；迄今为止只有 PatentPak 采用人工标引——研究人员可以快速识别专利中难以发现的物质（例如，表格化合物和图形图像内的化合物）。使用 PatentPak 可以访问 CAS REGISTRY^{SM}——世界上最全面的可公开获取的物质信息集合。

- 逆合成路线设计工具Retrosynthesis：基于全球最大的化学反应数据合集CAS REACTIONS结合先进的算法和人工智能，综合多种因素如原子经济性、收率、绿色、成本等为已被报道分子/未被报道分子提供实验验证或预测的逆合成路线。为合成化学家节省时间并提供新的思路和见解。

- 支撑生物学研究：生物序列检索工具Biosequences Search 提供超过12亿条可检索生物序列, 可进行 FTO 检索、侵权检索。

- 可视化检索结果：用户友好的可视化工具可以帮助用户快速做出更好的决策，这些工具可以精确定位趋势、模式和异常值，帮助将信息转化为洞察。

- CAS REGISTRY: 全球最大的物质数据合集，收录自19世纪初至今公开披露的超过1.9亿

个独特的物质（包括合金、配合物、矿物、混合物、聚合物和盐），CAS登记号被誉为化学物质的黄金标准，是向WHO提交INN申请时必须提供的信息，被广泛地应用在科研界及商务流程中。

- CAS Reactions：CAS创立的全球最大化学反应合集，收录1840年以来源自专利和非专利文献的1.4亿多条单步和多步反应。CAS的科学家在标引化学反应过程中提供了独特的增值信息，包括：实验安全信息、反应类型、反应条件及详细的实验操作步骤等，节省了用户从全文中总结、归纳相关反应信息所花费的时间。

- 马库什结构：CAS是全球唯一提供专利马库什结构的机构。从全球64家专利授权机构公开的专利中提取超过130万个可检索及浏览的马库什结构。一个马库什结构可能涵盖数千甚至数万个化合物，提升了用户进行化合物结构新颖性和创造性检索的能力。

账号问题

Q1：如何登录 CAS SciFinder^{n}?

A1：如果已经有 CAS SciFinder 账号，请使用 CAS SciFinder 账号和密码登录即可。如果没有 CAS SciFinder 账号，则请与贵单位 CAS SciFinder 管理人员联系获取账号。CAS SciFinder^{n} 的登录网址为：https://scifinder-n.cas.org。

Q2：我是一名学生。作为新用户，怎样才能访问 CAS SciFinder^{n}?

A2：学校的新用户需要先通过学校的 CAS SciFinder^{n} 注册链接注册账号后才能使用 CAS SciFinder^{n}。账号的具体注册方法，请访问所在学校图书馆网页或咨询所在学校图书馆的负责老师。

Q3：我可以在智能设备上使用 CAS SciFinder^{n} 吗?

A3：请使用授权 IP 范围内的网络登录智能设备，即可以使用。

Q4：我在上一家单位（学校）曾经注册过 CAS SciFinder^{n} 账号，在目前的单位能够继续使用吗?

A4：不可以，到新单位后需要重新申请（注册）账号。

Q5：我在本校注册的 CAS SciFinder^{n} 帐号可以在校外机构使用吗?

A5： 不可以。只能供自己和研究课题使用，禁止为他人代查。

Q6：我毕业之后可以继续使用在学校注册的 CAS SciFinder^{n} 账号吗?

A6：不可以。在学校注册的帐号仅能在学校就读期间使用，毕业后则不能再使用。

Q7：我可以与他人分享我的 CAS SciFinder^{n} 账号吗?

A7：不可以，自己注册的帐号仅能自己使用，不可与他人分享。

Q8：忘记登录密码怎么办?

A8：登录 SciFinder-n.cas.org, 在当前页面点击 Can`t log In，在弹出页面根据要求填写相应信息找回密码即可。如果您无法自己找回密码，请联系 china@acs-i.org，由相关客服人员协助您解决密码找回问题。

Q9：为什么显示此 IP 没有授权?

A9：用户需要在授权 IP 范围内才能使用 CAS SciFinder^{n}。如果您在使用时遇到 IP 未被授权的问题，请使用网址 http://web.cas.org/cgi-bin/casip 查询您的电脑 IP 地址，并将页面截图及您的 SciFinder 登录账号及注册 SciFinder 时使用的单位域名邮箱发送至 china@acs-i.org，便于 CAS 客服人员尽快解决您的问题。

Q10：我在本校注册的 CAS SciFinder^{n} 帐号可以在校外机构使用吗?

A10：不可以，只能在学校授权 IP 范围内使用，禁止在本校外的任何机构使用。如果您正在某商业机构实习或为某商业机构工作，也不允许在这些商业机构中使用在学校注册的 CAS SciFinder^{n} 帐号。

Q11：CAS SciFinder^{n} 有并发用户限制吗?

A11：没有并发用户数限制。

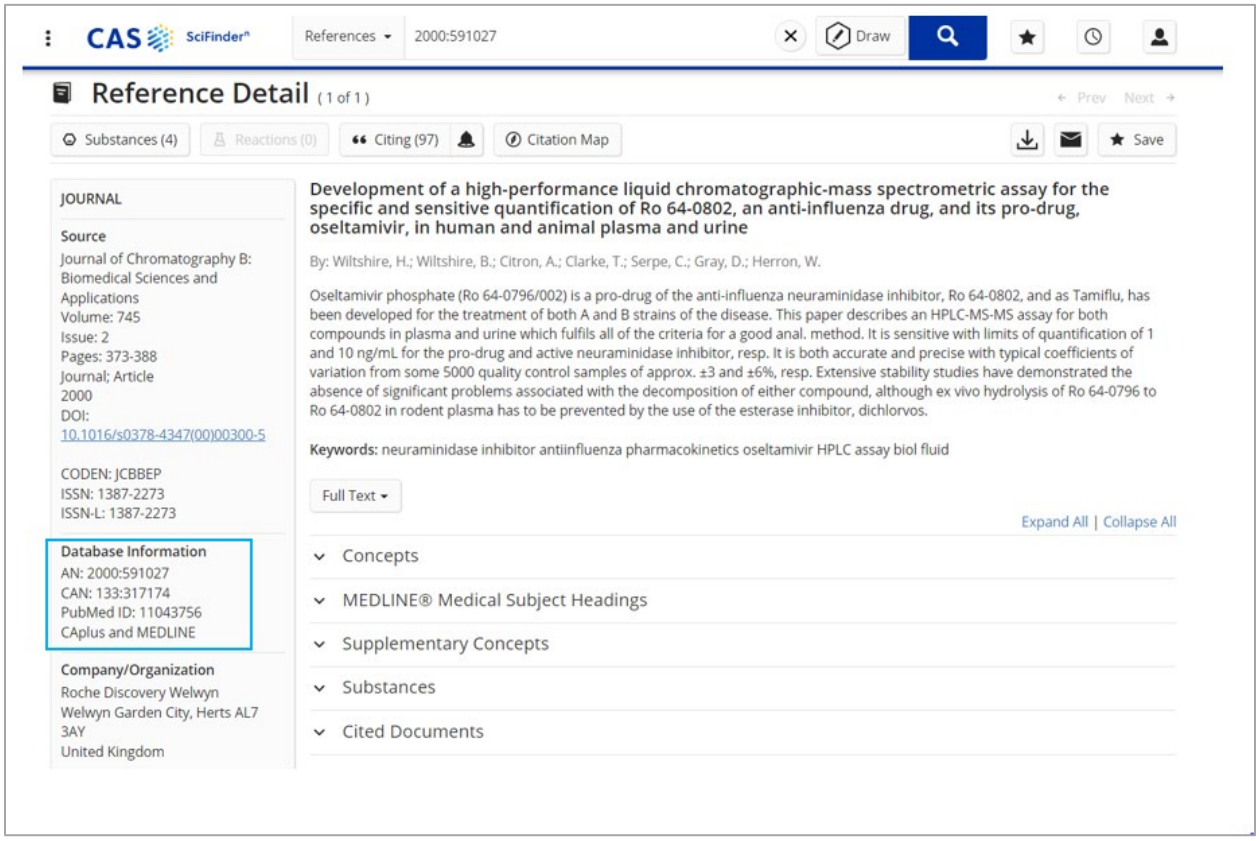
Q12：如果 CAS SciFinder^{n} 账号无法登陆，如何联系 CAS 中国大陆地区客服?

A12：CAS SciFinder^{n} 账号无法登陆或者其他有关 CAS SciFinder^{n} 的问题，可拨打电话或者发送邮件与 CAS 中国大陆区客服人员联系：电话：010-62508026/7，电子邮箱：china@acs-i.org。

文献检索

Q1：CAS SciFinder^{n} 文献结果集中会出现重复的文献吗?

A1：CAS SciFinder^{n} 涵盖的两个文献数据库 CAplus 和 Medline 有部分重复的文献。但是在展示的结果集中，已经自动进行了去重处理。对于 CAplus 和 Medline 重复收录的文献，在其文献详情页面左侧会看到如下信息：

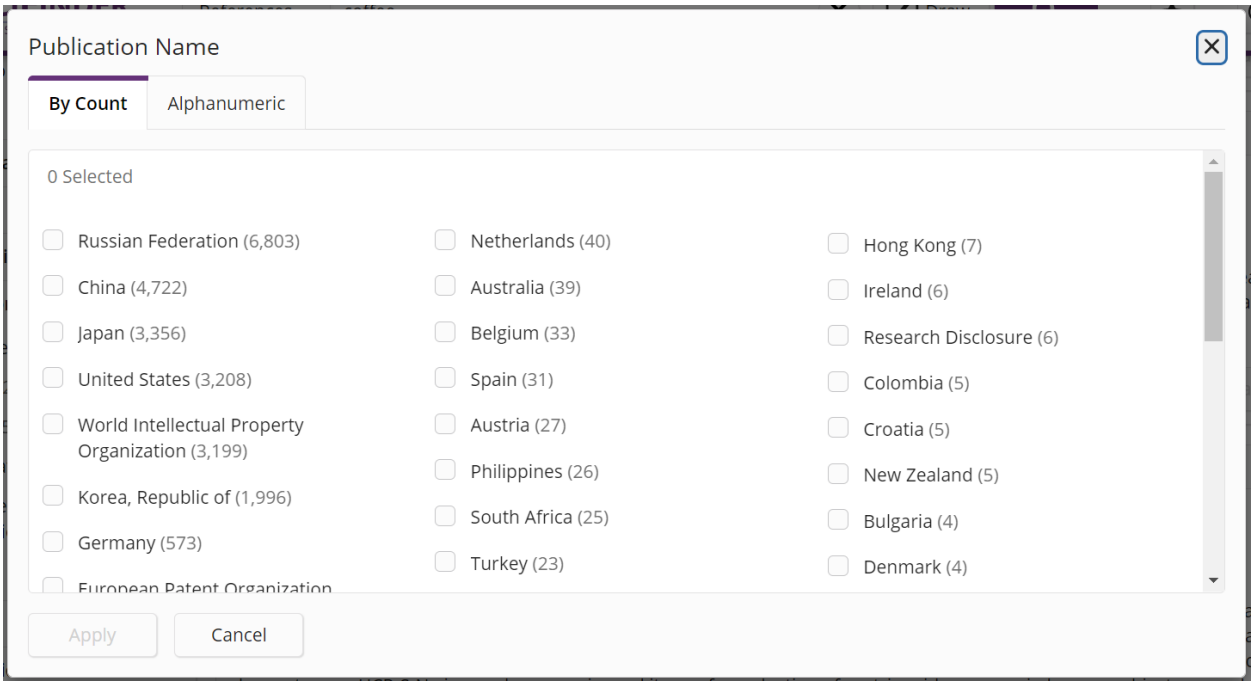


Q2：在文献结果集中，如何使用专利号筛选文献?

A2：点击文献结果集页面左下角的 Search Within Results, 在输入框中输入专利号，然后点击 Find，即完成用专利号筛选文献。

Q3：专利文献结果集中，如何通过专利国家对结果进行筛选?

A3：在文献结果集页面左侧选择 Publication Name，在弹出的页面即可根据国家进行筛选，如下图所示。



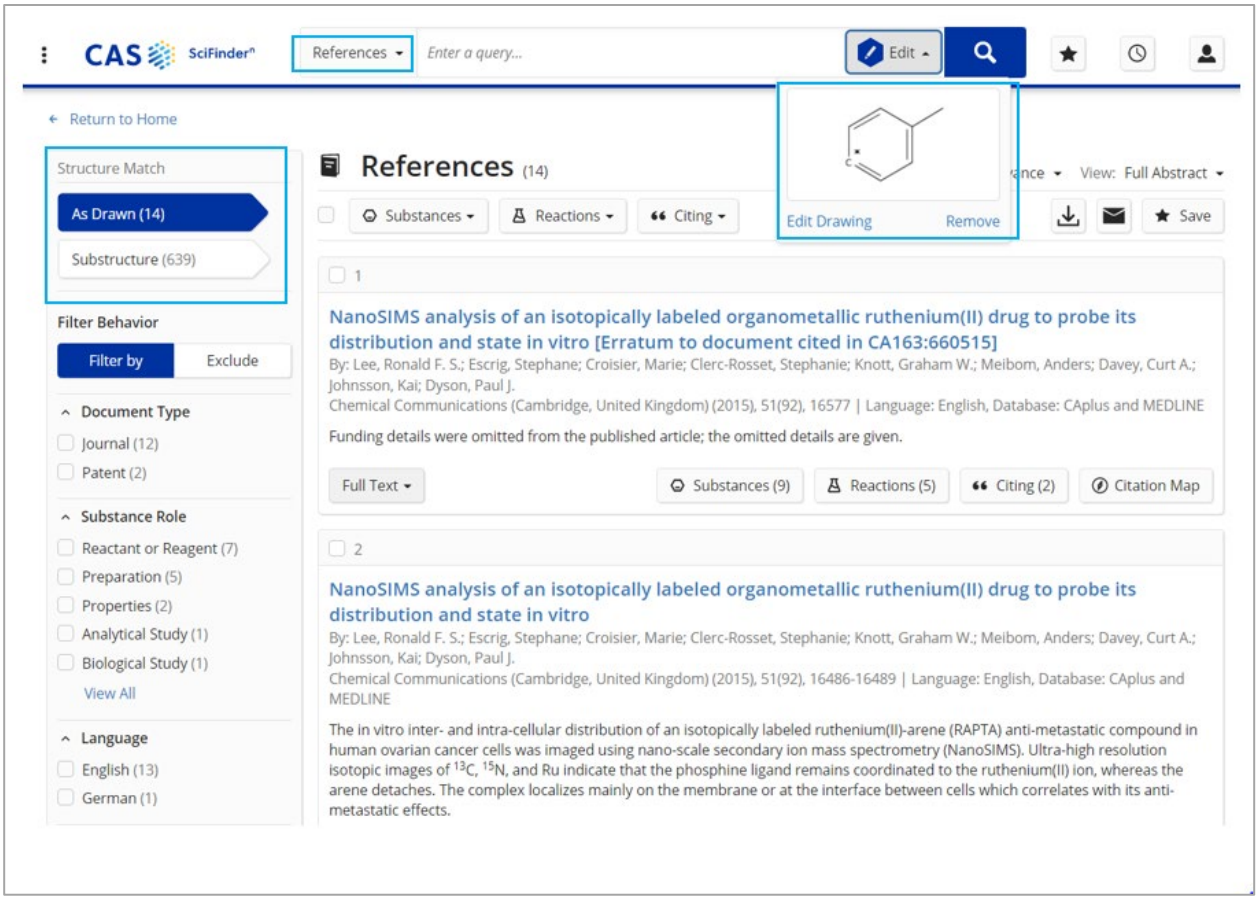
Q4：如何在 CAS ScFinder^{n} 中查看专利法律状态?

A4：在 CAS SciFinder^{n} 专利文献详情页面，可以查看专利的 Kind Code。

Q5：当我选择 References 检索时，输入物质名称和结构检索有何差别?

A5: 输入物质名称时，在检索时会进行同义词的扩展（即物质的其他名称），命中的结果中可能是名称完全匹配的结果，也可能是匹配片段名的结果。用名称检索时，检索的范围为标题、摘要、Concepts, Substances、Substance Role 等。

输入结构时，匹配的是文献中 Substances 部分展示的结构，可以通过 As Drawn 或 Substructure 来筛选文献结果。如下如所示：



Q6：CAS SciFinder^{n} 中布尔逻辑算符运算的优先性？

A6：在 SciFinder-n 中支持使用布尔逻辑算符 AND、 OR 和 NOT。默认的运算优先顺序为 OR > AND >NOT。在使用逻辑算符时，可以使用括号（），括号里的算符优先运算。如：（A NOT B）AND C，则会优先运算括号中的 NOT，然后再运算 AND。

Q7：如何筛选晶型研究相关的文献？

A7：在 CAS SciFinder^{n} 主页选择 References, 在输入框中输入关键词，比如 crystal polymorphs，crystal structure，获取晶型研究的相关文献。可以在文献结果集左侧，通过 Concept 列表查看和晶型研究相关的概念词，对文献结果进行精炼。

如果涉及某具体物质的晶型研究，则可以采用文本与结构联用的方式进行检索。

Q8：在物质结果集页面筛选出具有潜在生物活性物质后，如何获得它们的合成工艺专利？

A8：点击获得具有潜在生物活性物质结果集页面顶端的 References，获得报道这些物质的文献结果集。然后在文献结果集页面左侧的 Substance Role 选项中勾选 Preparation, Process。最后在文献结果集页面左侧 Document Type 选项中勾选 Patent, 即可得到物质的合成工艺专利。

Q9：如何检索某个年份的 ADC 技术的专利，尤其是寻找关于如何偶联（conjugate）的专利?

A9：有 2 种方法实现，分别按以下步骤进行。

方法一：

1. 在 CAS SciFinder^{n} 主页选择 References，在输入框中输入相关检索式，如，“antibody drug conjugate” or ADC，检索后得到文献结果集
2. 点击文献结果集页面左侧的 Filter by, 在 Document Type 选项下勾选 Patent，将结果限定为专利
3. 点击专利文献结果集页面左侧 Filter by，再点击 Concept 下的 View All，在弹出窗口中勾选 crosslinking agents 等相关词语，以获得更精准的检索结果。
4. 点击专利文献结果集页面左侧 Filter by，在 Publication Year 下勾选需要的某个年份即可

方法二：

1. 如果确定使用关键词 crosslinking，则可以按方法一所述第一步的输入框中输入检索式（“antibody drug conjugate” or ADC）and crosslinking
2. 按照方法一所述的第 2 和第 4 步操作即可。

Q10：如何检索某机构关于合成和工艺方面的研究文献?

A10：按以下步骤操作：

1. 在 CAS SciFinder^{n} 主页面选择 References，再点击 Add Advanced Search Field
2. 点击 Select，在弹出列表中选择 Organization Name,然后在输入框中输入机构名，检索后得到该机构的文献
3. 点击文献结果集左侧 Filter by，在 Search Within Results 下面的输入框中输入 preparation/synthesis/process/catalysis 等类似关键词来筛选合成和工艺方面的研究文献。

   如果需要查看具体的反应，可以点击文献结果页眉下方的 Reactions 获取文献中涉及的重要反应结果。

Q11：如何检索与 pvdf 修饰相关的文献?

A11：点击 References，在输入框中输入主题词进行检索，例如 modified pvdf。如果对于修饰的方法有明确的限定，可以利用布尔逻辑算符进一步精准构建检索式，例如 pvdf and "hydroxyl group"，或"CF4 plasma" and PVDF 等。

Q12：如何检索 MOF 材料的电致发光材料的研究文献?

A12：在 CAS SciFinder^{n} 中，可通过布尔逻辑符，结合恰当的关键词，灵活构建检索式，比如：(Electrochemiluminescence or ECL) and MOF，获得目标结果。

Q13：如何查某一个药物在体内的代谢产物，次级代谢产物?

A13：按以下步骤操作：

（1） 通过药物名或药物结构获取药物的物质信息，在物质结果集页面点击 References，获得药物的文献结果集；

（2） 在获得的文献结果集页面，点击左侧 Filter by： Concept，勾选 Drug metabolism 等与代谢有关的词语，获得药物代谢研究的文献；

Q14：如何获取研究高强、高导铜合金的文献?

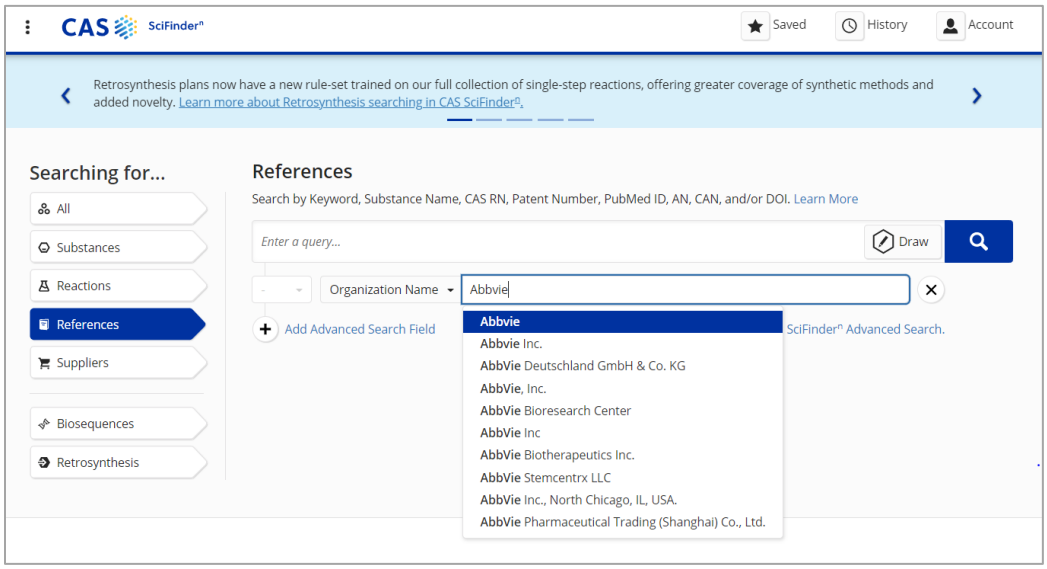
A14：选择 References，在输入框中输入检索式，检索式中可考虑使用恰当的布尔逻辑运算符，以获取预期结果。如输入：High-strength and high-conductivity and "copper alloy" 或 "High-strength" and" high-conductivity" and "copper alloy"等。

Q15：已经知道结构修饰位点，如何检索一个特定小分子化合物的前药研究专利?

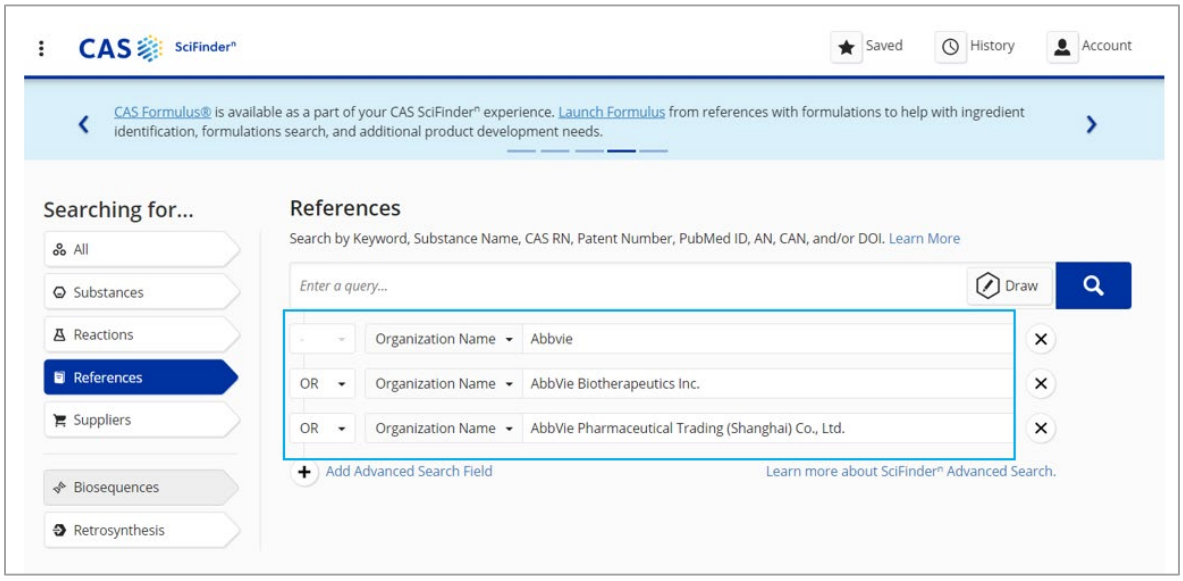
A15：选择 References。绘制小分子结构式，同时在输入框中输入关键词（如，prodrug and doxorubicin），采用文本+结构联合检索方式得到文献结果集。再在文献结果集页面左侧 Filter By: Document Type 选择 Patents, 即可获得该小分子前药研究专利。

Q16：如何检索某个机构的研究文献?

A16：点击 References，再点击 Add Advance Search Field，然后点击 Select，在弹出列表中选择 Organization Name，输入机构名，例如 Abbive。



如果需要考虑其分支机构，则可参考输入框中提示的分支机构名，并使用逻辑算符 OR 输入多个名称同时进行检索。

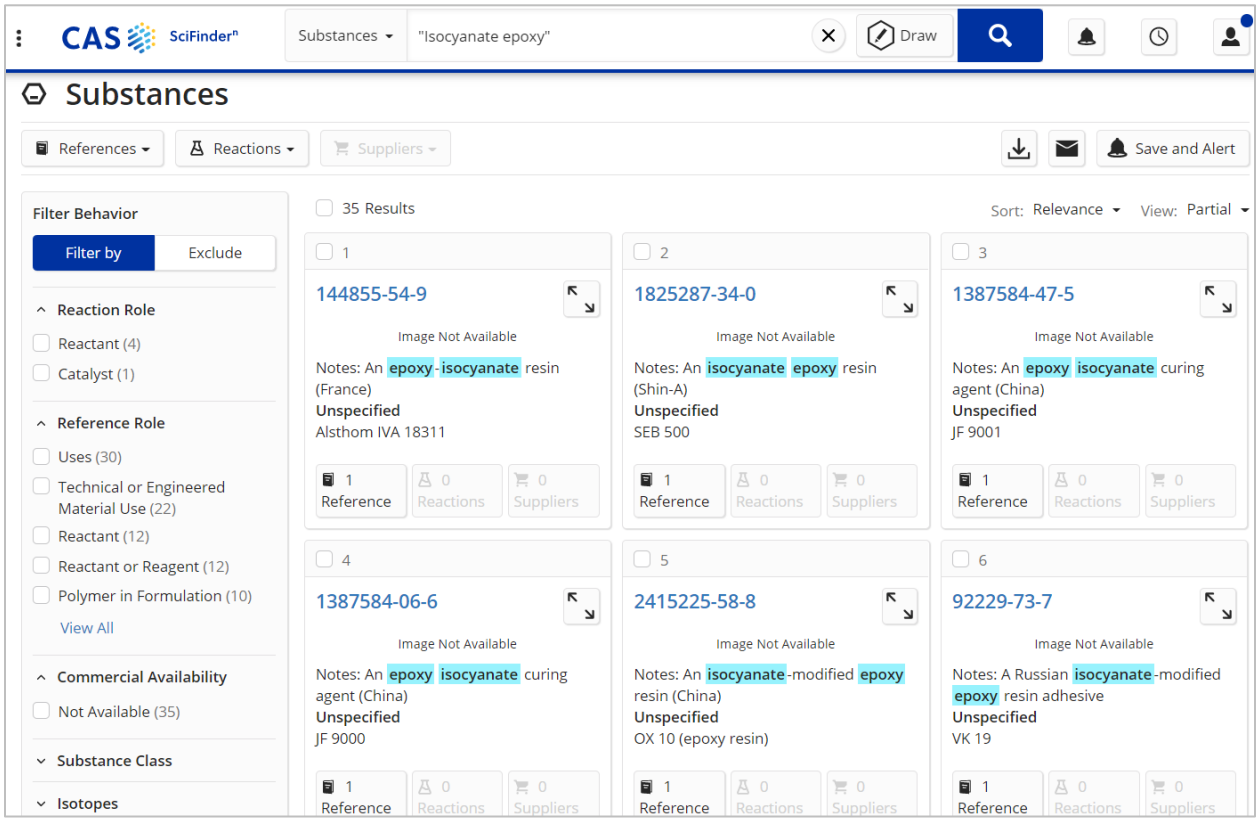


Q17：在 CAS SciFinder^n 中如何检索异氰酸酯环氧树脂?

A17：在结构信息不明确时，推荐以下两种检索方式：

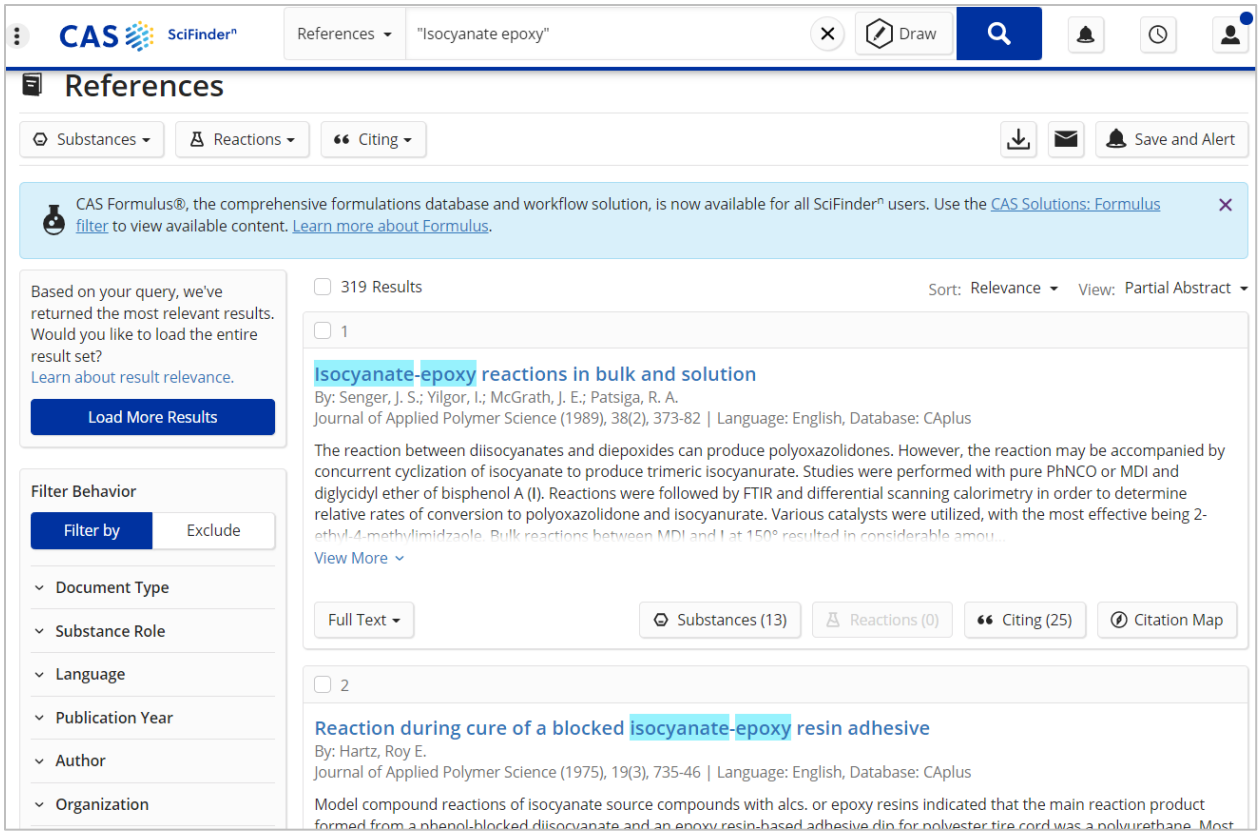
（1）在 CAS SciFinder^{n} 主页面点击 Substances，然后在输入框中输入“Isocyanate epoxy”，点击检索（将在物质名称或名称的注释部分进行检索）。

注：在用物质名称检索时，使用双引号“”，那么双引号中的词会同时被检索到。



（2）在 CAS SciFinder^{n} 主页面，点击 References，在输入框中输入文献关键词后，点击检索。

注：如果使用双引号，则可以相对精准地获取检索结果，例如“Isocyanate epoxy”，那么双引号中的关键词不会出现词形变化，但可出现单数或复数；且多个关键词会同时出现。

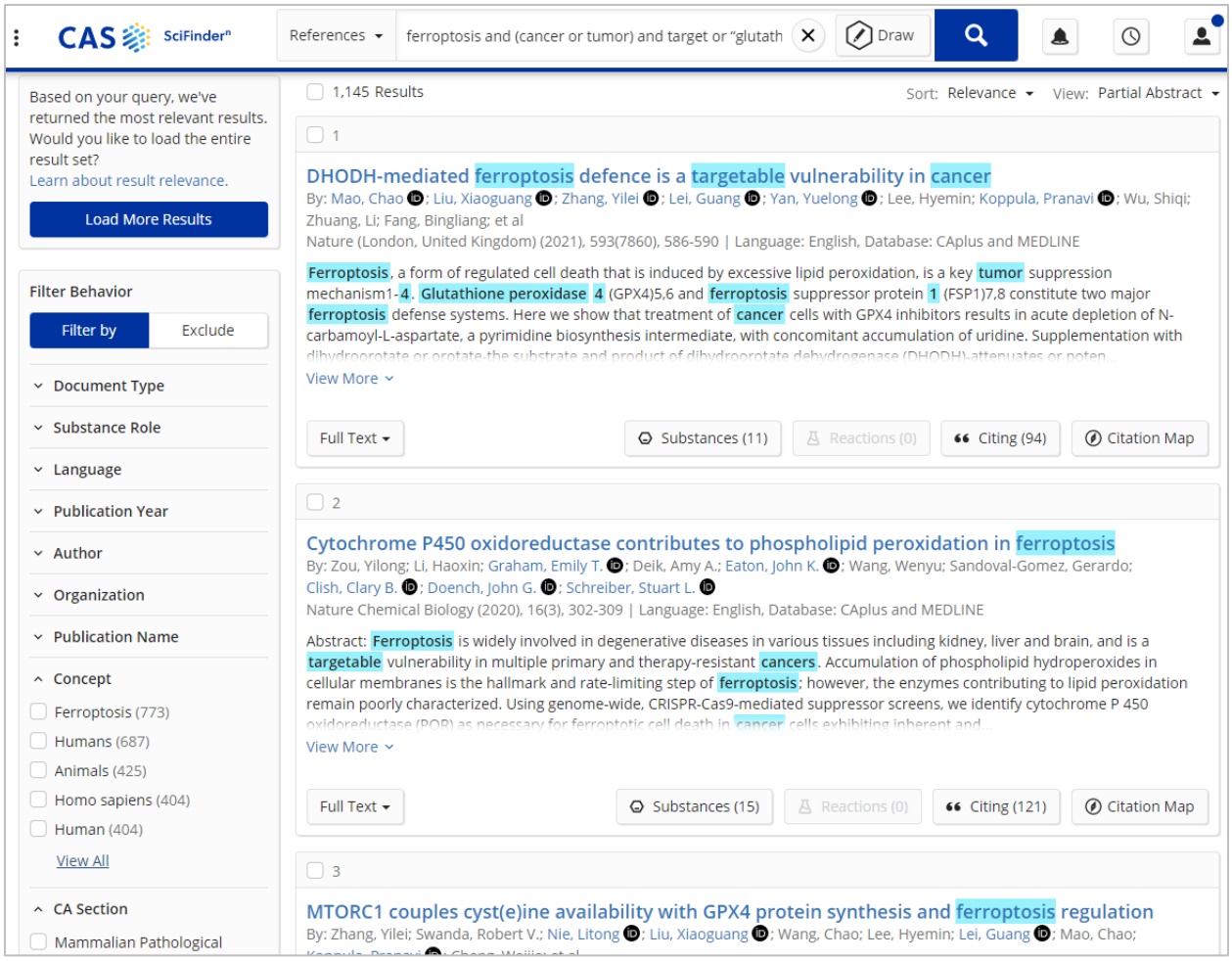


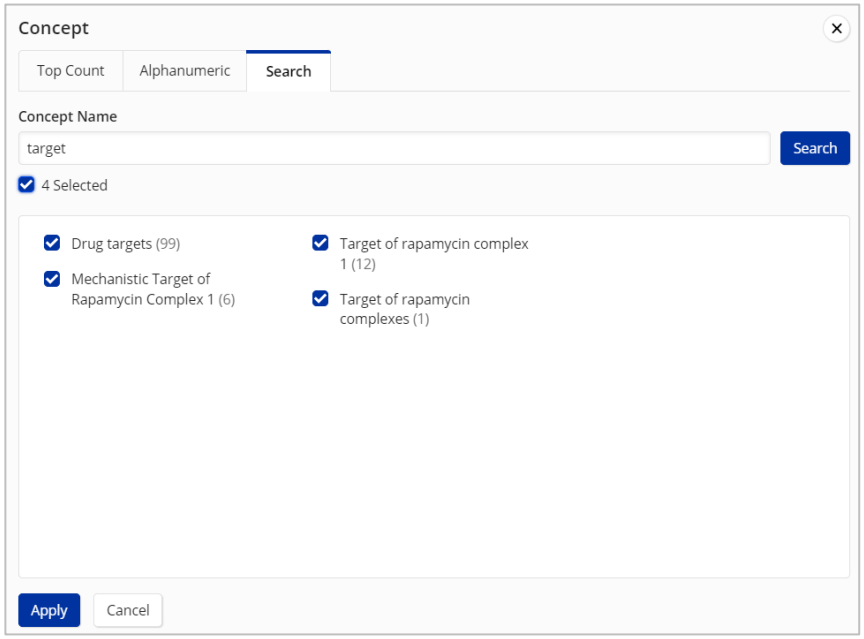
Q18：在 CAS SciFinder^n 中如何检索铁中毒癌症的靶点研究?

A18：推荐使用 References 进行关键词检索，然后通过 Concept 对结果进行精炼。操作步骤如下：

1）首先，在 CAS SciFindern 主页面点击 References，在输入框中输入关键词，例如：ferroptosis and (cancer or tumor) and target。如果已经知道某些关联的靶点，则可以一并输入对应的关键词，例如：ferroptosis and (cancer or tumor) and target or “glutathione peroxidase”or “GPX-4”or “glutathione peroxidase 4”。

（2）点击检索结果集页面左侧 Filter by: Concept 来精炼结果。可以通过 Top Count 或 Alphanumeric 浏览，也可以通过 Search 来检索，例如：输入 target，选中感兴趣的概念词，点击 Apply，就可以获得精炼后的文献。

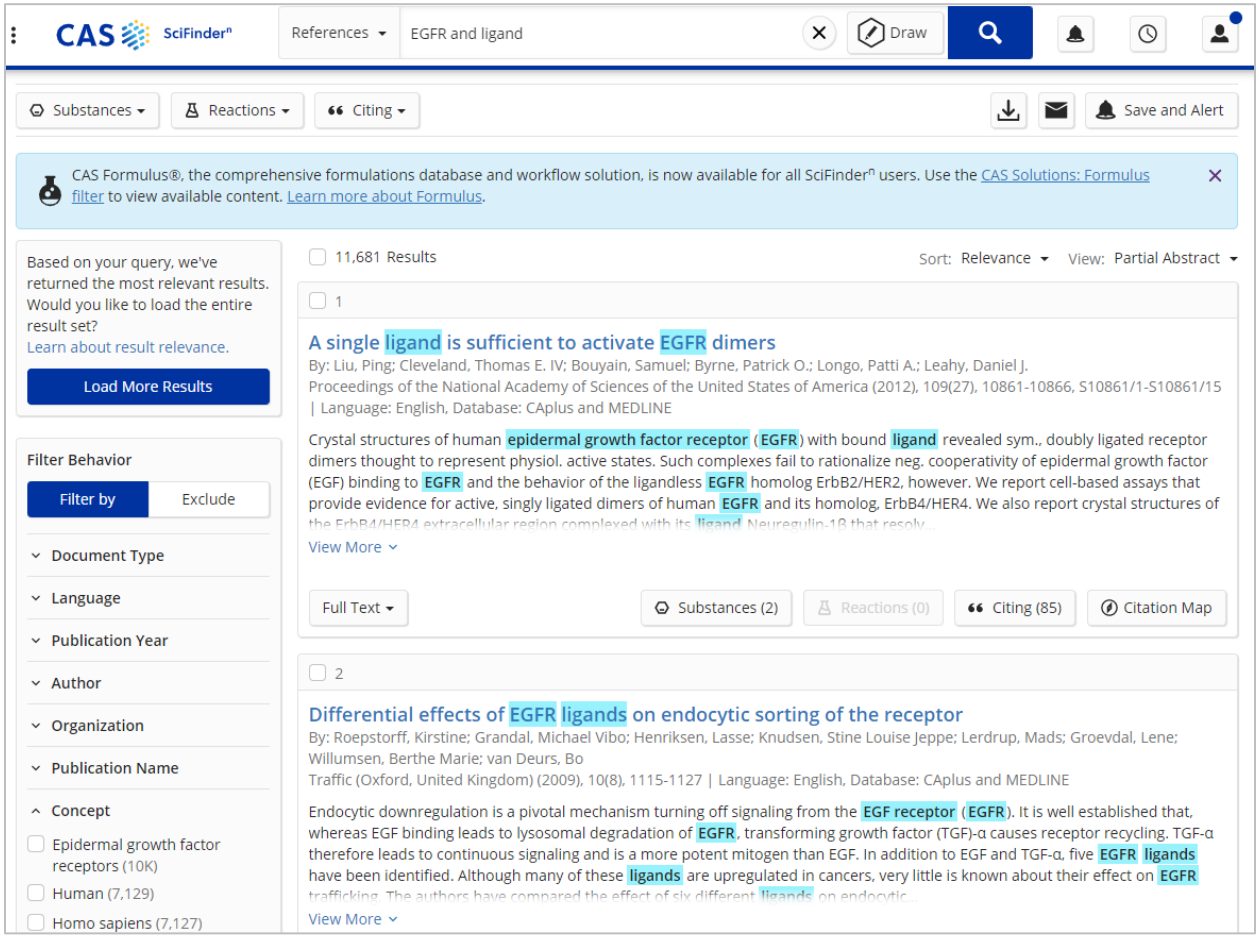

CAS SciFinder^{n}
References
ferroptosis and (cancer or tumor) and target or "glutath
Draw
Based on your query, we've returned the most relevant results. Would you like to load the entire result set?
Learn about result relevance.
Load More Results
1,145 Results
Sort: Relevance
View: Partial Abstract
1
DHODH-mediated ferroptosis defence is a targetable vulnerability in cancer
By: Mao, Chao; Liu, Xiaoguang; Zhang, Yilei; Lei, Guang; Yan, Yuelong; Lee, Hyemin; Koppula, Pranavi; Wu, Shiqi; Zhuang, Li; Fang, Bingliang; et al
Nature (London, United Kingdom) (2021), 593(7860), 586-590 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE
Ferroptosis, a form of regulated cell death that is induced by excessive lipid peroxidation, is a key tumor suppression mechanism1-4. Glutathione peroxidase 4 (GPX4)5,6 and ferroptosis suppressor protein 1 (FSP1)7,8 constitute two major ferroptosis defense systems. Here we show that treatment of cancer cells with GPX4 inhibitors results in acute depletion of N-carbamoyl-L-aspartate, a pyrimidine biosynthesis intermediate, with concomitant accumulation of uridine. Supplementation with
View More
Full Text
Substances (11)
Reactions (0)
Citing (94)
Citation Map
2
Cytochrome P450 oxidoreductase contributes to phospholipid peroxidation in ferroptosis
By: Zou, Yilong; Li, Haoxin; Graham, Emily T.; Deik, Amy A.; Eaton, John K.; Wang, Wenyu; Sandoval-Gomez, Gerardo; Clish, Clary B.; Doench, John G.; Schreiber, Stuart L.
Nature Chemical Biology (2020), 16(3), 302-309 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE
Abstract: Ferroptosis is widely involved in degenerative diseases in various tissues including kidney, liver and brain, and is a targetable vulnerability in multiple primary and therapy-resistant cancers. Accumulation of phospholipid hydroperoxides in cellular membranes is the hallmark and rate-limiting step of ferroptosis; however, the enzymes contributing to lipid peroxidation remain poorly characterized. Using genome-wide, CRISPR-Cas9-mediated suppressor screens, we identify cytochrome P 450
View More
Full Text
Substances (15)
Reactions (0)
Citing (121)
Citation Map
3
MTORC1 couples cyst(e)ine availability with GPX4 protein synthesis and ferroptosis regulation
By: Zhang, Yilei; Swanda, Robert V.; Nie, Litong; Liu, Xiaoguang; Wang, Chao; Lee, Hyemin; Lei, Guang; Mao, Chao;
Filter Behavior
Filter by
Exclude
Document Type
Substance Role
Language
Publication Year
Author
Organization
Publication Name
Concept
Ferroptosis (773)
Humans (687)
Animals (425)
Homo sapiens (404)
Human (404)
View All
CA Section
Mammalian Pathological

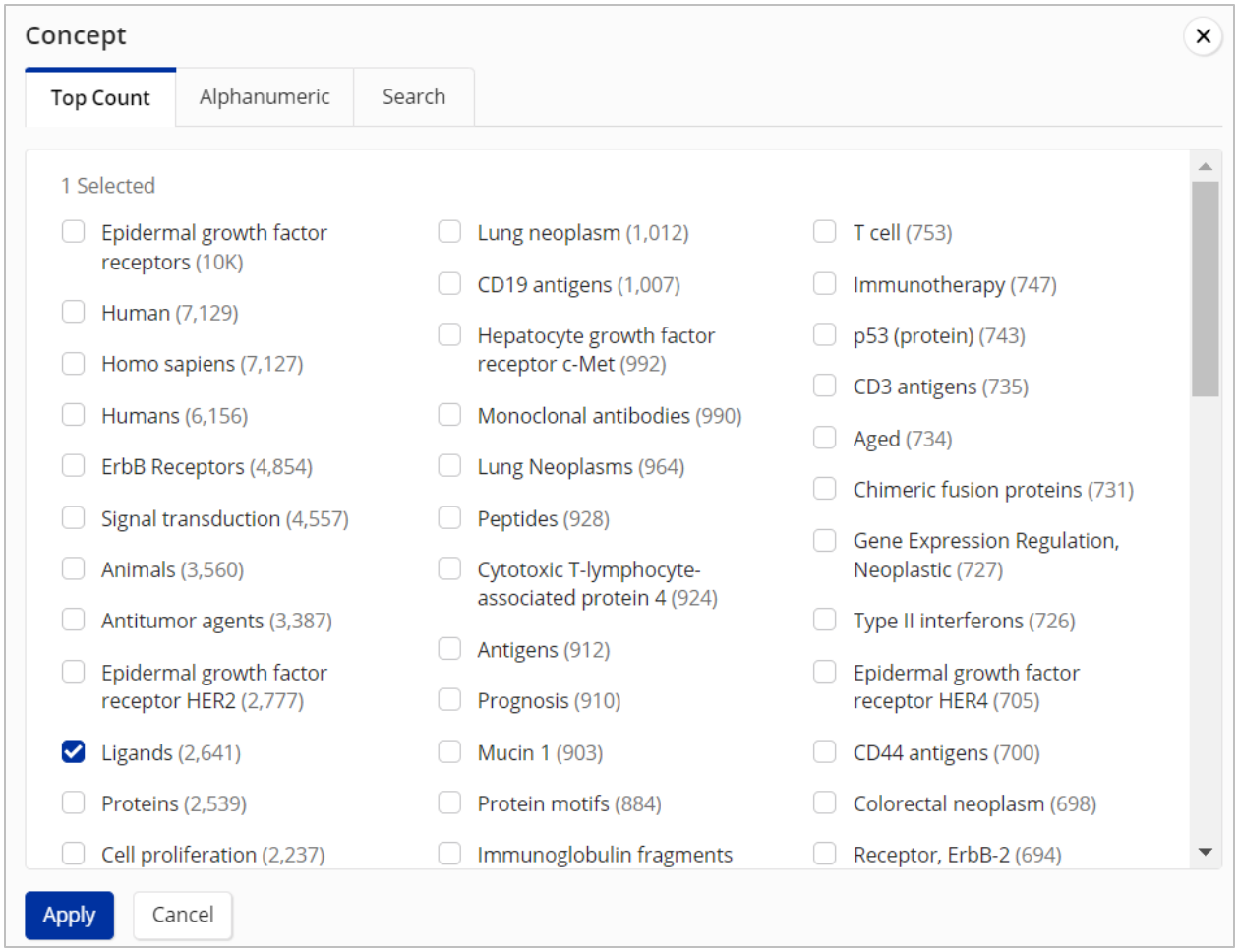

Concept
Top Count
Alphanumeric
Search
Concept Name
target
Search
4 Selected
Drug targets (99)
Mechanistic Target of Rapamycin Complex 1 (6)
Target of rapamycin complex 1 (12)
Target of rapamycin complexes (1)
Apply
Cancel

Q19：如何在 CAS SciFinder^n 中检索 EGFR 和配体分子?

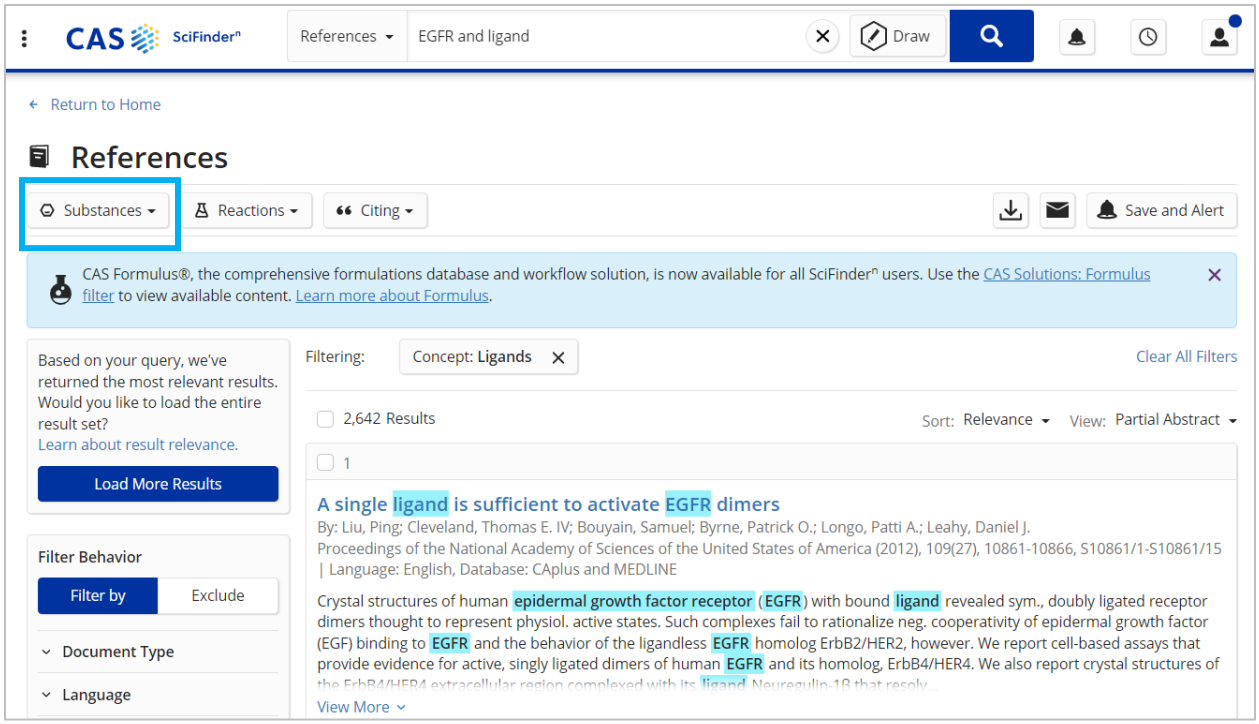
A19：推荐使用 References 进行关键词检索，然后使用 Concept 精炼结果，同时可以通过文献来获取关联的物质结果。操作步骤如下：

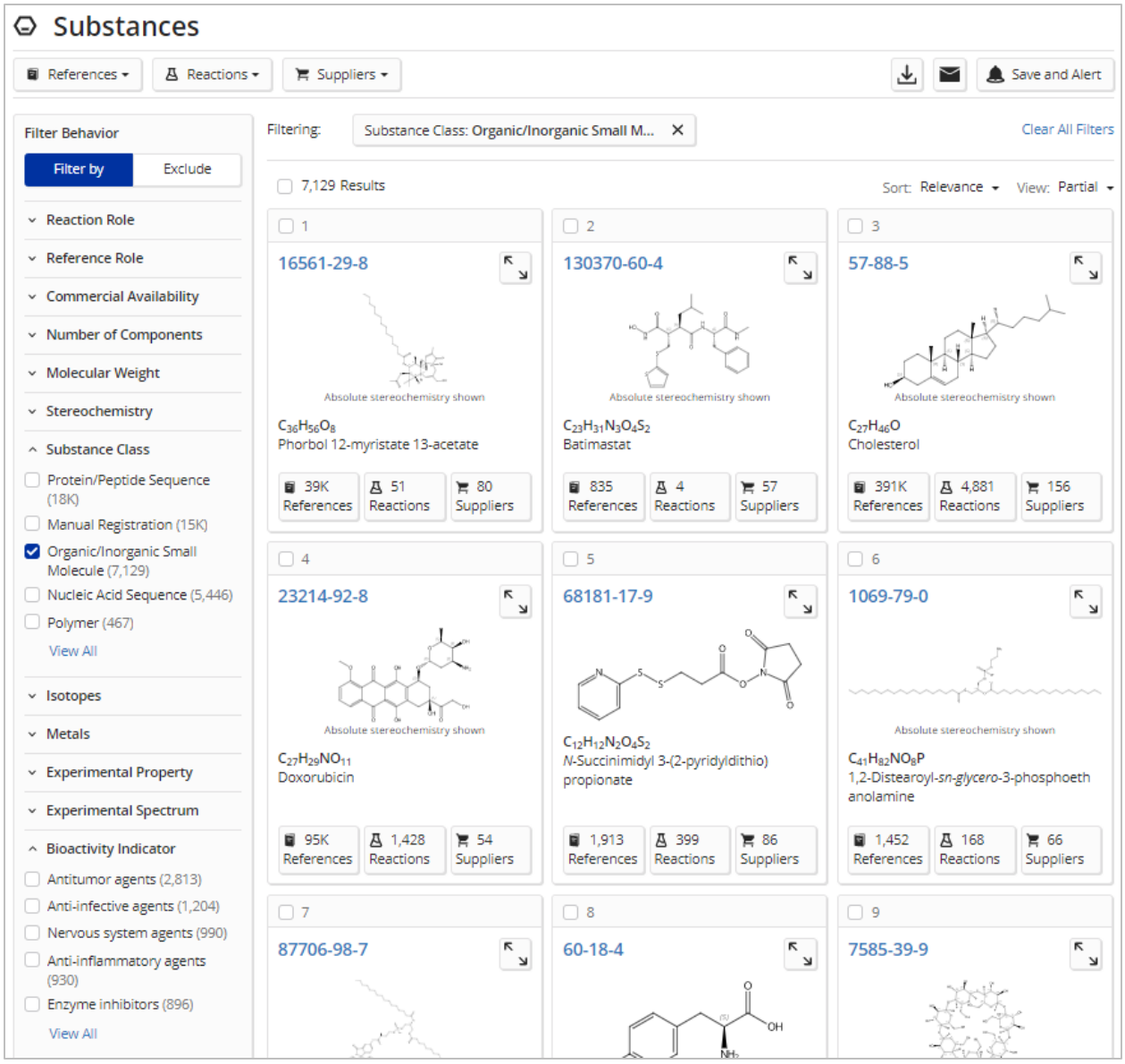
（1）在 CAS SciFinder^n 主页面点击 References，在输入框中输入关键词，例如：EGFR and ligand；然后在文献结果集页面左侧点击 Filter by：Concept 精炼结果（如，筛选 ligands）。





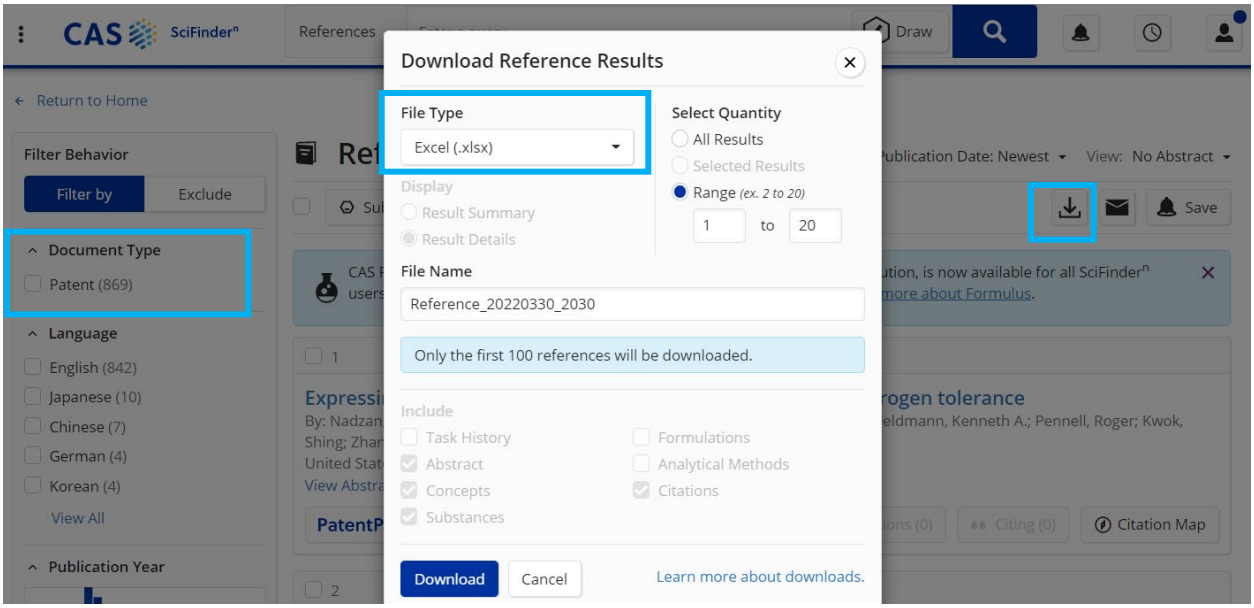
（2）如果需要获取关联的物质，可以在文献结果集页面点击 Substances 获取物质。然后通过物质结果集页面左侧筛选项进一步筛选物质，如通过 Substance Class 筛选物质类型，通过 bioactivity identifier 筛选具有生物活性的物质等。

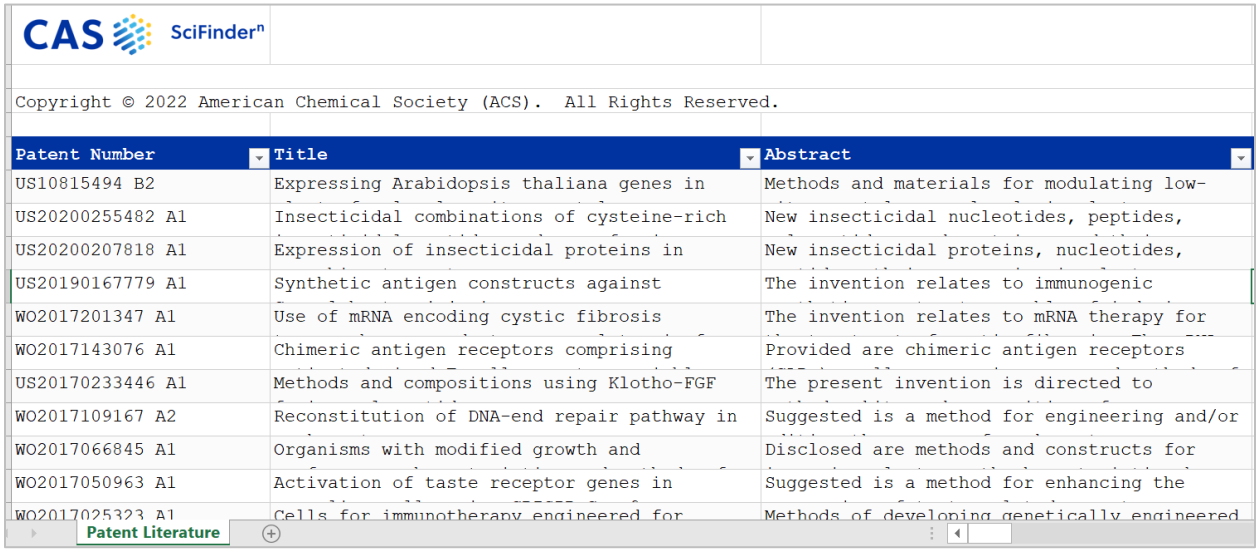

CAS SciFinder
References
EGFR and ligand
Draw
Return to Home
References
Substances
Reactions
Citing
Save and Alert
CAS Formulus®, the comprehensive formulations database and workflow solution, is now available for all SciFinder users. Use the CAS Solutions: Formulus filter to view available content. Learn more about Formulus.
Based on your query, we've returned the most relevant results. Would you like to load the entire result set?
Learn about result relevance.
Load More Results
Filter Behavior
Filter by
Exclude
Document Type
Language
Filtering:
Concept: Ligands
Clear All Filters
2,642 Results
Sort: Relevance
View: Partial Abstract
1
A single ligand is sufficient to activate EGFR dimers
By: Liu, Ping; Cleveland, Thomas E. IV; Bouyain, Samuel; Byrne, Patrick O.; Longo, Patti A.; Leahy, Daniel J.
Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America (2012), 109(27), 10861-10866, S10861/1-S10861/15 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE
Crystal structures of human epidermal growth factor receptor (EGFR) with bound ligand revealed sym., doubly ligated receptor dimers thought to represent physiol. active states. Such complexes fail to rationalize neg. cooperativity of epidermal growth factor (EGF) binding to EGFR and the behavior of the ligandless EGFR homolog ErbB2/HER2, however. We report cell-based assays that provide evidence for active, singly ligated dimers of human EGFR and its homolog, ErbB4/HER4. We also report crystal structures of
View More



Q20：在 CAS SciFinder^{n} 中如何导出文献检索结果中的专利号？

A20：首先通过文献结果集页面左侧 Document Type：选择 Patent，获得专利文献。然后，点击文献结果集右侧下载图标 ，在弹出窗口中 File Type 下选择 Excel，将专利文献导出为 Excel 格式文件。导出文件中包含 Patent Number 专利号栏。





CAS SciFinder

Copyright © 2022 American Chemical Society (ACS). All Rights Reserved.

Patent Number	Title	Abstract
US10815494 B2	Expressing Arabidopsis thaliana genes in	Methods and materials for modulating low-
US20200255482 A1	Insecticidal combinations of cysteine-rich	New insecticidal nucleotides, peptides,
US20200207818 A1	Expression of insecticidal proteins in	New insecticidal proteins, nucleotides,
US20190167779 A1	Synthetic antigen constructs against	The invention relates to immunogenic
WO2017201347 A1	Use of mRNA encoding cystic fibrosis	The invention relates to mRNA therapy for
WO2017143076 A1	Chimeric antigen receptors comprising	Provided are chimeric antigen receptors
US20170233446 A1	Methods and compositions using Klotho-FGF	The present invention is directed to
WO2017109167 A2	Reconstitution of DNA-end repair pathway in	Suggested is a method for engineering and/or
WO2017066845 A1	Organisms with modified growth and	Disclosed are methods and constructs for
WO2017050963 A1	Activation of taste receptor genes in	Suggested is a method for enhancing the
WO2017025323 A1	Cells for immunotherapy engineered for	Methods of developing genetically engineered

Patent Literature

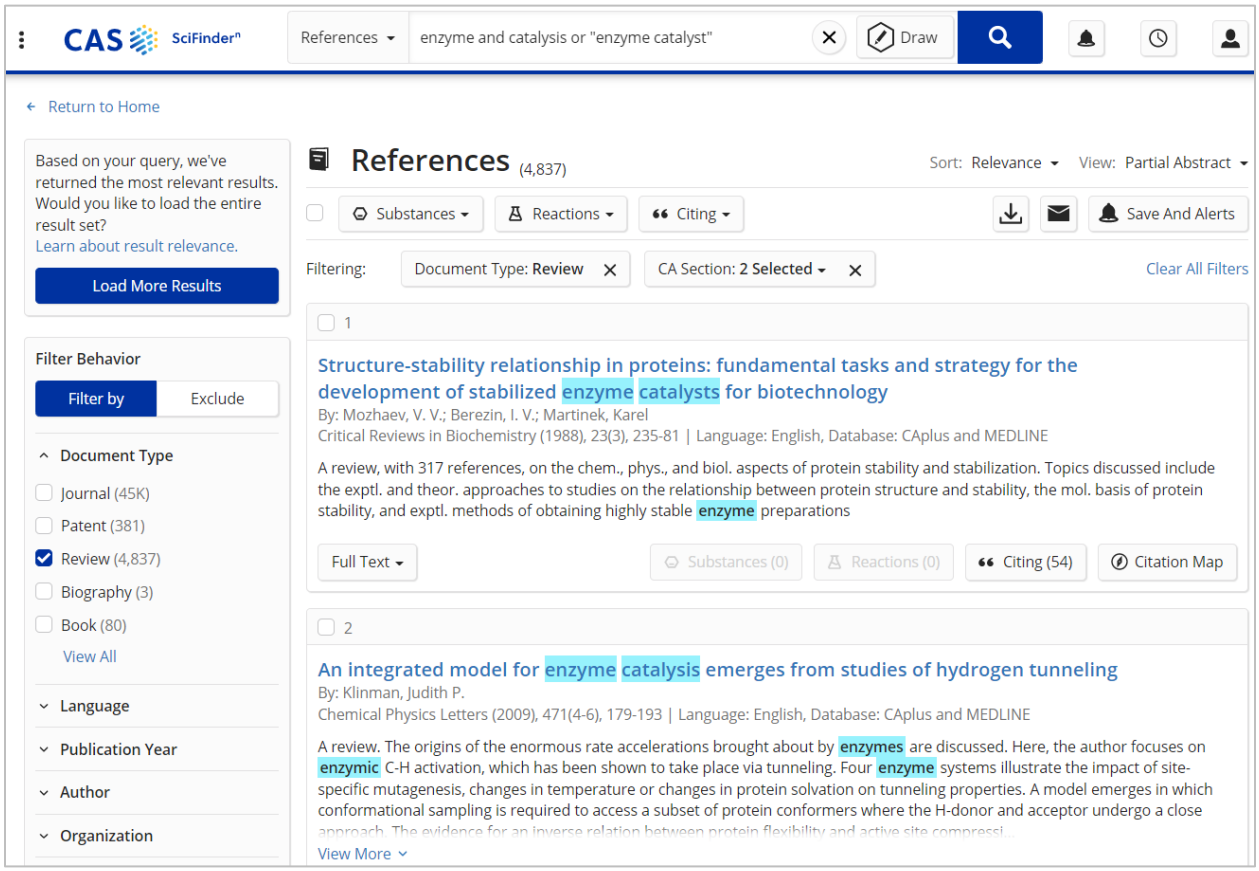
Q21：在 CAS SciFinder^n 中如何检索酶催化综述文献?

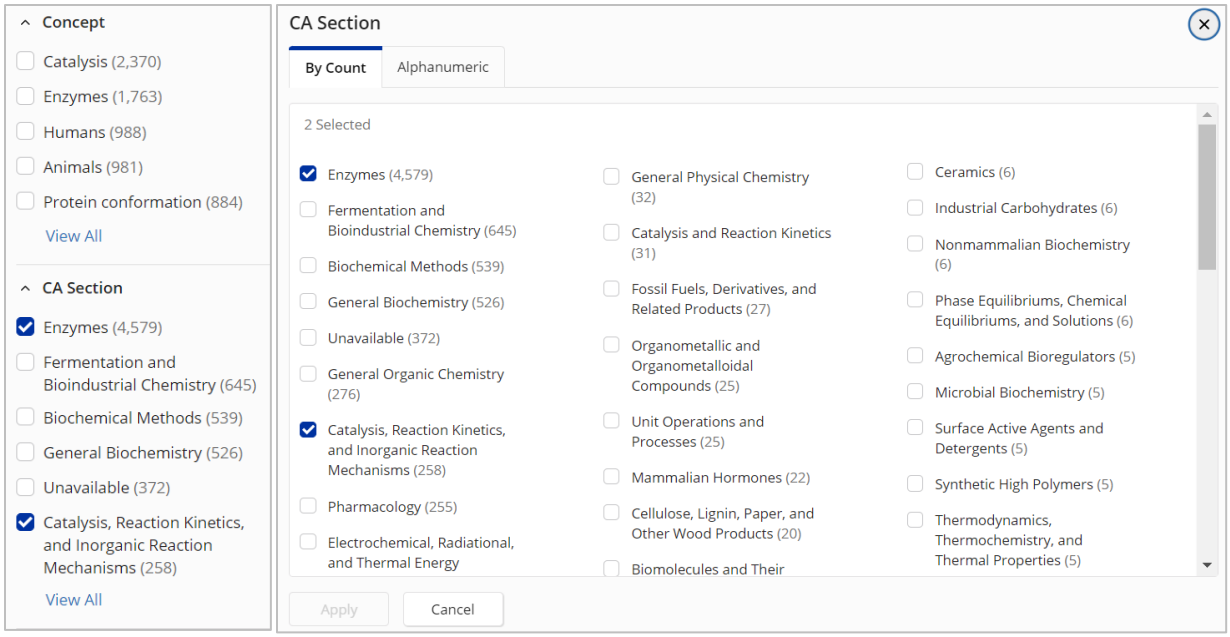
A21：推荐使用 References 关键词检索，并通过 Filter by: Document Type 精炼文献类型，CA Section 浏览学科领域分类， Concept 精炼具体的研究点等。操作步骤如下：

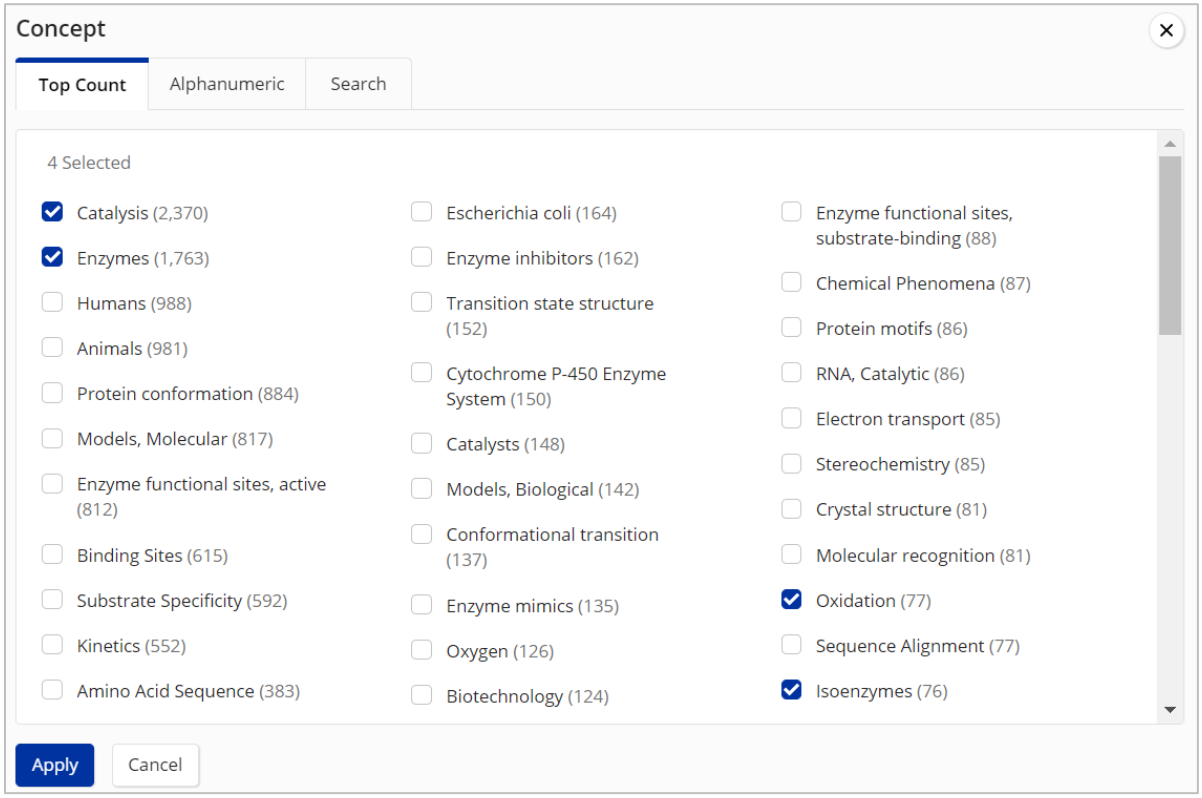
1）CAS SciFinder^n 中进行关键词检索时，推荐关键词间使用布尔逻辑运算符。例如：enzyme and catalysis or "enzyme catalyst"，可以全面精准地获取酶催化相关的研究文献。在获得的文献结果集页面，通过 Document Type: Review 即可获取综述文献。

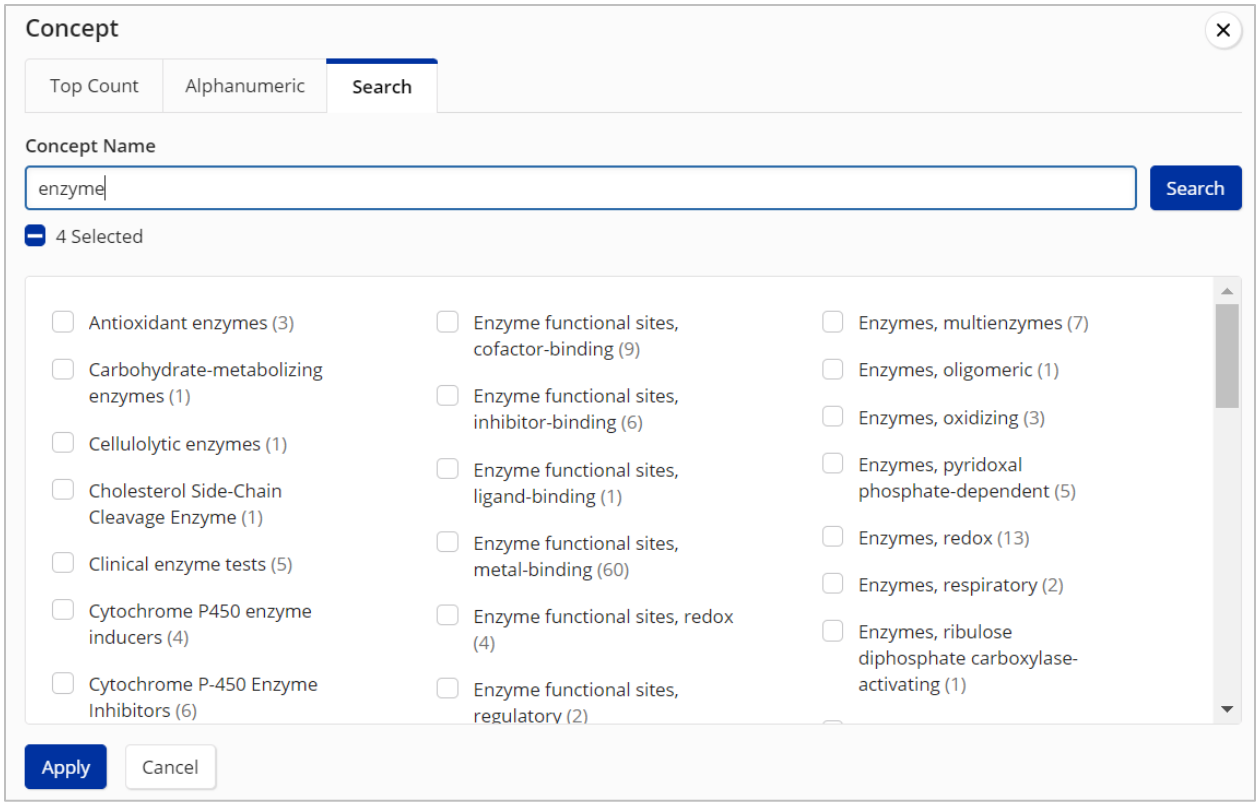
（2）如果需要快速纵览或继续精炼检索结果，则可通过 CAS Section 学科领域分类和 Concept 核心概念词库进行浏览和精炼。

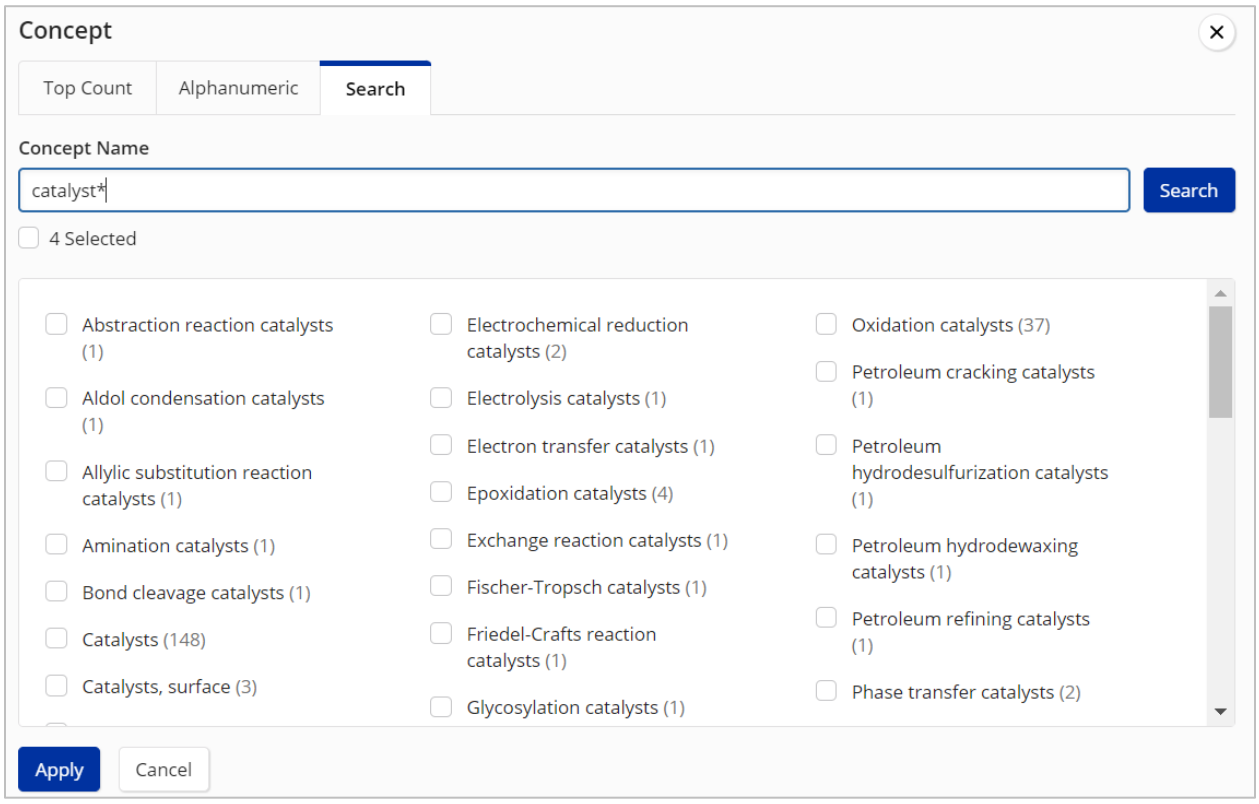
注：Concept 中的 Top Count 可浏览 top 100 最密集的研究点。若想快速获取某研究点，则可点击 Search，输入感兴趣的词（如，enzyme 或 catalyst*），即可查看所有涉及到的酶和催化反应。点击 Search 后，在输入词语时可使用通配符（如，*），* 代表 0 或多个字符，因而可以扩展检索词或词干。




Concept
Catalysis (2,370)
Enzymes (1,763)
Humans (988)
Animals (981)
Protein conformation (884)
View All
CA Section
Enzymes (4,579)
Fermentation and Bioindustrial Chemistry (645)
Biochemical Methods (539)
General Biochemistry (526)
Unavailable (372)
Catalysis, Reaction Kinetics, and Inorganic Reaction Mechanisms (258)
View All
CA Section
By Count
Alphanumeric
2 Selected
Enzymes (4,579)
Fermentation and Bioindustrial Chemistry (645)
Biochemical Methods (539)
General Biochemistry (526)
Unavailable (372)
General Organic Chemistry (276)
Catalysis, Reaction Kinetics, and Inorganic Reaction Mechanisms (258)
Pharmacology (255)
Electrochemical, Radiational, and Thermal Energy
General Physical Chemistry (32)
Catalysis and Reaction Kinetics (31)
Fossil Fuels, Derivatives, and Related Products (27)
Organometallic and Organometalloidal Compounds (25)
Unit Operations and Processes (25)
Mammalian Hormones (22)
Cellulose, Lignin, Paper, and Other Wood Products (20)
Biomolecules and Their
Ceramics (6)
Industrial Carbohydrates (6)
Nonmammalian Biochemistry (6)
Phase Equilibriums, Chemical Equilibriums, and Solutions (6)
Agrochemical Bioregulators (5)
Microbial Biochemistry (5)
Surface Active Agents and Detergents (5)
Synthetic High Polymers (5)
Thermodynamics, Thermochemistry, and Thermal Properties (5)
Apply
Cancel


Concept
Top Count
Alphanumeric
Search
4 Selected
Catalysis (2,370)
Enzymes (1,763)
Humans (988)
Animals (981)
Protein conformation (884)
Models, Molecular (817)
Enzyme functional sites, active (812)
Binding Sites (615)
Substrate Specificity (592)
Kinetics (552)
Amino Acid Sequence (383)
Escherichia coli (164)
Enzyme inhibitors (162)
Transition state structure (152)
Cytochrome P-450 Enzyme System (150)
Catalysts (148)
Models, Biological (142)
Conformational transition (137)
Enzyme mimics (135)
Oxygen (126)
Biotechnology (124)
Enzyme functional sites, substrate-binding (88)
Chemical Phenomena (87)
Protein motifs (86)
RNA, Catalytic (86)
Electron transport (85)
Stereochemistry (85)
Crystal structure (81)
Molecular recognition (81)
Oxidation (77)
Sequence Alignment (77)
Isoenzymes (76)
Apply
Cancel


Concept
Top Count
Alphanumeric
Search
Concept Name
enzyme
Search
4 Selected
Antioxidant enzymes (3)
Carbohydrate-metabolizing enzymes (1)
Cellulolytic enzymes (1)
Cholesterol Side-Chain Cleavage Enzyme (1)
Clinical enzyme tests (5)
Cytochrome P450 enzyme inducers (4)
Cytochrome P-450 Enzyme Inhibitors (6)
Enzyme functional sites, cofactor-binding (9)
Enzyme functional sites, inhibitor-binding (6)
Enzyme functional sites, ligand-binding (1)
Enzyme functional sites, metal-binding (60)
Enzyme functional sites, redox (4)
Enzyme functional sites, regulatory (2)
Enzymes, multienzymes (7)
Enzymes, oligomeric (1)
Enzymes, oxidizing (3)
Enzymes, pyridoxal phosphate-dependent (5)
Enzymes, redox (13)
Enzymes, respiratory (2)
Enzymes, ribulose diphosphate carboxylase-activating (1)
Apply
Cancel


Concept
Top Count
Alphanumeric
Search
Concept Name
catalyst*
Search
4 Selected
Abstraction reaction catalysts (1)
Aldol condensation catalysts (1)
Allylic substitution reaction catalysts (1)
Amination catalysts (1)
Bond cleavage catalysts (1)
Catalysts (148)
Catalysts, surface (3)
Electrochemical reduction catalysts (2)
Electrolysis catalysts (1)
Electron transfer catalysts (1)
Epoxidation catalysts (4)
Exchange reaction catalysts (1)
Fischer-Tropsch catalysts (1)
Friedel-Crafts reaction catalysts (1)
Glycosylation catalysts (1)
Oxidation catalysts (37)
Petroleum cracking catalysts (1)
Petroleum hydrodesulfurization catalysts (1)
Petroleum hydrodewaxing catalysts (1)
Petroleum refining catalysts (1)
Phase transfer catalysts (2)
Apply
Cancel

Q22：在 CAS SciFinder^n 中如何全面、精准地进行作者名检索?

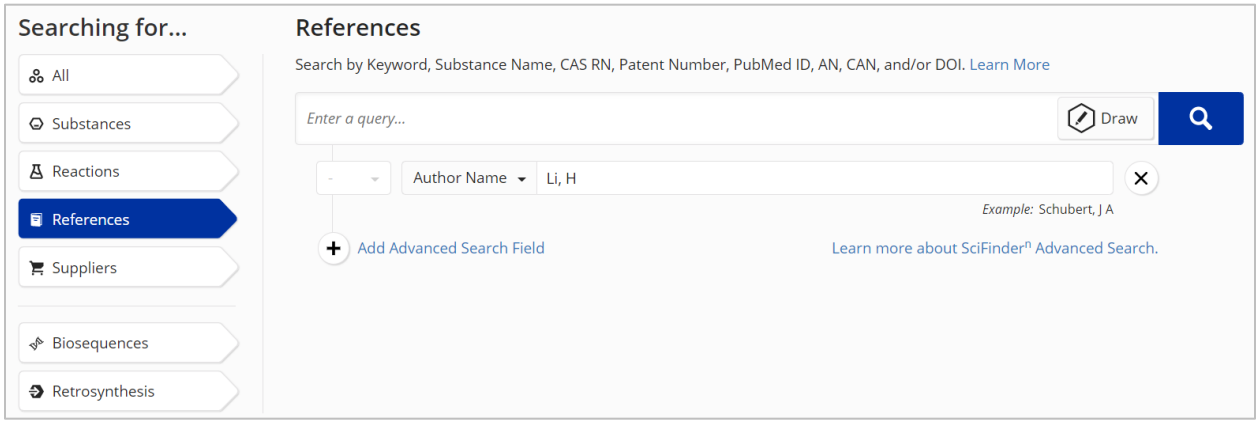
A22：推荐检索步骤如下：

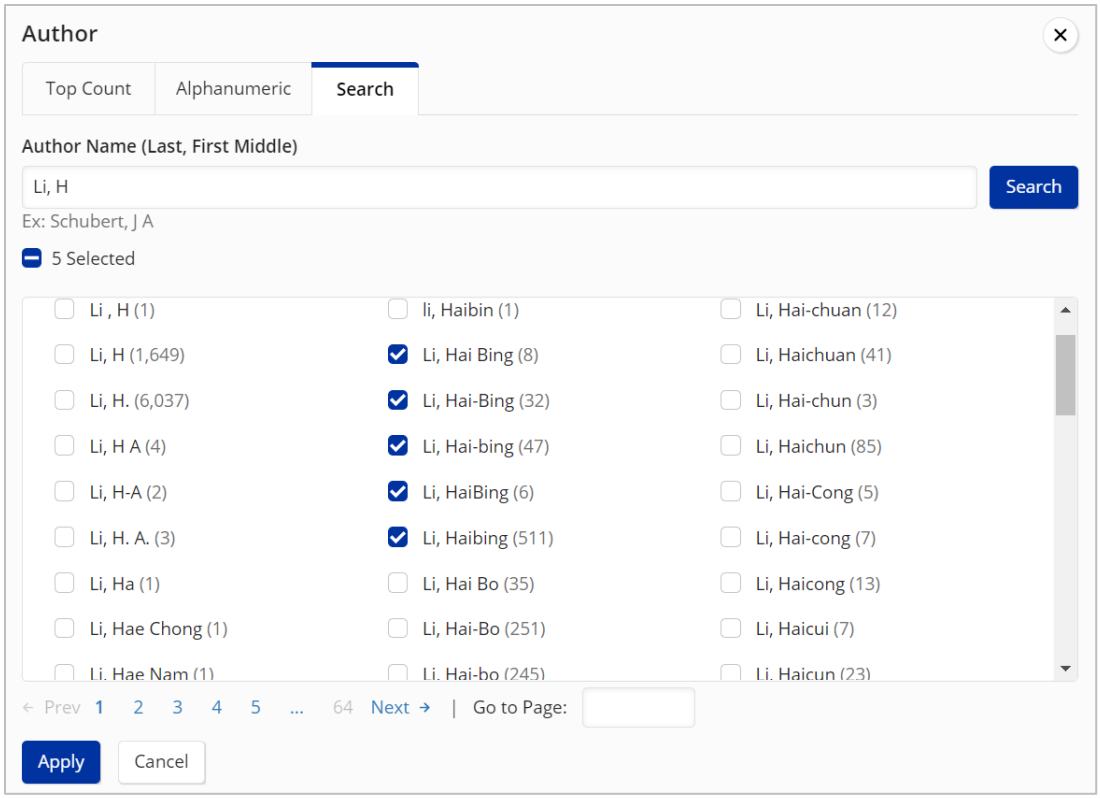
(1)在主页面点击 References，然后在 Advanced Search Field：Author Name，输入作者名。第一步输入姓加名的第一个字母，中间用英文的逗号隔开。比如，需要检索李海滨这位作者，可输入 Li, H。

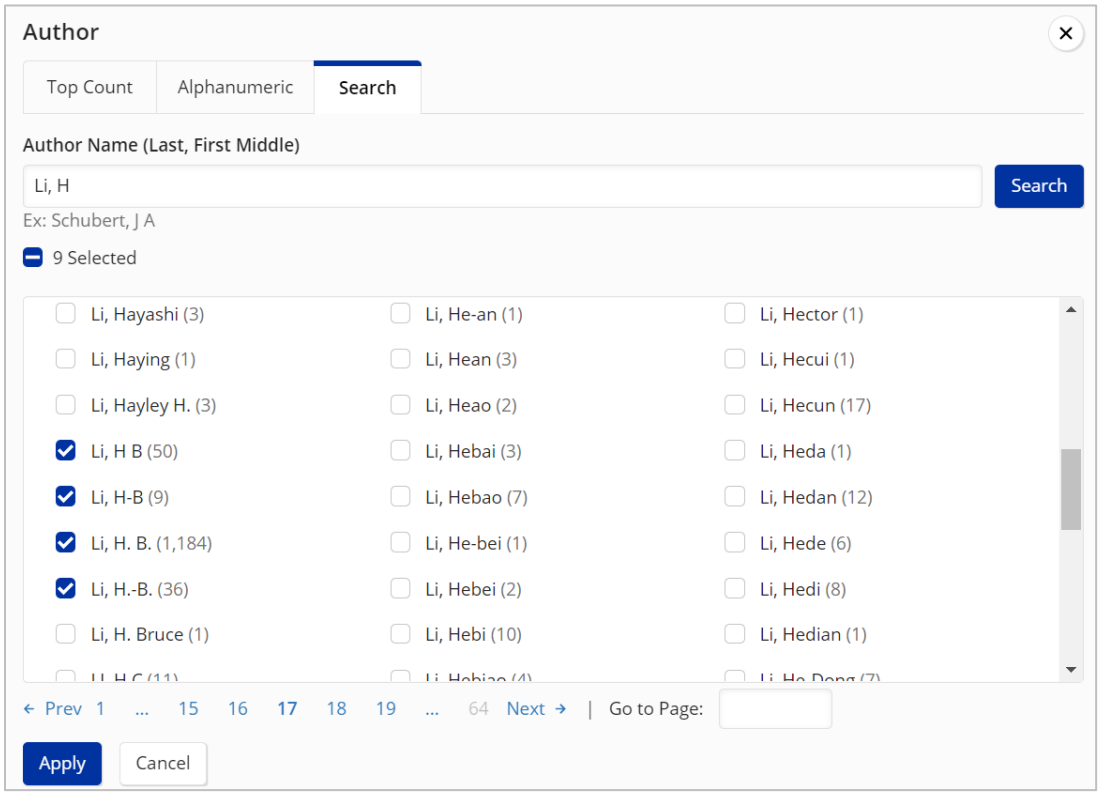
(2) 在获得的文献结果集页面，点击左侧 Filter by：Author，再点击 View All，通过 Search 搜索精准的作者名。

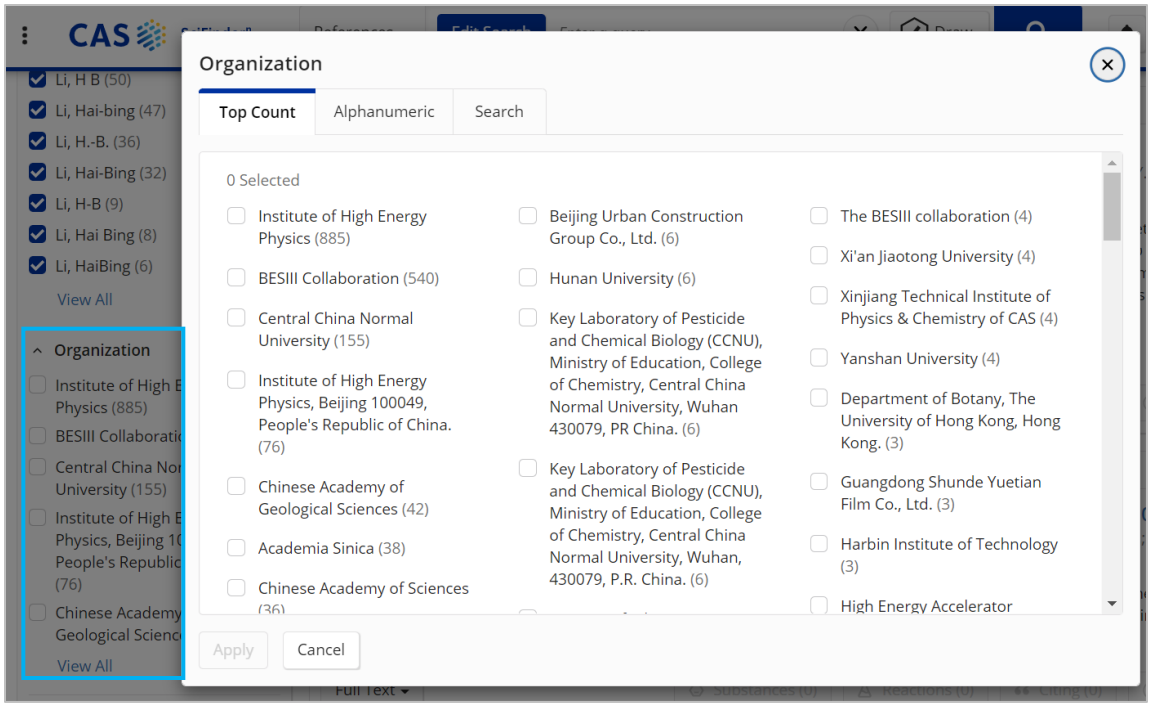
(3) 请注意作者名的不同书写形式：例如输入 Li, H。选择符合要求的名字，比如：Li, Haibing；Li, Hai Bing； Li, Hai-Bing 等。同时参考 Li, H B 和 Li, H. B., 尤其是不确定作者署名格式时，需勾选所有书写形式，确保获取该作者最完整的文献。

(4) 可使用机构名进一步筛选，以获取更精准的某作者的文献：在完成步骤（3）后，再点击结果集页面左侧 Filter by : Organization, 然后点击 View All，展开机构列表，选中该作者的工作单位，点击 Apply 即可精准地获得该作者的文献。




Author
Top Count
Alphanumeric
Search
Author Name (Last, First Middle)
Li, H
Search
Ex: Schubert, J A
5 Selected
Li , H (1)
li, Haibin (1)
Li, Hai-chuan (12)
Li, H (1,649)
Li, Hai Bing (8)
Li, Haichuan (41)
Li, H. (6,037)
Li, Hai-Bing (32)
Li, Hai-chun (3)
Li, H A (4)
Li, Hai-bing (47)
Li, Haichun (85)
Li, H-A (2)
Li, HaiBing (6)
Li, Hai-Cong (5)
Li, H. A. (3)
Li, Haibing (511)
Li, Hai-cong (7)
Li, Ha (1)
Li, Hai Bo (35)
Li, Haicong (13)
Li, Hae Chong (1)
Li, Hai-Bo (251)
Li, Haicui (7)
Prev 1 2 3 4 5 ... 64 Next | Go to Page:
Apply
Cancel

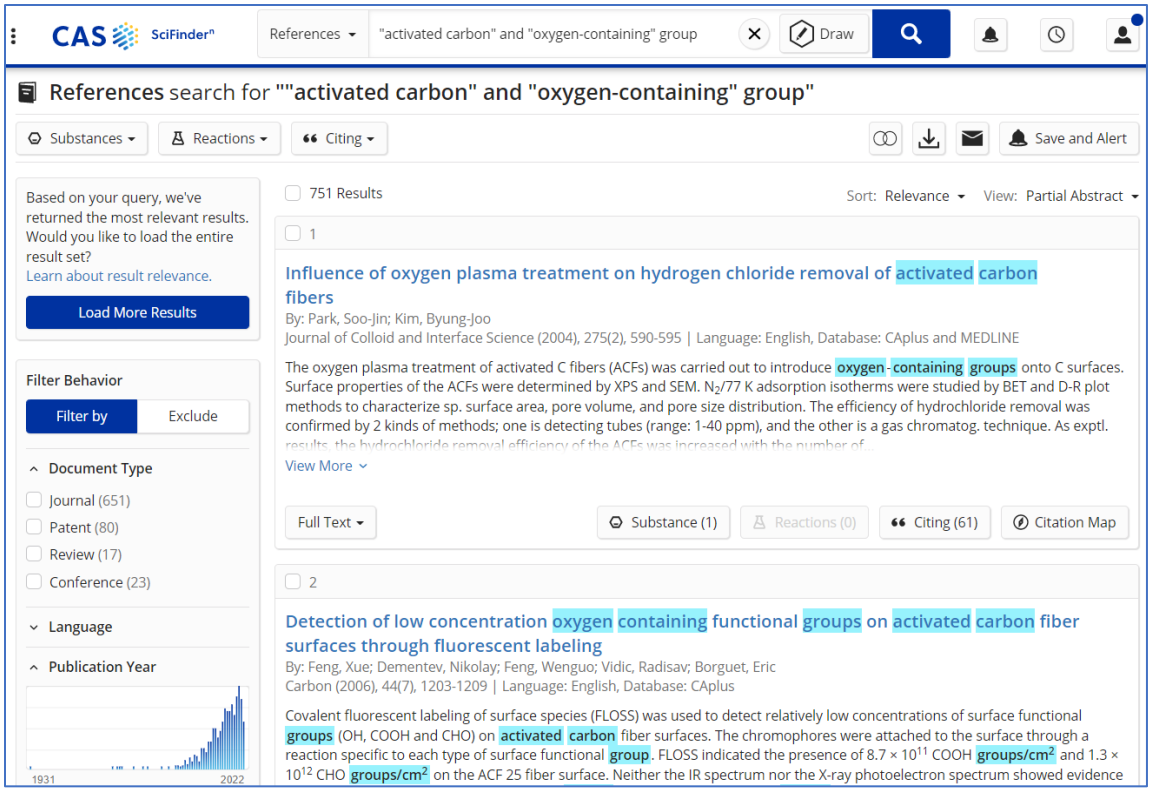

Author
Top Count
Alphanumeric
Search
Author Name (Last, First Middle)
Li, H
Search
Ex: Schubert, J A
9 Selected
Li, Hayashi (3)
Li, He-an (1)
Li, Hector (1)
Li, Haying (1)
Li, Hean (3)
Li, Hecui (1)
Li, Hayley H. (3)
Li, Heao (2)
Li, Hecun (17)
Li, H B (50)
Li, Hebai (3)
Li, Heda (1)
Li, H-B (9)
Li, Hebao (7)
Li, Hedan (12)
Li, H. B. (1,184)
Li, He-bei (1)
Li, Hede (6)
Li, H.-B. (36)
Li, Hebei (2)
Li, Hedi (8)
Li, H. Bruce (1)
Li, Hebi (10)
Li, Hedian (1)
Prev 1 ... 15 16 17 18 19 ... 64 Next | Go to Page:
Apply
Cancel



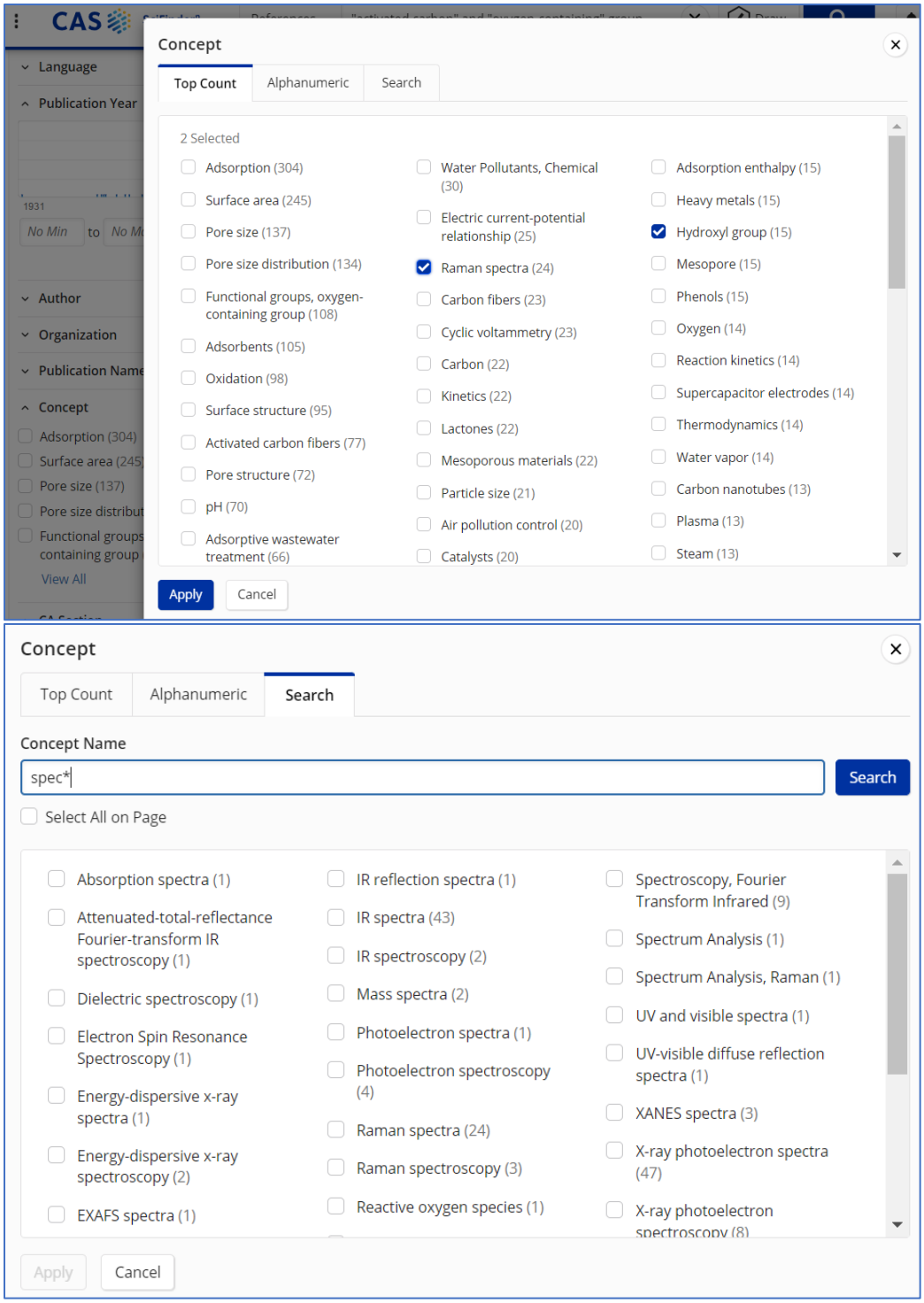
Q23：如何检索活性碳的表面含氧基团的分析方法?

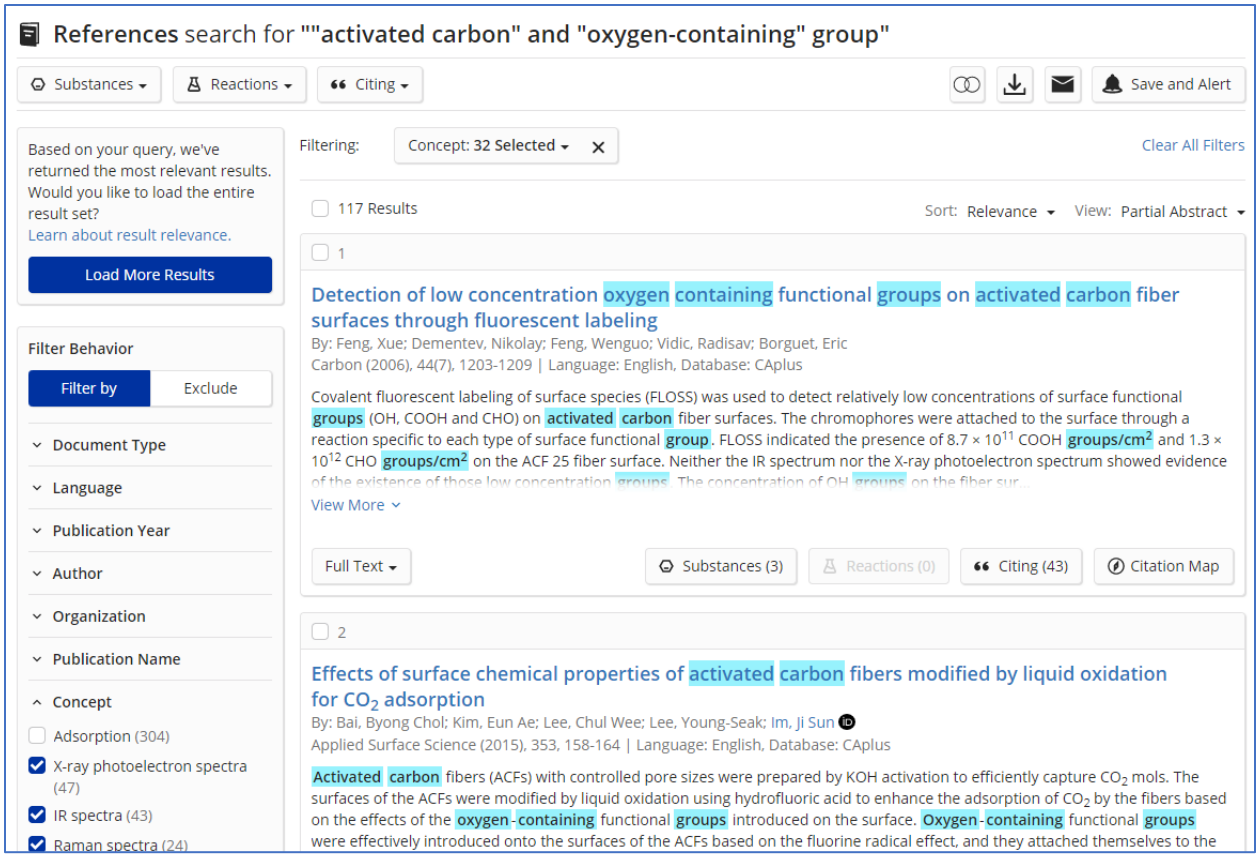
A23：推荐如下检索方法：

（1）使用关键词进行文献检索。例如："activated carbon" and "oxygen-containing" group.



（2）在获得的文献结果集页面，通过左侧聚类分析项 Concept，浏览文献中涉及的核心研究点。可以在 Top Count 中选择研究热点，也可以通过 Search 搜索感兴趣的研究热点，例如输入 spec* (通配符代表 0 或多个字符)，搜索分析谱学研究。选中研究热词后，点击 Concept 窗口左下角 Apply，即可获得精炼后的文献结果。

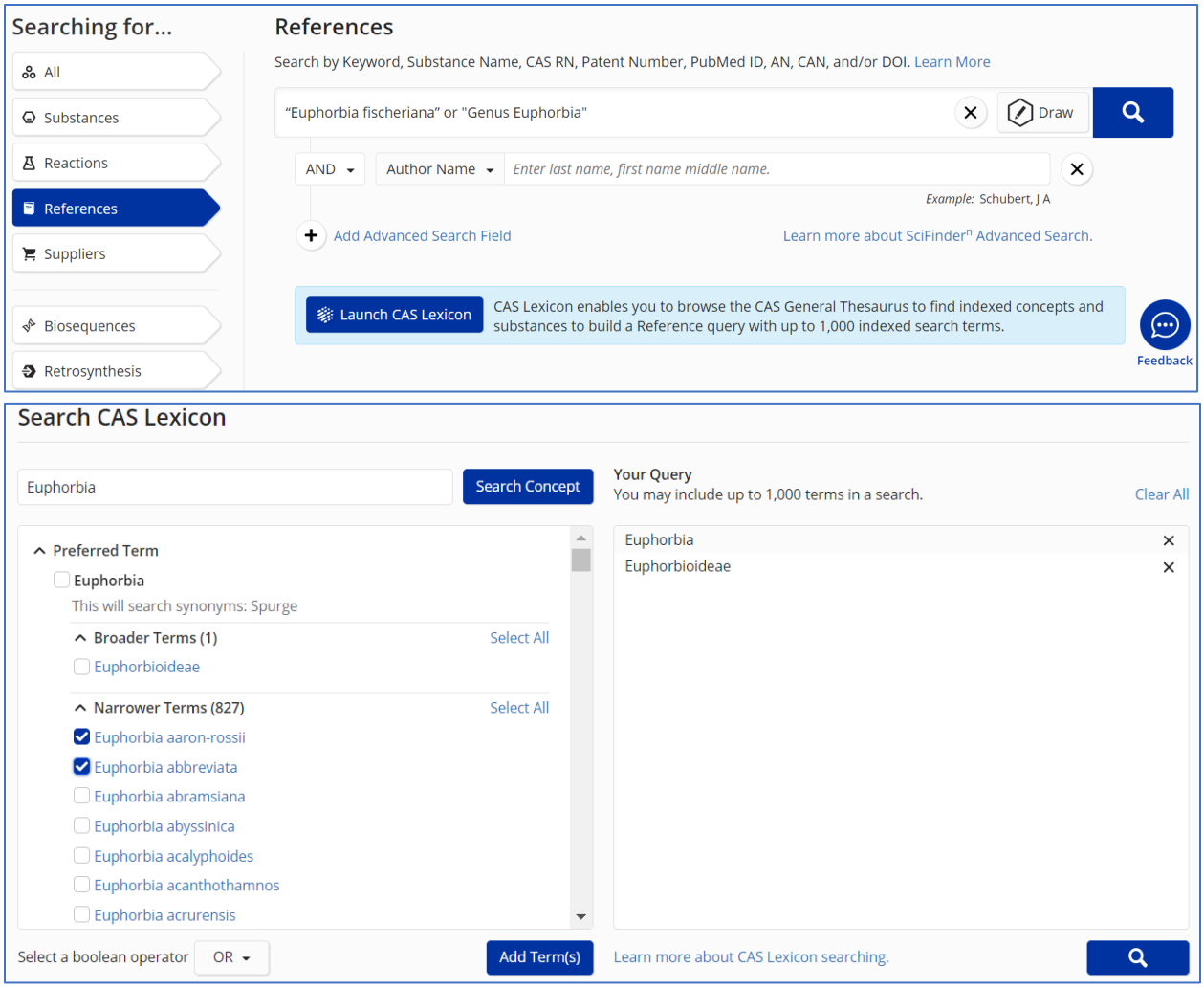

CAS
Language
Publication Year
1931
No Min
to
No Max
Author
Organization
Publication Name
Concept
Adsorption (304)
Surface area (245)
Pore size (137)
Pore size distribut
Functional groups
containing group
View All
Concept
Top Count
Alphanumeric
Search
2 Selected
Adsorption (304)
Surface area (245)
Pore size (137)
Pore size distribution (134)
Functional groups, oxygen-containing group (108)
Adsorbents (105)
Oxidation (98)
Surface structure (95)
Activated carbon fibers (77)
Pore structure (72)
pH (70)
Adsorptive wastewater treatment (66)
Water Pollutants, Chemical (30)
Electric current-potential relationship (25)
Raman spectra (24)
Carbon fibers (23)
Cyclic voltammetry (23)
Carbon (22)
Kinetics (22)
Lactones (22)
Mesoporous materials (22)
Particle size (21)
Air pollution control (20)
Catalysts (20)
Adsorption enthalpy (15)
Heavy metals (15)
Hydroxyl group (15)
Mesopore (15)
Phenols (15)
Oxygen (14)
Reaction kinetics (14)
Supercapacitor electrodes (14)
Thermodynamics (14)
Water vapor (14)
Carbon nanotubes (13)
Plasma (13)
Steam (13)
Apply
Cancel
Concept
Top Count
Alphanumeric
Search
Concept Name
spec*
Search
Select All on Page
Absorption spectra (1)
Attenuated-total-reflectance Fourier-transform IR spectroscopy (1)
Dielectric spectroscopy (1)
Electron Spin Resonance Spectroscopy (1)
Energy-dispersive x-ray spectra (1)
Energy-dispersive x-ray spectroscopy (2)
EXAFS spectra (1)
IR reflection spectra (1)
IR spectra (43)
IR spectroscopy (2)
Mass spectra (2)
Photoelectron spectra (1)
Photoelectron spectroscopy (4)
Raman spectra (24)
Raman spectroscopy (3)
Reactive oxygen species (1)
Spectroscopy, Fourier Transform Infrared (9)
Spectrum Analysis (1)
Spectrum Analysis, Raman (1)
UV and visible spectra (1)
UV-visible diffuse reflection spectra (1)
XANES spectra (3)
X-ray photoelectron spectra (47)
X-ray photoelectron spectroscopy (8)
Apply
Cancel



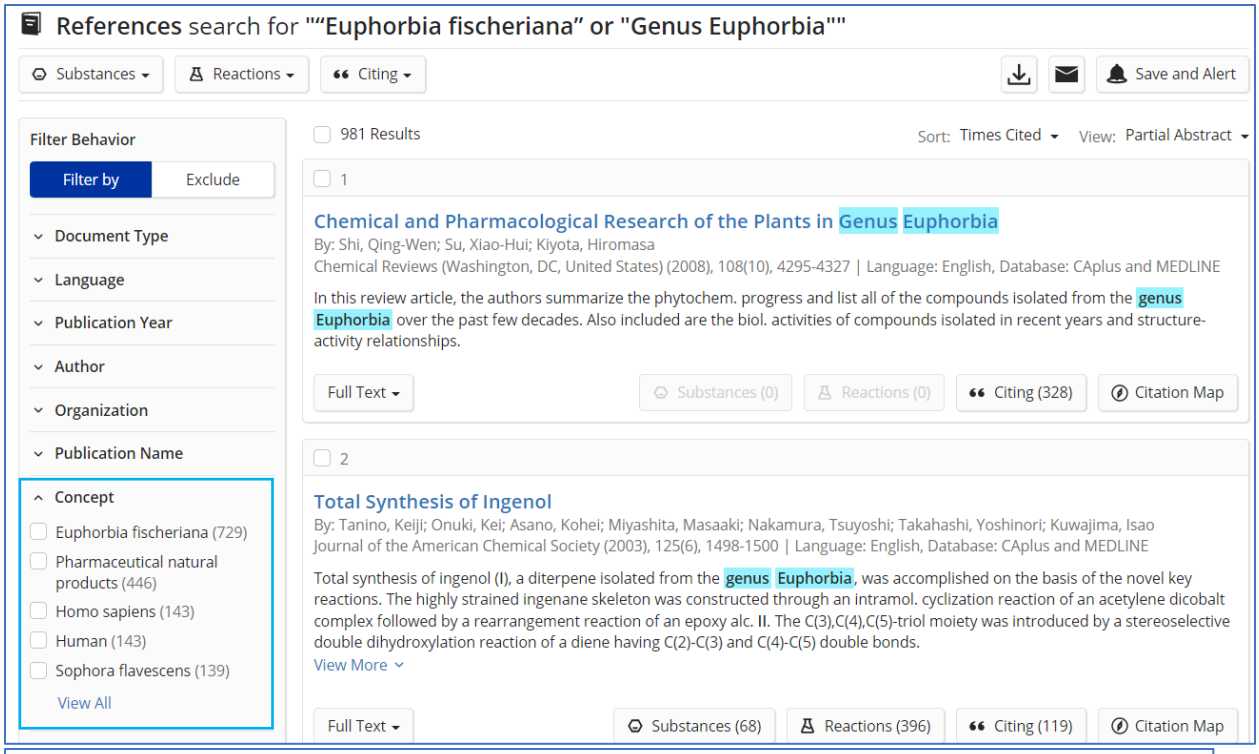
Q24：如何检索从某一植物中提取的化合物信息？

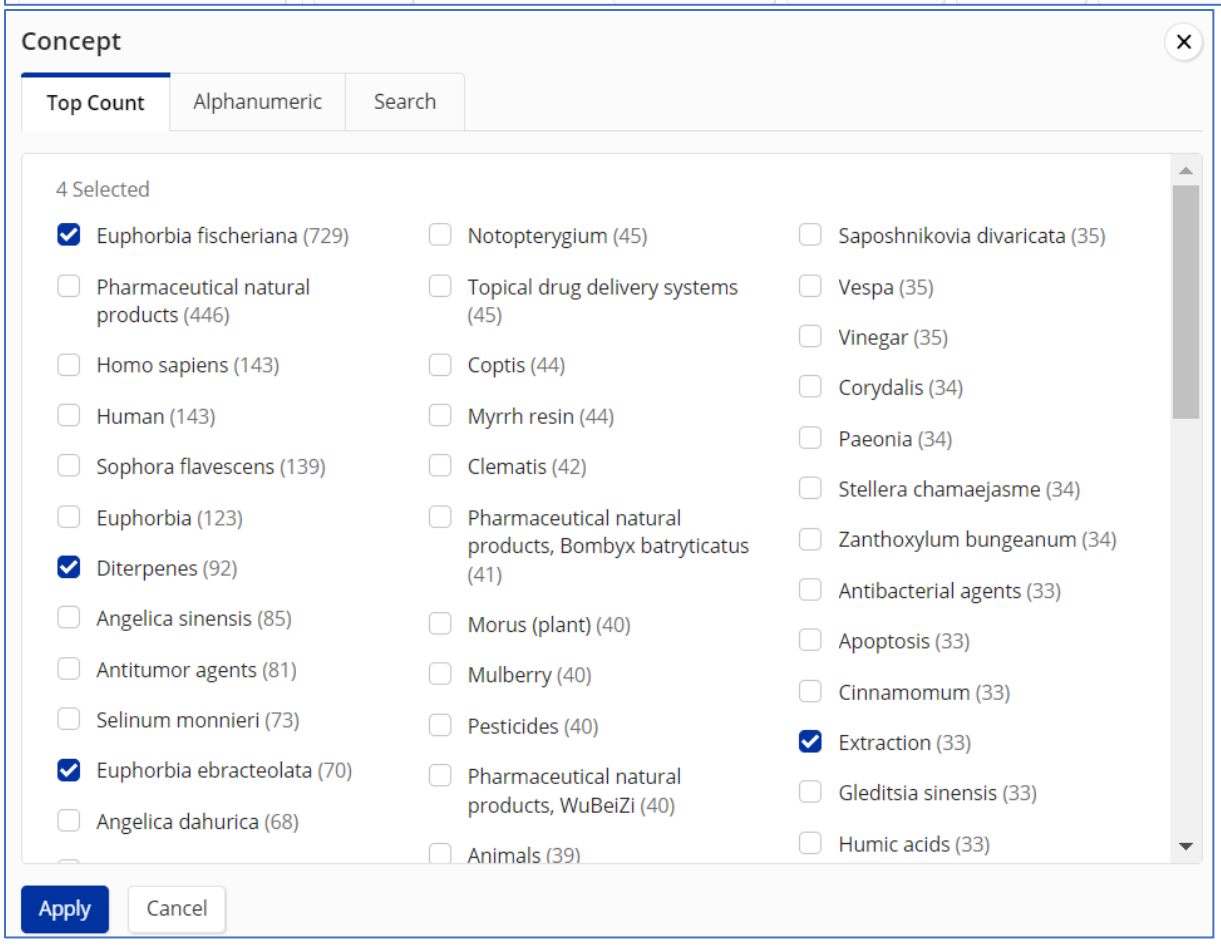
A24：推荐如下检索步骤：

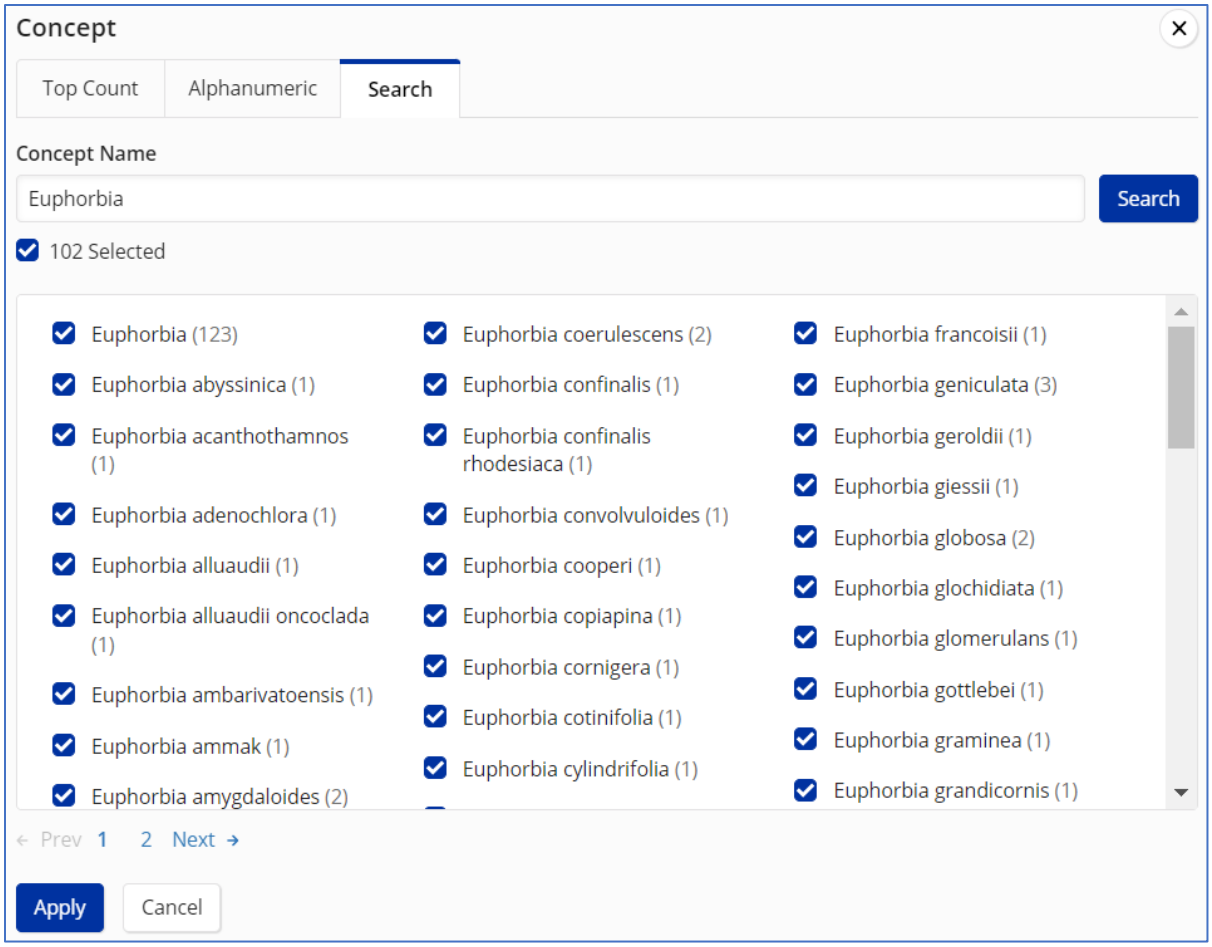
（1）在 CAS SciFinder^n 主页面，选择 References，输入此植物种（属）名。可以使用 CAS 词库（CAS Lexicon），扩展植物名。



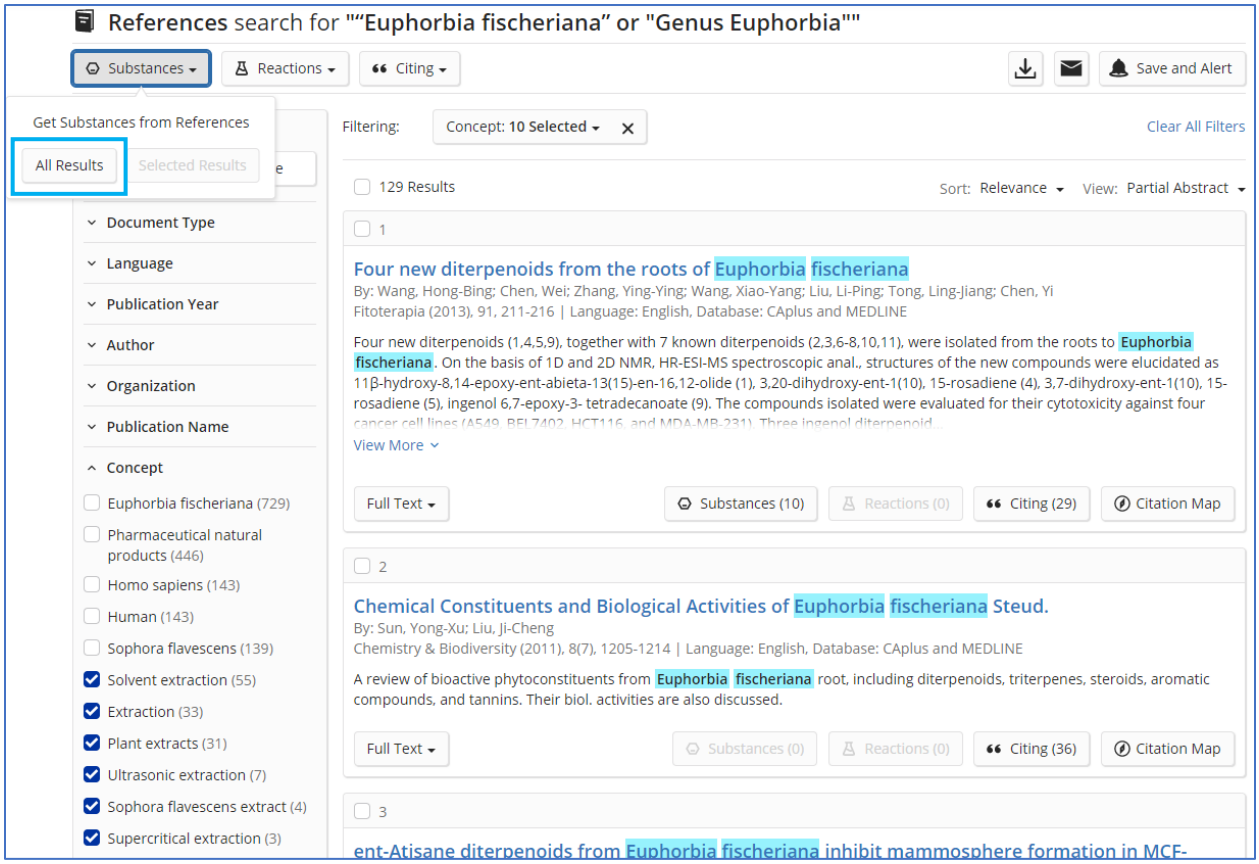
（2）获得文献结果后，可在结果集页面左侧通过 Concept 进一步精炼文献结果，例如选择 diterpene; 也可在 Concept 里搜索，例如 extract*。

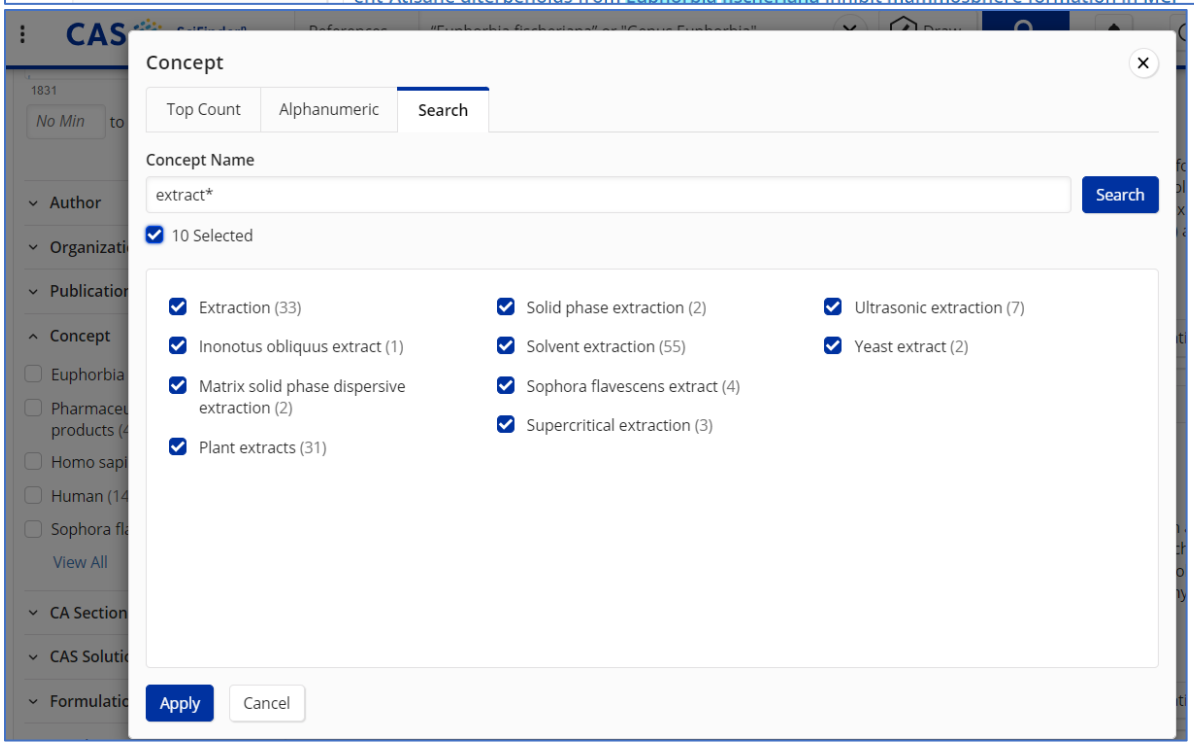

References search for ""Euphorbia fischeriana" or "Genus Euphorbia""
Substances
Reactions
Citing
Save and Alert
Filter Behavior
Filter by
Exclude
Document Type
Language
Publication Year
Author
Organization
Publication Name
Concept
Euphorbia fischeriana (729)
Pharmaceutical natural products (446)
Homo sapiens (143)
Human (143)
Sophora flavescens (139)
View All
981 Results
Sort: Times Cited
View: Partial Abstract
1
Chemical and Pharmacological Research of the Plants in Genus Euphorbia
By: Shi, Qing-Wen; Su, Xiao-Hui; Kiyota, Hiromasa
Chemical Reviews (Washington, DC, United States) (2008), 108(10), 4295-4327 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE
In this review article, the authors summarize the phytochem. progress and list all of the compounds isolated from the genus Euphorbia over the past few decades. Also included are the biol. activities of compounds isolated in recent years and structure-activity relationships.
Full Text
Substances (0)
Reactions (0)
Citing (328)
Citation Map
2
Total Synthesis of Ingenol
By: Tanino, Keiji; Onuki, Kei; Asano, Kohei; Miyashita, Masaaki; Nakamura, Tsuyoshi; Takahashi, Yoshinori; Kuwajima, Isao
Journal of the American Chemical Society (2003), 125(6), 1498-1500 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE
Total synthesis of ingenol (I), a diterpene isolated from the genus Euphorbia, was accomplished on the basis of the novel key reactions. The highly strained ingenane skeleton was constructed through an intramol. cyclization reaction of an acetylene dicobalt complex followed by a rearrangement reaction of an epoxy alc. II. The C(3),C(4),C(5)-triol moiety was introduced by a stereoselective double dihydroxylation reaction of a diene having C(2)-C(3) and C(4)-C(5) double bonds.
View More
Full Text
Substances (68)
Reactions (396)
Citing (119)
Citation Map


Concept
Top Count
Alphanumeric
Search
4 Selected
Euphorbia fischeriana (729)
Pharmaceutical natural products (446)
Homo sapiens (143)
Human (143)
Sophora flavescens (139)
Euphorbia (123)
Diterpenes (92)
Angelica sinensis (85)
Antitumor agents (81)
Selinum monnieri (73)
Euphorbia ebracteolata (70)
Angelica dahurica (68)
Notopterygium (45)
Topical drug delivery systems (45)
Coptis (44)
Myrrh resin (44)
Clematis (42)
Pharmaceutical natural products, Bombyx batryticatus (41)
Morus (plant) (40)
Mulberry (40)
Pesticides (40)
Pharmaceutical natural products, WuBeiZi (40)
Animals (39)
Saposhnikovia divaricata (35)
Vespa (35)
Vinegar (35)
Corydalis (34)
Paeonia (34)
Stellera chamaejasme (34)
Zanthoxylum bungeanum (34)
Antibacterial agents (33)
Apoptosis (33)
Cinnamomum (33)
Extraction (33)
Gleditsia sinensis (33)
Humic acids (33)
Apply
Cancel

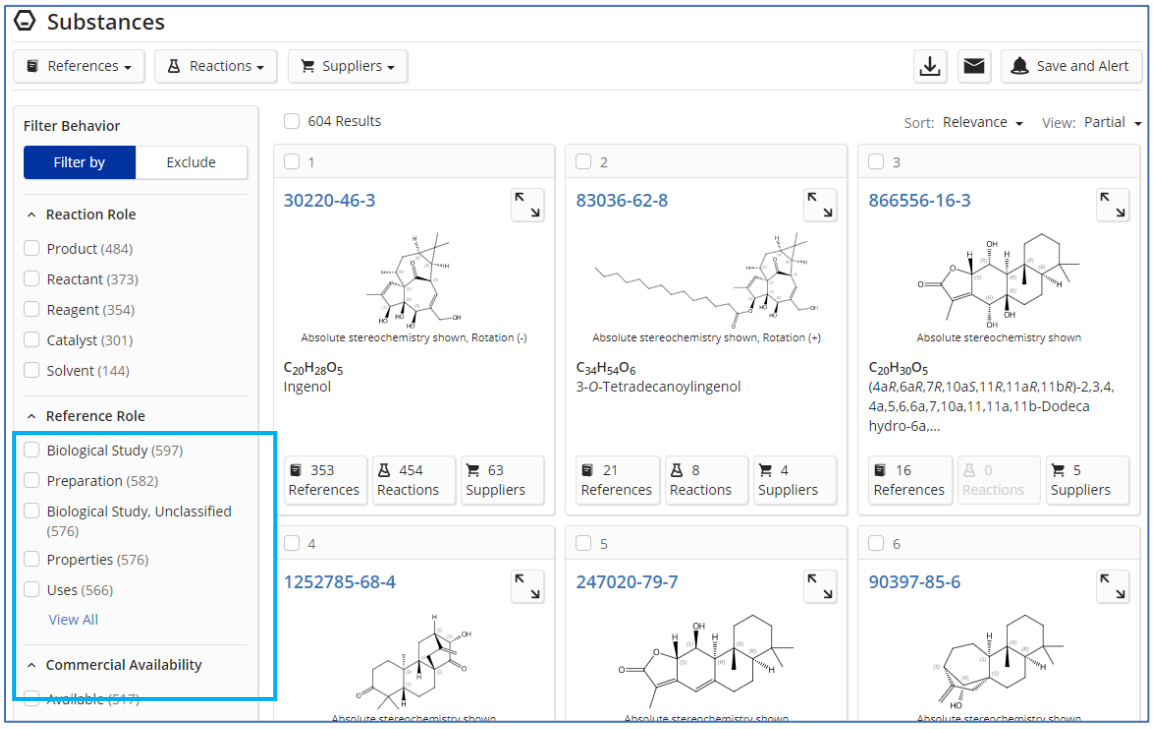


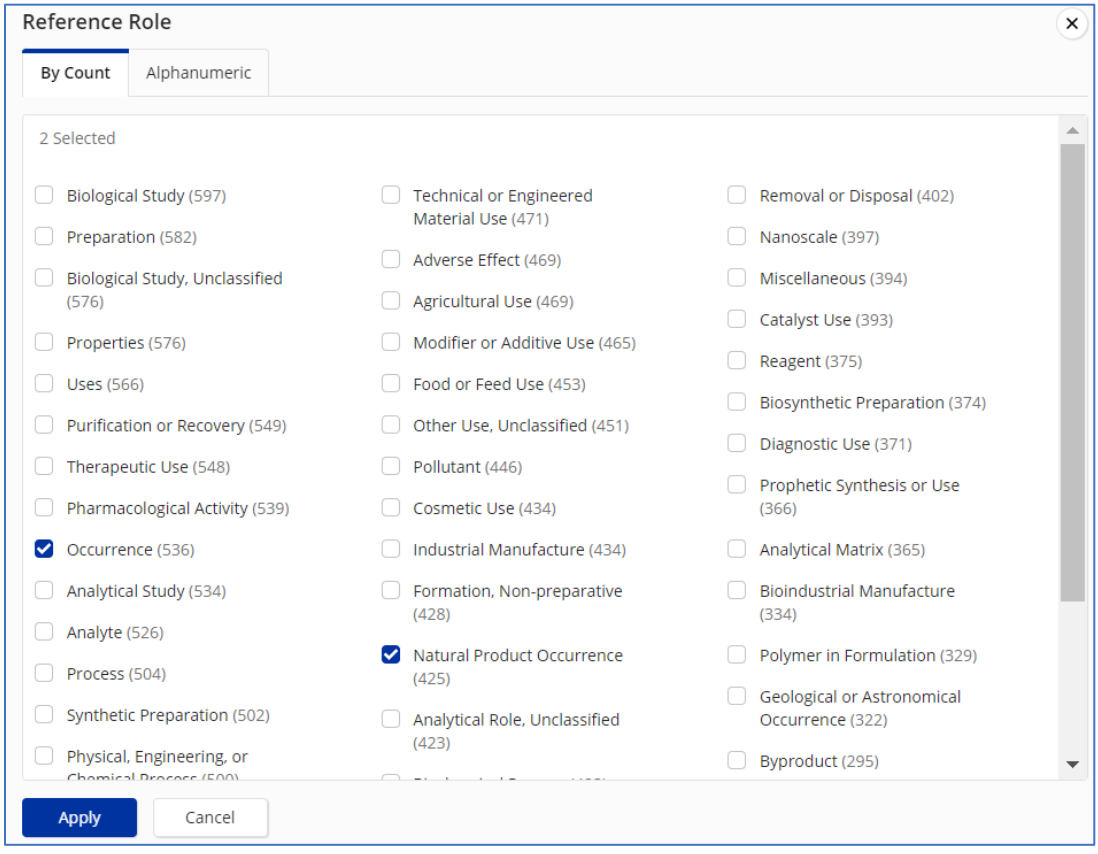
（3）精炼文献后，点击页面左上角的 Substance，可获取文献中的物质结果。

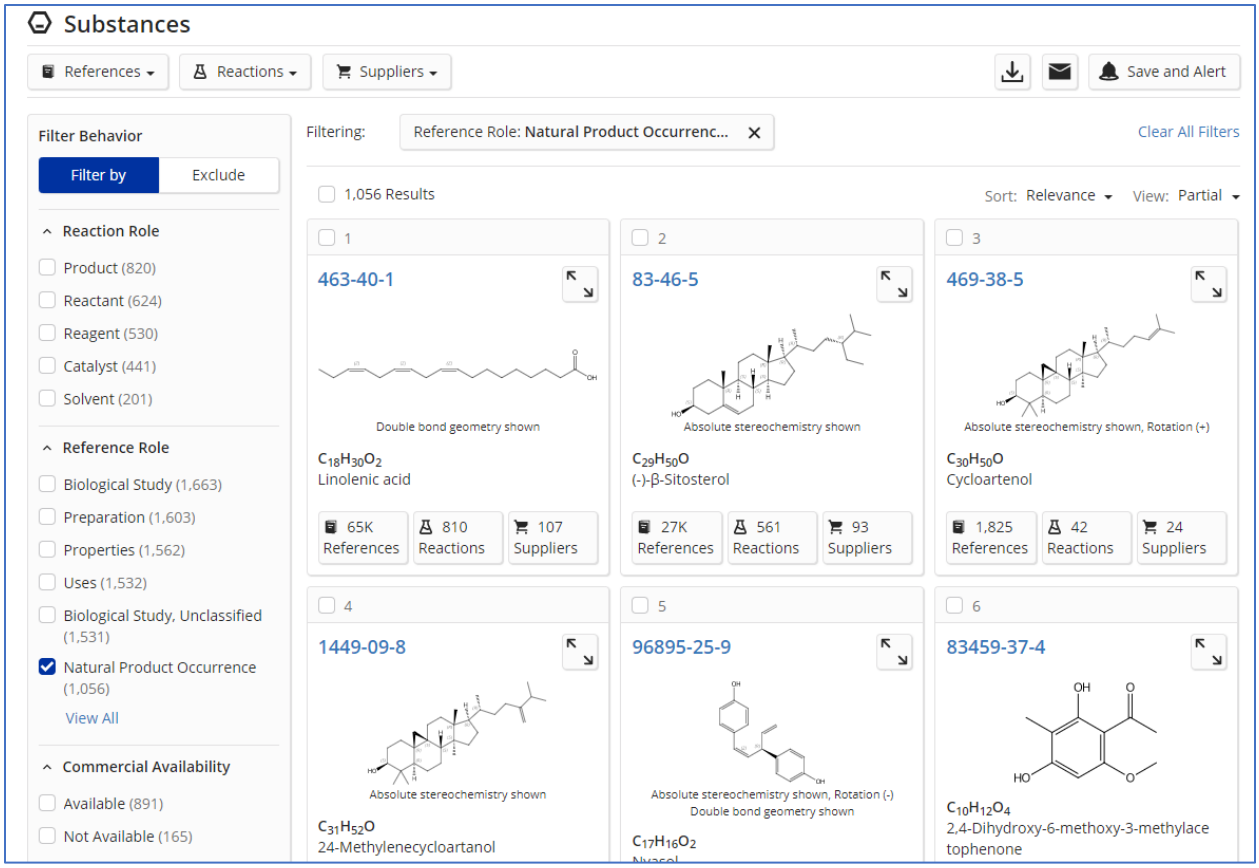

References search for ""Euphorbia fischeriana" or "Genus Euphorbia""
Substances
Reactions
Citing
Save and Alert
Get Substances from References
All Results
Selected Results
Filtering:
Concept: 10 Selected
Clear All Filters
129 Results
Sort: Relevance
View: Partial Abstract
Document Type
Language
Publication Year
Author
Organization
Publication Name
Concept
Euphorbia fischeriana (729)
Pharmaceutical natural products (446)
Homo sapiens (143)
Human (143)
Sophora flavescens (139)
Solvent extraction (55)
Extraction (33)
Plant extracts (31)
Ultrasonic extraction (7)
Sophora flavescens extract (4)
Supercritical extraction (3)
1
Four new diterpenoids from the roots of Euphorbia fischeriana
By: Wang, Hong-Bing; Chen, Wei; Zhang, Ying-Ying; Wang, Xiao-Yang; Liu, Li-Ping; Tong, Ling-Jiang; Chen, Yi
Fitoterapia (2013), 91, 211-216 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE
Four new diterpenoids (1,4,5,9), together with 7 known diterpenoids (2,3,6-8,10,11), were isolated from the roots to Euphorbia fischeriana. On the basis of 1D and 2D NMR, HR-ESI-MS spectroscopic anal., structures of the new compounds were elucidated as 11β-hydroxy-8,14-epoxy-ent-abieta-13(15)-en-16,12-olide (1), 3,20-dihydroxy-ent-1(10), 15-rosadiene (4), 3,7-dihydroxy-ent-1(10), 15-rosadiene (5), ingenol 6,7-epoxy-3- tetradecanoate (9). The compounds isolated were evaluated for their cytotoxicity against four
View More
Full Text
Substances (10)
Reactions (0)
Citing (29)
Citation Map
2
Chemical Constituents and Biological Activities of Euphorbia fischeriana Steud.
By: Sun, Yong-Xu; Liu, Ji-Cheng
Chemistry & Biodiversity (2011), 8(7), 1205-1214 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE
A review of bioactive phytoconstituents from Euphorbia fischeriana root, including diterpenoids, triterpenes, steroids, aromatic compounds, and tannins. Their biol. activities are also discussed.
Full Text
Substances (0)
Reactions (0)
Citing (36)
Citation Map
3
ent-Atisane diterpenoids from Euphorbia fischeriana inhibit mammosphere formation in MCF-


Concept
Top Count
Alphanumeric
Search
Concept Name
extract*
Search
10 Selected
Extraction (33)
Inonotus obliquus extract (1)
Matrix solid phase dispersive extraction (2)
Plant extracts (31)
Solid phase extraction (2)
Solvent extraction (55)
Sophora flavescens extract (4)
Supercritical extraction (3)
Ultrasonic extraction (7)
Yeast extract (2)
Apply
Cancel

（4）在物质结果集页面，通过左侧 Reference role，选择 Occurrence，获取天然来源的物质；选择 natural product occurrence 精准获取来自天然产物中的物质。






Substances
References
Reactions
Suppliers
Save and Alert
Filter Behavior
Filter by
Exclude
Reaction Role
Product (820)
Reactant (624)
Reagent (530)
Catalyst (441)
Solvent (201)
Reference Role
Biological Study (1,663)
Preparation (1,603)
Properties (1,562)
Uses (1,532)
Biological Study, Unclassified (1,531)
Natural Product Occurrence (1,056)
View All
Commercial Availability
Available (891)
Not Available (165)
Filtering:
Reference Role: Natural Product Occurrenc...
Clear All Filters
1,056 Results
Sort: Relevance
View: Partial
1
463-40-1
Double bond geometry shown
C18H30O2
Linolenic acid
65K References
810 Reactions
107 Suppliers
2
83-46-5
Absolute stereochemistry shown
C29H50O
(-)-β-Sitosterol
27K References
561 Reactions
93 Suppliers
3
469-38-5
Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)
C30H50O
Cycloartenol
1,825 References
42 Reactions
24 Suppliers
4
1449-09-8
Absolute stereochemistry shown
C31H52O
24-Methylenecycloartanol
5
96895-25-9
Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)
Double bond geometry shown
C17H16O2
6
83459-37-4
OH
O
HO
C10H12O4
2,4-Dihydroxy-6-methoxy-3-methylacetophenone

物质检索

Q1：在 CAS PatentPak 中如何搜索 CAS 登记号？

A1：使用 Ctrl+F，输入 CAS 登记号，即可快速定位到所关注的物质。

Q2：用结构式检索后，As Drawn、Substructure 和 Similarity 中哪个结果集可以使用 Chemscape 来进行分析?

A2：As Drawn、Substructure 或 similarity 选项中的物质都可以利用 Chemscape 来进行分析。

Q3：如何根据碎片结构检索潜药?

A3：

1）首先在结构编辑器中绘制碎片结构（各个碎片结构之间无需任何连接），结构上传后进行检索。通过物质结果集页面左侧的 Number of Components，确定这些碎片结构呈现在一个（选数字 1）还是多个（除 1 以外的其他数字）化学结构中；

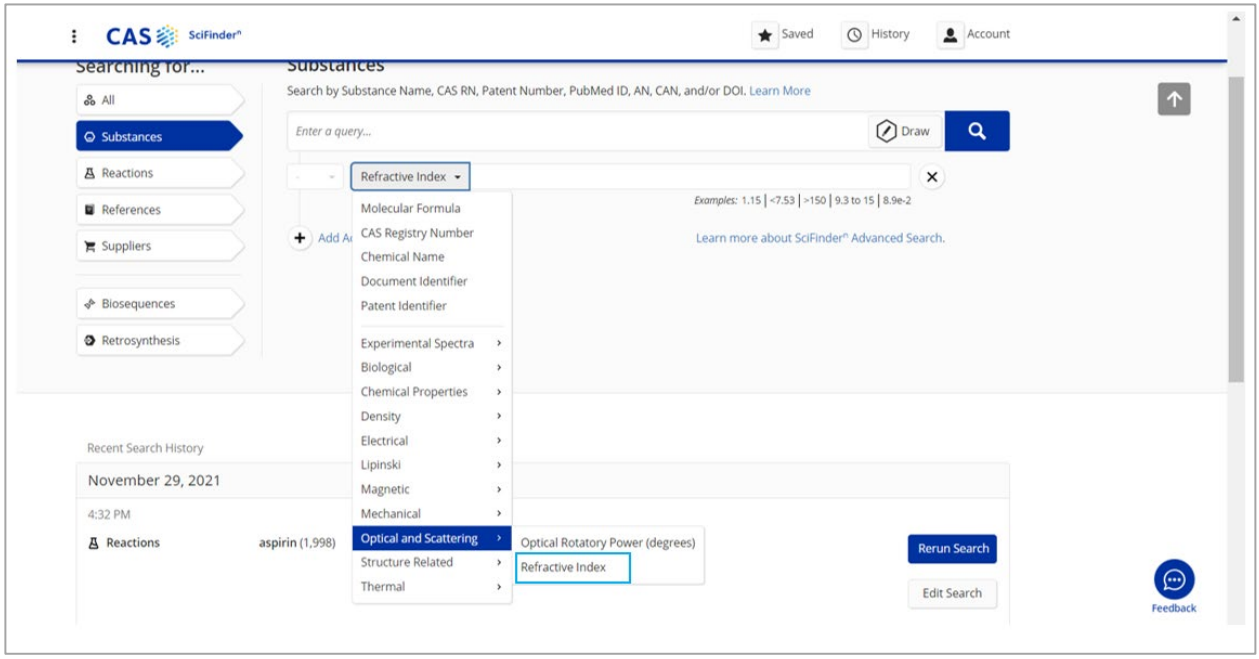
2）再通过物质结果集页面左侧的 Bioactivity Indicator 或 Target Indicator 筛选具有潜在生物活性的物质；

3）最后，点击物质结果集页面的 References 获取潜药的相关文献。

Q4：如何根据折射率来获取物质?

A4：先点击 CAS SciFinder^{n} 主页左侧的 Substances，再点击 Add Advanced Search Field，然后点击 Select，在出现的列表中选择 Optical and Scattering，再选择 Refractive Index，在输入框中输入希望检索的定值（比如 2）或者区间值（比如>1, 2 to 3），点击检索，即可获得符

合要求的物质结果集。 如下图所示：



Q5：怎样绘制苯并杂环的通式结构?

A5：

（1）首先绘制一个苯环，然后在苯环上绘制一个并环，根据需要使用重复键重复原子或片段，获得期望的环。

（2）如果有特定的杂原子可选，则可以使用 R 基团，将需要的杂原子定义在 R 基团中，如果对并环是否饱和无特殊要求，则并环中的键可用⋯ (unspecified bond）来表示。

Q6：在一个含有 N 杂环的物质 Substructure 检索结果集中，快速筛选出含有 2 个或者 3 个 N 原子数的物质的方法?

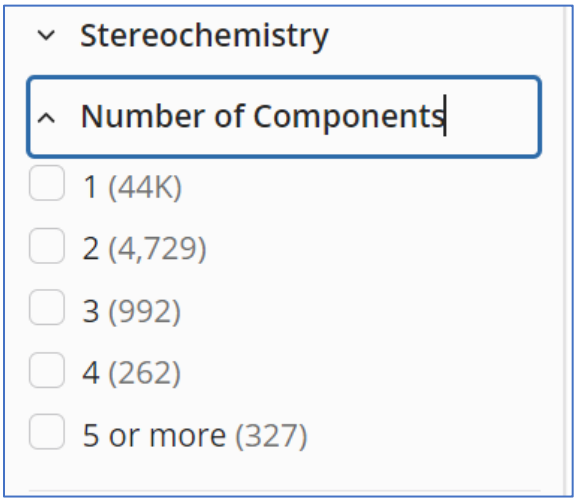
A6：点击结果集页面左下角的 Search Within Results，打开结构编辑器，在结构编辑器中绘制指定的原子，比如要求筛选出含有 2 个 N 原子的物质，则在结构编辑器中绘制 2 个 N 原子，2 个 N 原子之间无需任何连接，单独绘制即可。检索后即可得到指定原子个数的物质。

Q7：已知分子式及部分结构片段，如何快速得到目标物质?

A7：通过分子式进行检索，在得到的物质结果集页面左下角选择 Search Within Results，在打开的结构编辑中输入结构片段，然后检索，即可快速获得目标物质。

Q8：如何通过组分数筛选组合物?

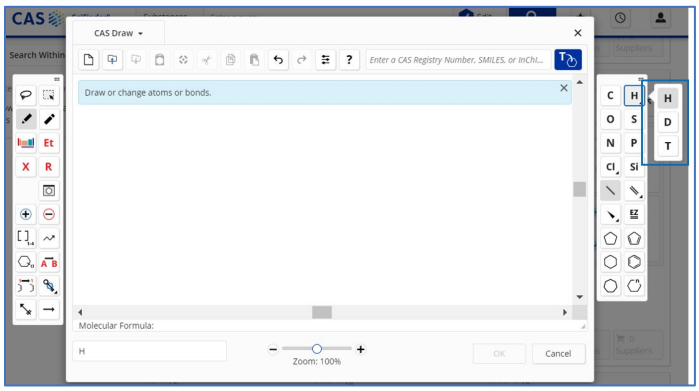
A8：在物质结果集页面左侧选择 Number of Components，即可通过组分数筛选组合物，如下图所示：



Q9：如何检索同位素标记的化合物

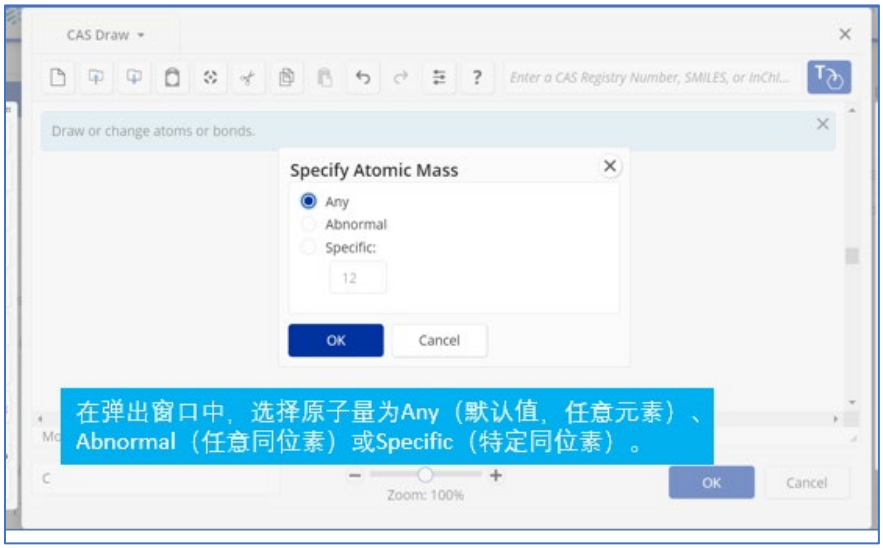
A9：以下三种方法可以获取到同位素标记的物质：

1） 对于含有 H 的同位素物质，可以在结构编辑器面板点击 H，在弹出框中直接选择 D, T 进行结构绘制。如下图所示



2） 在绘制结构时不考虑同位素，通过结构检索得到物质结果集页面后，点击物质结果集页面左侧 Filter by: Isotopes，选择 containing isotopes，即可获得各种同位素标记的物质。

3） 绘制任意特定原子的同位素方法如下：



Q10：怎么找到物质的衍生物?

A10：按照下述步骤操作：

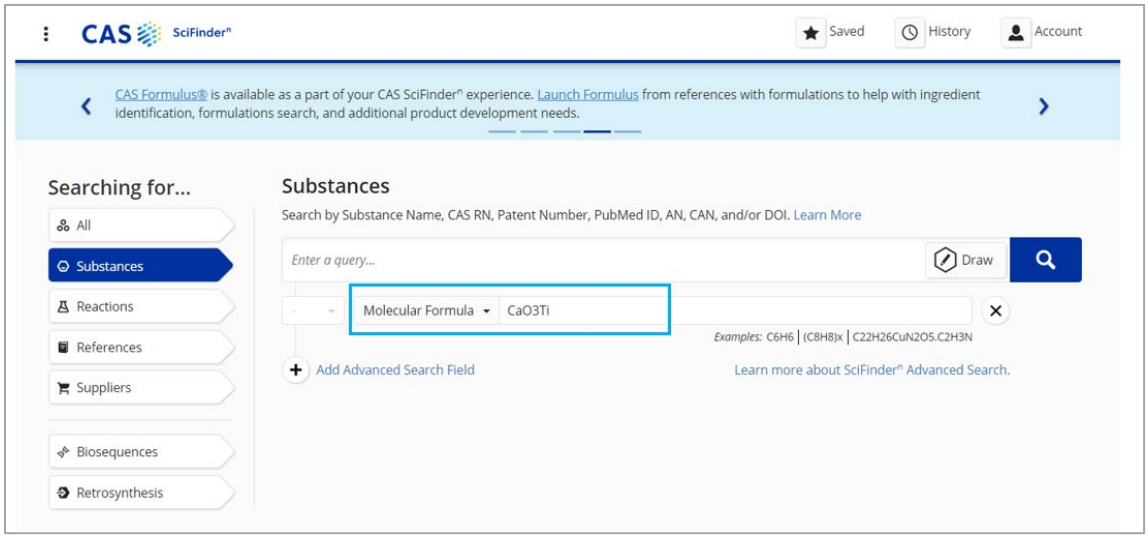
- 点击 Substances，打开结构编辑器，绘制结构。上传结构并检索
- 通过结构检索可同时获取 As Drawn, Substructure 和 Similarity 检索结果集，默认展示 As Drawn 结果集。
- 点击 Substructure，可获取绘制结构母核不变的衍生物；点击 Similarity，参考一定范围的相似度分值，可以获取绘制结构母核发生一定变化的衍生物。

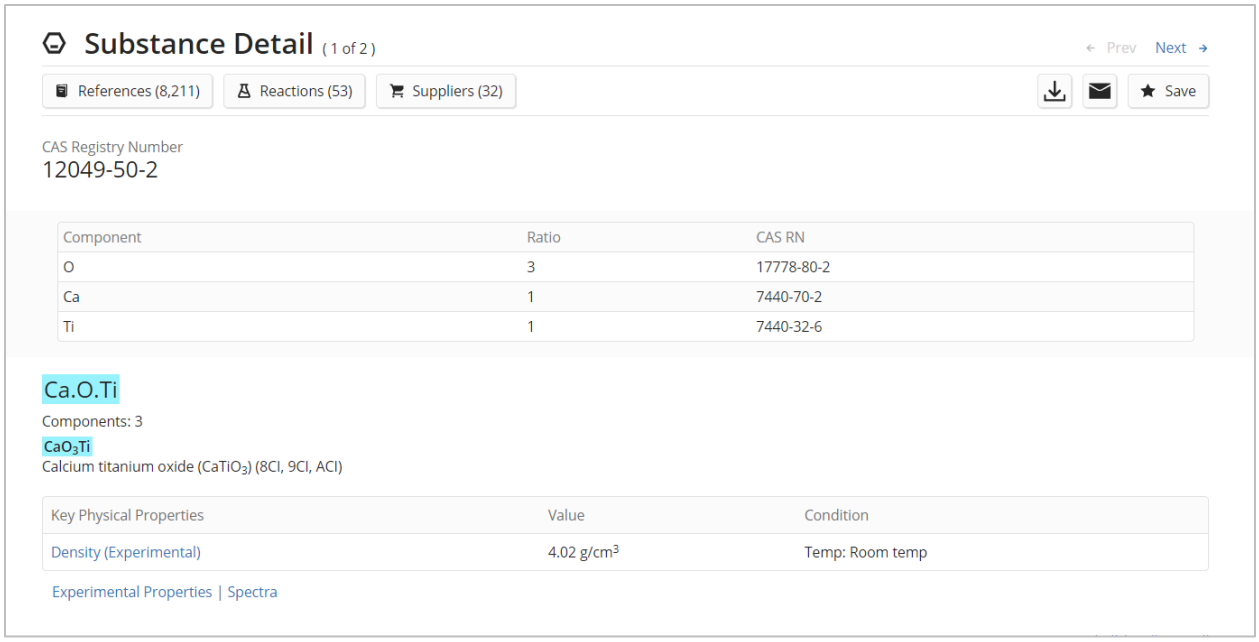
Q11：CAS SciFinder^n 中的结构是否区分构象异构体?

A11：在 CAS SciFinder^n 结构编辑器中绘制结构时，可使用结构面板的异构体键，绘制旋光异构体或顺反异构体。在绘制结构和展示物质结果集时，不区分构象异构或位阻异构等其他异构体，这些异构可通过文献详情获取。

Q12：如何检索无机氧化物，比如 CaTiO3?

A12：点击 Substances，再点击 Add Advanced Search, 点击 Select，在下拉选项中选择 Molecular Formula。在输入框中输入 CaO3Ti，点击 Search 即可获得 CaTiO3 的物质信息。如下图：





在输入分子式时，需要遵循 Hill 规则：分子式中不含碳原子时，各元素排序根据字母顺序表进行排列； 分子式中含碳原子时， “C”排首位，如有氢则紧随其后,其它元素符号按字母顺序排在氢的后面。

Q13：如何检索对苯二甲酸和 Zn 组成的 MOF 材料?

A13：按以下步骤操作：

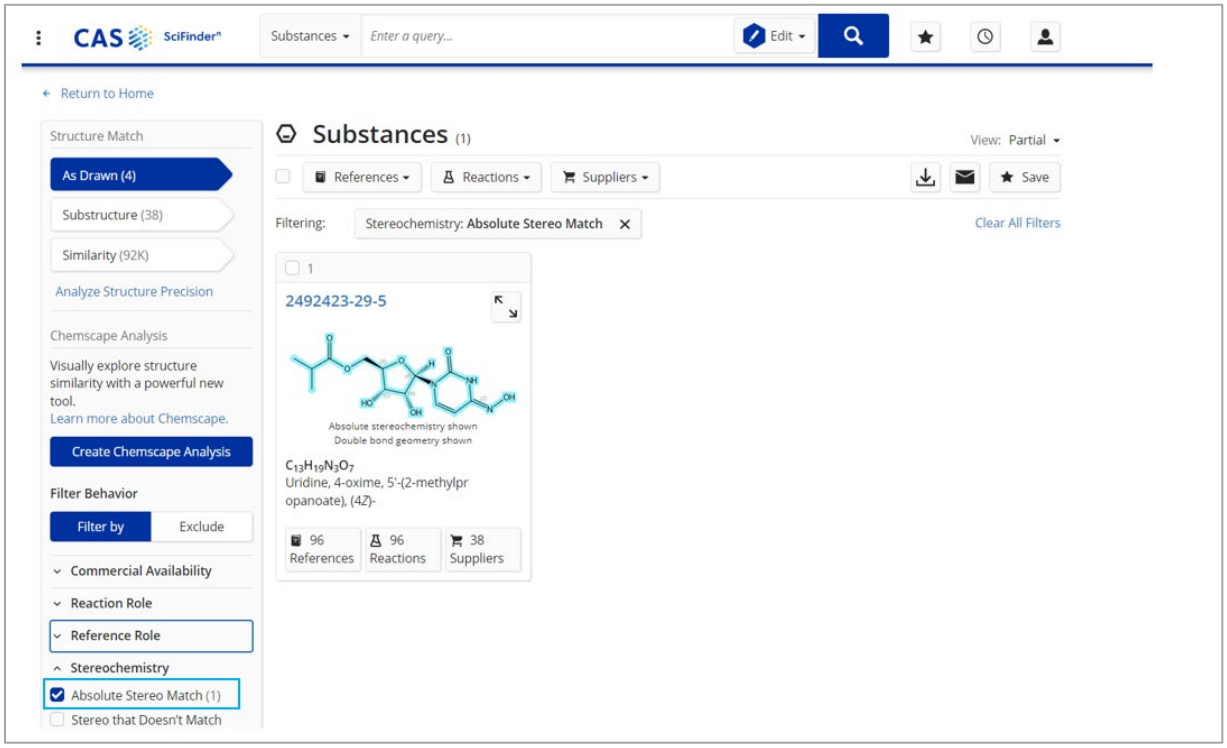
（1） 选择 Substances，打开结构编辑器，绘制对苯二甲酸和 Zn，进行结构检索。

（2） 在结果集页面，可直接查看 As Drawn 结果，如果需要查看有这类配体衍生物组成的 MOF 材料，则可查看 Substructure 结果。

在物质结果集页面左侧选择 Filter By : Number of Components 选 1，即获取配体和金属中心在同一个结构中的物质；如果需要，可进一步通过 substance class 选择 coordination compound 或 polymer。

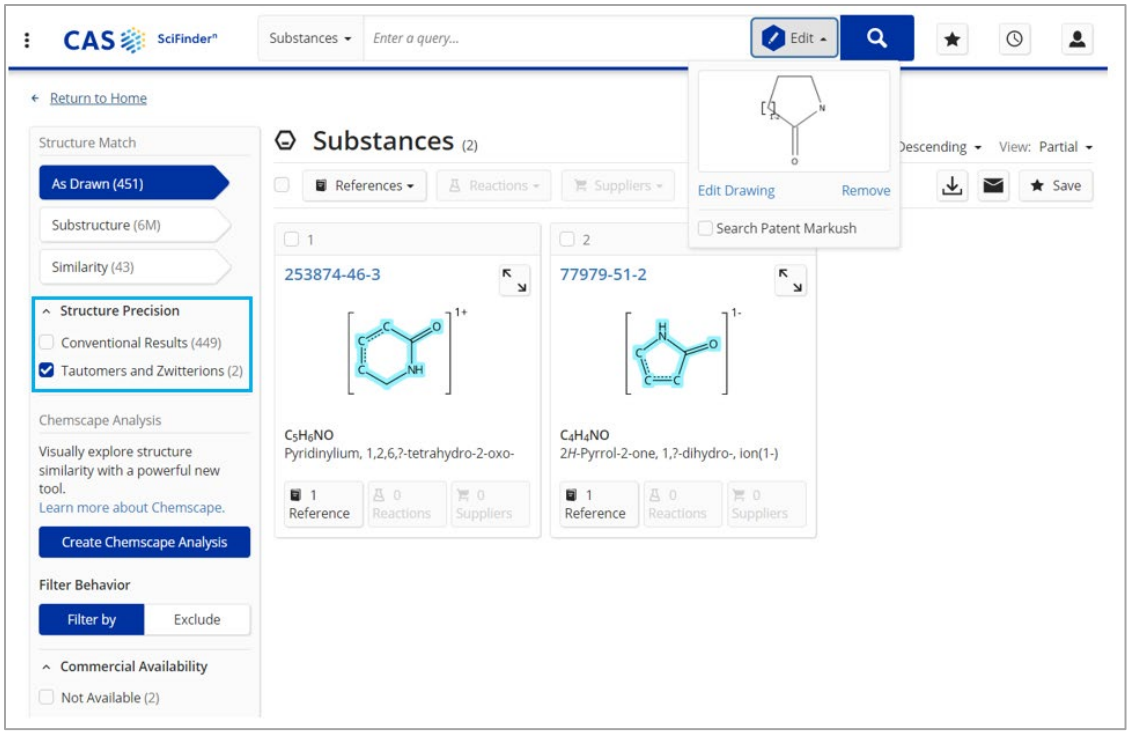
Q14：根据手性物质进行结构检索，为什么结果中呈现的物质数量有时候少于 As Drawn 显示的结果数?

A14：As Drawn 涵盖的物质既包含 Absolute Stereo Match，还包含 Stereo that doesn`t Match Query 的物质。在展示结果时，CAS SciFinder^{n} 自动勾选了 Absolute Stereo Match，这样就导致了呈现的物质数量与 As Drawn 展示数量不一致的情况。如果需要 As Drawn 包含的所有物质，则可在结果集页面左侧勾选 Filter by: Stereochemistry 下所有选项。如下所示：



Q15：一个含有酰胺(O=C-NH) 的环系化合物，如何获取其互变异构形成的-OH?

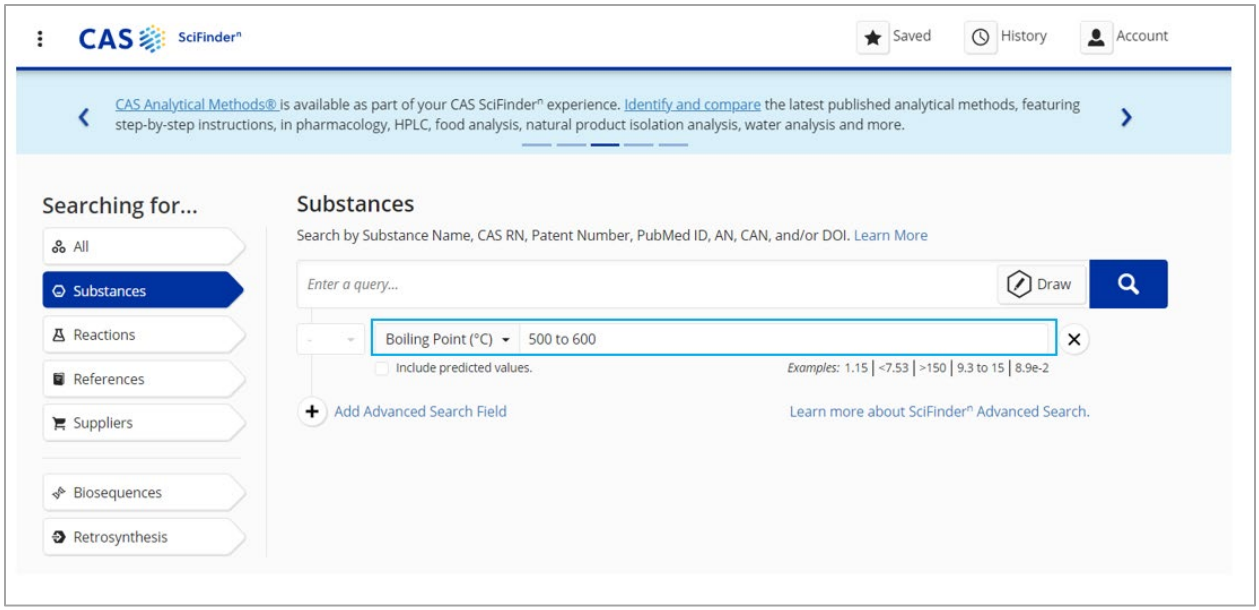
A15：用结构式进行物质检索。在获得的结果集页面左侧，点击 Analyze Structure Precision，选择 Tautomers and Zwitterions 获取互变异构体和两性离子化合物。

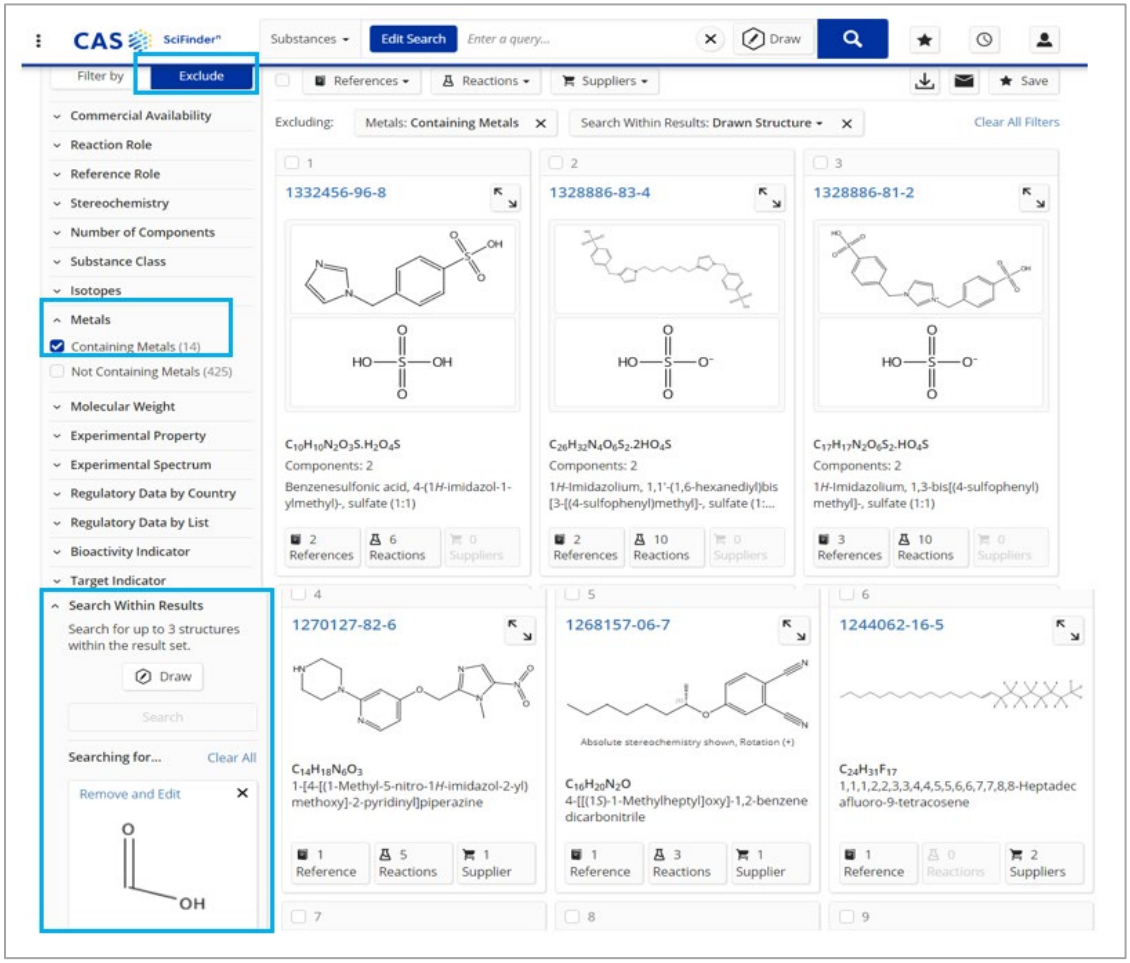


Q16：如何检索沸点是特定沸点的溶剂，且这个化合物不包含-COOH 和金属？

A16：按如下步骤进行：

- 选择 Substances，点击 Add Advanced Search Field
- 点击 Select，在展示字段中点击 Thermal，然后点击 Boiling Point
- 在输入框中输入沸点范围或者确定的值（输入格式可为：500 to 600， > 500, 或 550 这类格式）；进行检索，得到物质结果集。
- 在物质结果集页面左侧点击 Exclude
- 点击 Metals: containing metals；排除含有金属原子的物质
- 点击 Search within Results，打开结构编辑器，在结构编辑器中输入 CO2H， 上传后进行检索，得到不含-CO2H 的物质，如下所示：


CAS SciFinder
Saved
History
Account
CAS Analytical Methods® is available as part of your CAS SciFinder experience. Identify and compare the latest published analytical methods, featuring step-by-step instructions, in pharmacology, HPLC, food analysis, natural product isolation analysis, water analysis and more.
Searching for...
All
Substances
Reactions
References
Suppliers
Biosequences
Retrosynthesis
Substances
Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. Learn More
Enter a query...
Draw
Boiling Point (°C)
500 to 600
Include predicted values.
Examples: 1.15 | <7.53 | >150 | 9.3 to 15 | 8.9e-2
Add Advanced Search Field
Learn more about SciFinder Advanced Search.


CAS SciFinder
Substances
Edit Search
Enter a query...
Draw
Save
Filter by
Exclude
References
Reactions
Suppliers
Excluding:
Metals: Containing Metals
Search Within Results: Drawn Structure
Clear All Filters
Commercial Availability
Reaction Role
Reference Role
Stereochemistry
Number of Components
Substance Class
Isotopes
Metals
Containing Metals (14)
Not Containing Metals (425)
Molecular Weight
Experimental Property
Experimental Spectrum
Regulatory Data by Country
Regulatory Data by List
Bioactivity Indicator
Target Indicator
Search Within Results
Search for up to 3 structures within the result set.
Draw
Search
Searching for...
Clear All
Remove and Edit
1
1332456-96-8
C10H10N2O3S.H2O4S
Components: 2
Benzenesulfonic acid, 4-(1H-imidazol-1-ylmethyl)-, sulfate (1:1)
2 References
6 Reactions
0 Suppliers
2
1328886-83-4
C26H32N4O6S2.2HO4S
Components: 2
1H-Imidazolium, 1,1'-(1,6-hexanediyl)bis[3-[(4-sulfophenyl)methyl]-, sulfate (1:...
2 References
10 Reactions
0 Suppliers
3
1328886-81-2
C17H17N2O6S2.HO4S
Components: 2
1H-Imidazolium, 1,3-bis[(4-sulfophenyl)methyl]-, sulfate (1:1)
3 References
10 Reactions
0 Suppliers
4
1270127-82-6
C14H18N6O3
1-[4-[(1-Methyl-5-nitro-1H-imidazol-2-yl)methoxy]-2-pyridinyl]piperazine
1 Reference
5 Reactions
1 Supplier
5
1268157-06-7
Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)
C16H20N2O
4-[[(1S)-1-Methylheptyl]oxy]-1,2-benzenedicarbonitrile
1 Reference
3 Reactions
1 Supplier
6
1244062-16-5
C24H31F17
1,1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8-Heptadecafluoro-9-tetracosene
1 Reference
0 Reactions
2 Suppliers
7
8
9

Q17：如何获取物质的旋光度？

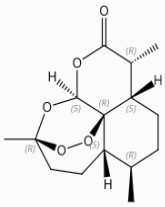
A17：（1）若已知物质名称、CAS 登记号或结构式等，通过物质检索获取到物质信息后，在物质详情页面 Experimental Properties: Optical and Scattering，获取 optical rotatory power 旋光度信息。

Substance Detail (1 of 1)

← Prev Next →

References (7,730) | Reactions (2,949) | Suppliers (96) | Save

CAS Registry Number
63968-64-9



Absolute stereochemistry shown

$C_{15}H_{22}O_5$

3,12-Epoxy-12*H*-pyrano[4,3-*j*]-1,2-benzodioxepin-10(3*H*)-one, octahydro-3,6,9-trimethyl-, (3*R*,5a*S*,6*R*,8a*S*,9*R*,12*S*,12a*R*)- (9CI, ACI)

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	282.33	-
Melting Point (Experimental)	156-157 °C	-
Boiling Point (Predicted)	389.9±42.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Experimental)	1.300 g/cm^3	-

Experimental Properties | Spectra

Other Names and Identifiers

Experimental Properties

Biological | Chemical | Density | Flow and Diffusion | Lipinski | Optical and Scattering | Structure Related | Thermal

Property	Value	Condition	Source
Optical Rotatory Power	+87.9 deg	Solvent: 1,4-Dioxane; λ: 589.3 nm	(1) CAS
Optical Rotatory Power	+75-+78 deg	c: 1.0 g/100mL; Solvent: Ethanol; λ: 589.3 nm; Temp: 20 °C	(2) CAS
Optical Rotatory Power	+68.2 deg	c: 0.97 g/100mL; Solvent: Chloroform; Temp: 25 °C	(3) IC
Optical Rotatory Power	+67.6 deg	c: 1.75 g/100mL; Solvent: Chloroform; λ: 589.3 nm; Temp: 25 °C	(4) CAS
Optical Rotatory Power	+66.6 deg	c: 1.57 g/100mL; Solvent: Chloroform; λ: 589.3 nm; Temp: 24 °C	(4) CAS
Optical Rotatory Power	+66.3 deg	c: 1.64 g/100mL; Solvent: Chloroform; λ: 589.3 nm; Temp: 17 °C	(5) APC
Optical Rotatory Power	+61 deg	c: 0.2 g/100mL; Solvent: Chloroform; λ: 589.3 nm; Temp: 24 °C; Pathlength: 1 dm	(6) CAS

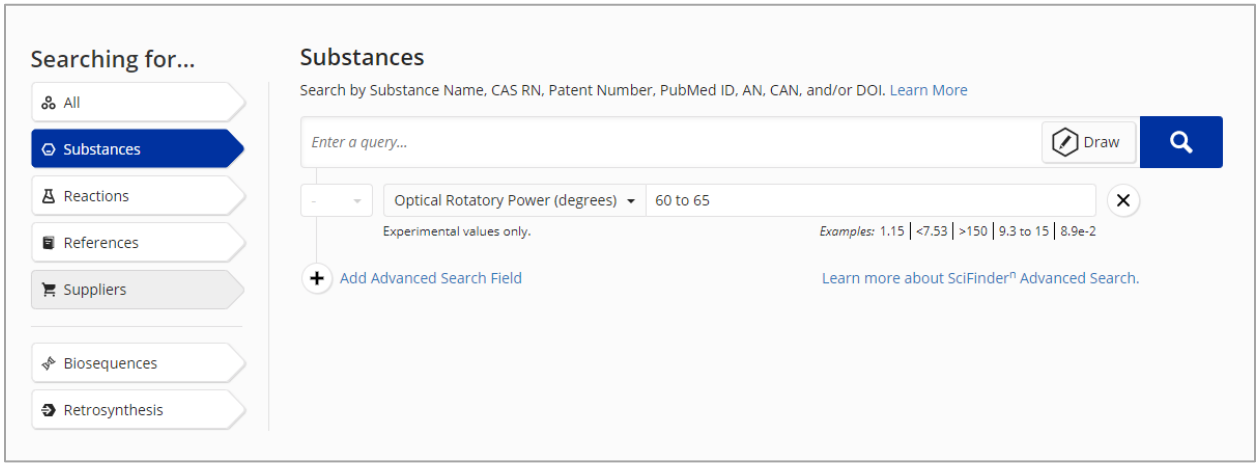
Sources

(1) Yadav, J. S.; Tetrahedron Letters, (2003), 44(2), 387-389, CAplus

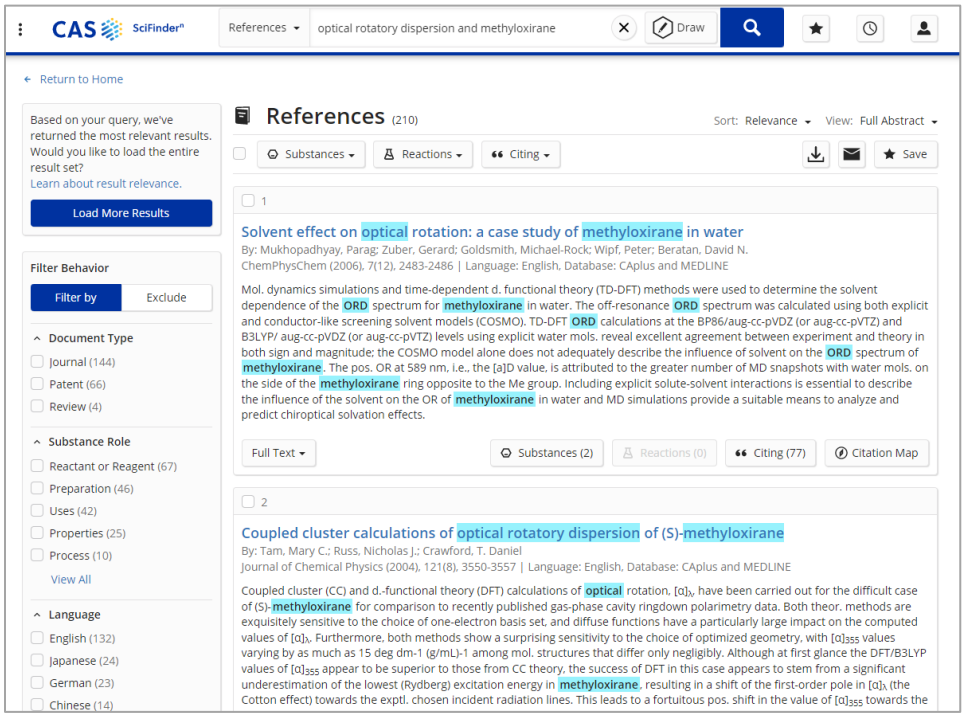
(2) Lapkin, Alexei A.; Journal of Natural Products, (2006), 69(11), 1653-1664, CAplus

(3) Ye, Bin; Journal of the Chemical Society, Chemical Communications, (1990)(10), 726-7, CAplus

（2）如果不知道物质结构或名称等信息，可以根据旋光度值来检索物质。点击 Substances: 再点击 Advanced Search Field，选择 Optical and Scattering：Optical Rotatory Power (degrees)，输入旋光度值（定值或者范围值都可以）。



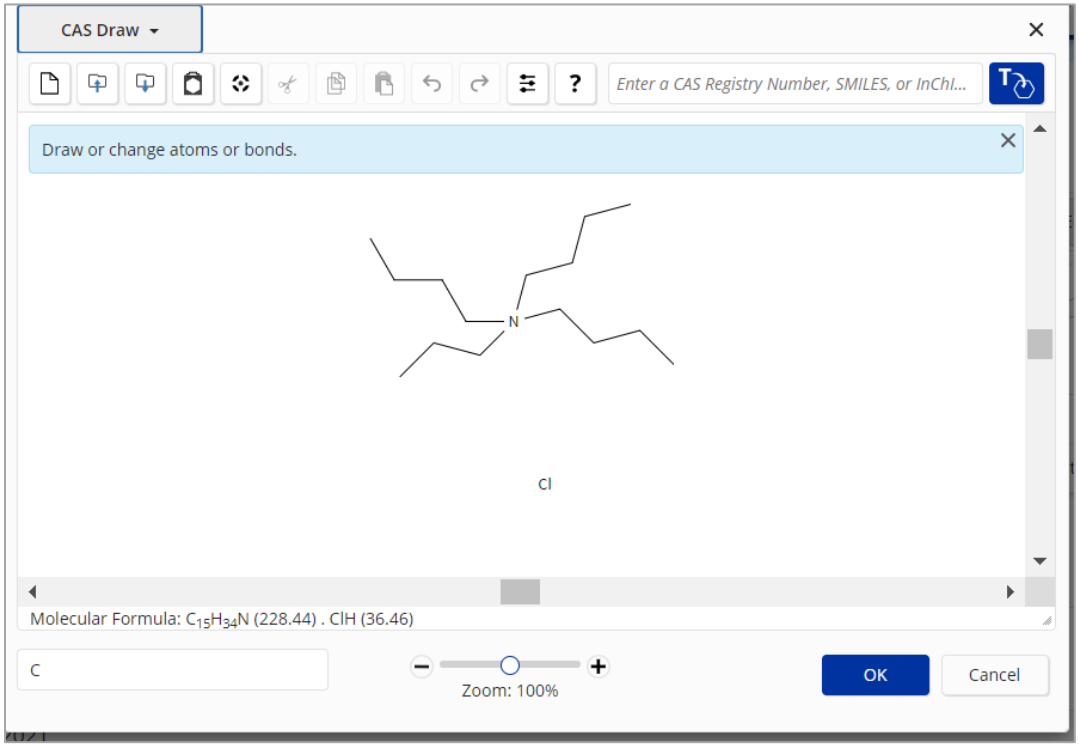
(3) 如果物质详情中没有提供旋光度值信息，可通过输入主题词（如：optical rotatory dispersion and methyloxirane），获取特定物质的旋光度研究文献。



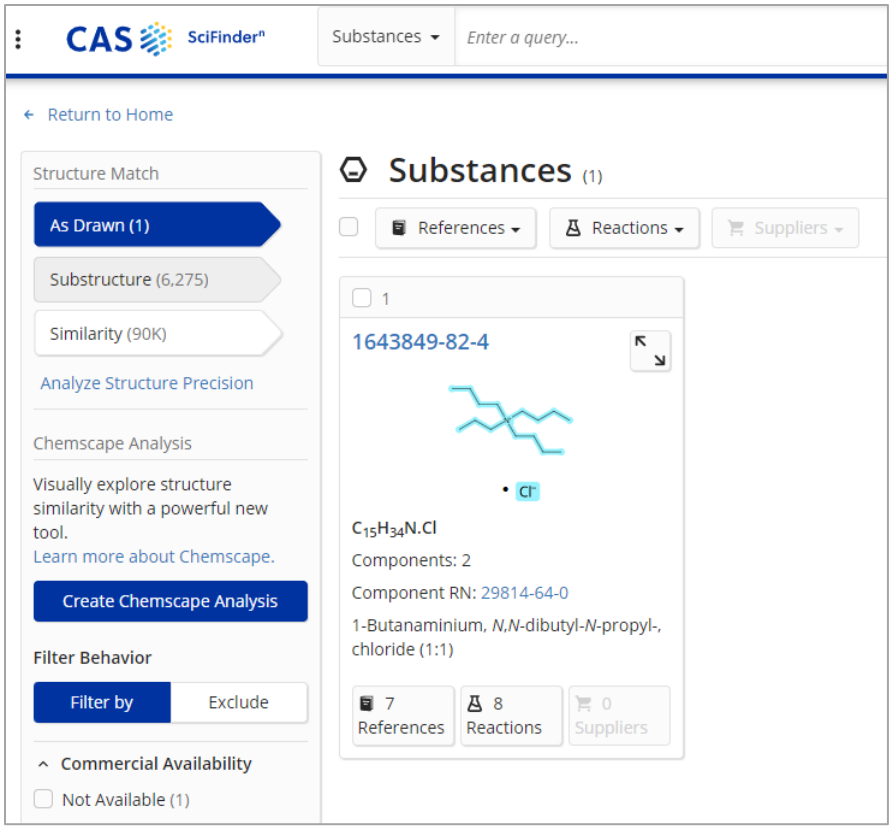
Q18：如何检索有机盐?

A18：通过以下两种方式获取：

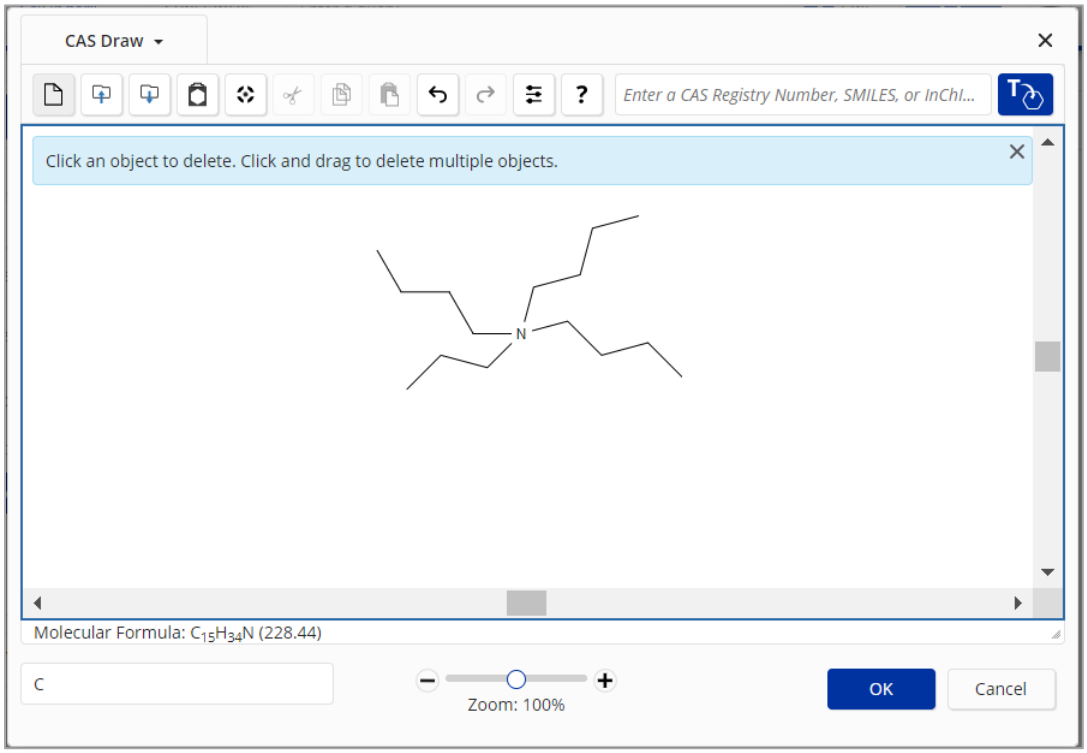
（1） 两个组分同时画出来，不用任何键连接



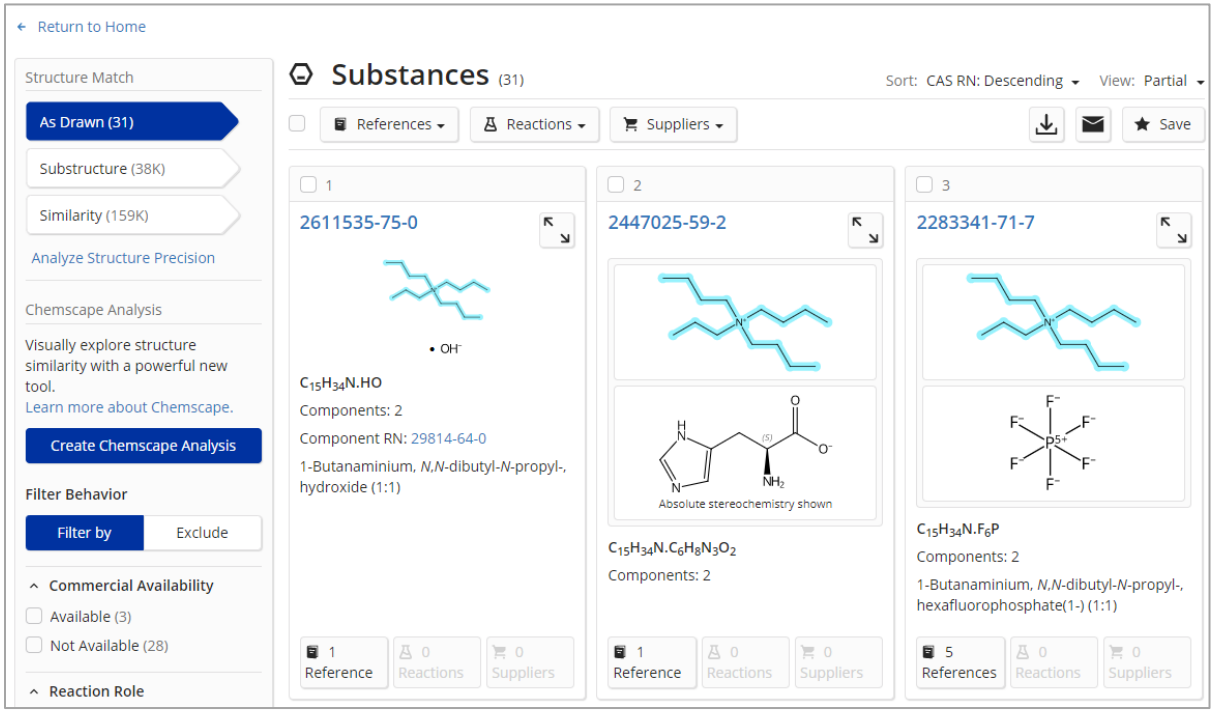
获得所需结果



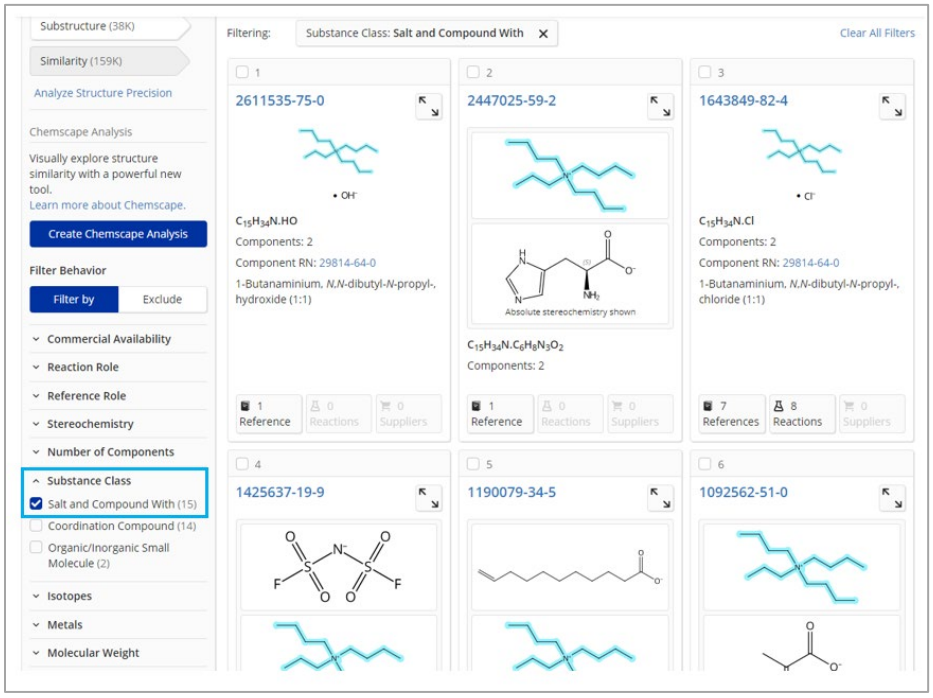
(2)绘制其中一个组分的结构



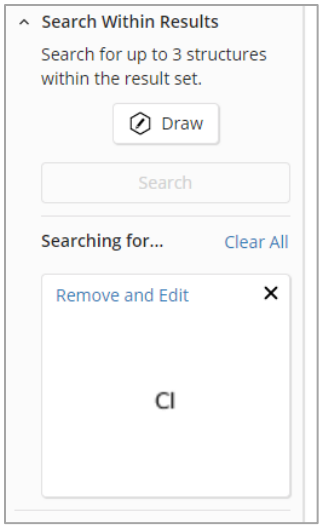
获得结果集



在结果集中可以用物质类别筛选出盐

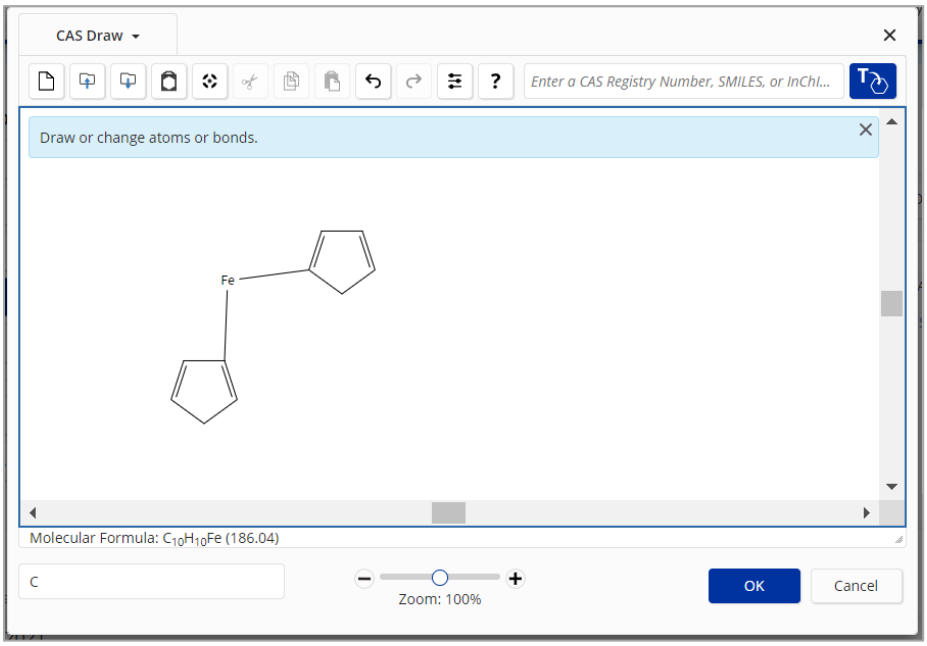


也可以在 search within results 中，通过结构筛选另一组分

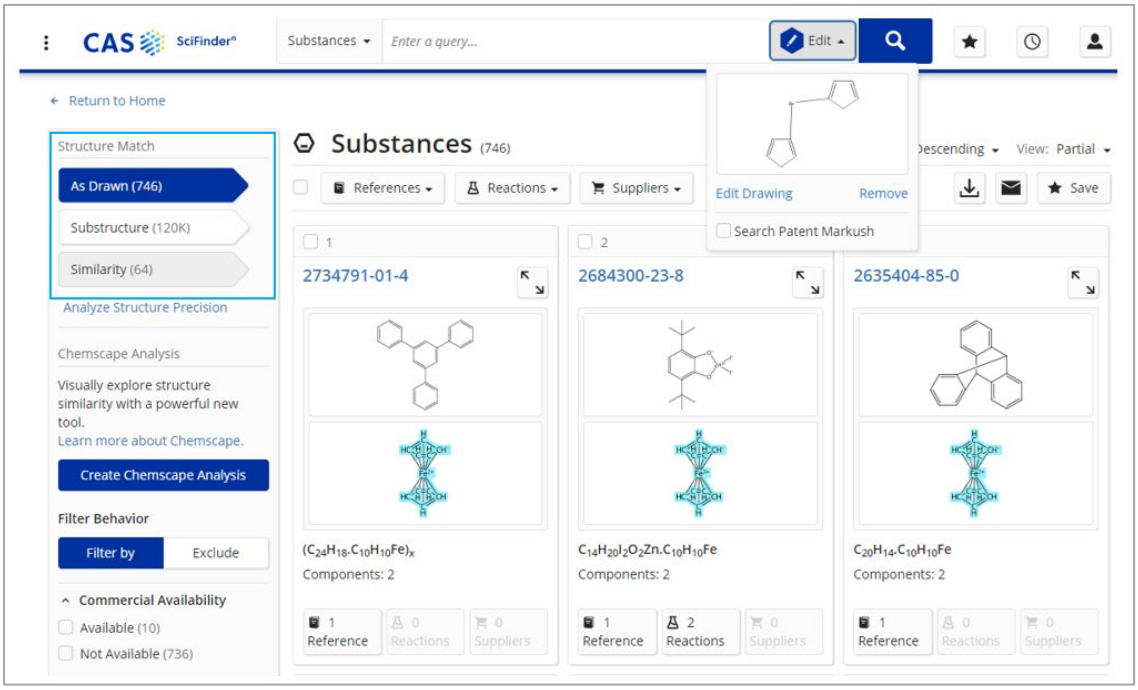


Q19：如何绘制二茂铁类金属有机化合物?

A19：使用单键，或者不确定键，连接金属原子和配体，点击 OK。



根据需求选择锁环锁原子检索结果（As Drawn）;亚结构检索结果（Substructure）或者相似结构检索结果（Similarity）。



根据组分数，物质类别，是否包含同位素等筛选选项，获得结果。

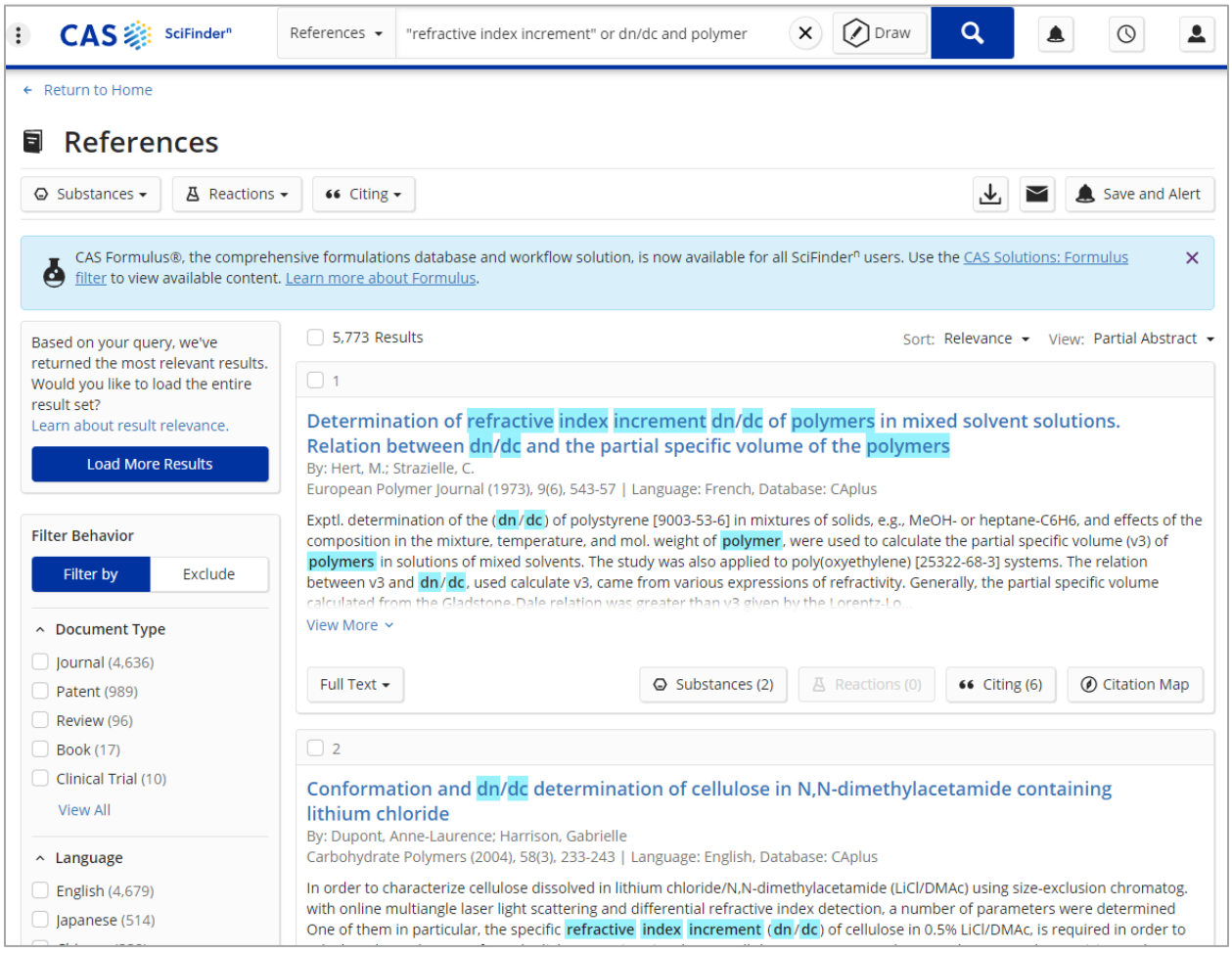
Q20：聚合物属性 dn/dc 怎么获取?

A20：属性值的获取有以下几个操作选项供选择。

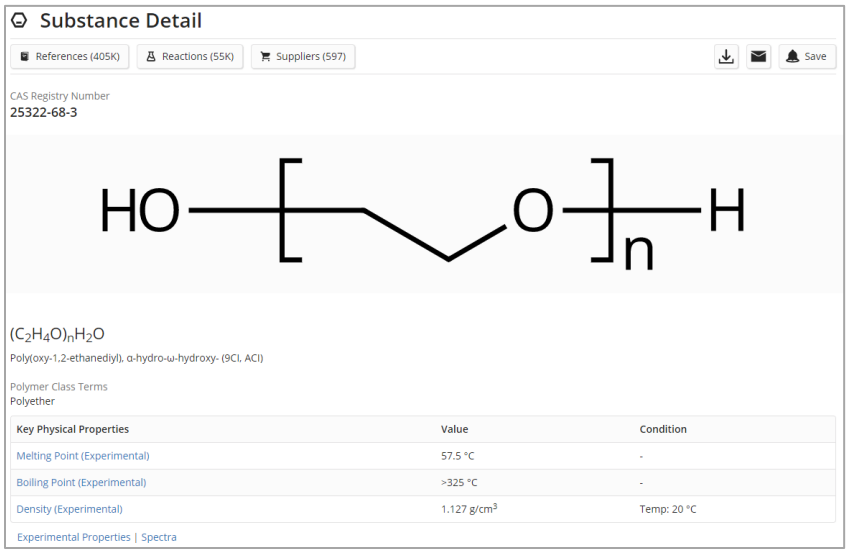
（1） 若需要通过属性值来获取物质，则可在 CAS SciFinder^n 主页面点击 Substances，然后在 Advanced Search Filed 选择对应的属性值选项输入值即可进行检索，获取相应的物质；

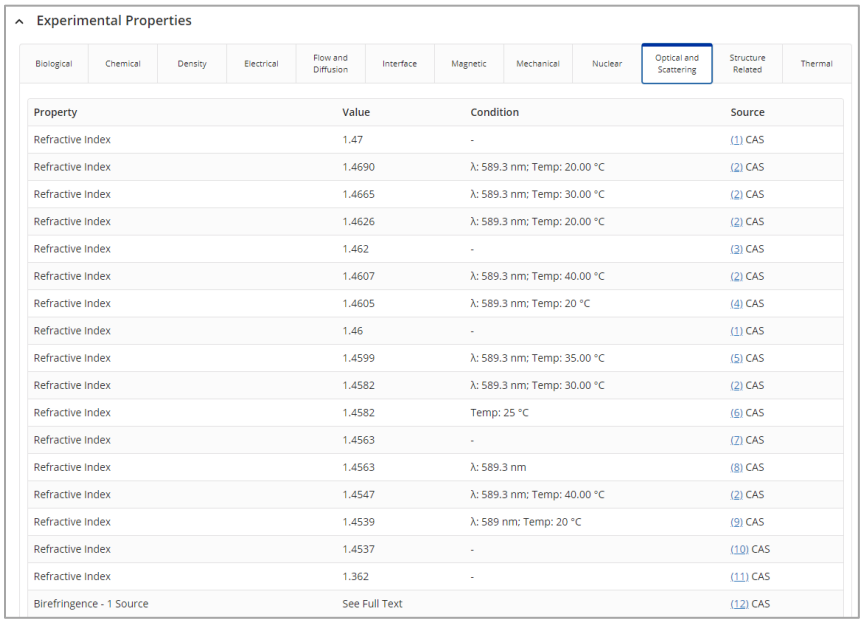
（2）若需查询某个特定物质的属性值，则可以先通过 Substances 检索获取到该物质，再点击其 CAS 登记号打开 Substance Detail 页面，在 Substance Detail 可查看该物质的各种属性值；

（3）若通过方法（1）或（2）无法获取到期望的属性值，则可通过 References 获取文献来实现。如，获取聚合物的 dn/dc 值，推荐在 References 输入框中输入"refractive index increment" or dn/dc and polymer，获取聚合物 dn/dc 研究文献。

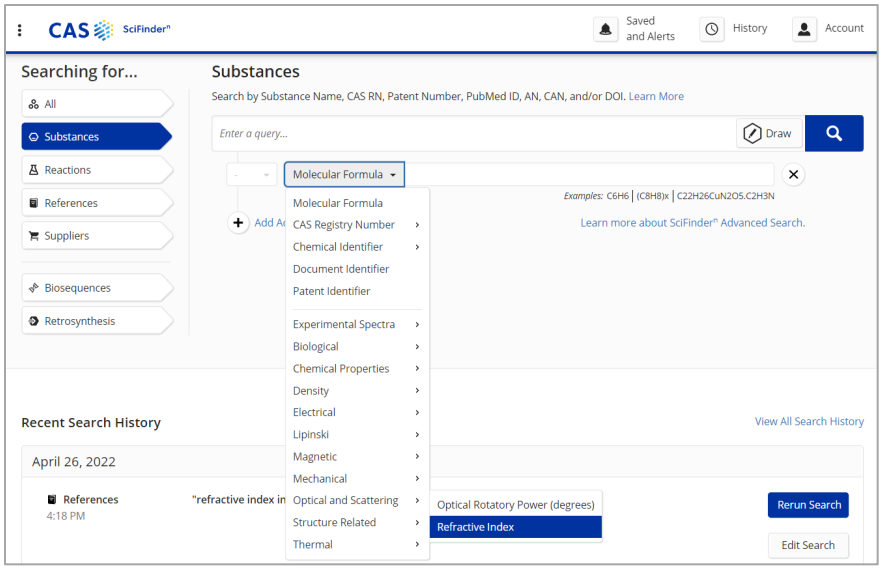


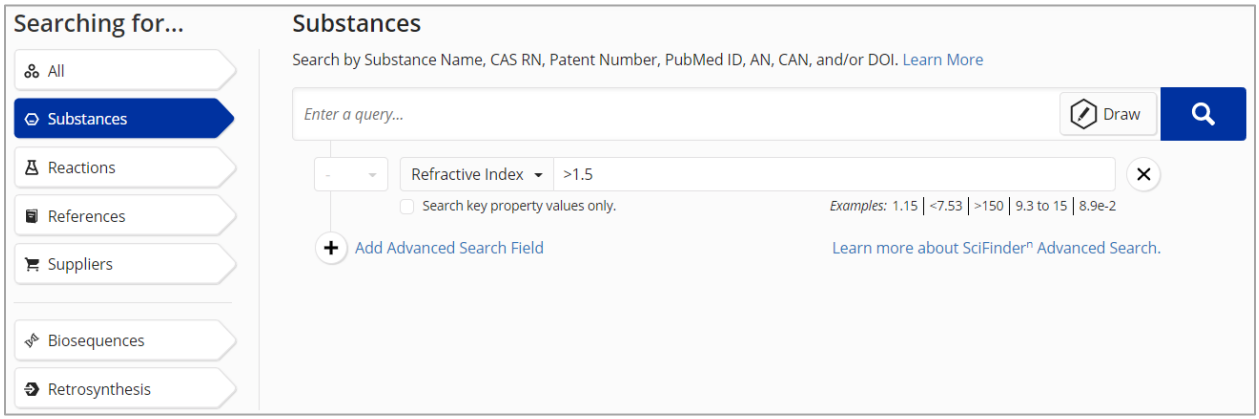
此外，与 dn/dc 值相关的 refractive index 值可以点击某聚合物 CAS 登记号，查看物质详情获取。

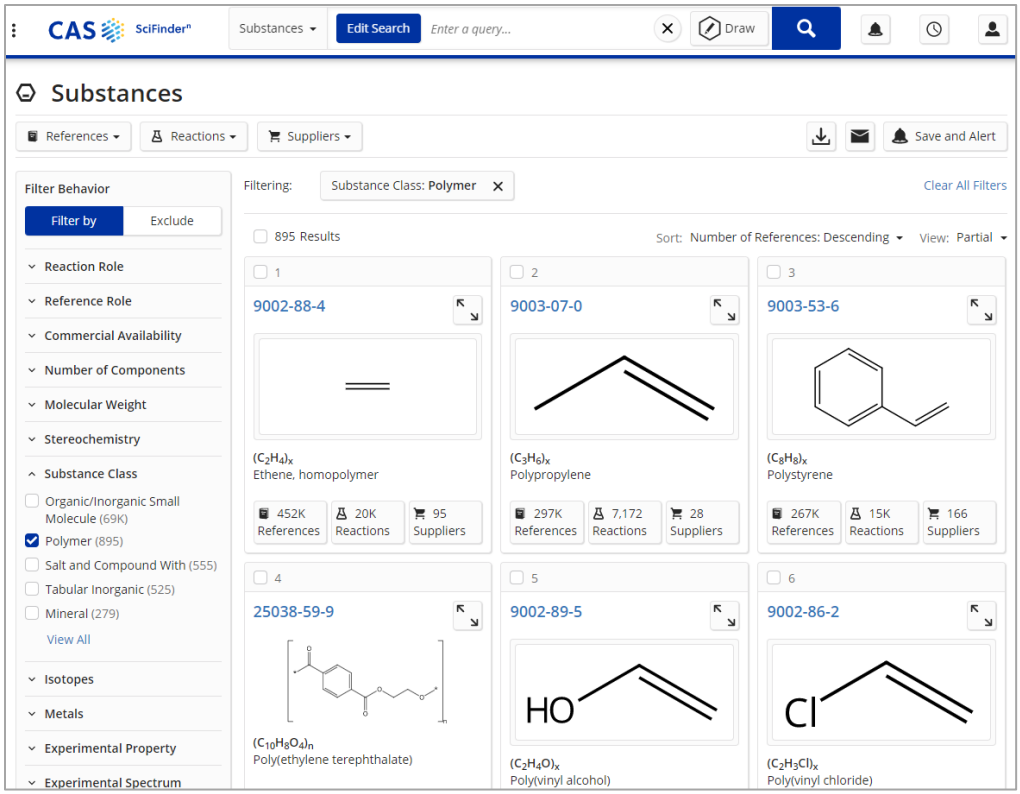




也可以在物质高级检索项中，通过 refractive index 值来检索聚合物。

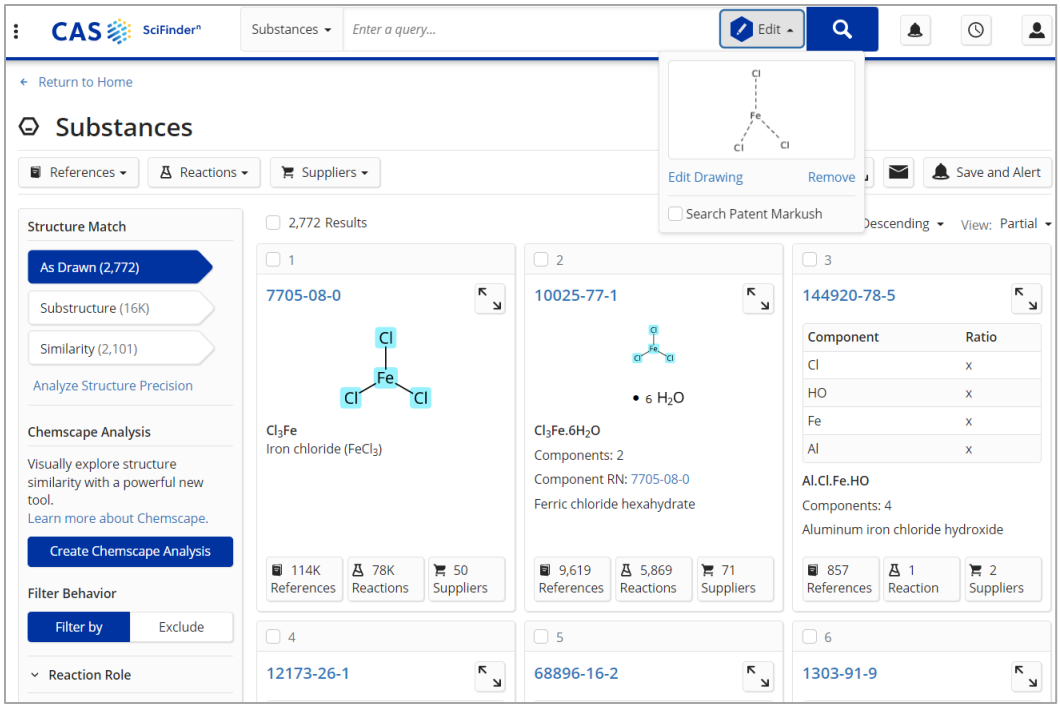

CAS SciFinder
Saved and Alerts
History
Account
Searching for...
All
Substances
Reactions
References
Suppliers
Biosequences
Retrosynthesis
Substances
Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. Learn More
Enter a query...
Draw
Molecular Formula
Examples: C6H6 | (C8H8)x | C22H26CuN2O5.C2H3N
Learn more about SciFinder Advanced Search.
Molecular Formula
CAS Registry Number
Chemical Identifier
Document Identifier
Patent Identifier
Experimental Spectra
Biological
Chemical Properties
Density
Electrical
Lipinski
Magnetic
Mechanical
Optical and Scattering
Structure Related
Thermal
Optical Rotatory Power (degrees)
Refractive Index
Recent Search History
View All Search History
April 26, 2022
References
4:18 PM
"refractive index in
Rerun Search
Edit Search

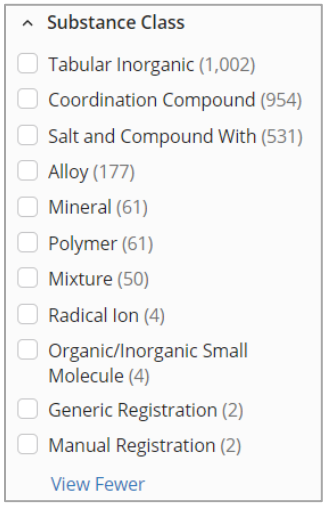

Searching for...
All
Substances
Reactions
References
Suppliers
Biosequences
Retrosynthesis
Substances
Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. Learn More
Enter a query...
Draw
Refractive Index
>1.5
Search key property values only.
Examples: 1.15 | <7.53 | >150 | 9.3 to 15 | 8.9e-2
Add Advanced Search Field
Learn more about SciFinder Advanced Search.

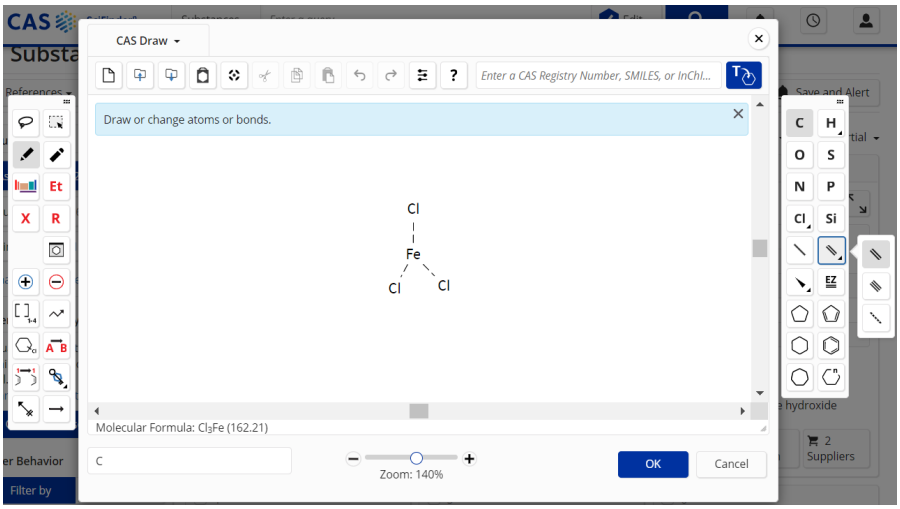


Q21：三氯化铁结构式怎么画?

A21：在绘制三氯化铁结构式时，如果不清楚其键型，则可使用 CAS Draw 面板右侧虚线键来绘制 Fe---Cl 键。然后在物质结果中，可通过 Substance Class 浏览相关结构的分子类型。

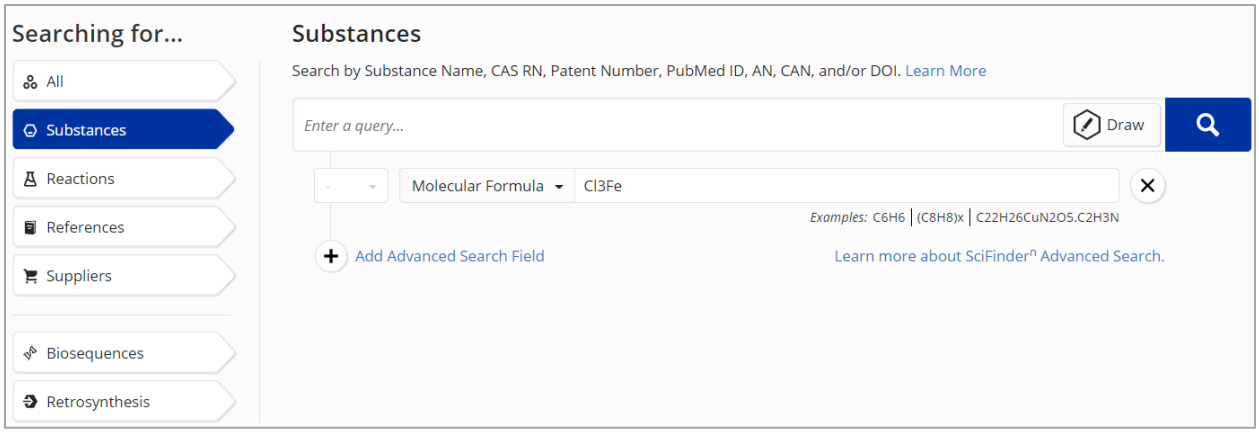


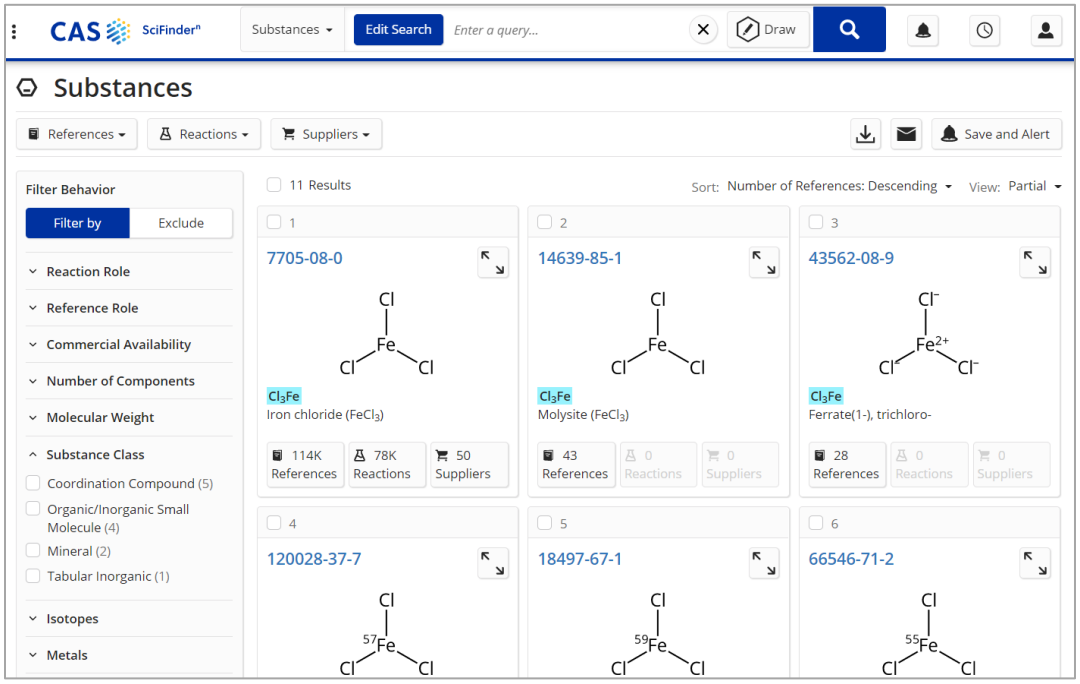




结构检索可以获得三个精准度的结果（As Drawn, Substructure, Similarity）。

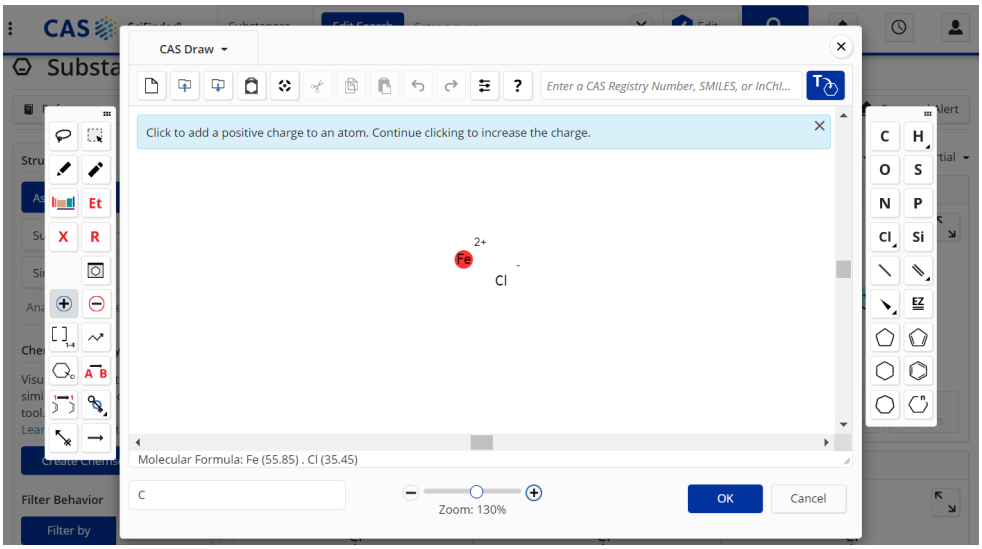
如果分子组成已经确定，也可以使用分子式检索三氯化铁，快速获取结果。





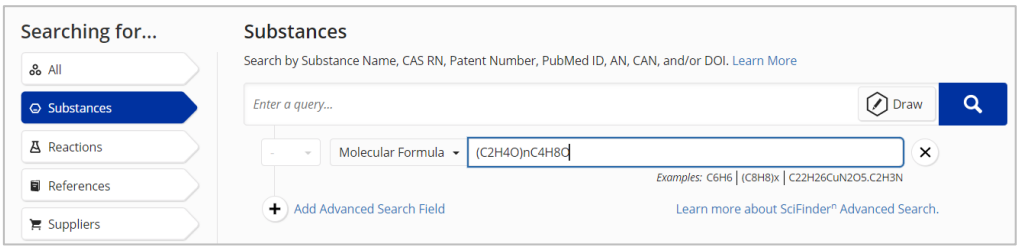
Q22：在绘制结构时，如何输入电荷？

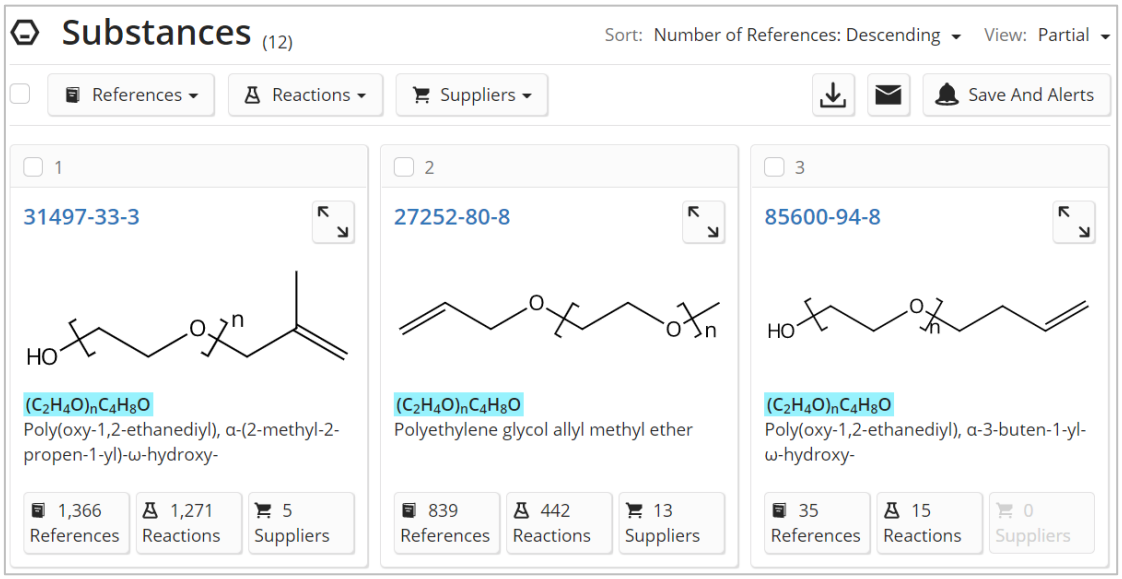
A22：在 CAS Draw 面板中，使用左侧正负电荷工具  ，点击对应原子进行电荷标注。点击一下，即会在原子上标注一个正/负电荷，多次点击则会标注多个电荷。



Q23：如何检索一个物质的同分异构体?

A23：在 CAS SciFinder^n 主页面点击 Substances，在 Advanced Search Field：Molecular Formula 输入框中输入此物质的分子式，就可以检索到此物质的各种同分异构体。例如：(C2H4O)nC4H8O。



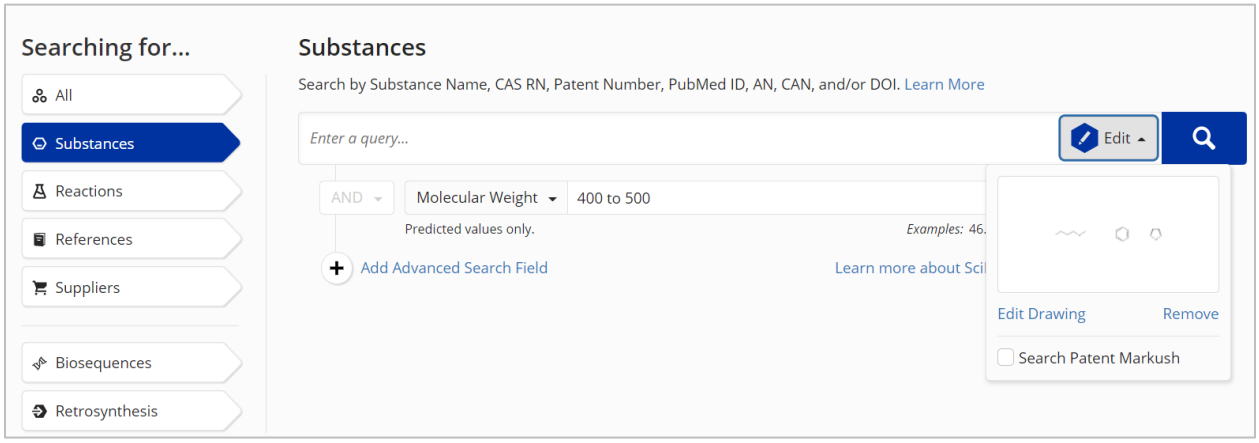


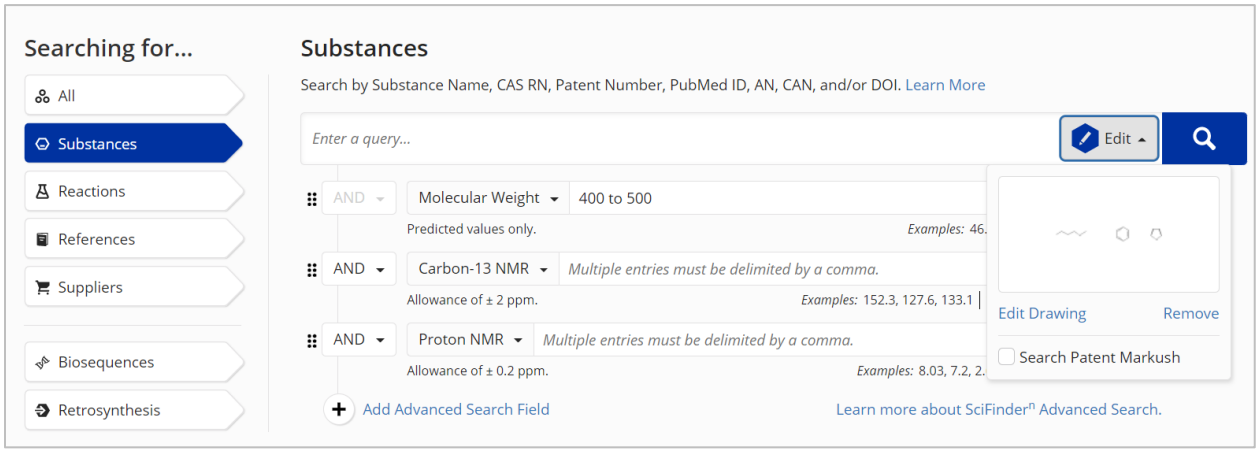
Q24：反应物已知，产物的一级质谱图和二级质谱图已知，如何猜测产物的可能结构呢？

A24：推荐思路和检索步骤：

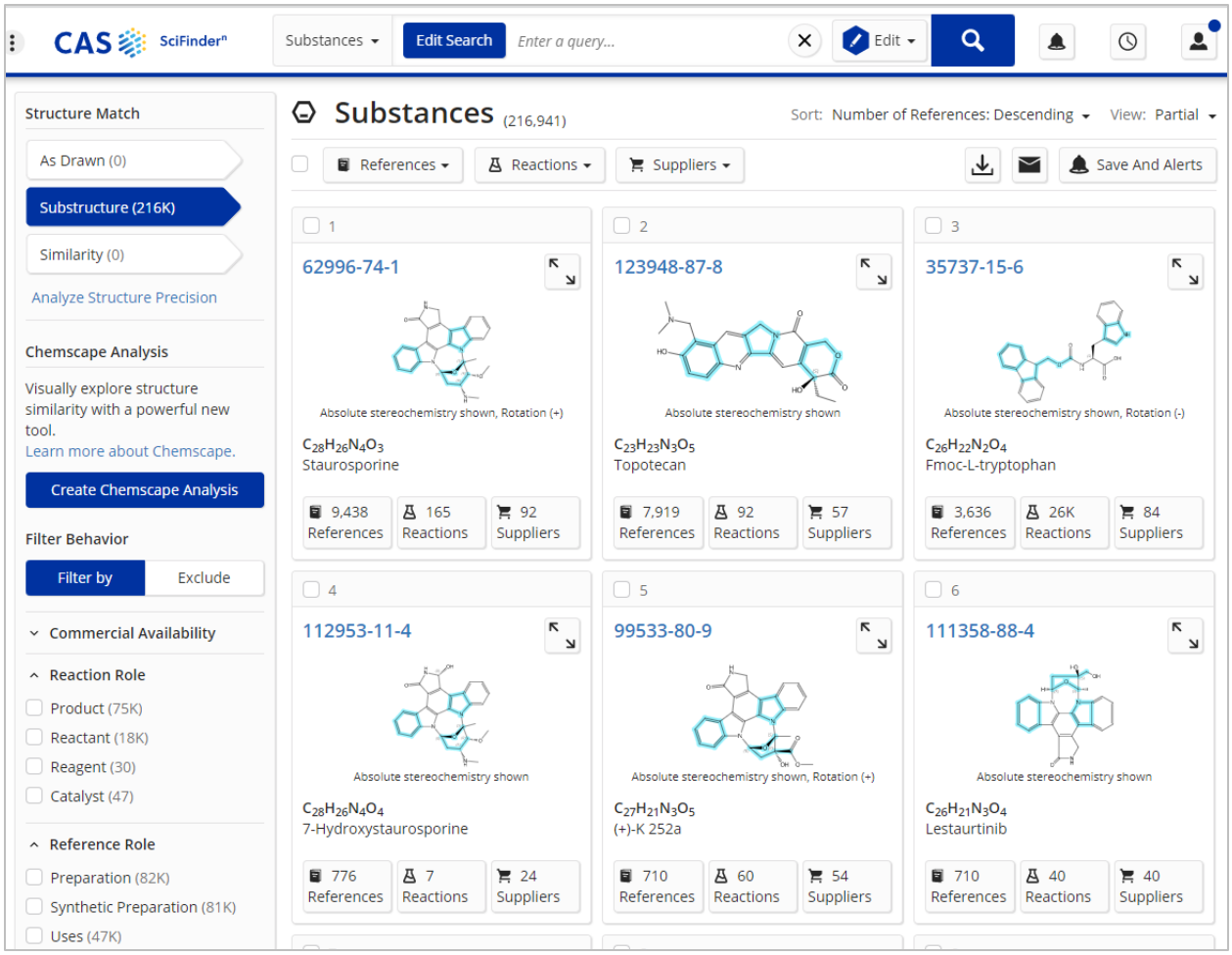
（1）根据一级质谱和二级质谱信息可以分析出产物的分子量范围和部分结构碎片，再结合反应物的结构进一步确认产物可能的结构碎片。

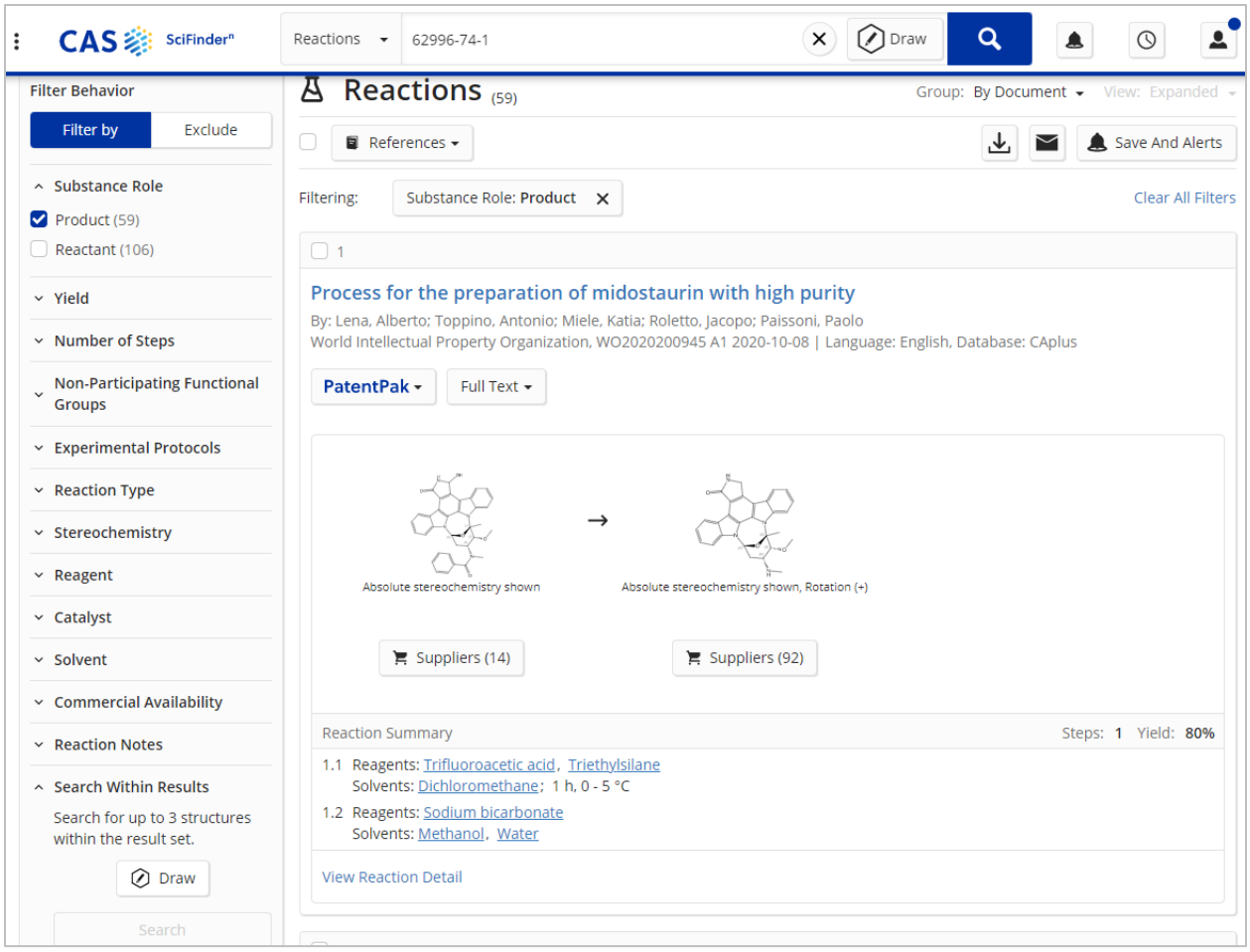
（2）然后基于这两部分信息在在 CAS SciFindern 中联合分子量和片段结构检索，获得相关的物质信息。如果还知道核磁数据，可以一并联用检索。





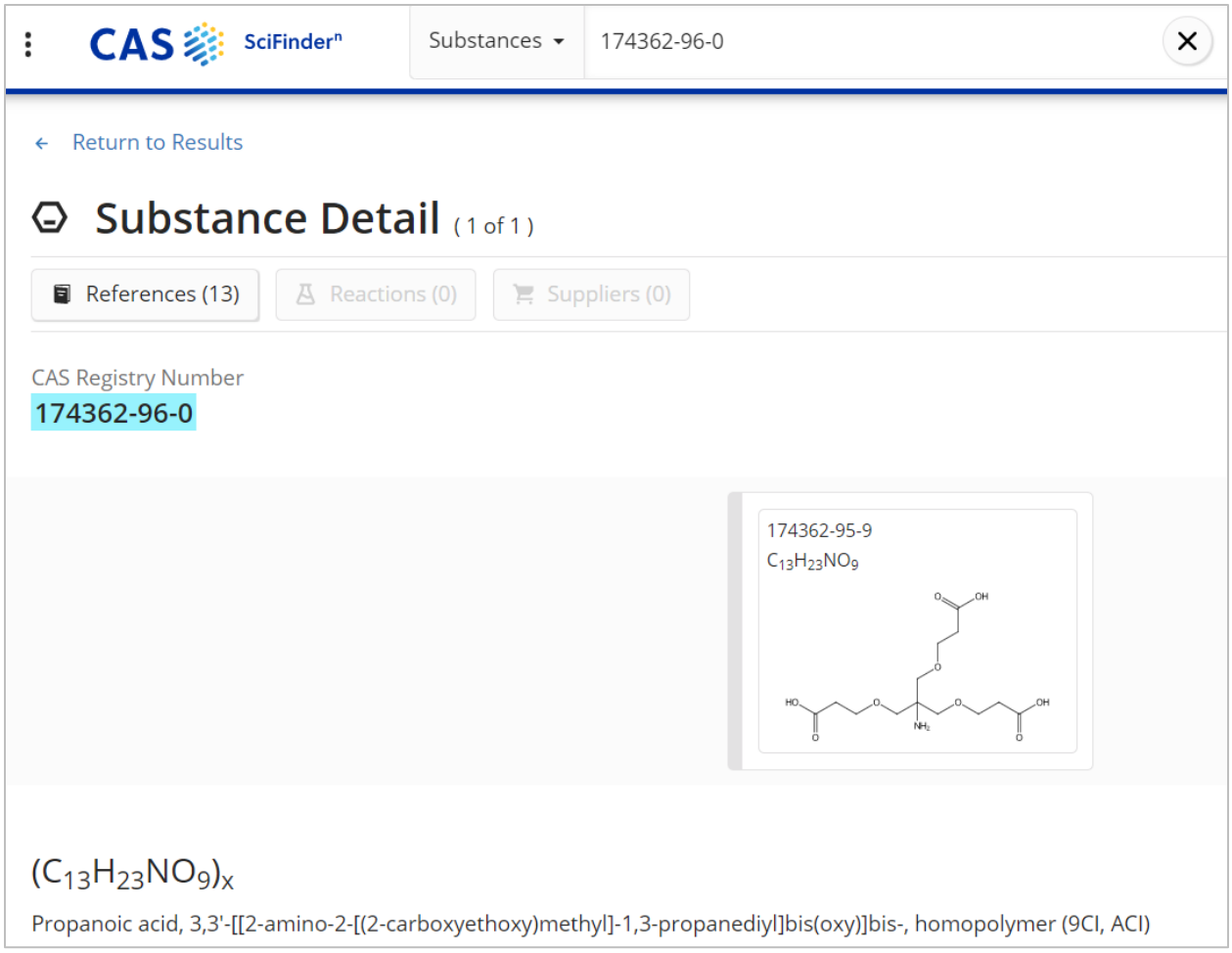
（3）获得相关的物质结果后，可根据结果集页面左侧 Reaction Role、Reference Role 限定物质在反应和文献中的角色。如果要获取反应信息，可点击物质下方 Reactions 或页眉上方的 Reactions。根据需要，在反应结果集页面，通过左侧 Search Within Results 限定原料的结构。


CAS SciFinder
Substances
Edit Search
Enter a query...
Edit
Structure Match
As Drawn (0)
Substructure (216K)
Similarity (0)
Analyze Structure Precision
Chemscape Analysis
Visually explore structure similarity with a powerful new tool.
Learn more about Chemscape.
Create Chemscape Analysis
Filter Behavior
Filter by
Exclude
Commercial Availability
Reaction Role
Product (75K)
Reactant (18K)
Reagent (30)
Catalyst (47)
Reference Role
Preparation (82K)
Synthetic Preparation (81K)
Uses (47K)
Substances (216,941)
Sort: Number of References: Descending
View: Partial
References
Reactions
Suppliers
Save And Alerts
1
62996-74-1
Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)
C28H26N4O3
Staurosporine
9,438 References
165 Reactions
92 Suppliers
2
123948-87-8
Absolute stereochemistry shown
C23H23N3O5
Topotecan
7,919 References
92 Reactions
57 Suppliers
3
35737-15-6
Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)
C26H22N2O4
Fmoc-L-tryptophan
3,636 References
26K Reactions
84 Suppliers
4
112953-11-4
Absolute stereochemistry shown
C28H26N4O4
7-Hydroxystaurosporine
776 References
7 Reactions
24 Suppliers
5
99533-80-9
Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)
C27H21N3O5
(+)-K 252a
710 References
60 Reactions
54 Suppliers
6
111358-88-4
Absolute stereochemistry shown
C26H21N3O4
Lestaurtinib
710 References
40 Reactions
40 Suppliers



Q25：CAS RN 174362-96-0 结果详情的显示中为什么有两个 CAS RN?

A25：如截图所示：CAS RN 174362-96-0 是均聚物的 CAS 登记号，而 CAS RN 174362-95-9 是聚合物单体的 CAS 登记号。

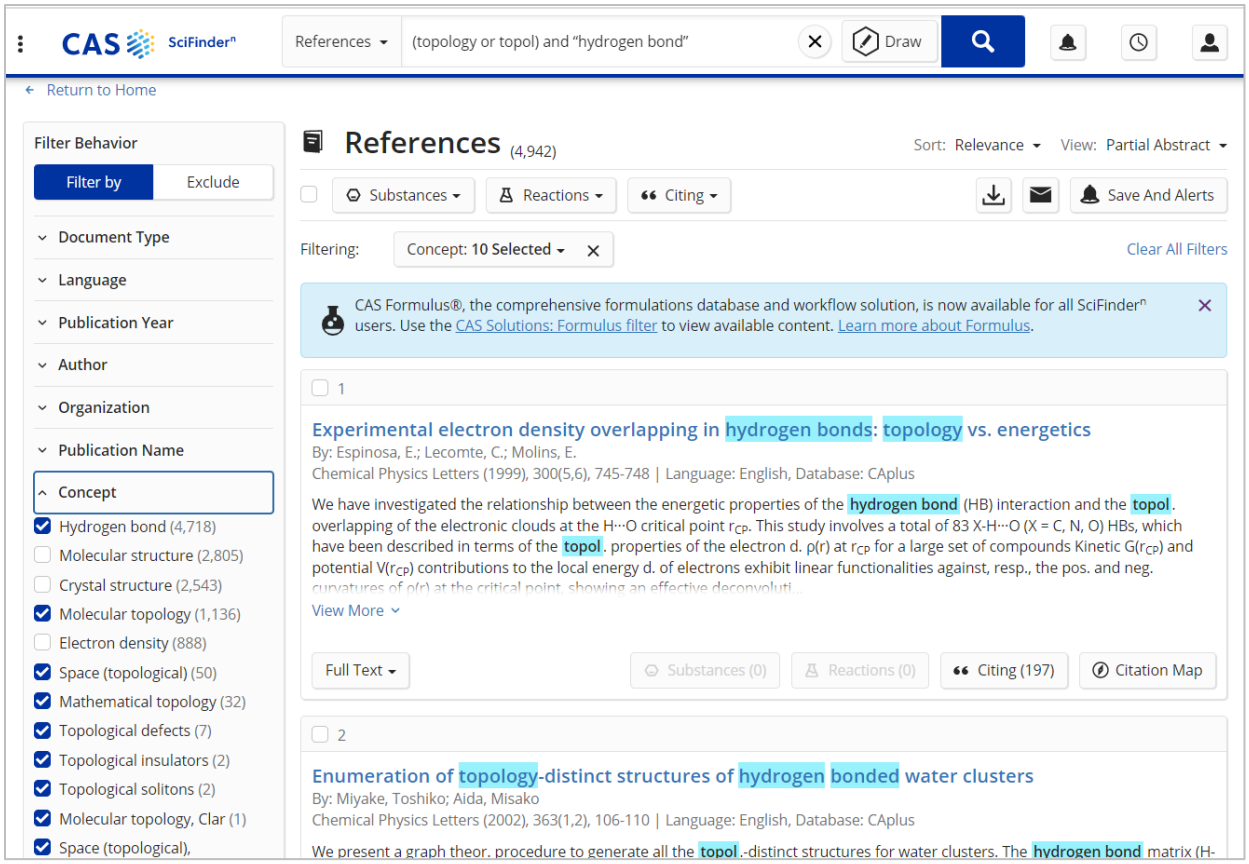


Q26：如何检索具有拓扑结构的可形成氢键的物质？

A26：可以从结构和关键词两方面进行检索。

（1）如果有具体的母核结构，在结构绘制时，可根据氢键形成的原理，加入 N-H, O-H, S-H, O=, N=等元素进行物质结构检索；得到物质结果后，再通过物质结果获取文献；在文献结果集页面，通过左侧 Filter by: Search Within Results 输入 topol 或 hydrogen bond 来精炼文献结果。

（2）如果没有特定的结构信息，则推荐通过关键词直接检索相关的研究文献，例如：(topology or topol) and “hydrogen bond” ，在文献结果集页面左侧通过 Filter by: Concept，限定感兴趣的核心研究点，例如，通过 hydrogen bond, molecular topology 等精炼相关文献。



Q27：CAS 在标引聚合物时，会关注聚合物的哪些信息？

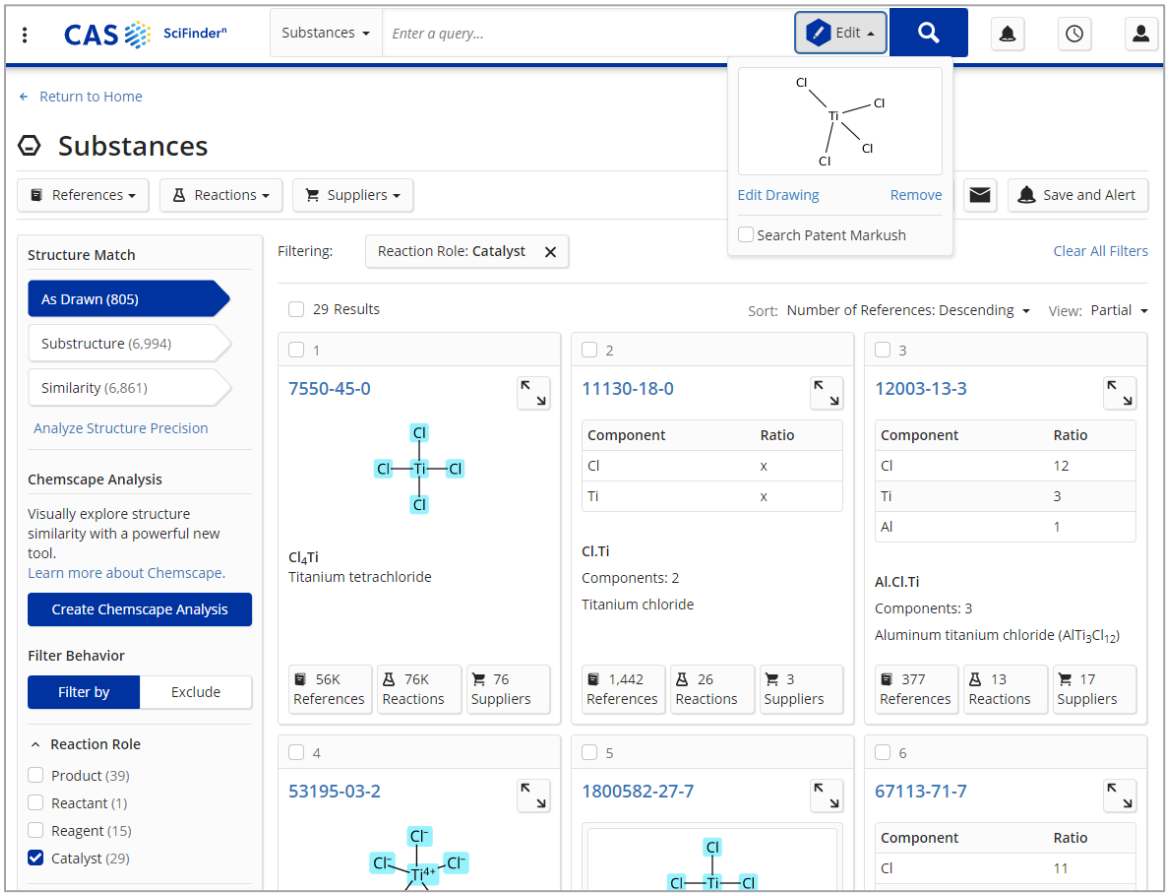
A27：CAS 科学家标引聚合物时，会关注聚合物的结构式、分子式、名称、制备、用途、工艺等信息。

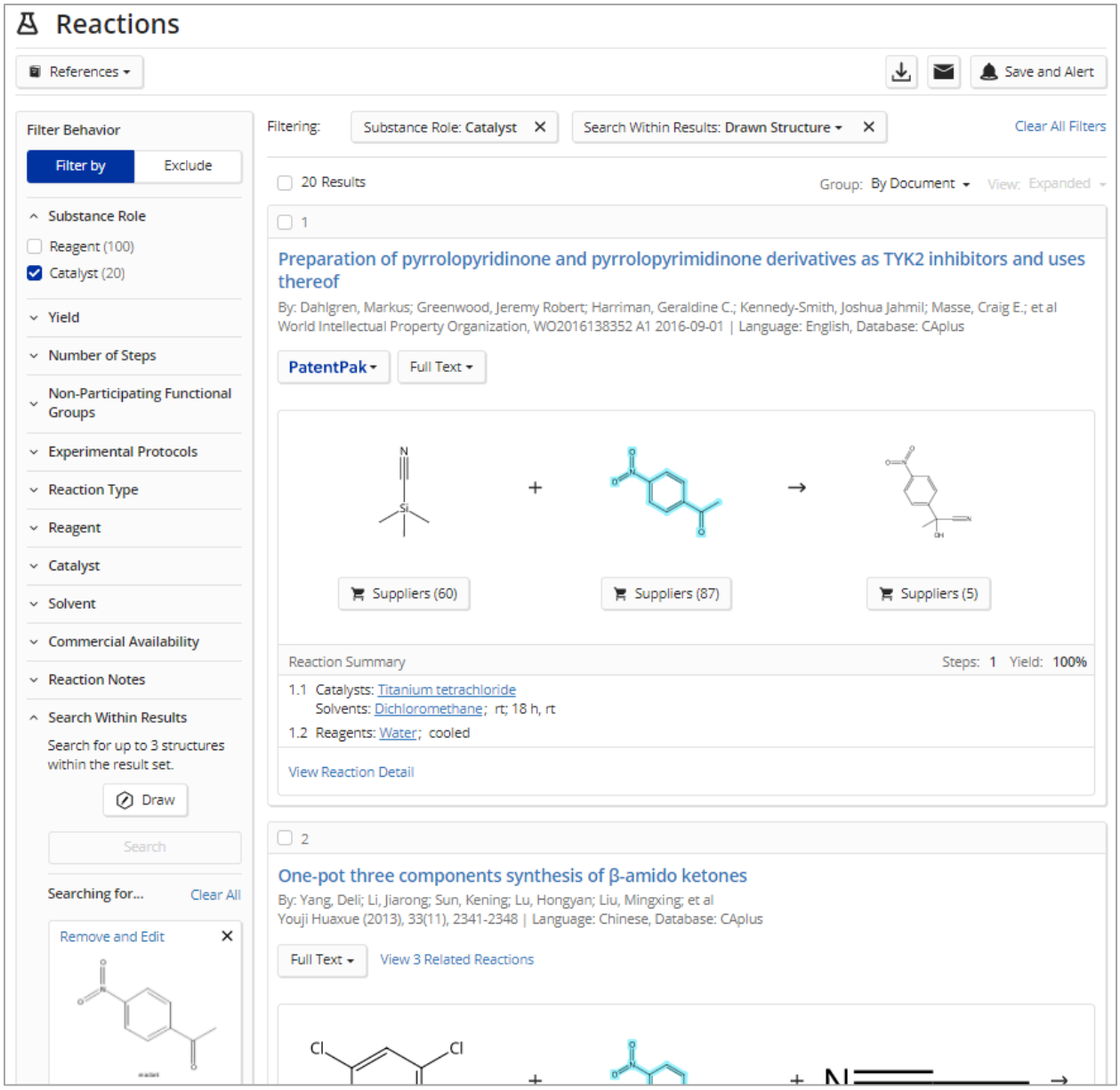
Q28：检索反应时，一个是催化剂结构，一个是反应物结构，怎么通过角色定义来检索这样的反应？

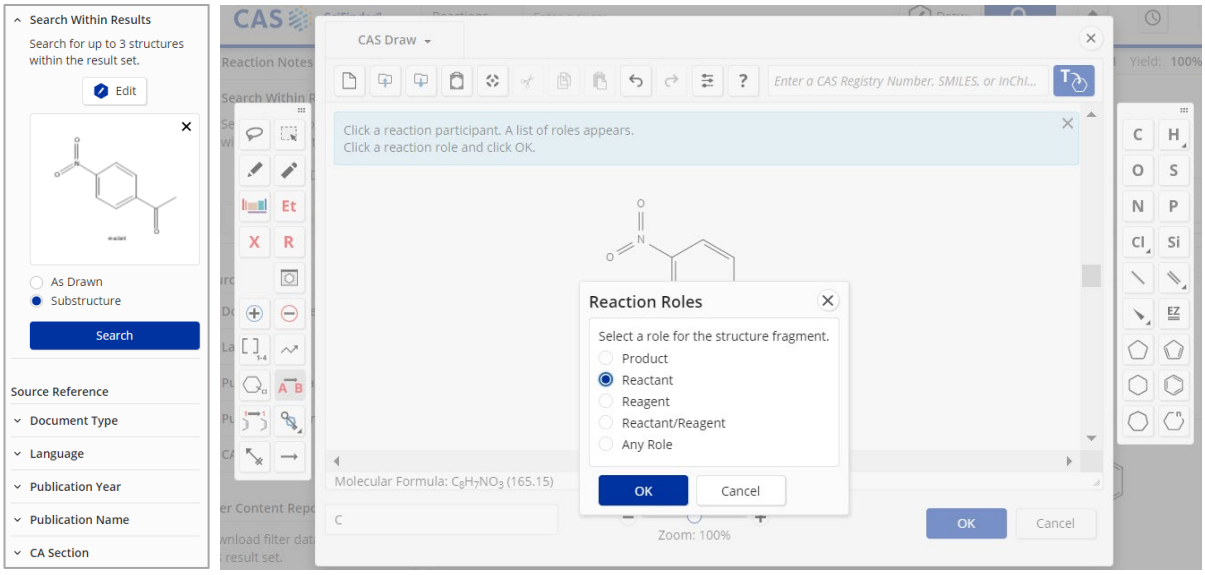
A28：推荐以下操作方法：

（1）先选择 Substances，检索催化剂。在获得的物质结果集页面，通过左侧 Filter by:Reaction Role, 将物质限定为在反应中的角色为 catalyst;

（2）点击物质结果集页面左上方的 Reactions，获得步骤（1）中物质作为催化剂参与的反应结果集，在反应结果集页面左侧点击 Search within results，在结构编辑器中绘制结构，使用反应角色定义工具将其限定为原料（reactant）。




Reactions
References
Save and Alert
Filter Behavior
Filter by
Exclude
Substance Role
Reagent (100)
Catalyst (20)
Yield
Number of Steps
Non-Participating Functional Groups
Experimental Protocols
Reaction Type
Reagent
Catalyst
Solvent
Commercial Availability
Reaction Notes
Search Within Results
Search for up to 3 structures within the result set.
Draw
Search
Searching for...
Clear All
Remove and Edit
Filtering:
Substance Role: Catalyst
Search Within Results: Drawn Structure
Clear All Filters
20 Results
Group: By Document
View: Expanded
1
Preparation of pyrrolopyridinone and pyrrolopyrimidinone derivatives as TYK2 inhibitors and uses thereof
By: Dahlgren, Markus; Greenwood, Jeremy Robert; Harriman, Geraldine C.; Kennedy-Smith, Joshua Jahmil; Masse, Craig E.; et al
World Intellectual Property Organization, WO2016138352 A1 2016-09-01 | Language: English, Database: CAplus
PatentPak
Full Text
Suppliers (60)
Suppliers (87)
Suppliers (5)
Reaction Summary
Steps: 1 Yield: 100%
1.1 Catalysts: Titanium tetrachloride
Solvents: Dichloromethane; rt; 18 h, rt
1.2 Reagents: Water; cooled
View Reaction Detail
2
One-pot three components synthesis of β-amido ketones
By: Yang, Deli; Li, Jiarong; Sun, Kening; Lu, Hongyan; Liu, Mingxing; et al
Youji Huaxue (2013), 33(11), 2341-2348 | Language: Chinese, Database: CAplus
Full Text
View 3 Related Reactions



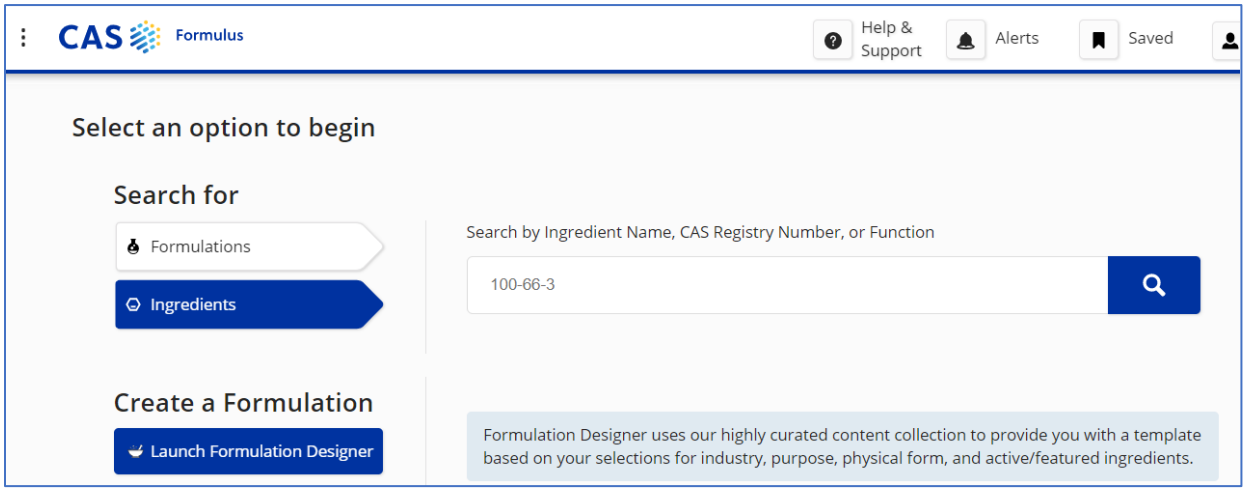
Q29：怎样查找化合物的用途信息?

A29：以苯甲醚 (CAS RN 100-66-3) 为例，分别介绍其在配方中的应用、在化学反应中的应用（作为反应物或溶剂）。

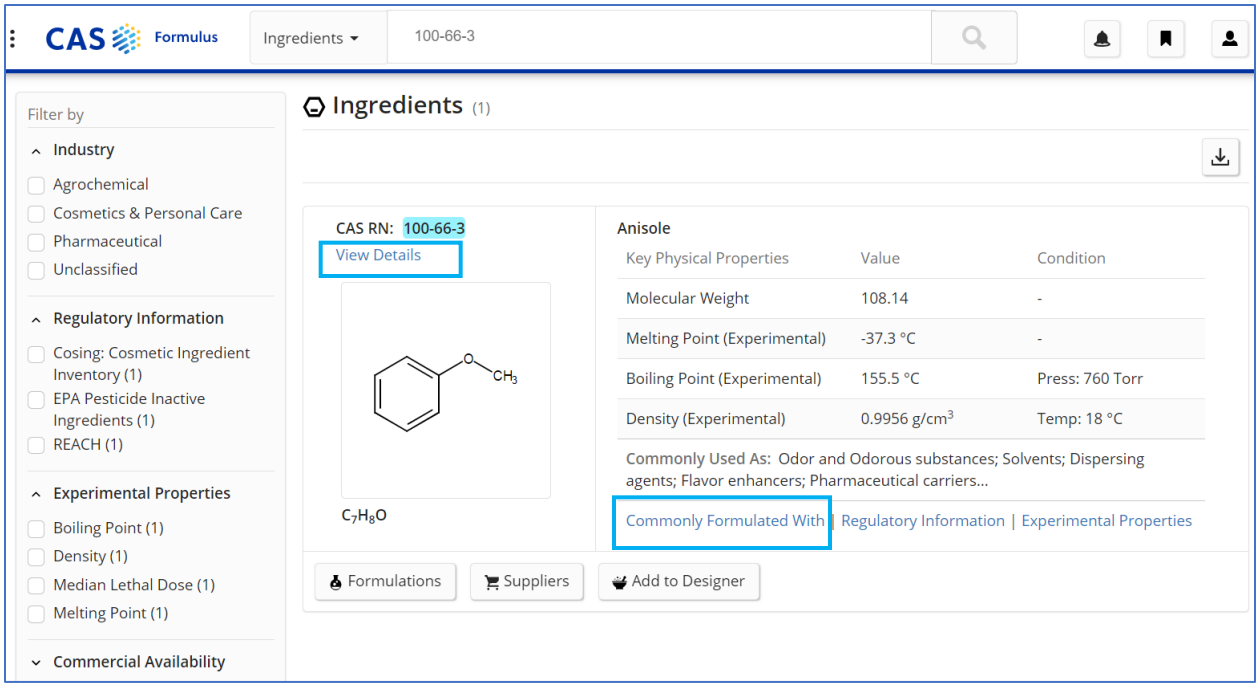
(1) 在配方中的应用。

登录 https://formulus.cas.org/#/search，进入 CAS Formulus 进行检索：

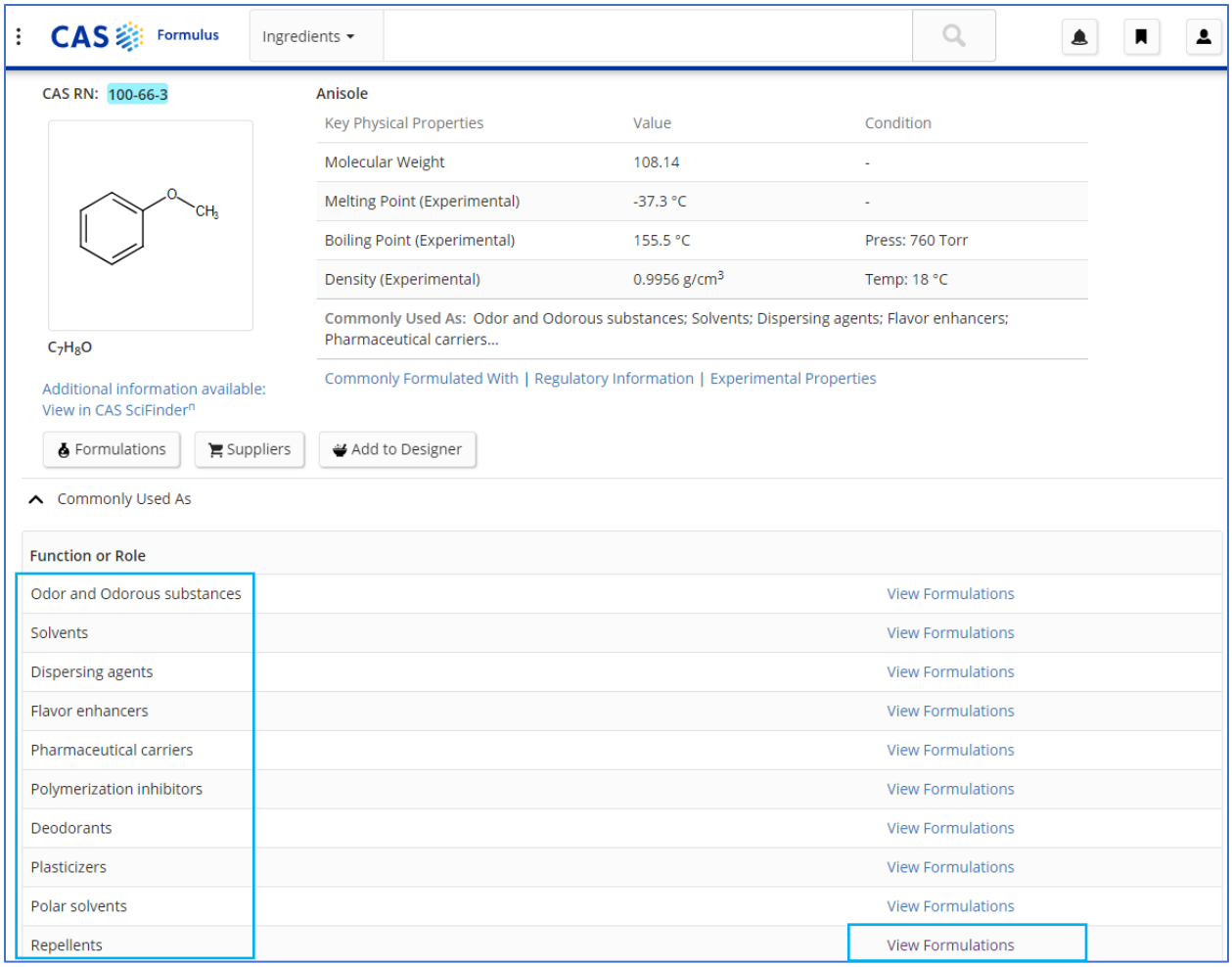
a．点击 Ingredients，输入苯甲醚 CAS 登记号。



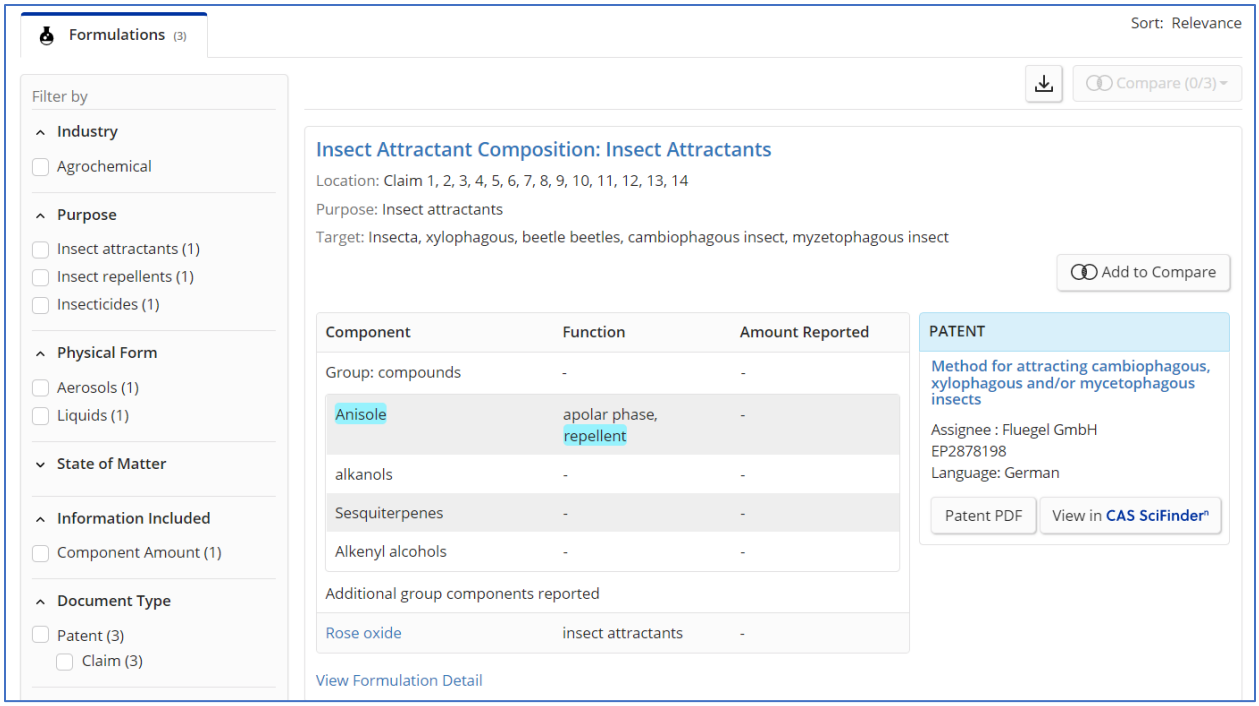
b.点击 View Details 或 Commonly Formulated with 查看其在配方中的用途。



c．通过 Commonly Formulated with 可查看其在配方中的常见用途，点击右侧 View formulations 可查看相应配方。

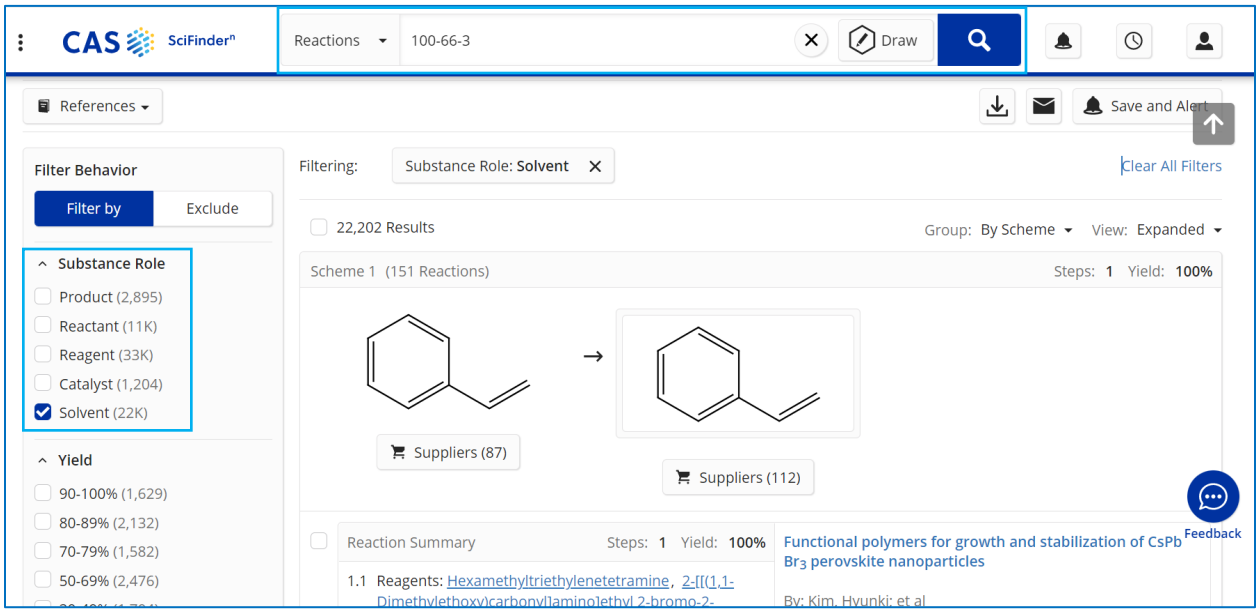


d．获得苯甲醚用作驱虫剂的配方详情。

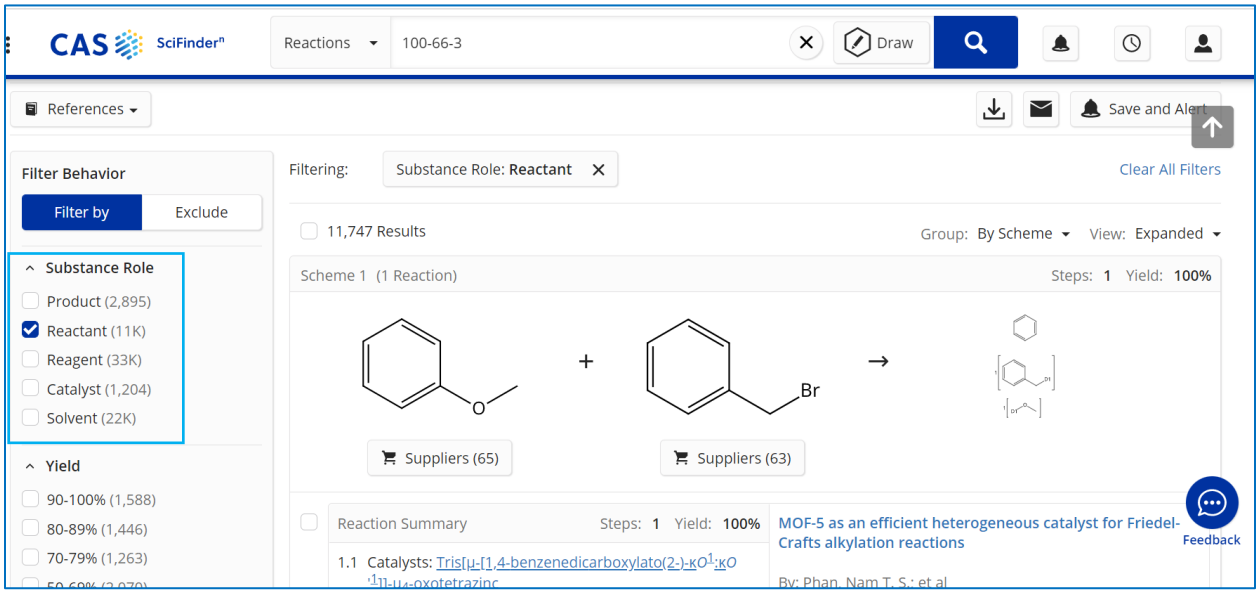


(2) 在反应中的应用。通过 CAS SciFinder^n，可以便捷获取苯甲醚在反应中的应用。获取反应用途的具体操作如下：

a.在 CAS SciFinder^n 主页面，选择 Reactions，输入苯甲醚的 CAS 登记号，点击右侧放大镜，检索其参与的化学反应。在反应结果集页面，通过左侧 substance role: solvent，查看苯甲醚作为溶剂参与的反应。

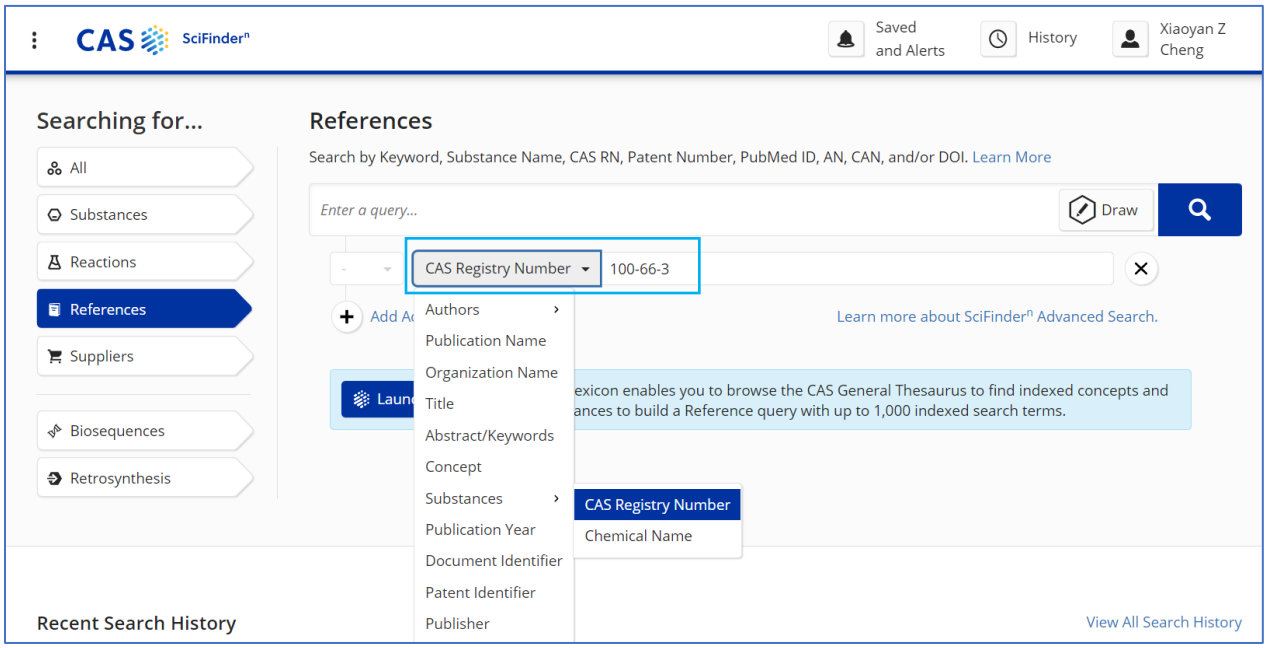


b.选择 Substance role: reactant，可获取苯甲醚作为反应物参与的反应。

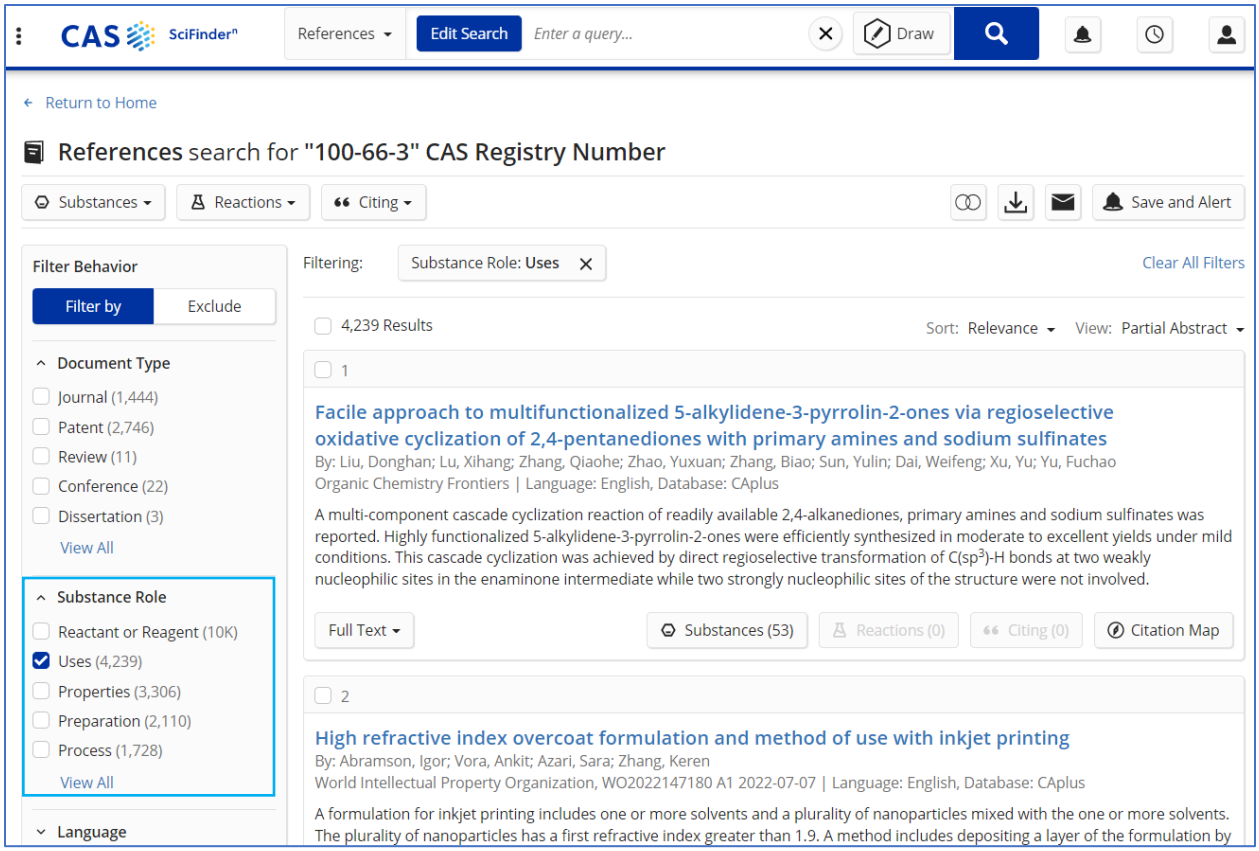


(3) 在 CAS 在 SciFinder^n 中，通过文献检索，可获取全面的苯甲醚用途报道的文献。

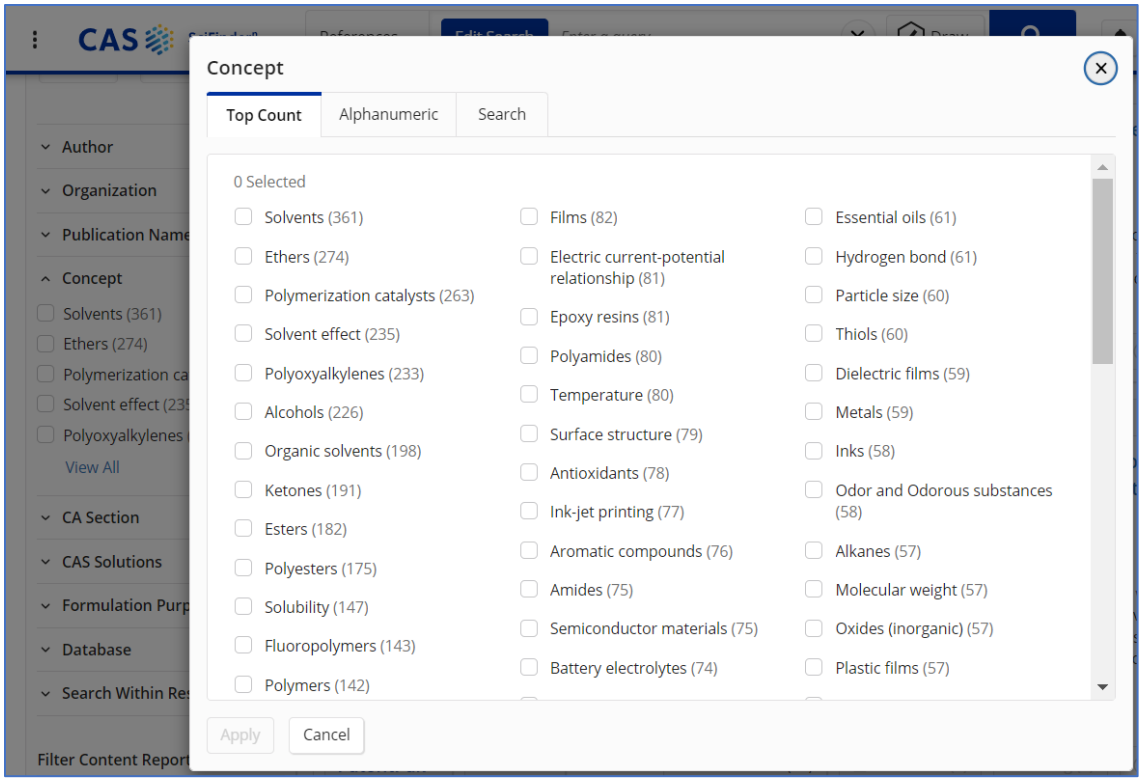
a. 在检索主页面，点击左侧 References，然后通过在页面中央选择高级检索字段，点击 Substances: CAS Registry Number 输入苯甲醚的 CAS 登记号。点击右侧放大镜，可检索获取苯甲醚相关的研究文献。



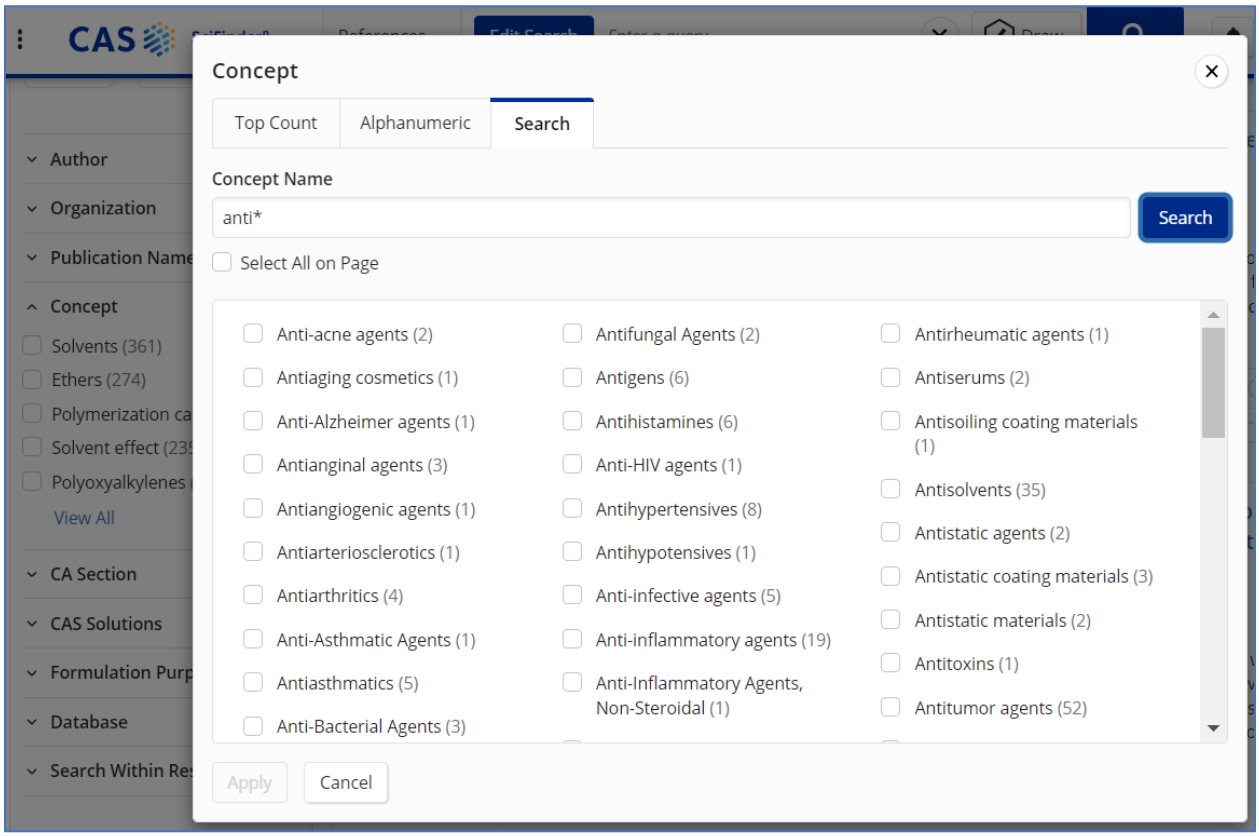
b.在文献检索结果集页面，选择左侧 Substance Role: Uses，筛选出苯甲醚用途研究的文献。



c.在筛选后的文献结果集中，通过 concept 查看与用途相关的词



d．也可以选择 search 输入感兴趣的词，查看相关结果。星号（*）代表 0 或者多个字符。



Q29：如何检索不含有噻唑的苯的并环结构？

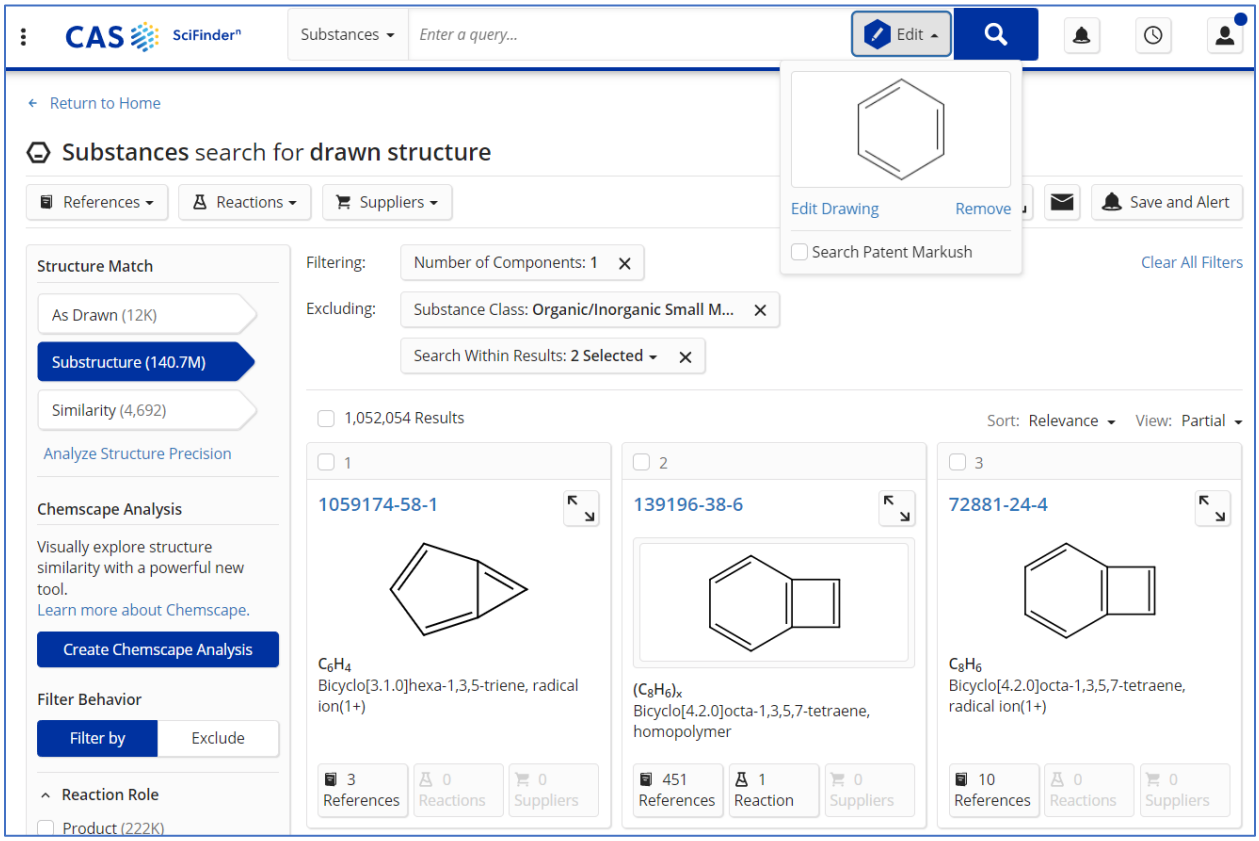
A29：检索思路如下：

（1）通过 Substance 进行物质结构检索，检索苯；

（2）在物质检索结果页面中，通过左侧 Filter Behavior: Exclude 排除苯的非并环结构（使用锁定工具）；

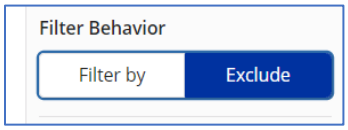
（3）在（2）的结果中，继续使用 Exclude，排除噻唑结构。

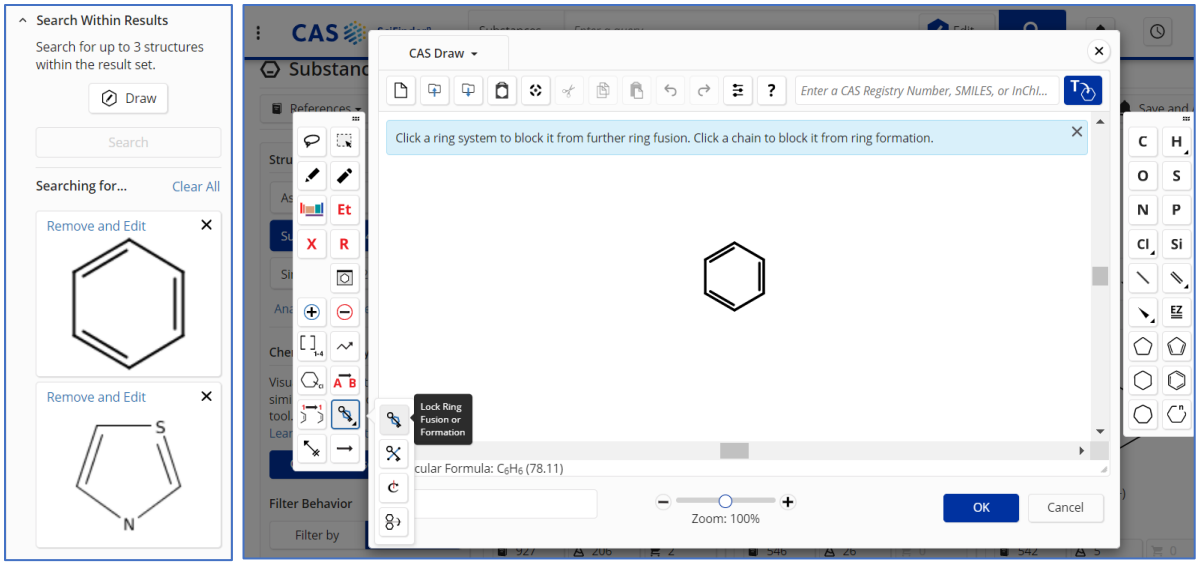
根据需要，还可以根据结果左侧 Number of Components 精炼单组份物质，根据 Substance class 精炼小分子物质等。



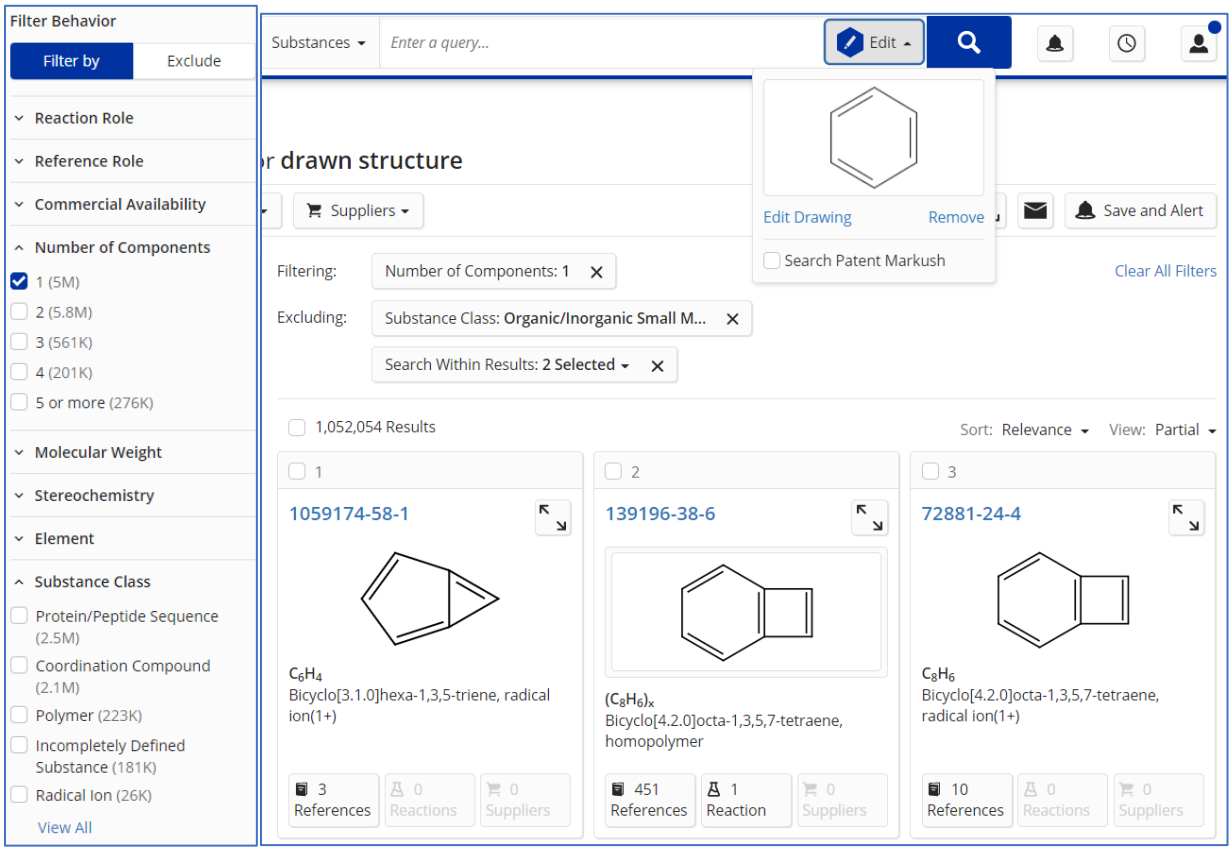
在物质结果页面左侧，点击 Filter Behavior 下面的 Filter by 则可对左侧列表中的聚类分析项进行精炼，点击 Exclude 则可对聚类分析项进行排除。

例如，点击 Exclude，然后在结果页面使用左下角 Search Within results，先后输入被锁定的苯和噻唑，那么这两类结果即便排除。





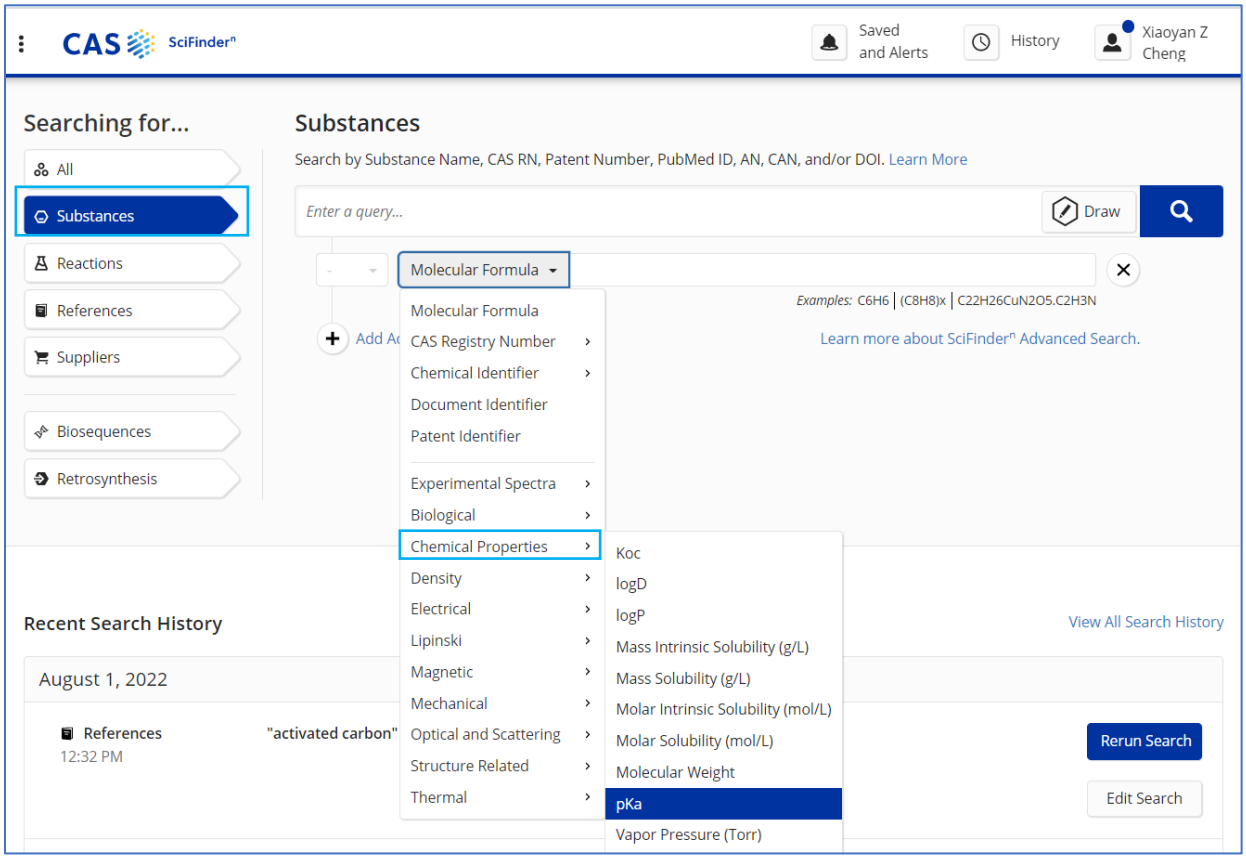
点击 Filter by，通过左侧 Number of Components 选择 1，即可查看单组份的物质。



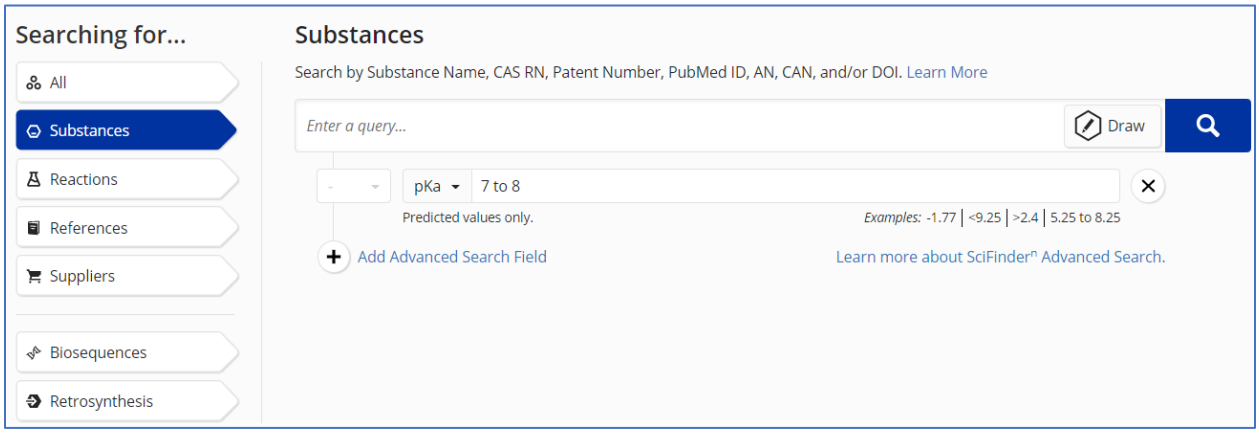
Q30：如何检索 pKa 在 7-8 之间的化合物?

推荐如下检索步骤：

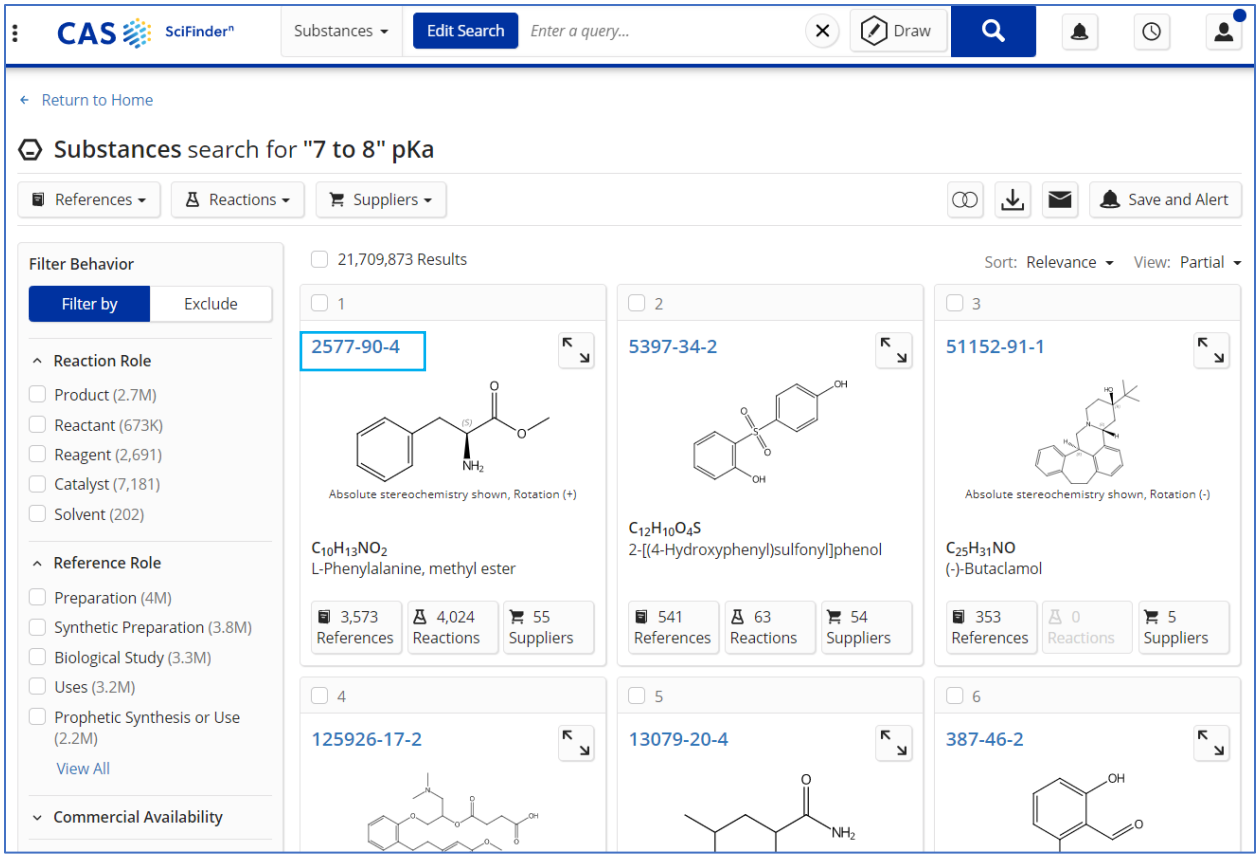
（1）通过 Substances 的高级检索项，选择 Chemical Properties 中的 pKa。



（2）根据输入框右下角提供的 examples 格式输入属性值或范围，例如： 7 to 8（从小到大输入范围值）。点击右侧放大镜，进行物质检索。



（3）获得符合属性要求的物质结果。点击物质 CAS RN，可查看物质详情。

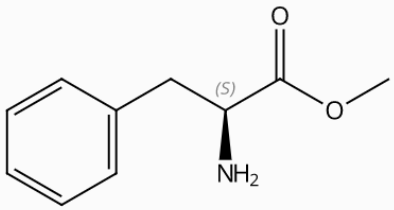

CAS SciFinder
Substances
Edit Search
Enter a query...
Draw
Return to Home
Substances search for "7 to 8" pKa
References
Reactions
Suppliers
Save and Alert
Filter Behavior
Filter by
Exclude
Reaction Role
Product (2.7M)
Reactant (673K)
Reagent (2,691)
Catalyst (7,181)
Solvent (202)
Reference Role
Preparation (4M)
Synthetic Preparation (3.8M)
Biological Study (3.3M)
Uses (3.2M)
Prophetic Synthesis or Use (2.2M)
View All
Commercial Availability
21,709,873 Results
Sort: Relevance
View: Partial
1
2577-90-4
Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)
C10H13NO2
L-Phenylalanine, methyl ester
3,573 References
4,024 Reactions
55 Suppliers
2
5397-34-2
C12H10O4S
2-[(4-Hydroxyphenyl)sulfonyl]phenol
541 References
63 Reactions
54 Suppliers
3
51152-91-1
Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)
C25H31NO
(-)-Butaclamol
353 References
0 Reactions
5 Suppliers
4
125926-17-2
5
13079-20-4
6
387-46-2

CAS SciFinder^n Substances Edit Search Enter a query... Draw

Return to Results Prev (1 of 21,709,873) Next

CAS Registry Number: 2577-90-4

References (3,573) Reactions (4,024) Suppliers (55) Save



Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)

$C_{10}H_{13}NO_2$

L-Phenylalanine, methyl ester (9CI, ACI)

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	179.22	-
Melting Point (Experimental)	131-133 °C	-
Boiling Point (Experimental)	84 °C	Press: 0.25 Torr
Density (Predicted)	1.100±0.06 g/cm^3	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
pKa (Predicted)	7.13±0.33	Most Basic Temp: 25 °C

Experimental Properties | Spectra

Expand All | Collapse All

- Other Names and Identifiers
- Experimental Properties
- Experimental Spectra
- Predicted Properties

Biological | Chemical | Density | Lipinski | Structure Related | Thermal

Property	Value	Condition	Source
Koc	1.0	pH 1; Temp: 25 °C	(1) ACD
Koc	1.0	pH 2; Temp: 25 °C	(1) ACD
Koc	1.0	pH 3; Temp: 25 °C	(1) ACD
Koc	1.0	pH 4; Temp: 25 °C	(1) ACD
Koc	1.0	pH 5; Temp: 25 °C	(1) ACD
Koc	7.73	pH 6; Temp: 25 °C	(1) ACD
Koc	47.2	pH 7; Temp: 25 °C	(1) ACD
Koc	97.6	pH 8; Temp: 25 °C	(1) ACD
Koc	109	pH 9; Temp: 25 °C	(1) ACD

Molar Solubility	0.057 mol/L	pH 8; Temp: 25 °C	(1) ACD
Molar Solubility	0.051 mol/L	pH 9; Temp: 25 °C	(1) ACD
Molar Solubility	0.050 mol/L	pH 10; Temp: 25 °C	(1) ACD
Molar Solubility	0.050 mol/L	Unbuffered Water pH 9.92; Temp: 25 °C	(1) ACD
Molecular Weight	179.22	-	
pKa	7.13±0.33	Most Basic Temp: 25 °C	(1) ACD
Vapor Pressure	9.86 x 10^{-3} Torr	Temp: 25 °C	(1) ACD

Sources

(1) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02 (© 1994-2022 ACD/Labs)

Predicted Spectra

Regulatory Information

Additional Details

反应检索

Q1：如何获取无机盐的反应信息？

A1：无机盐的反应信息获取策略如下：

1） 选择 substances, 是检索框中输入无机盐的化学名、分子式或通过结构编辑器绘制无机盐的化学结构式（然后上传结构式），检索得到无机盐的物质结果集；

2） 在无机盐的物质结果集页面点击 Reactions，即可得到无机盐的反应信息。可以利用反应结果集页面左侧的 Filter 对反应结果集进行筛选。

Q2：如何获取含有羧基的离子型或配位型化合物的反应信息？

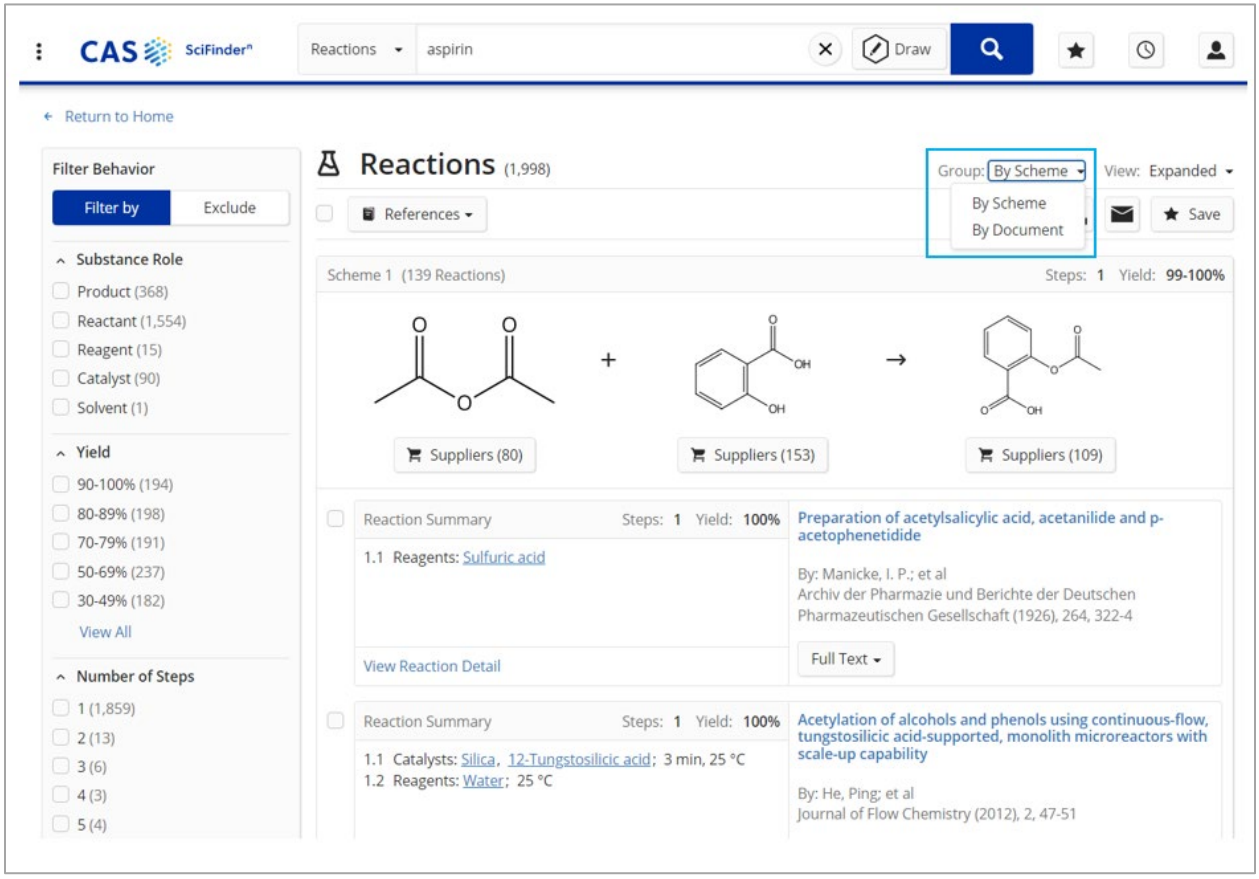
A2：

（1）离子型化合物的反应信息获取策略：先点击 Substances，通过物质检索获得离子型化合物的物质信息（可以在结构编辑器中绘制离子型化合物的结构式，如羧基离子型化合物的结构式可绘制为 O=C-O⋯.M），在获得物质信息后。通过物质结果集页面左侧的 Substance Class 筛选项将结果限定为 salt and compound with（注意区分是否需要带水合物的盐）。如果离子化合物的分子组成明确，也可直接使用分子式检索，比如 $CH_2O_2.H_2O.K$）。获得离子型化合物的物质信息后，在物质结果集页面点击 Reactions，即可获得其反应信息。

（2）配位型化合物的反应信息获取策略：可以直接将此配合物绘制在反应式中，使用⋯.(unspecified bond) 来绘制羧基配合物，比如 O=C-O⋯.Pd。

Q3：如何合并来自同一篇文献的反应？

A3：通过反应结果集页面右侧 Group: by Document 合并来自同一篇文献的反应。如下图



Q4：在反应结果集筛选项中的 Non-Participating Functional Groups 是什么意思?

A4：Non-Participating Functional Groups 表示该官能团不参与化学反应。

Q5：CAS 会收录权利要求书中用化学通式表示的化学反应吗?

A5：如果专利中披露的反应其起始物和（或）产物的信息很明确，CAS 就会收录该反应。

另，还可以直接通过 CAS PatentPak 下载专利全文，直接在专利原文中获取相关反应。

Q6：在 CAS SciFinder^{n} 结果集页面点击物质结构时，在弹出窗口会显示 Reactions, Synthesize 和 Start Retrosynthetic Analysis，请问这三者的区别是什么?

A6：Reactions 表示该物质参与的所有反应；Synthesize 表示该物质作为产物的反应；Start Retrosynthetic Analysis 表示生成该物质作为终产物的逆合成路线。

Q7：在一个硝基苯还原为苯胺的还原反应中，如果原料和产物中都含有 Boc 取代基，但在反应前后不发生变化。如何检索这样的反应？

A7：这属于片段结构的化学选择性反应检索，可分为分子间和分子内两种情况：

（1） 如果 Boc 取代基和硝基苯/苯胺可以存在不同的结构中，即分子间选择性反应，那么可以绘制片段结构直接进行反应检索，比如反应物绘制硝基苯和 Boc 两个片段，产物也绘制为苯胺和 Boc 两个片段。

（2） 如果 Boc 取代基和硝基苯在同一个原料中以及 BOC 和苯胺在同一个产物中（Boc 与硝基苯及苯胺间有其他连接片段），即分子内选择性反应，那么可以通过如下三步实现精准检索：

第一步：绘制硝基苯和 Boc 片段，进行物质检索。查看 Substructure 结果集，并在页面左侧 number of components 筛选项下选择 1，这样即可将硝基苯和 Boc 限定在同一个结构中。

第二步：在第一步物质结果集页面点击 Reactions，得到第一步获得的物质结果集的反应信息，并在页面左侧 Substance Role 筛选项下选择 Reactant。

第三步：点击第二步获得的反应结果集页面左下角的 Search within Results，在弹出的结构编辑器中绘制反应式，原料为硝基苯和 Boc 片段，产物为苯胺和 Boc 片段，同时使用结构编辑器左下角原子标记工具来标注原料中与硝基相连的碳原子，以及产物中与氨基相连的碳原子，同时标记原料和产物中 Boc 的羰基碳原子，从而限定原料和产物中对应的是同一个原子。选择 Substructure，点击 Find 即可获得精准的反应结果。

Q8：如何检索酶催化羰基还原反应？比如苯乙酰还原为苯乙醇反应

A8：有两种方法：

1) 直接进行反应检索。在 CAS SciFinder^n 主页选择 Reactions，打开结构编辑器，绘制苯乙酰还原为苯乙醇的反应式，进行反应检索。在得到的反应结果集页面左侧 Catalyst 筛选项中查看有哪些催化剂，选择酶，将反应结果集限定为酶作为催化剂的反应。

2) 采用文本与反应式联用进行文献检索。在 CAS SciFinder^n 主页选择 References，在输入框中输入主题词，如，“carbonyl reductase” or SSCR。再打开结构编辑器，绘制

苯乙酰还原为苯乙醇的反应式，上传反应式后，进行检索。在得到的文献结果集中，可选择左侧 As Drawn 查看锁环锁原子反应对应的文献结果集。

Q9：已知起始物料和 API 的 CAS RN，怎么检索合成路线?

A9：在 CAS SciFinder^n 主页选择 Reactions，进行反应检索。打开结构编辑器，分别通过 CAS RN 将起始原料和 API 的结构导入到结构编辑器后，再添加反应箭头，进行反应检索即可获得对应的合成路线。

Q10：如何全面准确检索合成丙烯酸的反应，同时排除由丙烯酸衍生物制备丙烯酸的合成方法?

A10：按下述步骤进行：

1) 在 CAS SciFinder^n 主页面选择 Reactions，在输入框中输入丙烯酸的 CAS 登记号 79-10-7，检索后得到丙烯酸参与的化学反应
2) 在反应结果集页面左侧 Filter By 筛选项 Substance Role 下勾选 Product, 将结果限定为丙烯酸为产物的反应
3) 点击反应结果集页面左侧的 Exclude，点击 Search Within Results 下的结构编辑器，绘制丙烯酸的结构并将其限定为 Reactant，上传结构后，选择 Substructure 进行检索，即可排除丙烯酸衍生物作为底物参与的反应。

Q11：CAS SciFinder^n 中，对于反应结果集而言，默认的排序规则是什么?

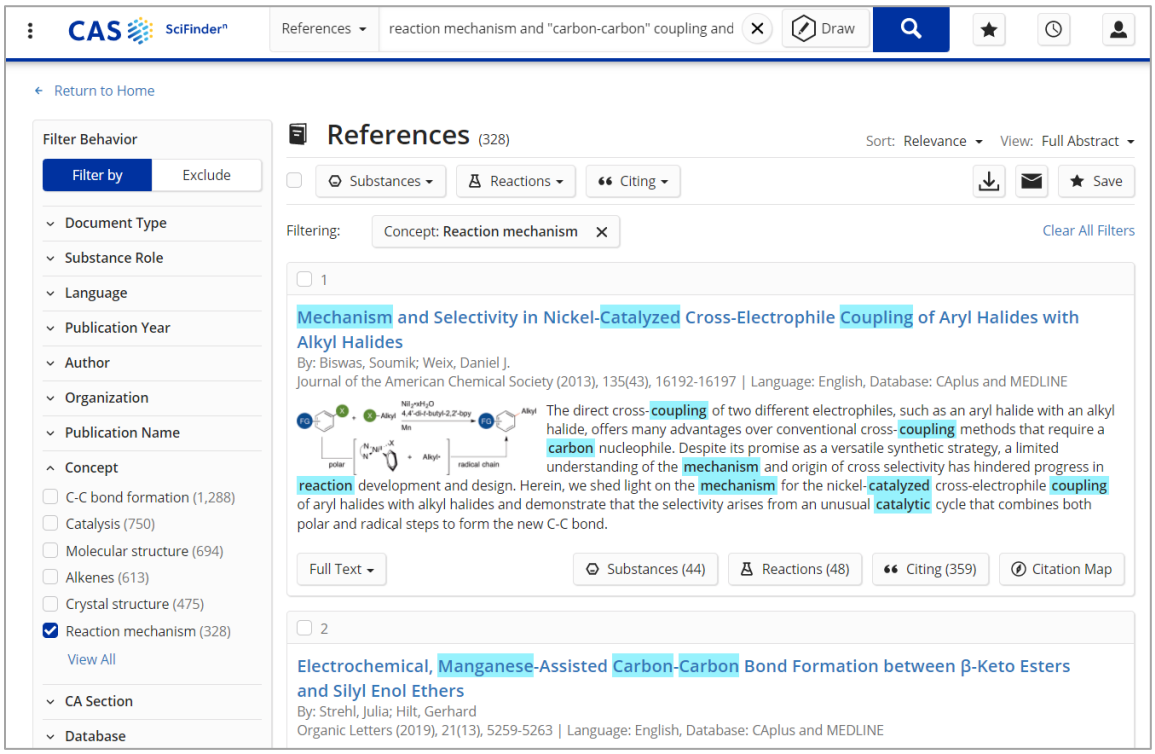
A11：通过反应式检索得到的反应结果集，其默认的排序规则是综合考量相似分（Tanimoto Score）、反应步数、产物结构、产率等多个参数。在 Scheme 下的 Reaction Summary 中，反应按照步数、产率、公开日期和文献标题来排序。

Q12：如何检索某一类催化剂涉及的某类型反应的机理?

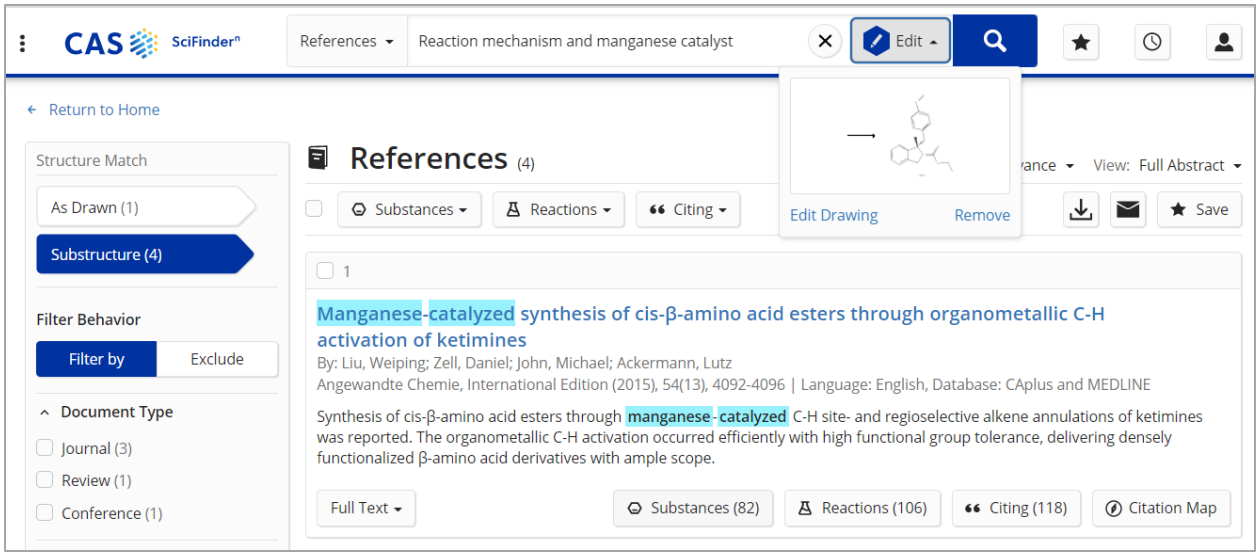
A12：用以下两种方法来进行检索：

（1）如果没有具体的反应式，仅知道反应类型或催化剂的类型，则建议选择 References，输入主题词进行检索。可根据需要灵活构建检索式，如：reaction mechanism and "carbon-carbon" coupling and (trivalent manganese or manganese catalyst)。在得到的

文献结果集页面，点击左侧 Filter by Concept，选择 Reaction mechanism，获取锰催化剂或三价锰催化的 C-C 偶联反应的机理研究文献。

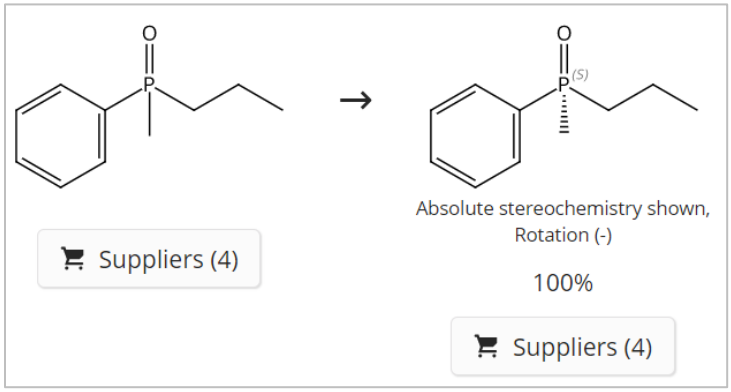


（2）如果有具体的反应式，则推荐选择主题词和结构式/反应式联用的方法进行检索。如下图：

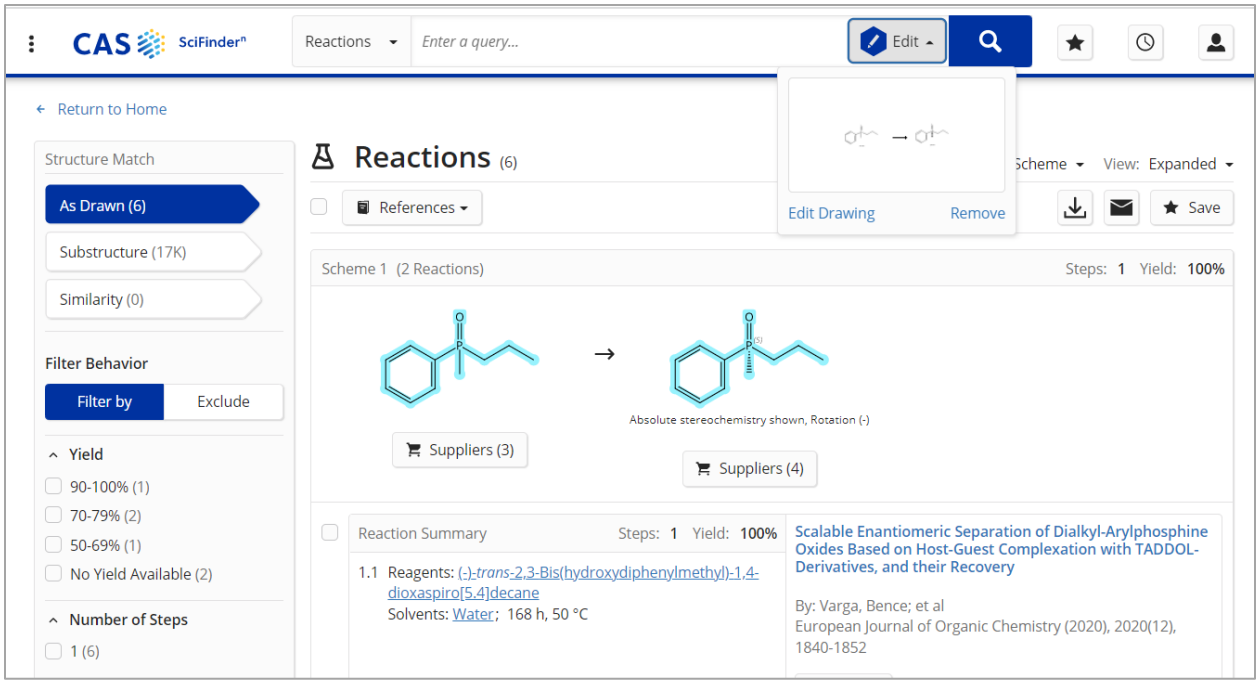


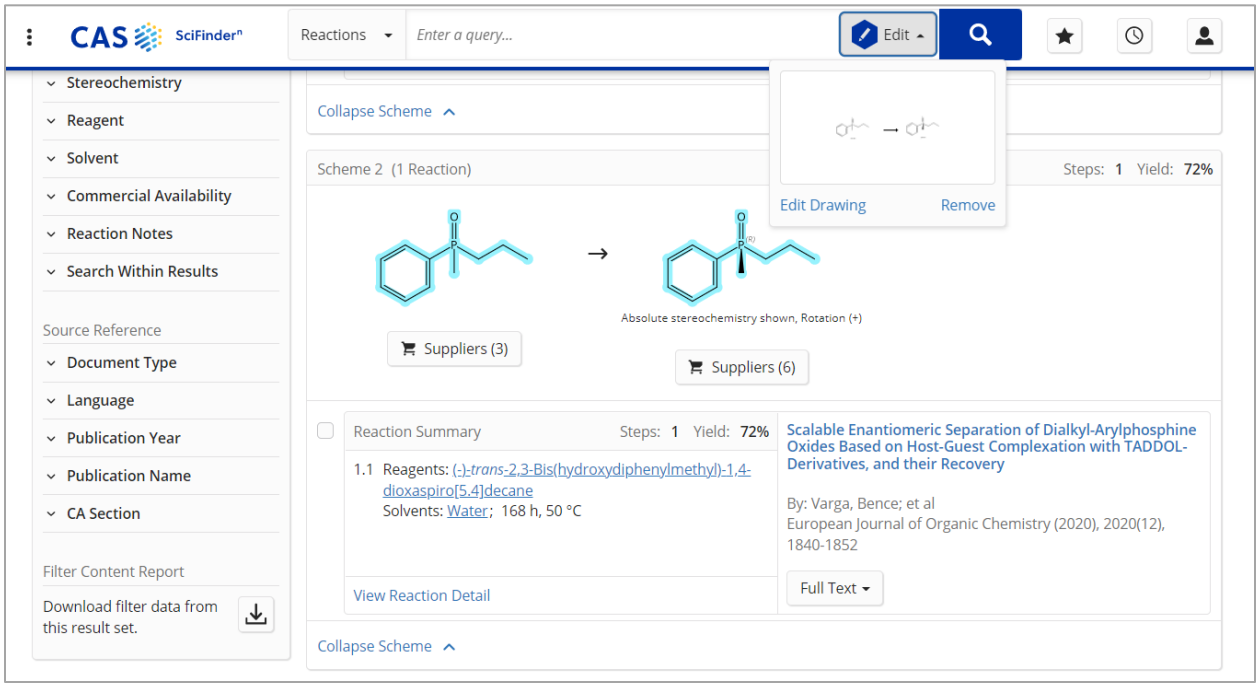
Q13：含有手性结构的化合物拆分的反应怎么检索?

A13：手性化合物的拆分反应可以直接绘制反应式进行快速检索，也可以从物质检索出发，在获取到手性结构后，再获取其反应信息。以下面的反应为例：



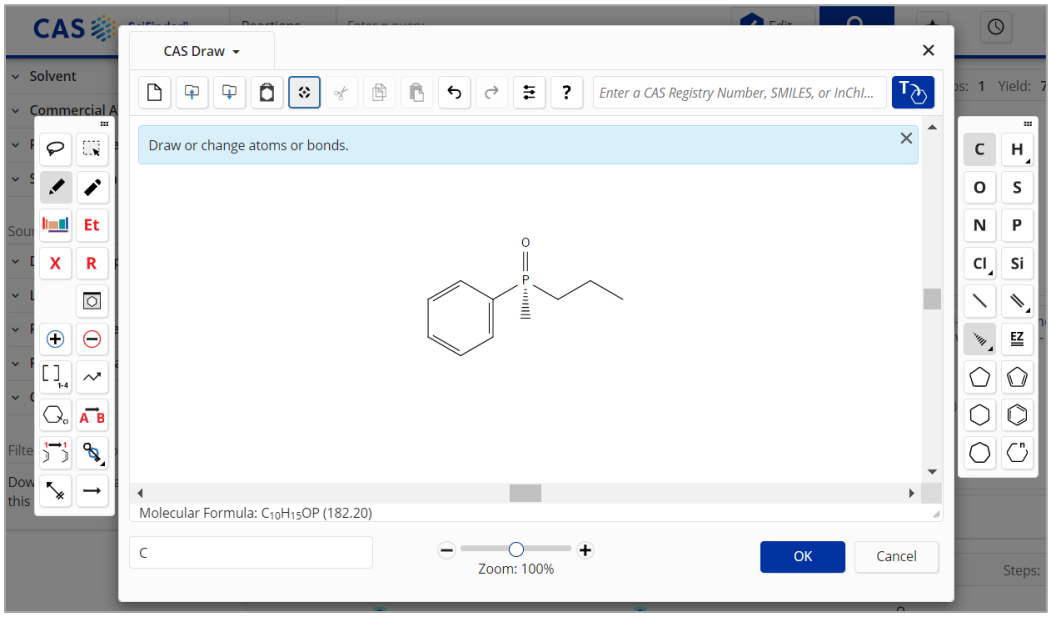
（a）直接绘制上述反应式进行检索，可以快速获取各类手性拆分反应。

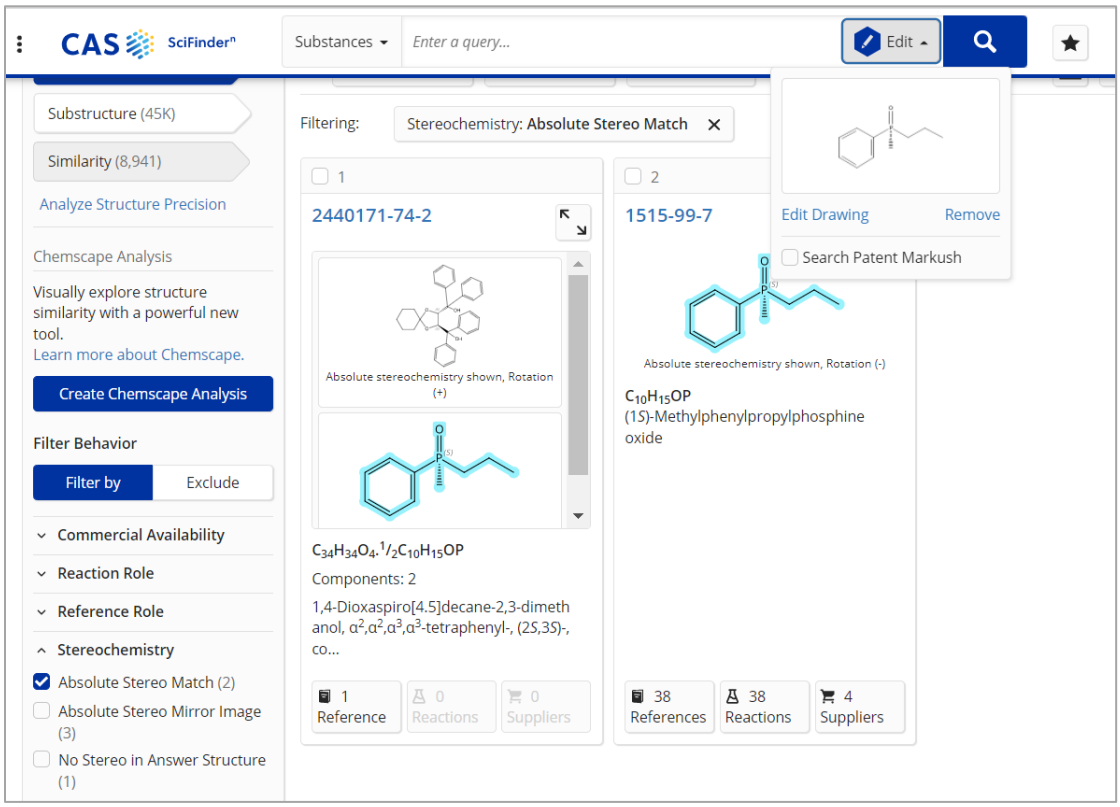




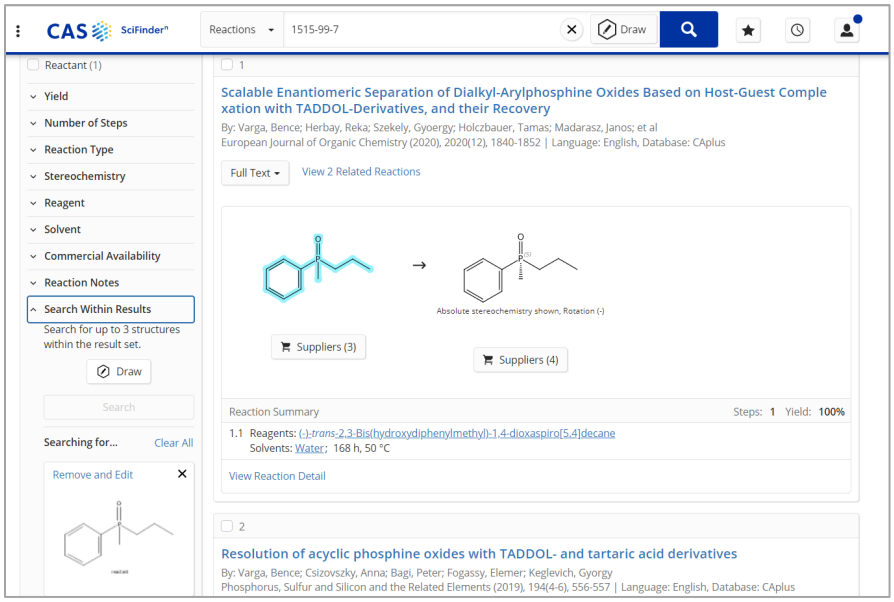
(b) 如果希望获取拆分后的产物为特定手性的反应，可先检索精准手性的物质，然后再获取反应。

例如，先使用结构编辑器下方的手性键，绘制 S 构型的拆分产物，并进行物质检索；通过物质结果左侧 Stereochemistry 获取 absolute stereo match 立体构型完全匹配的物质。





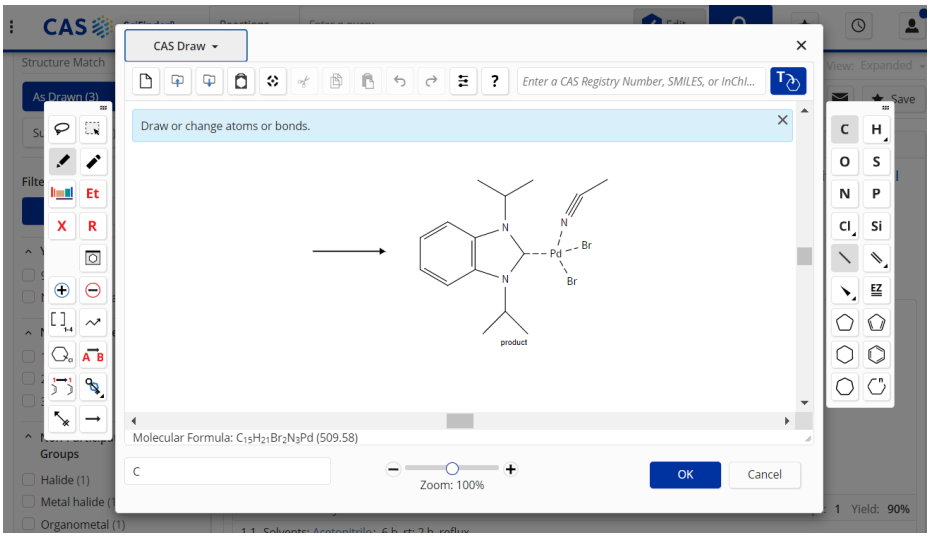
CAS RN 1515-99-7 为立体构型完全匹配的物质，点击其下方的 Reactions，获取其参与的反应。在反应结果集页面左侧 Filter by 限定 Reaction Role 为 Product, 并在 Search Within Results 中输入原料的结构，且使用反应角色标记工具标注其角色为 reactant，进行二次反应结构检索。即可获得手性精准的拆分反应。

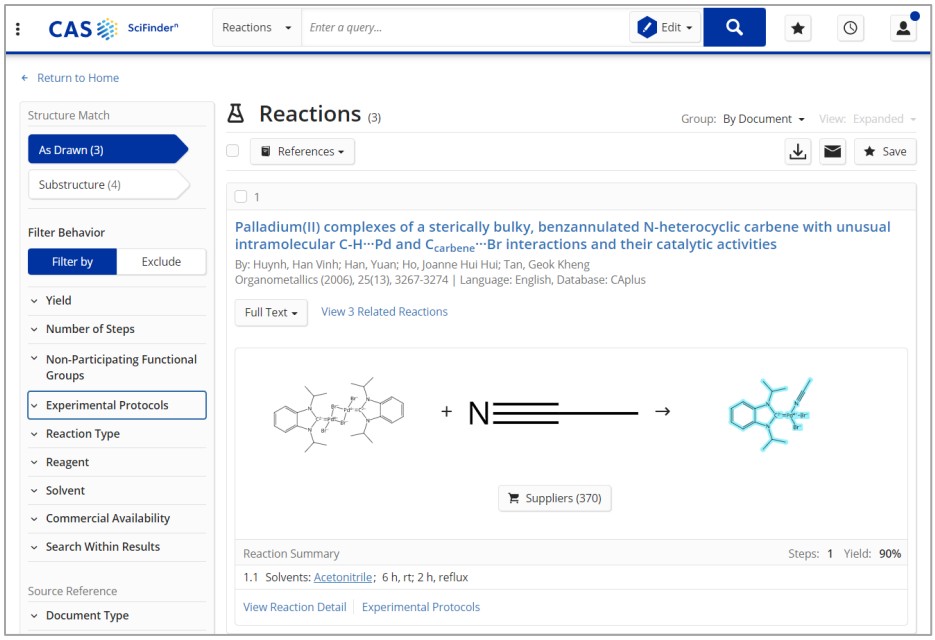


Q14：如何获取金属络合物的制备方法？

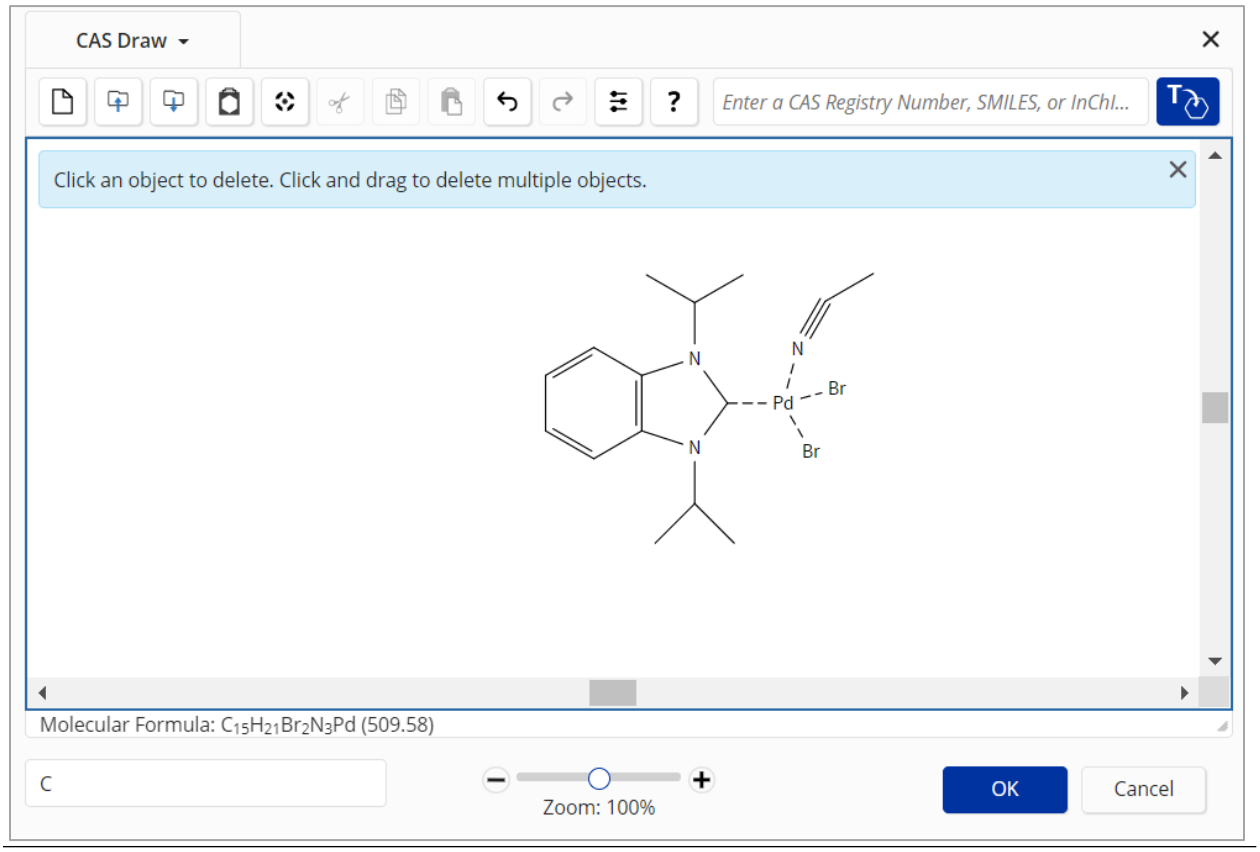
A14：通过以下两种方式可获取金属络合物的制备方法：

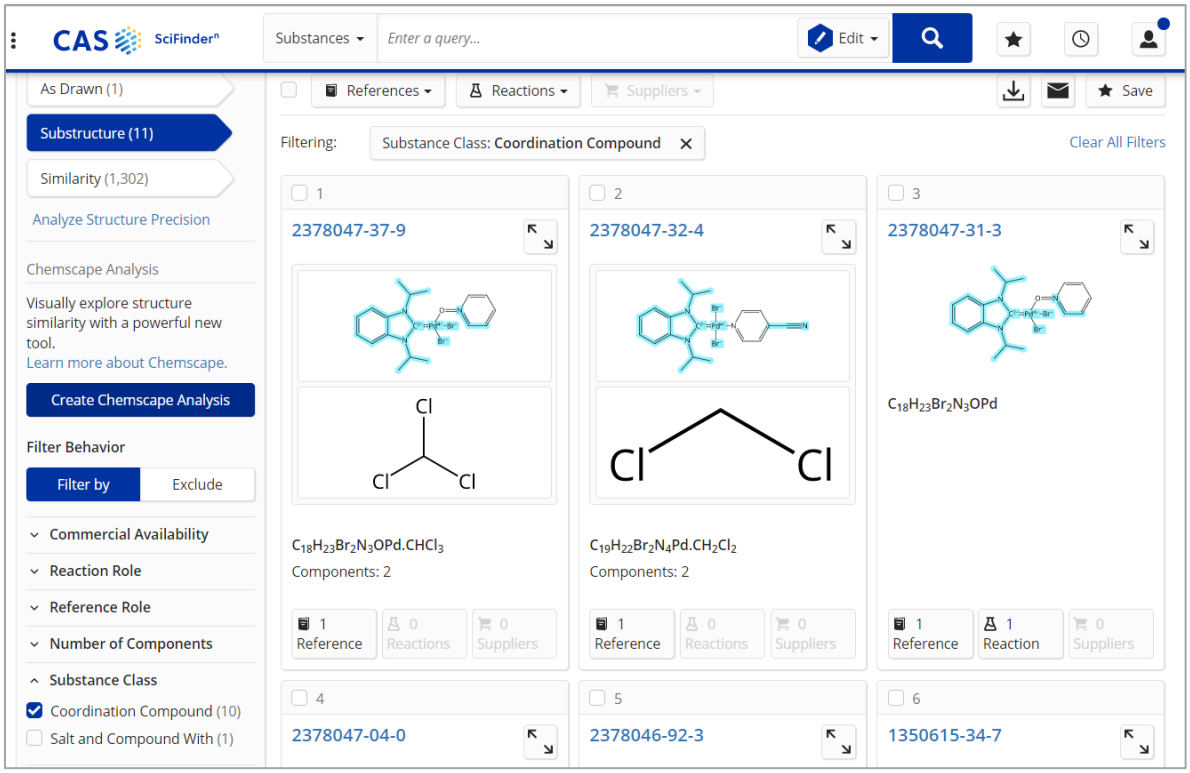
1) 直接绘制反应式，进行反应检索。如下图：





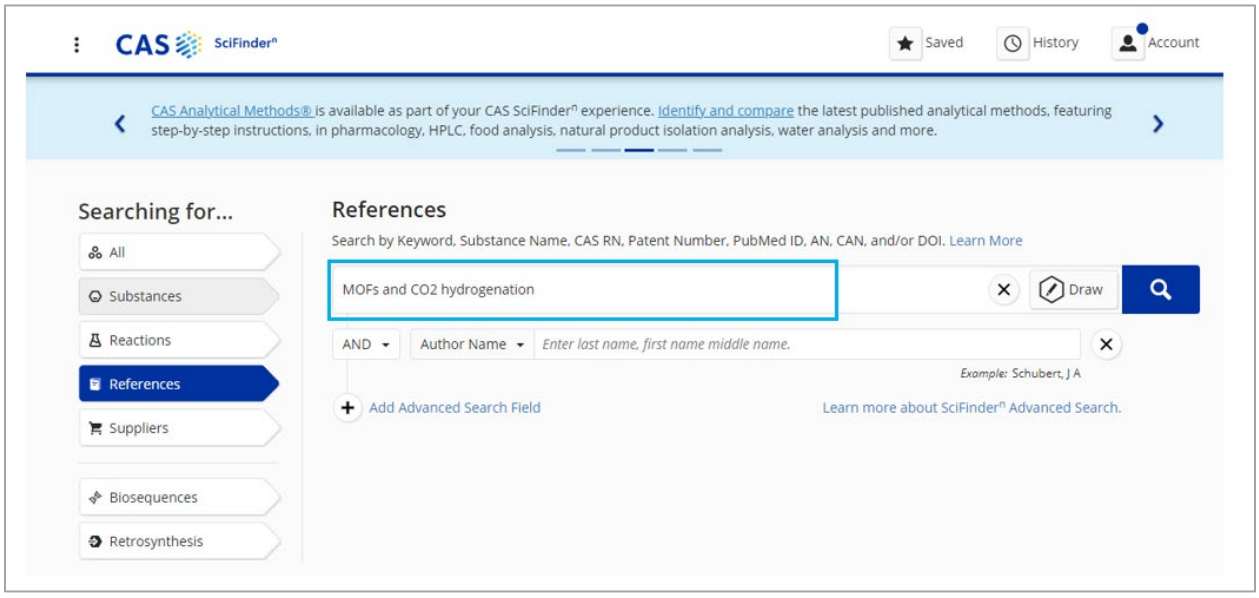
2) 也可以通过绘制结构进行物质检索，再从物质获取其反应信息。金属络合物的绘制，可通过配体、中心原子及连接键（虚线键）来绘制即可。结构检索结果有 3 个选项 (As Drawn, Substructure, Similarity），可根据需要查看感兴趣的物质，并根据物质获取其反应信息。如下所示：



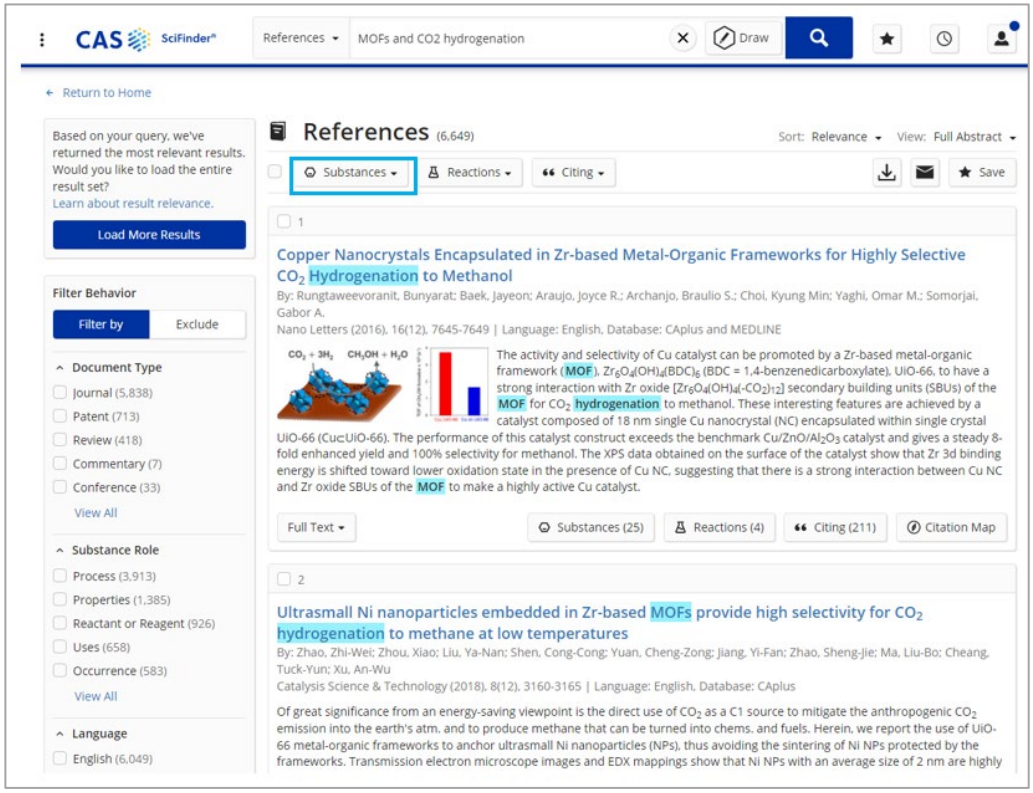


Q15：如何查找 MOFs 催化的二氧化碳加氢反应?

A15：点击 References，输入关键词



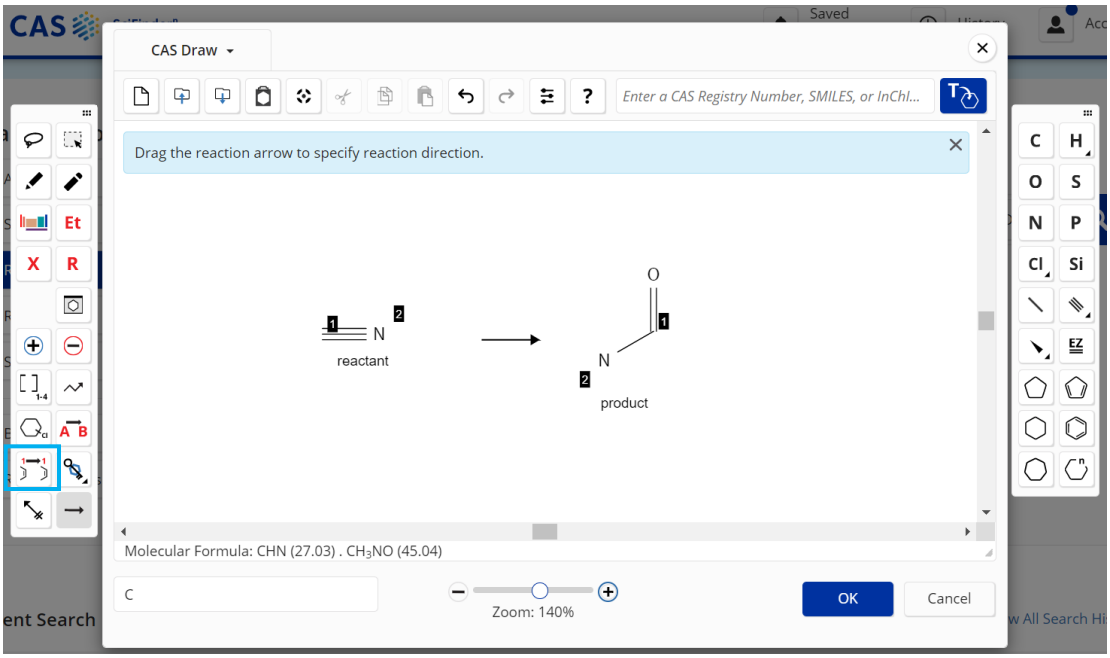
在文献结果集页面点击 Substances

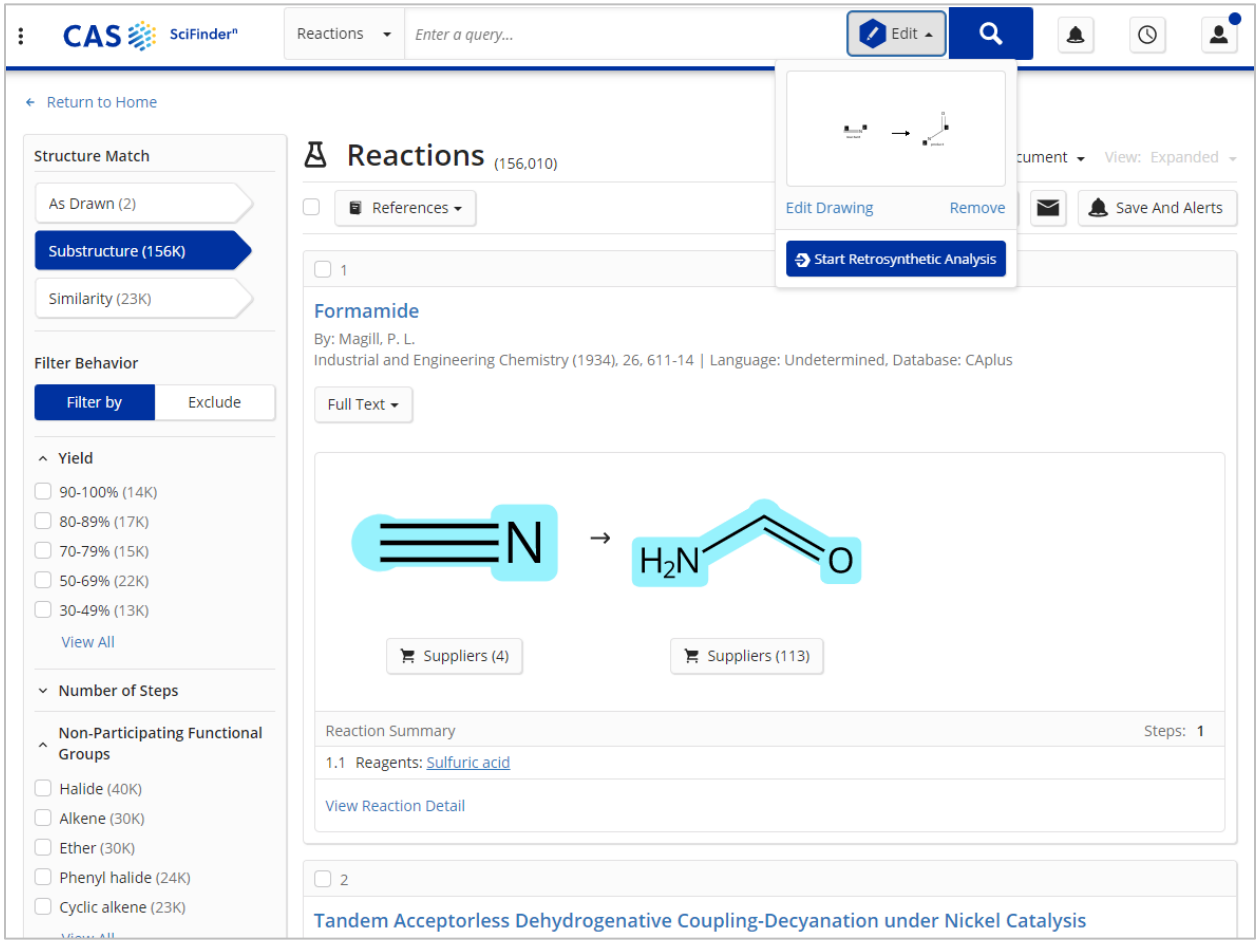


Q16：如何获取报道氰基还原为酰胺的文献？

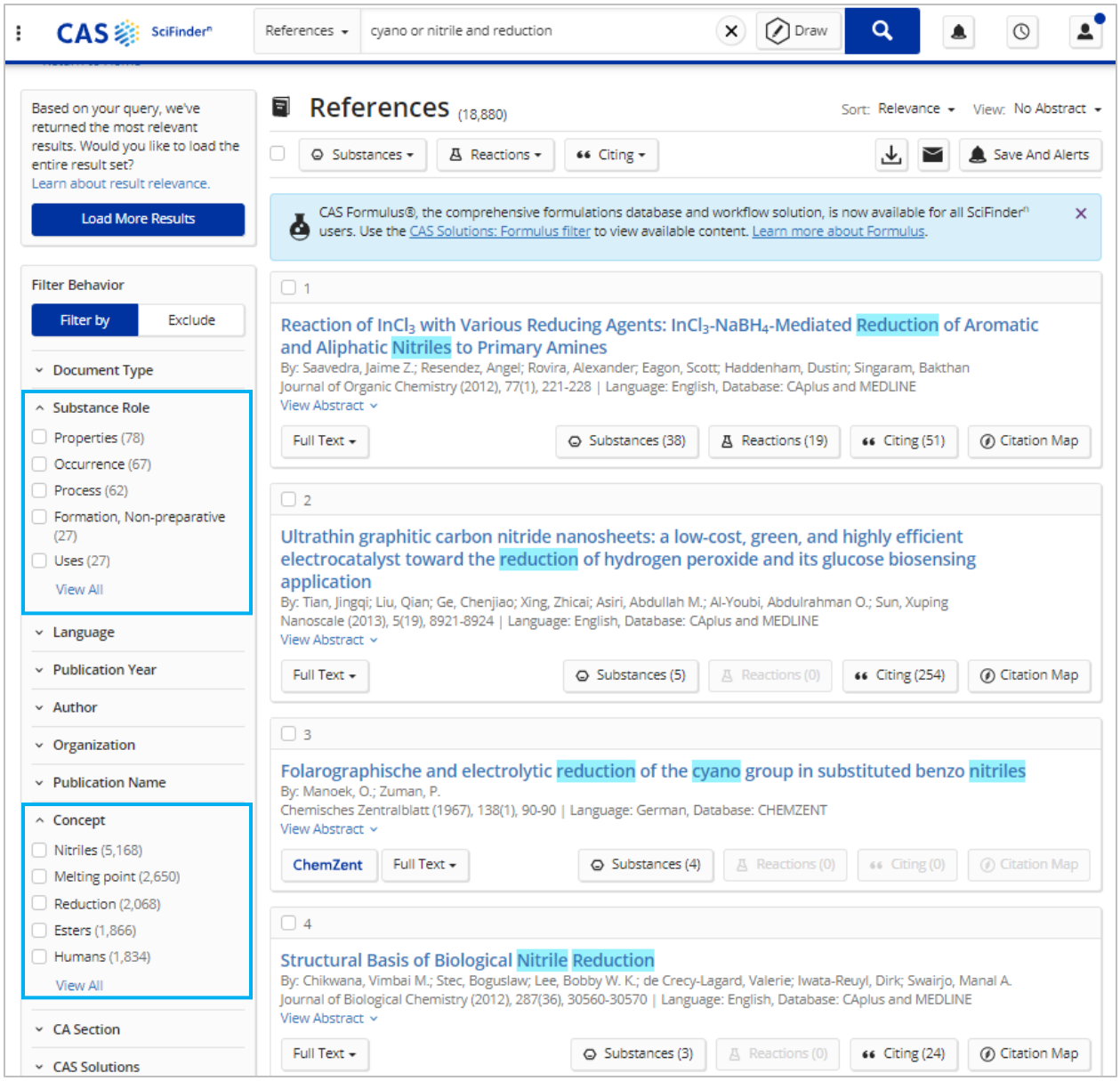
A16：获取报道相关反应的文献，推荐以下两种方式：

(1) 直接检索反应：绘制反应式。在绘制反应式时，可以使用原子标记工具，标记反应前后未发生变化的同一原子。例如：


CAS Draw
Enter a CAS Registry Number, SMILES, or InChI...
Drag the reaction arrow to specify reaction direction.
reactant
product
Molecular Formula: CHN (27.03) . CH3NO (45.04)
Zoom: 140%
OK
Cancel


CAS SciFinderⁿ
Reactions
Enter a query...
Edit
Return to Home
Structure Match
As Drawn (2)
Substructure (156K)
Similarity (23K)
Filter Behavior
Filter by
Exclude
Yield
90-100% (14K)
80-89% (17K)
70-79% (15K)
50-69% (22K)
30-49% (13K)
View All
Number of Steps
Non-Participating Functional Groups
Halide (40K)
Alkene (30K)
Ether (30K)
Phenyl halide (24K)
Cyclic alkene (23K)
Reactions (156,010)
References
Edit Drawing
Remove
Save And Alerts
Start Retrosynthetic Analysis
Formamide
By: Magill, P. L.
Industrial and Engineering Chemistry (1934), 26, 611-14 | Language: Undetermined, Database: CAplus
Full Text
Suppliers (4)
Suppliers (113)
Reaction Summary
Steps: 1
1.1 Reagents: Sulfuric acid
View Reaction Detail
Tandem Acceptorless Dehydrogenative Coupling-Decyanation under Nickel Catalysis

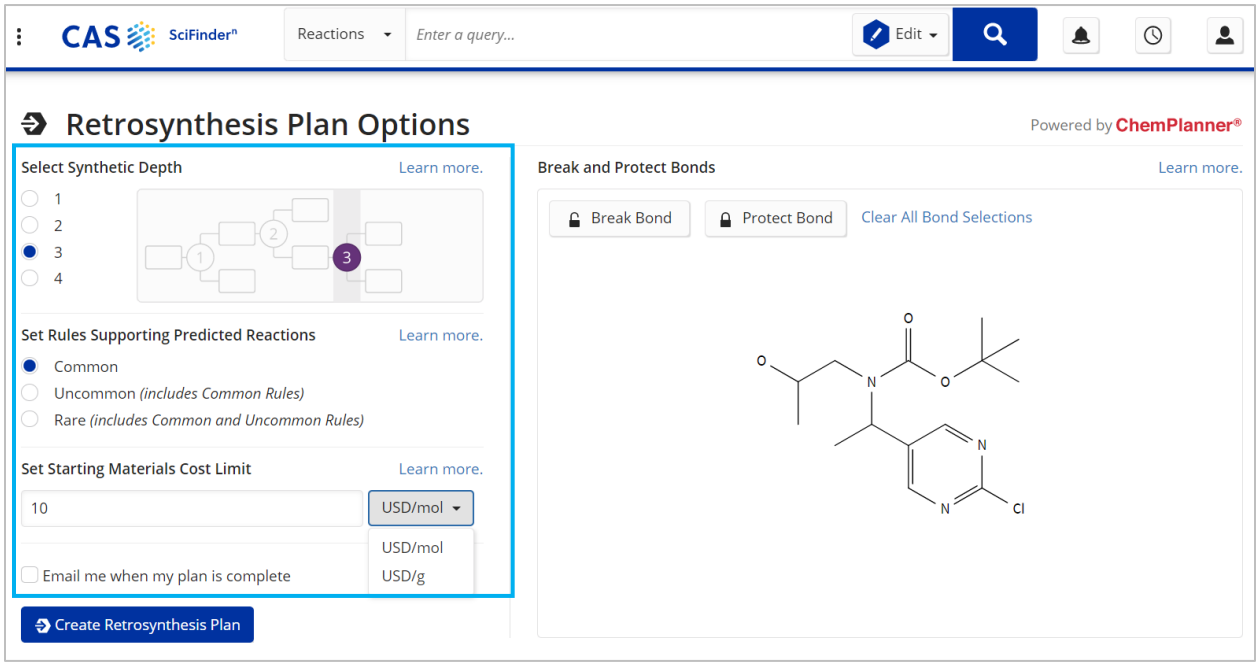
(2) References 检索：构建文献检索关键词，例如：reduction and (nitrile or cyano) 。然后在文献结果集页面左侧 Filter by: Substance Role 精炼主题词中的 nitrile 和 cyano 在文献中的研究角色；或通过 Concept 精炼文献研究核心点。

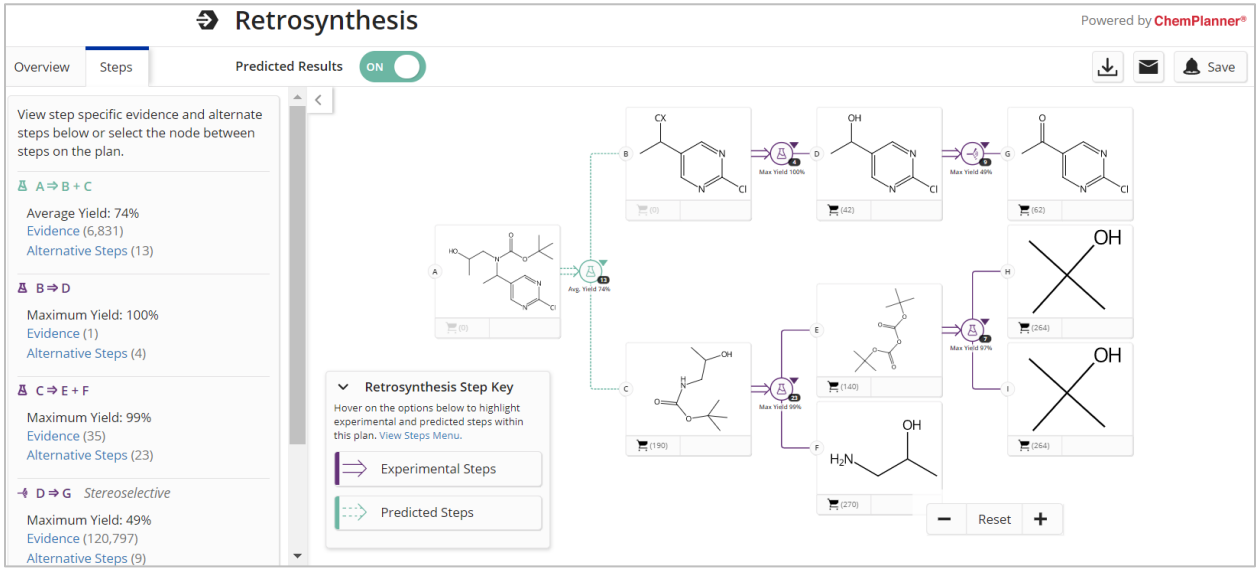


Q17：Retrosynthesis tool 在满足什么条件时即终止运算？

A17：在使用逆合成反应路线工具 Retrosynthesis 时，首先输入一个单一的，具体的结构；然后需要预设参数；最后获得结果。在自动运算结果时，系统会根据预设参数选项

（Retrosynthesis Plan Options）中的 Synthetic Depth，Rules 和 Starting Materials Cost Limit 来决定何时停止运算，最后的结果中包括最优路线和所有的替代路线（Alternative Steps）。





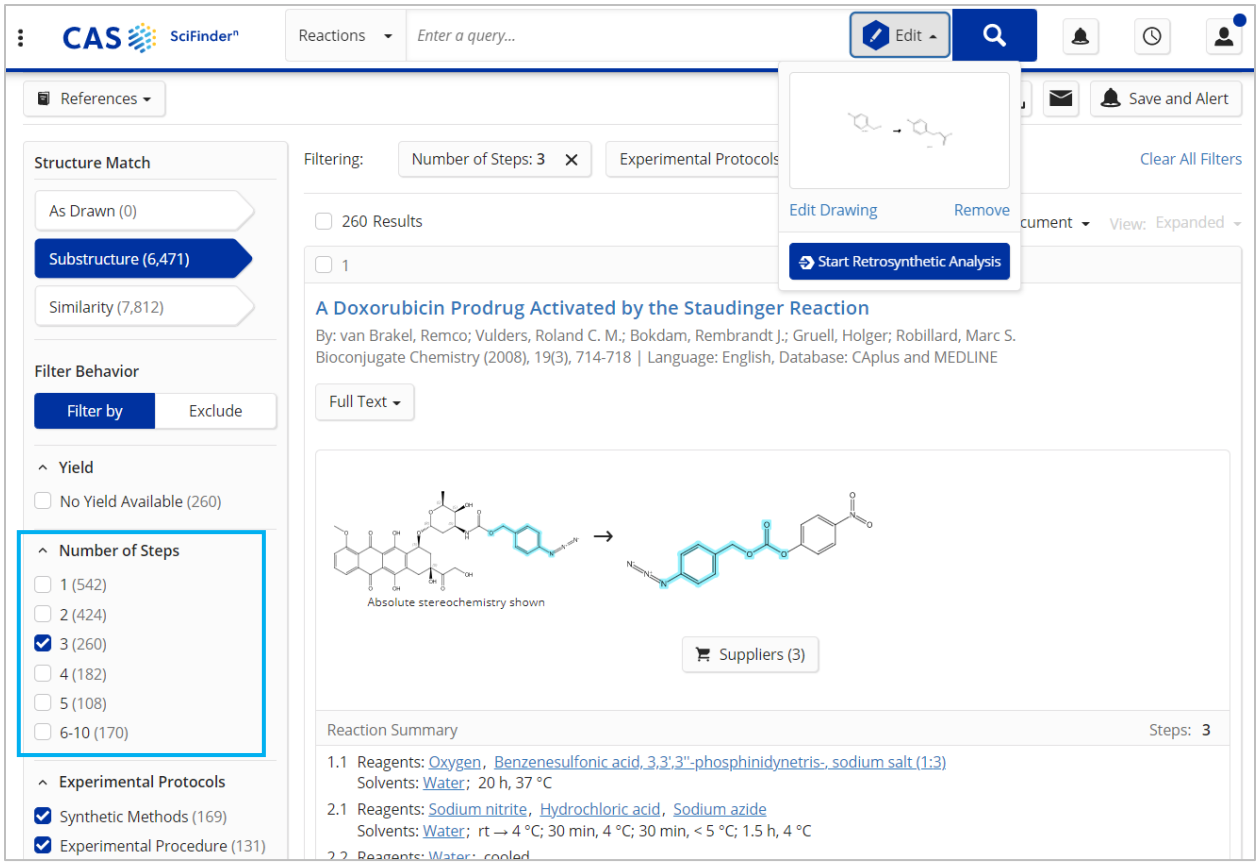
Q18：在获取到多步反应后，如何查看其实验详情？

A18：通过反应结果集页面左侧 Filter by 对反应步数和实验详情等进行筛选。

（1）通过 Filter by：Number of steps 选中反应步数，例如 3；

（2）通过 Filter by: Experimental Protocols 可获取具有反应详情的反应：选择 Synthetic Methods，可在反应结果中查看 CAS 科学家标引的实验详情；选择 Experimental Procedures 可查看来自原文的实验详情。

然后根据感兴趣的反应，点击 Reaction Summary 下面的 Experimental protocols, 即可查看多步反应的详情，包括多步反应路线、反应中的物质信息、反应步骤、产物表征数据和物质物理形态等信息。

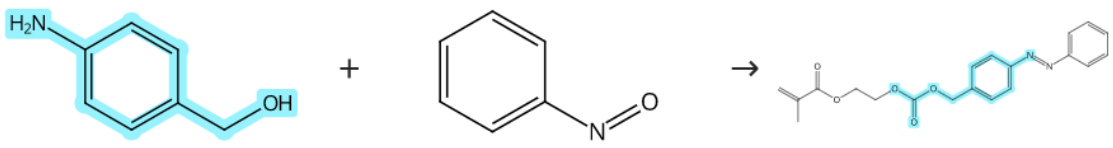


Enzyme-Triggered Cascade Reactions and Assembly of Abiotic Block Copolymers into Micellar Nanostructures

By: Rao, Jingyi; Hottinger, Christine; Khan, Anzar

Journal of the American Chemical Society (2014), 136(16), 5872-5875 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE

Full Text ▾ View 2 Related Reactions



Suppliers (101) Suppliers (57)

Reaction Summary Steps: 3

1.1 Solvents: Acetic acid; 15 min, rt; 3 h, rt; 30 min, cooled

2.1 Reagents: Triethylamine
Solvents: Tetrahydrofuran; 2 h, rt

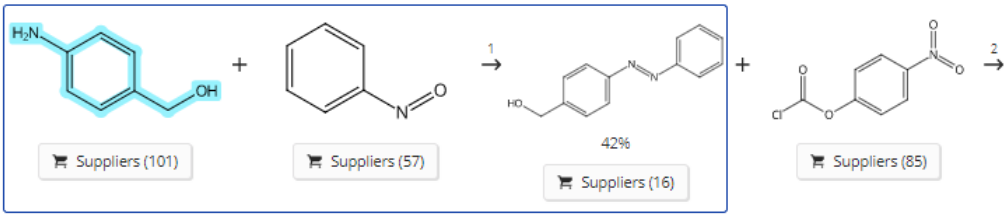
3.1 Reagents: 4-(Dimethylamino)pyridine
Solvents: Dichloromethane; 16 h, rt

View Reaction Detail Experimental Protocols

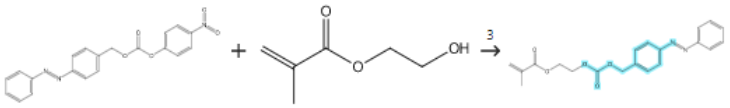
Reaction Detail

Save

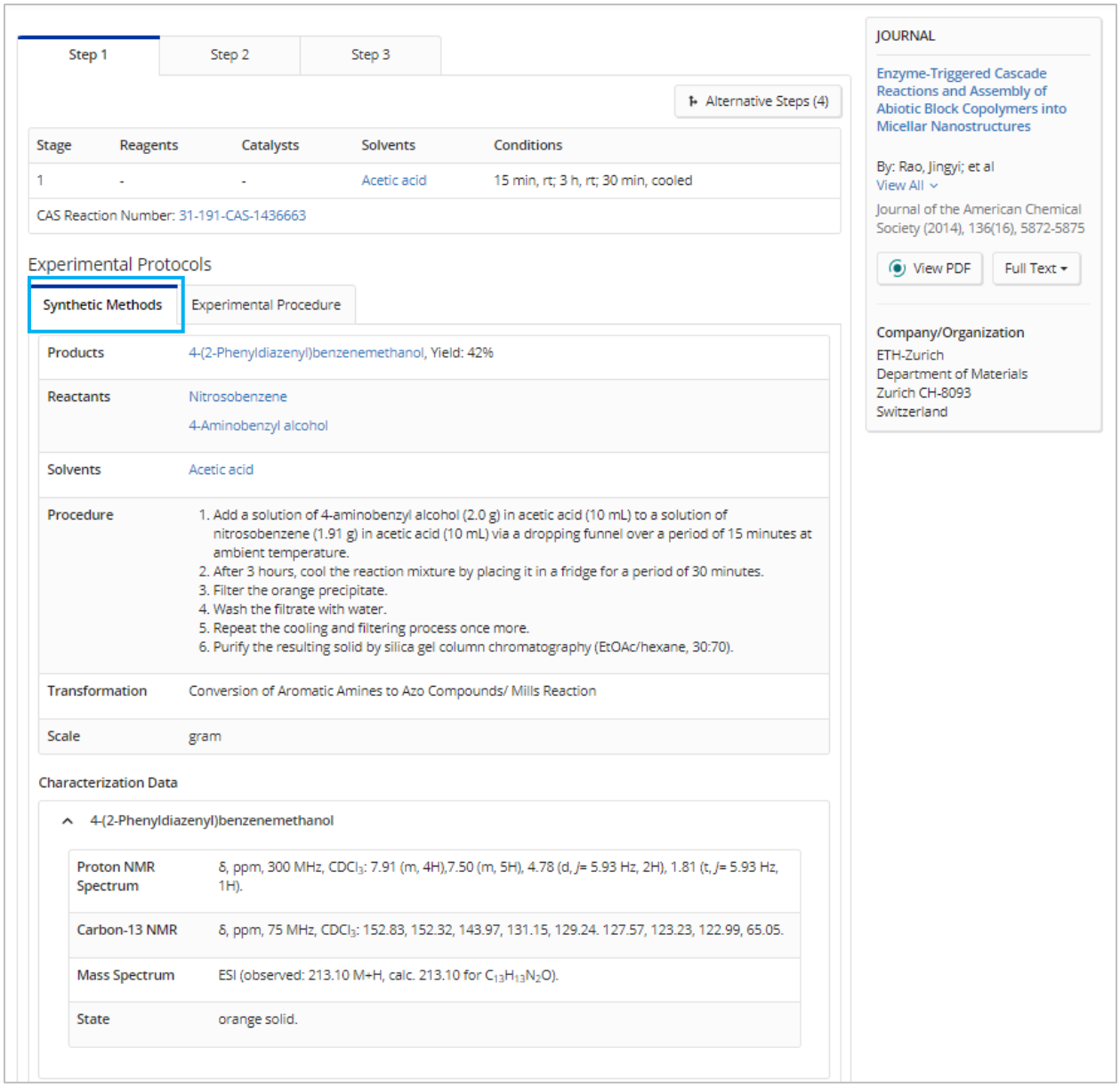
Steps: 3



Suppliers (101) Suppliers (57) 42% Suppliers (16) Suppliers (85)



52% Suppliers (77) 72%



Step 1 | Step 2 | Step 3

Alternative Steps (4)

Stage	Reagents	Catalysts	Solvents	Conditions
1	-	-	Acetic acid	15 min, rt; 3 h, rt; 30 min, cooled

CAS Reaction Number: 31-191-CAS-1436663

Experimental Protocols

Synthetic Methods | Experimental Procedure

Products	4-(2-Phenyldiazenyl)benzenemethanol, Yield: 42%
Reactants	Nitrosobenzene 4-Aminobenzyl alcohol
Solvents	Acetic acid
Procedure	1. Add a solution of 4-aminobenzyl alcohol (2.0 g) in acetic acid (10 mL) to a solution of nitrosobenzene (1.91 g) in acetic acid (10 mL) via a dropping funnel over a period of 15 minutes at ambient temperature. 2. After 3 hours, cool the reaction mixture by placing it in a fridge for a period of 30 minutes. 3. Filter the orange precipitate. 4. Wash the filtrate with water. 5. Repeat the cooling and filtering process once more. 6. Purify the resulting solid by silica gel column chromatography (EtOAc/hexane, 30:70).
Transformation	Conversion of Aromatic Amines to Azo Compounds/ Mills Reaction
Scale	gram

Characterization Data

4-(2-Phenyldiazenyl)benzenemethanol

Proton NMR Spectrum	δ, ppm, 300 MHz, $CDCl_3$: 7.91 (m, 4H),7.50 (m, 5H), 4.78 (d, *J*= 5.93 Hz, 2H), 1.81 (t, *J*= 5.93 Hz, 1H).
Carbon-13 NMR	δ, ppm, 75 MHz, $CDCl_3$: 152.83, 152.32, 143.97, 131.15, 129.24. 127.57, 123.23, 122.99, 65.05.
Mass Spectrum	ESI (observed: 213.10 M+H, calc. 213.10 for $C_{13}H_{13}N_2O$).
State	orange solid.

JOURNAL

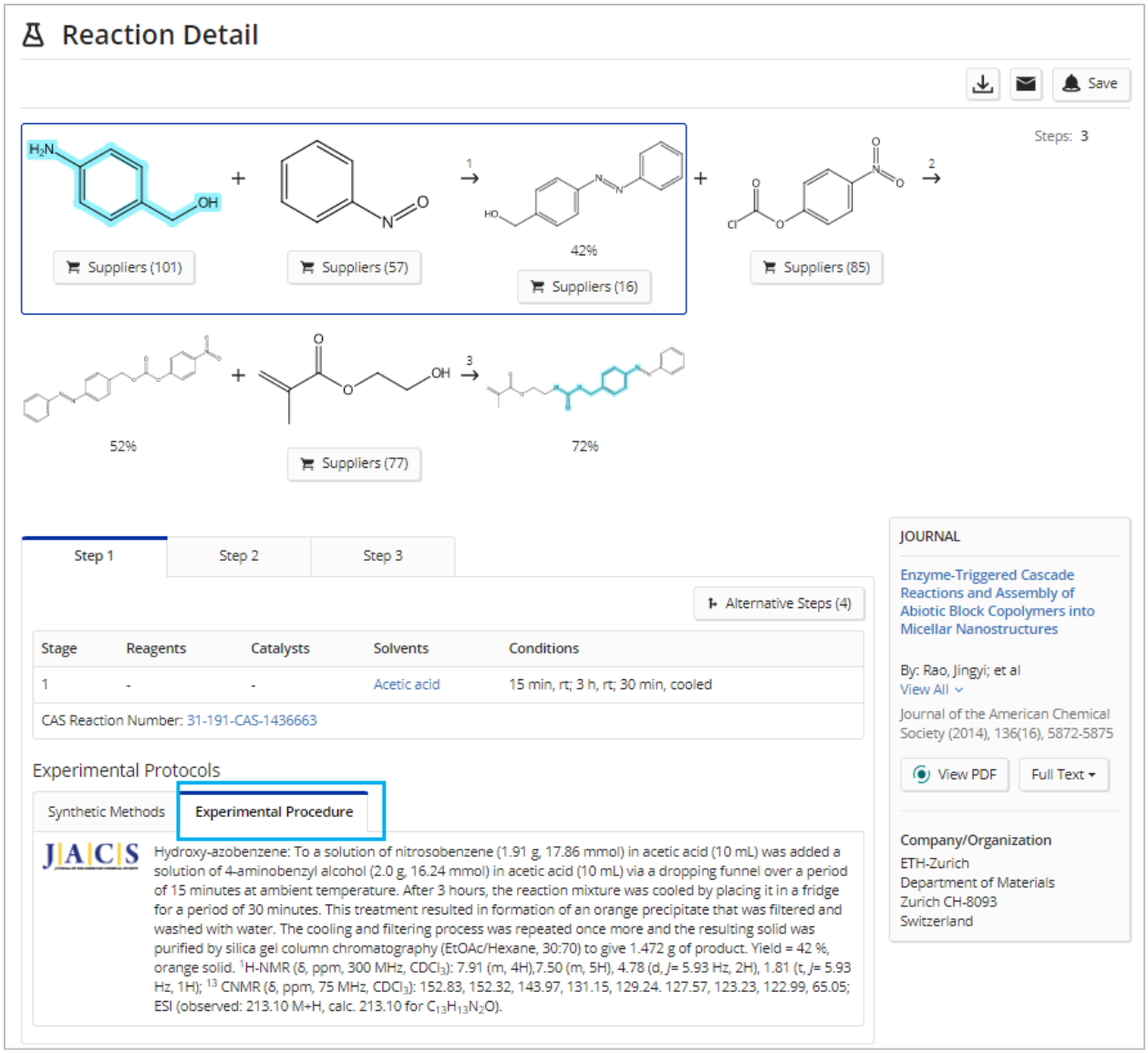
Enzyme-Triggered Cascade Reactions and Assembly of Abiotic Block Copolymers into Micellar Nanostructures

By: Rao, Jingyi; et al
View All

Journal of the American Chemical Society (2014), 136(16), 5872-5875

View PDF | Full Text

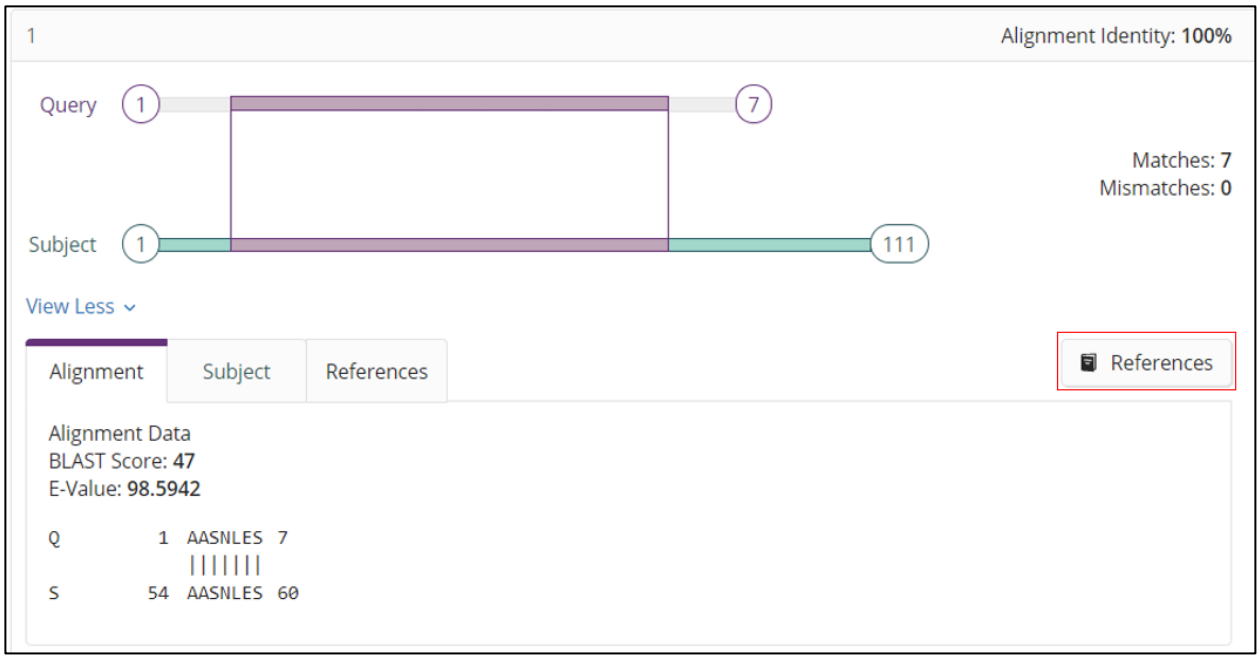
Company/Organization
ETH-Zurich
Department of Materials
Zurich CH-8093
Switzerland


Reaction Detail
Save
Steps: 3
Suppliers (101)
Suppliers (57)
42%
Suppliers (16)
Suppliers (85)
52%
Suppliers (77)
72%
Step 1
Step 2
Step 3
Alternative Steps (4)
Stage
Reagents
Catalysts
Solvents
Conditions
1
-
-
Acetic acid
15 min, rt; 3 h, rt; 30 min, cooled
CAS Reaction Number: 31-191-CAS-1436663
Experimental Protocols
Synthetic Methods
Experimental Procedure
Hydroxy-azobenzene: To a solution of nitrosobenzene (1.91 g, 17.86 mmol) in acetic acid (10 mL) was added a solution of 4-aminobenzyl alcohol (2.0 g, 16.24 mmol) in acetic acid (10 mL) via a dropping funnel over a period of 15 minutes at ambient temperature. After 3 hours, the reaction mixture was cooled by placing it in a fridge for a period of 30 minutes. This treatment resulted in formation of an orange precipitate that was filtered and washed with water. The cooling and filtering process was repeated once more and the resulting solid was purified by silica gel column chromatography (EtOAc/Hexane, 30:70) to give 1.472 g of product. Yield = 42 %, orange solid. 1H-NMR (δ, ppm, 300 MHz, CDCl3): 7.91 (m, 4H),7.50 (m, 5H), 4.78 (d, J= 5.93 Hz, 2H), 1.81 (t, J= 5.93 Hz, 1H); 13 CNMR (δ, ppm, 75 MHz, CDCl3): 152.83, 152.32, 143.97, 131.15, 129.24. 127.57, 123.23, 122.99, 65.05; ESI (observed: 213.10 M+H, calc. 213.10 for C13H13N2O).
JOURNAL
Enzyme-Triggered Cascade Reactions and Assembly of Abiotic Block Copolymers into Micellar Nanostructures
By: Rao, Jingyi; et al
View All
Journal of the American Chemical Society (2014), 136(16), 5872-5875
View PDF
Full Text
Company/Organization
ETH-Zurich
Department of Materials
Zurich CH-8093
Switzerland

序列检索

Q1：Biosequences 检索时，如何获取来自 CAS SciFinder^n 的相关文献?

A1：点击序列展示页面右边的 References，即可获得来自 SciFinder^n 的相关文献，如下图所示。

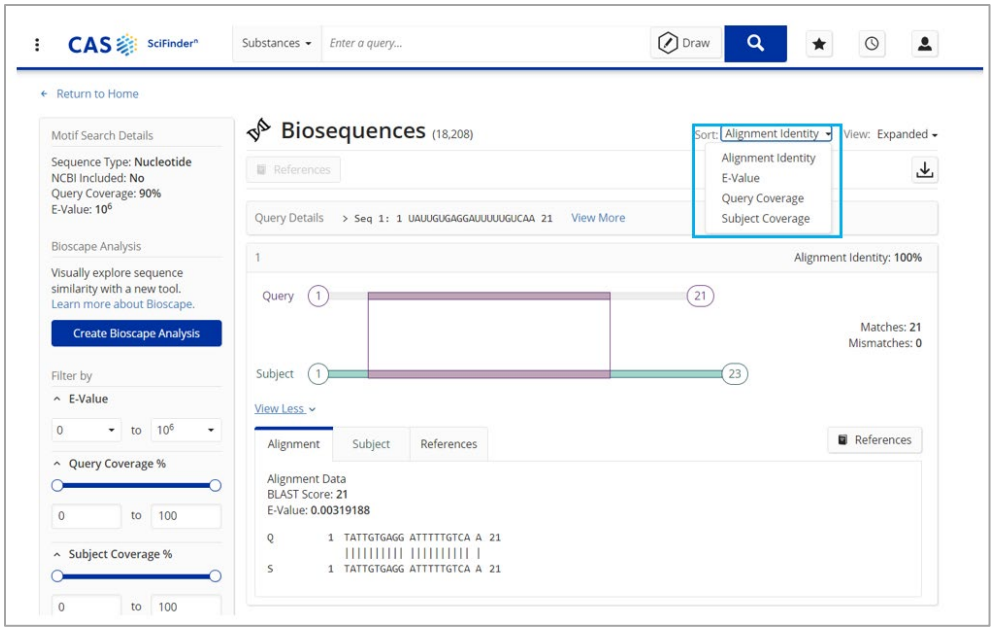


Q2：CAS SciFinder^n 中 Biosequences Search 数据的来源?

A2：CAS SciFinder^n 中 Biosequences Search 数据来自专利、期刊、NCBI 等。

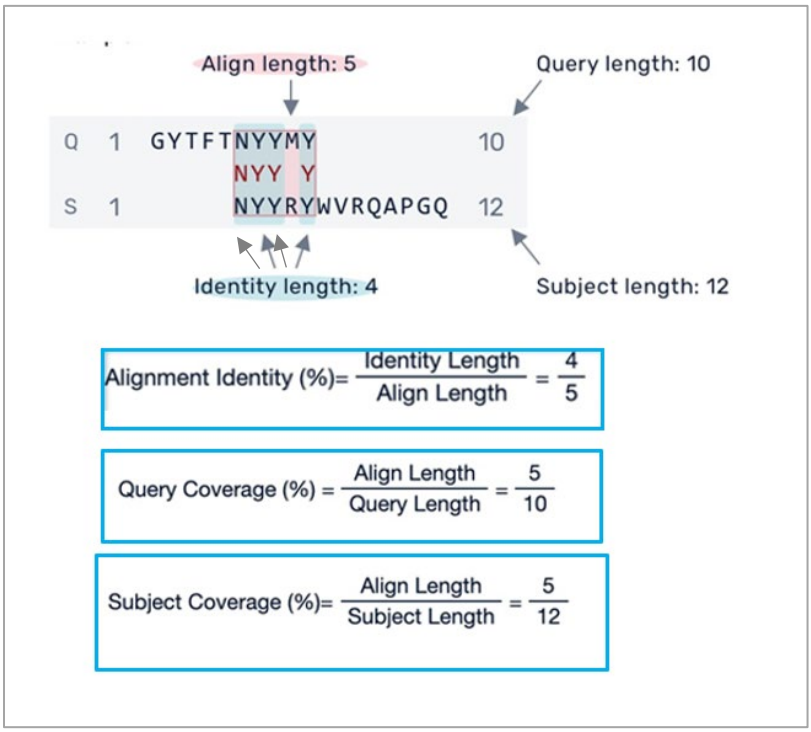
Q3：如何优先展示生物序列检索结果中 Subject Coverage%高的结果?

A3：点击 Biosequences 结果集页面右上侧 Sort 下拉菜单，选择 Subject Coverage，序列结果将按照 Subject Coverage%从高到低排列。如下图：



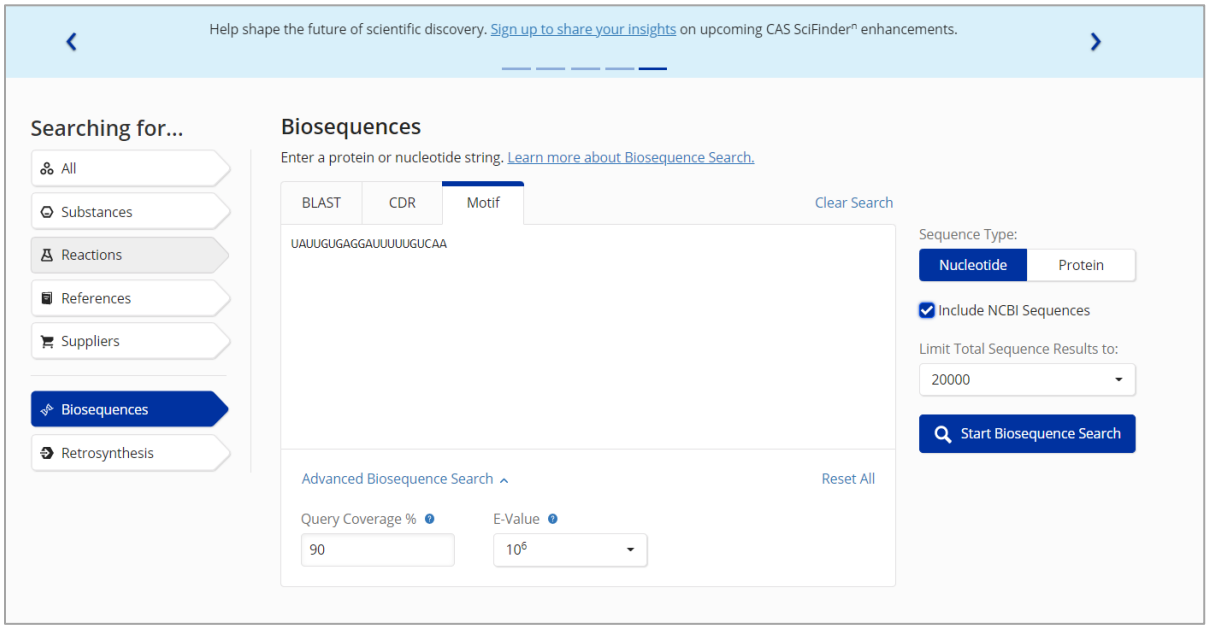
Q4：Biosequences Search 中 Query Coverage%, Subject Coverage%和 Alignment identity%是如何计算的?

A4：请参见如下示意图

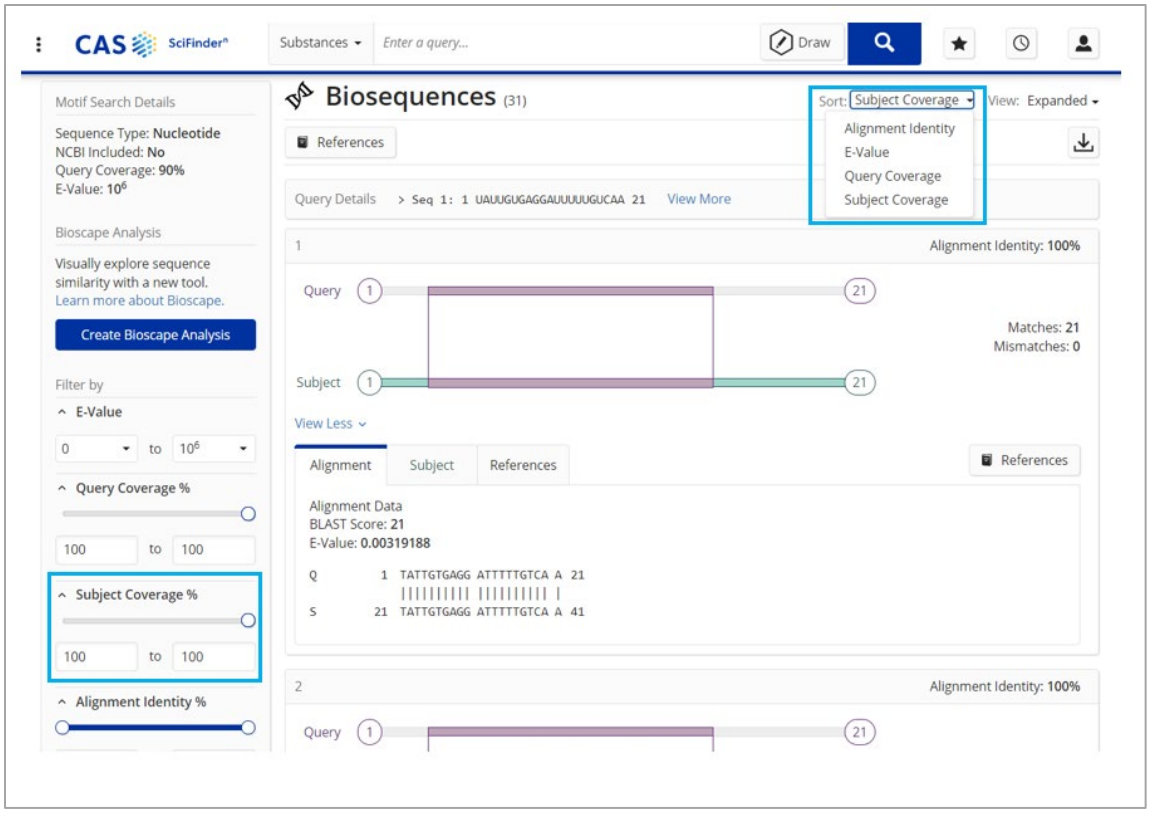


Q5：如何输入序列获取其相关信息？

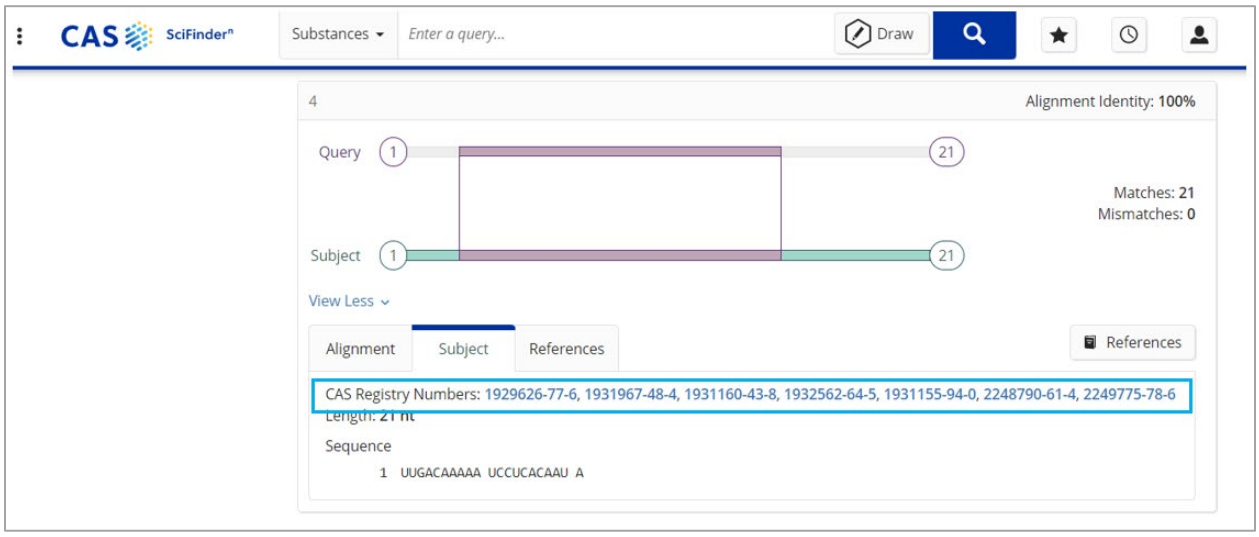
A5：点击 Biosequences，根据检索需要，可选择 BLAST、CDR、Mofit 输入序列，然后进行检索。

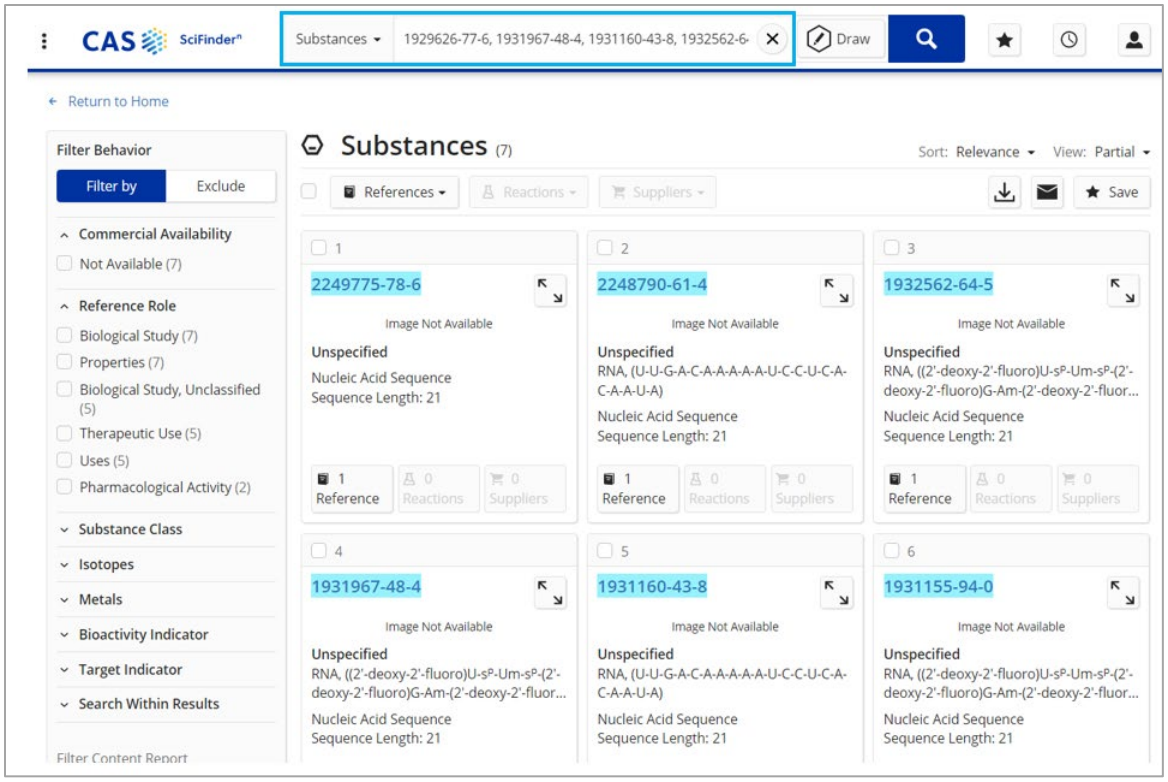


如果需要检索的序列长度和输入的序列一致，可在结果左侧将 Subject Coverage 设置为 100%，或者通过右上角 Sort: Subject Coverage 按照 Subject Coverage%从高至低重新排序。点击结果中的 Subject 查看目标序列（包括修饰和非修饰序列）及对应的 CAS RN。



将下面的 CAS RN 拷贝至 Substances 检索输入框，进行物质检索，可获得修饰序列的物质结果。





点击 CAS RN 查看序列详情。

Sequence Details

Sequence 1: Length 21; RNA; linear

1	auggaauacu	cuugguuact	t	-	-

Sequence 2: Length 21; RNA; linear

1	guaaccaaga	guauuccaut	t	-	-

Sequence Modifications

Type	Location	Description
modified base	strand 1 uridine-7	um
modified base	strand 1 uridine-17	um
modified base	strand 2 uridine-2	um
modified base	strand 2 cytidine-5	cm
modified base	strand 2 cytidine-6	cm
modified base	strand 2 uridine-12	um
modified base	strand 2 uridine-14	um
modified base	strand 2 uridine-15	um
modified base	strand 2 cytidine-16	cm
modified base	strand 2 cytidine-17	cm
modified base	strand 2 uridine-19	um

Target Indicators

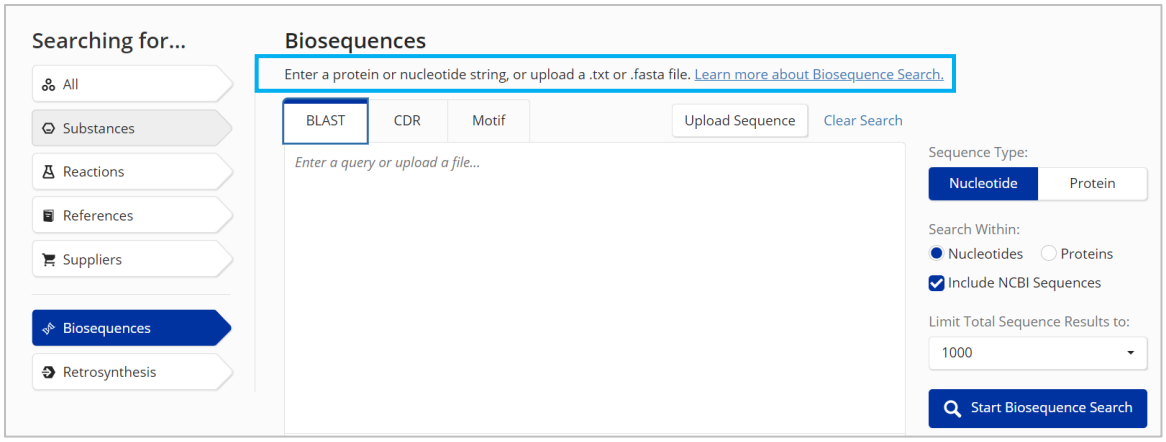
Regulatory Information

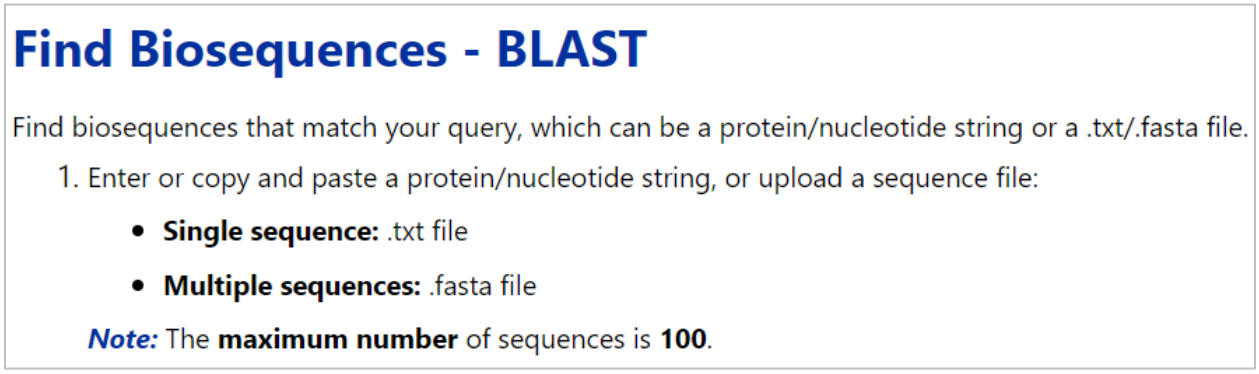
Additional Details

Q6：如何将.txt 文件中的多条序列导入 Biosequences 进行序列检索?

A6：利用 CAS SciFinder^{n} 中的 Biosequences 检索序列时，可直接输入待检索序列或以.txt/.fasta 文件上传待检索序列（注：通过.txt 文件可上传单条序列；.fasta 文件可上传多条序列）。在 Biosequences 中最多可同时检索 100 条序列。

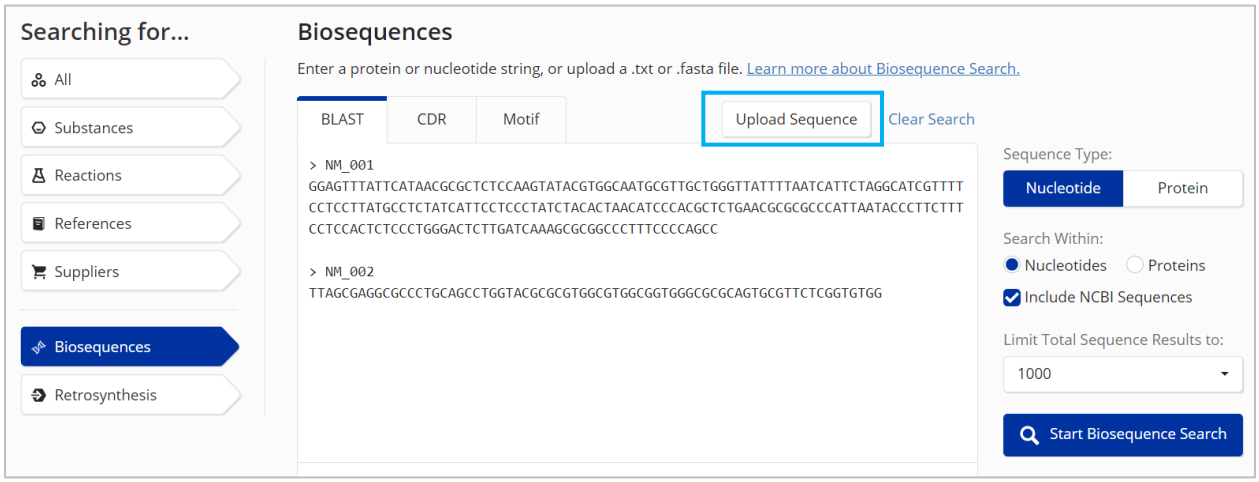
通过.txt 或.fasta 格式上传待检索序列操作方法如下所示：





如果.txt 文件中含有多条序列，可以先为序列添加格式和序号（下图示例），然后将文件后缀改为.fasta, 就可以转化为含有多条序列的.fasta 文件。点击 upload sequence 上传.fasta 文件，完成多条序列的上传。上传后，点击 Start Biosequence Search 即开始序列检索。

```
>NM_001

GGAGTTTATTCATAACGCGCTCTCCAAGTATACGTGGCAATGCGTTGCTGGGTTATT
TTAATCATTCTAG

GCATCGTTTTCCTCCTTATGCCTCTATCATTCCTCCCTATCTACACTAACATCCCACG
CTCTGAACGCGC

GCCCATTAATACCCTTCTTTCCTCCACTCTCCCTGGGACTCTTGATCAAAGCGCGGCC
CTTTCCCCAGCC

>NM_002

TTAGCGAGGCGCCCTGCAGCCTGGTACGCGCGTGGCGTGGCGGTGGGCGCGCAGTG
CGTTCTCGGTGTGG

AGGGCAGCTGTTCCGCCTGCGATGATTTATACTCACAGGACAAGGATGCGGTTTGTC
AAACAGTACTGCT
```



Q7：在 Biosequences 中使用.fasta 文件上传多条序列后，在检索时，这些序列间的运算逻辑是 OR 还是 AND?

A7：在 Biosequences 中 通过.fasta 上传多条序列后，在检索时这些序列间的运算逻辑为 OR。

Q8：通过 Biosequences 的 BLAST 对核酸序列进行检索时，为什么查询序列是 TACTTGGAGAGCATCACTG，而检索结果 Subject 中会出现和查询序列不一样的目标序列 CAGUGAUGCUCUCCAAGUA 呢?

A8：通过 Biosequences 的 BLAST 进行核酸序列检索时，会同时检索 DNA, RNA 及其（反向）互补链。另外，CAS 科学家在标引序列时，也会标引 DNA 和 RNA 的混体，T 和 U 等同，所以在检索结果中会出现 DNA、RNA 的（反向）互补链。

在本例中，BLAST 检索时查询的核苷酸序列是：TACTTGGAGAGCATCACTG，其反向链是 GTCACTACGA GAGGTTCAT， T 和 U 互换后，即为 GUCACUACGA GAGGUUCAU。BLAST 比对时，其互补链（complimentary strands）为：CAGUGAUGCUCUCCAAGUA，所以在 Subject 目标序列中会出现这条序列结果。

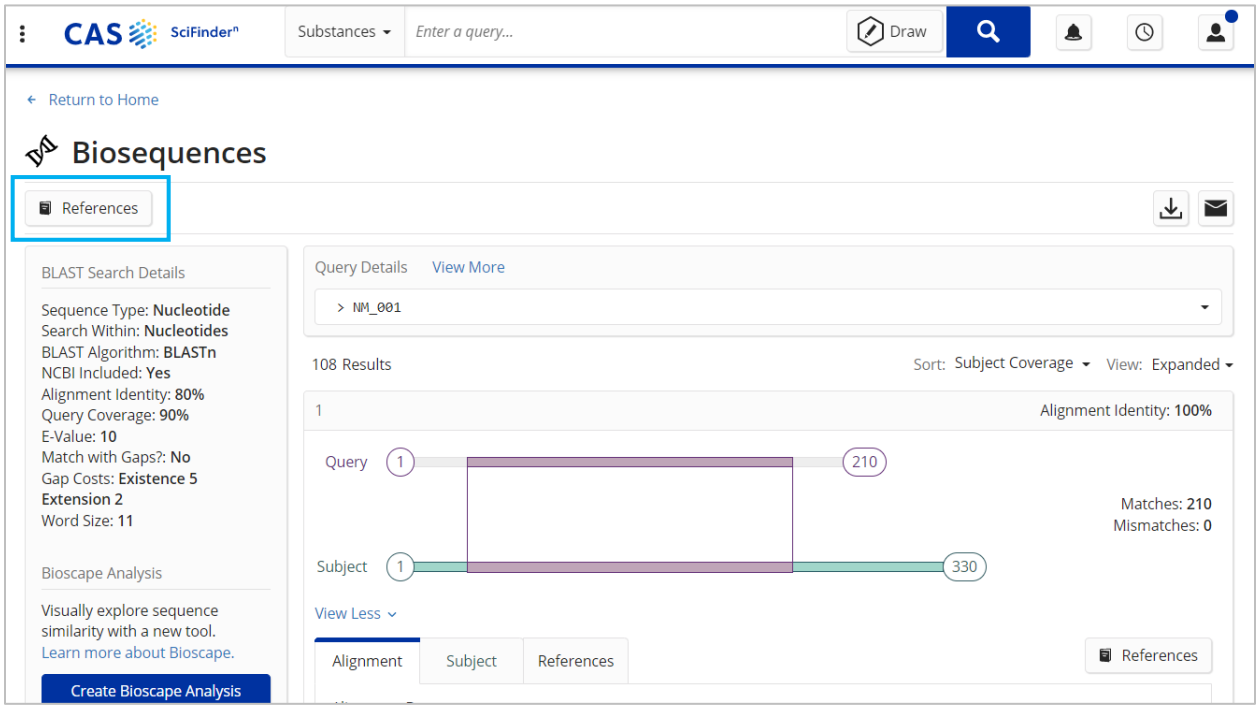
5’ CAGUGAUGCU CUCCAAGUA 3’

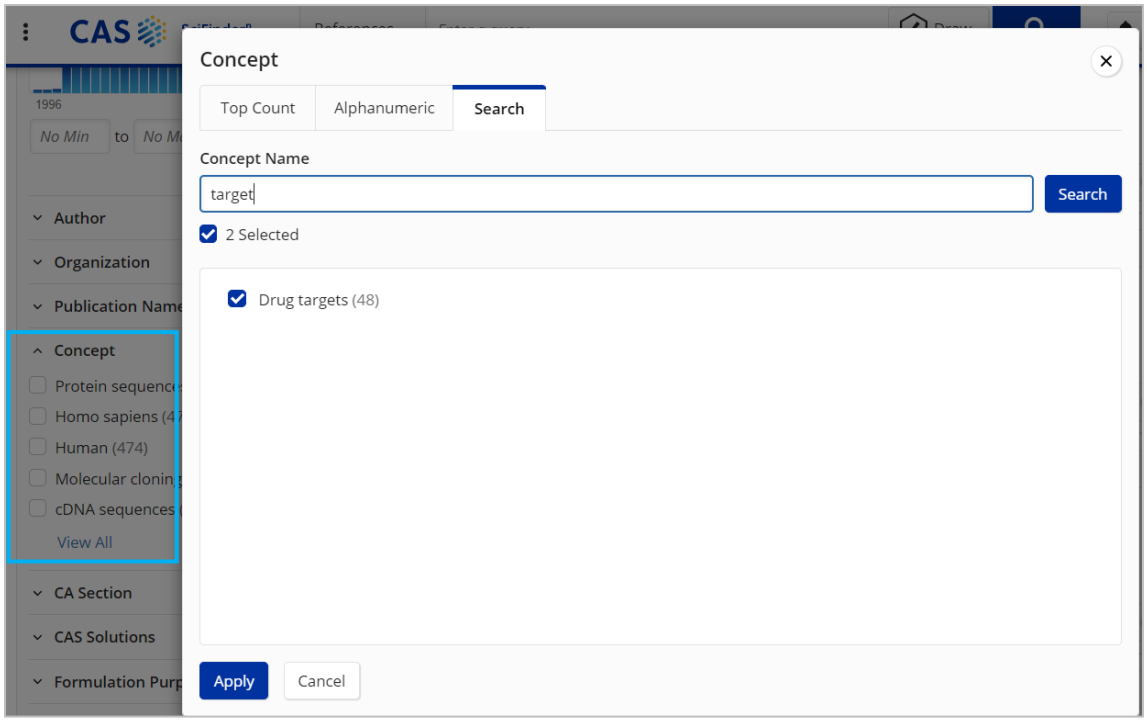
| | | | | | | | | | | | | | | | | | |

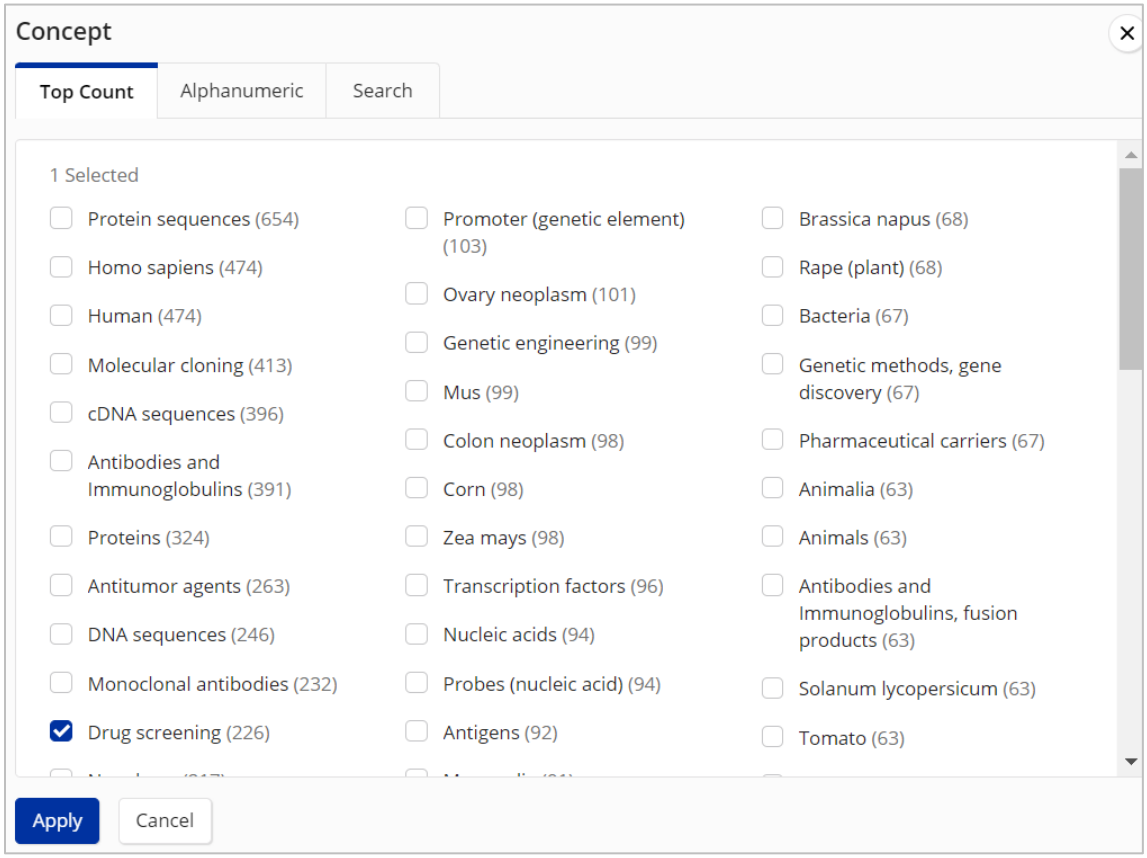
3’ GUCACUACGA GAGGUUCAU 5’

Q9：如何在 Biosequences 检索结果中获取对应的靶点研究信息？

A9：在 Biosequences 结果中，点击目标序列对应的 References 获取报道该序列的文献。然后在文献结果集页面左侧点击 Filter by: Concept 下面的 View All，打开 Concept 列表，浏览或筛选与靶点相关的研究点。如需快速筛选，则可点击 Search，在输入 drug target, drug screening 等关键词后，点击 Apply，即可获得和靶点相关的研究文献。




CAS
1996
No Min
to
Author
Organization
Publication Name
Concept
Protein sequence
Homo sapiens (47
Human (474)
Molecular clonin
cDNA sequences
View All
CA Section
CAS Solutions
Formulation Purp
Concept
Top Count
Alphanumeric
Search
Concept Name
target
Search
2 Selected
Drug targets (48)
Apply
Cancel


Concept
Top Count
Alphanumeric
Search
1 Selected
Protein sequences (654)
Homo sapiens (474)
Human (474)
Molecular cloning (413)
cDNA sequences (396)
Antibodies and Immunoglobulins (391)
Proteins (324)
Antitumor agents (263)
DNA sequences (246)
Monoclonal antibodies (232)
Drug screening (226)
Promoter (genetic element) (103)
Ovary neoplasm (101)
Genetic engineering (99)
Mus (99)
Colon neoplasm (98)
Corn (98)
Zea mays (98)
Transcription factors (96)
Nucleic acids (94)
Probes (nucleic acid) (94)
Antigens (92)
Brassica napus (68)
Rape (plant) (68)
Bacteria (67)
Genetic methods, gene discovery (67)
Pharmaceutical carriers (67)
Animalia (63)
Animals (63)
Antibodies and Immunoglobulins, fusion products (63)
Solanum lycopersicum (63)
Tomato (63)
Apply
Cancel

Q10：CAS Biosequences 中是否包含专利全文中表格里的序列、专利序列表中的序列?

A10：CAS Biosequences 包含来自期刊、专利和 NCBI 中的序列。其中，专利中的序列涵盖权利要求书、说明书、全文表格，以及专利申请人向专利授权机构提交的序列表中的序列等。

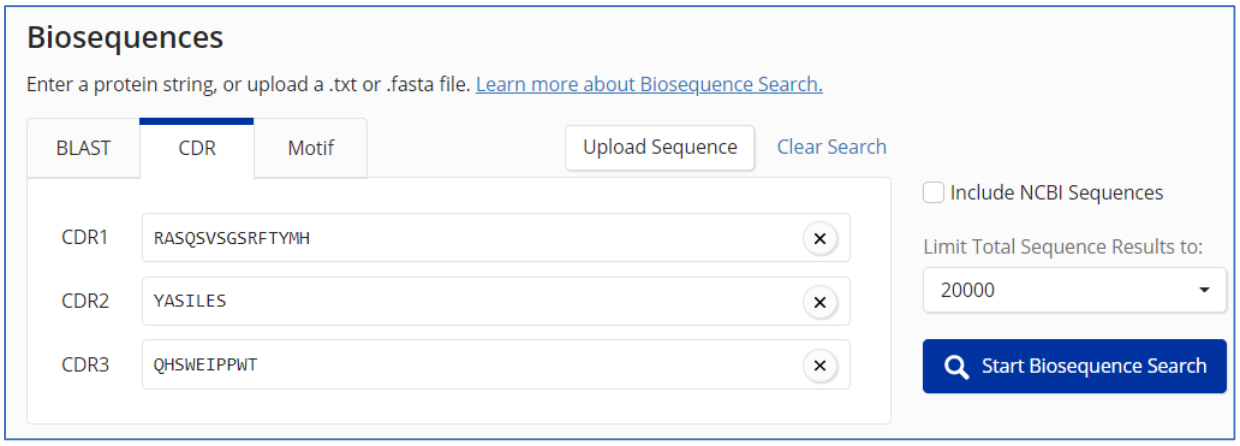
Q11：同时用 3 个 CDR 检索抗体序列，获得的包含 2 个或 3 个 CDR 的序列结果是在同一条链上吗?

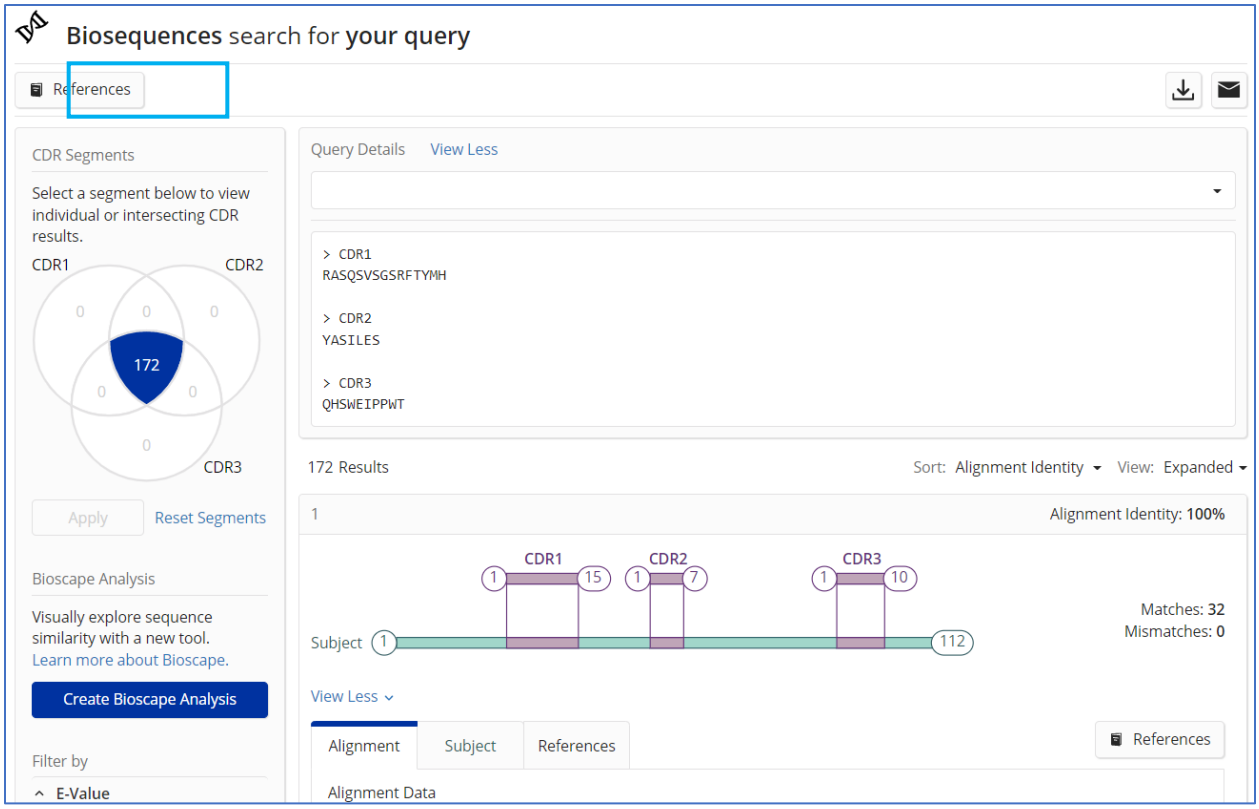
A11：是的。

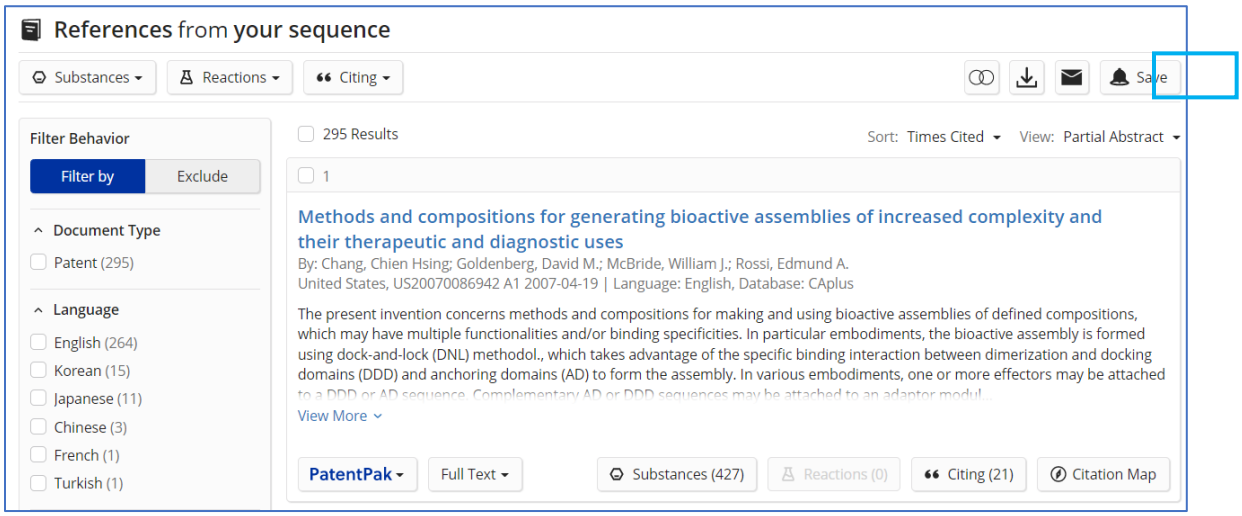
Q12：如何获取跟抗体轻链和重链中 6 个 CDR 序列均相关的专利?

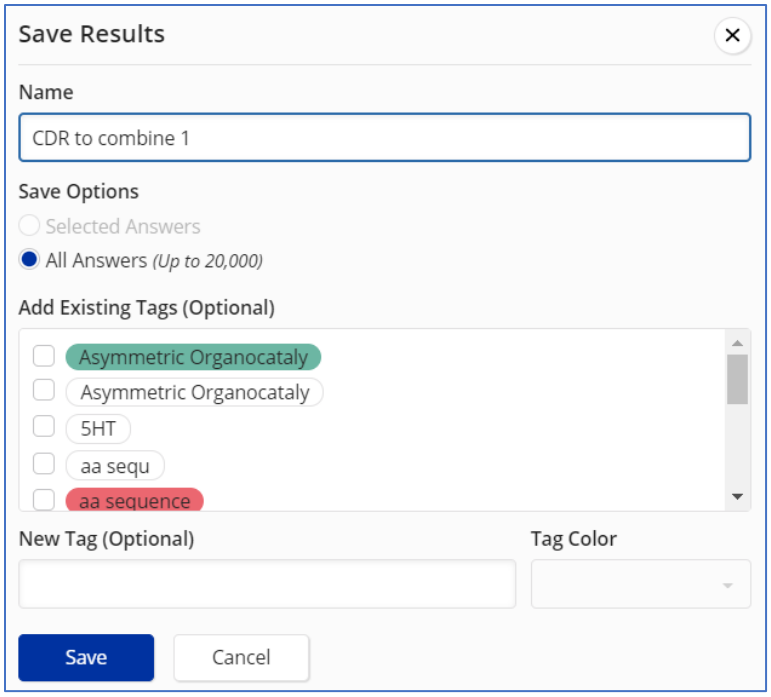
A12：分四步完成，以下为详细的操作过程：

第一步：输入抗体其中一条链中的 3 个 CDR， 获取 3 个 CDR 均被包含的序列结果集，再点击序列结果集页面左上角 References 按钮，获取报道这些序列的专利文献，点击文献结果集右上角 Save 按钮，保存结果集并命名，如：此例命名为“CDR to combine 1”。

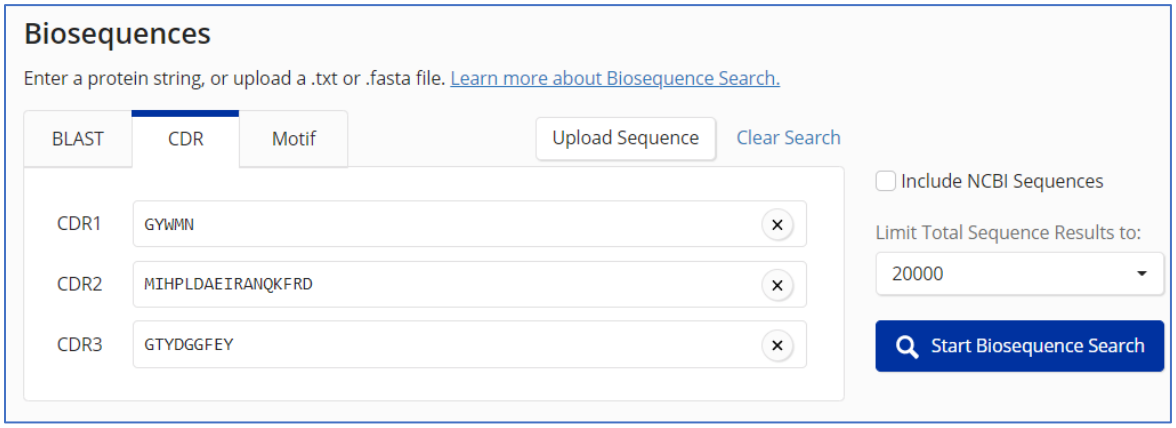


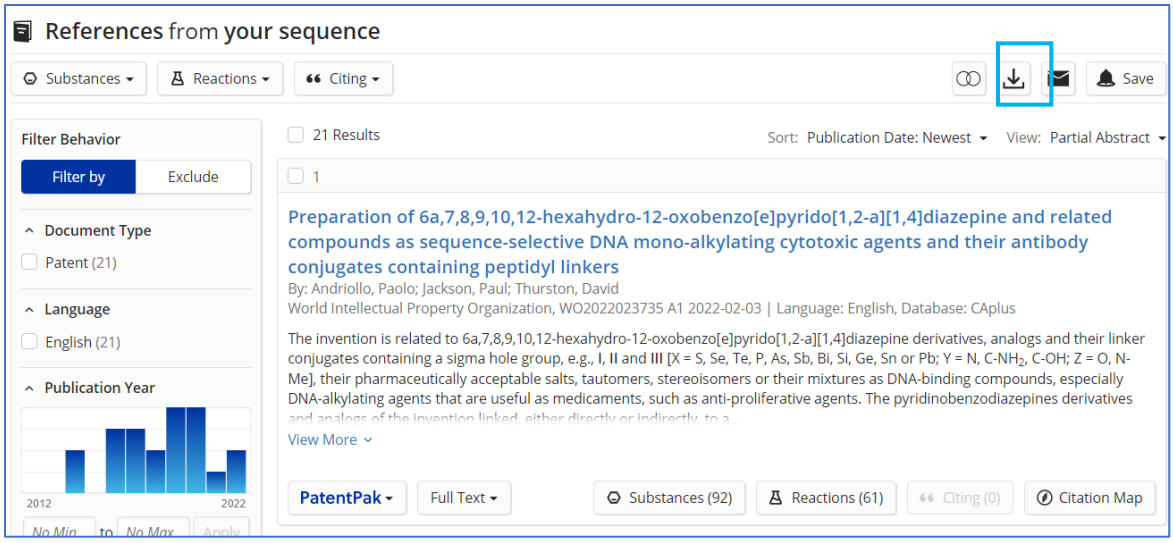

Biosequences search for your query
References
CDR Segments
Select a segment below to view individual or intersecting CDR results.
CDR1
CDR2
CDR3
172
Apply
Reset Segments
Bioscape Analysis
Visually explore sequence similarity with a new tool.
Learn more about Bioscape.
Create Bioscape Analysis
Filter by
E-Value
Query Details
View Less
> CDR1
RASQSVSGSRFTYMH
> CDR2
YASILES
> CDR3
QHSWEIPPWT
172 Results
Sort: Alignment Identity
View: Expanded
1
Alignment Identity: 100%
CDR1
CDR2
CDR3
Subject
112
Matches: 32
Mismatches: 0
View Less
Alignment
Subject
References
References
Alignment Data


References from your sequence
Substances
Reactions
Citing
Save
Filter Behavior
Filter by
Exclude
Document Type
Patent (295)
Language
English (264)
Korean (15)
Japanese (11)
Chinese (3)
French (1)
Turkish (1)
295 Results
Sort: Times Cited
View: Partial Abstract
1
Methods and compositions for generating bioactive assemblies of increased complexity and their therapeutic and diagnostic uses
By: Chang, Chien Hsing; Goldenberg, David M.; McBride, William J.; Rossi, Edmund A.
United States, US20070086942 A1 2007-04-19 | Language: English, Database: CAplus
The present invention concerns methods and compositions for making and using bioactive assemblies of defined compositions, which may have multiple functionalities and/or binding specificities. In particular embodiments, the bioactive assembly is formed using dock-and-lock (DNL) methodol., which takes advantage of the specific binding interaction between dimerization and docking domains (DDD) and anchoring domains (AD) to form the assembly. In various embodiments, one or more effectors may be attached
View More
PatentPak
Full Text
Substances (427)
Reactions (0)
Citing (21)
Citation Map

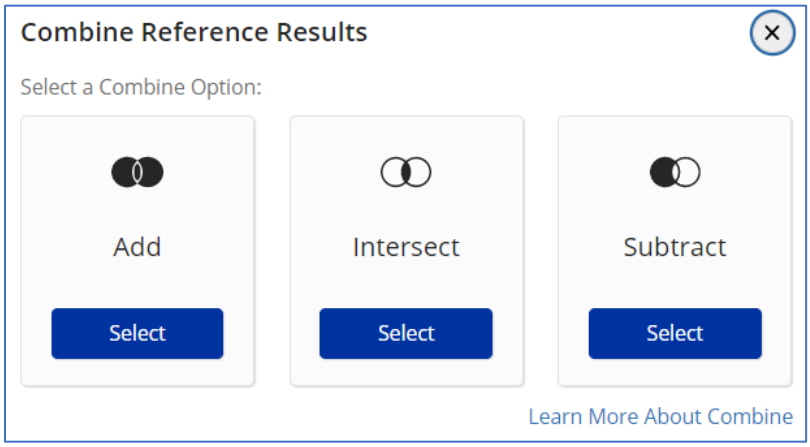


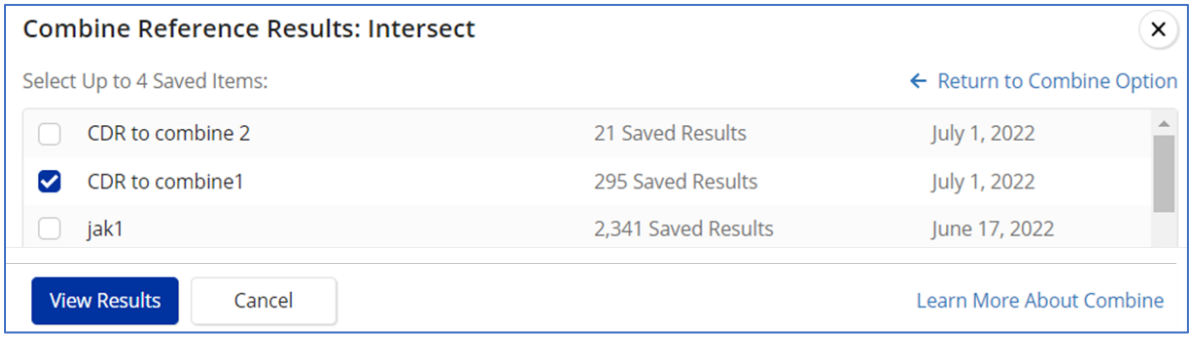
第二步： 输入抗体另一条链中 3 个 CDR， 同第一步的操作，获取 3 个 CDR 均被包含的序列结果集，再点击序列结果集页面左上角的 References 按钮，获取报道这些序列的专利文献。





第三步：在第二步的文献结果集页面，点击右上角 combine 按钮，选择合并方式，如：此例选取交集 Intersect；在弹出对话框中选勾选想要合并取交集的已保存文献结果集，如：此例选 “CDR to combine 1”。





第四步： 点击 View Results 按钮，查看跟抗体轻链和重链中 6 个 CDR 序列均相关的专利文献结果。

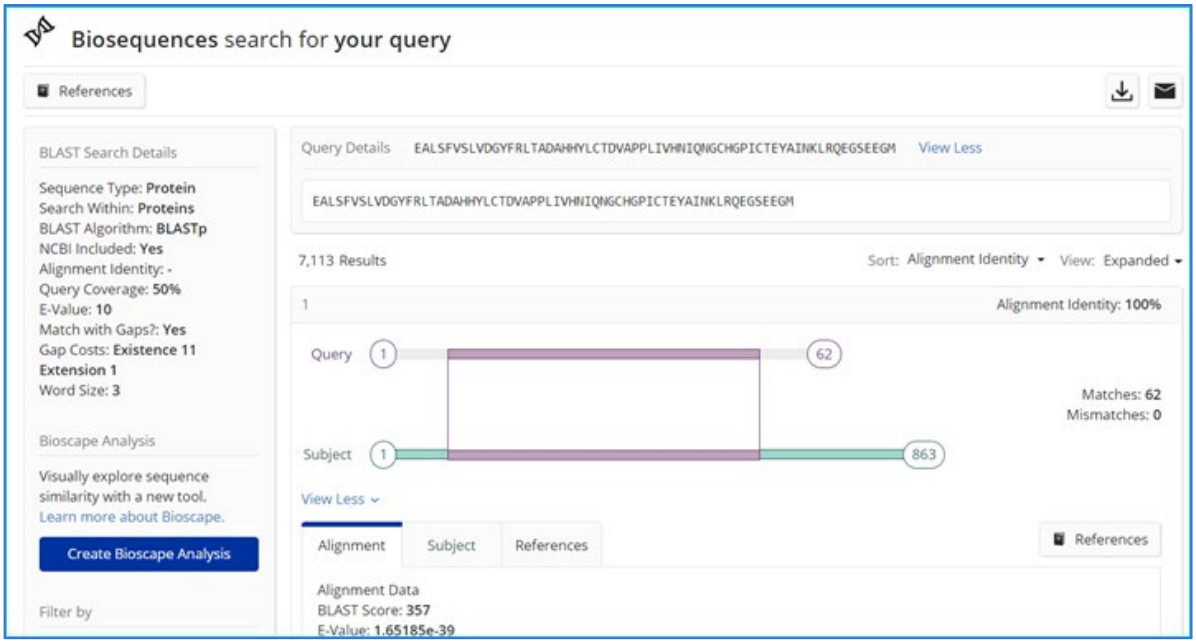
Q13：Bioscape 中可以展示指定目标公司的序列吗？

A13：可以。具体操作如下示例。

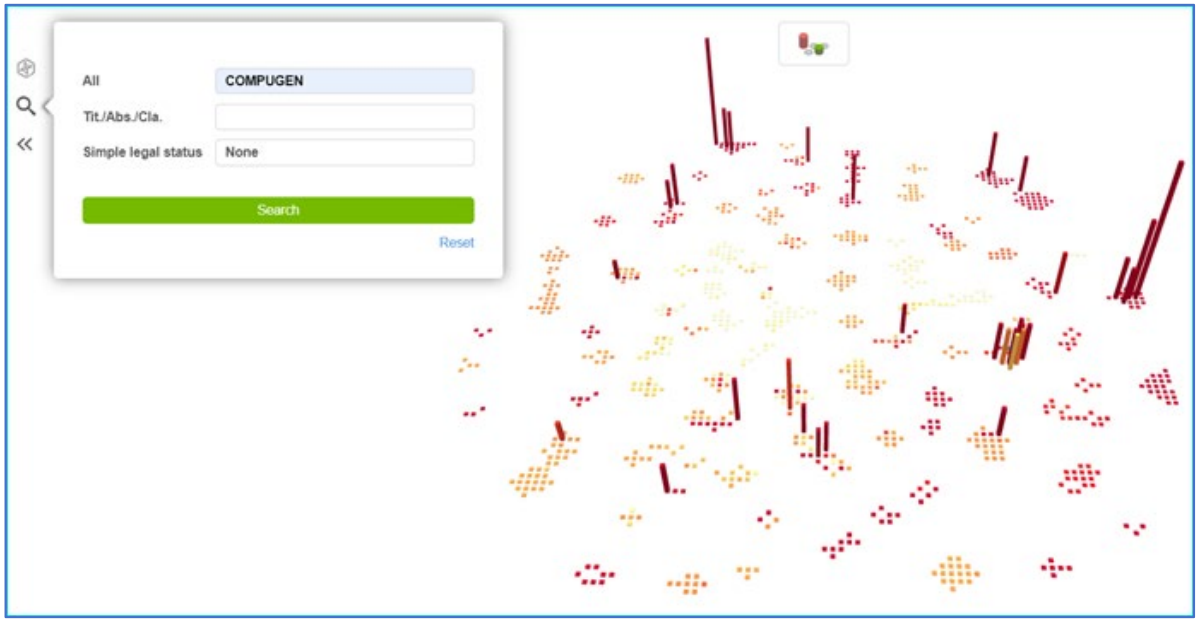
示例序列：

EALSFVSLVDGYFRLTADAHHYLCTDVAPPLIVHNIQNGCHGPICTEYAINKLRQEGSEEGM

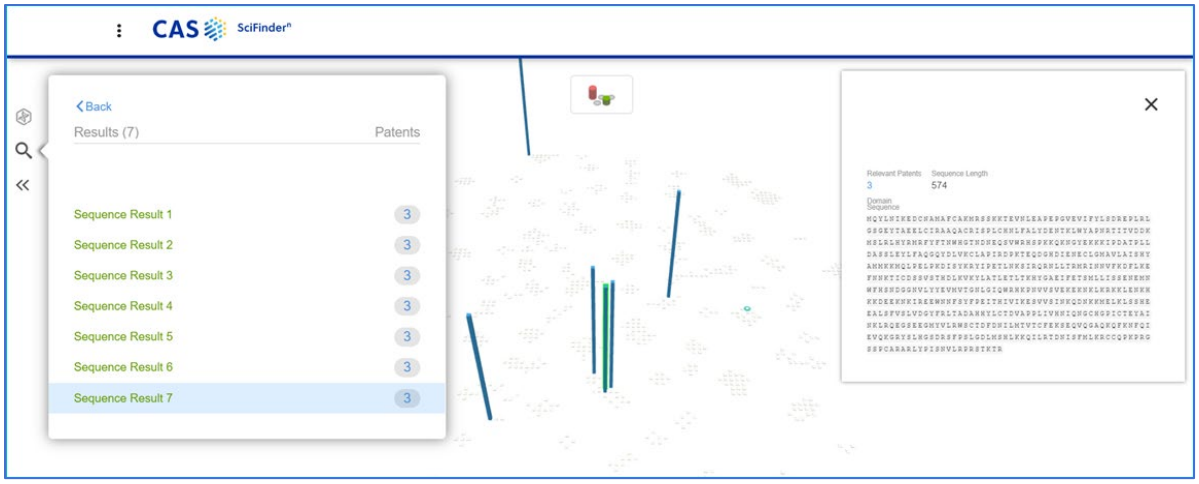
(1) 在 CAS Biosequences 中获得的序列结果集页面，点击页面左侧 Create Bioscape Analysis。



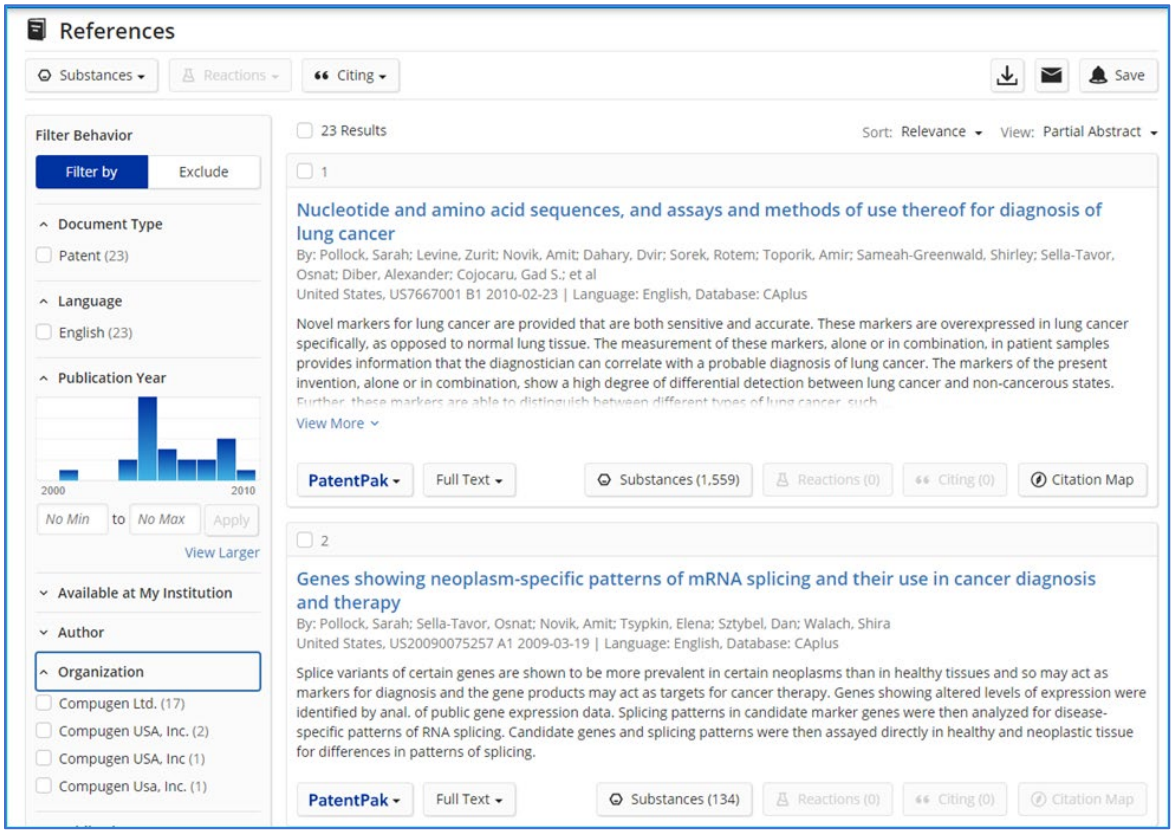
(2) 在 Bioscape 可视化分析页面，点击左侧放大镜图标，在 All 中输入指定公司名，如“Compugen”，点击绿色 search 按钮，获得该页面上的指



(3) 点击柱体代表的序列，会在右侧弹出框中呈现该序列、序列长度、相关专利数量，点击代表专利数量的蓝色数字，可获取该选中序列（绿框框柱的柱体）的相关专利合集。



(4) 在专利结果集页面左侧 Organization 筛选选项下，可见该专利结果集专利权人包含指定的“Compugen”。



CAS Formulus

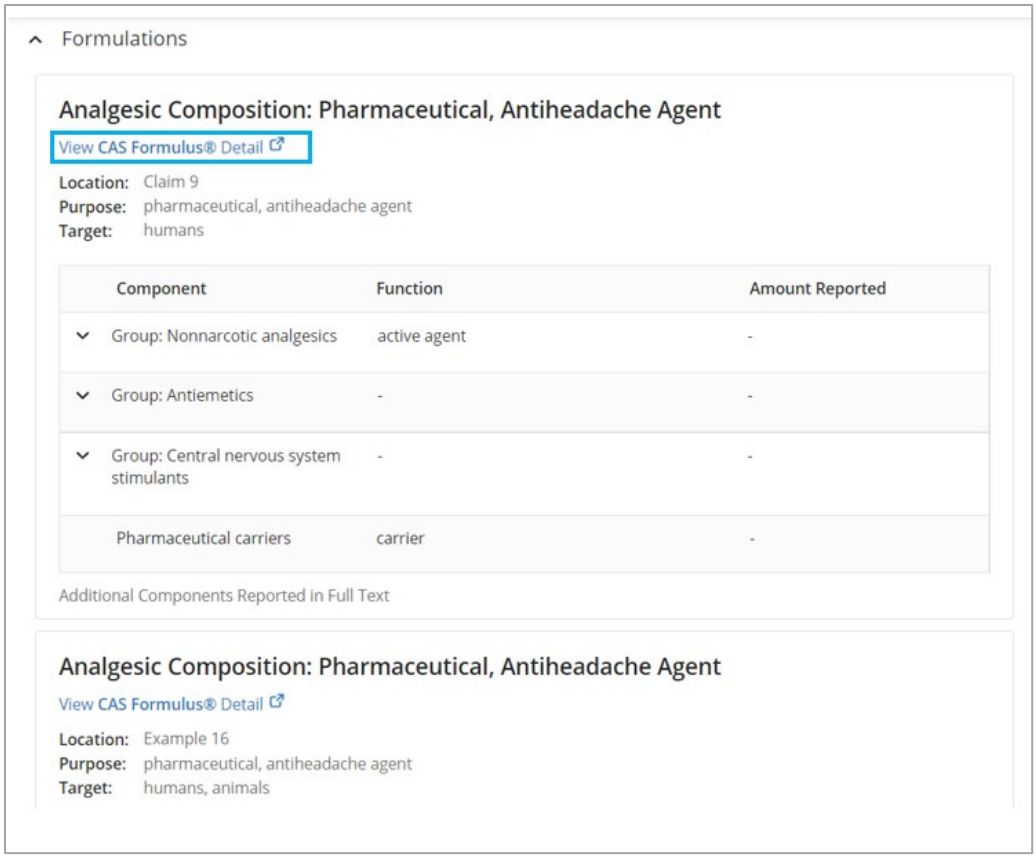
Q1：CAS Formulus 中，Formulation Designer, Formulation, Ingredient 的区别?

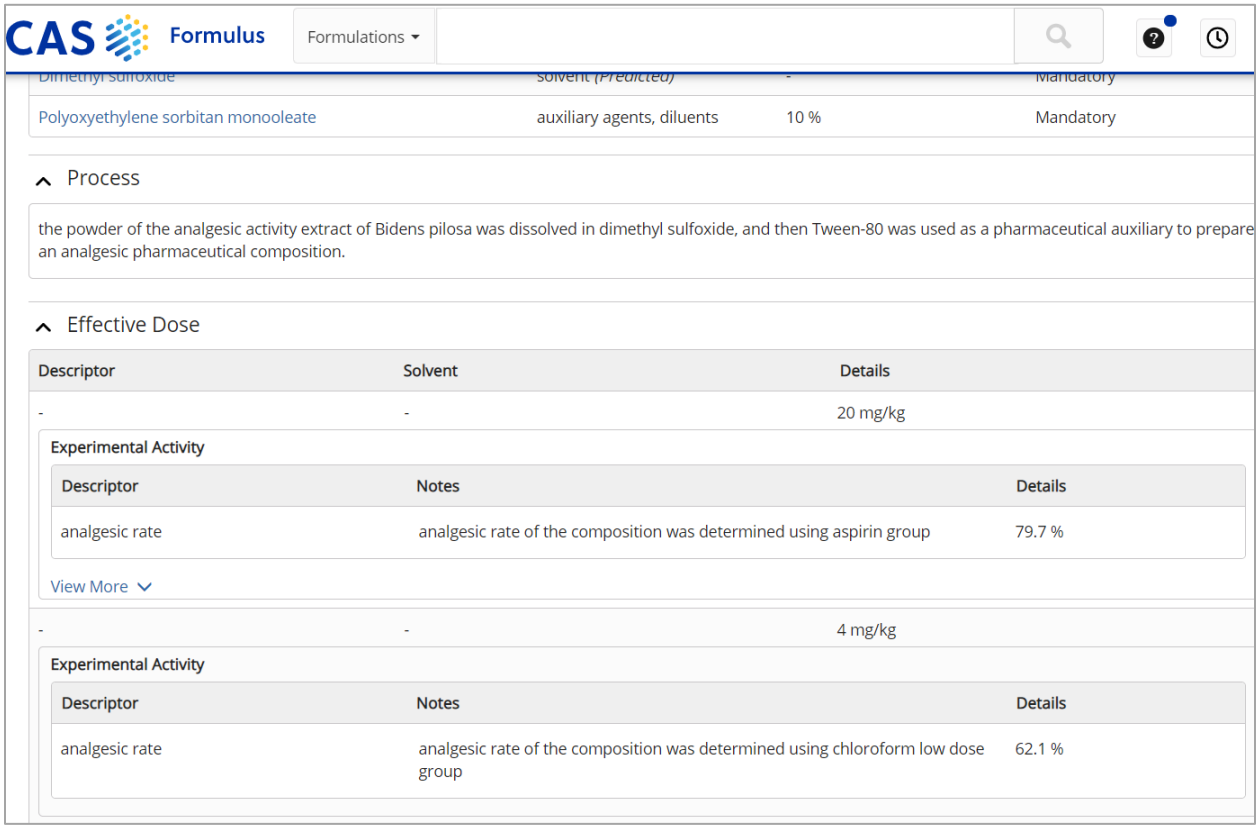
A1：

- Formulation Designer 根据用户选择的应用领域、用途、物理形态和活性/主要成分，提供配方设计模板。模板中包括建议的成分（活性成分、辅料、润滑剂、分散剂等）、功能、替代的成分，对应的管控信息链接、组分含量，以及配方工艺等。用户可以使用模板中建议的成分，或者手动添加其他感兴趣的成分，最终可以导出为 Excel 格式的文件，无缝对接配方设计工作流程。
- Formulation 是根据成分、功能、形态、用途、递送途径等来检索 Formulus 中的制剂/配方信息。
- Ingredient 是根据配方成分的化学名、CAS 号等来检索配方中的物质信息。获得的物质信息包括该物质的 CAS 号、化学名、结构式、理化性质、其常见的配伍成分、管控信息（FDA、ANMAT、DMF、EMA 等）、常见用途、配方详情和供应商信息等。

Q2：如何通过技术手段检索制剂信息?

A2：在 CAS SciFinder^{n} 主页面选择 References，在检索框中输入有关技术手段的关键词，检索得到文献结果集。在文献结果集页面左侧 CAS Solutions 选项中勾选 CAS Formulus，获得制剂研究的文献结果集。在文献详情页面点解 View CAS Formulus Detail，链接至 CAS Formulus 获得制剂实验操作详情。


Formulations
Analgesic Composition: Pharmaceutical, Antiheadache Agent
View CAS Formulus® Detail
Location: Claim 9
Purpose: pharmaceutical, antiheadache agent
Target: humans
Component
Function
Amount Reported
Group: Nonnarcotic analgesics
active agent
Group: Antiemetics
Group: Central nervous system stimulants
Pharmaceutical carriers
carrier
Additional Components Reported in Full Text
Analgesic Composition: Pharmaceutical, Antiheadache Agent
View CAS Formulus® Detail
Location: Example 16
Purpose: pharmaceutical, antiheadache agent
Target: humans, animals


CAS Formulus
Formulations
Polyoxyethylene sorbitan monooleate
auxiliary agents, diluents
10 %
Mandatory
Process
the powder of the analgesic activity extract of Bidens pilosa was dissolved in dimethyl sulfoxide, and then Tween-80 was used as a pharmaceutical auxiliary to prepare an analgesic pharmaceutical composition.
Effective Dose
Descriptor
Solvent
Details
20 mg/kg
Experimental Activity
Descriptor
Notes
Details
analgesic rate
analgesic rate of the composition was determined using aspirin group
79.7 %
View More
4 mg/kg
Experimental Activity
Descriptor
Notes
Details
analgesic rate
analgesic rate of the composition was determined using chloroform low dose group
62.1 %

Q3：如何通过结构式检索制剂信息？

A3：按下述步骤进行：

1） 在 CAS SciFinder^{n} 主页面选择 References

2） 打开结构编辑器、绘制结构，检索后得到文献结果集。

3） 在文献结果集页面左侧 Filter by 筛选项 CAS Solutions 下勾选 Formulus, 即可获得绘制结构制剂研究的文献。

4） 在文献结果集页面，点击 View CAS Formulus Detail 链接至 CAS Formulus 获取制剂研究其他更多详细信息。

CAS Analytical Methods

Q1：如何通过已知结构，检索相似结构的分析检测方法？

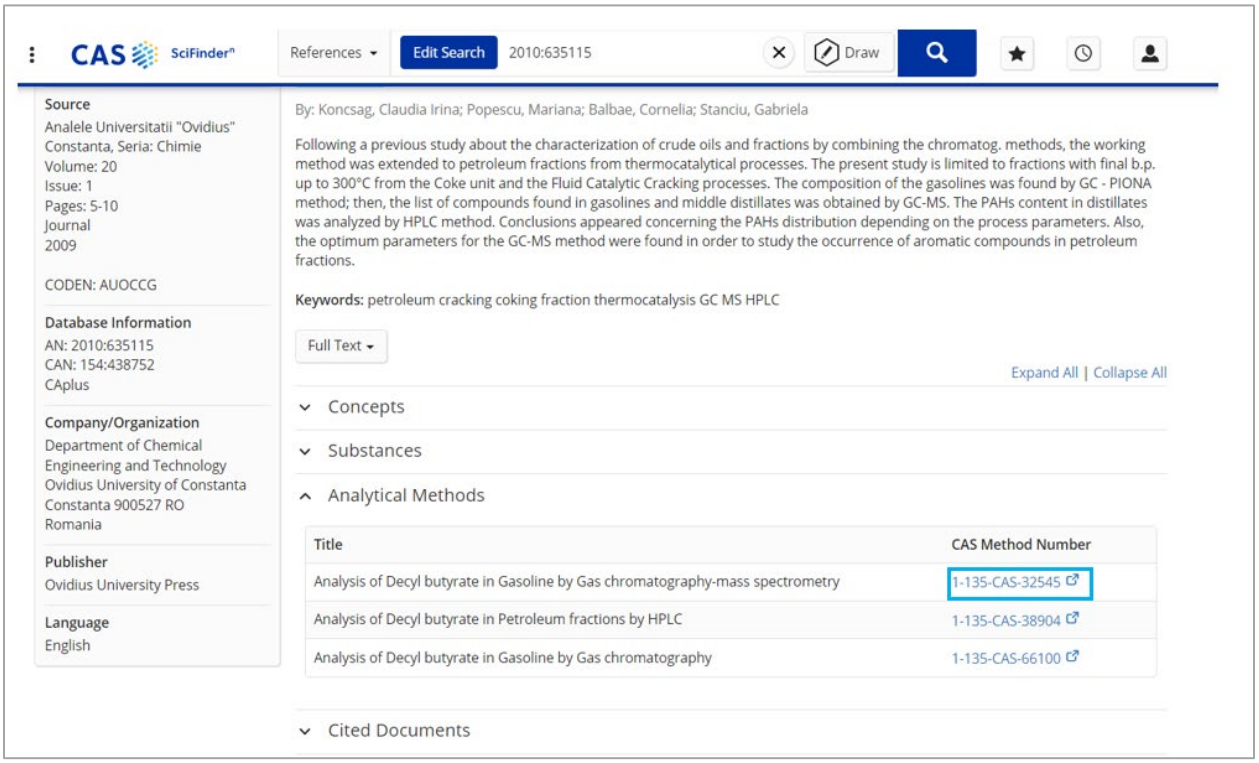
A1：操作步骤如下：

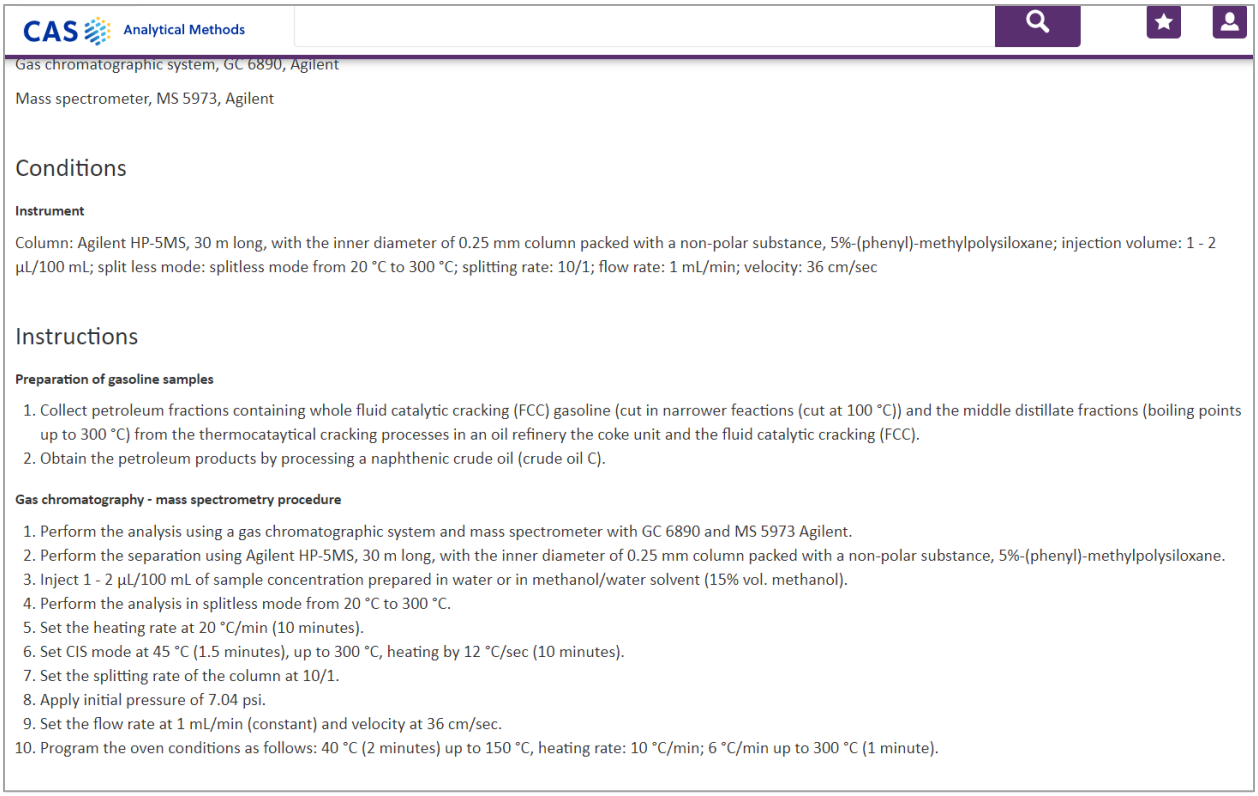
1）在 CAS SciFinder^{n} 主页选择 Substances, 然后 打开结构编辑器绘制结构，再进行物质检索。

2）在物质结果集页面左侧选择 Similarity，获得绘制结构的相似结构结果集。点击该结果集页面顶端的 References，获得报道这些结构的文献结果集。

3）勾选文献结果集页面左侧 Substance Role 选项中的 Analytical Study,或者 Analyte 获得与分析研究相关的文献结果集。

4）或者勾选 CAS Solutions 选项下的 Analytical Methods。在文献详情页面点击 CAS Method Number 链接至 CAS Analytical Methods 获取分析方法实验操作详情。





Gas chromatographic system, GC 6890, Agilent

Mass spectrometer, MS 5973, Agilent

Conditions

Instrument

Column: Agilent HP-5MS, 30 m long, with the inner diameter of 0.25 mm column packed with a non-polar substance, 5%-(phenyl)-methylpolysiloxane; injection volume: 1 - 2 µL/100 mL; split less mode: splitless mode from 20 °C to 300 °C; splitting rate: 10/1; flow rate: 1 mL/min; velocity: 36 cm/sec

Instructions

Preparation of gasoline samples

1. Collect petroleum fractions containing whole fluid catalytic cracking (FCC) gasoline (cut in narrower feactions (cut at 100 °C)) and the middle distillate fractions (boiling points up to 300 °C) from the thermocataytical cracking processes in an oil refinery the coke unit and the fluid catalytic cracking (FCC).
2. Obtain the petroleum products by processing a naphthenic crude oil (crude oil C).

Gas chromatography - mass spectrometry procedure

1. Perform the analysis using a gas chromatographic system and mass spectrometer with GC 6890 and MS 5973 Agilent.
2. Perform the separation using Agilent HP-5MS, 30 m long, with the inner diameter of 0.25 mm column packed with a non-polar substance, 5%-(phenyl)-methylpolysiloxane.
3. Inject 1 - 2 µL/100 mL of sample concentration prepared in water or in methanol/water solvent (15% vol. methanol).
4. Perform the analysis in splitless mode from 20 °C to 300 °C.
5. Set the heating rate at 20 °C/min (10 minutes).
6. Set CIS mode at 45 °C (1.5 minutes), up to 300 °C, heating by 12 °C/sec (10 minutes).
7. Set the splitting rate of the column at 10/1.
8. Apply initial pressure of 7.04 psi.
9. Set the flow rate at 1 mL/min (constant) and velocity at 36 cm/sec.
10. Program the oven conditions as follows: 40 °C (2 minutes) up to 150 °C, heating rate: 10 °C/min; 6 °C/min up to 300 °C (1 minute).

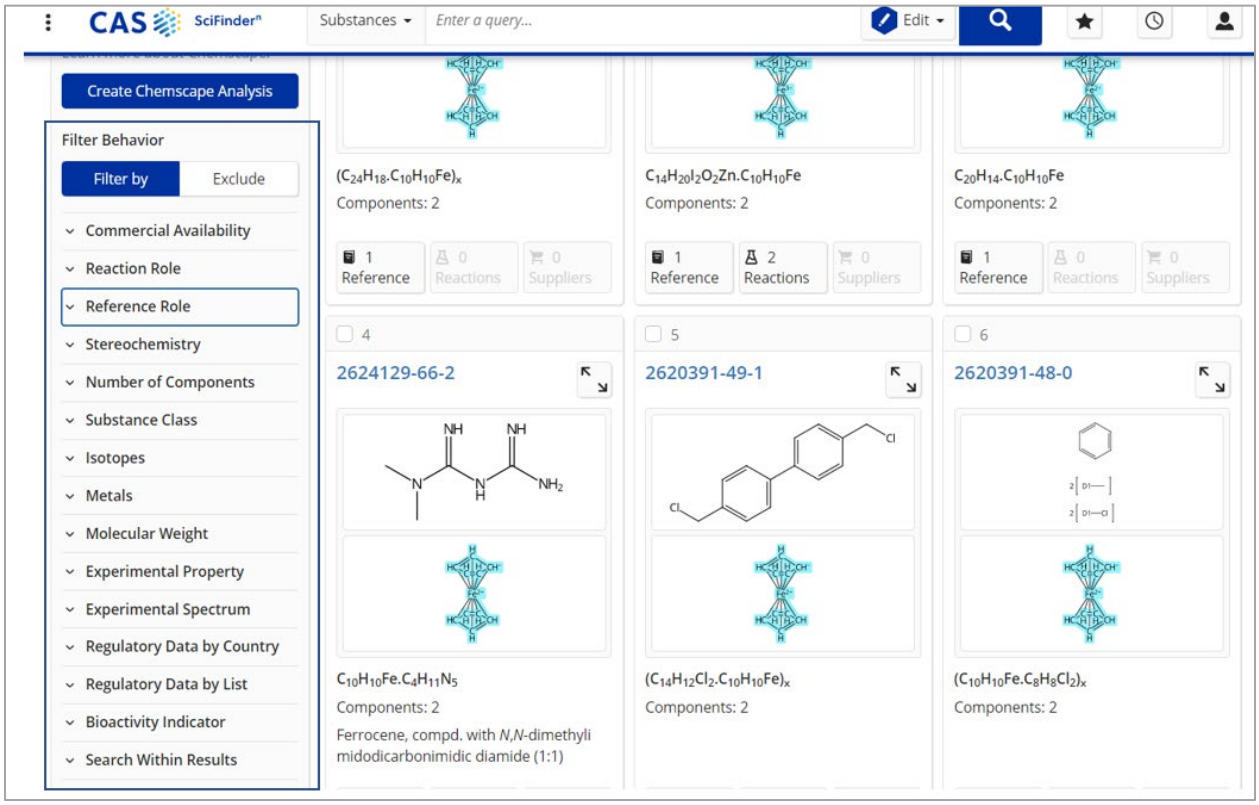
其他

Q1：我最近将 KMP alerts 从 CAS SciFinder 转移到了 CAS SciFinder^n。但是为什么我在 CAS SciFinder^n 中得到的结果比 CAS SciFinder 少呢?

A1：在 CAS SciFinder 中用于 KMP alerts 的筛选项不会自动全部转移到 CAS SciFinder^n。因此您需要在 CAS SciFinder^n 中更改 Alert 检索策略。

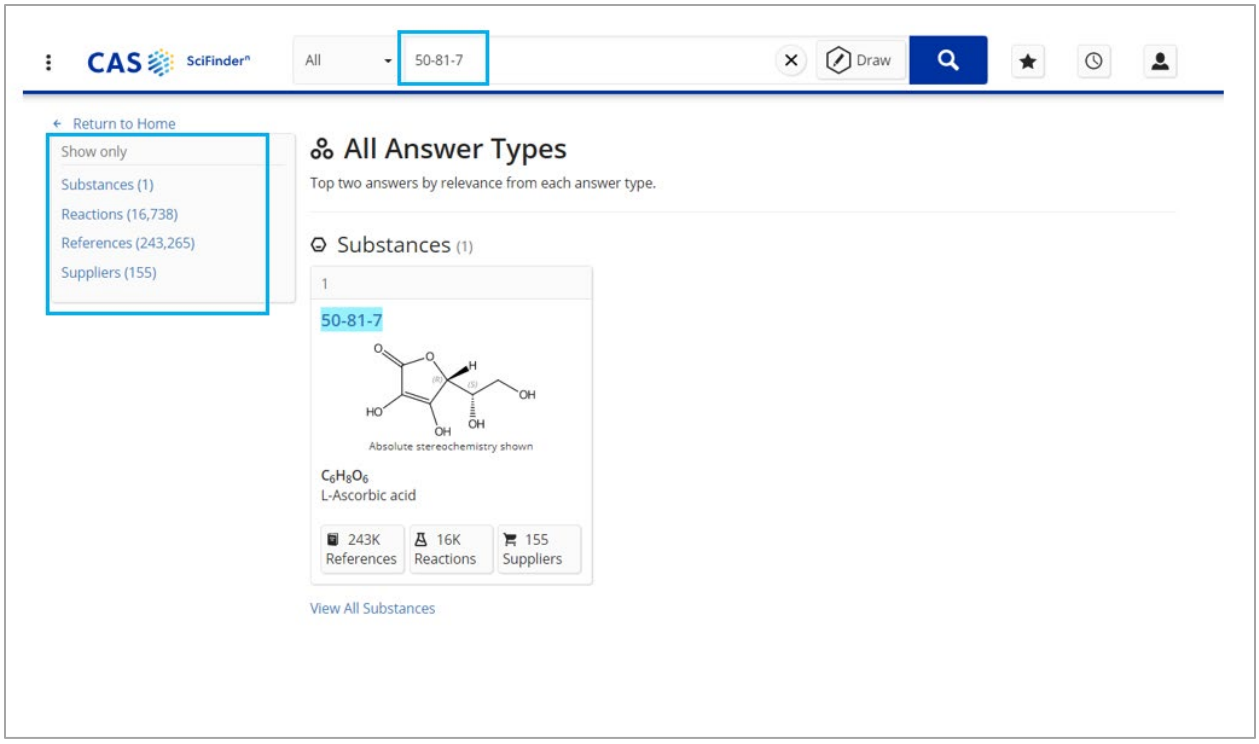
Q2： 在哪里可以获得筛选检索结果的选项?

A2：可在 CAS SciFinder^n 结果集页面获取所有的筛选选项。



Q3：选择 All 进行检索，将得到什么信息？在检索框中需要输入什么类型的信息?

A3：当选择 All 选项时，可以在检索框中输入关键词、CAS 登记号、专利号或文献收录号(Accession Number)等，将获得与输入信息相关的物质、文献、反应和供应商等信息。



Q4：CAS SciFinder^{n} 支持哪些操作系统和浏览器?

A4：请参考如下建议，同时不建议使用 360、Sogo 等浏览器。

- Windows 10: 谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高版本、火狐 52 (ESR)、 IE11、Edge 15 或更高版本
- Windows 8.1: 谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高版本、火狐 52 (ESR)、 IE11
- Windows 7: 谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高版本、火狐 52 (ESR)、 IE11
- Mac OS X 10.13: Safari 11.x、谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高版本、火狐 52 (ESR)
- Mac OS X 10.12: Safari 10.x、谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高版本、火狐 52 (ESR)
- Mac OS X 10.11: Safari 9.3 或更高版本、谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高版本、火狐 52 (ESR)
- iOS 11: Safari 11.x、谷歌 60 或更高版本、火狐 8.0 或更高版本
- iOS 10: Safari 10.x、谷歌 60 或更高版本、火狐 8.0 或更高版本
- iOS 9: Safari 9.3、 谷歌 60 或更高版本、火狐 8.0 或更高版本

- Android 7.x: 谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高
- Android 6.x: 谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高
- Android 5.x: 谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高
- Android 4.x: 谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高

网络连接要求

- SSL (https)通过端口 443 连接 scifinder-n.cas.org；
- https 通过端口 80 连接 chemport.cas.org 用于获取全文链接。

其他建议和要求

- 必须启用 JavaScript 和 cookie；
- 将 https://scifinder-n.cas.org 添加为浏览器信任站点（Trusted Site）及非弹出阻止程序（ Pop-up blocker Exceptions lists）；
- PDF Reader 用于导出和打印 CAS SciFinder^{n} 检索结果及其他信息。Adobe Reader 可用于 Mac 或 Windows 计算机。Mac OS X 提供免费浏览器 Preview。