SciFinder®
快速入门指南

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SCIFINDER®
A CAS SOLUTION

scifinder.cas.org

SciFinder®——最全面的化学及相关学科信息资源，加速实现科学突破

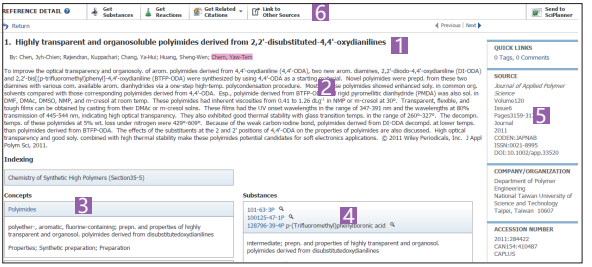
SciFinder 是一个研发应用平台，由美国化学会（American Chemical Society，简称“ACS”）旗下的美国化学文摘社（Chemical Abstracts Service，简称“CAS”）出品，提供全球最大、最权威的化学及相关学科文献、物质和反应信息。SciFinder 涵盖了化学及相关领域如生物医药、工程、材料科学、农业科学等多学科、跨学科的科技信息。SciFinder 收录的文献类型包括期刊、专利、会议论文、学位论文、图书、技术报告、评论和网络资源等。

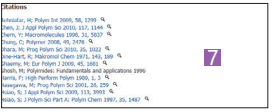
SciFinder 收录所有已公开披露、高质量且来自可靠信息源的信息，由 CAS 科学家分析文献的每一个细节并加以标引，您无需担心遗漏任何关键信息。

通过 SciFinder 可以获得、检索以下数据库信息：CAplus℠（文献数据库）、CAS REGISTRY℠（物质信息数据库）、CASREACT®（化学反应数据库）、MARPAT®（马库什结构专利信息数据库）、CHEMLIST®（管控化学品信息数据库）、CHEMCATS®（化学品商业信息数据库）、MEDLINE®（美国国家医学图书馆数据库）。

文献检索

文献记录详情

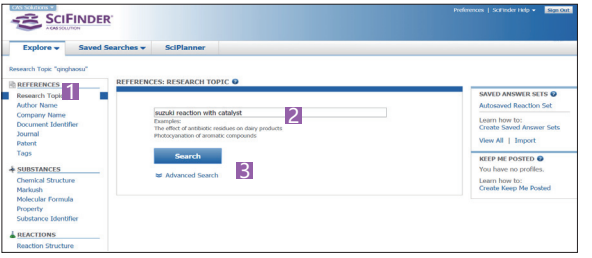


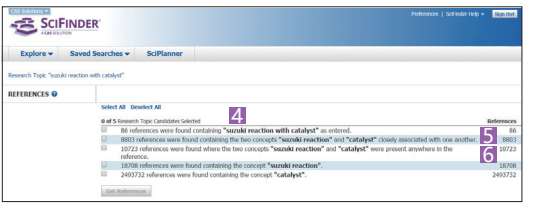


1 标题
2 摘要
3 文献中标引的技术术语
4 文献中标引的物质
5 书目信息
6 获得文献中的物质、反应、引文等
7 参考文献

文献检索方式及举例

主题检索





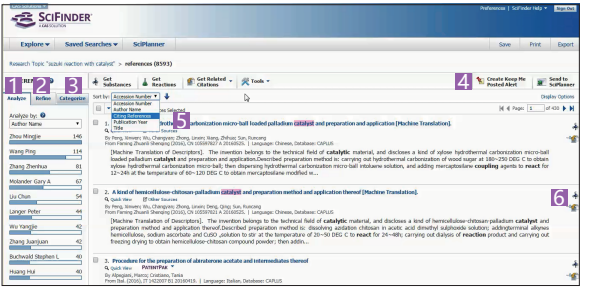
1 选择Research Topic
2 输入关键词，用介词（of，with，to，in）将关键词连接
3 点击Search

4 Concept，表示SciFinder后台做了同义词、近义词扩展

5 Closed associated with one another，表示两个关键词出现在同一个句子中

6 Were present anywhere in the reference，表示两个关键词出现在同一条记录的任意位置

文献筛选



1 Analyze 分析工具

2 Refine 限定工具

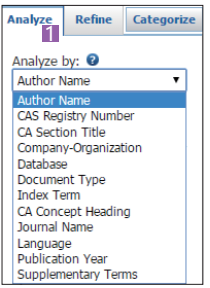
3 Categorize 学科分析工具

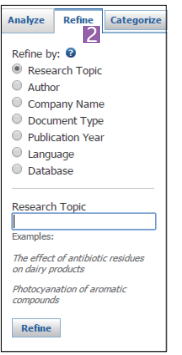
4 Keep Me Posted Alert 定题跟踪服务

5 依据被引次数排序

6 文献的被引次数

筛选工具

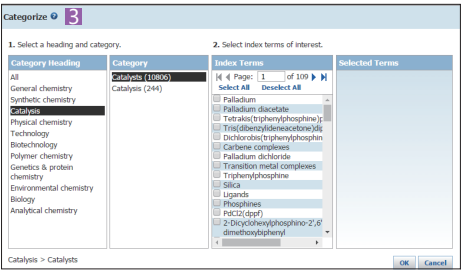




1 Analyze 中的12种选项

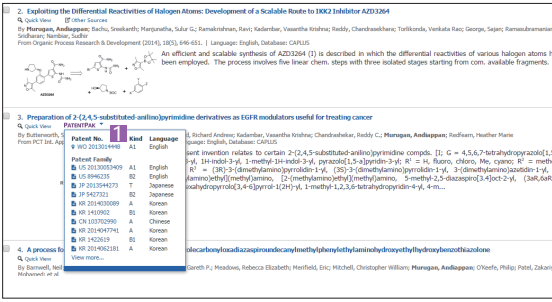
2 Refine 中的7种选项

3 Categorize 学科分类工具，依据学科自动分类



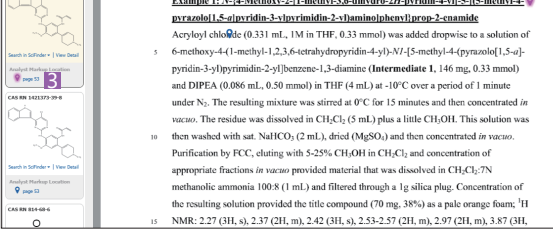
PatentPak™使用*

PatentPak™——专利工作流程解决方案



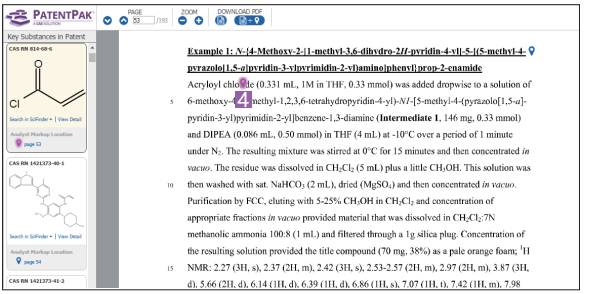
1 点击PatentPak，获取PatentPak浏览器

2 PatentPak浏览器

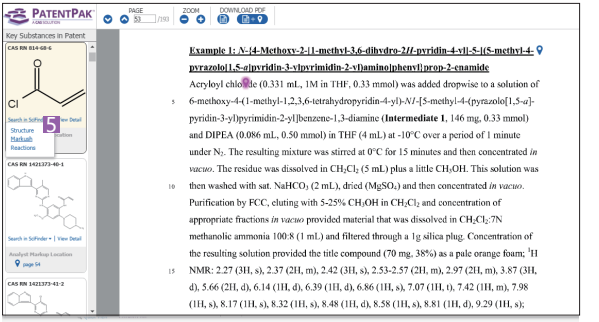


3 在PatentPak Viewer中点击物质下面的页码，快速定位到专利PDF文件中的物质信息

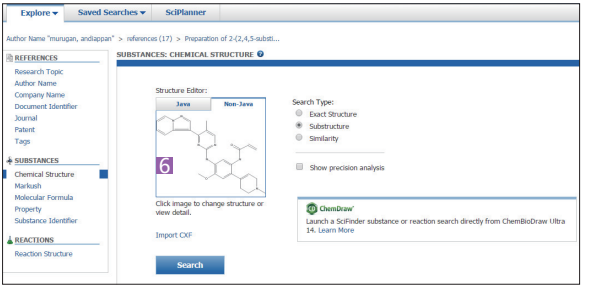
*PatentPak为新增模块，用户需要与学校图书馆查询是否已获得访问权限



4 也可以在PDF文件中与PatentPak进行互动



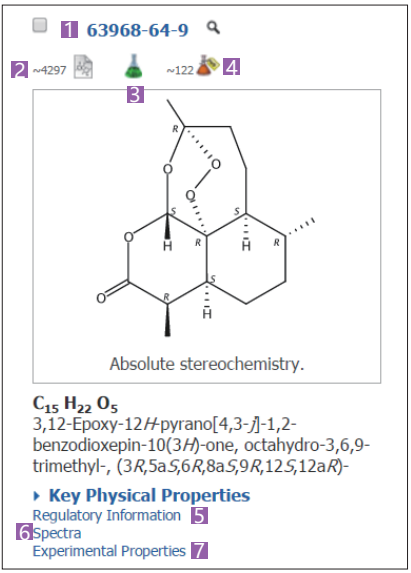
5 在PatentPak浏览器中直接进行SciFinder结构、马库什和反应检索



6 从PatentPak浏览器直接跳转到结构检索界面，同时无需绘制，系统会自动将相应的结构直接导入到绘图面板，点击Search即开始SciFinder检索，拓展新的研究方向

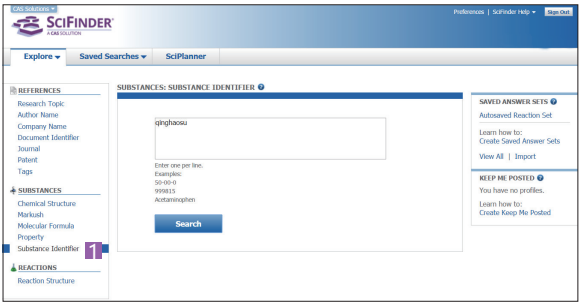
物质检索

物质记录详情

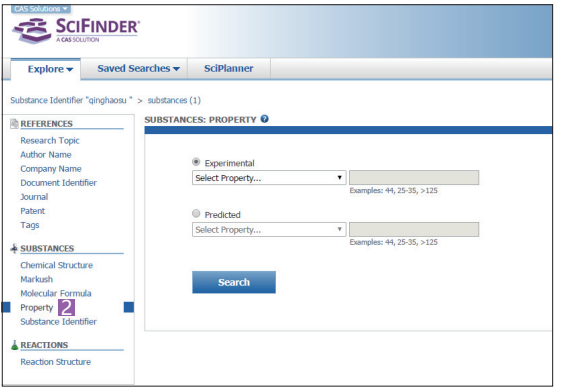


1 物质详情链接
2 物质文献链接
3 物质反应链接
4 物质供应商链接
5 物质管制信息链接
6 物质谱图链接
7 物质实验性质链接

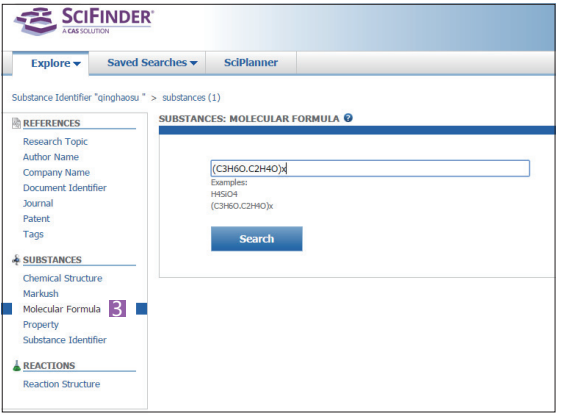
物质检索举例



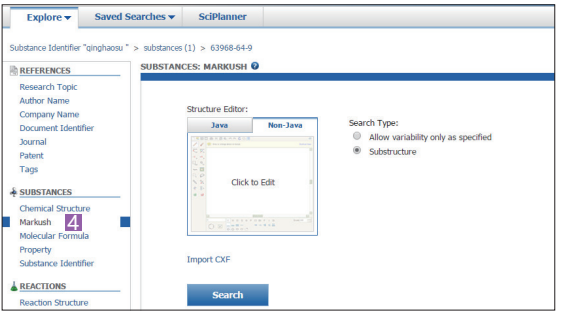
1 物质标识符（CAS RN®、化学名、商品名、俗名等）



2 理化性质数据（实验数据、预测数据）

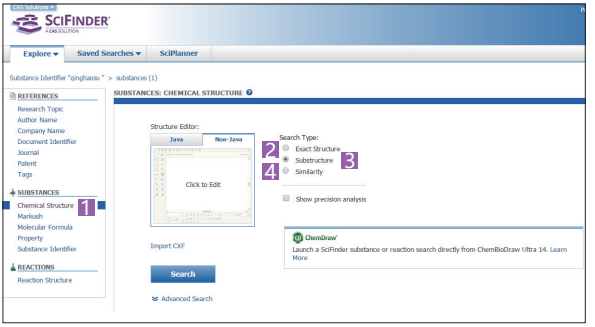


3 分子式（分子式输入需要遵守Hill排序规则：不含碳化合物，分子式按元素符号的字母顺序排列；含碳化合物，则“C”在前；如有氢则紧随其后，其它元素符号则按字母顺序排在氢的后面）



4 马库什检索，获取专利权利要求（说明书）中的Markush结构，用于确认化合物结构保护范围及获取最新化合物信息

物质检索举例



1 结构检索

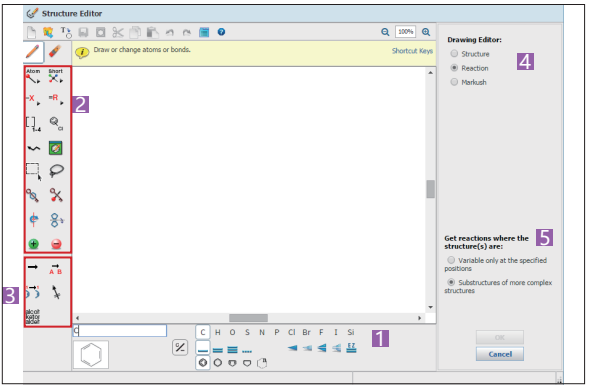
2 精确结构检索：获得被检索结构的盐、混合物、配合物、聚合物等，被检结构不能被取代

3 亚结构检索：包括精确结构检索结果，及被检索结构的修饰结构

4 相似结构检索：获得片段或整体结构与被检索结构相似的结果，母体结构可以被取代，也可以被改变

反应检索

结构绘制面板



1 常用原子、环、化学键

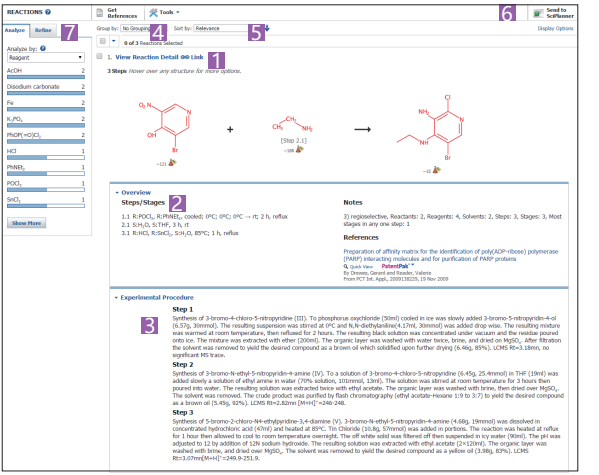
2 结构绘制工具组

3 反应定义工具组

4 结构检索、反应检索、马库什检索选项

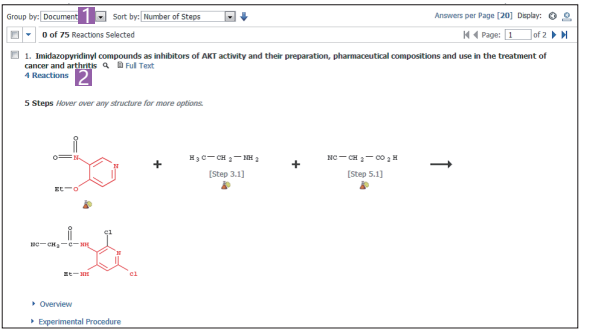
5 当前检索模式下的功能选择

反应记录详情

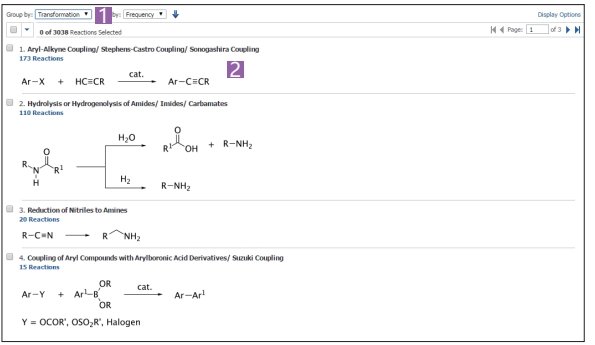


1 反应详情链接
2 反应总览
3 反应实验过程
4 反应分组
5 反应排序
6 将反应推送到SciPlanner
7 反应分析与限定

重排反应式



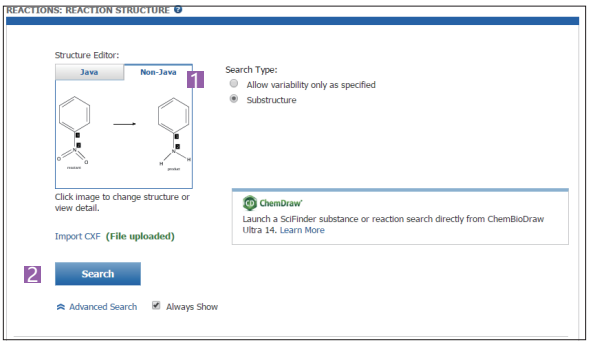
1 选择Group by Document
2 所有来自同一篇文献的反应全部合并到一条记录中

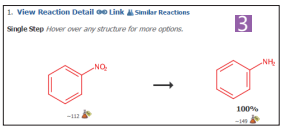


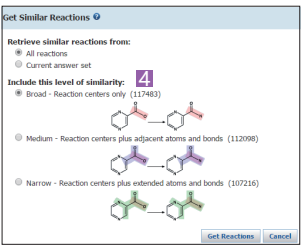
1 选择Group By Transformation

2 总结归纳反应类型

反应检索举例







1 待检索的反应式

2 点击，执行反应检索

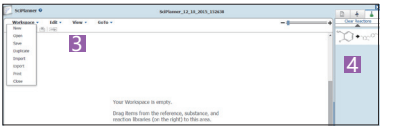
3 获取相似反应

4 选择不同的相似级别，获得相似反应

SciPlanner™使用

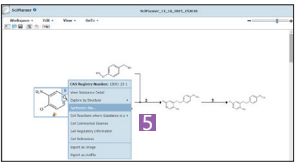
1 勾选想要的反应

2 点击Send to SciPlanner

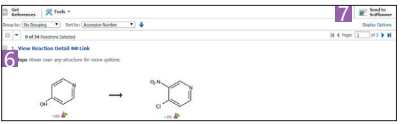


3 workspace 下新建一个文件

4 进入SciPlanner，将刚推送过来的反应拖动到屏幕中间

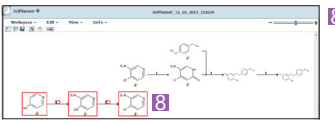


5 点击反应中的一个物质，单击上面的双箭头，选择Synthesis this

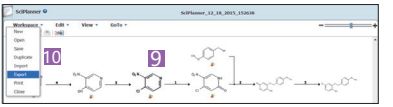


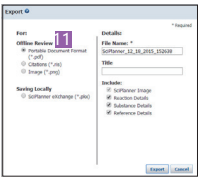
6 在检索到的反应中，选择感兴趣的一条反应

7 将该条反应继续推送到SciPlanner中



8 将推送过来的反应拖动到屏幕中间，可以看到两条反应中存在同样的结构





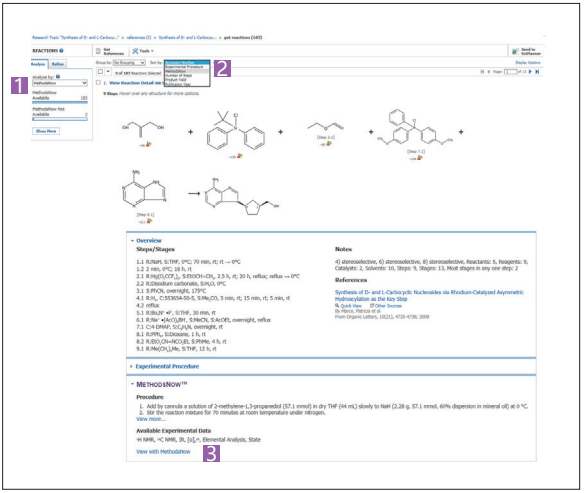
9 用鼠标将两个同样的结构拖动至重叠状态，两条反应合并

10 点击 Workspace，选择其中的 Export 输出结果

11 选择适当的输出格式，输出结果

MethodsNow™使用*

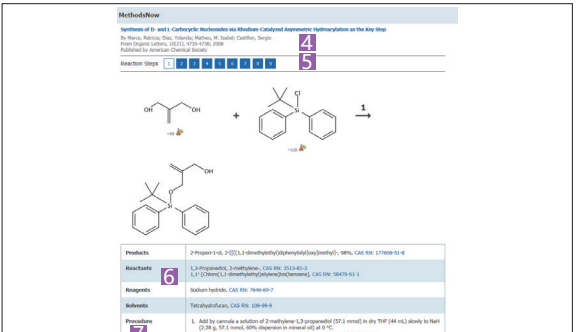
MethodsNow™快速获取更加详细的合成方法



1 在SciFinder反应结果集的分析选项中，获取有MethodsNow的反应结果

2 也可以在反应结果集的排序选项中获取

3 点击View with MethodsNow，获取合成方法详情



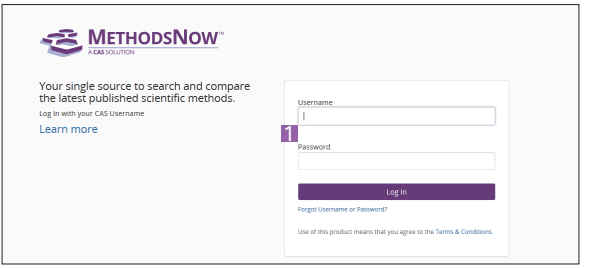
*MethodsNow为新增模块，用户需要与学校图书馆查询是否已获得访问权限

4 书目信息
5 点击反应步数即可获得该步反应的详细操作信息
6 反应中涉及的物质：产物、反应物、催化剂、溶剂和相关物质的CAS登记号等，点击CAS登记号即可转到SciFinder物质检索界面，查看物质信息详情。
7 可以获得分步列出的反应过程，反应量级，图谱数据，元素分析和其他可获得的性质数据。
8 可以打印或者保存到本地电脑

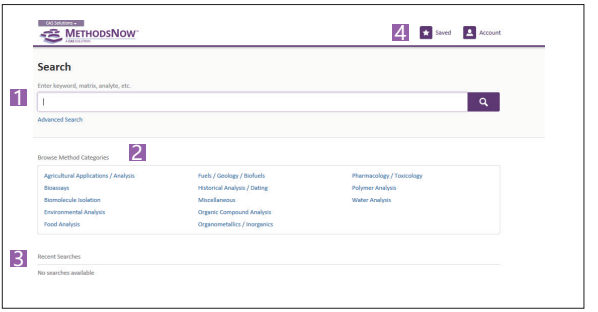
MethodsNow快速获取详细的分析方法

MethodsNow Analysis (www.methodsnow.com)

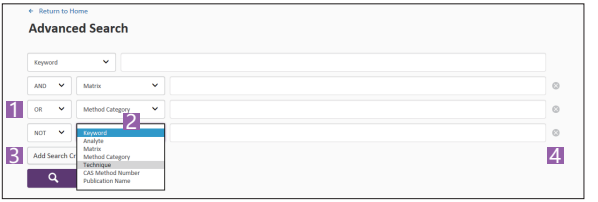
- Organic Compound Analysis: 天然产物分离分析，手性分离，活性药物成分及代谢产物分析...
- Organometallics / Inorganics: 地质分析，无机物分析，金属有机化合物分析
- Pharmacology / Toxicology: 成瘾药物检测，有毒物检测...
- Bioassays: 生物探针，生物标定细胞实验，生物标定药物实验，生物医学材料分析，生物分子/生物组织分离测定...
- Water Analysis: 阴阳离子分析，元素测定，痕量元素分析，废水分析，生物标记公共卫生分析...
- Historical Analysis / Dating: 考古分析，同位素分析
- Environmental Analysis: 土壤/空气/水分析，农药残留分析...
- Agricultural Applications / Analysis: 除草剂分析...
- Food Analysis: 脂肪酸分析，脂肪酸酯分析，蛋白质分析...
- Fuels / Geology / Biofuels: 生物燃料分析，油气分析，石油产品分析，煤炭加工...
- Miscellaneous: 化妆品分析，爆炸物分析，纳米材料分析...



1 登录www.methodsnow.com网址，输入用户名和密码

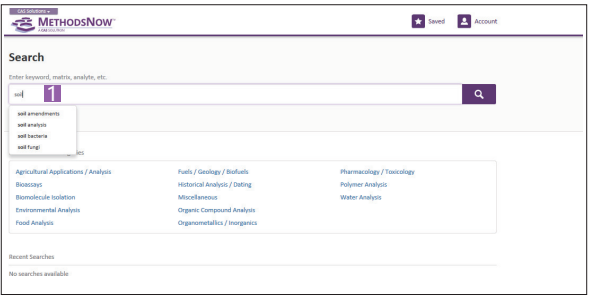


1 可以在检索框输入关键词或者分析物等进行检索
2 也可以通过浏览方法分类，点击一个浏览类别查看相关方法
3 点击历史检索重新运行检索，点击X删除检索历史
4 保存结果集

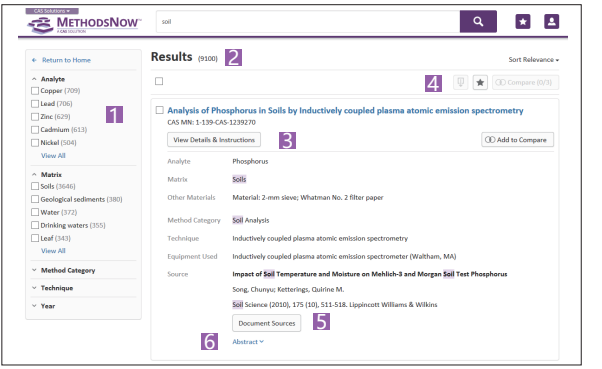


1 逻辑运算符：and, or, not
2 检索条件包括：关键词，分析物， 基质，方法分类，技术手段，CAS方法号，出版物名称
3 增加检索条件
4 删除检索条件

案例：在土壤中检测重金属的方法



1 此处只需要输入物质的一个名称即可，MethodsNow会自动进行同义词的查找



1 按照分析物、基质、方法分类、技术手段、公开年份等条件筛选结果

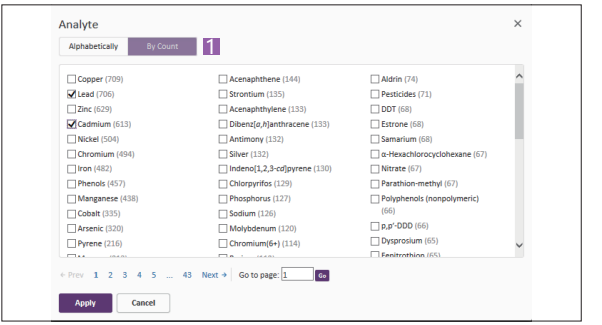
2 方法结果数量

3 查看方法信息详情

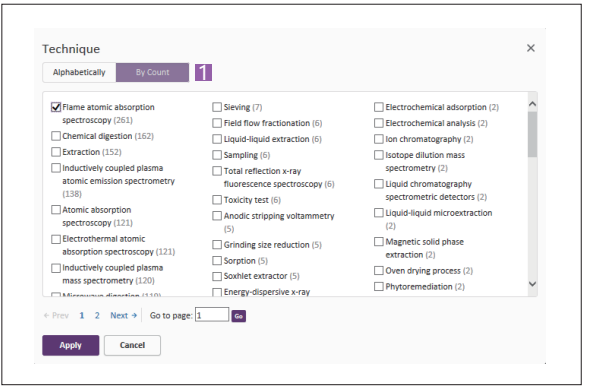
4 导出或者保存方法

5 获得全文链接

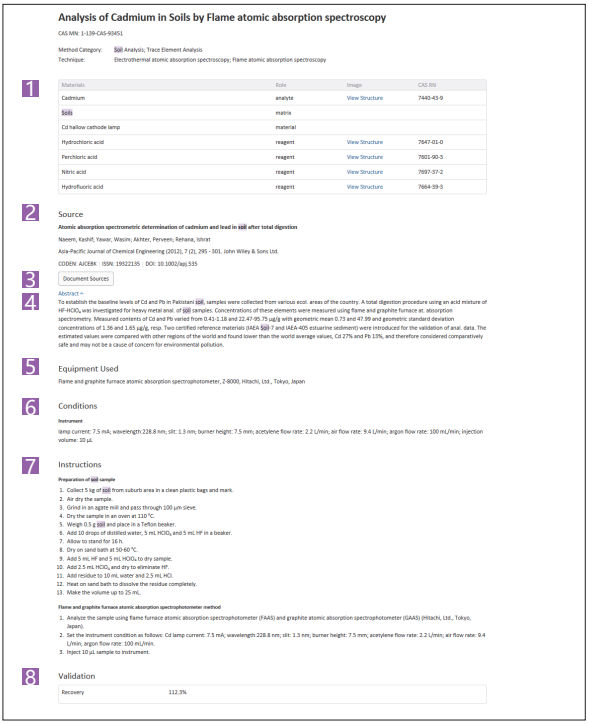
6 展示摘要



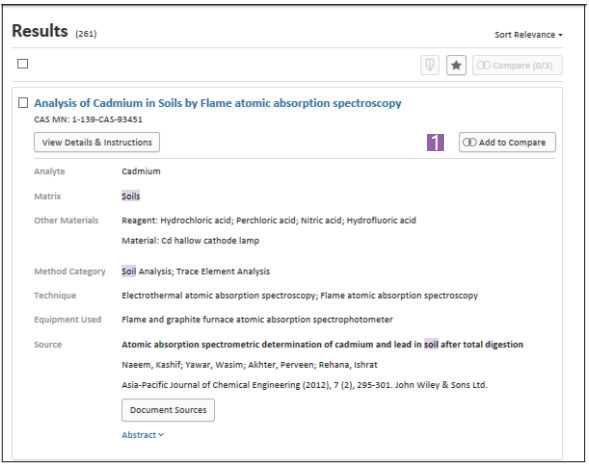
1 点击分析物列表，选择目标分析物

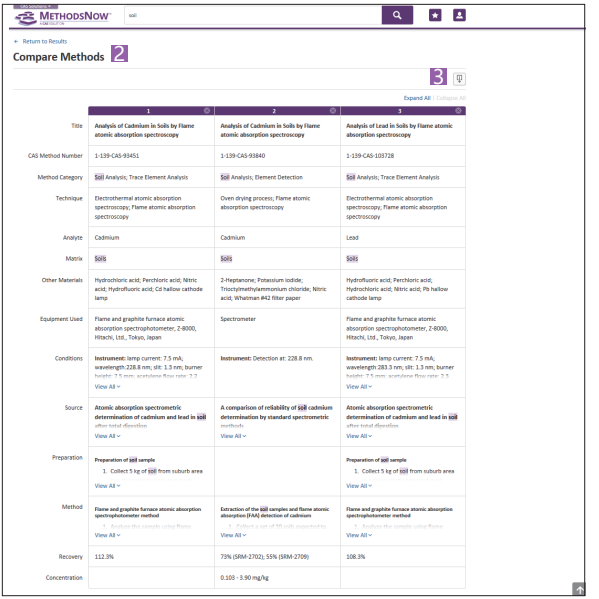


1 点击技术手段列表，选择技术手段



1 分析方法所用材料
2 书目信息
3 原文链接
4 摘要
5 使用仪器
6 实验条件
7 分析方法操作步骤
8 方法有效性



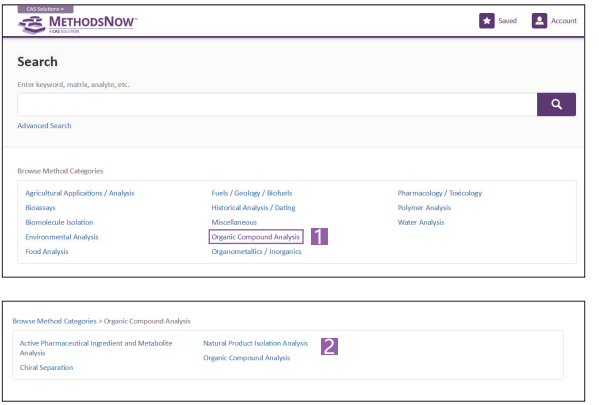


1 选择感兴趣的方法进行对比

2 一次最多可以比较三种不同方法，所有方法信息详情的内容都可以进行对比

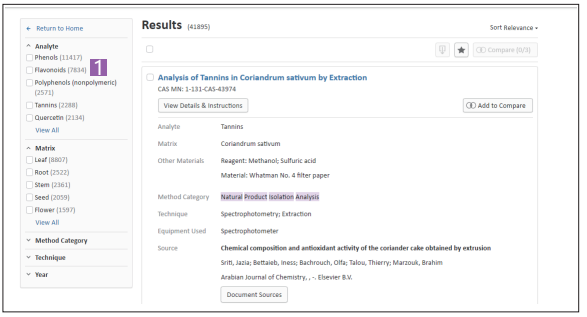
3 可以将方法比较结果下载成pdf或者excel格式文件到本地电脑

天然产物分离

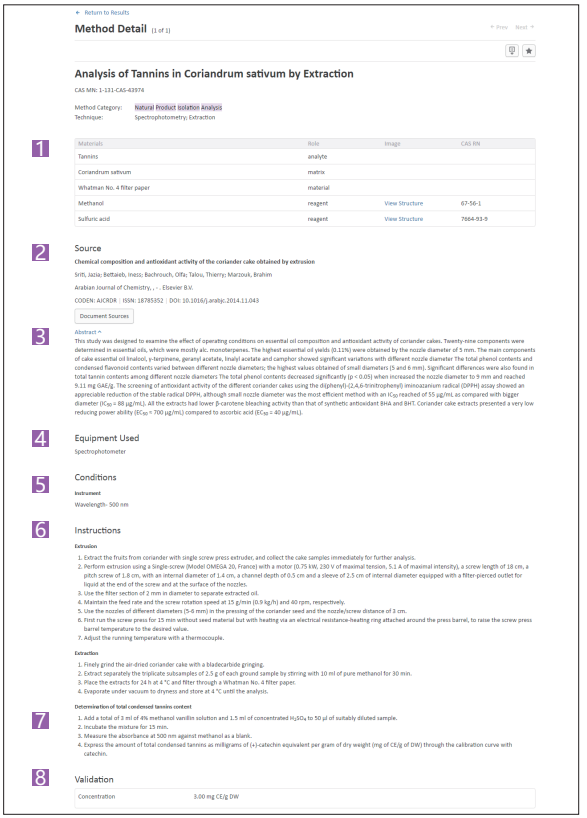


1 浏览方法分类，选择有机化合物分析

2 获得全部关于天然产物分离/分析的文献



1 根据需要，对相应的分离物、基质进行筛选



1 实验所用材料
2 书目信息
3 摘要
4 使用的仪器
5 实验条件
6 提取、分离步骤详情
7 产物的表征
8 方法有效性

美国化学文摘社（Chemical Abstracts Service，简称“CAS”）是美国化学会（American Chemical Society，简称“ACS”）旗下的分支机构，是全球提供化学及相关信息解决方案的权威机构。秉承美国化学会“通过化学的力量改善人们的生活”的愿景，美国化学文摘社专业的科学家团队致力于发现、收集及管理所有公开的化学物质信息，创建了世界上对于创新至关重要的、最有价值的内容集合。全球的科研人员及从事专利的专业人士依靠美国化学文摘社提供的研究解决方案实现其科研发现并完成工作流程。

Connect with SciFinder:

美国艾赛思国际有限公司北京代表处
Tel: 010-62508026/7
Email: china@acs-i.org

CAS®
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

scifinder.cas.org