



SciFinder[®] 使用手册

美国化学文摘社

CAS, a division of American Chemical Society

章节目录

第一卷 入门指导

第二卷 文献检索

第三卷 访问 ChemZent 文献

第四卷 通过 PatentPak 访问专利

第五卷 非 Java 结构编辑器

第六卷 Java 结构编辑器

第七卷 物质检索

第八卷 反应检索

第九卷 什么是 MethodsNow

第十卷 查找化合物商业来源

第十一卷 创建定题追踪 (KMP) 提醒

第十二卷 在 SciPlanner 中组织信息

第十三卷 查看检索历史

第十四卷 SciFinder 系统设置



SciFinder® 使用手册

第一卷 入门指导

美国化学文摘社

CAS, a division of American Chemical Society

1. 入门指导

介绍	1
学习资源	1
联系我们	2
SciFinder 交互式视图	2
文献	2
物质	2
反应	2
结构编辑	2
商业来源	2
其他	3
教程和视频.....	3
入门指南	3
检索	3
画图	3
SciPlanner.....	3
SciFinder 培训材料.....	4

介绍

SciFinder 入门指南，请按如下流程点击查看。



SciFinder 提供独特的文献、物质和反应合集信息，所以可以从文献、物质或者反应中的任一项检索开始，就可以很便捷地获得其他两项信息。


学习资源

如果您是使用 SciFinder 的新手，则可以参考以下教程：



可以浏览其他[教程](#)——大部分只需花费几分钟就可以完成。

或者浏览[互动式视图](#)了解不同的 SciFinder 检索功能。

在使用 SciFinder 过程中，可以随时点击  按钮获取所需的帮助信息。

其他的学习资源如“须知视频”，“如何开始”，“中文培训材料”，以及“高级主题检索培训资料”都可以在 [SciFinder Training Materials](#) 里面获得。

通过查看 [CAS Content at a Glance](#)，可以获得数据库的最新统计数据。

联系我们

在使用 SciFinder 过程中，如果有任何问题或者需要帮助，请随时联系 china@acs-i.org。

SciFinder 交互式视图

利用以下交互式操作页面图, 了解更多 SciFinder 界面提供的不同功能。

文献

[文献检索选项页面图](#)

[文献页面图](#)

[文献详情页面图](#)

物质

[物质检索选项页面图](#)

[物质页面图](#)

[物质详情页面图](#)

反应

[反应检索选项页面图](#)

[反应页面图](#)

[反应详情图](#)

结构编辑

[非-Java 结构编辑器操作页面图](#)

[Java 结构编辑器页面图](#)

商业来源

[商业来源页面图](#)

[来源详情页面图](#)

其他

[SciPlanner 页面图](#)

[历史页面图](#)

[保存的结果集页面图](#)

[设定定题追踪页面图](#)

[系统设置页面图](#)

教程和视频

花费几分钟观看下面教程和视频，学习如何使用 **SciFinder**。

入门指南

[Introduction to SciFinder](#)-教程中展示了如何检索物质、反应和文献、分析检索结果，以及设置定期追踪提醒。

也可以获得中文课件：[SciFinder 简介](#)

检索

[精确结构检索](#)（1 分钟）

[亚结构检索](#)（1 分钟）

[相似结构检索](#)（1 分钟）

[通过 Markush 结构检索专利](#)（1 分钟）

[文献分类](#)（1 分钟）

画图

[画结构](#)（10 分钟）

[画反应](#)（10 分钟）

SciPlanner

[将数据发送到 SciPlanner](#)（1 分钟）

[操作工作区的对象](#)（1 分钟）

分享一个项目（1 分钟）

SciFinder 培训材料

请在 [SciFinder 培训材料](#) 里获得视频、中英文文件等培训资料。



SciFinder® 使用手册

第二卷 文献检索

美国化学文摘社

CAS, a division of American Chemical Society

2. 文献检索

文献检索操作流程.....	1
文献检索选项页面图.....	2
文献检索选项.....	4
研究主题检索.....	5
作者名检索.....	8
公司名检索.....	10
文献识别号检索.....	11
检索期刊信息.....	13
检索专利信息.....	15
通过 Markush 结构检索专利.....	17
标签检索.....	20
查看和分析文献选项.....	20
文献页面图.....	21
文献详情页面图.....	26
查看文献结果.....	30
文献排序.....	31
查看文献详情.....	32
分析当前结果集.....	33
分类文献.....	36
回到先前的结果集.....	37
筛选文献的选项.....	38
删除 MEDLINE 中重复的文献.....	39
保留或删除选中的文献.....	39
添加检索限定条件缩小结果集.....	40
合并文献结果集.....	41
获得相关数据的选项.....	43
获取文献中报道的物质.....	43
获取文献中报道的反应.....	46
获取参考文献.....	48

获取引文	49
获取一篇文献的全文.....	50
保存和分享文献的选项.....	51
保存当前结果集.....	53
分享文献	54
导出文献	56
导入文献	58
打印文献	59
将文献发送至 SciPlanner.....	62
打开一个保存的结果集.....	63
为保存的结果集编辑信息.....	64
删除保存的结果集.....	65
为文献添加评论和标签的选项.....	66
为文献添加评论.....	67
为文献添加标签.....	69
获取标签文献.....	70
删除文献的标签.....	71
为文献编辑评论.....	72
删除对文献的评论.....	73

文献检索操作流程

请根据以下流程查找文献并与他人分享。也可以浏览目录表中相应内容学习更多检索技巧。

开始文献检索

开始文献检索

通过下面的选项检索文献：

- 研究主题
- 作者名
- 公司名
- 文献识别号
- 期刊信息
- 专利信息

查看并分析文献检索集

查看并分析文献结果集

定位最相关的文献结果：

- 根据提供的选项对结果进行排序（如，可以通过排序获取最早期的专利文献，或者获取被引用次数最多的文献）。
- 根据提供的选项分析结果集（如，可以获取到在某个特定领域的研究中，哪些作者或者公司发表的研究成果最多）。

筛选文献结果集

筛选文献结果集

可以通过更多的限定选项来筛选结果集（如，文献类型或者公开年份）。

也可以保留或者移走选定的文献，或者合并多个结果集。

从文献获得相应的数据

从文献获得相应的数据

可以通过一篇文献检索到其报道的物质或反应，或者检索到所有引用该篇文献的文献及该篇文献的参考文献。

保存和分享文献信息

保存和分享文献信息

可以保存文献，以备以后再用，或者导出到文件夹中供他人阅读。还可以将某篇文献链接发送给其他 SciFinder 用户。

评论和标记文献 以备将来使用

评论和标记文献以备将来使用

可以将自己的评论加到一篇文献中，或者用自己的检索词在文献中作标记，以便下次更容易地检索这篇文献。

文献检索选项页面图

当选择任何一个文献检索选项时，就会出现下面的页面。




点击图中的字母，查看文献检索各选项的对应解释

<p>A</p>	<p>根据不同的检索条件，此处列出多种文献检索选项：</p> <p>Research Topic——用英文进行检索，可以用介词或者其他通用的连词将主题词分开</p> <p>Author Name——至少提供姓氏</p> <p>Company Name——可用片段名</p> <p>Document Identifier——可用收录号、文献号、专利号、PubMed ID 号和 DOI</p> <p>Journal——需要期刊名或部分标题，或者至少提供作者的姓氏</p> <p>Patent——需要专利号，或者至少提供专利权人或发明人的姓氏</p> <p>Tags——通过自定义关键词检索之前标记过的文献</p>
<p>B</p>	<p>出现在此处的检索范围取决于所选择的检索选项。</p> <p>在这个例子中，选择的检索选项是研究主题。可以在研究主题中输入主题描述（如，抗生素残留对乳制品的影响）。</p> <p>可以从C中选择检索限定条件缩小检索范围。</p> <p>点击 Search，开始检索</p>
<p>C</p>	<p>当点击 Advanced Search 时，就会出现适合每个类型的检索限定条件。如果想让限定选项一直出现，则请勾选 Always Show 前面的方框。</p> <p>除检索要求特别确定的情况外，通常在检索开始时，我们不建议您使用限定条件，这样可以保证一开始就能获得比较全面的信息。如果需要，则可以在后面通过 Refine 功能来筛选结果集。</p>
<p>D</p>	<p>此处展示了最近保存过的结果集。</p> <p>点击保存的结果集的名字就可以在一个保存过的结果集中进行检索（比如 Multistep 2）</p> <p>点击 View All 可以查看、编辑、删除或合并所有被保存过的结果集。</p> <p>点击 Import 可以导入之前以 AKX 文件导出的或者转化为 AKX 文件的结果集。</p>
<p>E</p>	<p>此处显示的是来自定题追踪(KMP)提醒中的最新结果。KMP 提醒会每周或者每个月自动地检索新结果。</p> <p>点击 KMP 名称下面的日期（比如 Jan 30, 2016）查看结果集中的结果。括号里的数字表示结果集中一共有多少结果。</p> <p>点击 View All 可以查看、删除或合并 KMP 结果集中所有的结果。</p>
<p>F</p>	<p>选择从保存的检索选项进入：</p> <p>Saved Answer Sets——查看、编辑、删除或者合并结果集</p>

	<p>Keep Me Posted——查看、删除或者合并定题追踪提醒的结果集</p> <p>History ——查看、打印或者导出操作历史（包括当前的和先前的 SciFinder 操作历史）。</p>
	进入 SciPlanner 可以对文献、物质和反应进行可视化管理。
	<p>使用这些选项执行下面的操作：</p> <p>Preferences——设置 SciFinder 系统参数</p> <p>SciFinder Help——进入下面的选项：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Help 帮助 ▪ Training 培训 ▪ What's New 新内容 ▪ Contact Us 联系我们 <p>Sign Out ——退出 SciFinder 登录页面，同时退出会话</p>

文献检索选项

检索页面中的文献检索选项有多种限定条件。

	<p>研究主题</p> <p>识别英文自然语言表述的短语，其中主题概念之间可以用介词或者其他常用连词隔开（如，<i>effect of antibiotic residues in dairy products</i>）</p>
	<p>作者名</p> <p>至少需要输入姓氏</p>
	<p>公司名</p> <p>可用片段名</p>

文献识别号	文献识别号 可用收录号、文献号、专利号、PubMed ID 号, 或数字对象识别号 (DOI)
期刊	期刊 至少需要一个期刊名、部分标题、或者作者的姓氏
专利	专利 至少需要提供一个专利号、专利权人姓名或者发明人的姓氏
标签	标签 通过自定义关键词检索用户自己标记过的文献

也可以通过 Markush 结构检索获得专利文献。Markush 结构通常指出现在专利权利要求中的通式结构和预测性化合物。Markush 检索选项就在物质检索选项的下方。

当完成检索后, 可以通过定题追踪 (KMP) 提醒追踪最新的文献 (可以选择每周或者每月执行一次同样的检索, 并获得检索报告)。

研究主题检索

使用检索选项获取某个特定主题的文​​献。

操作步骤

1. 选择 **Explore > Research Topic**.
2. 用简单清晰的英文输入检索主题, 使用介词或者其他常用连词将主题概念隔开。比如:

REFERENCES

- Research Topic
- Author Name
- Company Name
- Document Identifier
- Journal
- Patent
- Tags

SUBSTANCES

- Chemical Structure
- Markush
- Molecular Formula

REFERENCES: RESEARCH TOPIC

tyrosine kinase inhibitors in the treatment of cancer

Examples:
The effect of antibiotic residues on dairy products
Photocyanation of aromatic compounds

Search

Advanced Search

3. (可选) 点击 **Advanced Search**, 通过限定项 (如出版年、文献类型、语言、作者名和/或公司名) 限定检索范围。如果希望始终显示这些检索限定项, 则可以勾选上 **Always Show** 前面的方框。

[Advanced Search](#) Always Show

Publication Years
Examples: 1995, 1995-1999, 1995-, -1995

Document Types

<input type="checkbox"/> Biography	<input type="checkbox"/> Historical
<input type="checkbox"/> Book	<input type="checkbox"/> Journal
<input type="checkbox"/> Clinical Trial	<input type="checkbox"/> Letter
<input type="checkbox"/> Commentary	<input type="checkbox"/> Patent
<input type="checkbox"/> Conference	<input type="checkbox"/> Preprint
<input type="checkbox"/> Dissertation	<input type="checkbox"/> Report
<input type="checkbox"/> Editorial	<input type="checkbox"/> Review

Languages

<input type="checkbox"/> Chinese	<input type="checkbox"/> Japanese
<input type="checkbox"/> English	<input type="checkbox"/> Polish
<input type="checkbox"/> French	<input type="checkbox"/> Russian
<input type="checkbox"/> German	<input type="checkbox"/> Spanish
<input type="checkbox"/> Italian	

Author

Last Name *	First	Middle
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

Company
Examples:
Minnesota Mining and Manufacturing
DuPont

提示: 除非检索要求非常明确, 通常不建议在一开始检索时就使用限定项, 这样就可以先获得比较全面的结果集。如果有需要, 可以在后面通过使用 **Refine** 功能限定结果集。

4. 点击 **Search**.
5. 在研究主题候选项页面, 点击一个或者多个候选项。

1 of 12 Research Topic Candidates Selected		References
<input type="checkbox"/>	59 references were found containing "tyrosine kinase inhibitors in the treatment of cancer" as entered.	59
<input checked="" type="checkbox"/>	3879 references were found containing all of the concepts "tyrosine kinase inhibitors", "treatment" and "cancer" closely associated with one another.	3879
<input type="checkbox"/>	17344 references were found where all of the concepts "tyrosine kinase inhibitors", "treatment" and "cancer" were present anywhere in the reference.	17344
<input type="checkbox"/>	10621 references were found containing the two concepts "tyrosine kinase inhibitors" and "treatment" closely associated with one another.	10621
<input type="checkbox"/>	27557 references were found where the two concepts "tyrosine kinase inhibitors" and "treatment" were present anywhere in the reference.	27557
<input type="checkbox"/>	10817 references were found containing the two concepts "tyrosine kinase inhibitors" and "cancer" closely associated with one another.	10817
<input type="checkbox"/>	24803 references were found where the two concepts "tyrosine kinase inhibitors" and "cancer" were present anywhere in the reference.	24803
<input type="checkbox"/>	531003 references were found containing the two concepts "treatment" and "cancer" closely associated with one another.	531003
<input type="checkbox"/>	1198011 references were found where the two concepts "treatment" and "cancer" were present anywhere in the reference.	1198011
<input type="checkbox"/>	48580 references were found containing the concept "tyrosine kinase inhibitors".	48580
<input type="checkbox"/>	9585444 references were found containing the concept "treatment".	9585444
<input type="checkbox"/>	3841905 references were found containing the concept "cancer".	3841905

Get References

提示：候选项是基于概念而给出的，这些概念是 SciFinder 根据输入语句进行识别后产生的。在上面的例子中，包含的概念有“酪氨酸激酶抑制剂（*tyrosine kinase inhibitors*）”，“治疗（*treatment*）”和“癌症（*cancer*）”。不同的候选项代表了概念在文献中的相互位置：“as entered”表示概念在一个单一的短语中、“closely associated”表示概念通常在一句话或者同一标题中、anywhere 表示在文献中的“任意位置”（概念之间的位置可能很远）。

每个候选项中的文献数并不是选择查看的关键因素（因为 SciFinder 的分析工具可以对大量的文献进行快速评估和筛选）。

更重要的是评估 SciFinder 是否正确解释了概念。如果对候选项不满意，可以单击导航条，返回到检索页面然后修改检索词。

6. 点击 Get References.

作者名检索

使用该检索选项检索某个作者、发明人或者编辑发表的文献。

操作步骤

1. 选择 **Explore > Author Name**.
2. 在姓名栏中输入某个作者、编辑或者发明人姓名。必须输入姓氏（**Last Name**）。

3. (可选)如果不希望获得姓氏的不同拼写，可以不用勾选 **Look for alternative spellings of the last name**。
4. 点击 **Search**。
5. 在候选项页面，勾选一个或者多个姓名。

REFERENCES		
		References
Select All Deselect All 4 of 18 Author Name Candidates Selected		
<input type="checkbox"/>	FRAILEY MAX L	1
<input type="checkbox"/>	FRAILEY MICHAEL DEAN	1
<input type="checkbox"/>	FRAILEY MIKE	2
<input type="checkbox"/>	FRALEY M	0
<input type="checkbox"/>	FRALEY M A	1
<input type="checkbox"/>	FRALEY M C	1
<input checked="" type="checkbox"/>	FRALEY M E	2
<input type="checkbox"/>	FRALEY MARIE ELENA A	1
<input checked="" type="checkbox"/>	FRALEY MARK	10
<input checked="" type="checkbox"/>	FRALEY MARK E	152
<input checked="" type="checkbox"/>	FRALEY MARK EDWARD	1
<input type="checkbox"/>	FRALEY MARTA	1
<input type="checkbox"/>	FRALEY MARY A	2
<input type="checkbox"/>	FRALEY MATTHEW A	5
<input type="checkbox"/>	FRALEY MATTHEW N	4
<input type="checkbox"/>	FRALEY MICHAEL	4
<input type="checkbox"/>	FRALEY MICHAEL R	1
<input type="checkbox"/>	FRALEY MIKE	1
<input type="checkbox"/>	FRALEY MILINDA	1

在这个例子中，“**Look for alternative spellings of the last name**”选项提供了 Frailey 的不同拼写。在结果中，没有与 Fraley M.拼写完全匹配的结果。但是对于 Mark Edward Fraley 这个作者却有四个可能的候选项。在获取到所有可能的作者发表的文献之后，可以通过主题词、公司名、以及其他已知的关于某位作者的信息再行限定。

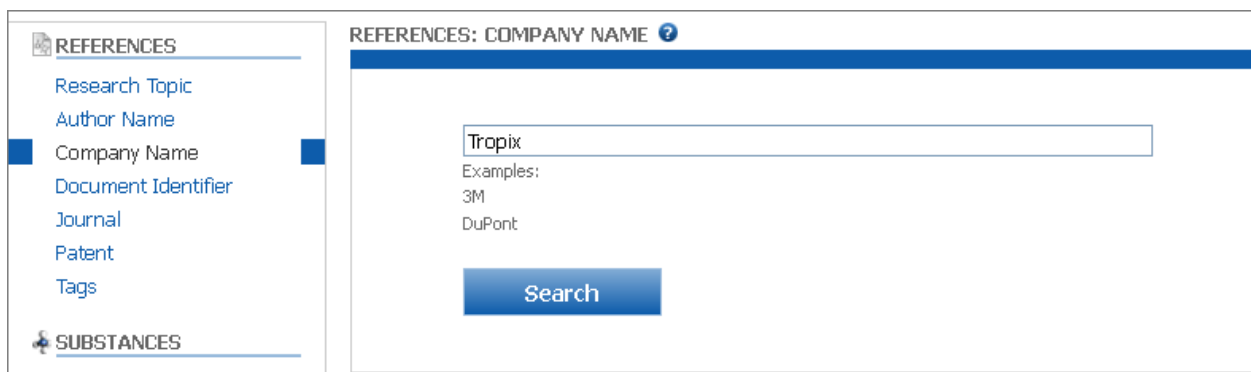
6. 点击 **Get References**.

公司名检索

使用该检索选项可以检索某个公司、大学、政府机构或者非盈利组织发表的文献。

操作步骤

1. 选择 **Explore > Company Name**。
2. 输入公司名称或者公司片断名。



The screenshot shows the SciFinder interface. On the left, a sidebar menu is visible with the following options: REFERENCES, Research Topic, Author Name, Company Name (highlighted with a blue bar), Document Identifier, Journal, Patent, Tags, and SUBSTANCES. The main content area is titled 'REFERENCES: COMPANY NAME' and features a search input field containing the text 'Tropix'. Below the input field, there are examples: 'Examples: 3M DuPont'. A blue 'Search' button is positioned below the examples.

3. 点击 **Search**。

注意：可以使用 **Analyze** 选项中的 **Company-Organization** 来分析结果。列出的选项可以帮助您进一步获取到相关的公司名。

REFERENCES

Get Substances Get Reactions Get Related Citations Get Full Text Tools Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

Analyze Refine Categorize Sort by: Accession Number

0 of 113 References Selected Page: 1 of 6

Analyze by: Company-Organization

Tropix Inc, USA	76
Tropix Inc Bedford MA 01730	9
Tropix, USA	7
Tropix Bedford MA USA	3
Tropix Inc Bedford Massachusetts 01730	3
Tropix Inc Bedford Massachusetts 01730 USA	3
Tropix Bedford MA 01730	2
Advanced Discovery Sciences Applied Biosystems Tropix Division Bedford MA 01730 USA	1
Advanced Discovery Sciences, USA	1
Tropix Inc 47, USA	1

Show More

- Dendritic chemiluminescent substrates**
By Sparks, Alison L.
From PCT Int. Appl. (2002), WO 2002057745 A2 20020725. | Language: English, Database: CAPLUS
The invention concerns chemiluminescent substrate delivery systems comprising a conjugate a dendrimer and at least one chemiluminescent substrate are provided. The substrate delivery systems can also include a chemiluminescence enhancer. The dendrimer/chemiluminescent substrate conjugates can be used in kits including an enzyme capable of activating the chemiluminescent substrate to produce a per-oxygenated intermediate that decomps. to produce light. The dendrimer/chemiluminescent substrate conjugates can be used in assays to detect the presence of an analyte (e.g., an enzyme, an antibody,...
- The NorthStar HTS workstation luminescence detection system**
By Olesen, Corinne E. M.; Boldt-Houle, Deborah M.; Yan, Susan; D'Eon, Brian J.; Liu, Betty; Tillotson, Bonnie; Voyta, John C.; Bronstein, Irena
Edited by Case, James F
From Bioluminescence & Chemiluminescence, Proceedings of the International Symposium, 11th, Pacific Grove, CA, United States, Sept. 6-10, 2000 (2001), 485-488. | Language: English, Database: CAPLUS
The NorthStar HTS workstation is a fully integrated high throughput screening (HTS) luminescence detection system developed to expedite lead discovery with whole-plate imaging for both glow and flash luminescence chemistries. Luminescent assay systems, including homogeneous cell-based assays and heterogeneous immunoassay formats, using several different luminescence chemistries, were developed and performed on the NorthStar workstation. The results showed that NorthStar HTS workstation is capable of imaging flash and glow luminescence assays, and is compatible with multiple microplate format...
- Enzyme-based G protein-coupled receptor assay for monitoring GPCR activity and protein/protein interactions in GPCR signaling and for screening ligands**
By Palmer, Michelle A. J.; Gee, Melissa; Tillotson, Bonnie; Chang, Xia-jia
From PCT Int. Appl. (2001), WO 2001059451 A1 20010816. | Language: English, Database: CAPLUS
Methods for detecting G-protein coupled receptor (GPCR) activity; methods of assaying GPCR activity; and methods of screening for GPCR ligands, G-protein-coupled receptor kinase (GRK) activity, and compds. that interact with components of the GPCR regulatory process are described. The present invention involves the use of a proprietary technol. (ICAST, Intercistronic Complementation Anal. Screening Technol.) for monitoring protein/protein interactions in GPCR signaling. The method involves using 2 inactive β -galactosidase mutants, each of which is fused with one of two interacting protein pa...
- An enzyme complementation assay for G protein-coupled receptors and their interactions and analysis of orphan receptor function**

文献识别号检索

根据某个文献识别号获取文献：比如专利号或者数字对象识别号（DOI）

操作步骤

1. 选择 **Explore > Document Identifier**。

REFERENCES: DOCUMENT IDENTIFIER ?

Enter one per line.
Examples:
1983:4296
107:12935
10.1021/np050327j

Search

2. 最多可以输入 25 个文献识别号（每行输入一个识别号）。可以使用下面的任何一个识别号进行文献检索：

收录号 (Accession number)	<p>收录号是数据库中每条记录拥有的独一无二的识别号。</p> <p>在 CAplusSM 文献中，收录号是以下面格式排列的 10 位数字：</p> <p>例：2009:624911</p> <p>在 MEDLINE[®] 文献中，收录号具有相同的格式，但是没有冒号。</p>
文献号 (Document number)	<p>在印刷版的化学文摘(CA)中，文献号是一个系列标识号：分配给每条摘要的系列数字识别号，包括校验数字，从每卷开始，文献识别号一直贯穿到每卷的 26 期。</p> <p>在 CAplusSM 中，文献号是 CAS 收录号 (CAN)。</p> <p>文献号的格式是：vol:n...n.</p> <p>例：148:276656</p>
专利号 (Patent number)	<p>专利号是任何识别专利的号码，可以是公开号、专利申请号或者优先权申请号。</p> <p>在这个号码中，国家代码必须置于日期前。</p>

	<p>年份可以是两位数或者四位数的格式（如：92 或 1992）。</p> <p>例：JP 1992-502228</p>
PubMed ID 号	<p>PubMed ID 号是 MEDLINE(美国国立医学图书馆)分配给每篇文献的号码。</p> <p>这个号码不使用标点符号。</p> <p>例：12608445</p>
数字对象识别号 (PubMed ID number)	<p>数字对象识别号，或者 DOI[®]，专门用于识别在生命周期中的电子文件。DOI 系统由国际 DOI 基金会管理。</p> <p>SciFinder 在 CAplus 数据库中检索数字识别号。</p> <p>所有的 DOI 以 10 开头。前缀用于识别注册人，后缀是注册人选择的用于识别对象的信息。用正斜杠分隔前缀和后缀。</p> <p>例：10.1021/np050327j</p>

3. 点击 **Search**。

检索期刊信息

使用该检索选项可以检索期刊或者非专利文献（如，书和会议论文集）。

操作步骤

1. 选择 **Explore > Journal**。

2. 在检索区域输入数据

- 期刊检索至少需要提供**期刊名称**。其他数据可以是**卷 (Volume)**，**期 (Issue)**，或者**起始页码 (Starting Page)**。
- 作者名检索至少需要提供**作者的姓氏 (Author Last Name)**。其他数据可以是**名 (First)**或者**中间名 Middle**。
- **公开年份 (Publication Year)** 检索至少需要提供**期刊名称 (Journal Name)**，**题名 (Title Word (s))**，或者**作者的姓氏 (Author Last Name)**。

可在此区域输入下面的数据：

期刊名称 (Journal Name)	全名、部分名、简写或者首字母缩写。 简写或不包含空格或者标点符号的缩写 最多 30 个字符。
卷 (Volume)	数字 (38) 或者字母数字字符串 (45a)。
期 (Issue)	数字 (16) 或者月份 (六月)。

起始页码 (Starting Page)	数字 (46), 字母 (iii), 或者字母数字字符串 (m287)。
题名 (Title Word (s))	标题的全名或者部分名 (一个或多个词)。
作者的姓氏 (Author Last Name)	姓氏
名 (First)	名的首字母
中间名 (Middle)	中间名的首字母
公开年份 (Publication Year)	输入单一的年份, 或者使用连字符限定一个年份范围, 比如 1975-1995. 可以通过在某个年份前后加连字符进行年份范围不确定的检索: 比如, 1975-代表 1975 年以及 1975 年后的文献, 或者-1995 代表所有 1995 年以及 1995 年之前的文献。

3. 点击 **Search**。

技巧: 要查看指定期刊的目录内容, 则可以输入**期刊名**, **卷和期**。通过 **Tools** 菜单中的 **Remove Duplicates** 确保将 MEDLINE 中重复的文献自动移除。也可以通过系统设置, 自动去重。文献结果集中将包含期刊目录中的图片和描述。

检索专利信息

使用该检索选项可以检索到专利文献信息。

操作步骤

1. 选择 **Explore > Patent**。

REFERENCES

- Research Topic
- Author Name
- Company Name
- Document Identifier
- Journal
- Patent**
- Tags

SUBSTANCES

- Chemical Structure
- Markush
- Molecular Formula
- Property
- Substance Identifier

REACTIONS

- Reaction Structure

REFERENCES: PATENT ?

Patent Number

Examples: WO 2001011365

Assignee Name

Examples: Cancer Research Technology Limited

Inventor Last Name * First Middle

Publication Year

Examples: 1995, 1995-1999, 1995-, -1995

Search

2. 输入至少下面的一项信息。如果只检索某个发明人，则只需要输入姓氏。可在此区域输入以下数据：

<p>专利号 (Patent Number)</p>	<p>专利号是任何可以识别一件专利的号码：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 专利号——例: CA 2107100 或 CA2107100 ▪ 专利申请号——例: JP 1992-502228 ▪ 优先权申请号——例: IT 1998-BO661 <p>格式：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 可以输入一个专利号。 ▪ 号码必须不超过 200 个字符。 ▪ 号码可以是大写或小写字母，而且可以包含空格或标点符号。 ▪ 号码可以包含连字符。 ▪ 如果公开年份是确定的，则国家代码必须在日期前面（比如：US 2005-301370）。 ▪ 如果要限定专利的年份，则专利申请号或者优先权申请号可以是两位数或者四位数的格式（例：05 或 2005）。
--------------------------------	---

专利权人 (Assignee Name)	<p>专利权人指的是专利权的拥有者（可以是公司、机构或者个人）：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 公司全名——例：Glaxo SmithKline Corporation ▪ 公司名简称——例：Glaxo ▪ 发明人姓名——例：Adalbert Prior(名字也可以这样输入：Prior, Adalbert) <p>专利权人的名称必须包含至少一个字母字符，并且不可以超过 200 个字符。</p>
姓氏 (Last)	姓氏
名 (First)	名或名的首字母
中间名 (Middle)	中间名或中间名的首字母

3. (可选) 通过 **Publication Year** 限定专利检索。

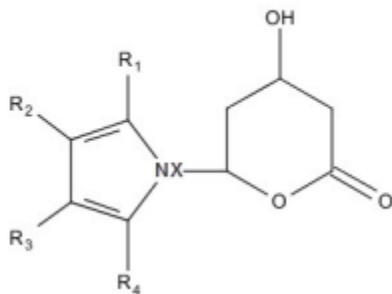
可以输入一个单一的年份，或通过连字符限定一个时间段，比如 1975-1995。可以在某个年份前或后加连字符进行年份范围不确定的检索：比如 1975-代表 1975 年以及 1975 年之后的文献，或者-1995 代表 1995 年以及 1995 年以前的文献。

4. 点击 **Search**。

通过 Markush 结构检索专利

Markush 结构通常是专利权利要求中用来表达的通式化合物和预测性化合物。例：

trans-6-[2-(Substituted pyrrol-1-yl)alkyl]pyran-2-one inhibitors of cholesterol synthesis



R1 = (un)substituted Ph, naphthyl, cyclohexyl, norbornenyl, etc.

R2, R3 = H, Br, Cl, cyano, C1-4 alkyl, etc.

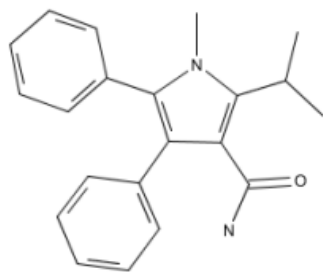
R2R3 = atoms required to form a fused heterocycle

R4 = C1-4 alkyl, cycloalkyl, CF3

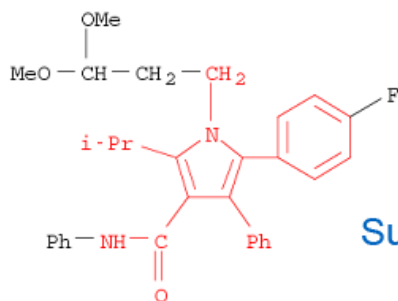
X = CH2, CH2CH2, CHMeCH2

发明人可以不必检测或者制备某族的所有化合物，但是可以通过 Markush 结构制定一个在化学角度上合理的权利要求。

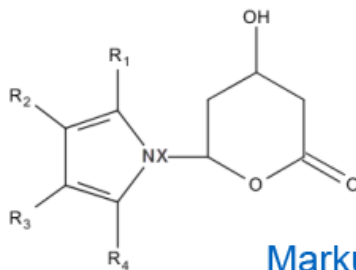
Markush 检索和物质亚结构检索的不同之处在于它的匹配结果是专利中出现的通式结构。检索结果是一系列专利文献。



Structure query



Substructure match



Markush match

操作步骤

1. 选 **Explore > Markush**。

The screenshot shows the SciPlanner interface. At the top, there are tabs for 'Explore', 'Saved Searches', and 'SciPlanner'. Below the tabs, the text 'Author Name "Fraleley, M"' is visible. On the left, a sidebar contains three main sections: 'REFERENCES' (with sub-items: Research Topic, Author Name, Company Name, Document Identifier, Journal, Patent, Tags), 'SUBSTANCES' (with sub-items: Chemical Structure, Markush, Molecular Formula, Property, Substance Identifier), and 'REACTIONS' (with sub-item: Reaction Structure). The 'SUBSTANCES' section is currently selected, and 'Markush' is highlighted. The main content area is titled 'SUBSTANCES: MARKUSH'. It features a 'Structure Editor' window with 'Java' and 'Non-Java' tabs. The 'Structure Editor' window contains a 'Click to Edit' prompt. To the right of the editor, the 'Search Type' section has two radio buttons: 'Allow variability only as specified' (unselected) and 'Substructure' (selected). Below the editor, there is an 'Import CXF' link and a large blue 'Search' button.

2. 点击 **Import CXF** 可以导入之前以 CXF 格式保存的结构。

3. 使用结构编辑器 **Structure Editor**。

a. 点击编辑器图标开始结构编辑。（可以点击标签切换 **Java** 或非-**Java** 编辑器。**Java** 编辑器需要一个 **Java JRE** 和插件）。

b. 绘制结构。（**注意**: Markush 检索会自动将输入的结构式进行环锁定，不会发生并环取代。这个预设参数被用于聚焦专利全景的初步评估。用户无法修改该参数。）

c. 点击 **OK** 将结构上传到检索页面。

4. 选择检索类型

- **Allow variability only as specified** 表示只能在 R-基团、其他可变原子或键上有取代。
- **Substructure** 表示没有被明确锁定的位置处都可以有取代。

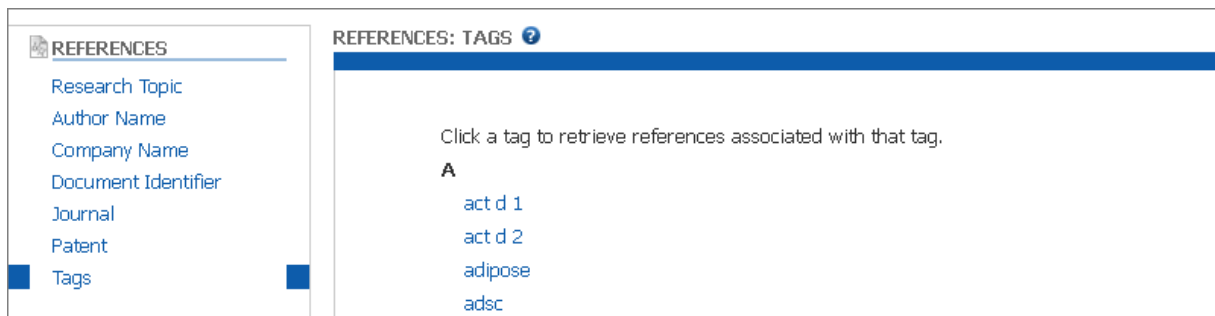
5. 点击 **Search**。

标签检索

利用该检索选项可以获取自定义词语标记的文献。

操作步骤

1. 选择 **Explore > Tags**。



2. 从标签的字母顺序列表中，点击标签就可检索到和这个标签相关的文献。

查看和分析文献选项

SciFinder 帮助您评估检索结果、并快速地定位最相关的结果集。

查看文献结果集

查看文献结果集

当检索完成后，结果就会被显示在**文献**页面。可以快速地浏览标题和摘要、或者点击文献标题的超链接查看文献详情。可以选择限制每页显示的结果数量，也可以选择限制摘要显示的文字数量。

文献排序

文献排序

可以通过选择限定条件对文献进行排序（如，可以通过排序查看最早的专利文献或者被其他论文引用次数最多的文献）。

查看文献详情

查看文献详情

要查看文献详情，则请点击标题超链接。**文献详情**页面提供了完整的摘要、书目、引文、以及标引数据。这些信息可以被用做相关检索的基础。

分析当前结果集

分析当前结果集

可以根据 **SciFinder** 提供的分析选项分析结果集（如，可以通过作者名分析，以确定哪些作者在某个特定研究领域内是最活跃的）。可以在分析的基础上建立一个新的结果集、或者清除分析限定，重新回到分析前的完整结果集。

文献分类

文献分类

使用 **Categorize** 可以根据学科分类和标引词对文献进行快速筛选。

回到先前的结果集

回到先前的结果集

当执行一个操作、创建一个新的结果集后，一个检索条目就被添加到了页面顶部的“检索足迹”导航条中。可以点击导航条目中先前的结果集获取文献。

文献页面图

当文献检索完成后，结果就呈现在文献页面中。

Research Topic "apomorphine controlled release" > references (60)

REFERENCES

Analyze by: Author Name

Fang Jia You 5

Chi Chen Hsien 3

El Rashidy Ragab 3

Freedman Joshua 3

Harrison Nancy 3

Hassan Emad Eldin 3

Hsu Shu Hui 3

Jankovic Joseph 3

Junginger H E 3

Macdonald David 3

Show More

Sort by: Citing References

0 of 60 References Selected

1. Embedding and encapsulation of controlled release particles

By Van Lengerich, Bernhard H. From PCT Int.

Controlled release particles are embedded in a heat sensitive polymer matrix. The produced particles are continuously releasing the component. A release-rate controlling component is embedded in the particles. The additional capacity component for extending the release time.

2. Bioavailability of apomorphine following intranasal administration of mucoadhesive drug delivery systems in rabbits

By Ugwoke, M. I.; Exaud, S.; Van Den Mooter, G.; Verbeke, N.; Kinget, R. From European Journal of Pharmaceutical Sciences (1999), 9(2), 213-219. | Language: English, Database: CAPLUS

Purpose: The purpose of this study was to investigate both the in vitro and in vivo release of apomorphine from mucoadhesive powder formulations of Carbopol 971P and polycarbophil. Methods: The in vitro drug release from the mucoadhesive formulations was studied by using a modified USP XXII rotating basket. The pharmacokinetics of apomorphine given as a soln. was detd. after s.c. and intranasal administrations to rabbits. The animals also received intranasally the mucoadhesive dosage forms and immediate release lactose powder mixt. Comparisons were made between the salient pharmacokinetic ...

3. Nasal mucoadhesive delivery systems of the anti-parkinsonian drug, apomorphine: influence of drug-loading on in vitro and in vivo release in rabbits

By Ugwoke, Michael Ikedchukwu; Sam, Exaud; Van Den Mooter, Guy; Verbeke, Norbert; Kinget, Renaat From International Journal of Pharmaceutics (1999), 181(1), 125-138. | Language: English, Database: CAPLUS

点击图中的字母，查看文献页面各选项的对应解释

A



在文献标题和摘要中与检索词匹配的词语将被高亮显示。在这个例子中，检索式包含的概念有 *apomorphine*, *controlled* 和 *release*。含有相同词根的单词(*controlling* 与 *controlled* 匹配)和同义词(*delivery* 与 *release* 匹配)都是匹配的。

文献标题是一个超链接。可以点击文献标题进入到文献详情页面。

Quick View 选项可以实现在不离开当前页面就可以预览文献。

在文献结果集页面，可能会看到 **PatentPak** 选项（获取专利的 PDF 全文及其同族的 PDF 全文），或者 **Other Sources**（链接至 SciFinder 平台外的全文）选项（需要订购 **PatentPak** 才能直接获取专利 PDF 全文）。

<p>B</p>	<p>当前结果集中有 60 篇文献。可以点击文献标题旁边的复选框选择一篇文献，也可以点击下拉箭头选择 Select All 选择全部文献。</p> <p>下拉菜单中的其他选项帮助您清除全选，保持选择或移除选中的。</p> <p>H 处显示的功能，比如 Get Substances 将会在选中的文献中起到作用。如果没有选择文献，这个功能将会作用于结果集中的所有文献。</p> <p>Sort by 功能帮助您根据收录号、作者名、引文、公开年份或者标题对文献进行排序。</p> <p>可以点击蓝色箭头指定升序或者降序。在这个例子中，文献已经根据引文数量进行降序排列。</p>
<p>C</p>	<p>点击 Display Options 改变每页显示的结果数或者摘要文字的数量。在对话框中进行选择，然后点击 OK。</p> <p>点击箭头可以查看第一页，前一页，下一页或最后一页。或者，输入具体的页码，直接跳转到指定页。</p>
<p>D</p>	<p>可以使用这些图标检索和文献相关的信息。</p> <p>检索相关的物质信息，可以点击分子图标。</p> <p>在这个例子中，一共有 46 篇文献引用了这篇文章。可以点击文件图标，获取引文信息。</p>

	<p>利用 Analyze 选项筛选结果集（如，用作者名筛选）。</p> <p>可以单击子集条查看由作者 Jia You Fang 发表的 5 篇文献。</p> <p>将显示发表文献数最多的前十位作者名。可以单击 Show More 查看所有的作者名。</p> <p>单击 Analyze by 的下拉箭头改变分析选项。选项有：</p> <ul style="list-style-type: none">• 作者名• CAS 登记号• CA 学科分类• 公司-机构名• 数据库• 文献类型• 索引词• CA 概念词标题• 期刊名• 语言• 公开年份• 补充术语
	<p>可使用 Refine 对初始的检索结果进行限定，得到更精确的子集。</p> <p>选择 Refine by 选项，然后在检索区域输入显示的限定条件。</p> <p>单击 Refine 就产生新的结果集。</p>
	<p>选择 Category Heading。标题分类会出现在 Category 栏中。然后选择一个分类，Index Terms 就会出现。选择感兴趣的索引词（index terms）。</p> <p>单击 OK, SciFinder 就会将结果集限定为仅包含所选索引词的文献。</p>

	<p>Get Substances 获取选中文献中报道的物质。</p> <p>Get Reactions 获取选中文献中报道的反应。</p> <p>Get Related Citations 提供了 Get Citing（引用了被选中文献的文献）和 Get Cited（被选中文献所引用的文献）两个选项。</p> <p>Tools 提供的下拉菜单选项：</p> <ul style="list-style-type: none">▪ Remove Duplicates—移除 MEDLINE 中重复的文献▪ Combine Answer Sets—合并当前结果集和之前保存过的结果集▪ Add Tags—使用定制的词语对选中的文献进行标记 <p>Creast Keep Me Posted Alert 运用指定结果集相同的检索式，定期自动获取最新信息。</p> <p>Send to SciPlanner 将选中的反应推送至 SciPlanner library 中。</p>
	<p>“检索足迹”记录了结果集的变化。点击检索足迹，可回到上层结果集。</p>
	<p>点击 Save, Print 或 Export 保存、打印或导出所选文献。</p>

文献详情页面图

文献详情（Reference Detail）页面显示了指定文献的详细信息。

1. **Controlled release formulations and associated methods**

By: Parikh, Nilesh H.; Melaku, Teshome **A**
 Assignee: Watson Laboratories, Inc., USA

A pharmaceutical formulation having a geometric configuration that affects the release characteristics of active agents contained therein and assocd. method... (10) may include a controlled release layers (14), at least one of the adjacent layers (14) are arranged such that they cover a portion of continuous layer, depending... (12) having a first... (16) (14) (18)

QUICK LINKS
0 Tags, 0 Comments

PATENT INFORMATION **B**
 Jul 1, 2014
 US 8765178
 B2

APPLICATION
 Jul 19, 2006
 US 2006-458651

PRIORITY
 Jul 19, 2006
 US 2006-458651
 Jul 19, 2007
 WO 2007-US16498
 Jul 19, 2007
 NZ 2007-574325
 Jul 19, 2007
 CN 2007-80034617

SOURCE

点击图中的字母，查看文献详情页面各选项的对应解释

Equivalent to 148:175784
 (WO)
 Patent
 2014
 CODEN:USXXAM

Patent Information C

Patent No.	Kind	Language	Date	Application No.	Date
US 8765178	PATENTPAK B2		Jul 1, 2014	US 2006-458651	Jul 19, 2006
US 20080020039	A1		Jan 24, 2008		
AU 2007275557	A1		Jan 24, 2008	AU 2007-275557	Jul 19, 2007
CA 2657913	A1		Jan 24, 2008	CA 2007-2657913	Jul 19, 2007
CA 2657913	C		Sep 22, 2015		
WO 2008011169	PATENTPAK A2	English	Jan 24, 2008	WO 2007-US16498	Jul 19, 2007
WO 2008011169	A3		Nov 6, 2008		
EP 2043647	A2		Apr 8, 2009	EP 2007-836171	Jul 19, 2007
TR 2009000437	T1		May 21, 2009	TR 2009-437	Jul 19, 2007
CN 101553230	A		Oct 7, 2009	CN 2007-80034617	Jul 19, 2007
CN 101553230	B		Apr 11, 2012		
JP 2009543875	T		Dec 10, 2009	JP 2009-520861	Jul 19, 2007
JP 5202522	PATENTPAK B2	Japanese	Jun 5, 2013		
NZ 574325	A		Nov 25, 2011	NZ 2007-574325	Jul 19, 2007
NZ 590674	A		Feb 24, 2012	NZ 2007-590674	Jul 19, 2007
CN 102512397	PATENTPAK A	Chinese	Jun 27, 2012	CN 2011-10320167	Jul 19, 2007
RU 2463049	PATENTPAK C2	Russian	Oct 10, 2012	RU 2009-105373	Jul 19, 2007
BR 2007014304	A2		Apr 9, 2013	BR 2007-14304	Jul 19, 2007

CLASSIFICATIONS

US424468000

ACCESSION NUMBER

2014:1069794
CAN161:132561
CAPLUS

LANGUAGE

English

Priority Application

US 2006-458651	A	Jul 19, 2006
WO 2007-US16498	W	Jul 19, 2007
NZ 2007-574325	A3	Jul 19, 2007
CN 2007-80034617	A3	Jul 19, 2007

Indexing D

Pharmaceuticals (Section63-6)

Concepts

- Analgesics
- Controlled-release drug delivery systems
- Isomers
- NMDA receptor antagonists
- Opium

controlled release formulations and assoc. methods

Opioids

controlled release formulations and assoc. methods

Pharmacokinetics; Therapeutic use; Biological study; Uses

Pharmaceutical tablets

controlled-release; controlled release formulations and opioid analgesic controlled release formulation

Substances E

64-17-5 Ethanol, analysis Q

controlled release formulations and assoc. methods

Analytical role, unclassified; Analytical study

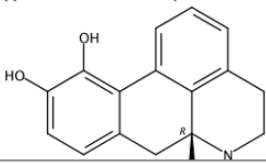
50-78-2 Aspirin Q

57-27-2 Morphine, biological studies Q

57-42-1 Meperidine Q

58-00-4 Apomorphine Q

Rotation (-). Absolute stereochemistry.



Citations F

Stephenson; US 3146169 A 1964 Q

Baker; US 4569937 A 1986 Q

Elger; US 4844907 A 1989 Q

Sims; US 5164398 A 1992 Q

Conte; US 5422123 A 1995 Q

Conte; US 5626874 A 1997 Q

Fassih; US 5783212 A 1998 Q

Palepu; US 5827537 A 1998 Q

Oshlack; US 5968551 A 1999 Q

Chen; US 6087386 A 2000 Q

Kushia; US 6348216 B1 2002 Q

Kushia; US 6361794 B1 2002 Q

Thassu; US 6663892 B1 2003 Q

Kaiko; US 6696066 B2 2004 Q

Fanara; US 6699502 B1 2004 Q

Appel; US 6706283 B1 2004 Q

Oshlack; US 6733783 B2 2004 Q

Woolfe; US 6787155 B2 2004 Q

Rosenberg; US 6787157 B1 2004 Q

Grimmett; US 6838094 B2 2005 Q

Malik; US 6827338 B2 2005 Q

Tags G

0 Tags | [Edit Tags](#)


Comments

0 Comments Sort by: Newer First | Older First

No comments

Copyright © CAS, a division of American Chemical Society

A	<p>此处显示了完整的摘要。有些文献还包含了详细的图表。</p>
B	<p>此区域显示了书目信息。</p>
C	<p>在专利信息区域列出了专利族成员。</p> <p>如果某篇专利提供了 PatentPak 链接，则可以通过点击链接打开 PDF 全文。</p> <p>如果专利号是超链接（如下表格中的 WO 2008011169）的，则此时可以点击链接获得专利的文献详情。</p> <p>要获取这些专利，需要订购 PatentPak。</p>
D	<p>Indexing 显示了摘要的 CA Section title。可通过 CA Section Title 分析结果集中的文献。</p> <p>Concepts 列出了概念标题，用于分类文献主题。可以通过点击某个概念标题检索数据库中和这个概念相关的所有文献。也可以通过 CA Concept Heading 分析某个文献结果集。</p> <p>Supplementary Terms 提供了概念标题列表中受控词未表达的信息。可使用 Supplementary Terms 分析文献结果集。</p>
E	<p>此区域列出了文献中报道的物质。</p> <p>点击 CAS 登记号的超链接可以查看物质详情。显示的物质详情包括：化学名称、结构式、预测和实验得到的性质数据，以及谱图信息。</p> <p>点击 Quick View 图标 ，可以在不离开当前页面的状态下预览物质信息。</p>
F	<p>被 CAplusSM 标引的 Citations 显示为蓝色标记的超链接。没有被 CAplus 标引的 Citations 则显示为黑色。</p>

	<p>点击 Quick View 图标, 可以在不离开当前页面的状态下预览物质信息。或点击文献的超链接查看引文的文献详情信息。</p>
<p>G</p>	<p>Tags 是用户给某篇文献添加的可以检索的术语。可以使用 Tags 检索选项快速地检索到所有曾经被标记过的文献。</p> <p>点击 Edit Tags 链接可以添加或编辑某个标签。</p> <p>用户还可以给某篇文献添加自己的评论。要添加一条评论, 请在 Add Comment 框中输入评论, 然后点击 Save 即可。</p>
<p>H</p>	<p>使用导航链接可以:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 返回到结果集的文献页面 ▪ 进入上一条或下一条文献详情 ▪ 跳到文献的 Tags 或 Comments。
<p>I</p>	<p>获取和文献相关的信息, 点击:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Get Substances 获取文献中报道的物质。 ▪ Get Reactions 获取文献中报道的反应。 ▪ Get Related Citations 选择 Get Cited (获取文献的参考文献) 或 Get Citing (获取引用这些文献的论文) ▪ View with PatentPak 打开专利文献的 PDF 全文 (要使用该功能, 需要订购 PatentPak)。 ▪ Link to Other Sources 在 SciFinder 平台外获取全文。 <p>点击 Send to SciPlanner 将反应推送至 SciPlanner library 中。</p>

J 要保存或共享当前文献，点击：

- **Link:** 复制文献的 URL 链接，可以粘贴到书签、文件或者 email 中。
- **Save:** 将文献保存到 SciFinder 平台下的 Saved Answer Sets 中。
- **Print:** 将文献打印为 PDF 文件。
- **Export:** 将文献导出为一个外部的文件。

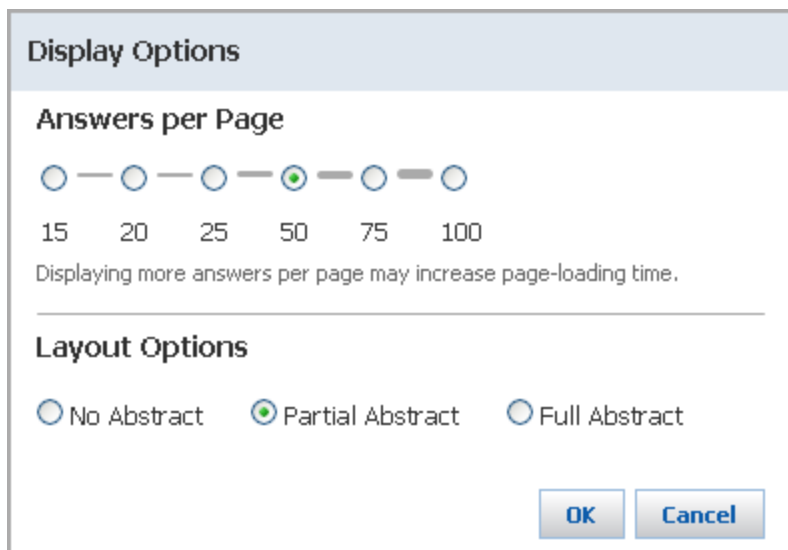
查看文献结果

当检索结束后，文献结果会显示在文献页面。

The screenshot shows the SciFinder REFERENCES interface. At the top, there are navigation buttons: 'Get Substances', 'Get Reactions', 'Get Related Citations', and 'Tools'. On the right, there are buttons for 'Create Keep Me Posted Alert' and 'Send to SciPlanner'. Below these is a 'Sort by' dropdown set to 'Citing References' and a 'Display Options' link. The main area shows a list of 60 references selected. Two references are visible:

- 1. Embedding and encapsulation of controlled release particles**
 By Van Lengerich, Bernhard H.
 From PCT Int. Appl. (1998), WO 9818610 A1 19980507. | Language: English, Database: CAPLUS
Controlled release, discrete, solid particles which contain an encapsulated and/or embedded component such as a heat sensitive or readily oxidizable pharmaceutically, biol., or nutritionally active component are continuously produced without substantial destruction of the matrix material or encapsulant. A **release-rate controlling** component is incorporated into the matrix to **control** the rate of **release** of the encapsulant from the particles. The addnl. component may be a hydrophobic component or a high water binding capacity component for **extending** the **release** time. The plasticizable matrix m...
- 2. Bioavailability of apomorphine following intranasal administration of mucoadhesive drug delivery systems in rabbits**
 By Ugwoke, M. I.; Exaud, S.; Van Den Mooter, G.; Verbeke, N.; Kinget, R.
 From European Journal of Pharmaceutical Sciences (1999), 9(2), 213-219. | Language: English, Database: CAPLUS
 Purpose: The purpose of this study was to investigate both the in vitro and in vivo **release** of **apomorphine** from mucoadhesive powder **formulations** of Carbopol 971P and polycarbophil. Methods: The in vitro drug **release** from the mucoadhesive **formulations** was studied by using a modified USP XXII rotating basket. The pharmacokinetics of **apomorphine** given as a soln. was detd. after s.c. and intranasal administrations to rabbits. The animals also received intranasally the mucoadhesive dosage forms and immediate **release** lactose powder mixt. Comparisons were made between the salient pharmacokinetic ...

- 点击 **Display Options**，可以改变每页显示的结果数量或显示的摘要文本量。在出现的对话框中确定选项，然后点击 **OK**。



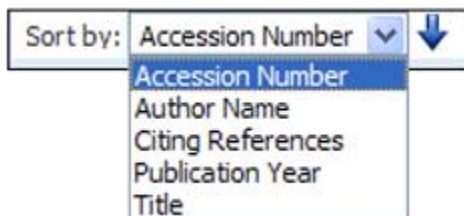
- 要查看其它页码，则请点击箭头  可以查看第一页，前面页码，后面页码或最后一页。或者输入一个具体的页码，直接跳转到指定页。
- 要查看文献详情，则请点击文献标题。 [Reference Detail screen](#) 会显示文献详情。
- 点击文献标题旁边的  [Quick View](#)，在不离开当前页面的状态下预览文献详情。信息就会出现在 [Quick View](#) 弹出窗口中。
- 要打开一篇专利文献或者专利族成员的 PDF 全文，则请点击文献标题旁边的 ，然后选择下拉列表中的相应专利（这个功能只有在订购了 PatentPak 后才可用）。
- 要链接 SciFinder 平台外的全文，则请点击  [Other Sources](#)。这些全文来源于您所在机构图书馆、免费的网络资源、或者付费订购的资源。CAS 的 **Full Text** 选项将开启另一个独立的窗口，在窗口中将列出获取全文的方式。

文献排序

可以根据收录号、作者名、引文、公开年份或者标题对结果进行排序。

操作步骤

1. 点击 **Sort by** 下拉箭头，然后选择排序选项。



收录号 (Accession Number)	按收录号对文献排序（收录号是文献进入数据库时被指定的号码）。大的收录号表示的是最近进入数据库的文献，小的收录号则表示早期进入数据库的文献。
作者姓 (Author Name)	根据作者姓的字母顺序进行排序（当姓相同，则按名的字母顺序排列，如果姓和名都相同，则按中间名的字母顺序排列）。如果有多个作者，则按照第一作者名进行排序。
被引次数 (Citing References)	根据文献被引次数多少排序。
公开年份 (Publication Year)	根据出版年份进行排序。
文献标题 (Title)	根据文献标题的字母顺序进行排序

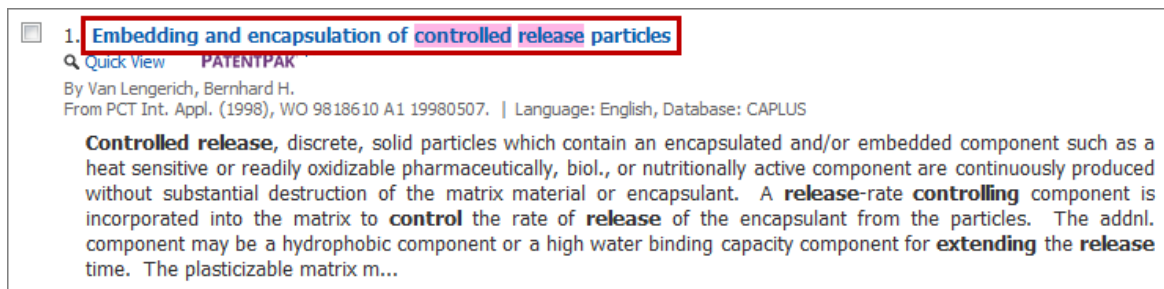
2. 点击箭头可以改变排序的次序，箭头朝上表示升序、箭头朝下表示降序。

[查看文献详情](#)

文献详情页面显示了一篇文献的详细信息。

操作步骤

1. 在文献页面中，点击一篇文献的标题可以进入文献详情页面。



查看 [Map of the Reference Detail screen](#) 获得该页面上显示的其他更多信息。

2. 点击 **Return** 可以回到结果集。或者点击 **Next** 或 **Previous** 查看下一篇或前一篇文献详情。

分析当前结果集

在检索完成后，可以根据分析选项（比如作者名或文献类型）对结果进行筛选，然后得到结果子集。可以显示感兴趣的子集，并将显示的子集创建为一个新的结果集。也可清除分析返回到之前得到的完整结果集。

注： 如果结果集中文献量超过 20,000 篇，则不能得到完全完成的分析结果，此时可在分析条里查看 [Sample Analysis](#)。（查看 [Sample Analysis](#) 获得更多信息。）

操作步骤

从文献页面：

1. 选择**Analyze by**选项（查看下面的描述）。

2. 点击一条分析选项查看该子集中的文献。

— 或 —

点击**Show More**查看除此外10个子集以外的更多其他信息。

The screenshot shows the SciFinder 'REFERENCES' page. On the left, the 'Analyze' sidebar is active, displaying a list of categories with horizontal bars representing the number of references in each: CA Concept Heading (20), Oil spills (17), Petroleum (14), Waters (10), Petroleum products (9), Water purification (8), Seawater pollution (7), Oil spill (5), Absorbents (5), Control apparatus (5), and Oceans (5). A 'Show More' button is at the bottom of the list. The main area shows two search results. The first result is titled '1. Separated - combined marine oil spill recovery method and system [Machine Translation]'. It includes a diagram of a ship's recovery system and a detailed description of the method. The second result is titled '2. Marine oil pollution cleaning and cooling equipment' and describes the application of such equipment.

分析选项:

- **Author Name**——列出作者
- **CAS Registry Number**——列出文献中物质的 CAS 登记号
- **CA Section Title**——《化学文摘》纸本中的 80 个学科信息
- **Company - Organization** ——列出公司或机构名称
- **Database** ——列出文献来自的数据库
- **Document Type** ——列出文献类型
- **Index Term** ——用于对数据库中的文献进行分类的受控词。
- **CA Concept Heading**——用于识别文献中常见的主题内容的受控词。
- **Journal Name** ——列出期刊
- **Language** ——列出撰写原始文献所使用的语言
- **Publication Year**——列出文献公开的年份
- **Supplementary Terms**——文献的关键词，通常是原文作者使用的关键词

如果选择 Show More:

如果想按照字母顺序排列子集，则选择Natural Order。如果想根据数量排序，则选择Frequency。

点击Export，可以将选中的子集导出为Excel或PDF格式的文件。

Analyze - CA Concept Heading

235 Items 2 Selected Export

Sort by: Frequency Page: 1 of 5

Select bars to view only those references within the current answer set.

Concept	Count	Selected
Oil spills	20	<input type="checkbox"/>
Petroleum	17	<input type="checkbox"/>
Waters	14	<input type="checkbox"/>
References not containing information for this analysis	10	<input type="checkbox"/>
Petroleum products	10	<input checked="" type="checkbox"/>
Water purification	9	<input type="checkbox"/>
Seawater pollution	8	<input type="checkbox"/>
Oil spill	7	<input type="checkbox"/>
Absorbents	5	<input checked="" type="checkbox"/>
Control apparatus	5	<input type="checkbox"/>

Apply Cancel

勾选想查看子集前面的方框。

点击Apply查看选中的子集

查看子集后，可以：

点击Keep Analysis, 将当前显示的文献创建 – 或 – 点击Clear Analysis, 消除分析返回到
 成一个新的结果集。 分析之前获得的结果集显示页面。

注: 黄色的子集条代表当前显示的文献 (如, 此处显示的文献为与 CA 概念标题 **Petroleum products** 和 **Absorbents** 相关, 有些也被包含在 **Water purification** 和其他子集中)。

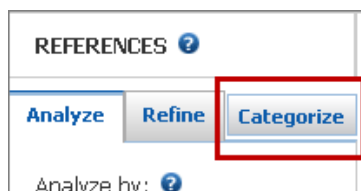
分类文献

在完成一次检索后, 可以使用 **Categorize**, 通过学科分类和标引词对文献进行筛选, 快速地获得感兴趣的结果。

注: 如果结果集中文献量超过 15000 篇, 将不能使用 **Categorize**。在使用 **Categorize** 之前, 需将结果集的数量缩小。

操作步骤

1. 点击 **Categorize** 按钮。



2. 点击一个Category Heading.

3. 从显示出的列表中, 选择一个Category。括号中的数字表明在这个分类中有多少个结果。

The screenshot shows the 'Categorize' interface with the following components:

- 1. Select a heading and category:** A table with 'Category Heading' and 'Category' columns. 'Biology' is selected under 'Category Heading', and 'Substances in adverse effects (103)' is selected under 'Category'.
- 2. Select index terms of interest:** A table with 'Index Terms' and their counts. 'Petroleum' (31), 'Aromatic hydrocarbons' (11), and 'Polycyclic compounds' (10) are checked.
- Selected Terms:** A box containing 'Biology > Substances in adverse effects (3 Terms)'. A note says 'Click 'x' to remove the category from 'Selected Terms'.'
- Buttons:** 'OK' and 'Cancel' buttons at the bottom right.
- Breadcrumbs:** 'Biology > Substances in adverse effects > 3 Index Term(s) Selected' at the bottom left.

6. 点击OK, 显示包含选中术语的文献。

4. 从显示的列表中, 点击选择的index Terms。数字表明每个index term会得到多少结果。

5. 这一栏显示选中术语的汇总。重复2-4步选择更多其他术语。点击X可以删除选中的术语。

回到先前的结果集

当执行了一个检索或者通过筛选创建一个新的结果集后, 一个新的记录就会被添加进文献显示页顶端的“检索足迹”中。可以点击检索足迹中的条目获取之前得到的结果集。

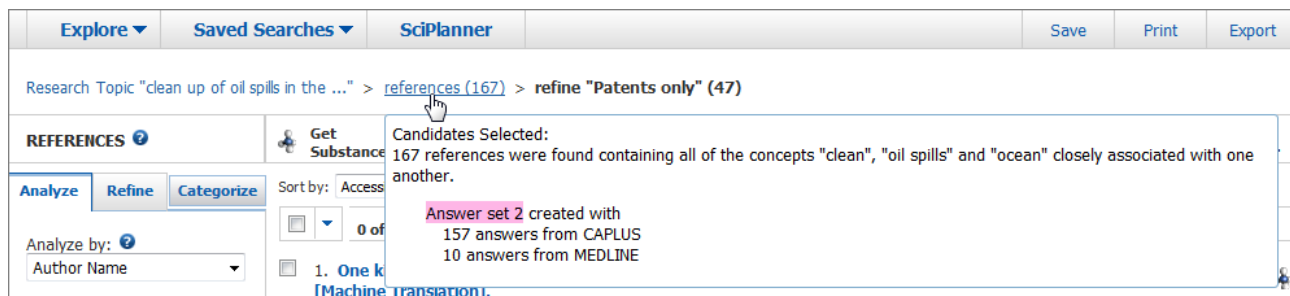
检索足迹记录了结果集的变化。

The screenshot shows the search interface with the following components:

- Navigation:** 'Explore', 'Saved Searches', 'SciPlanner', 'Save', 'Print', 'Export' buttons.
- Breadcrumb Trail:** 'Research Topic "clean up of oil spills in the ..." > references (167) > refine "Patents only" (47)'. A red dot is under 'Patents only'.
- Tools:** 'Get Substances', 'Get Reactions', 'Get Related Citations', 'Tools', 'Create Keep Me Posted Alert', 'Send to SciPlanner'.
- Actions:** 'Analyze', 'Refine', 'Categorize' buttons. 'Sort by: Accession Number' dropdown.
- Status:** '0 of 47 References Selected' and 'Page: 1 of 3'.

操作步骤

1. 要查看一个结果集的信息, 则请将鼠标放在检索足迹上。



2. 要获取之前得到的某个结果集，则请点击检索足迹中的相应条目。

筛选文献的选项

在评估完检索结果后，可能需要进一步筛选结果集。

去除MEDLINE中
的重复文献

去除 MEDLINE 中重复的文献

去除 MEDLINE®和 CAplusSM中互相重复的结果集。

保留或删除
选中的文献

保留或删除选中的文献

手动选择文献，然后选择保留或删除被选中的文献

通过添加检索条件
缩小结果集

通过添加检索条件缩小结果集

使用 **Refine** 标签中的选项指定更多其他检索条件：

- Research Topic 研究主题
- Author Name 作者名
- Company Name 公司名
- Document Type 文献类型
- Publication Year 公开年份
- Language 语言
- Database 数据库

合并结果集

合并结果集

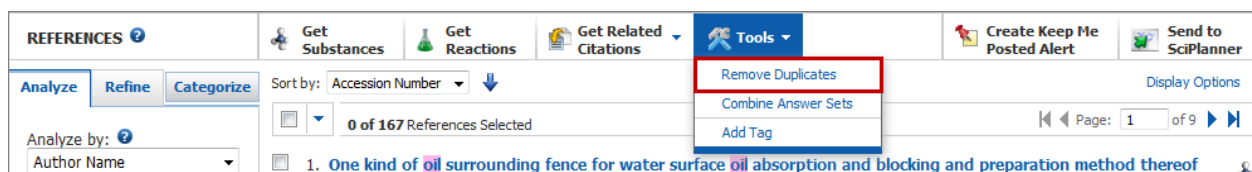
通过布尔逻辑合并、交集或排出等方式合并结果集，并创建一个新的结果集

删除 MEDLINE 中重复的文献

可以在结果集中删除 MEDLINE®中和 CAPLUSSM 重复的结果。

操作步骤

1. 选择 **Tools** 菜单中的 **Remove Duplicates**。



2. 点击页面右上方的 **Preferences**，可以设置将每次检索中重复的结果自动去除。勾选 **Automatically remove duplicate MEDLINE answers**，然后点击 **OK** 保存设置。

保留或删除选中的文献

可以手动选择文献，然后选择保留或删除选中的文献，从而修改当前结果集。

操作步骤

1. 在文献页面，勾选文献。

2. 在选择选项中，选择 **Keep Selected** 或 **Remove Selected**。



添加检索限定条件缩小结果集

Refine 标签中提供了对当前结果集进行更多其他检索限定的选项。

操作步骤

从文献页面：

1. 点击 **Refine** 标签。

2. 点击 **Refine by** 选择下面适当的限定标准。

3. 输入限定标准。

4. 点击 **Refine**。

限定选项	检索条件
Research Topic	研究主题：输入简洁的英文进行查询，并使用介词或其他连词将主题词的概念分开。
Author Name	姓氏，名，中间名（只有姓氏是必须的）。
Company Name	公司名：输入公司名称或者机构部分名称
Document Type	文献类型：勾选想要获取的文献类型（如学位论文、期刊、专利）。
Publication Year	公开年份：输入一个单一的年份，或通过连字符指定一个年份范围（如 1975-1995）。可以用连接符指定一个开放的年份范围如 1975-，代表 1975 年及 1975 年之后的年份。-1995，代表 1995 年及 1995 年之前的年份。
Language	语言：勾选想要的语言（如：中文、英文、法文）
Database	数据库：点击单选按钮查看 CAPLUS 或 MEDLINE。

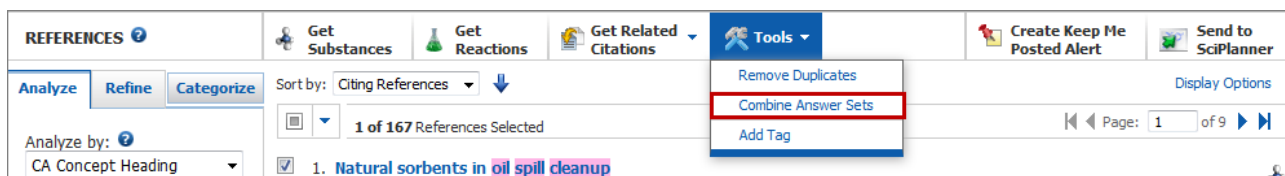
合并文献结果集

通过布尔逻辑运算合并、取交集或排除等方式合并文献结果集，创建一个新的结果集。

操作步骤

将先前保存的结果集和当前结果集合并

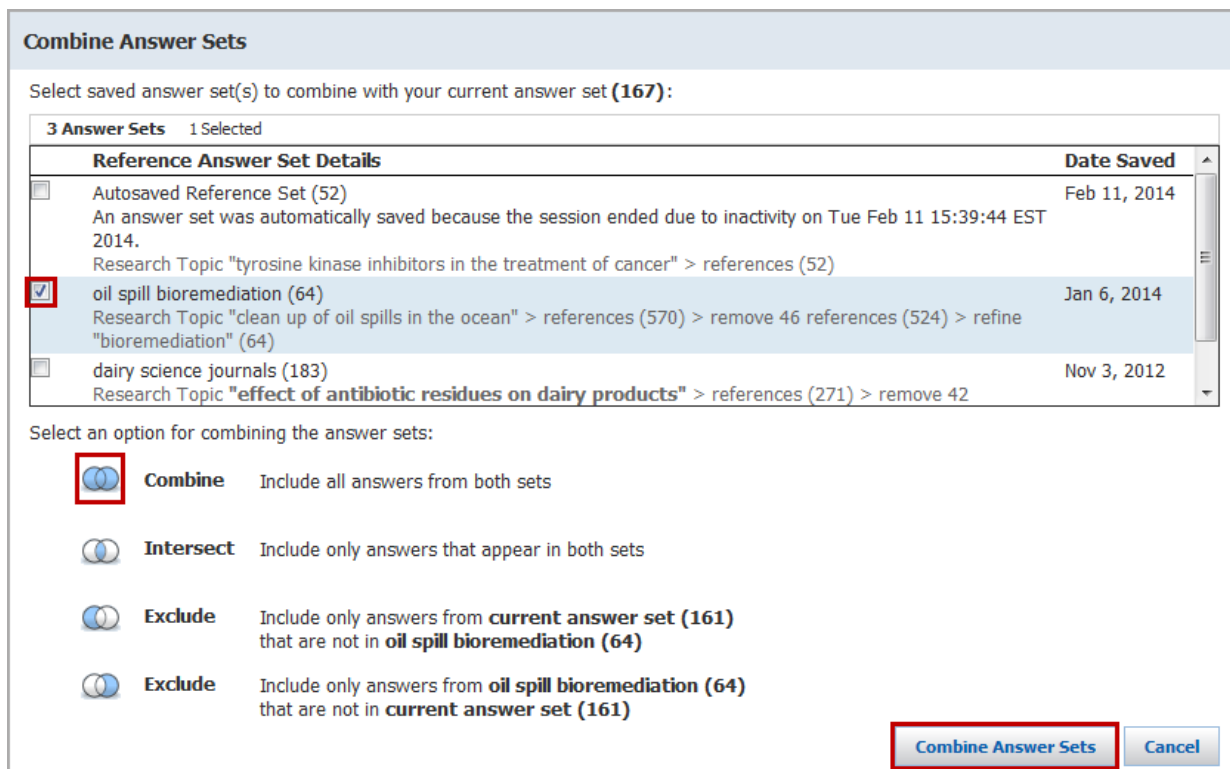
1. 从 **Tools** 菜单中选择 **Combine Answer Sets**。



2. 从保存的结果集列表中，勾选一个或多个保存的结果集。

注：如果选择的结果集超过 1 个，则第三步中的合并选项将只能选择合并或取交集。

3. 点击想使用的合并选项。



4. 点击 **Combine Answer Sets**。

合并先前保存的结果集

1. 选择 **Saved Searches > Saved Answer Sets**.
2. 点击 **References** 显示保存的结果集。
3. 在选择框中勾选上想合并的两个或多个结果集，然后点击 **Combine Answer Sets**。

Research Topic "clean up of oil spills in the ..." > references (161) > refine "Patents only" (44)

SAVED ANSWER SETS Combine Answer Sets

SAVED SEARCHES
 Saved Answer Sets
 Keep Me Posted
 History

2 of 4 Reference Answer Sets Selected **References (4)** **Substances (2)** **Reactions (3)**

<input checked="" type="checkbox"/>	oil spill patents (44) Research Topic "clean up of oil spills in the ocean" > references (161) > refine "Patents only" (44)	Edit	Link	Saved Feb 17, 2014
<input type="checkbox"/>	Autosaved Reference Set (52) An answer set was automatically saved because the session ended due to inactivity on Tue Feb 11 15:39:44 EST 2014. Research Topic "tyrosine kinase inhibitors in the treatment of cancer" > references (52)		Save	Saved Feb 11, 2014
<input checked="" type="checkbox"/>	oil spill bioremediation (64) Research Topic "clean up of oil spills in the ocean" > references (570) > remove 46 references (524) > refine "bioremediation" (64)	Edit	Link	Saved Jan 6, 2014

注：如果选择的结果集超过两个，则第四步合并选项中将只能选择合并或取交集。

4. 点击想使用的合并选项。

Combine Answer Sets

Select an option for combining the two selected saved answer sets:

- Combine** Include all references from both sets
- Intersect** Include only references that appear in both sets
- Exclude** Include only answers from oil spill patents that are not in oil spill bioremediation
- Exclude** Include only answers from oil spill bioremediation that are not in oil spill patents

Combine Answer Sets **Cancel**

5. 点击 **Combine Answer Sets**。

获得相关数据的选项

通过以下操作，可获取单篇文献、选中的文献或整个结果集中文献的相关数据。

获得物质

获得物质

获取文献中报道的物质。这是一个由物质（而不是文献）组成的新结果集。

获得物质

获得反应

获取文献中报道的反应。这是一个由反应（而不是文献）组成的新结果集。

获得参考文献

获得参考文献

获取这篇文献引用的论文和专利。结果是一个新文献结果集。

获得引文

获得引文

获取引用这篇文献的论文和专利。结果是由文献组成的新结果集。

获得文献全文

获得文献全文

使用 [PatentPak](#) 可以获取专利 PDF 全文，或链接到图书馆、网络资源获取全文。

获取文献中报道的物质

获取文献中报道的物质。结果是由物质（而不是文献）组成的新结果集。

操作步骤

从单篇文献中获取其报道的物质

1. 在文献页面，点击文献标题右侧的 **Get Substances** 图标。

REFERENCES

Get Substances Get Reactions Get Related Citations Tools

Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

Analyze Refine Categorize

Sort by: Accession Number

0 of 8 References Selected

Analyze by: Author Name

An Yeon Beom 1

Chen Lunhua 1

Chen Niangen 1

Chen Wenjie 1

1. **Process for preparation of atorvastatin calcium intermediate**

Quick View PATENTPAK

By Zhang, Zhiyue; Mei, Guangyao; Fang, Zhenrong; Meng, Xiaowei; Wu, Jinguo

From Faming Zhuanli Shenqing (2012), CN 102766136 A 20121107. | Language: Chinese, Database: CAPLUS

The present invention pertains to a **process** for the prepn. of **atorvastatin** calcium intermediate, i.e., (4R-cis)-6-[2-[2-(4-fluorophenyl)-5-(1-methylethyl)-3-phenyl-4-[(phenylamino)carbonyl]-1H-pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-1,3-Dioxane-4-acetic acid 1,1-dimethylethyl ester, which comprises: mixing (4R-cis)-1,1-dimethylethyl 6-(2-aminoethyl)-2,2-dimethyl-1,3-dioxane-4-acetate (compd. A) and N-Phenyl-4-(4-fluorophenyl)-3-phenyl-2-(2-methyl-1-oxopropyl)-5-oxopentanamide (compd. B) under nitrogen protection; adding THF and butylether, stirring uniformly; adding tri-Me acetic acid, reflux-reacting...

– 或者 –

在 **Reference Detail** 页面，点击 **Get Substances**。

REFERENCE DETAIL

Get Substances Get Reactions Get Related Citations View with PATENTPAK Link to Other Sources Send to SciPlanner

Return Previous Next

1. **Process for preparation of atorvastatin calcium intermediate**

By: Zhang, Zhiyue; Mei, Guangyao; Fang, Zhenrong; Meng, Xiaowei; Wu, Jinguo

Assignee: Zhejiang Hongyuan Pharmaceutical Co., Ltd., Peop. Rep. China

The present invention pertains to a **process** for the prepn. of **atorvastatin** calcium intermediate, i.e., (4R-cis)-6-[2-[2-(4-fluorophenyl)-5-(1-methylethyl)-3-phenyl-4-[(phenylamino)carbonyl]-1H-pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-1,3-Dioxane-4-acetic acid 1,1-dimethylethyl ester, which comprises: mixing (4R-cis)-1,1-dimethylethyl 6-(2-aminoethyl)-2,2-dimethyl-1,3-dioxane-4-acetate (compd. A) and N-Phenyl-4-(4-fluorophenyl)-3-phenyl-2-(2-methyl-1-oxopropyl)-5-oxopentanamide (compd. B) under nitrogen protection; adding THF and butylether, stirring uniformly; adding tri-Me acetic acid, reflux-reacting at 94-96 °C to obtain the title compd. The invention can improve the conversion rate of product and reduce the content of pollutants in the reaction obviously.

QUICK LINKS

0 Tags, 0 Comments

PATENT INFORMATION

Nov 7, 2012

CN 102766136

A

APPLICATION

获取到的物质将变成一个新的结果集。

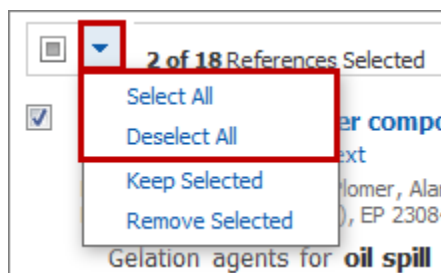
从多篇文献中获取其报道的物质

1. 在文献页面，勾选感兴趣的文献。然后点击 **Get Substances**。

The screenshot shows the SciFinder REFERENCES interface. On the left, there is a list of authors with a count of 1 for each. On the right, two patent entries are selected and displayed. The first entry is titled "1. Process for preparation of atorvastatin calcium intermediate" and includes a chemical structure and a description of the process. The second entry is titled "2. Process for preparation of atorvastatin" and also includes a chemical structure and a description of the process. The interface includes various navigation and tool buttons at the top, such as "Get Substances", "Get Reactions", "Get Related Citations", and "Tools".

如果没有文献被选中，SciFinder 会认为您希望获取结果集中所有文献报道的物质。

注：通过下拉菜单中的选项，选择或取消选择所有的文献。



2. 在获得物质的对话框中，点击单选按钮获取**所有文献**或只是部分**选中文献**中的物质。

Get Substances

Retrieve substances for:

All references

Selected references

Limit results to:

<input type="checkbox"/> Adverse Effect, including toxicity	<input type="checkbox"/> Preparation
<input type="checkbox"/> Analytical Study	<input type="checkbox"/> Process
<input type="checkbox"/> Biological Study	<input type="checkbox"/> Properties
<input type="checkbox"/> Combinatorial Study	<input type="checkbox"/> Prophetics in Patents
<input type="checkbox"/> Formation, nonpreparative	<input type="checkbox"/> Reactant or Reagent
<input type="checkbox"/> Miscellaneous	<input type="checkbox"/> Uses
<input type="checkbox"/> Occurrence	

Get **Cancel**

3. (可选) 勾选感兴趣的物质角色, 限定被检索的物质。
4. 点击 **Get**, 被检索到的物质就构成了一个新的结果集。

获取文献中报道的反应

可以获取文献中报道的反应。结果将由反应组成(而不是文献)。

操作步骤

从单篇文献中获取其报道的反应

1. 在文献页面, 点击文献标题右侧的 **Get Reactions** 图标。

The screenshot shows the 'REFERENCES' section of a software interface. At the top, there are navigation buttons: 'Get Substances', 'Get Reactions', 'Get Related Citations', 'Tools', 'Create Keep Me Posted Alert', and 'Send to SciPlanner'. Below these are tabs for 'Analyze', 'Refine', and 'Categorize'. A 'Sort by: Accession Number' dropdown is visible. On the left, an 'Analyze by:' dropdown is set to 'Author Name', with a list of authors and their counts: An Yeon Beom (1), Chen Lunhua (1), Chen Niangen (1), and Chen Wenjie (1). The main area shows '0 of 8 References Selected'. The first reference is selected and highlighted: '1. Process for preparation of atorvastatin calcium intermediate'. It includes a 'Quick View' button, 'PATENTPAK' label, authors (Zhang, Zhiyue; Mei, Guangyao; Fang, Zhenrong; Meng, Xiaowei; Wu, Jinguo), and a detailed description of the invention.

– 或者 –

在 **Reference Detail** 页面，点击 **Get Reactions**。

The screenshot shows the 'REFERENCE DETAIL' page for the selected reference. At the top, there are navigation buttons: 'Get Substances', 'Get Reactions' (highlighted with a red box), 'Get Related Citations', 'View with PATENTPAK', 'Link to Other Sources', and 'Send to SciPlanner'. Below these are 'Return', 'Previous', and 'Next' navigation options. The main content area displays the title '1. Process for preparation of atorvastatin calcium intermediate', authors, assignee, and a detailed description of the invention. On the right side, there are sections for 'QUICK LINKS' (0 Tags, 0 Comments), 'PATENT INFORMATION' (Nov 7, 2012, CN 102766136, A), and 'APPLICATION'.

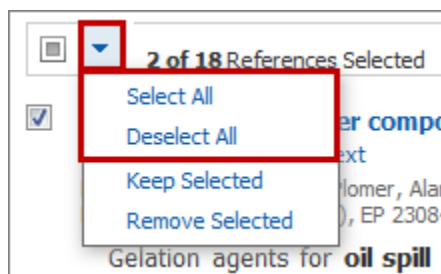
检索到的反应组成了一个新的结果集。

从多篇文献中获取其报道的反应

1. 在文献页面，勾选感兴趣的文献。然后点击 **Get Reactions**。

The screenshot shows the SciFinder interface with the 'REFERENCES' section. The 'Get Reactions' button is highlighted with a red box. A list of authors is on the left, and two references are selected and displayed in the main area. Reference 1 is 'Process for preparation of atorvastatin calcium intermediate' and Reference 2 is 'Process for preparation of atorvastatin'. Both references include a 'Quick View' button and a 'PATENTPAK' label. Reference 2 also includes a chemical structure diagram of atorvastatin.

如果没有被选中的文献，SciFinder 就会认为您希望获取结果集中所有文献报道的反应。通过下拉菜单中的选项，选择或取消选择所有的文献。



注：可以从文献量不超过 1000 篇的文献结果集中使用 **Get Reactions** 获取文献中报道的反应。

获取参考文献

可以获取到文献引用的论文和专利信息。结果是由新的文献组成的新结果集。

操作步骤

1. 在选项框中勾选感兴趣的文献，获取当前结果集中一篇或多篇文献引用的文献。
2. 选择 **Get Related Citations > Get Cited**。

The screenshot shows the 'REFERENCES' section of a software interface. At the top, there are buttons for 'Get Substances', 'Get Reactions', 'Get Related Citations', and 'Tools'. The 'Get Related Citations' dropdown menu is open, showing 'Get Citing' and 'Get Cited' options, with 'Get Cited' highlighted by a red box. Below the menu, there are tabs for 'Analyze', 'Refine', and 'Categorize'. The 'Analyze by' section shows a list of authors: An Yeon Beom (1) and Chen Lunhua (1). The main content area displays a list of references, with the first one selected and checked. The selected reference is titled '1. Process for preparation of atorvastatin calcium intermediate' and includes a 'Quick View' button and a 'PATENTPAK' dropdown. The abstract text is partially visible: 'The present invention pertains to a process for the prepn. of atorvastatin calcium intermediate, i.e., (4R-cis)-6-[2-[2-(4-fluorophenyl)-5-(1-methylethyl)-3-phenyl-4-[(phenylamino)carbonyl]-1H-pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-1,3-

注：在结果集中文献量不超过 500 篇时，可以使用 **Get Cited**。

也可以从 **Reference Detail** 页面选择 **Get Related Citations > Get Cited**，获得单篇文献引用的文献。

The screenshot shows the 'REFERENCE DETAIL' page for the reference '1. Embedding and encapsulation of ... particles'. The 'Get Related Citations' dropdown menu is open, with 'Get Cited' highlighted by a red box. The page includes a 'Return' button, 'Previous' and 'Next' navigation arrows, and a 'Send to SciPlanner' button. The main content area shows the title, author 'By: Van Lengerich, Bernhard H.', and assignee 'Assignee: Van Lengerich, Bernhard H., USA'. The abstract text is partially visible: 'Controlled release, discrete, solid particles which contain an encapsulated and/or embedded component such as a heat sensitive or readily oxidizable pharmaceutically, biol., or nutritionally active component are continuously produced without substantial destruction of the matrix material or encapsulant. A release-rate controlling component is incorporated into the matrix to control the rate of release of the encapsulant from the particles. The addnl. component may be a hydrophobic component or a high water binding capacity'. On the right side, there are sections for 'QUICK LINKS' (0 Tags, 0 Comments) and 'PATENT INFORMATION' (May 7, 1998, WO 9818610, A1).

获取引文

可以获取到引用文献的论文和专利信息。结果是由新文献组成的新结果集。

操作步骤

获取当前结果集中的单篇文献的引文

1. 点击文献标题右侧的 **Citings** 图标。

The screenshot shows the 'REFERENCES' section of a software interface. At the top, there are buttons for 'Get Substances', 'Get Reactions', 'Get Related Citations', and 'Tools'. The 'Get Related Citations' dropdown menu is open, showing 'Get Citing' and 'Get Cited' options. Below the menu, there are tabs for 'Analyze', 'Refine', and 'Categorize'. The 'Analyze by' section shows a list of authors: An Yeon Beom (1), Chen Lunhua (1), Chen Niangen (1), and Chen Wenjie (1). The main content area displays a list of references, with the first one selected and checked. The selected reference is titled '1. Process for preparation of atorvastatin calcium intermediate' and includes a 'Quick View' button and a 'PATENTPAK' dropdown. The abstract text is partially visible: 'The present invention pertains to a process for the prepn. of atorvastatin calcium intermediate, i.e., (4R-cis)-6-[2-[2-(4-fluorophenyl)-5-(1-methylethyl)-3-phenyl-4-[(phenylamino)carbonyl]-1H-pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-1,3-Dioxane-4-acetic acid 1,1-dimethylethyl ester, which comprises: mixing (4R-cis)-1,1-dimethylethyl 6-(2-aminoethyl)-2,2-dimethyl-1,3-dioxane-4-acetate (compd. A) and N-Phenyl-4-(4-fluorophenyl)-3-phenyl-2-(2-methyl-1-oxopropyl)-5-oxopentanamide (compd. B) under nitrogen protection; adding THF and butylether, stirring uniformly; adding tri-Me acetic acid, reflux-reacting...'. On the right side of the reference entry, there is a 'Citings' icon highlighted by a red box.

– 或者 –

在文献详情页面，选择 **Get Related Citations > Get Citing**。

The screenshot shows a document page with a top navigation bar. The 'Get Related Citations' menu is open, and 'Get Citing' is highlighted. The document title is '1. Embedding and encapsulation of ... particles'. The author is Van Lengerich, Bernhard H. The abstract discusses controlled release particles. On the right, there are sections for 'QUICK LINKS' (0 Tags, 0 Comments) and 'PATENT INFORMATION' (May 7, 1998, WO 9818610 A1).

获取当前结果集中多篇文献的引文

1. 选择感兴趣的文献。
2. 选择 **Get Related Citations > Get Citing**。

The screenshot shows a search results page with '3 of 8 References Selected'. The first reference is selected with a checkmark. The reference title is '1. Process for preparation of atorvastatin calcium intermediate'. The authors are Zhang, Zhiyue; Mei, Guangyao; Fang, Zhenrong; Meng, Xiaowei; Wu, Jinguo. The abstract describes a process for the preparation of atorvastatin calcium intermediate. The 'Get Related Citations' menu is open, and 'Get Citing' is highlighted.

获取一篇文献的全文

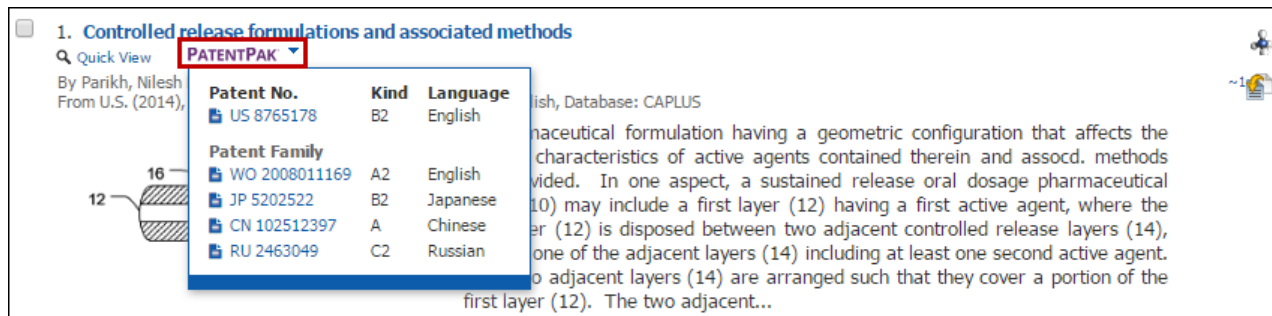
根据文献可获得的选项,可以使用:

- **PatentPak** 浏览一篇专利或专利族成员的 PDF 全文。（仅购买 PatentPak 后才可以使
用。）
- **Other Sources** 链接到 SciFinder 外的全文资源（可能会链接到您所在机构图书馆、网络
免费资源或需要订购后才能使用的资源）。

操作步骤

查看一篇专利或专利族成员的 PDF 全文

1. 在文献页面，点击文献标题旁边的 **PatentPak**。然后点击下拉菜单中的文献。PDF 文件为专利原始撰写语言的文件。



1. **Controlled release formulations and associated methods**
 Quick View **PATENTPAK**
 By Parikh, Nilesh
 From U.S. (2014),

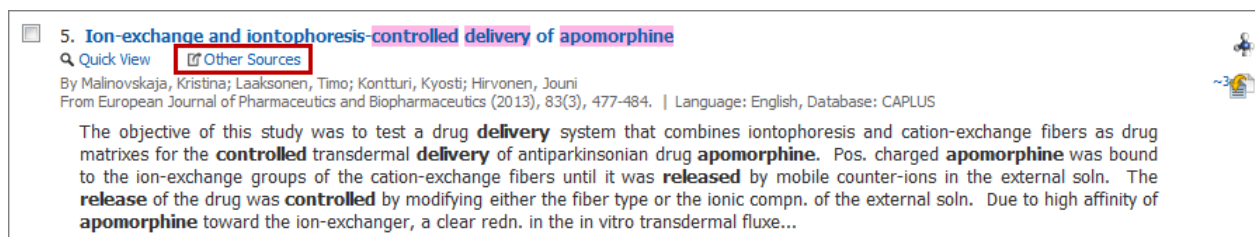
Patent No.	Kind	Language
US 8765178	B2	English
Patent Family		
WO 2008011169	A2	English
JP 5202522	B2	Japanese
CN 102512397	A	Chinese
RU 2463049	C2	Russian

ph, Database: CAPLUS
 naceutical formulation having a geometric configuration that affects the characteristics of active agents contained therein and assocd. methods vided. In one aspect, a sustained release oral dosage pharmaceutical (10) may include a first layer (12) having a first active agent, where the er (12) is disposed between two adjacent controlled release layers (14), one of the adjacent layers (14) including at least one second active agent. o adjacent layers (14) are arranged such that they cover a portion of the first layer (12). The two adjacent...

还可以在文献的 **Quick View** 窗口中点击 **PatentPak** 链接，或在 **Reference Detail** 页面点击 **View with PatentPak**。

链接到其他全文资源：

1. 在文献页面，点击文献标题下面的 **Other Sources**。



5. **Ion-exchange and iontophoresis-controlled delivery of apomorphine**
 Quick View **Other Sources**
 By Malinovskaja, Kristina; Laaksonen, Timo; Kontturi, Kyosti; Hirvonen, Jouni
 From European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics (2013), 83(3), 477-484. | Language: English, Database: CAPLUS

The objective of this study was to test a drug **delivery** system that combines iontophoresis and cation-exchange fibers as drug matrixes for the **controlled** transdermal **delivery** of antiparkinsonian drug **apomorphine**. Pos. charged **apomorphine** was bound to the ion-exchange groups of the cation-exchange fibers until it was **released** by mobile counter-ions in the external soln. The **release** of the drug was **controlled** by modifying either the fiber type or the ionic compn. of the external soln. Due to high affinity of **apomorphine** toward the ion-exchanger, a clear redn. in the in vitro transdermal fluxe...

还可以在文献 **Quick View** 窗口点击 **Other Sources** 链接，或者在 **Reference Detail** 页面点击 **Link to Other Sources**。

保存和分享文献的选项

在获取到工作所需的文献后，可能需要保存以备将来使用，或者与其他 **SciFinder** 用户分享。

保存当前结果集

保存当前结果集

结果集将被保存在 **SciFinder** 服务器上。以后再使用 **SciFinder** 时，可以获取被保存的结果集。

分享文献	<p>分享文献</p> <p>可以与他人分享一篇文献、一个保存的结果集或一个 KMP 结果的链接。收到链接的用户必须登录 SciFinder 才可以查看文献。</p>
导出文献	<p>导出文献</p> <p>可以用多种格式导出文献（包括引文管理软件可读的格式文件）。</p>
导入文献	<p>导入文献</p> <p>可以导入之前保存为 AKX 格式的文献。被导入的文献将成为当前结果集。</p>
打印文献	<p>打印文献</p> <p>文献可以被打印为 PDF 格式的文件。</p>
将文献发送至 SciPlanner	<p>将文献发送至 SciPlanner</p> <p>SciPlanner 帮助您在一个可视化的工作界面对文献和其他类型的 SciFinder 结果进行组织，组织后的信息可以被保存和分享。</p>
打开一个保存的结果集	<p>打开一个保存的结果集</p> <p>保存的结果集中的文献将成为当前结果集，并且显示在文献页面。</p>
编辑保存的结果集信息	<p>编辑保存的结果集信息</p> <p>可以改变保存的结果集的名称或描述。</p>
删除保存的结果集	<p>删除保存的结果集</p> <p>可以从 SciFinder 服务器删除一个保存的结果集（将无法再获取被删除了的结果集）。</p>

为了将来更容易获取到感兴趣的文献，可以对文献添加自己的评论或用自定义的检索词为文献添加标签。参阅 [Comment and tag references for future use](#) 获取详情。

保存当前结果集

结果集将保存在 SciFinder 服务器上。通过 **Saved Searches > Saved Answer Sets** 获取保存的结果集。

操作步骤

- 在文献页面，勾选想要保存的文献。或者点击所有的选项框(**Select All**)或删除所有的选项框(**Deselect All**)保存整个结果集。

The screenshot shows the SciFinder interface with the 'REFERENCES' section. A dropdown menu is open over the '3 of 7 References Selected' status, with options: 'Select All', 'Deselect All', 'Keep Selected', and 'Remove Selected'. The 'Deselect All' option is highlighted with a red box. The background shows a list of authors and a chemical structure.

- 点击 **Save**.

The screenshot shows the SciFinder interface with the 'REFERENCES' section. The 'Save' button is highlighted with a red box. The background shows a list of authors and a chemical structure.

- (可选) 在出现的对话框中，确认保存 **All answers** 或 **Only selected answers**。

Save This Answer Set * Required

Save:

All answers

Only selected answers

Title: *

Description:

OK Cancel

4. 输入结果集的 **Title**。
5. （可选）输入 **Description**。
6. 点击 **OK**。

用相似的步骤，在 [Reference Detail screen](#) 页面点击 **Save** 保存单篇文献。

分享文献

可以与他人分享一篇文献、一个保存的结果集或一个 **KMP**（定题追踪提醒）结果集的连接。收到链接的用户必须登录 **SciFinder** 才可以查看文献。

操作步骤

1. 在 **Reference Detail** 页面，点击 **Link**。

Explore ▾ Saved Searches ▾ SciPlanner **Link** Save Print Export

Research Topic "clean up of oil spills in the ..." > references (167) > Method of separation of two im...

REFERENCE DETAIL ⓘ Get Substances Get Related Citations View with PATENTPAK Link to Other Sources Send to SciPlanner

Return Previous Next

9. Method of separation of two immiscible fluids, for example, oil in water

By: Elagin, Andrey Aleksandrovich; Mironov, Maksim Anatolevich; Ponomarev, Vladislav Sergeevich
Assignee: OOO "NPO BioMikroGel", Russia

The group of inventions relates to the field of org. chem. and can be used for cleaning water, industrial and domestic waste water or waste water sediment, and for the containment and recovery of petroleum and petroleum product spills in large bodies of water, rivers, lakes and seas. In the claimed group of inventions, aq. solns. of polysaccharide microgels, having a mol. mass of 20000-200000 daltons and a particle size of 50-600 nm, are used as a substance for cleaning water of petroleum and petroleum products. Moreover, low concns. of polysaccharide microgels in water, ranging

QUICK LINKS
0 Tags, 0 Comments

PATENT INFORMATION
Dec 27, 2013
WO 2013191590
A1

– 或者 –

在 **Saved Searches > Saved Answer Sets** 页面，点击结果集旁边的 **Link** 图标。

Explore ▾ Saved Searches ▾ SciPlanner

Research Topic "clean up of oil spills in the ..." > references (161) > Research progress on oil spill...

SAVED ANSWER SETS ⓘ Combine Answer Sets

0 of 3 Reference Answer Sets Selected References (3) Substances (3) Reactions (2)

SAVED SEARCHES

Saved Answer Sets
Keep Me Posted
History

Search Name	References	Substances	Reactions	Actions	Saved
clean up oil spills (573) Research Topic "clean up of oil spills in the ocean" > references (573)				Edit Link	Saved Feb 17, 2014
tyrosine kinase inhibitors (52) Research Topic "tyrosine kinase inhibitors in the treatment of cancer" > references (52)				Edit Link	Saved Feb 11, 2014

– 或者 –

在 **Saved Searches > Keep Me Posted** 页面，点击结果集旁边的 **Link** 图标。

Explore ▾ Saved Searches ▾ SciPlanner

Research Topic "clean up of oil spills in the ..." > references (161) > Research progress on oil spill...

KEEP ME POSTED ⓘ Delete Selected

0 of 2 Profiles Selected

SAVED SEARCHES

Saved Answer Sets
Keep Me Posted
History

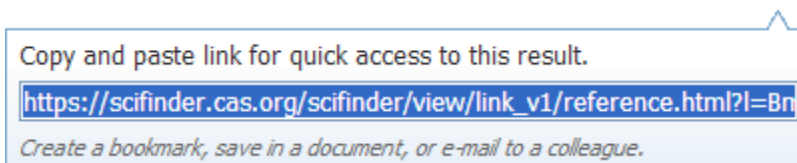
Search Name	Status	Created	Expires
lipitor substructure search using lipitor.cfx as query	Enabled	Apr 16, 2012	Apr 2, 2014

Search Strategy:

Select All Deselect All

Results	Selected Results
Feb 15, 2014 (2)	Link
Feb 8, 2014 (11)	Link
Feb 1, 2014 (15)	Link

2. 使用 **Ctrl-C** 或其他复制方法复制弹出式文本框中内容的 **URL**。



3. 将 URL 复制到邮件、文件或将 URL 作为浏览器书签使用。

导出文献

文献可以被导出为多种文件格式（包括引文管理软件支持的可读格式）。

操作步骤

1. 在文献页面，勾选想要导出的文献。或勾选所有选项框(**Select All**)或消除所有选项框(**Deselect All**)导出所有的文献。

The screenshot shows the SciFinder interface with the 'REFERENCES' section. On the left, there is an 'Analyze' sidebar with a dropdown menu set to 'Author Name'. The main area shows a list of authors and their counts: Ungashe Solomon (4), Zeng Yibin (3), Bakthavatchalam Rajagopal (2), and Basu Manas Kumar (2). A dropdown menu is open over the '3 of 7 References Selected' header, with options: Select All, Deselect All, Keep Selected, and Remove Selected. A chemical structure is visible at the bottom of the page.

2. 点击 **Export**。

Research Topic "preparation of benzenesulfonam..." > references (7)

REFERENCES ?

Get Substances Get Reactions Get Related Citations Tools

Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

Analyze Refine Categorize Sort by: Accession Number ↓

Display Options

3 of 7 References Selected

Analyze by: Author Name

Ungashe Solomon 4

Zeng Yibin 3

Bakthavatchalam Rajagopal 2

Basu Manas Kumar 2

1. 4-(Arylsulfonylamino)isoindoline-1,3-dione compounds useful as CCR9 modulators and their preparation

Quick View PATENTPAK

By Bakthavatchalam, Rajagopal; Basu, Manas Kumar; Behera, Ajit Kumar; Venkateshappa, Chandregowda; Hewson, Christopher Alexander; Kadnur, Sanjay Venkatachalapathi; Kalindjian, Sarkis Barret; Kulkarni, Bheemashankar; Saxena, Rohit; Suresh, Juluri; et al

From PCT Int. Appl. (2015), WO 2015097121 A1 20150702. | Language: English, Database: CAPLUS

The invention relates to compds. of formula I, useful as CCR9 modulators, to compns. contg. them, to methods of making them, and to methods of using them. The invention relates to compds. capable of modulating the function of the CCR9 receptor by acting as partial agonists, antagonists or inverse agonists. Such compds. may be useful to treat, prevent or ameliorate a disease or condition assocd. with CCR9 activation, including inflammatory and

3. 在 Export 下方的对话框中，可以选择导出所有（All）结果，或导出选中的（Selected）部分结果，或指定范围（Range）的部分结果。

Export ?

* Required

Export:

All

Selected

Range

Example: 2-20

For:

Citation Manager

Citation export format (*.ris)

Quoted Format (*.txt)

Tagged Format (*.txt)

Offline review

Portable Document Format (*.pdf)

Rich Text Format (*.rtf)

Answer Keys (*.txt)

Saving locally

Answer Key eXchange (*.akx)

Details:

File Name: *

Reference_01_13_2015_190854

Export Cancel

4. 在 For 下方的对话框中选择文件类型。选择的文件类型将决定导出的文献详情信息。

文件类型	使用
Citation export format (*.ris)	将 SciFinder 文献导入进引文管理软件（如 ChemWorx™、EndNote®、以及 Reference Manager®）中。
Quoted Format (*.txt)	在一个给定的结果中，数据被引号或其他用户选择的符号分隔。这个格式被多数电子表格程序(如 Microsoft® Excel®)和数据库(如 Microsoft® Access 和 Lotus® Notes)识别。
Tagged Format (*.txt)	在给出的结果中，数据多行显示，每行都包含一个字段标签和阈值。标签格式的使用主要是为了将文献导入引文软件（如 Endnote®和 Reference Manager®）。这种格式也被大多数电子表格程序和数据库识别。
Portable Document Format (*.pdf)	需要一个 PDF 阅读器查看和打印。
Rich Text Format (*.rtf)	可以通过文本处理软件（如 Microsoft®Word®）导入。
Answer Keys (*.txt)	文献结果被保存为收录号。可以从.txt 文件中拷贝收录号，然后复制到 SciFinder 的 Document Identifier 检索区进行文献识别号检索（ Document Identifier search ）。
Answer Key eXchange (*.akx)	在文献页面使用 Import 按钮将导出的 AKX 格式文件导入进 SciFinder。

5. 在 **Details** 下方输入数据。

6. 点击 **Export**。

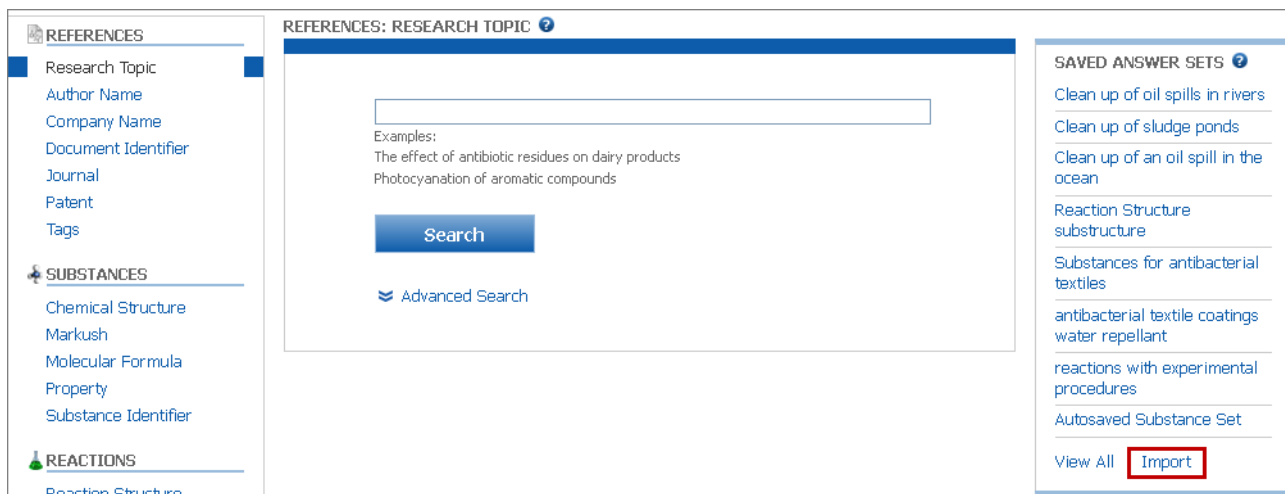
用相似的方法，在文献详情页面（[Reference Detail screen](#)）点击 **Export** 导出单篇文献。

导入文献

可以导入之前保存为 AKX 格式的文献。被导入的文献就成为当前结果集。

操作步骤

1. 在检索界面右侧的 **Saved Answer Sets** 中，点击 **Import**。



2. 点击 **Browse** 查找需要被导入的 AKX 文件。
3. 双击 AKX 文件，或点击选中文件，然后点击 **Open**。
4. 点击 **OK**。

打印文献

可以将选中的文献打印为 PDF 文件。

操作步骤

1. 在文献页面，勾选想要打印的文献。勾选所有选择框(**Select All**)或取消所有选择(**Deselect All**)打印所有文献。

2. 点击 **Print**。

3. 在 **Print to PDF** 下方，选择 **All** 打印所有结果、选择 **Selected** 打印选择的结果、或选择 **Range** 打印指定范围的结果。

Print ?

Print to PDF:

All

Selected

Range

Example: 2-20

Format:

Summary without abstracts

Summary with partial abstracts

Summary with full abstracts

Detail (full record)

Title:

Include:

Task History

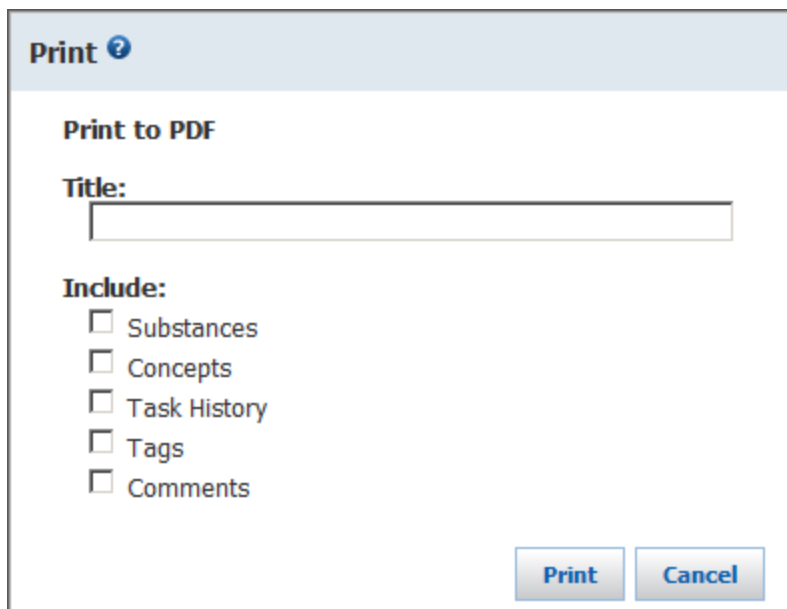
Tags

Comments

Print **Cancel**

4. 选择 **Format**。
5. （可选）输入将被包含在 PDF 文件中的 **Title**。
6. （可选）勾选包含 **Task History**、**Tags** 和/或 **Comments** 的选项框。
7. 点击 **Print**。

用相似的方法，在文献详情页面（[Reference Detail screen](#)）点击 **Print** 打印单篇文献。输入 **Title** 并勾选想要包含的数据。然后点击 **Print**。



将文献发送至 SciPlanner

SciPlanner 帮助您在可视化的工作界面组织文献和其他的 SciFinder 结果，组织后的信息可以被保存和分享。按照以下步骤将选中的文献发送至 SciPlanner。

操作步骤

1. 在文献页面，选择想要发送到 SciPlanner 的文献。勾选所有的选项框或取消所有选择 (**Deselect All**) 将所有的结果发送到 SciPlanner。

2. 点击 **Send to SciPlanner**。

The screenshot shows the SciPlanner interface with the following details:

- Navigation tabs: Explore, Saved Searches, SciPlanner, Save, Print, Export.
- Research Topic: "preparation of benzenesulfonam..." > references (7)
- Buttons: Get Substances, Get Reactions, Get Related Citations, Tools, Create Keep Me Posted Alert, **Send to SciPlanner** (highlighted).
- Sort by: Accession Number
- 3 of 7 References Selected
- Reference 1: 4-(Arylsulfonylamino)isoindoline-1,3-dione compounds useful as CCR9 modulators and their preparation. Includes author list (Bakthavatchalam, Rajagopal, Basu, Manas Kumar, Behera, Ajit Kumar, Venkateshappa, Chandregowda, Hewson, Christopher Alexander, Kadnur, Sanjay Venkatachalapathi, Kalindjian, Sarkis Barret, Kulkarni, Bheemashankar, Saxena, Rohit, Suresh, Juluri, et al) and a chemical structure.

用相似的方法，在文献详情页面（[Reference Detail screen](#)）点击 **Send to SciPlanner** 将单篇文献发送至 **SciPlanner**。

打开一个保存的结果集

在打开一个保存的结果集后，打开的结果就会展示在文献页面并成为当前结果集。

操作步骤

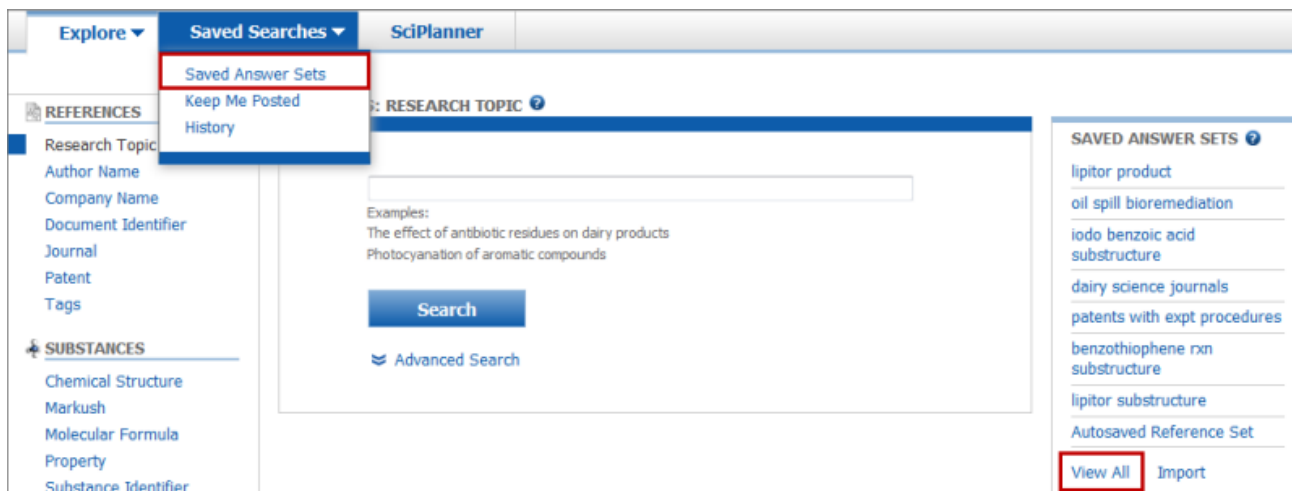
1. 在检索页面的 **Saved Answer Sets** 下方点击结果集名称打开一个保存的结果集。例：

The screenshot shows the SciPlanner interface with the following details:

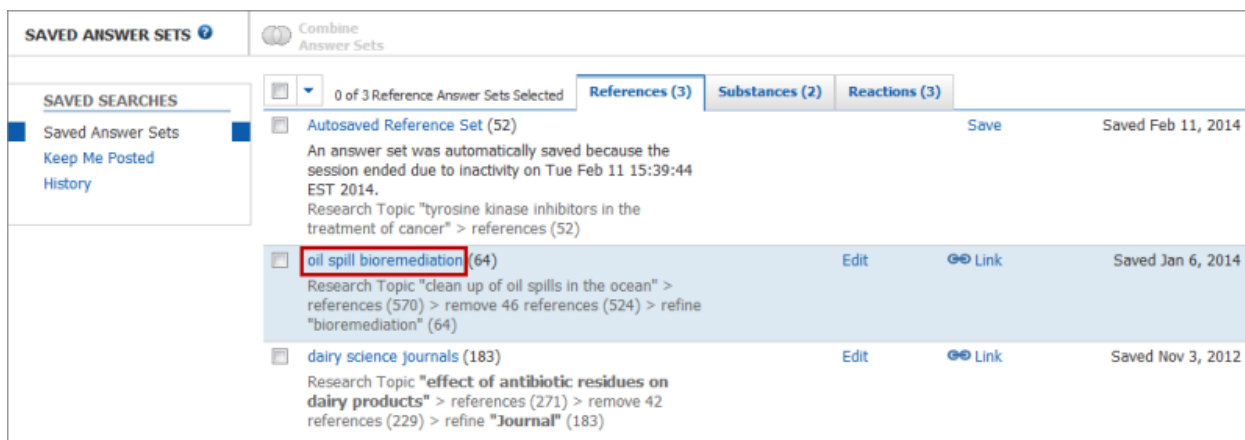
- Navigation tabs: Explore, Saved Searches, SciPlanner.
- Left sidebar: REFERENCES (Research Topic, Author Name, Company Name, Document Identifier, Journal, Patent, Tags), SUBSTANCES (Chemical Structure, Markush, Molecular Formula, Property, Substance Identifier).
- Center panel: REFERENCES: RESEARCH TOPIC with a search input field, examples, and a Search button.
- Right sidebar: SAVED ANSWER SETS with a list of saved sets. 'oil spill bioremediation' is highlighted with a red box.

– 或者 –

1. 如果保存过的结果集未列出，则可以点击右侧栏中的 **View All**，或选择 **Saved Searches > Saved Answer Sets**。



2. 点击 **Reference**。
3. 点击结果集的名称。



为保存的结果集编辑信息

可以改变一个保存的结果集的名称或描述。

操作步骤

1. 选择 **Saved Searches > Saved Answer Sets**。
2. 点击想要编辑的结果集类型（文献、物质、反应）。
3. 点击想要编辑的结果集旁的 **Edit**。

The screenshot shows the 'Saved Answer Sets' section of the SciFinder interface. It includes a sidebar with 'SAVED SEARCHES' and 'Saved Answer Sets' options. The main area displays a table of saved sets:

Reference Answer Sets Selected	References (3)	Substances (2)	Reactions (3)
<input type="checkbox"/>	Autosaved Reference Set (52)	Save	Saved Feb 11, 2014
<input type="checkbox"/>	oil spill bioremediation (64)	Edit	Link Saved Jan 6, 2014
<input type="checkbox"/>	dairy science journals (183)	Edit	Link Saved Nov 3, 2012

4. 根据需要，修改 **Title** 或 **Description**。

The 'Edit Answer Set' dialog box contains the following fields and buttons:

- Title: *** (Required): oil spill bioremediation
- Description:** (Empty text area)
- OK** button
- Cancel** button

5. 点击 **OK**。

删除保存的结果集

可以从 SciFinder 服务器上删除一个保存的结果集（将无法再获取被删除的结果集）。

操作步骤

1. 选择 **Saved Searches > Saved Answer Sets**。

2. 点击想要删除的结果集类型（文献、物质、反应）。
3. 勾选想要删除的结果集。
4. 在选项中选择 **Delete Selected**。



为文献添加评论和标签的选项

为将来更便捷的获取到感兴趣的文献，可以对文献添加自己的评论，或用自定义的检索词为文献添加标签。

- | | |
|---------|--|
| 为文献添加评论 | <p>为文献添加评论</p> <p>在文献详情页面可以查看对文献的评论。可以对多篇文献添加相同的评论，也可以对一篇文献添加至多 50 条评论。</p> |
| 为文献添加标签 | <p>为文献添加标签</p> <p>可以使用自定义的检索词对文献添加标签。可以将相同的标签添加到多篇文献，也可以对单篇文献添加最多 50 个标签。使用标签检索选项可以获取到被添加标签的文献。</p> |
| 获取标签文献 | <p>获取标签文献</p> <p>当进入标签检索选项时，所有创建的标签将被列出。点击一个标签获取该标签标记的所有文献。</p> |

- | | |
|---------|-----------------------------|
| 删除文献的标签 | 删除文献的标签
可以从标签标记的文献中删除标签。 |
| 为文献编辑评论 | 为文献编辑评论
可以修改之前添加到文献的评论。 |
| 删除文献的评论 | 删除文献的评论
可以删除之前添加到文献的评论。 |

为文献添加评论

可以为单篇文献添加自己的评论。可以在文献详情页面查看添加的评论。不能检索评论，但是可以为添加评论的文献添加标签，被标签标记的文献可以通过标签检索选项获取到。

操作步骤

1. 在文献详情页面的底部，**Add Comment** 下方的输入框中输入评论。每条评论最多可输入 1024 个字符。在输入框的右下角会显示还可以输入多少个字符。

Add Comment: Maximum of 1024 characters per comment; 50 comments per reference.

A whole cell bioreporter detection method, which has unique advantages for the rapid evaluation on toxicity and bioavailability, is a useful tool to provide environmental risk assessments at crude oil-contaminated sites.

Save
Characters Remaining: **804**

2. 点击 **Save**。评论即被添加到下面的列表中。

Tags


0 Tags | [Edit Tags](#)

Comments

1 Comment **Sort by:** Newer First | Older First

A whole cell bioreporter detection method, which has unique advantages for the rapid evaluation on toxicity and bioavailability, is a useful tool to provide environmental risk assessments at crude oil-contaminated sites.

Posted April 17, 2013 9:32 AM [Edit](#) [Delete](#)
Last Modified April 17, 2013 9:32 AM

 Your comment has been added.

可以对单篇文献添加最多 50 条评论。评论将按照时间顺序排列。点击链接可以根据最新优先（**Newer First**）或最早优先（**Older First**）重新排序。根据需要点击链接编辑（**Edit**）或删除（**Delete**）一条评论。

3. （可选）为被评论过的文献添加检索标签，就可以在将来很容易的获取到它。
 - a. 点击 **Edit Tags**。

Tags

0 Tags [Edit Tags](#)

Comments

1 Comment **Sort by:** Newer First | Older First

A whole cell bioreporter detection method, which has unique environmental risk assessments at crude oil-contaminated sit

- b. 在 **Add Tags** 下方的输入框中输入标签。

Edit Tags

Whole cell bioreporter application for rapid detection and evaluation of crude oil spill in seawater caused by Dalian oil tank explosion

My Tags: Click 'x' to remove tag from "My Tags".
You have not added any tags for this reference.

Add Tags: Separate multiple tags with semicolons, 100 characters per tag, 50 tags per reference

[Save](#) [Cancel](#)

- c. 点击 **Save**。标签即被添加到标签列表中。



可以给一篇文献添加最多 **50** 个标签。也可以同时给多篇文献添加一个相同的标签。参阅 [Add tags to a reference](#) 获取更多信息。

为文献添加标签

可以用自定义的检索词为文献添加标签。一个标签可以包含最多 **100** 个字符。可以使用**标签**检索选项获取被标签标记的文献。可以为多篇文献添加相同的标签，一次最多 **500** 篇。一篇文献可以有最多 **50** 个标签。

[Add tags to a single reference](#) 为单篇文献添加标签

[Add the same tags to a multiple references](#) 为多篇文献添加相同的标签

操作步骤

为单篇文献添加标签

1. 在文献详情页页面的 **Tags** 下方，点击 **Edit Tags**。



2. 在 **Add Tags** 下方的输入框中输入标签。一个标签最多可以包含 **100** 个字符。用分号分隔多个标签。每篇文献最多可以添加 **50** 个标签。

Edit Tags

Whole cell bioreporter application for rapid detection and evaluation of crude oil spill in seawater caused by Dalian oil tank explosion

My Tags: Click 'x' to remove tag from "My Tags".
You have not added any tags for this reference.

Add Tags: Separate multiple tags with semicolons, 100 characters per tag, 50 tags per reference

3. 点击 **Save**。标签即被添加到标签列表中。

Tags

1 Tag | [Edit Tags](#) rapid detection(1)

为多篇文献添加相同的标签

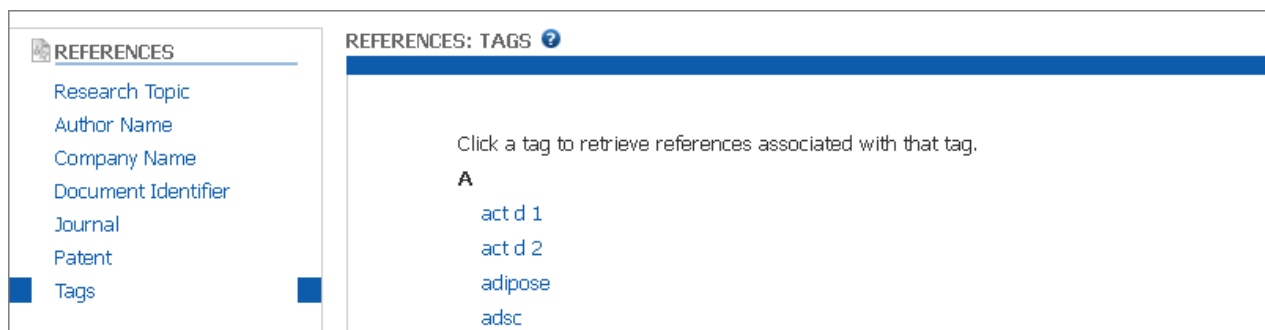
1. 在文献页面，勾选想要添加标签的文献，或所有的选项框都不勾选标记整个结果集。
2. 选择 **Tools** 菜单中的 **Add Tag**。
3. 在 **Add Tags** 下方的输入框中输入标签。用分号将多个标签隔开。
4. 点击 **Save**。

获取标签文献

按照下面的步骤获取用自定义的检索词标记的标签文献。

操作步骤

1. 选择 **Explore > Tags**。



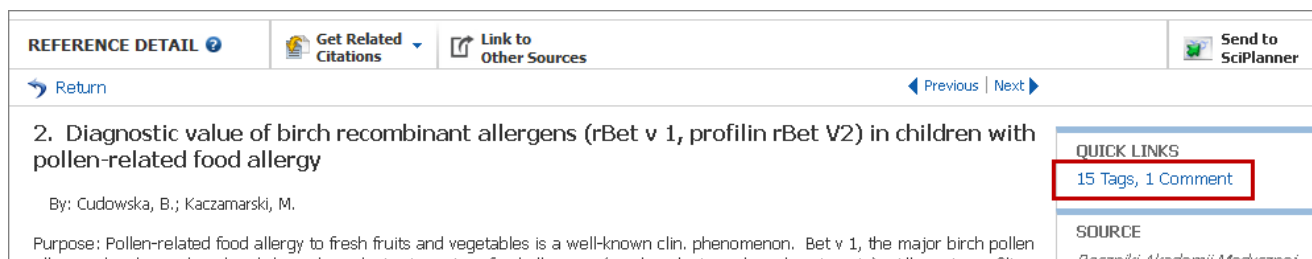
2. 从标签的字母列表中，点击一个标签获取该标签标记的文献。

删除文献的标签

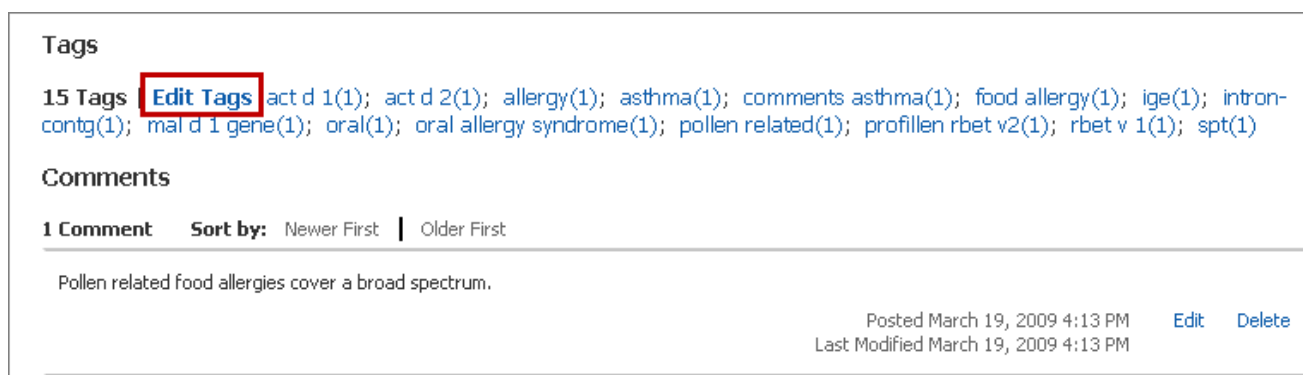
可以从一篇文献中移除用于检索的标签。

操作步骤

1. 在文献详情页面，点击 **Quick Links** 下方的 **Tags/Comments** 链接就会跳转到文献下方的标签和评论。



2. 点击 **Edit Tags**。



3. 点击标签旁的 **X**，移除一个标签。

Edit Tags

Diagnostic value of birch recombinant allergens (rBet v 1, profilin rBet V2) in children with pollen-related food allergy

My Tags: Click 'x' to remove tag from "My Tags".

act d 1 x act d 2 x allergy x asthma x comments asthma x food allergy x ige x intron-contg x mal d 1 gene x oral x oral allergy syndrome x pollen related x profillin rbet v2 x rbet v 1 x spt x

Add Tags: Separate multiple tags with semicolons, 100 characters per tag, 50 tags per reference

4. 点击 **Save**。

为文献编辑评论

可以修改或删除之前对文献的评论。

操作步骤

1. 在文献详情页面，点击 **Quick Links** 下方的 **Tags/Comments** 就会跳转到文献下方的标签和评论。

REFERENCE DETAIL
Get Related Citations
Link to Other Sources
Send to SciPlanner

Return
Previous | Next

2. Diagnostic value of birch recombinant allergens (rBet v 1, profilin rBet V2) in children with pollen-related food allergy

By: Cudowska, B.; Kaczmarek, M.

Purpose: Pollen-related food allergy to fresh fruits and vegetables is a well-known clin. phenomenon. Bet v 1, the major birch pollen allergen, has been shown to be highly immunogenic. Food allergies (especially milk, egg, soy, wheat, and fish) are the most common allergic diseases in children.

QUICK LINKS

15 Tags, 1 Comment

SOURCE

Rozprawy Akademii Medycznej

2. 点击 **Edit** 编辑想要修改的评论。或点击 **Delete**，删除评论。

Tags

15 Tags | Edit Tags act d 1(1); act d 2(1); allergy(1); asthma(1); comments asthma(1); food allergy(1); ige(1); intron-contg(1); mal d 1 gene(1); oral(1); oral allergy syndrome(1); pollen related(1); profillin rbet v2(1); rbet v 1(1); spt(1)

Comments

1 Comment Sort by: Newer First | Older First

Pollen related food allergies cover a broad spectrum.

Posted March 19, 2009 4:13 PM
Last Modified March 19, 2009 4:13 PM

3. 如果选择编辑评论，则在 **Add Comment** 下方的框中输入修改的词语，然后点击 **Save**。

Tags

15 Tags | [Edit Tags](#) act d 1(1); act d 2(1); allergy(1); asthma(1); comments asthma(1); food allergy(1); ige(1); intron-contg(1); mal d 1 gene(1); oral(1); oral allergy syndrome(1); pollen related(1); profillen rbet v2(1); rbet v 1(1); spt(1)

Comments

1 Comment Sort by: [Newer First](#) | [Older First](#)

Pollen related food allergies cover a broad spectrum.

Posted March 19, 2009 4:13 PM [Editing...](#)
Last Modified March 19, 2009 4:13 PM

Add Comment: Maximum of 1024 characters per comment; 50 comments per reference.

Pollen related food allergies cover a broad spectrum. Objective of the authors' work was to assess the diagnostic value of recombinant allergens (rBet v 1, rBet v 2) for diagnosis of children sensitized to birch pollen with assocd.

Characters Remaining: 793

[Save](#) [Cancel](#) [Delete](#)

删除对文献的评论

可以删除之前添加到文献中的评论。

操作步骤

1. 在文献详情页点击 **Quick Links** 下方的 Tags/Comments 链接，就会跳转到文献下面的的标签和评论。

REFERENCE DETAIL	Get Related Citations	Link to Other Sources	Send to SciPlanner
Return		Previous Next	
<p>2. Diagnostic value of birch recombinant allergens (rBet v 1, profilin rBet V2) in children with pollen-related food allergy</p> <p>By: Cudowska, B.; Kaczmarek, M.</p> <p>Purpose: Pollen-related food allergy to fresh fruits and vegetables is a well-known clin. phenomenon. Bet v 1, the major birch pollen allergen, has been cloned and characterized in terms of food allergen (a broad but not a narrow tree). Allergens are 61kDa</p>			<p>QUICK LINKS</p> <p>15 Tags, 1 Comment</p> <p>SOURCE</p> <p><i>Roczniki Akademii Medycznej</i></p>

2. 点击 **Delete** 删除需要删除的评论。

Tags

15 Tags | [Edit Tags](#) [act d 1\(1\)](#); [act d 2\(1\)](#); [allergy\(1\)](#); [asthma\(1\)](#); [comments asthma\(1\)](#); [food allergy\(1\)](#); [ige\(1\)](#); [intron-contg\(1\)](#); [mal d 1 gene\(1\)](#); [oral\(1\)](#); [oral allergy syndrome\(1\)](#); [pollen related\(1\)](#); [profilin rbet v2\(1\)](#); [rbet v 1\(1\)](#); [spt\(1\)](#)

Comments

1 Comment **Sort by:** [Newer First](#) | [Older First](#)

Pollen related food allergies cover a broad spectrum.

Posted March 19, 2009 4:13 PM [Edit](#) [Delete](#)
Last Modified March 19, 2009 4:13 PM

3. 点击 **OK**，确认删除。



SciFinder® 使用手册

第三卷 访问 ChemZent 文献

美国化学文摘社

CAS, a division of American Chemical Society

3. 访问 ChemZent 文献

什么是 ChemZent™?.....	1
查看 ChemZent 文献.....	1
查看德文文摘.....	2

什么是 ChemZent™?

ChemZent™是被整合到 SciFinder 中的德国化学文摘（Chemisches Zentralblatt）的英文版，CAS 已经对 ChemZent 中的物质和概念进行了标引，可以通过英文检索 ChemZent。德国化学文摘是第一个、也是最古老的化学文摘期刊，收录了 1830-1969 年之间的化学文献。ChemZent 需要单独购买，才能使用。

查看 ChemZent 文献

- 如果只需查看结果集中的 **ChemZent** 文献，则请点击“**View Only ChemZent**”
(也可在“Analyze”或“Refine”中按照数据库分析或限定，然后选择 ChemZent)。

The screenshot shows the SciFinder interface for a search on 'belladonna'. The top navigation bar includes 'Explore', 'Saved Searches', 'SciPlanner', 'Save', 'Print', and 'Export'. Below this, the search topic is 'Research Topic "belladonna" > references (4099)'. A toolbar contains buttons for 'Get Substances', 'Get Reactions', 'Get Related Citations', 'View Only ChemZent' (highlighted with a red box), 'Tools', 'Create Keep Me Posted Alert', and 'Send to SciPlanner'. The main content area is divided into 'Analyze', 'Refine', and 'Categorize' sections. The 'Analyze' section shows a list of authors with their respective counts. The 'Refine' section shows 'Sort by: Accession Number' and '0 of 4099 References Selected'. The 'Categorize' section shows two search results:

- 1. Traditional chinese medicine composition for treating dysmenorrhea [Machine Translation].**
 By Zhao, Hong
 From Faming Zhuanli Shenqing (2016), CN 105412887 A 20160323. | Language: Chinese, Database: CAPLUS
 [Machine Translation of Descriptors]. The present invention discloses traditional Chinese medicine compn. for treating dysmenorrhea. The traditional Chinese medicine is prepd. from Polygonum tinctorium leaves 5-13 parts, Ziziphus jujuba and/or Ziziphus vulgaris fruits 15-30 parts, Atropa belladonna 4-12 parts, Carthamus tinctorius and/or Crocus sativus (safflower) flowers 8-18 parts, Torreya grandis seeds 8-20 parts, Wikstroemia indica 4-15 parts, brown sugar 20-30 parts, calcined gypsum 3-9 parts, ginger 12-25 parts, Brucea javanica fruits 6-16 parts, Lathyrus davidii all grass 10-20 parts,...
- 2. Effect of homoeopathic drugs to control growth and production of A. flavus**
 By Singh, H. N. P.; Kumari, Sunita; Prasad, M. M.
 From Advances in Bioscience and Biotechnology (2015), 6(1), 18-21. | Language: English, Database: CAPLUS
 Five common homoeopathic drugs viz., **Belladonna**, Bryonia, Colchicum, Colocynth and Lathyrus sat were selected and tested against growth and aflatoxin prodn. of Aspergillus flavus. The result indicates that all five drugs suppressed the growth of A. flavus. The lower concn. of all the tested drugs induced max. growth of fungi and max. prodn. of aflatoxin. However, the growth as well as aflatoxin prodn. potentiality was considerably decreased when the concn. of the drug was increased. Out of all the five drugs, Bryonia was comparatively less effective with respect to inhibition in aflatoxin ...

SciFinder 会生成一个只有 ChemZent 文献的新结果集。

Research Topic "belladonna" > references (4099) > refine "CHEMZENT" (94)

REFERENCES

Get Substances | Get Reactions | Get Related Citations | View Only CHEMZENT | Tools | Create Keep Me Posted Alert | Send to SciPlanner

Analyze | Refine | Categorize

Sort by: Accession Number

0 of 94 References Selected

1. Determination of theophylline, caffeine and ephedrine hydrochloride side by side in Belladrial "tablet-th"

Quick View CHEMZENT

By zKturska, We ronikaR es; Walicka, Teresa
From Chemisches Zentralblatt (1969), 140(38), 148. | Language: German, Database: CHEMZENT
Original Source Acta polon. pharmac. 25 (1968) 1, 45 — 50; Warszawa, Inst. Lekow, Zaki. Chem. analit.; pol.

In Belladrial tablets Which wasserlös. is theophylline (I) potentiometr. Agnos with or after Yolhard isoflavones. Caffeine (II) is after separation of I with AgNO₃/NH₄OH with phosphomolybdic acid or without isolation with p-dimethylaminobenzaldehyde kolorimetr. Determined. Ephedrine Hydrochloride with picryl chloride in benzene colorimetrically. The Tropaalkaloule of belladonna extract can not be paper chromatography from separate and Determined.

2. Separation and determination of tropane alkaloids in pharmaceutical, officinal Solanaceenextrakten

Quick View CHEMZENT

By Levorato, C.
From Chemisches Zentralblatt (1969), 140(29), 160. | Language: German, Database: CHEMZENT
Original Source Boll. chim. farmac. 107 (1968) 9, 574 — 78; Labor. Ric., T. Locatelli, Padova; ital.

Anticholinergic agents (I), hyoscyamine (II) and scopolamine from belladonna, Hyoscyamus-u. Stramoniumextrakten and medicaments Containing thesis extracts by Dünnschichtchro-chromatography separately. I and II have thereby into each of the 9 Examined Lsgm. mixtures the same RF value. After evaporating with HN03 and alkalization is at 575 nm colorimetrically.

3. Determination of microgram quantities of belladonna alkaloids in one neomycin kaolin pectin suspension

Quick View CHEMZENT

By Bracey, Alfred; Selzer, George
From Chemisches Zentralblatt (1969), 140(20), 148. | Language: German, Database: CHEMZENT
Original Source J. pharmac. Sei. 57 (1968) 3, 464—66; Washington, D.C., U.S. Dep. of Health, Educ. and Welfare, Div. of Antibiotics and Insulin Certification; engl.

The Alkaloids by partitioning with A./Ae. isolated and of interfering substances (for forming preservatives) Freed, then over diatomaceous earth columns and cleaned with CHCl₃ eluted. Of nitration, reduction and diazotizing are stored N-[-naphthyl]-sthylen-diamine for dye coupled and the absorption at 550 nm Measured. Worin Modellvers. are 92.9-99.4 weight of atropine sulfate initially found.

查看德文文摘


- 点击文献标题下方的 **ChemZent** 链接查看德文文摘。

2. Separation and determination of tropane alkaloids in pharmaceutical, officinal Solanaceenextrakten

Quick View CHEMZENT

By Levorato, C.
From Chemisches Zentralblatt (1969), 140(29), 160. | Language: German, Database: CHEMZENT
Original Source Boll. chim. farmac. 107 (1968) 9, 574 — 78; Labor. Ric., T. Locatelli, Padova; ital.

Anticholinergic agents (I), hyoscyamine (II) and scopolamine from belladonna, Hyoscyamus-u. Stramoniumextrakten and medicaments Containing thesis extracts by Dünnschichtchro-chromatography separately. I and II have thereby into each of the 9 Examined Lsgm. mixtures the same RF value. After evaporating with HN03 and alkalization is at 575 nm colorimetrically.

ChemZent PDF 文件出现在一个单独的窗口，在这个窗口中可以选择打印或保存 PDF 文件。定位标记符号  表明指定内容所在的具体位置。

Jod-2-propinyl-äther in pharmazeutischen Zubereitungen. Atsushi Sugii und Yozo Kabasawa. (J. pharm. Soc. Japan [Yakugakuzaishi] 88 (1968) 3, 243-46; Pharmaz. Inst., Coll. of Sci. and Engng., Nihon Univ., Tokyo; jap., Auszug; engl.) - Vgl. beschreiben die gleichzeitige polarograph. Best. von 2,4,5-Trichlorphenyl-2-propinyl- (I) u. -Jod-2-propinyl-äther (II). II ist polarograph. akt., I nicht. Die Simultanbest. von I u. II macht es erforderlich, nach Best. der 2. Welle im Polarogramm (A) II mit Na-Borhydrid zu reduzieren, mit Hoxvay-Reagens das Cu-Salz zu bilden u. die mit A.-HCl-Gemisch zersetzte Lag. zu polarographieren (B); $B_{1,2,3,4,5} = C_1 \cdot K$. Ziegenhorn 4846

1371 Bestimmung des pK_s -Wertes für 5,5-Diphenylhydantoin. Suraj P. Agarwal und Martin I. Blisko. (J. pharm. Sci. 47 (1968) 8, 1431-35; Dep. of Pharm., Univ. of Ill. at the Med. Center, Chicago, Ill.; engl.) - Ausz. spektrophotometr. Messungen alkohol. Lag. von 5,5-Diphenylhydantoin (I) in Tri-(hydroxymethyl)aminomethan(II)-Pufferlös. (pH: 7,7; 7,9; 8,1; 8,3; 8,5; 8,7 bzw. 8,9), 0,01 n NaOH u. 0,01 n HCl errechnet sich der pK_s -Wert von I gemäß $pK_s = pH + \log(A - B)/(B - C)$, wenn A die I-Absorption in 0,01 n NaOH, B in II u. C in 0,01 n HCl bedeuten, zu $pK_s = 8,31 \pm 0,04$. Durch potentiometr. Titration von I in wss. alkohol. Lag. (A.-Konz. ≈ 20 Vol.-%) mit HCl u. Extrapolation der für verschiedene A.-Konz. erhaltenen pK_s -Werte gegen die A.-Konz. Null (W.) ergibt sich der pK_s -Wert von I zu 8,33. I findet therapeut. Anwendung in Kombinationen mit Phenobarbital. D. Pankow 4846

1372 Trennung und Bestimmung der Tropanalkaloide in pharmazeutischen, offiziellen Solanaceenextrakten. C. Leverato. (Boll. chim. farm. 107 (1968) 9, 574-78; Labor. Ric., T. Locatelli, Padova; ital.) - Atropin (I), Hyoscyamin (II) u. Scopolamin werden aus Belladonna-, Hyoscyamus u. Stramoniumextrakten sowie Arzneimitteln mit diesen Extrakten durch Dünnschichtchromatographie getrennt. I u. II haben dabei in jedem der 9 untersuchten Legn.-Gemische den gleichen R_f -Wert. Nach Eindampfen mit HNO_3 u. Alkalisieren wird bei 575 nm kolorimetriert. W. Holland 4846

1373 Spektrophotometrische Methode für die Strychninphosphatanalyse in Gegenwart von Magnesiumstearat. Janelle Barrett, Ramona Puckett und R. D. Poe. (J. pharm. Sci. 57 (1968) 7, 1249-50; Alcon Labor., Inc., Fort Worth, Tex.; engl.) - Eine quant. Best. von Strychninphosphat (I) in Tabletten besteht darin, daß nach Zusatz von Ammoniumhydroxid zu wss. I-Dispersionen u. nach CHCl₃-Extraktion die Lag. mit Bromthymolblau in Phosphatpuffer (pH 7,65) versetzt u. die Absorption der Lag. bei 410 nm gemessen wird. Mg-, Ca-, Zn-Stearat u. Stearinsäure stören bei der Meth. nicht. D. Pankow 4846

1374 Beziehungen zwischen physikalisch-chemischen Eigenschaften und Wirksamkeit bei Steroiden. 2. Mitt. Löslichkeit und Aktivität anabol wirksamer Steroide. R. Hüttenrauch und Ingeborg Keiner. (Arch. Pharmaz. 301 (1968) 11, 866-82; Wiss. Labor. VEI3 Jenapharm, Jena; dt.) - 1. vgl. ibid. 300 (1967) 1007. - Die Löslichkeiten in W. oder Phosphatpufferlös. (pH 7,4) bei 30° betragen in %: Testosteron 0,0018/0,0029, Methyltestosteron 0,0034/0,0043, 1(2)-Dehydro-methyltestosteron 0,015/0,0129, 11 β -Hydroxy-methyltestosteron 0,0023/-, 4-Chlor-methyltestosteron 0,0018/0,0013, 4-Chlor-1-dehydro-methyltestosteron 0,0013/0,0013 u. 4-Chlor-11 β -Hydroxy-methyltestosteron 0,0336/0,0252. Mit zunehmender Löslichkeit der Verh. erhöht sich im allg. die anabole u. androgene Wirksamkeit. - 50 Literaturangaben. D. Pankow 4847

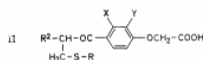
1375 Beziehungen zwischen physikalisch-chemischen Eigenschaften und Wirksamkeit bei Steroiden. 3. Mitt. Verteilungskoeffizient und Aktivität anabol wirksamer Steroide. R. Hüttenrauch und I. Keiner. (Arch. Pharmaz. 301 (1968) 9, 641-48; dt.) - 2. vgl. vorst. Referat. - Die Verteilungskoeff. (VK) in den Syst. CHCl₃/Glycerin (I) (1:1) bzw. Ae./W. (1:1) betragen bei Testosteron 424/21,67, Methyltestosteron 211/20,87, 1(2)-

Dehydro-methyltestosteron 186/31,12, 4-Chlor-methyltestosteron 390/16,81, 4-Chlor-1-dehydro-methyltestosteron 211/12,77 u. 4-Chlor-11 β -Hydroxy-methyltestosteron 174/-, - Im Syst. CHCl₃/W. tritt eine nahezu vollständige Anreicherung der Steroide in der apolaren Phase ein. Mit ansteigenden VK im Syst. CHCl₃/I nimmt die anabole Wirksamkeit der geprüften Steroide ab; im Syst. Ae./W. erhöht sich mit zunehmendem VK die androgene Aktivität. - 17 Literaturangaben. D. Pankow 4847

1376 Vergleichende Untersuchung eines neuen fluorimetrischen Verfahrens für Mestranolol in Tabletten mit Gas-Flüssigkeits-Chromatographie und kolorimetrischen Methoden. Robert J. Templeton, William A. Arnett und Ivan M. Jakovljevic. (J. pharm. Sci. 57 (1968) 7, 1168-1172; Analyt. Dev. Dep., Eli Lilly and Comp., Indianapolis, IN; engl.) - Mestranolol (I; 17 α -Äthyl-17 β -estradiol-3-methyläther) reagiert mit Methanol-H₂SO₄-Gemischen bestimmter Zus. unter Bildg. eines stabilen Fluorophors von hoher Intensität, mit dem 10 μ g-Mengen bestimmt werden kann. Bei Verw. wechselnder Methanol- u. H₂SO₄-Mengen kann die Fluoreszenz bei verschiedenen Wellenlängen gemessen werden. Kolorimetr., Gas-Fl.- u. Dünnschicht-chromatograph. Verh. der I-Best. werden mit der fluorimetr. Meth. verglichen, die für Kontroll- u. Stabilitätsmessungen geeignet erscheint. U. Drehmann 4847

1377 Identifizierung von Antinuragika und Antipyretika in Tabletten mittels Dünnschichtchromatographie. D. Zivanov-Stakić und V. Domaćin. (Arch. Pharm. 18 (1968) 1, 21-26; Inst. za Farmac., Hemju Farmac. Fak., Beograd; kroat.) - Vgl. wenden die dünnschichtchromatograph. Meth. zur Trennung u. Identifizierung der Komponenten in Coffeacin (Coffein, Phenacetin u. Aminopyrin), Cyclopyrin- u. Plixidon (Aminopyrin, Phenacetin, Kodeinphosphat, Barbiton, Phenobarbiton), Codefol (Aspirin, Phenacetin, Kodeinphosphat) u. Galipyrin (Aminopyrin, Novalgin)-Tabletten an. Hierzu dienen 7 Legm.-Syst. u. zur Sichtbar-machung o-Kresolphalein, Alizarin R u. Chromazaron S. Die Pyrazolon-Deriv. können gut mit Chloralhydrat oder Trichloressigsäure erkannt werden. - 23 Literaturangaben. K. Ziegenhorn 4850

1378 Merck & Co., Inc., USA (Erfinder: Everett Maynard Schultz und James Maurice Sprague), Substituierte Derivate der Essigsäure, zu Ung.F. 151888, C. 1967, 18-1757 sind folgende Beispiele zu ergänzen: 0,01 (Mol) Isopropylmercaptan (I) werden mit 0,013-Chlor-4-(2-methylenbutyryl)-phenoxyessigsäure versetzt, unter Rückfluß auf 80-90° erhitzt, u. I wird abgetrieben; nach Aufarbeiten aus Blz. u. Hexan (1:2) erhält man 3-Chlor-4-[2-(isopropylmercaptomethyl)-butyryl]-phenoxyessigsäure, F. 77-79°, in 48%ig. Ausbeute. - 3-Chlorphenoxyessigsäuren: 4-[2-(Äthylmercaptomethyl)-butyryl], F. 88-90°. - 4-[2-(o-Carboxyphenylmercaptomethyl)-butyryl], F. 172-173°. - 4-[2-(2-Amino-2-carboxyethylmercaptomethyl)-butyryl], Hydrochlorid, - 4-[2-(2-Dichloräthylmercaptomethyl)-butyryl], - Bis-[2-(2-chlor-4-carboxymethoxybenzoyl)-butyl]-sulfoxid, Zers. bei 130-144°. - 1,4-Bis-[2-(2-chlor-4-carboxymethoxybenzoyl)-butylmercapto]-butan, Zers. bei 118-222°. - Bis-[2-(2,3-dichlor-4-carboxymethoxybenzoyl)-butyl]-sulfoxid, F. 144,5-146°. - 2,3-Dimethyl-4-[2-(2-amino-2-carboxymethylmercaptomethyl)-butyryl]-phenoxyessigsäurehydrochlorid, - 2-[2-Amino-2-carboxyethylmercapto]-2-[2,3-dichlor-4-carboxymethoxybenzoyl]-pentanhydrochlorid, - 2,3-



Dimethyl-4-[2-methylenbutyryl]-phenoxyessigsäureglutathion. Analog folgende Verb. der allg. Formel II, worin $\text{R}^2 = \text{C}_2\text{H}_5$, $\text{X} = \text{Cl}$, $\text{Y} = \text{H}$ u. R nachst. Bedeutung hat: $\text{CH}_2(\text{CH}_2)_2\text{CH}_2$, F. 80-81,5°. - $\text{CH}_2-\text{CH}(\text{CH}_3)-$, F. 73,5-75°. - $(\text{CH}_2)_4\text{C}$, F. 108-110°. Cyclohexyl-

- 在 Quick View 窗口中也可获得 ChemZent 链接。

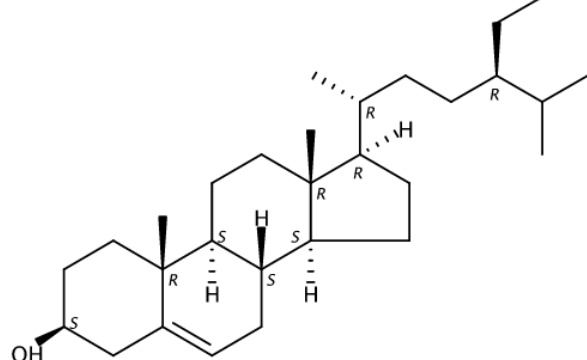
Quick View

On the Mechanism of Etruscomycin, a new polyene antibiotic tables

CHEMZENT
 By GHIORIS, M.; Sanfilippo, A.; Mazzoleni, R.; Migliacci, A.
 From *Chemisches Zentralblatt* (1964), 135(1), 148. | Language: German, Database: CHEMZENT
 Original Source *Giorn. Microbiol.* 9, 73 — 82, April-Juni 1961; Milano, Farmitalia, Labor. Ricerche Microbiol. e Chemioterapia; Ital.

Etruscomycin (I) is effective against mold fungi and yeasts, but not against schizomycetes. The effect against *Candida albicans* by sterols (II) with more than 26 carbon atoms made naught. A non-competitive antagonism by sodium acetate, mevalonic acid, Na-Dehydrocholol, cholesterol and Sito sterol Applied. The antagonist. II bear at C (3) a OH group. Prevents this I as the remaining polyene. Antibiotics in the synthesis or the utilization of II.

Substance Images
 83-46-5 (-)- β -Sitosterol



Absolute stereochemistry.

- 在文献详情页面点击 **View with ChemZent** 获取德文文摘。

Explore | Saved Searches | SciPlanner | Link | Save | Print | Export

Research Topic "belladonna" > references (4099) > refine "CHEMZENT" (94) > Determination of theophylline,...

REFERENCE DETAIL | Get Related Citations | **View with CHEMZENT** | Send to SciPlanner

Return | Previous | Next

1. Determination of theophylline, caffeine and ephedrine hydrochloride side by side in Belladrial "tablet-th (Bestimmung von Theophyllin, Coffein und Ephedrinhydrochlorid nebeneinander in "Belladrial"-Tablet-ten)

By: zkturska, Wa ronikaR es; Walicka, Teresa

In Belladrial tablets Which wasserlösli. is theophylline (I) potentiometr. Agnos with or after Yolhard isoflavones. Caffeine (II) is after separation of I with AgNO₃/NH₄OH with phosphomolybdic acid or without isolation with p-dimethylaminobenzaldehyde kolorimetr. Determined. Ephedrine Hydrochloride with picryl chloride in benzene colorimetrically. The Tropaalkaloule of *Belladonna* extract can not be paper chromatography from separate and Determined.

Tags
 0 Tags | Edit Tags

Comments
 0 Comments | Sort by: Newer First | Older First
 No comments

Add Comment: Maximum of 1024 characters per comment; 50 comments per reference.
 Characters Remaining: 1024

QUICK LINKS
 0 Tags, 0 Comments

SOURCE
Chemisches Zentralblatt
 Volume140
 Issue38
 Pages148
 Journal
 1969
 CODEN:CHZEAG
 Original Source: *Acta polon. pharmac.* 25 (1968) 1, 45 — 50; Warszawa, Inst. Lekow, Zakl. Chem. analit.; pol.

COMPANY/ORGANIZATION
 Warszawa, Inst. Lekow, Zakl. Chem. analit.

ACCESSION NUMBER
 CZ:1969:77760
 CHEMZENT

PUBLISHER
 Verlag Chemie GmbH

LANGUAGE
 German



SciFinder[®] 使用手册

第四卷 通过 PatentPak 访问专利

美国化学文摘社
CAS, a division of American Chemical Society

4. 通过 PatentPark 获取专利

什么是 PatentPak™?	1
获取专利全文的 PDF 文件	1
链接到专利中的物质所在页	3
使用 PatentPak 浏览器	5
定位标记符号	6
在 SciFinder 中检索和查看详情	7
导航页面和缩放显示	8
下载 PDF	8

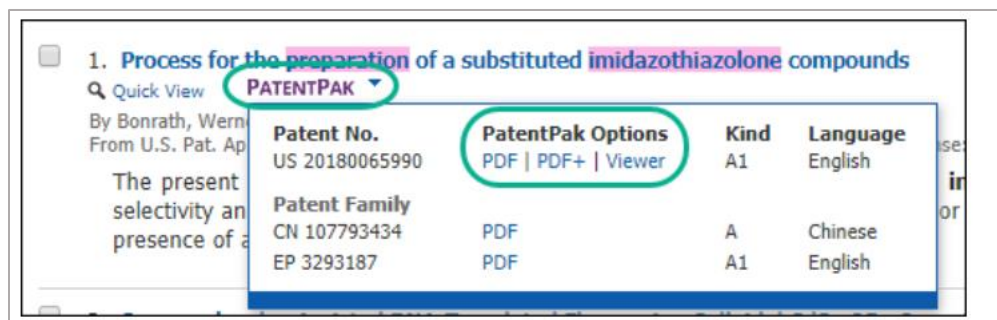
什么是 PatentPak™?

PatentPak™ 是一个单独授权的模块，它提供：

- 即时访问全球主要专利授权机构的专利全文
- 全面的专利族覆盖范围可实现获取一篇专利的多种语言的文件
- 直接定位专利原文中的重要物质

获取专利全文的 PDF 文件

当 PatentPak 模块功能激活后，在文献或反应结果集中，点击 PatentPak 即可查看专利或专利族的全文 PDF 文件。



在 Quick View 窗口中也可使用 PatentPak。

The screenshot shows the 'Quick View' window for the same patent. The 'PATENTPAK' dropdown is visible. Below the patent information table, there are 'Reference Images' and 'Substance Images' tabs. The 'Reference Images' tab is active, showing four chemical structures labeled I, II, III, and IV. Structure I is a general imidazothiazolone core with substituents R¹ and R². Structure II is similar to I but with an OR group. Structure III is a specific example with a benzyl group and a hydroxyl group. Structure IV is a more complex derivative with a benzyl group, a hydroxyl group, and a fused ring system.

在文献详情页面点击 **View with PatentPak** 查看专利全文的 PDF 文件。下面页面中提供了专利族的成员表。可以在表格中点击 **PatentPak** 打开专利的 PDF 全文。如果专利号是超链接的（如图中的 **GR 201300654**），则可以点击链接进入该专利的文献详情页面。

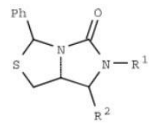
REFERENCE DETAIL [Get Substances](#) [Get Related Citations](#) **View with PATENTPAK** [Link to Other Sources](#)

[Return](#)

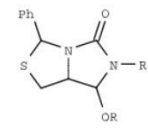
1. Process for the preparation of a substituted imidazothiazolone compounds

By: Bonrath, Werner; Peng, Kun; Zhang, Lei; Zhu, Zhibin
Assignee: Switz.

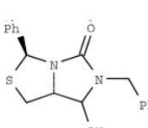
The present invention provides a new process for the **prepn.** of a substituted **imidazothiazolone** compd. I [$R^1 = \text{benzyl}$; $R^2 = \text{alkyl}$]. The process of the present invention uses a fluoride process for the **prepn.** of I, or a stereoisomer thereof, or a stereoisomeric mixt. thereof, comprises: reacting a compd. II [$R = \text{H}$, alkyl, alkyl/carbonyl; $R^1 = \text{benzyl}$], or a stereoisomer provide I. For example, reacting compd. III with 1,2-bis(trimethylsilyloxy)cyclohexene in the presence of ZnCl_2 in DCM afforded 91% (3S,7R,7aR)-IV.



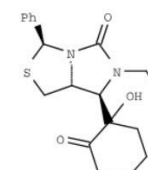
I



II



III



IV

Patent Information

Patent No.	PatentPak Options	Kind	Language	Date
US 20180065990	PDF PDF+ Viewer	A1		Mar 8, 2018
CN 107793434	PDF	A	Chinese	Mar 13, 2018
EP 3293187	PDF	A1	English	Mar 14, 2018
Priority Application				
WO 2016-CN98302		A1		Sep 7, 2016

在反应详情页面点击 **View with PatentPak** 查看专利文献的 PDF 全文或者查看专利族成员的 PDF 全文。

REACTION DETAIL [?](#) [Get Reference Detail](#) [View with PATENPAK](#)

[Return](#)

8. Single Step *Hover over any structure for more*

Patent No.	PatentPak Options	Kind	Language
CN 105330688	PDF PDF+ Viewer	A	Chinese
Patent Family			
CN 105330688	PDF	B	Chinese

链接到专利中的物质所在页

在 Quick View 窗口中，专利中被标引物质的图片显示在 Substance Images 标签中。点击右边的页码数字就直接链接到专利 PDF 中的物质（并非所有物质都有关联页码）。

Quick View ×

Method for producing glyphosate from glycine crystallization mother liquor

PATENPAK [?](#)

By Wu, Chuanlong; Ding, Yongliang; Qin, Ling; Wang, Yonggui; Zhu, Lili; Yang, Fan; Ren, Xingyu; Chen, Hongyang; Li, Ou
From Faming Zhuanli Shenqing (2014), CN 103641854 A Mar 19, 2014. | Language: Chinese, Database: CAPLUS






The present invention belongs to the tech. field of pesticide, and refers to a method for producing glyphosate from glycine crystn. mother liquor. The method comprises the steps of: adding inorg. base to residual glycine crystn. mother liquor for neutralization, converting glycine and iminodiacetic acid in the mother liquor into glycinate and iminodiacetate, adding chloroacetate to completely convert glycinate into iminodiacetate to obtain mother liquor contg. iminodiacetate, carrying out a reaction between the mother liquor contg. iminodiacetate and phosphorus trichloride to obtain iminodiacetic acid hydrochloride, adding formaldehyde, regulating pH value to obtain N-phosphonomethyl imino diacetic acid mixt., and oxidizing to obtain N-phosphonomethylglycine. The method can effectively recycle residual glycine and iminodiacetic acid in waste mother liquor to produce glyphosate, accomplishes integrative utilization of glycine crystn. mother liquor, reduces waste discharge of glycine prodn. and waste of resources, creates social benefit and economic benefit, and solves problems of treatment of glycine crystn. mother liquor.

Reference Images **Substance Images**

1071-83-6P Glyphosate 1 2 3 4 5 ... 9 of 9

Page 2 in PATENPAK

在文献详情页面的 **Substance** 区域也列出了物质所在的页码。

Patent No.	PatentPak Options	Kind	Language	Date	Application No.	Date
CN 107522738	PDF PDF+ Viewer	A		Dec 29, 2017	CN 2017-10570598	Jul 13, 2017
Priority Application						
CN 2017-10570598 Jul 13, 2017						
Indexing						
Organometallic and Organometalloidal Compounds (Section29-7)						
Concepts						
Acidification Condensation reaction						
prepn. of glyphosate						
Substances						
1071-83-6P Glyphosate  Page 2 in PATENTPAK						
prepn. of glyphosate						
Industrial manufacture; Preparation						
50-00-0 Formaldehyde, reactions 						
56-40-6 Glycine, reactions 						
868-85-9 Dimethylphosphite 						
30525-89-4 Paraformaldehyde  Page 4 in PATENTPAK						
prepn. of glyphosate						
Reactant; Reactant or reagent						

使用 PatentPak 浏览器

PatentPak 中很多专利都已经被 CAS 科学家加注了页码，有助于定位最重要的化学物质。

PatentPak 浏览器的左侧导航栏将会显示 Key Substances in Patent。点击 Key Substances in Patent 中的物质定位标记符号，就会直接定位到专利中该物质所在位置。采用相似的方法，当点击专利中的定位标记符号时，左边 Key Substances in Patent 中的相应物质就会被高亮显示。每一个关键物质都可以直接在 SciFinder 进行检索和查看详情。同时可以导航、缩放，下载 PDF 或 PDF+ 专利文件。

重要物质

滑动Key Substances栏中的滚动条, 快速评估专利中的化学物质

在更多专利页面查看该物质

通过CAS登记号识别物质

PatentPak A CAS SOLUTION

PAGE 1 / 90 ZOOM DOWNLOAD PDF

Key Substances in Patent

CAS RN 1622898-84-3

Search in SciFinder | View Detail

Analyst Markup Locations (6)

- page 45
- page 53
- page 58

▼ More Locations

CAS RN 1622898-85-4

Search in SciFinder | View Detail

Analyst Markup Locations (2)

- page 45
- page 60

CAS RN 1622898-82-1

Search in SciFinder | View Detail

Analyst Markup Locations (3)

- page 45
- page 46
- page 59

APPLICATION PUBLISHED UNDER THE PATENT COOPERATION TREATY (PCT)

Property

(10) International Publication Number
WO 2015/109080 A1

(43) International Publication Date
23 July 2015 (23.07.2015)

WIPO | PCT

(51) International Patent Classification:
C07D 319/06 (2006.01)

(21) International Application Number:
PCT/US2015/011581

(72) Inventors; and
(71) Applicants: CARROLL, Frank, Ivy [US/US]; Care of, Research Triangle Institute, 3040 Cornwallis Road, Research Triangle Park, NC 27709 (US). NAVARRO, Hernan, A. [US/US]; Care of, Research Triangle Institute, 3040 Cornwallis Road, Research Triangle Park, NC 27709 (US). RUSYON, Scott, P. [US/US]; Care of, Research Triangle Institute, 3040 Cornwallis Road, Research Triangle Park, NC 27709 (US). THOMAS, James, B. [US/US]; Care of, Research Triangle Institute, 3040 Cornwallis Road, Research Triangle Park, NC 27709 (US). GICHINGA, Moses, G. [US/US]; Care of, Research Triangle Institute, 3040 Cornwallis Road, Research Triangle Park, NC 27709 (US). KORMOS, Chad, M. [US/US]; Care of, Research Triangle Institute, 3040 Cornwallis Road, Research Triangle Park, NC 27709 (US).

(26) Publication Language: English

(30) Priority Data: 61/927,739 15 January 2014 (15.01.2014) US

(71) Applicant: RESEARCH TRIANGLE INSTITUTE [US/US]; 3040 Cornwallis Road, Research Triangle Park, NC 27709 (US).

[Continued on next page]

(54) Title: KAPPA-OPIOID RECEPTOR SELECTIVE OPIOID RECEPTOR ANTAGONISTS

(57) Abstract: Potent opioid receptor antagonists and their use as pharmacotherapies for treating depression, anxiety, schizophrenia, eating disorders, and addiction to cocaine, methamphetamine, nicotine, alcohol, and opiates are disclosed.

定位标记符号

Key Substances in Patent

Analyst Markup Locations (2)

- page 45
- page 60

CAS RN 1622898-82-1

Search in SciFinder | View Detail

Analyst Markup Locations (3)

- page 45
- page 46
- page 59

CAS RN 119193-19-0

Search in SciFinder | View Detail

Analyst Markup Locations (2)

- page 45
- page 58

CAS RN 1622898-79-6

Search in SciFinder | View Detail

WO 2015/109080 **PCT/US2015/011581**

hydride cleaved the triflamide to give piperidine 7. Boc-L-valinal was prepared according to the procedure of Skiles *et al.* (Skiles *et al.*, 1992) which was used for reductive amination with 7 to afford 8 after Boc deprotection with trifluoroacetic acid in dichloromethane. Peptide coupling using HBTU with the Boc-7-hydroxy-D-Tic carboxylic acid was followed by Boc deprotection to afford RTI-5989-374.

[00224] Scheme 1*

1. 点击Key Substances定位标记符跳转到相应页面

2. 专利中的物质被定位标记符号高亮显示

3. 同样，点击专利中的定位标记符号，Key Substances边栏中的对应物质将高亮显示

[00225] *Reagents: (a) Ti_2O , DIPEA, DCM; (b) $\text{PdCl}_2(\text{PPh})_3$, LAH, Δ ; (d) 1. Boc-L-valinal, NaCNBH_3 , $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{OH}$, 2. TFA, D-Tic, HBTU, NEt_3 , DCM, 2. TFA, DCM.

当定位标记符号被 [] 括起来时 []，就表明有多个物质和其有关（如下图中，专利中高亮显示的标记符号与 10a-10t 的物质都有关）。当专利中定位标记符号高亮显示时，在 Key Substances In Patent 边栏中的相关物质也会被高亮显示。

Key Substances in Patent

WO 2015/048365 PCT/US2014/057575

Triethylamine (1.2mmol) was added slowly to a suspension of the various TFA salts **8** (0.5mmol) in CH_2Cl_2 (35mL), and this mixture was stirred for 10 min when a clear solution was obtained. Under an N_2 atmosphere, alkyne (0.5 mmol), sulfonylazide **5** (0.6 mmol), and CuI (0.05 mmol) were added into this reaction mixture at room temperature. After the reaction was completed, as monitored by TLC, the reaction mixture was diluted by adding CH_2Cl_2 (4 mL) and aqueous NH_4Cl solution (6 mL). The mixture was stirred for an additional 30 min and two layers were separated. The aqueous layer was extracted with CH_2Cl_2 (3 mL \times 3). The combined organic layers **10** were dried over MgSO_4 , filtered, and concentrated *in vacuo*. The crude residue was purified by flash column chromatography with an appropriate eluting solvent system.

在 SciFinder 中检索和查看详情

Key Substances in Patent

CAS RN 1622898-84-3

Search in SciFinder | View Detail

Structure Markush Reactions

page 58

More Locations

CAS RN 1622898-85-4

Search in SciFinder | View Detail

Analyst Markup Locations (2)

page 45

page 60

(12) INTERNATIONAL APPLICATION PUBLISHED UNDER THE PATENT COOPERATION TREATY (PCT)

(19) World Intellectual Property Organization

(10) International Publication Number
WO 2015/109080 A1

(71) Applicants: CARROLL, Frank, Ivy [US/US]; Care of, Research Triangle Institute, 3040 Cornwallis Road, Research Triangle Park, NC 27709 (US). NAVARRO, Hernan, A. [US/US]; Care of, Research Triangle Institute, 3040 Cornwallis Road, Research Triangle Park, NC 27709 (US). RUNYON, Scott, P. [US/US]; Care of, Research Triangle Institute, 3040 Cornwallis Road, Research Triangle Park, NC 27709 (US). THOMAS, James, B. [US/US]; Care of, Research Triangle Institute, 3040 Cornwallis Road, Research Triangle Park, NC 27709 (US). GICHINGA, Moses, G. [US/US]; Care of, Research Triangle Institute, 3040 Cornwallis Road, Research Triangle Park, NC 27709 (US). KORMOS, Chad, M. [US/US]; Care of, Research Triangle Institute, 3040 Cornwallis Road, Research Triangle Park, NC 27709 (US).

(25) Filing Language: English

(26) Publication Language: English

(30) Priority Data: 61/927,739 15 January 2014 (15.01.2014) US

(71) Applicant: RESEARCH TRIANGLE INSTITUTE [US/US]; 3040 Cornwallis Road, Research Triangle Park, NC 27709 (US).


(57) Abstract: Potent opioid receptor antagonists and their use as pharmacotherapies for treating depression, anxiety, schizophrenia, eating disorders, and addiction to cocaine, methamphetamine, nicotine, alcohol, and opiates are disclosed.

导航页面和缩放显示



下载 PDF



当使用  下载专利的 PDF 文件时，定位标记也会被包含在 PDF 中（如下所示标记的 44 和 47）。

US 2013/0225580 A1 Aug. 29, 2013

17

TABLE 1-continued

Exemplary compounds with CCR(9) activity in calcium mobilization assay.

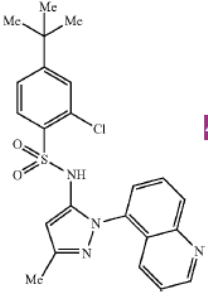
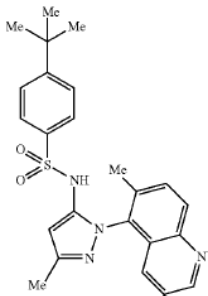
Chemical Structure	CCR(9) Ca ²⁺
 <p style="text-align: right; color: purple; font-weight: bold;">44</p>	+++

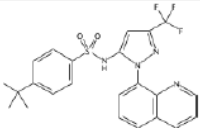
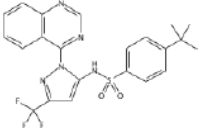
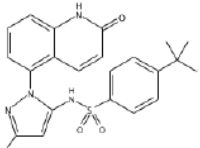
TABLE 1-continued

Exemplary compounds with CCR(9) activity in calcium mobilization assay.

Chemical Structure	CCR(9) Ca ²⁺
 <p style="text-align: right; color: purple; font-weight: bold;">47</p>	+++

如下所示，物质信息会以表格的形式附在专利 PDF 文件中。

Key Substances in Patent

Mark	Page #	CAS RN	Name	Structure
34	p.16	1452182-92-1	Benzenesulfonamide, 4-(1,1-dimethylethyl)-N-[1-(8-quinolinyl)-3-(trifluoromethyl)-1H-pyrazol-5-yl]-	
36	p.16	1452182-93-2	Benzenesulfonamide, 4-(1,1-dimethylethyl)-N-[1-(4-quinazoliny)-3-(trifluoromethyl)-1H-pyrazol-5-yl]-	
39	p.17	1452182-94-3	Benzenesulfonamide, N-[1-(1,2-dihydro-2-oxo-5-quinolinyl)-3-methyl-1H-pyrazol-5-yl]-4-(1,1-dimethylethyl)-	



SciFinder[®] 使用手册

第五卷 使用非 Java 结构编辑器绘制结构

美国化学文摘社

CAS, a division of American Chemical Society

5. 使用非 Java 结构编辑器绘制结构

非 Java 结构编辑器页面图.....	1
绘制物质结构方法.....	1
绘制反应式方法.....	2
绘制原子、键和环.....	2
绘制环	2
绘制键	3
改变键型	3
使用立体键.....	4
使用电荷	5
使用模板和常用官能团.....	6
使用模板	6
创建自定义模板.....	7
添加常用官能团.....	11
使用键盘快捷方式.....	12
删除所有结构或结构中的一部分.....	14
导入来自其他资源的结构.....	14
将 CAS 登记号、SMILES 字符串和 InChI 字符串转变为结构	14
导入结构文件.....	14
导出结构文件.....	16
使用亚结构检索功能.....	17
允许原子变化.....	17
允许化学键变化.....	22
允许环或链尺寸变化.....	22
锁定取代	23
锁定环	24
允许环上取代点位变化.....	25
移动结构、调整结构位置或调整结构尺寸.....	28
移动一个结构.....	28
旋转一个结构.....	28
翻转一个结构.....	28

调整一个结构尺寸.....	28
指定反应角色.....	29
绘制一个反应箭头.....	29
给一个物质指定反应角色.....	29
标记反应位点.....	31
操作步骤.....	31
标记原子.....	31
操作步骤.....	31
使用官能团指定一个物质.....	32
编辑绘制设置.....	35

非 Java 结构编辑器页面图

使用非 Java 结构编辑器中的工具，绘制查询的物质和反应。反应绘制工具仅出现在反应检索模式下。

绘制物质结构方法

绘制一个物质结构后，可对结构执行精确结构、亚结构、相似结构或 Markush 检索。

绘制原子、键和环

绘制原子、键和环

绘制环和键、改变键型和使用立体键、改变原子符号、使用电荷。

使用模板和常用官能团

使用模板和常用官能团

使用模板、常用官能团和键盘快捷键。创建自定义模板。

删除所有结构或结构的一部分

删除所有结构或结构的一部分

擦除个别原子和键、或选择结构中要删除的部分

导入结构文件

导入来自其他资源的结构

将 CAS 登记号、SMILES 字符串和 InChI 字符串转换为结构。导入结构文件。

应用亚结构检索的功能

应用于亚结构检索的功能

以下功能仅适用于亚结构检索：原子和键上允许发生变化、环或链的尺寸允许变化、锁定取代或环的形成、取代基在环上的位置可变。

移动、重新定位结构或调整结构大小

移动，重新定位结构或调整结构大小

移动、旋转、翻转和按比例调整结构尺寸。

绘制反应式方法

指定反应角色

指定反应角色

绘制物质并通过绘制反应箭头指定其为反应物或产物。另外，也可以单独指定每个物质的反应角色（产物、反应物、试剂、反应物/试剂和任意角色）。

标记反应位点

标记反应位点

标记在反应中发生改变的键（断裂、形成或改变键的排序）。

标记原子

标记原子

指定出现在反应物和产物中的相应原子对。

通过官能团指定一个物质


通过官能团指定一个物质

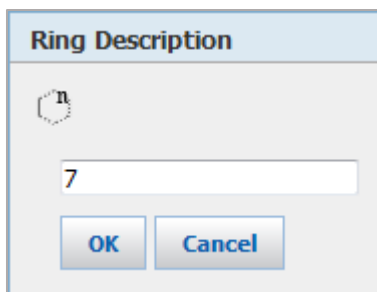
可以用官能团（而不是画一个确定的结构）代表反应物、试剂或产物。

绘制原子、键和环

绘制环


1. 点击常用环面板  上的一个环。

如果点击 **3-15 元环工具** ，则需要指定环大小（输入 3-15 之间的任一个数字指定环的大小），然后点击 **OK**。




2. 可以：
 - 点击绘制区输入环。
 - 点击一个原子，使环通过该原子形成螺环。
 - 点击一根键，使环通过该键形成并环。

绘制键


1. 点击铅笔工具 。
2. 可以
 - 拖拽鼠标绘制一个化学键
 - 点击一个原子，从原子处产生一个化学键。


默认设置下，键长为标准长度，键角为标准角度。可以通过 [fixed drawing length](#) 或 [fixed drawing angles](#) 修改结构绘制设置。

另外：

1. 点击链工具 。
2. 按住鼠标并拖动，可以快速绘制单键长链。在拖动鼠标的过程中，链上碳原子的数量会被显示。松开鼠标结束绘制链。



改变键型


1. 点击铅笔工具 。
2. 可以：

- 点击**键型显示面板**上的一根键。然后点击想改变的结构键。
- 指向一个结构键高亮显示。然后输入 **1**, **2** 或 **3** 将键变为单键、双键或三键。
- 如果**键型显示面板**上的**单键工具**是激活的, 则可以点击一个结构键循环改变键型(单键、双键或三键)。




注: 要快速将键设置为**单键**并且将原子设置为**碳**, 则点击**碳/单键**图标。


使用立体键

1. 点击**铅笔工具**。
2. 点击**立体键显示面板**上的一根键。
3. 点击想要改变的键。重复点击键即可改变键的方向。



注: 要快速将键设置为**单键**并且将原子设置为**碳**, 则点击**碳/单键**图标。

改变原子符号

1. 点击**铅笔工具**。
2. 可以:
 - 点击**常用原子面板**上的一个原子。
 - 在位于面板左侧的**当前原子框**中直接输入原子符号。
 - 点击**原子菜单工具**, 选择元素周期表中的一个原子。
3. 点击想要改变的原子。


注: 要快速将键设置为**单键**并且将原子设置为**碳**, 则点击**碳/单键**图标。

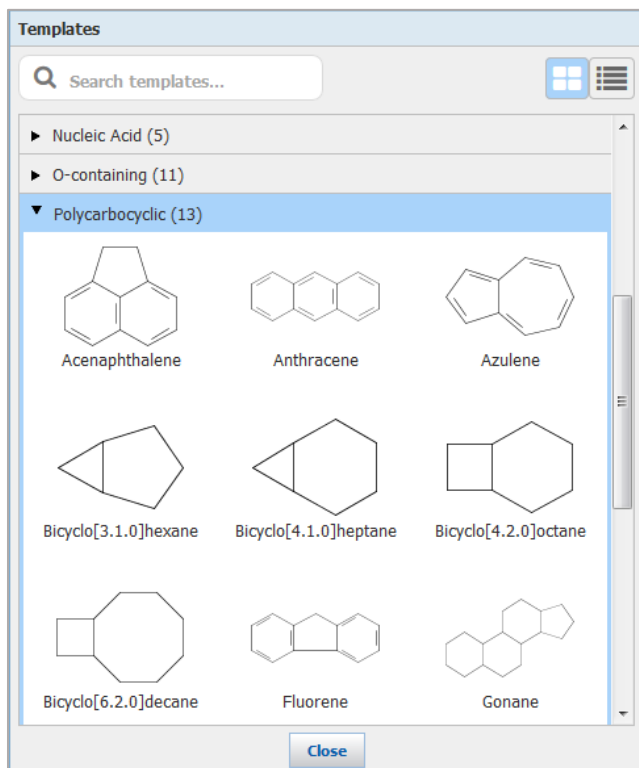
使用电荷

1. 点击正电荷工具  或负电荷工具 .
2. 点击结构中的带电原子。如果想增加电荷，可以不断点击原子。

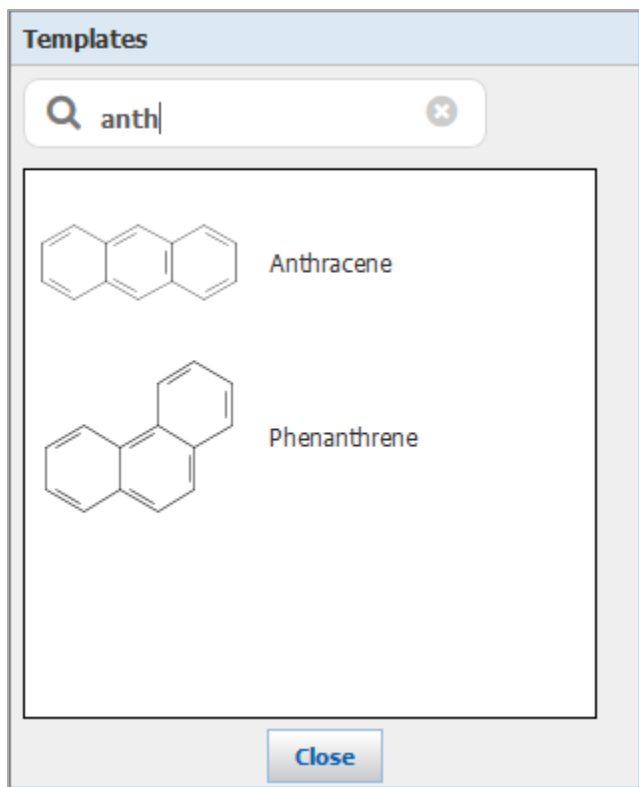
使用模板和常用官能团

使用模板

1. 点击模板工具 。
2. 在下面的模板对话框中，点击一个子集（如：多碳环化合物）显示该结构类型的模板。




另外，也可以在检索模板框中输入一个模板的名称。在输入名称时，相应的模板就会出现在对话框中。

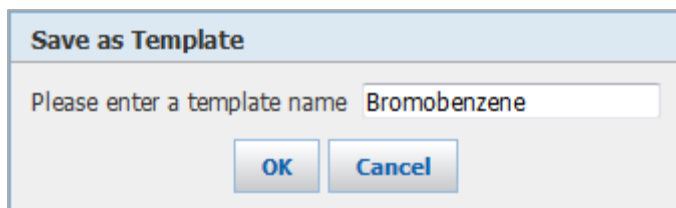


3. 点击选择其中的一个模板。
4. 点击绘制区输入模板中的结构。

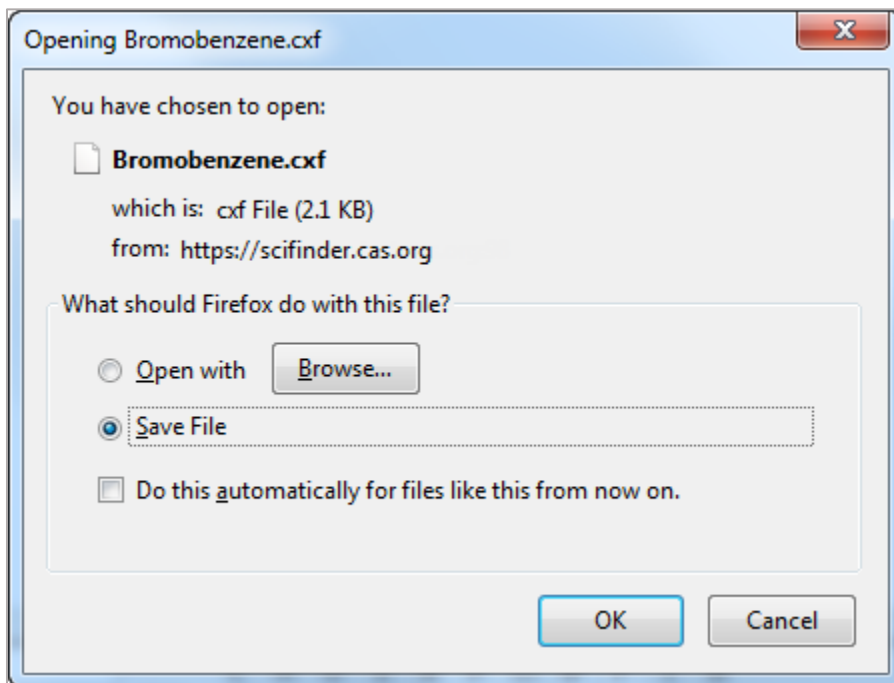
被选中的模板会出现在绘制区底部的**当前模板**框中。点击即可获得模板中的结构。

创建自定义模板

1. 绘制模板结构。
2. 点击**另存为模板**图标.
3. 输入一个模板名称，然后点击 **OK**。

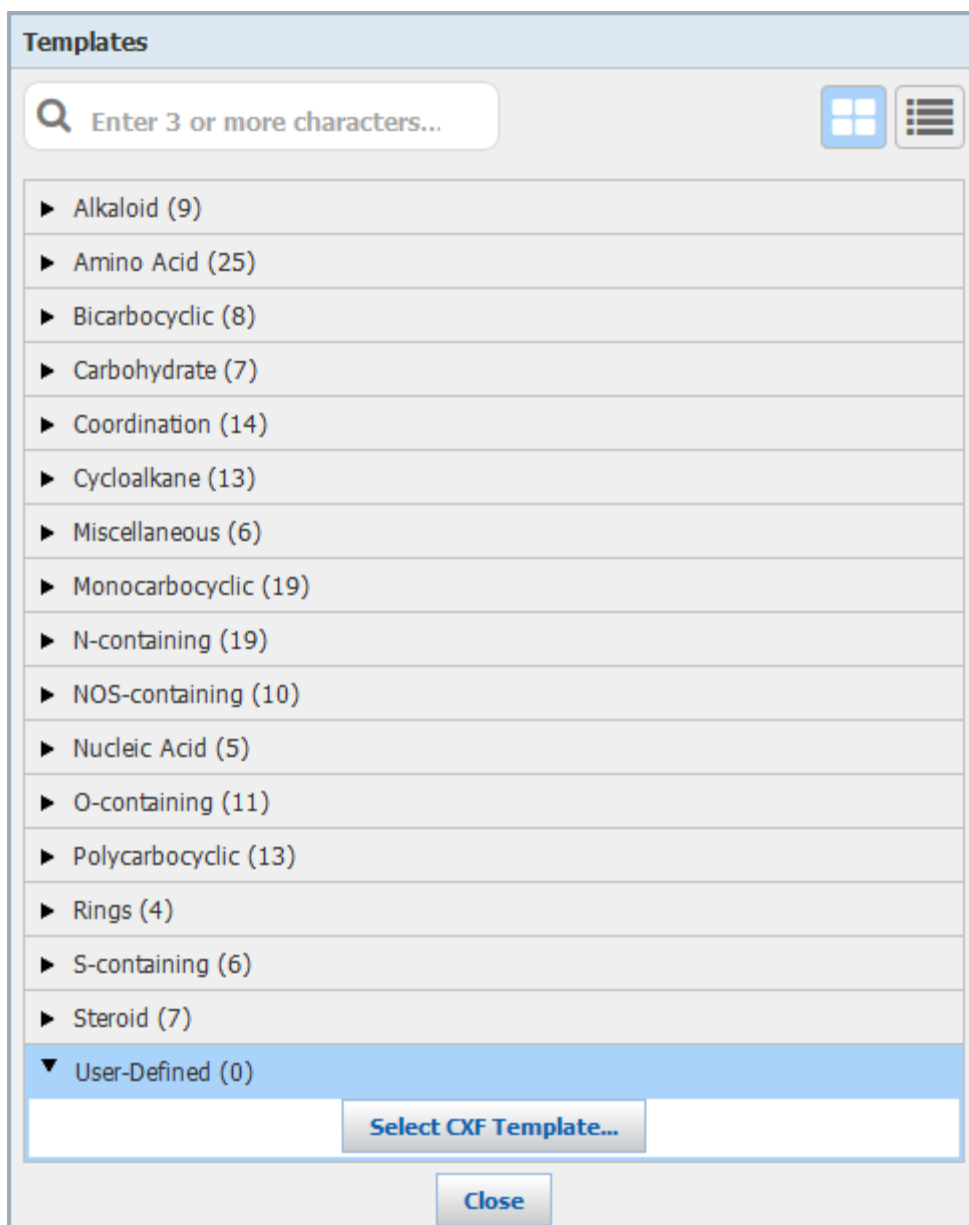


4. 点击 **OK** 保存文件。CXF 文件被保存至 **下载** 目录中。

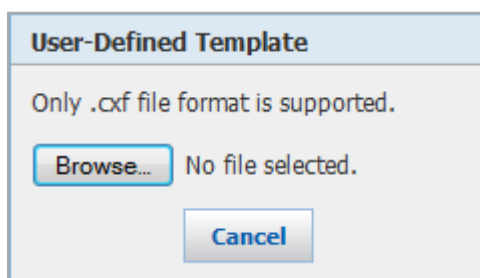


随时都可以使用 **导入工具** 通过 [importing the structure from the CXF file](#) 获取保存的结构。

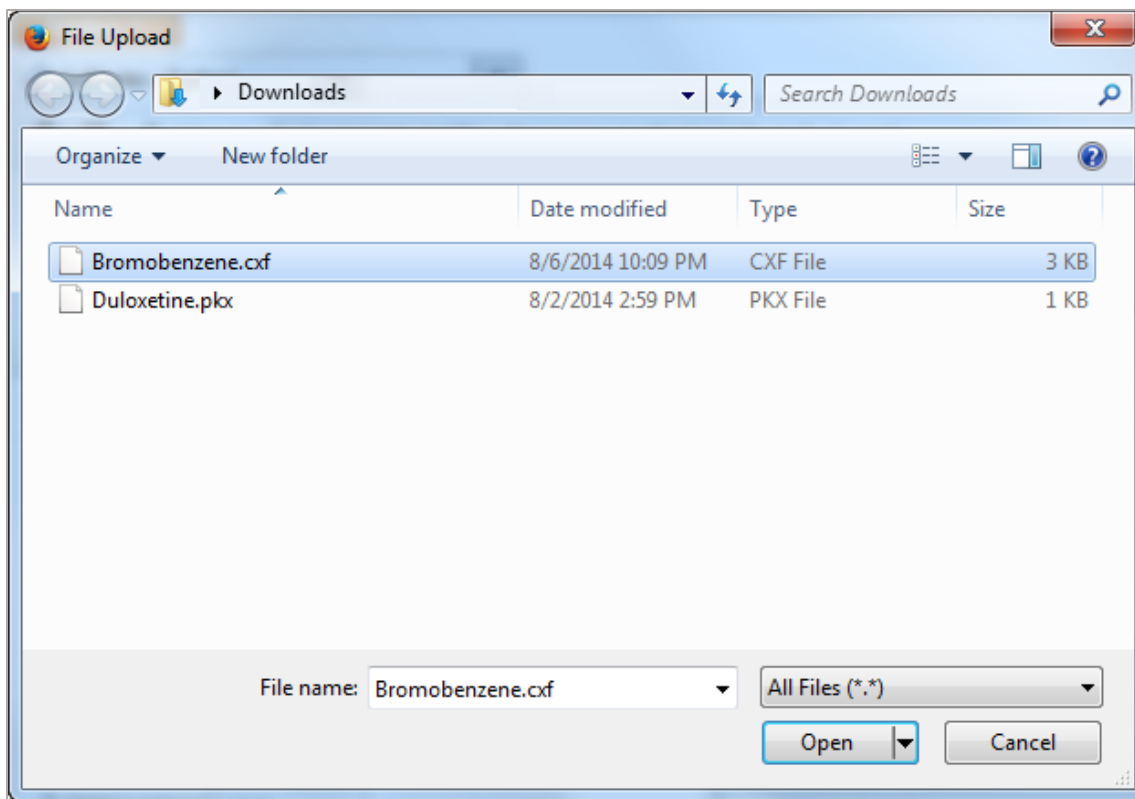
5. 点击 **模板工具** ，将 CXF 文件添加到用户自定义（User Defined）模板中，扩充用户自定义的内容。点击 **Select CXF Template**。



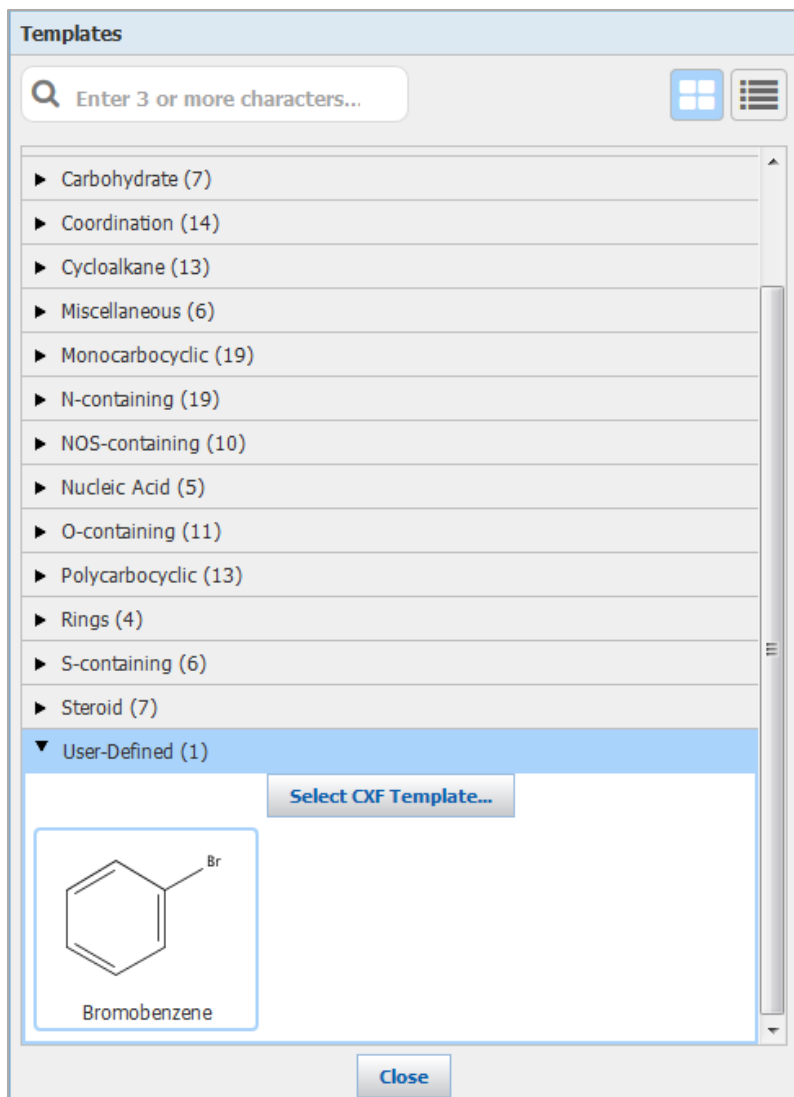
6. 点击 **Browse**。



7. 选择 CXF 文件，然后点击 **Open**。




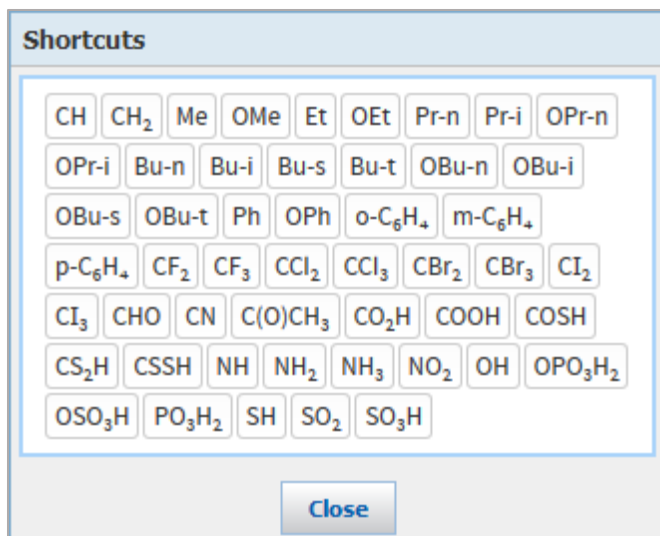
8. CXF 文件出现在模板 (Templates) 对话框的 User-Defined 中，它们可以像其他模板一样被选中和使用。



但是，当关闭当前 SciFinder 操作时，在模板对话框的 **User-Defined** 中的模板会被自动删除。用户自定义的模板仅在 SciFinder 当前操作时可用。

添加常用官能团

1. 点击常用官能团菜单工具 。
2. 点击想使用的常用官能团。



将鼠标放置在常用官能团旁边，就可以看到化学结构。官能团的结构将在弹出的窗口中显示。

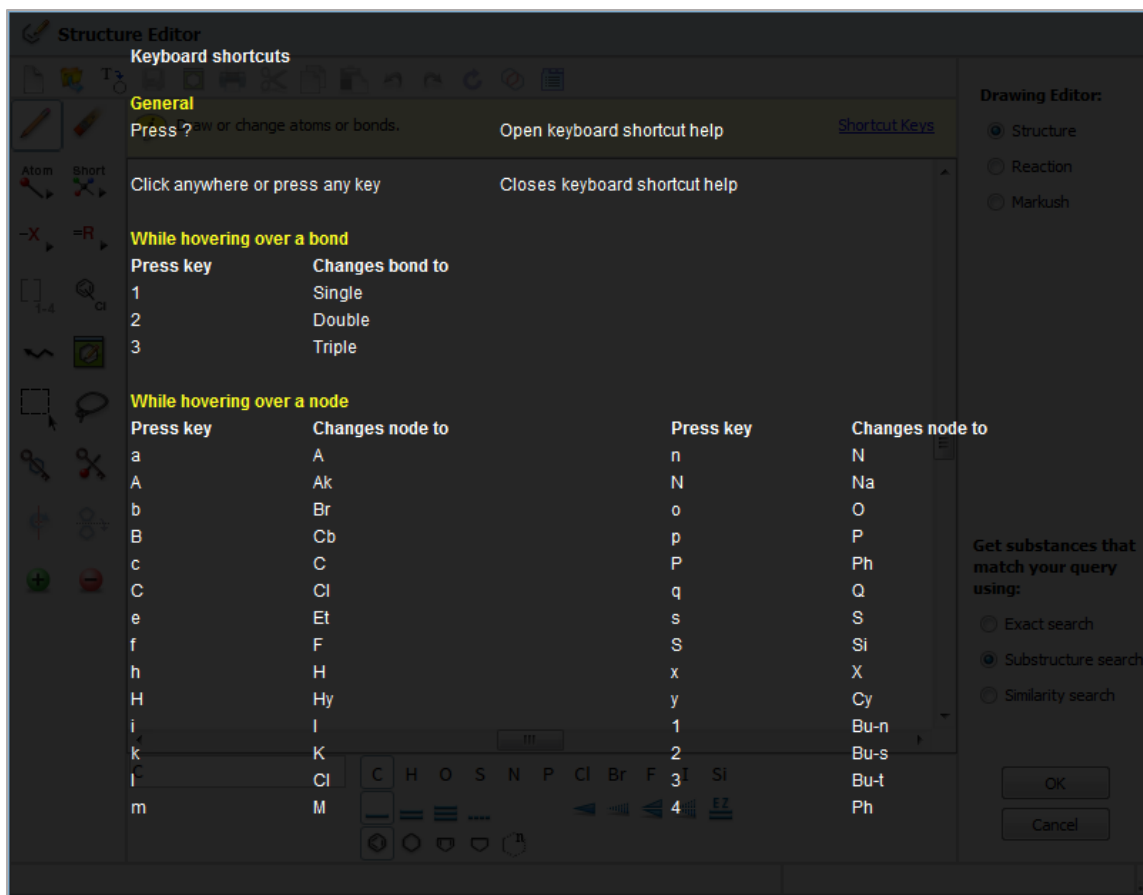
3. 点击想要连接常用官能团的原子。

使用键盘快捷方式

1. 点击铅笔工具 。
2. (可选) 在黄色信息条中，点击 **Shortcut Keys** 链接。或点击? 键。






键盘快捷方式在非 Java 编辑器中显示为新页面。



3. 点击任意位置或输入任意键，即可关闭显示在编辑器上的快捷界面。无论快捷键页面是否显示，你都能使用键盘快捷键。
4. 可以：
 - 指向一个原子，然后利用键盘快捷键输入想使用的元素。例：指向一个原子，然后输入 **b**，将其变为 **Br**。
 - 指向一根键，然后利用键盘快捷键输入想使用的键型。例：指向一根键，输入 **2**，将其变为**双键**。

删除所有结构或结构中的一部分

1. 点击橡皮工具 。
2. 点击想要删除的一个原子或一根键。或拖动鼠标，在矩形区域里删除选中的原子和键。

另外，也可以使用套索工具  或选框工具  选择原子和键，然后按下 **Delete** 键删除被选中的目标。拖动鼠标，使用套索工具或选框工具选中要删除的目标。点击一个原子或键进行选择，使用 **CTRL**-点击可以多选，或双击选择整个结构。

导入来自其他资源的结构

将 CAS 登记号、SMILES 字符串和 InChI 字符串转变为结构

1. 点击添加到编辑器图标 。
2. 在文本框中输入 CAS 登记号、SMILES 字符串或 InChI 字符串。

Add to Editor

Enter CAS Registry Number, SMILES, or InChI:

Examples:
 50-00-0
 CCCO
 InChI=1S/C3H8O/c1-2-3-4/h4H,2-3H2,1H3

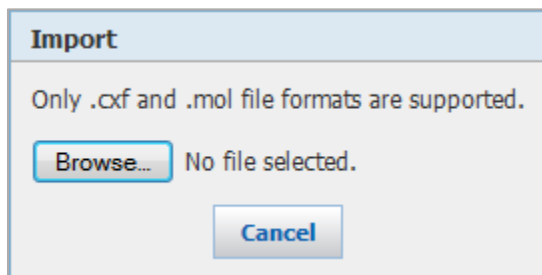
3. 点击 **OK**。结构即出现在输入区域。

导入结构文件

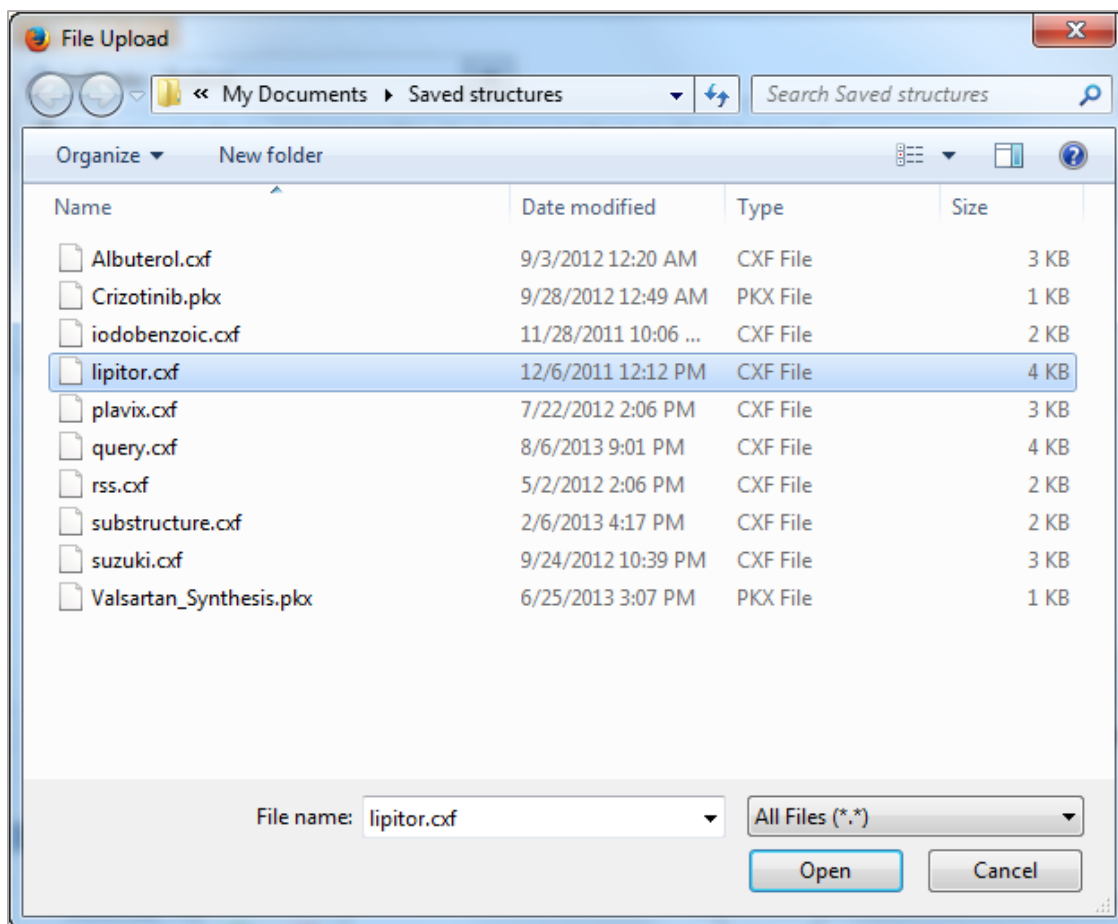
可以导入已经被保存为 **CXF** 或 **MOL** 文件格式的结构。

1. 点击 **Import** 图标 。

2. 点击 **Browse**。




3. 选择文件。

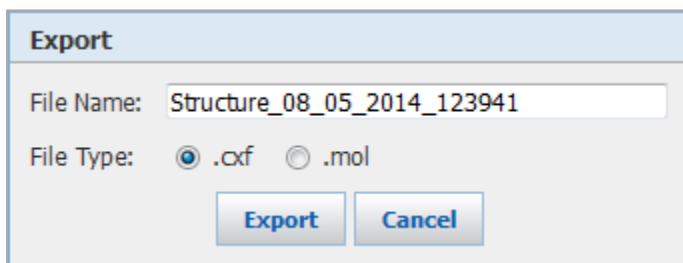


4. 点击 **Open**。

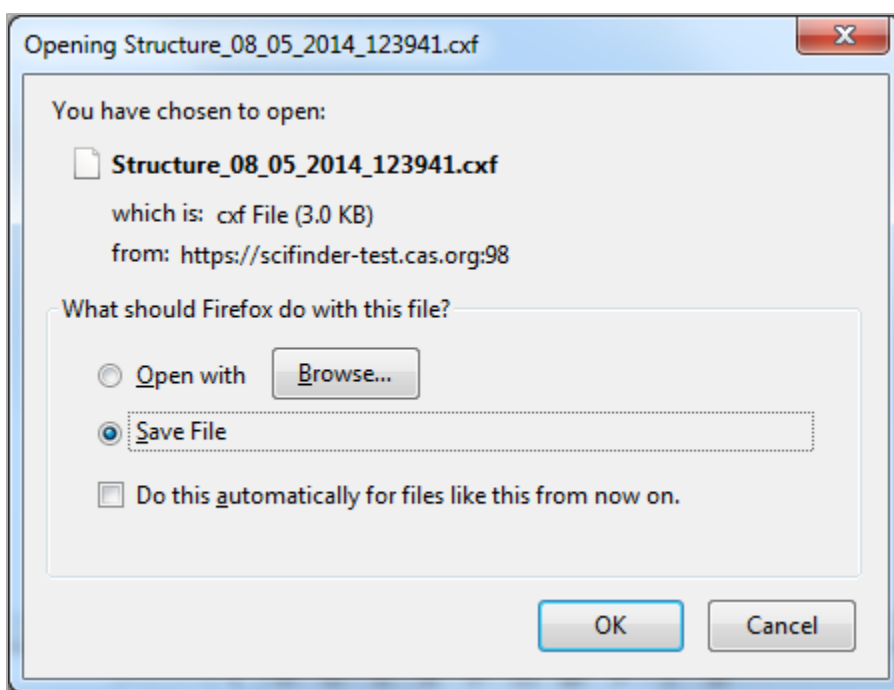
导出结构文件

可以将绘制区的内容导出为 CXF 或 MOL 文件，以备以后再导入。使用 CXF 格式保存完整的结构或反应。MOL 格式不支持保存反应。

1. 点击 **Export** 图标 。
2. 输入一个 **File Name(文件名)**或使用默认的名称。选择 **File Type(文件类型)**。点击 **Export**。



3. 点击 **OK**，将文件保存到下载目录中。



使用亚结构检索功能

以下功能仅用于亚结构和反应检索：

允许原子变化

指定一个通用的原子类型（可变基团）

在一个原子位置指定一系列替代的基团（R 基团）

允许化学键变化

使用一个不确定的键型

允许环或链的大小变化

绘制一个重复基团

改变重复数

移除一个重复基团

锁定取代基

使用原子锁定功能

去除原子锁定功能

锁定环

使用环锁定功能

去除环锁定功能

允许环上取代位点变化

绘制可变位置取代

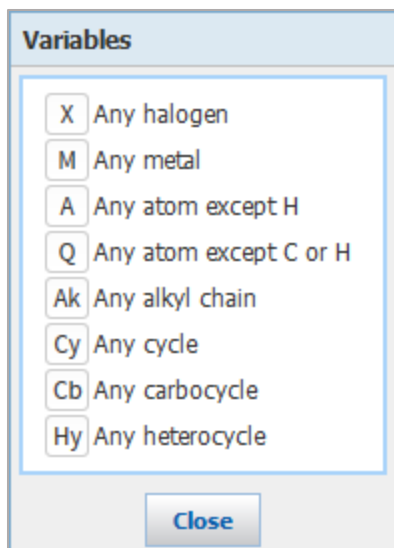
删除可变位置取代

允许原子变化

指定一个通用的原子类型（可变基团）：

使用一个可变基团指定一个通用的原子类型，（如：**X** 代表“任意卤素”，或 **A** 代表“除了氢以外的任意原子”）。

1. 点击 **Variables** 工具 .
2. 点击可变的原子类型。



注:

- **Ak** 代表任意碳链，包括但不限于烷基。**Ak** 基团不可以接到另一个 **Ak** 基团上（包括 **R** 基团内的 **AK** 或重复基团内的 **Ak**）。
- **Cy** 代表任意大小或任意组成的稠环或非稠环。
- **Cb** 是只包含碳原子的 **Cy** 子集。
- **Hy** 是包含至少一个非碳原子的 **Cy** 子集。

3. 点击结构上想要放置可变基团的原子。

在一个原子上指定一系列可变的基团（**R** 基团）

在特定位点上用 **R** 基团指定具体的取代基。**R** 基团可以包含原子、常用官能团或可变基团。

1. 点击 **R 基团工具** ，就会出现 **R 基团定义** 对话框。

R-group Definitions

R1 R2 R3 R4 R5 R6 R7 R8 R9 R10

R1 =

Atoms

H																			He
Li	Be										B	C	N	O	F				Ne
Na	Mg										Al	Si	P	S	Cl				Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br			Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I			Xe
Cs	Ba	·	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At			Rn
Fr	Ra	·																	
		·	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb			Lu
		·	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No			Lr

Variables

X Any halogen
M Any metal
A Any atom except H
Q Any atom except C or H
Ak Any alkyl chain
Cy Any cycle
Cb Any carbocycle
Hy Any heterocycle

Shortcuts

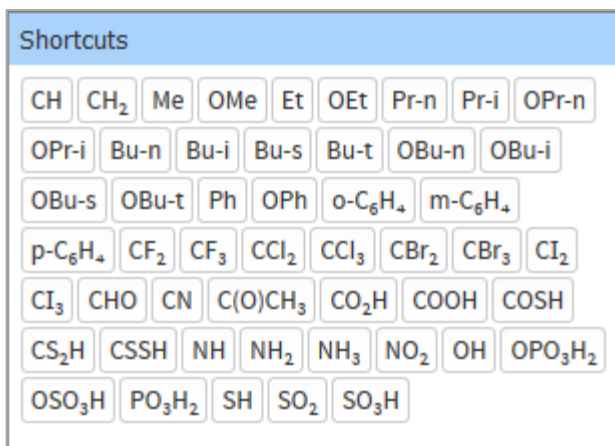
CH CH₂ Me OMe Et OEt Pr-n Pr-i OPr-n
OPr-i Bu-n Bu-i Bu-s Bu-t OBU-n OBU-i
OBU-s OBU-t Ph OPh o-C₆H₄ m-C₆H₄
p-C₆H₄ CF₂ CF₃ CCl₂ CCl₃ CBr₂ CBr₃ Cl₂
Cl₃ CHO CN C(O)CH₃ CO₂H COOH COSH
CS₂H CSSH NH NH₂ NH₃ NO₂ OH OPO₃H₂
OSO₃H PO₃H₂ SH SO₂ SO₃H

[Close](#)

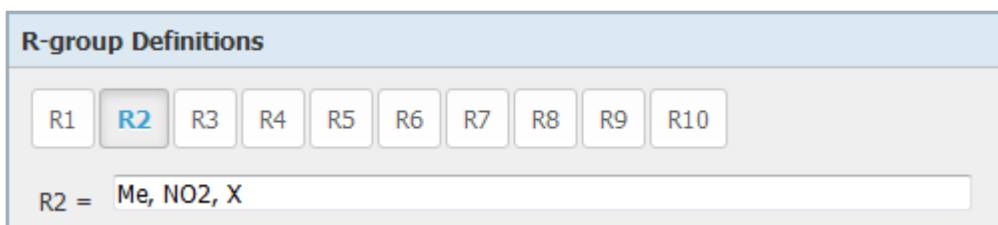
选中的项目会以蓝色高亮显示。

2. 使用以下方法定义一个 R 基团：

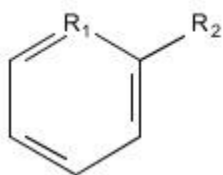
a. 选择一个 **R 基团**（如 R1）。




- e. 在 **R 基团** 输入框中输入元素符号，符号之间用逗号隔开。



- 在 **R 基团定义 (R-group Definitions)** 对话框中点击 **R 基团** (如 R2)，然后点击查询结构中的相应原子，就可以将 R 基团绘制到结构中。
- 重复第 3 步，直到所有的 R 基团画完为止，然后点击 **Close**。




注:

- 通用基团 Ak, Cb, Cy 和 Hy 不可以出现在环上或环上的 R 基团中。
- 一个结构中最多可以定义 10 个 R 基团，并且每个 R 基团最多包含 20 个原子、常用官能团或可变基团。
- 所使用的 R 基团 (如 R2) 会成为系统默认设置一直出现在当前原子输入框中 (可以点击 **碳/单键** 图标  改变该默认设置)。

允许化学键变化

可以在结构中使用不确定的键型。在检索中，不确定的键型可以匹配到任意键。

使用一个不确定的键型

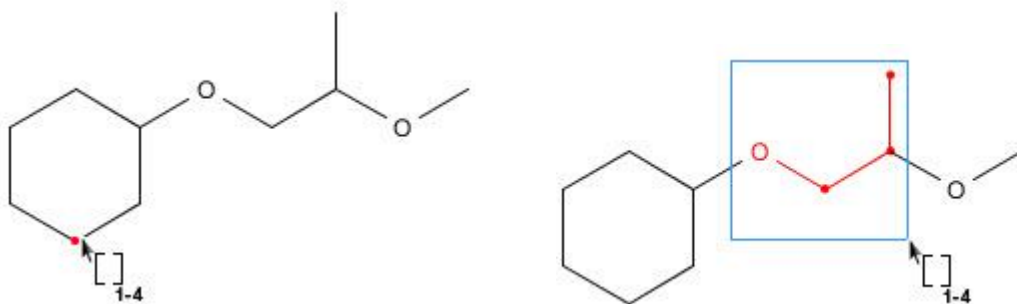
1. 点击化学键面板上的不确定键工具 。
2. 点击结构中想要发生键型变化的键。

允许环或链尺寸变化

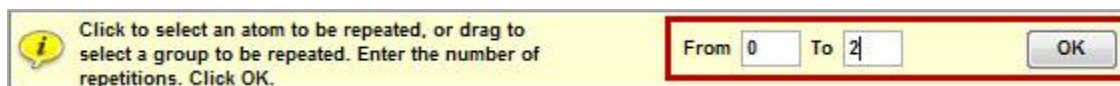
可以指定亚结构中某个重复基团中的原子的重复次数。重复基团可以是原子、常用官能团或可变基团。

绘制一个重复基团

1. 点击重复基团工具 。
2. 点击选择需要重复的某个原子，或按住并拖拽鼠标选择一组需要重复的原子和键。



3. 信息条变为包括 **From** 和 **To** 的文本输入框。在文本框中输入数值指定重复次数。




4. 点击 **OK**。

注:

- 重复数字可以是一个单一值或一个范围（0-20）。
- 在重复基团中，原子上连接的任何取代基也适用于每个获取到的重复单元。
- 重复原子上必须有两个确定的键。
- 相邻的两个重复基团可以通过一根键连接
- 重复基团中不能包含立体键。
- 不能重复键与 Ak 直接相连的基团。

改变重复的次数:

1. 点击**重复基团工具**.
2. 将鼠标放在结构中需要重复的位置处，就会出现括号和数值。当重复基团高亮显示时，就点击选中。
3. **From** 和 **To** 的文本框中输入新的数值。
4. 点击 **OK**。


去除一个重复基团

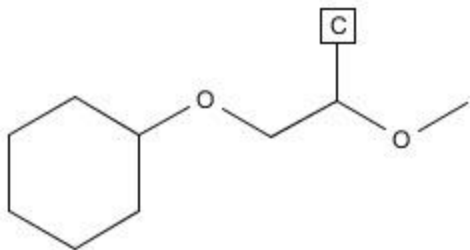
1. 点击**橡皮工具**.
2. 点击重复基团的括号或重复值。

锁定取代


原子锁定工具被用于锁定原子以阻止在原子上接其他取代基。可以锁定一个结构中任何数量的原子。尾端的常用官能团（如：甲基）在定义时就被锁定。

使用原子锁定功能

1. 点击原子锁定工具.
2. 点击需要锁定的原子。原子上出现一个方框则表示其已经被锁定，不可接其他取代基。




去除原子锁定功能

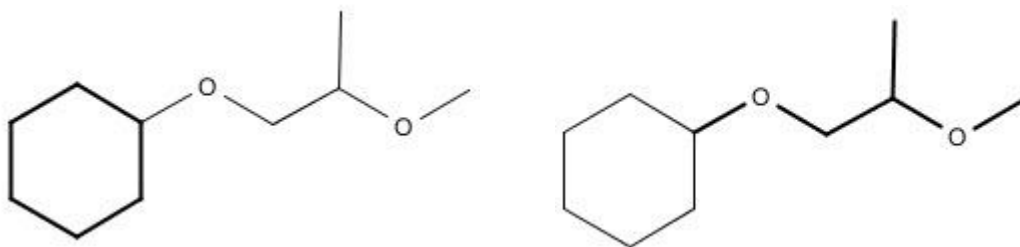
1. 点击原子锁定工具 。
2. 点击锁定的原子。原子上的方框即被去除，原子上可以接任何取代基。

锁定环

锁环工具被用于控制在环系和链中形成新的环。使用此功能可以在结果集中排除以下结构：绘制的链片段被包含在环中；或在绘制的环系中稠和其他环。

使用环锁定功能

1. 点击环锁定工具 。
2. 点击需要锁定的环系或链，整个环系或链即加粗显示，表明其已被锁定，不可以稠和其他环或形成新环。



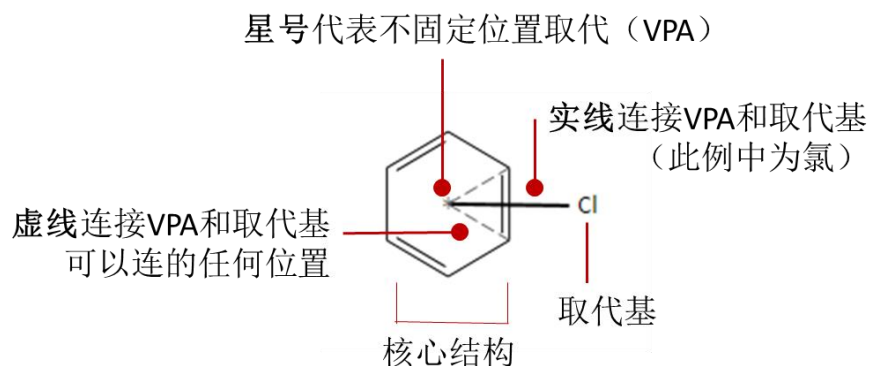
去除环锁定功能

1. 点击环锁定工具 。

2. 点击锁定的环系或链，环系或链上的加粗显示即被去除，表明其可以稠和其他环或形成新环。

允许环上取代点位变化


可变取代位点工具（**Variable Attachment Point, VPA**）被用于指定环系上某个取代基的多个可能连接位置。



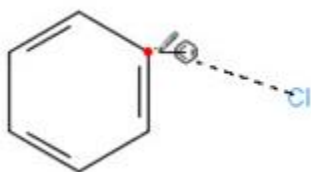
内容	特征
取代原子	<ul style="list-style-type: none"> 可以是一个单一原子或更大片段上的一个原子 可以是（或包含）一种元素、可变基团、常用官能团、无其他取代基的 R 基团，或重复基团 可以被锁定 只能对一个环系进行可变位置取代 不可以是重复基团的一部分 不能作为 VPA 同时连接两个不同环系
可变取代原子	<ul style="list-style-type: none"> 可以是（或包含）一种非金属元素或 X, Q 或 A 可以被锁定 不可以是一个常用官能团，一种金属原子或 M, Ak, Cb, Cy 或 Hy 被选中重复基团中的原子不能作为不固定取代的一部分 不能作为 VPA 同时连接两个不同环系
可变取代键	<ul style="list-style-type: none"> 可以是单键、双键、三键或不确定的键型 不可以是立体键

核心结构	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 一个或多个取代基可以不固定连接到环系中的相同原子上 ▪ 每个环系中，至多可以有 20 个不固定位置取代基
------	---

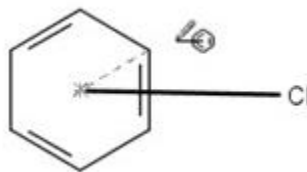
绘制可变位置取代 (VPA) :

1. 点击可变取代位点工具 。
2. 将鼠标放置在取代基上，按住并拖动至环上的某个位置，松开鼠标后，就会形成一条取代线。

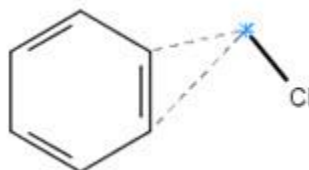
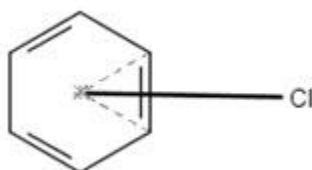
按住鼠标




松开鼠标

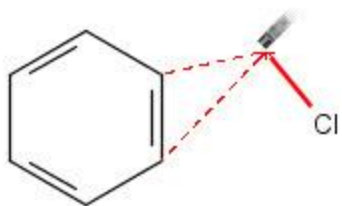


3. (可选) 可以使用选中工具  移动可变位点至一个新位置，便于查看。

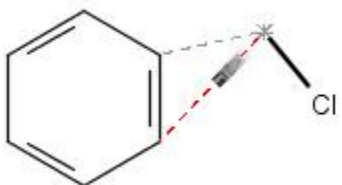


去除可变位置取代

1. 点击橡皮工具 。
2. 点击取代基 (取代原子)、键线、虚线、或星号去除整个可变取代。





3. 点击单个虚线去除某个取代位点。



移动结构、调整结构位置或调整结构尺寸


移动一个结构

在绘制区将一个被选中的结构拖拽至一个新区域。

1. 点击**套索工具**或**选框工具**。
2. 双击结构即选中它。
3. 将被选中的结构拖拽至一个新的区域。


旋转一个结构

使用翻转工具，可顺时针或逆时针方向旋转一个结构。

1. 点击**旋转工具**。
2. 指向结构，然后按住并拖拽鼠标，即可顺时针或逆时针方向旋转此结构。

翻转一个结构

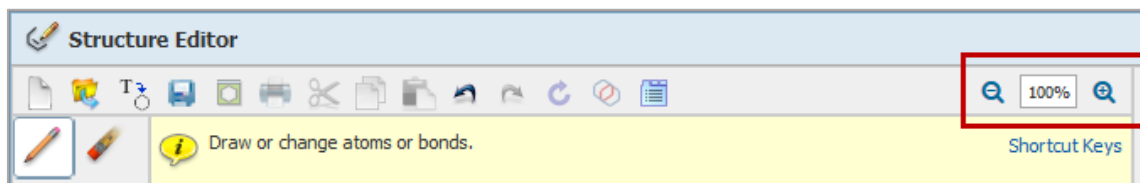
使用**翻转结构工具**可对结构进行水平方向或垂直方向翻转。

1. 点击**翻转结构工具**。
2. 指向一个原子作为轴，然后按住并拖拽鼠标，水平方向或垂直方向翻转此原子周围的结构。

调整一个结构尺寸


可以在绘制区通过改变显示比例调整结构的尺寸。

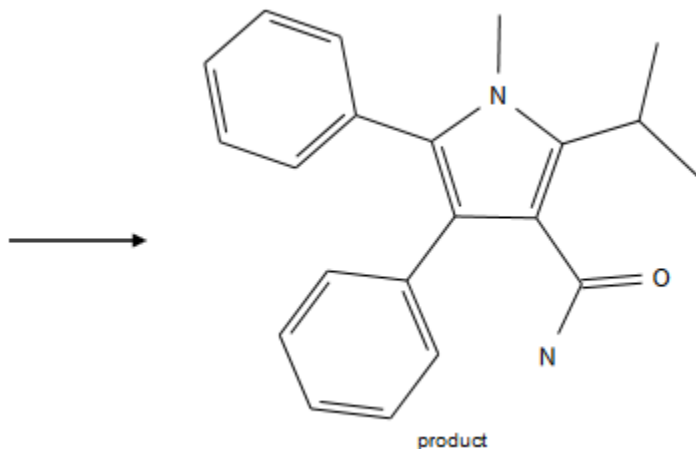
1. 点击加或减图标增加或减小**比例值**。



指定反应角色


绘制一个反应箭头

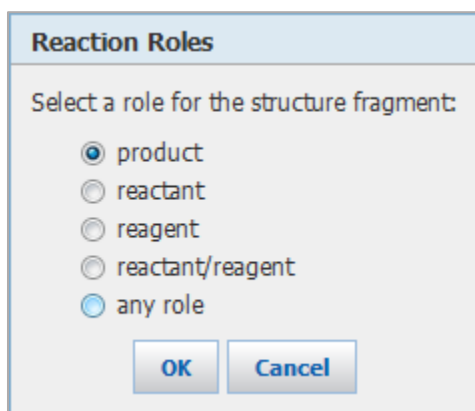
1. 点击反应箭头工具 。
2. 在绘制区点击或拖拽鼠标绘制反应箭头。如：



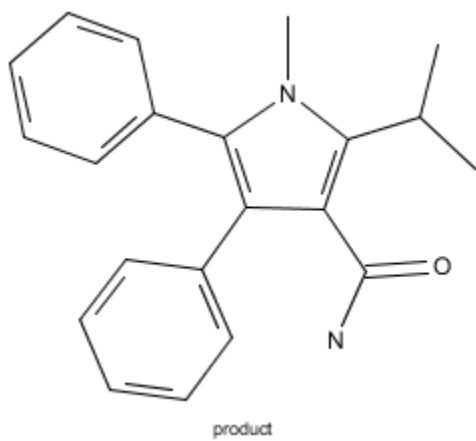
箭头左边的结构自动被定义为反应物。箭头右边的结构自动被定义为产物。

给一个物质指定反应角色

1. 点击反应角色工具 。
2. 点击绘制区的物质。
3. 选择对话框中的反应角色，然后点击 **OK**。




反应角色即出现在物质下方。如：

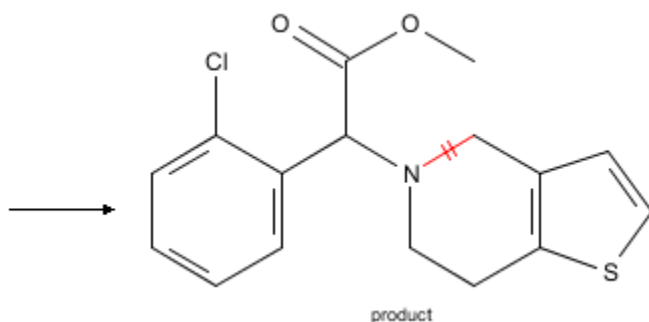


标记反应位点

标记在反应中发生变化（断裂、生成或改变键序）的键聚焦反应检索。

操作步骤

1. 点击反应位点标记工具 。
2. 点击在反应中发生变化的键，键即被红双杠号标记。如：（当鼠标移开时，红色高亮标记就会消失）：




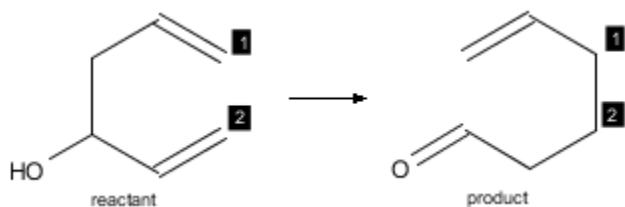
再次点击标记的键去除反应位点标记。

标记原子

指定出现在反应物和产物中的相应原子对聚焦反应检索。

操作步骤

1. 点击原子标记工具 。
2. 点击反应物中的一个原子，然后点击产物中的相应原子。标记数字即出现在原子对上。如：

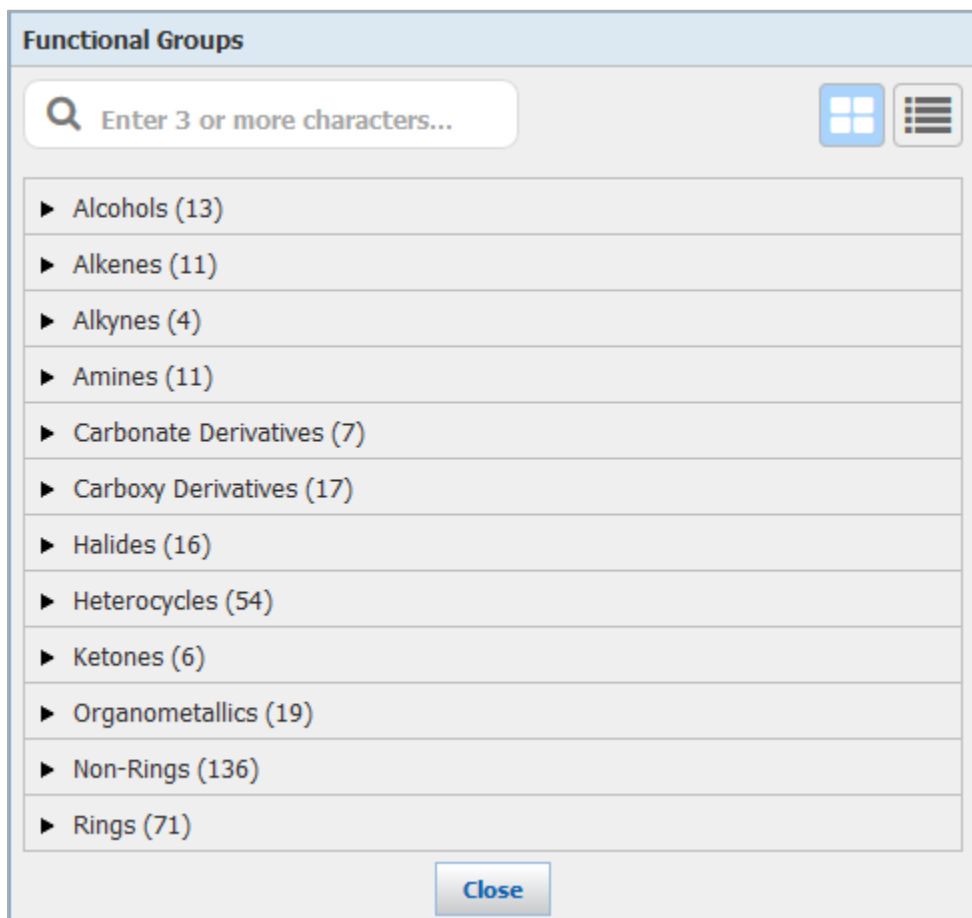


提示：标记原子对可以明显地缩小结果集。从标记需要的原子对开始聚焦检索。

使用官能团指定一个物质

使用官能团词语（而不是画一个确定的结构）指定反应物、试剂或产物。

1. 点击官能团工具 ，出现官能团对话框。



他

2. 点击官能团分类展开其中的信息

可以选择分类词语（如：炔烃类）或选择一个确定的词语（如：pi-炔烃）。

另外，也可以在文本框中输入官能团词语。在输入至少三个字符时，SciFinder 就会显示匹配的词语。

Functional Groups

Q ket

Acyclic Ketone

Cyclic Ketone

Ketal

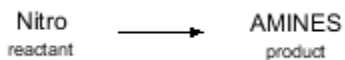
Ketene

Ketenimine

KETONES is a class that includes: Acyclic Ketone,

Close

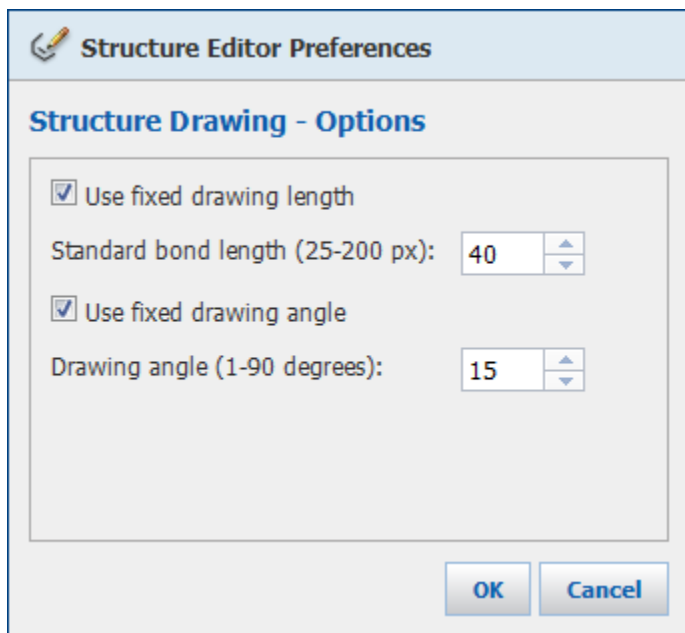
3. 点击官能团词语。
4. 在绘制区点击放置官能团。
5. 绘制一个反应箭头或使用反应角色定位工具为官能团词语指定反应角色。例：



编辑绘制设置

1. 在结构编辑器中，点击**设置（Preferences）**  图标。

2. 改变设置：



选项	描述
Use fixed drawing length	勾选该选项时，绘制的键将自动回到设定的长度。该选项设置也适用于环的尺寸和模板中的结构尺寸。 标准键长 值为 25-100px。默认值为 40px。
Use fixed drawing angles	勾选该选项时，绘制的键将自动回到绘制角度中定义的标准角度。 绘制角度值为 1-90 度。默认值为 15 度。

3. 点击 **OK** 保存设置。



SciFinder[®] 使用手册

第六卷 使用 Java 结构编辑器绘制结构

美国化学文摘社

CAS, a division of American Chemical Society

6. 使用 Java 结构编辑器绘制结构

6. 使用 Java 结构编辑器绘制结构	1
绘制物质结构方法.....	1
绘制反应式方法.....	2
绘制原子、键和环.....	3
绘制环	3
绘制键	4
改变键型	4
使用立体键.....	5
改变原子符号.....	5
使用电荷	5
使用模板和常用官能团.....	6
使用模板	6
创建自定义模板.....	7
添加常用官能团.....	8
使用键盘快捷方式.....	9
删除所有结构或结构中的一部分.....	11
删除单个原子和键.....	11
删除多个原子或键.....	11
导入来自其他资源的结构.....	11
将 CAS 登记号、SMILES 字符串和 InChI 字符串转变为结构	11
从其他结构编辑器中拷贝和粘贴结构.....	12
导入结构文件.....	12
使用亚结构检索功能.....	13
允许原子变化.....	13
允许化学键变化.....	17
允许环或链尺寸变化.....	18
锁定取代	19
锁定环	20

允许环上取代位点变化.....	21
移动结构、调整结构位置或调整结构尺寸.....	24
指定反应角色.....	26
绘制一个反应箭头.....	26
标记反应位点.....	28
操作步骤	28
标记原子	29
操作步骤	29
使用官能团指定一个物质.....	30
编辑绘制设置.....	33
剪贴板	33
颜色	33
结构绘制	35
工具条	37

绘制物质结构方法

绘制一个物质结构后，可对结构执行精确结构、亚结构、相似结构或 Markush 检索。

绘制原子、键和环

绘制原子、键和环

绘制环和键、改变键型和使用立体键、改变原子符号、使用电荷。

使用模板和快捷键

使用模板和快捷键

使用模板、常用官能团和键盘快捷键。创建自定义模板。

删除所有结构或结构的一部分

删除所有结构或结构的一部分

删除个别原子和键、或选择结构中要删除的部分。

导入结构文件

导入来自其他资源的结构

将 CAS 登记号、SMILES 字符串和 InChI 字符串转换为结构。导入结构文件。

应用亚结构检索的功能

应用于亚结构检索的功能

以下功能仅适用于亚结构检索：原子和键上允许发生变化、环或链的尺寸允许变化、锁定取代或环的形成、取代基在环上的位置可变。

移动、重新定位结构或调整结构大小

移动，重新定位结构或调整结构大小

移动、旋转、翻转和按比例调整结构尺寸。

绘制反应式方法

指定反应角色

指定反应角色

绘制物质并通过绘制反应箭头指定其为反应物或产物。另外，也可以单独指定每个物质的反应角色（产物、反应物、试剂、反应物/试剂和任意角色）。

标记反应位点

标记反应位点

标记在反应中发生改变的键（断裂、形成或改变键的排序）。

标记原子

标记原子

指定出现在反应物和产物中的相应原子对。

通过官能团指定一个物质


通过官能团指定一个物质

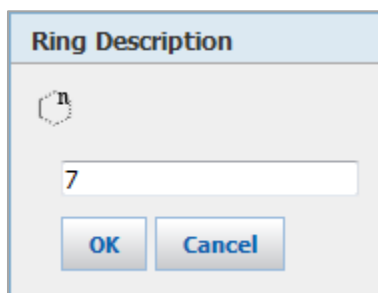
可以用官能团（而不是画一个确定的结构）代表反应物、试剂或产物。

绘制原子、键和环

绘制环

1. 点击常用环面板  上的一个环。

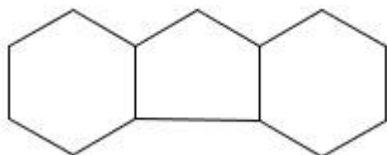
如果点击 **3-15 元环工具** ，则需要指定环大小（输入 3-15 之间的任一个数字指定环的大小），然后点击 **OK**。



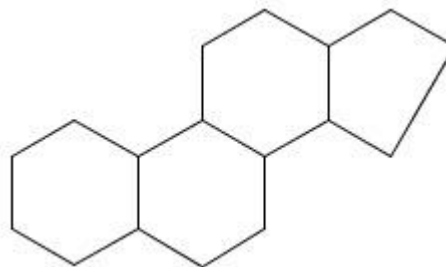
2. 可以：
 - 点击绘制区输入环。
 - 点击一个原子，使环通过该原子形成螺环。
 - 点击一根键，使环通过该键形成并环。

注：在 Java 结构编辑器中，也可以使用 **3-15 Member Ring Tool**  从键盘绘制耦合环系。当提示输入环描述时，就可以输入系列环尺寸（允许输入 4, 5 和 6 元环）和环方向（**u**=上，**d**=下）。例：


输入 **656** 绘制下面的结构：



输入 **66u6d5** 绘制下面的结构：




绘制键



1. 点击铅笔工具 。
2. 可以：
 - 拖拽鼠标绘制一个化学键
 - 点击一个原子，从原子处产生一个化学键


默认设置下，键长为标准长度，键角为标准角度。可以通过 [fixed drawing length](#) 或 [fixed drawing angles](#) 修改结构绘制设置。

或者



1. 点击链工具 。
2. 按住鼠标并拖动，可以快速绘制单键长链。在拖动鼠标的过程中，链上碳原子的数量会被显示。松开鼠标结束绘制链。


改变键型

1. 点击铅笔工具 。
2. 可以：
 - 点击键型显示面板  上的一根键。然后点击想改变的结构键。
 - 指向一个结构键高亮显示。然后输入 **1**, **2** 或 **3** 将键变为单键、双键或三键。
 - 如果键型显示面板上的单键工具是激活的，则可以点击一个结构键循环改变键型（单键、双键或三键）。




注：要快速将键设置为单键并且将原子设置为碳，则点击碳/单键图标 。


使用立体键

1. 点击**铅笔工具** .
2. 点击**立体键显示面板**  上的一根键。
3. 点击想要改变的键。重复点击键即可改变键的方向。



注: 要快速将键设置为**单键**并且将原子设置为**碳**, 则点击**碳/单键**图标 .

改变原子符号

1. 点击**铅笔工具** .
2. 可以:
 - 点击**常用原子面板**  上的一个原子。
在位于面板左侧的**当前原子框**中直接输入原子符号。
 - 点击**原子菜单工具** , 选择元素周期表中的一个原子。
3. 点击想要改变的原子。


注: 要快速将键设置为**单键**并且将原子设置为**碳**, 则点击**碳/单键**图标 .

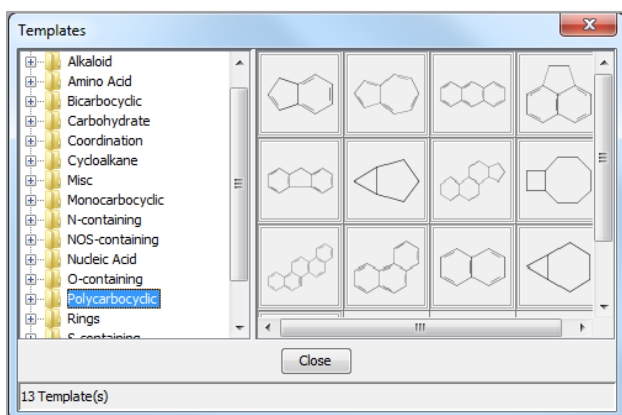
使用电荷

1. 点击**正电荷工具**  或**负电荷工具** .
2. 点击结构中的带电原子。如果想增加电荷, 可以不断点击原子。

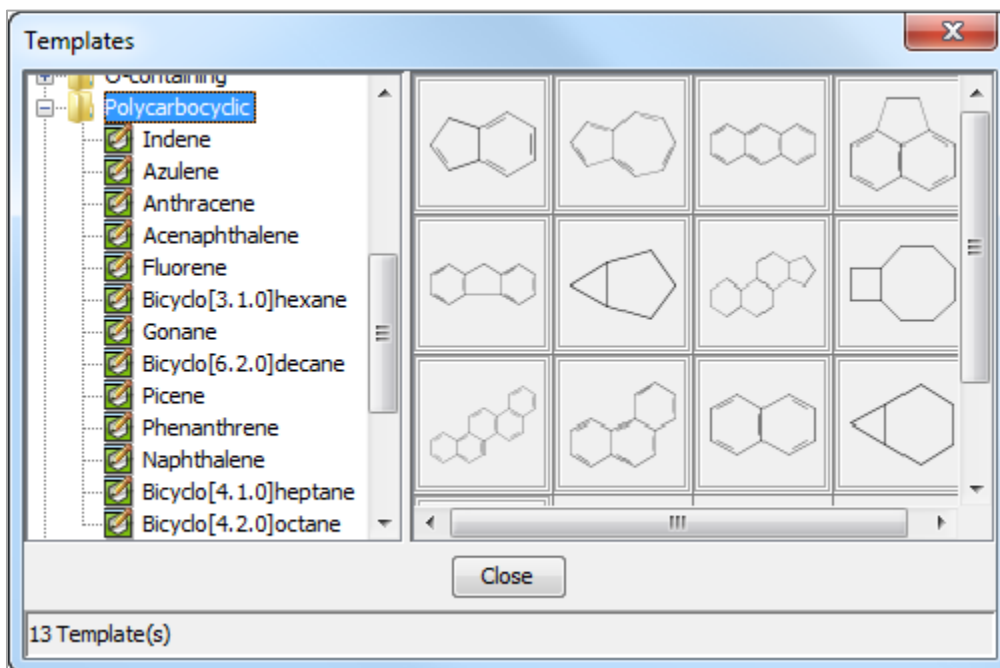
使用模板和常用官能团

使用模板

1. 点击模板工具 。
2. 在下面的模板（**Templates**）对话框中，点击文件夹展示存在文件夹里的模板。




或者，也可以点击文件夹左侧的加号（+）列出其中储存的模板。

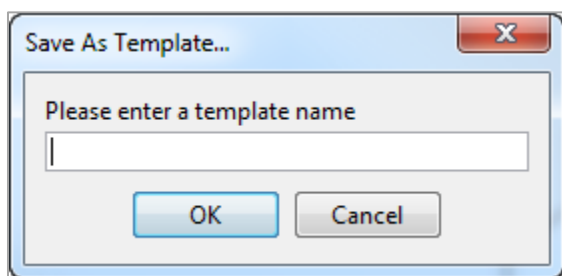


3. 点击选择模板中列出的某个结构或点击展示的模板结构。
4. 点击绘制区输入模板中的结构。

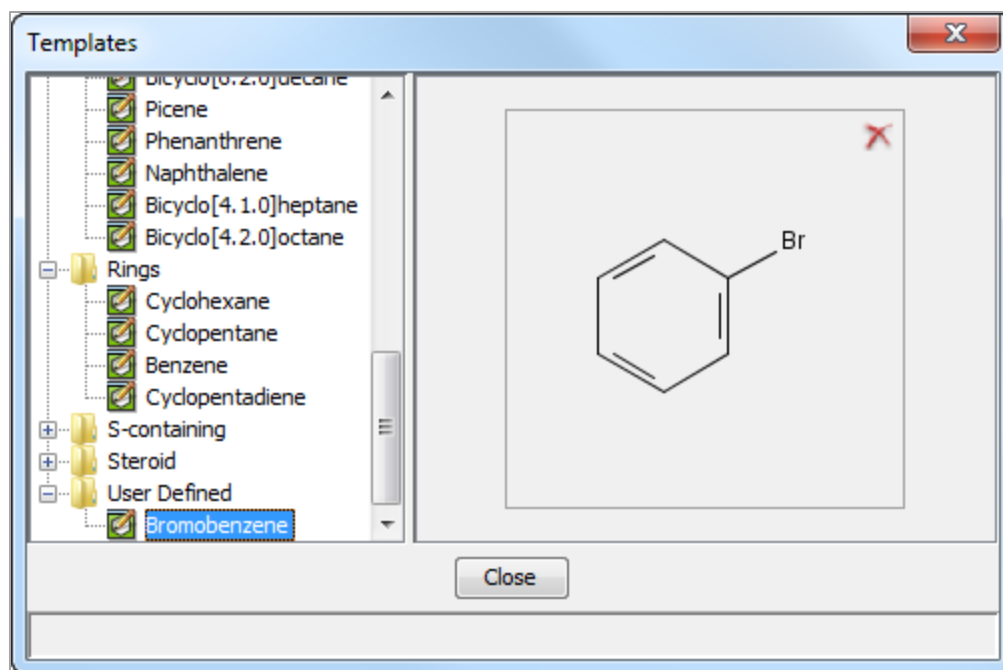
被选中的模板会出现在绘制区底部的**当前模板框**中。点击即可获取模板中的结构。

创建自定义模板

1. 绘制模板结构
2. 点击**另存为模板**图标。
3. 输入一个模板名称




4. 点击 **OK**
5. 要访问自定义模板，请点击**模板工具栏 (Template Tool)** 。模板就存储在用户定义 (**User Defined**) 的文件夹中。



点击结构旁边的红 X 删除用户定义的模板。

添加常用官能团

1. 点击常用官能团菜单工具 。
2. 点击想使用的常用官能团。


CH	Bu-n	o-C ₆ H ₄	Cl ₃	NH ₂
CH ₂	Bu-i	m-C ₆ H ₄	CHO	NH ₃
Me	Bu-s	p-C ₆ H ₄	CN	NO ₂
OMe	Bu-t	CF ₂	C(O)CH ₃	OH
Et	OBu-n	CF ₃	CO ₂ H	OPO ₃ H ₂
OEt	OBu-i	CCl ₂	COOH	OSO ₃ H
Pr-n	OBu-s	CCl ₃	COSH	PO ₃ H ₂
Pr-i	OBu-t	CBr ₂	CS ₂ H	SH
OPr-n	Ph	CBr ₃	CSSH	SO ₂
OPr-i	OPh	Cl ₂	NH	SO ₃ H

Close

将鼠标放置在常用官能团旁边，就可以看到化学结构。官能团的结构将在弹出的窗口中显示。

3. 点击想要连接常用官能团的原子。

使用键盘快捷方式

1. 点击铅笔工具 。
2. (可选) 在黄色信息条中，点击 **Shortcut Keys** 链接。



键盘快捷选项将被展示在 Java 编辑器中。



Keyboard Shortcuts	
Elements/Shortcuts	
a	A
A	Ak
b	Br
B	Cb
c	C
C or l	Cl
e	Et
f	F
h	H
H	Hy
i	I
k	K
m	M
n	N
N	Na
o	O
p	P
P or 4	Ph
q	Q
s	S
S	Si
x	X
y	Cy
1	Bu-n
2	Bu-s
3	Bu-t
Bonds	
1	Single
2	Double
3	Triple

3. 可以

- 指向一个原子，然后利用键盘快捷键输入想使用的元素。例：指向一个原子，然后输入 **b**，将其变为 **Br**。
- 指向一根键，然后利用键盘快捷键输入想使用的键型。例：指向一根键，输入 **2**，将其变为**双键**。



4. （可选）点击 **Close** 隐藏 Java 编辑器键盘快捷键方式。可以使用键盘快捷键显示快捷或隐藏快捷。

删除所有结构或结构中的一部分

删除单个原子和键

1. 点击橡皮工具 
2. 点击想要删除的原子或键。

删除多个原子或键

1. 点击索套工具  选择原子和键，或者点击选择工具  选择矩形区域里的原子和键。
2. 拖动鼠标覆盖想要删除的原子和键。
3. 点击 **Delete** 键。

注：也可以使用选择工具选择原子或键，然后用 **CTRL+点击**，选择多个对象，或双击选择整个结构。

导入来自其他资源的结构

将 CAS 登记号、SMILES 字符串和 InChI 字符串转变为结构

1. 点击添加到编辑器图标 .
2. 在文本框中输入 CAS 登记号、SMILES 字符串或 InChI 字符串。

Add to Editor

Enter CAS Registry Number, SMILES, or InChI:

Examples:
 50-00-0
 CCCO
 InChI=1S/C3H8O/c1-2-3-4/h4H,2-3H2,1H3

3. 点击 **OK**。结构即出现在输入区域。

从其他结构编辑器中拷贝和粘贴结构

1. 从 ChemDraw 或 ISIS/Draw 拷贝结构。

注：在 ISIS/Draw 中，必须设置为 place Molfile content on the clipboard.

2. 在结构编辑器中，点击**粘贴**图标



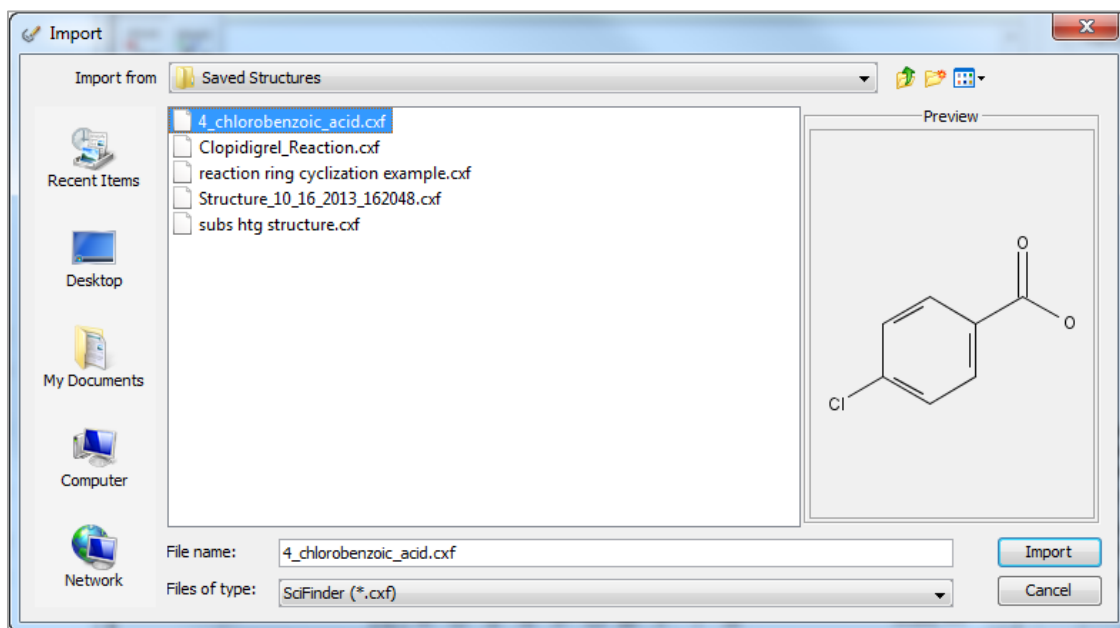
导入结构文件

可以导入已经被保存为 CXF 或 MOL 文件格式的结构。

1. 点击 **Import** 图标



2. 选择文件。



3. 单击 **Import**.

使用亚结构检索功能

以下功能仅用于亚结构和反应检索：

允许原子变化

指定一个通用的原子类型（可变基团）

在一个原子位置指定一系列替代的基团（R 基团）

允许化学键变化

使用一个不确定的键型

允许环或链的大小变化

绘制一个 repeating group

改变重复次数

删除一个 repeating group

锁定取代基

使用原子锁定功能

去除原子锁定功能

锁定环

使用环锁定功能

去除环锁定功能

允许环上取代位点变化

绘制可变位置取代

删除可变位置取代

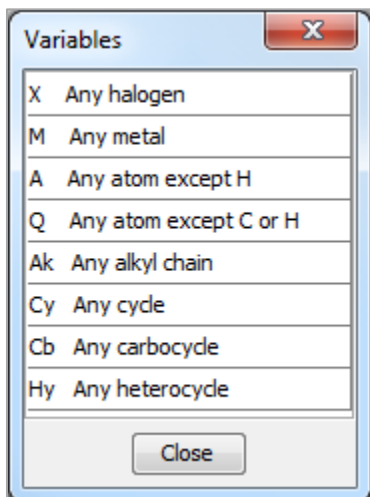
允许原子变化

指定一个通用的原子类型(Variable):

使用一个可变基团指定一个通用的原子类型，（如：**X** 代表“任意卤素”，或 **A** 代表“除了氢以外的任意原子”）。

1. 点击 **Variables** 工具 .

2. 点击可变的原子类型。




注：

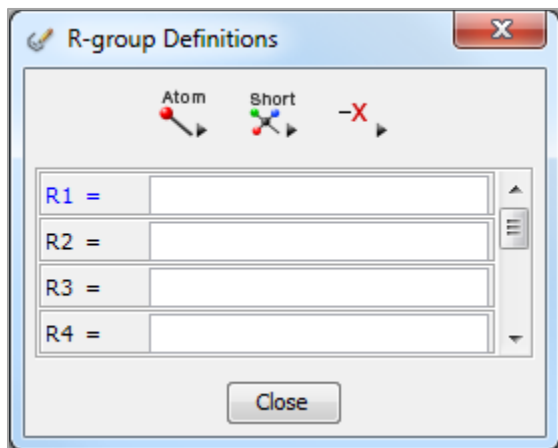
- **Ak** 代表任意碳链，包括但不限于烷基。**Ak** 基团不可以接到另一个 **Ak** 基团上（包括 **R** 基团内的 **AK** 或 **repeating group** 内的 **Ak**）。
- **Cy** 代表任意大小或任意组成的稠环或非稠环。
- **Cb** 是只包含碳原子的 **Cy** 子集。
- **Hy** 是包含至少一个非碳原子的 **Cy** 子集。

3. 点击结构上想要放置可变基团的原子。

在一个原子上指定一系列可变的基团（R 基团）

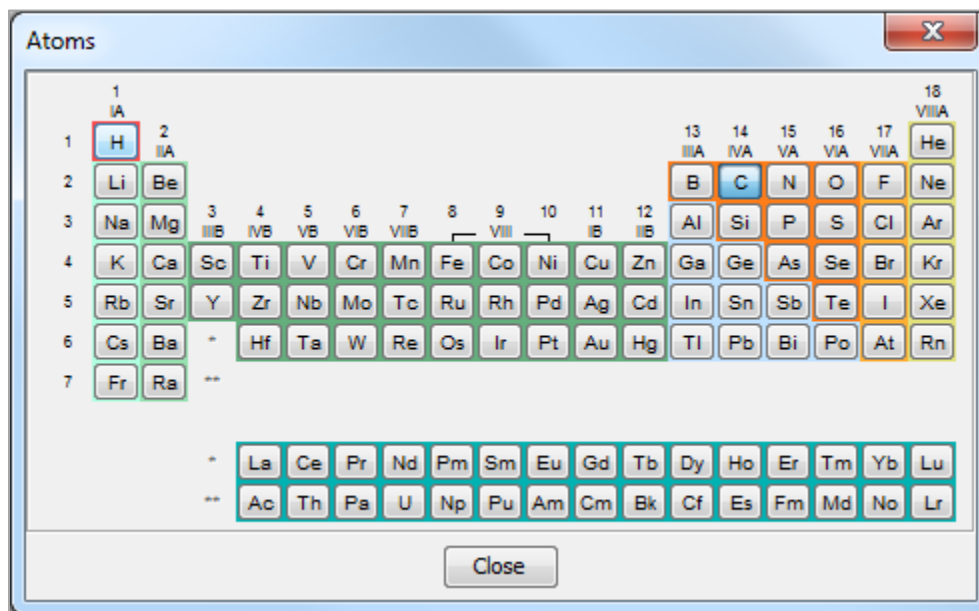
定义 **R** 基团指定特定位置的取代基。**R** 基团可以包含原子、常用官能团或可变基团。

1. 点击 **R-基团工具** ，就会出现对话框。

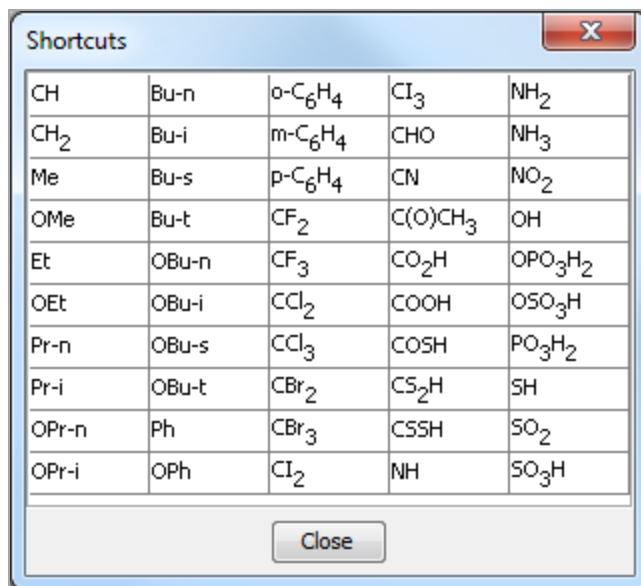


2. 使用以下方法定义一个 R 基团（如：R1）：

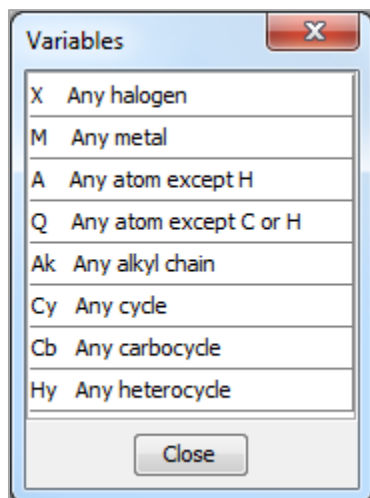
- a. 单击 **Atom Menu Tool** , 从元素周期表中选择一个或多个原子。



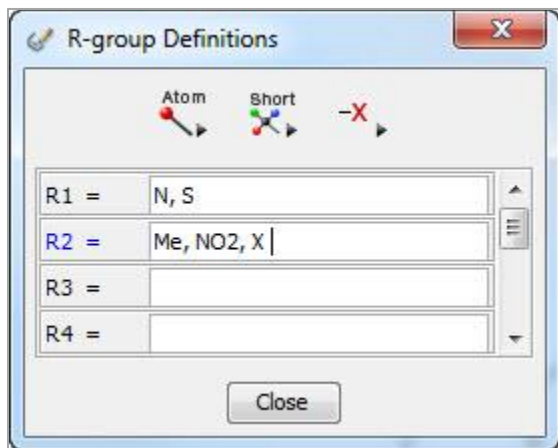
- b. 单击 **Shortcut Menu Tool** , 从显示的菜单中选择一个或多个常用官能团。



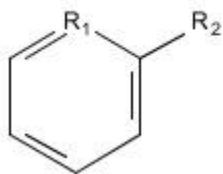
- c. 点击 **Variables Tool** , 从显示的菜单中选择一个或多个可变基




- d. 在 **R 基团** 输入框中输入元素符号, 符号之间用逗号分隔。
3. 在 **R 基团定义** 对话框中点击 **R 基团** (如, R2), 然后点击原子, 就可以将 R 基团绘制到结构中。



4. 重复第 3 步，直到所有的 R 基团画完为止，然后点击 **Close**。




注:

- 通用基团 Ak, Cb, Cy 和 Hy 不可以出现在环或环中的 R 基团
- 一个结构中最多可以定义 10 个 R 基团，并且每个 R 基团最多包含 20 个原子、常用官能团或可变基团。
- 所使用的 R 基团（如：R2）会成为系统默认设置一直出现在当前原子输入框中（可以点击 **碳/单键** 图标  改变该默认设置）。

允许化学键变化

可以在结构中使用不确定的键型。在检索中，不确定的键型可以和任意键型匹配。


使用一个不确定的键型

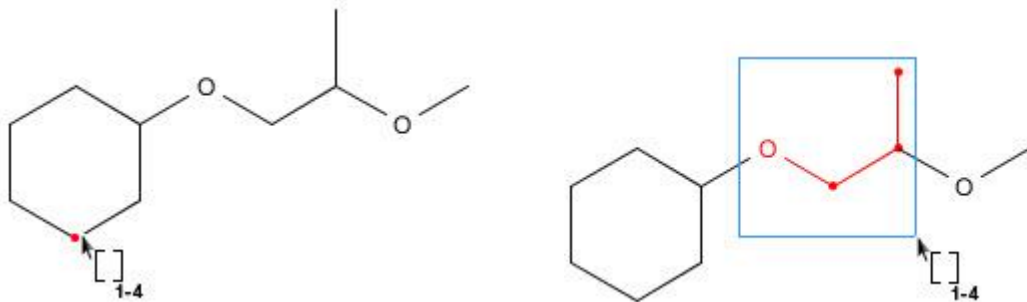
1. 点击化学键面板上的不确定键型工具 。
2. 点击结构中想要发生键型变化的键。

允许环或链尺寸变化

可以指定亚结构中某个 repeating group 中的原子的重复次数。Repeating group 可以是原子、常用官能团或可变基团。

绘制一个 repeating group

1. 点击 repeating group 工具 。
2. 点击选择需要重复的某个原子，或按住并拖拽鼠标选择一组需要重复的原子和键。



3. 信息条变为包括 **From** 和 **To** 的文本输入框。在文本框中输入数值指定重复次数。




4. 点击 **OK**。

注：

- 重复数字可以是一个单一值或一个范围（0-20）。
- 在 repeating group 中，置于原子上的任何取代基也适用于每个获取到的重复单元。

- 重复原子上必须有两个明确的键。
- 相邻的两个 repeating group 可以通过一根键连接
- repeating group 中不能包含立体键。
- 与 Ak 直接连接的键不能使用 repeating group。

改变重复的次数:

1. 点击 **repeating group** 工具 。
2. 将鼠标放在结构中需要重复的位置处，就会出现括号和数值。当 repeating group 高亮显示时，就点击选中。
3. 在 **From** 和 **To** 的文本框中输入新的数值。
4. 点击 **OK**。


去除一个 repeating group

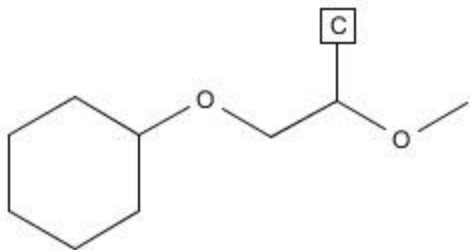
1. 点击橡皮工具 。
2. 点击 repeating group 的括号或重复值。

锁定取代


原子锁定工具被用于锁定原子以阻止在原子上接其他取代基。可以锁定一个结构中任何数量的原子。尾端的常用官能团（如：甲基）在定义时就已被锁定。

使用原子锁定功能

1. 点击原子锁定工具 。
2. 点击需要锁定的原子。原子上出现一个方框则表示其已经被锁定，不可接其他取代基。




去除原子锁定功能

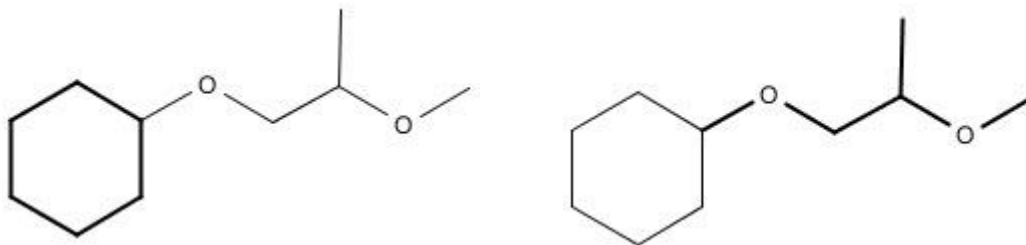
1. 点击**锁定原子工具** .
2. 点击锁定的原子。原子上的方框即被去除，原子上可以接任何取代基。

锁定环


锁环工具被用于控制在环系和链中形成新的环。使用此功能可以在结果集中排除以下结构：绘制的链片段被包含在环中；或在绘制的环系中稠和其他环。

使用环锁定功能

1. 点击**环锁定工具** .
2. 点击需要锁定的环系或链，整个环系或链即加粗显示，表明其已被锁定，不可以稠和其他环或形成新环。

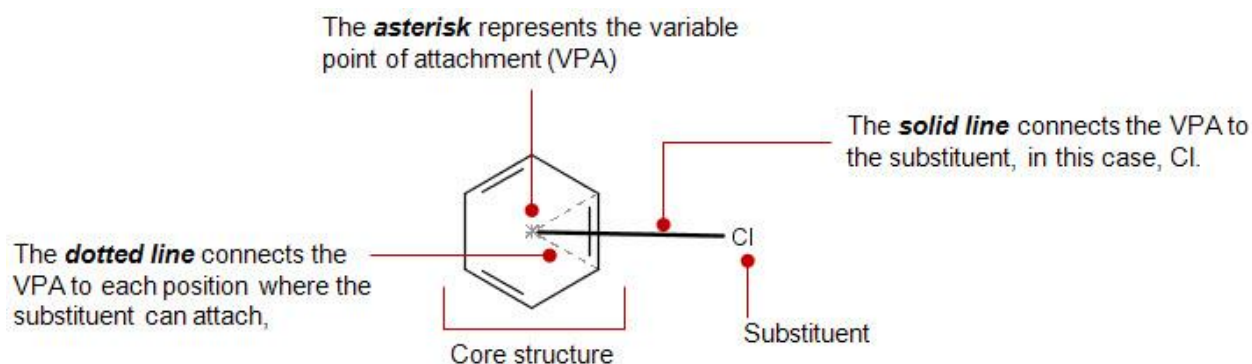


去除环锁定功能

1. 点击环锁定工具 。
2. 点击锁定的环系或链，环系或链上的加粗显示即被去除，表明其可以稠和其他环或形成新环。

允许环上取代位点变化


可变取代位点工具（Variable Attachment Point, VPA）被用于指定环系上某个取代基的多个可能连接位置。

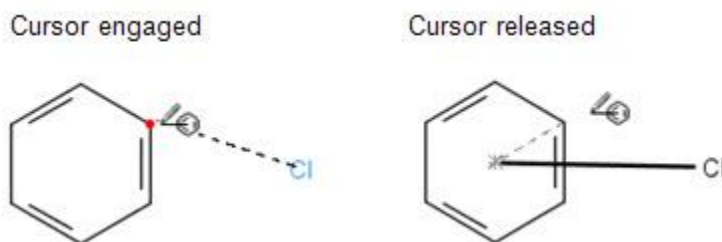


内容	特征
取代原子	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 可以是一个单一原子或更大片段上的一个原子 ▪ 可以是（或包含）一种元素、可变基团、常用官能团、无其他取代基的 R 基团，或 repeating group ▪ 可以被锁定 ▪ 只能对一个环系进行可变位置取代 ▪ 不可以是 repeating group 的一部分 ▪ 不能作为 VPA 同时连接两个不同环系
可变取代原子	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 可以是（或包含）一种非金属元素或 X, Q 或 A ▪ 可以被锁定 ▪ 不可以是一个常用官能团，一种金属原子或 M, Ak, Cb, Cy 或 Hy

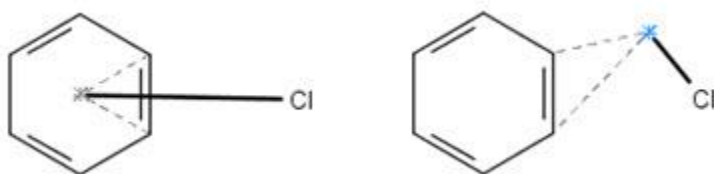
	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 被选中 repeating group 中的原子不能作为不固定取代的一部分 ▪ 不能作为 VPA 同时连接两个不同环系
Variable attachment bond 可变取代键	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 可以是单键、双键、三键或不确定的键型 ▪ 不可以是立体键
Core structure 核心结构	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 一个或多个取代基可以不固定连接到环系中的相同原子上 ▪ 每个环系中，至多可以有 20 个不固定位置取代基

绘制可变位置取代 (VPA)

1. 点击可变取代位点工具 。
2. 将鼠标放置在取代基上，并按住拖动至环上的某个位置，松开鼠标后，就会形成一条取代线。



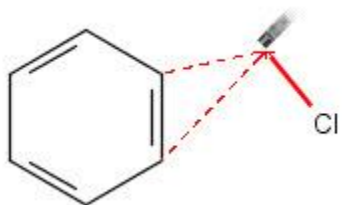
3. (可选) 可以使用选中工具  移动可变位点至一个新位置，便于查看。



删除可变位置取代

1. 点击橡皮工具 。

2. 点击取代基（取代原子）、键线、虚线、或星号去除整个可变量取代。




3. 点击一条虚线去除某个取代位点。



移动结构、调整结构位置或调整结构尺寸


移动一个结构

在绘制区将一个被选中的结构拖拽至一个新区域。

1. 点击套索工具 。
2. 拖动鼠标包围结构选中。




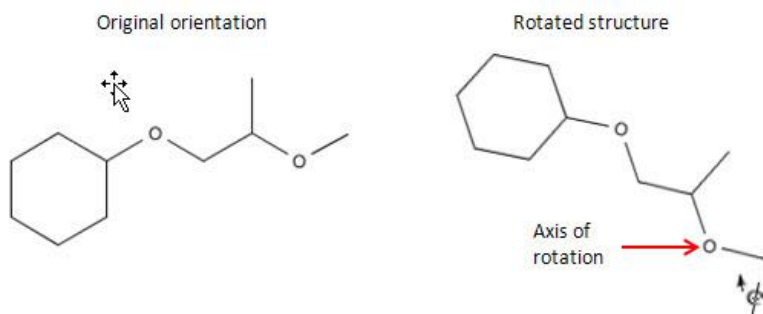
3. 将鼠标放置在选中的结构上，然后拖动鼠标将结构放置在新位置。

或者，点击选择工具 ，然后双击结构选中。将选中的结构放置在新位置。

旋转一个结构

使用翻转工具，可顺时针或逆时针方向旋转一个结构。

1. 点击旋转工具 。
2. 将鼠标放置在想要作为旋转轴的原子上。
3. 按住并拖动鼠标顺时针或逆时针旋转结构或片段。



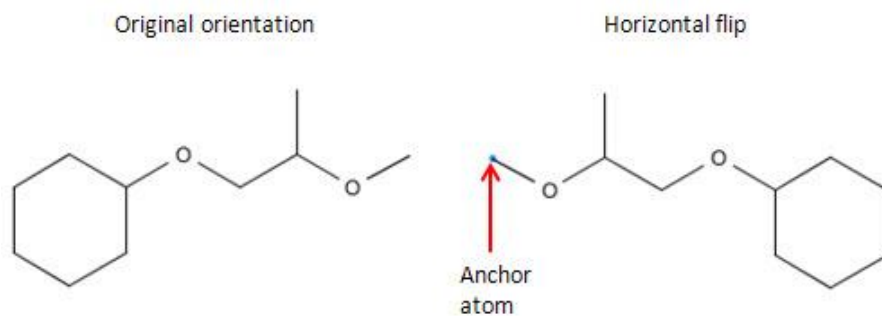
翻转一个结构

使用**翻转结构**工具可对结构进行水平方向或垂直方向翻转。

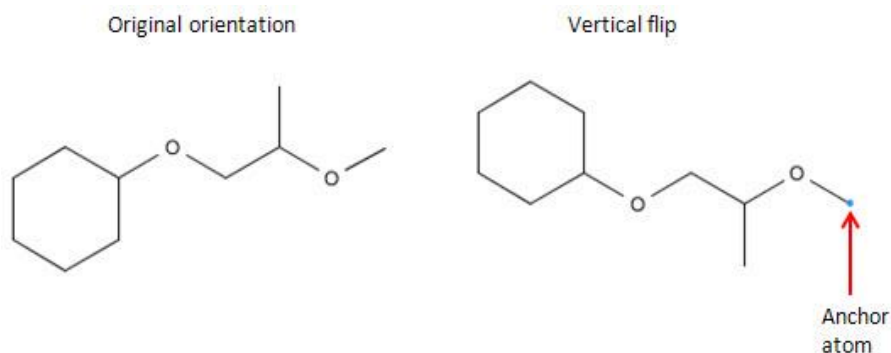
1. 点击**翻转结构**工具 。

2. 点击作为翻转中心的原子。

- 输入 **H** 水平翻转结构。



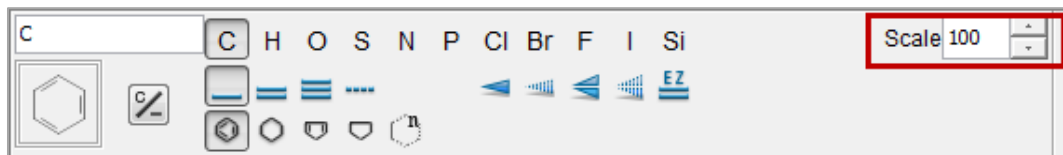
- 输入 **V** 垂直翻转结构。



调整一个结构尺寸

可以在绘制区通过改变显示比例调整结构的尺寸。

1. 使用上下箭头放大或缩小**比例值**



或者，在“**缩放**”框中输入 **25** 到 **400** 之间的数字，输入的数字为 **25** 的倍数。

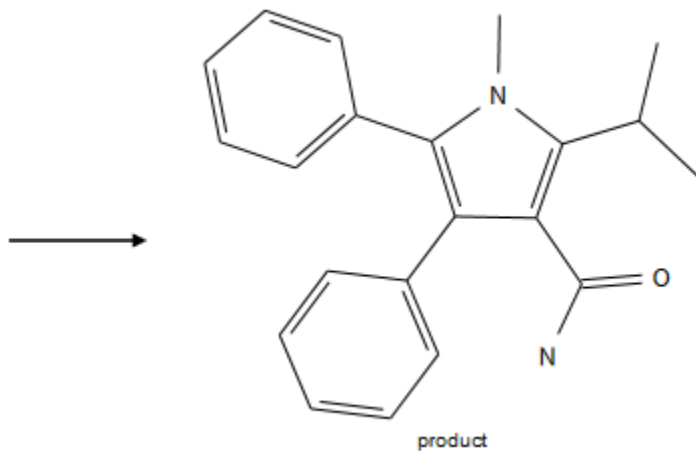
指定反应角色

绘制一个反应箭头

1. 点击反应箭头工具



2. 在绘图区域拖动鼠标绘制反应箭头。例：



箭头左边的结构被自动定义为反应物。箭头右边的结构被自动定义为产物。

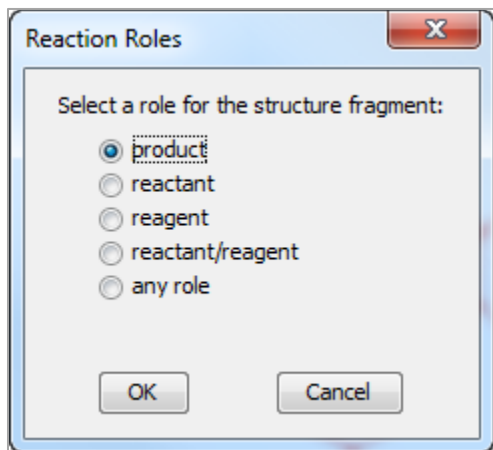
给一个物质指定反应角色

1. 点击反应角色工具

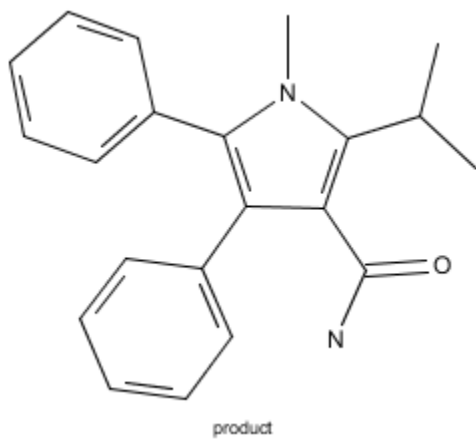


2. 点击绘制区的物质。

3. 选择对话框中的反应角色，然后点击 **OK**。




反应角色出现在物质下面。例：

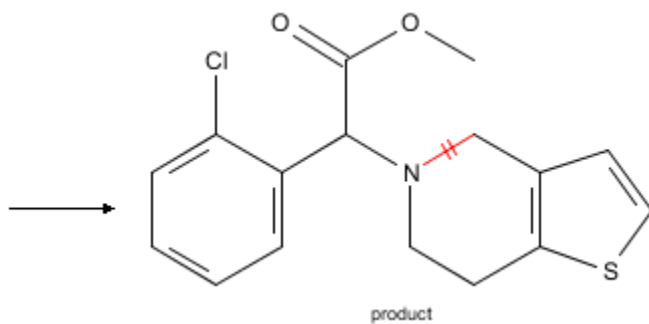


标记反应位点

标记在反应中发生变化（断裂、生成或改变键序）的键聚焦反应检索。

操作步骤

1. 点击反应位点标记工具 。
2. 点击在反应中发生变化的键，键即被红双杠号标记。如（当鼠标移开时，红色高亮标记就会消失）：




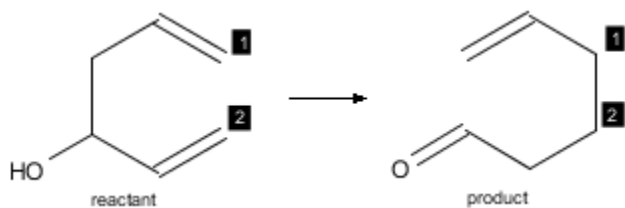
再次点击标记的键去除反应位点标记。

标记原子

指定出现在反应物和产物中的相应原子对聚焦反应检索。

操作步骤


1. 点击原子标记工具。
2. 点击反应物中的一个原子，然后点击产物中的相应原子。标记数字即出现在原子对上。如：

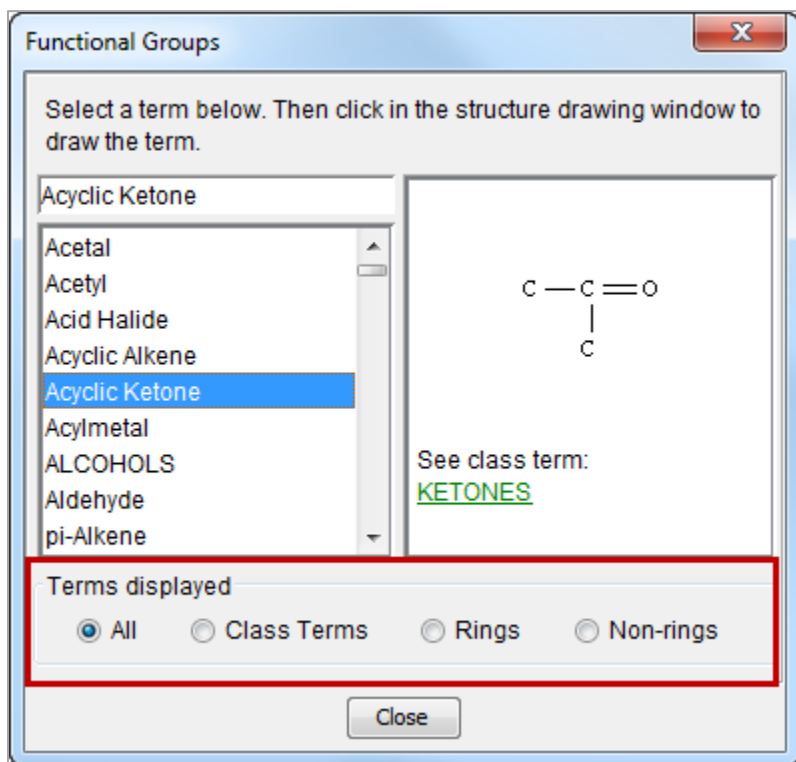


提示：标记原子对可以明显地缩小结果集。从标记需要的原子对开始聚焦检索。

使用官能团指定一个物质

使用官能团词语（而不是画一个确定的结构）指定反应物、试剂或产物。

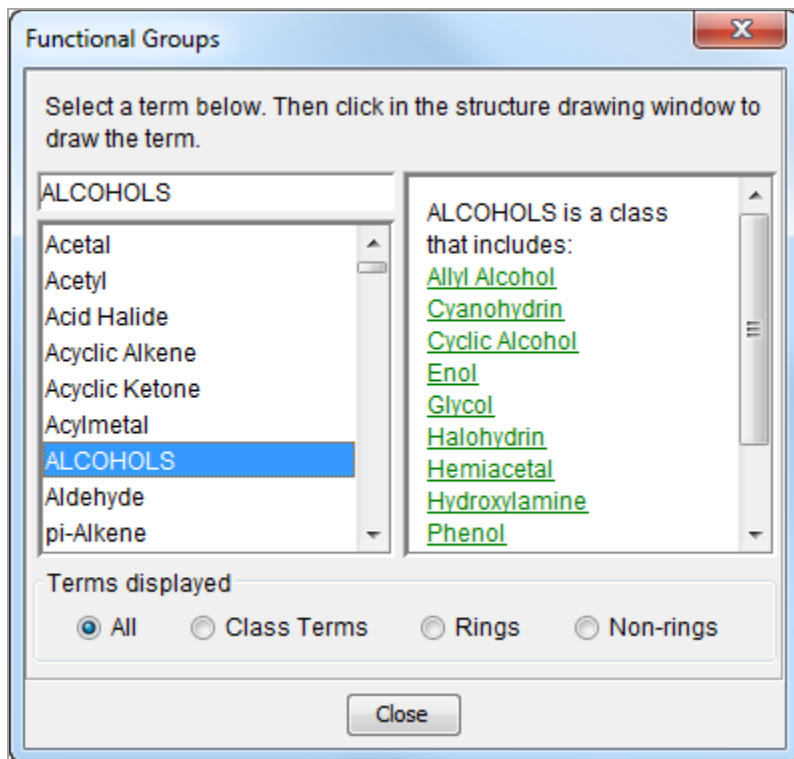
1. 点击官能团工具 。
2. 在对话框中，选择要显示的词语。默认情况下，将显示所有词语。



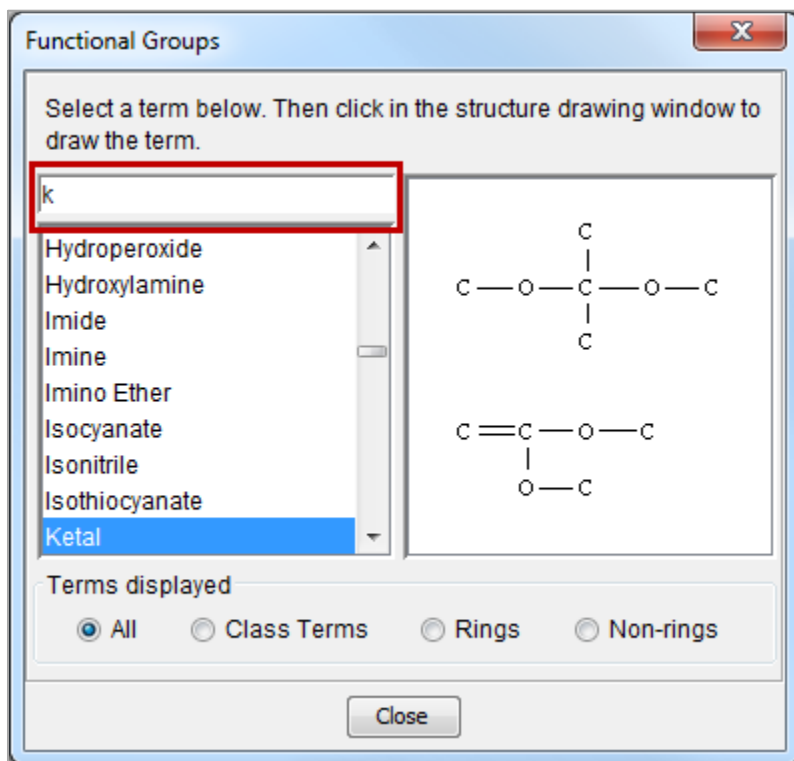
3. 点击左侧面板中的官能团词语

如果选择单个词语（如上所示的 **Acyclic Ketone**），则结构和词语所属的官能团分类（本例的官能团类别为 **KETONES**）将被展示在右侧面板中。

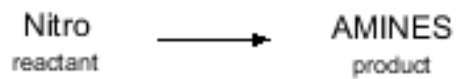
如果您选择一个分类词（如下所示的 **ALCOHOLS**），则将显示该分类下的各个词语。



或者，可以在文本框中输入官能团词语的第一个字母。SciFinder 将跳转到匹配项。



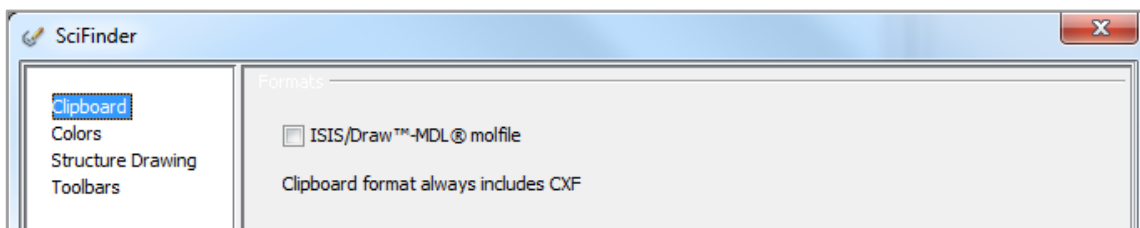
4. 点击绘制区放置官能团词语。
5. 通过绘制反应箭头或使用**反应角色工具**指定官能团词语的反应角色 ([Specify the reaction role](#))。例：



编辑绘制设置

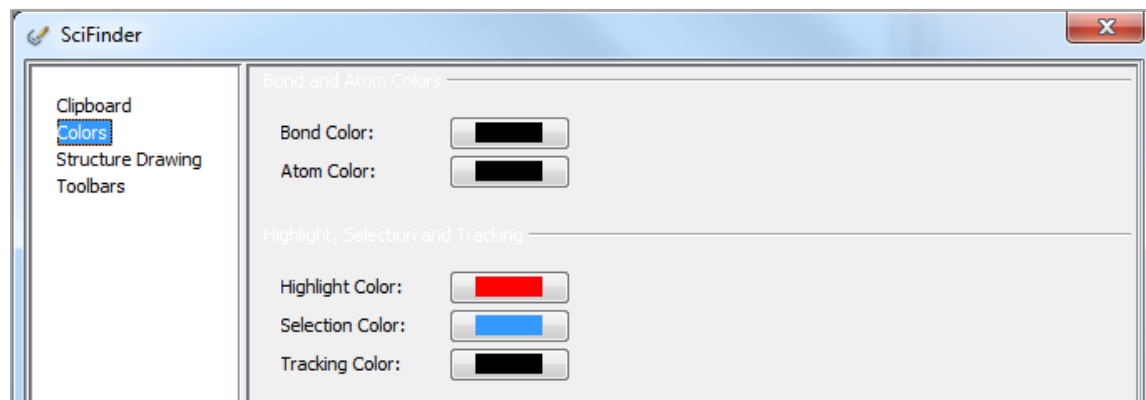
1. 在结构编辑器中，点击**设置（Preferences）**图标。
2. 点击想要更改的设置类别：[Clipboard（剪贴板）](#)，[Colors（颜色）](#)，[Structure Drawing（结构绘制）](#)，[Toolbars（工具栏）](#)。
3. 在下方表格里更改设置。
4. 点击 **OK** 保存设置。

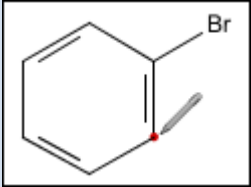
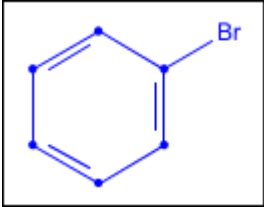
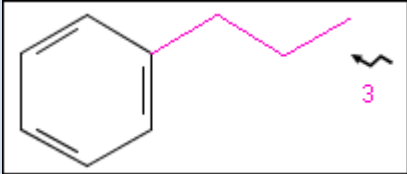
剪贴板



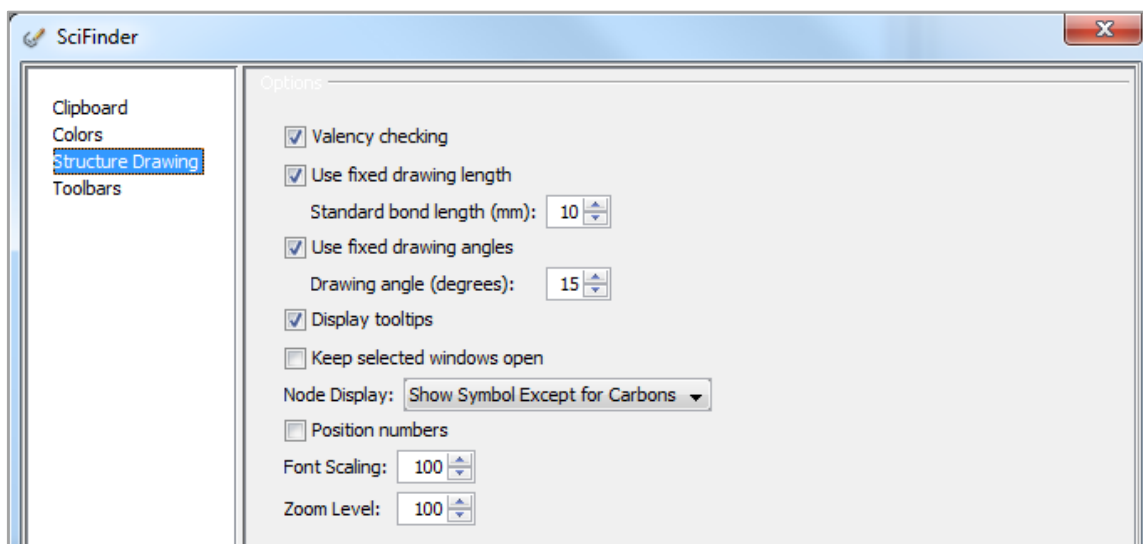
选项	描述
ISIS/Draw-MDL molfile	勾选选项，确定从结构编辑器复制到剪贴板的结构包含了 molfile 格式信息。此类结构可以被粘贴到接受 molfile 格式的其他绘图程序中。

颜色

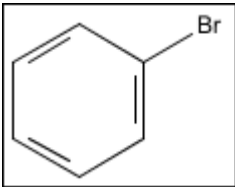
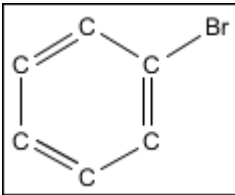
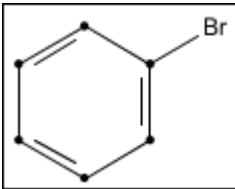
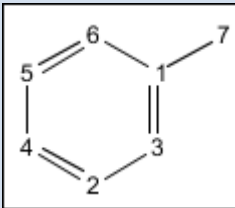


选项	描述
Bond Color	指定绘制的结构中的键的颜色。
Atom Color	指定绘制的结构中原子的颜色。
Highlight Color	<p>指定在使用光标指向原子或键时，高亮显示原子或键时呈现的颜色。</p> <p>例，当铅笔工具处于活动状态，并且指向原子做更改时，原子将以红色高亮显示，此时默认的高亮颜色为红色。</p> 
Selection Color	<p>指定用于高亮显示选中的原子和键的颜色。</p> <p>例，当使用 Lasso 工具选择结构时，选中的原子和键将以蓝色显示，蓝色即为默认颜色。</p> 
Tracking Color	<p>指定用于在绘制时高亮显示正在绘制的结构颜色。</p> <p>例，当使用链工具绘制键链时，链的长度在被拖动时会被高亮显示。如果跟踪颜色设置为粉色，它将显示如下：</p>  <p>默认情况下，跟踪颜色为黑色。</p>

结构绘制

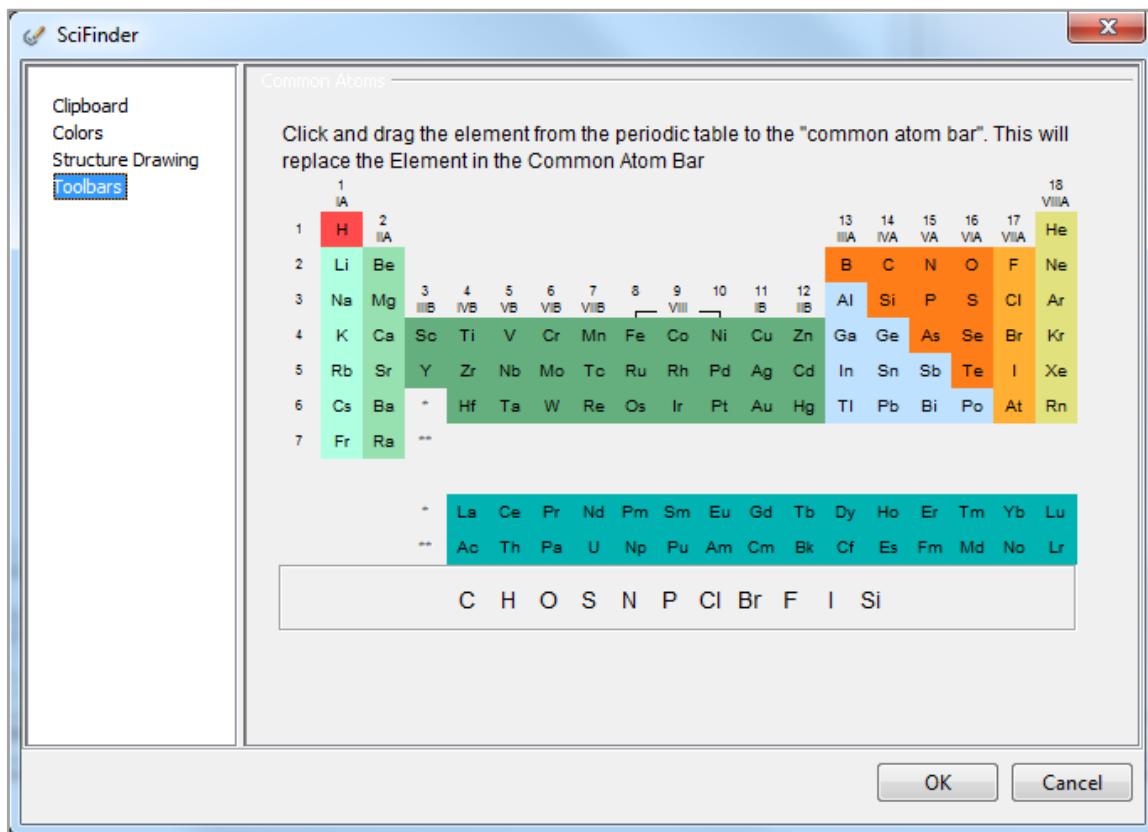


选项	描述
Valency checking	<p>如果希望 SciFinder 提醒化合价是否超过元素常值，则勾选该选项。需要回复以下消息才能继续绘图。</p>  <p>如果未勾选该选项，则在点击“OK”退出编辑器时，SciFinder 才执行化合价检查。</p>
Use fixed drawing length	<p>勾选该选项时，绘制的键将自动回到设定的长度。该选项设置也适用于环的尺寸和模板中的结构尺寸。</p> <p>标准键长值为 8 - 50 mm。默认长度为 10 mm。</p>
Use fixed drawing angles	<p>勾选该选项时，绘制的键将自动回到绘制角度中定义的标准角度。</p>

Display tooltips	绘制角度值为 1-90 度。默认值为 15 度。
Keep selected windows open	勾选改选项时，当指向任何绘图工具时将显示相应说明。 取消该选项，一次只能打开一个窗口。
Node display	<p>选择如何展示绘制结构中的原子。</p> <p>显示除碳原子之外的原子</p>  <p>一直显示原子</p>  <p>将碳原子显示为点</p> 
Position numbers	<p>勾选此选项将原子显示为位置编号。</p> 
Font Scaling	将值设置为 25 – 200，在绘制过程中调整文本的字体
Zoom Level	将值设置为 25 – 400，指定所绘制结构的默认缩放值。该值

被设置为 25 的倍数。

工具条



选项	描述
Common Atoms	元素周期表下方的“常用原子”代表了绘制编辑器中的当前常用原子面板。要更改常用原子面板上的原子，请从原子周期表中拖动新原子到常用原子面板上想要被替换的原子处。



SciFinder[®] 使用手册

第七卷 物质检索

美国化学文摘社

CAS, a division of American Chemical Society

7. 物质检索

物质检索操作流程.....	1
物质检索选项页面图.....	2
物质检索	4
物质检索选项.....	4
精确结构检索.....	5
亚结构检索.....	6
相似结构检索.....	9
使用 Markush 结构检索专利	11
分子式检索.....	13
通过物理性质检索.....	15
利用物质结果进行新检索.....	26
通过物质标识符检索物质.....	28
查看, 分析和限定选项.....	29
物质页面图.....	30
物质详情页面图.....	33
查看物质结果集.....	36
物质排序	39
查看物质详细信息.....	40
分析当前结果集.....	41
保留或者移除选中物质.....	44
添加检索标准缩小结果集.....	44
回到前一个结果集.....	47
合并物质结果集.....	48
获得物质相关数据.....	50
获得相关数据的方式.....	50
获得报道物质的文献.....	51
获取物质的反应.....	53
获得物质的商业来源.....	56
获得物质的管控信息.....	57

保存和分享物质结果.....	59
保存和分享物质选项.....	59
保存当前结果集.....	60
分享物质结果集.....	62
导出物质结果集.....	63
导入物质结果集.....	66
打印物质	67
将物质发送到 SciPlanner.....	70
打开一个已保存的结果集.....	71
编辑已保存的结果集信息.....	72
删除已保存的结果集.....	73

物质检索操作流程

请按照下面建议的操作流程，找到感兴趣的物质并与他人分享。可以浏览以下目录内容了解每步操作详情。

物质检索

可以使用以下方式检索物质：

- 精确结构
- 亚结构
- 相似结构
- 马库什结构
- 分子式
- 物理性质
- 物质标识符

查看、分析和限定物质检索结果

使用下述方法聚焦最相关的结果：

- 根据选定的标准（如，分子量或报道物质的文献量）对物质进行排序
- 使用如生物活性等参数分析结果（可以选择将筛选的结果集保留为新结果也可以选择删除筛选后的结果）
- 添加更明确的检索条件（如，包括或排出同位素、商业可获得性）限定检索结果

还可以保留或删除选定的物质，并合并多个结果集。

获取物质相关信息

可以获取到某个物质的文献或反应。也可以获取到物质的管控信息和商业来源。

保存和分享物质结果集

保存、打印或导出物质结果集。也可以向同事发送某个物质的链接。

物质检索选项页面图

当选择物质检索时，该页面就会出现



<p>A</p>	<p>此处列出了不同类型的检索选项：</p> <p>Chemical Structure—获取到与输入的结构式匹配的物质。可以指定进行精确结构、亚结构或相似结构检索</p> <p>Markush—获取到含有与输入的马库什结构匹配的通式结构的专利文献</p> <p>Molecular Formula—获取到与输入的分子式中的元素符号和原子数精确匹配的物质</p> <p>Property—获取到与输入的性质数据匹配的物质</p> <p>Substance Identifier—获取到与输入的 CAS 号或化学名匹配的物质</p>
<p>B</p>	<p>不同的检索方式, 将会出现不同的检索字段：</p> <p>在此例中, 所选的检索方式是“Chemical structure”。点击编辑器图像启动结构编辑器, 并绘制结构式。（可以点击选项卡切换 Java 和非 Java 编辑器。Java 编辑器需要 Java JRE 和插件。）</p> <p>或者, 点击“Import CFX”导入另存为.cxf 文件的结构。</p>

	<p>可以从 C 中选择检索限制条件，缩小检索范围。</p> <p>点击 Search，执行检索。</p>
C	<p>当点击 Advanced Search 时，适于检索类型的限制条件就会出现。 如果希望一直显示限制条件，则请勾选 Always Show。</p> <p>除非检索要求十分严格，否则最好从更宽范围检索开始（先不要使用限制条件）。如果需要，则可以在检索后使用 Refine 功能限定检索结果。</p>
D	<p>此处显示的是最近保存的结果集。</p> <p>要从保存的结果集中获取结果，则请点击结果集名称（如，Multistep 2）。</p> <p>点击 View All 查看所有已保存的结果集、或者编辑、删除或合并它们。</p> <p>点击 Import，导入以前导出为 AKX 文件或已转换为 AKX 文件的结果集</p>
E	<p>此处显示的是 KMP 提醒的最新结果。 KMP 提醒每周或每月自动根据设定的检索式进行检索，获取最新的结果。</p> <p>点击 KMP 名称下的日期（如，2016年1月30日）查看 KMP 中的结果（括号中的数字表示结果集中的结果数量）。</p> <p>点击 “View All” 查看所有 KMP 结果集、或者删除或合并它们。</p>
F	<p>Saved Answer Sets（保存的结果集）-查看、编辑、删除或合并已保存的结果集</p> <p>Keep Me Posted（定题追踪提醒）-查看、删除或合并定题追踪结果</p> <p>History（检索历史）-查看、打印或导出当前或之前 SciFinder 的检索历史</p>
G	<p>转到 SciPlanner 可视化地组织文献、物质和反应。</p>
H	<p>使用以下选项：</p> <p>Preferences-SciFinder 系统设置</p> <p>SciFinder 帮助-获取：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Help ▪ Training ▪ What's New ▪ Contact Us <p>Sign Out-退出 SciFinder</p>

物质检索

物质检索选项

Explore Substances 页面上有获取物质信息的多种不同检索选项。

精确结构检索

获取到与输入的结构式完全匹配的物质。

亚结构检索

获取到包含输入结构式的物质。

相似结构检索

获取到与输入结构式相似的物质。

马库什结构检索

获取到包含与输入的马库什结构匹配的专利。

分子式检索

获取到与输入的分子式中元素符号和原子数精确匹配的物质。

物理性质检索

获取到与输入的物理性质数据匹配的物质。

物质标识符检索

获取到与输入的物质标识符（如，CAS 号或化学名）匹配的物质。

精确结构检索

精确结构检索获得的物质包括：

- 与所画的结构完全一样
- 立体异构体
- 互变异构体（包括酮-烯醇）
- 两性离子
- 带电荷的化合物
- 所画结构的混合物和盐
- 自由基或者自由基离子
- 同位素
- 配位化合物
- 聚合物（所画的结构为聚合物的一个单体）

操作步骤

1. 选择 **Explore > Chemical Structure**.

The screenshot displays the SciPlanner web interface. At the top, there are tabs for 'Explore', 'Saved Searches', and 'SciPlanner'. The left sidebar contains a navigation menu with three main sections: 'REFERENCES' (with sub-items like Research Topic, Author Name, etc.), 'SUBSTANCES' (with sub-items like Chemical Structure, Markush, etc.), and 'REACTIONS' (with sub-item Reaction Structure). The 'SUBSTANCES' section is currently selected. The main content area is titled 'SUBSTANCES: CHEMICAL STRUCTURE' and contains a 'Structure Editor' window with 'Java' and 'Non-Java' tabs. The editor window shows a 'Click to Edit' message. Below the editor, there is an 'Import CXF' button, a large blue 'Search' button, and an 'Advanced Search' link. To the right of the editor, there are search options: 'Search Type' with radio buttons for 'Exact Structure' (selected), 'Substructure', and 'Similarity', and a checkbox for 'Show precision analysis'.

2. 点击 **Import CXF** 导入之前用 CXF 格式保存的结构
3. 使用 Structure Editor:

- a. 点击编辑器图像启动结构编辑器（可以点击选项卡切换 Java 和 Non-Java 编辑器，Java 编辑器需要 Java JRE 和插件）。
 - b. 绘制结构。
 - c. 点击 OK 将结构传输到检索页面。
4. 选择 **Exact Structure** 作为检索类型。
 5. （可选）勾选 **Show precision analysis** 显示创建最终结果集所需的精确候选列表。精确候选项包括：常规精确、密切相关的互变异构体和两性离子、宽泛相关互变异构体和两性离子及其他。
 6. （可选）点击 **Advanced Search**，通过指定其他检索条件来限制检索结果（勾选 **Always Show**，可以一直显示检索限定条件）。

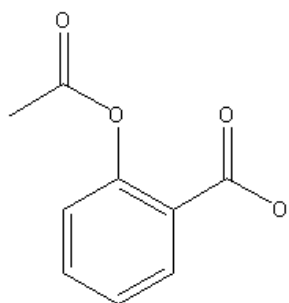
Advanced Search
 Always Show

Characteristics	<input type="checkbox"/> Single component <input type="checkbox"/> Commercially available <input type="checkbox"/> Included in references
Classes	<input type="checkbox"/> Alloys <input type="checkbox"/> Coordination compounds <input type="checkbox"/> Incompletely defined <input type="checkbox"/> Mixtures <input type="checkbox"/> Polymers <input type="checkbox"/> Organics, and others not listed
Studies	<input type="checkbox"/> Analytical <input type="checkbox"/> Biological <input type="checkbox"/> Preparation <input type="checkbox"/> Reactant or reagent

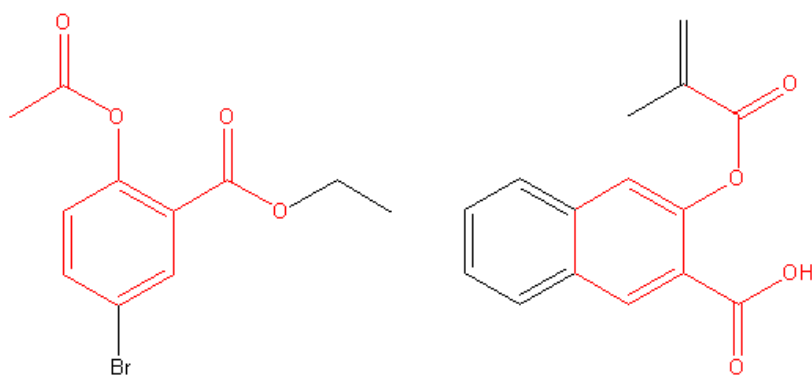
7. 点击 Search

亚结构检索

- 亚结构检索可以获取到包含输入结构式的物质
- 输入的亚结构式上所有原子都开放（除某个/些被明确锁定的原子外）。



Substructure query



Substances retrieved

操作步骤

1. 选择 **Explore > Chemical Structure**.

The screenshot shows the CAS SciFinder interface for a chemical structure search. The top navigation bar includes 'Explore', 'Saved Searches', and 'SciPlanner'. The left sidebar contains a tree view with categories: REFERENCES (Research Topic, Author Name, Company Name, Document Identifier, Journal, Patent, Tags), SUBSTANCES (Chemical Structure, Markush, Molecular Formula, Property, Substance Identifier), and REACTIONS (Reaction Structure). The main content area is titled 'SUBSTANCES: CHEMICAL STRUCTURE' and features a 'Structure Editor' with 'Java' and 'Non-Java' tabs, a 'Click to Edit' button, and an 'Import CXF' option. To the right, the 'Search Type' section has radio buttons for 'Exact Structure', 'Substructure' (which is selected), and 'Similarity', along with a checkbox for 'Show precision analysis'. A large blue 'Search' button and an 'Advanced Search' link are also visible.

2. 点击 **Import CXF** 导入之前用 CXF 格式保存的结构
3. 使用结构编辑器

- a. 点击编辑器图像启动结构编辑器（可以点击选项卡切换 Java 和 Non-Java 编辑器。Java 编辑器需要 Java JRE 和插件。）
 - b. 绘制结构
 - c. 单击 **OK** 将结构传输到检索页面。
4. 选择 **Substructure** 作为检索类型
 5. （可选）勾选 **Show precision analysis** 显示创建最终结果集所需的精确候选列表。精确候选项包括：常规精确、密切相关的互变异构体和两性离子、宽泛相关互变异构体和两性离子及其他。
 6. （可选）点击 **Advanced Search**，通过指定其他检索条件来限制检索结果（勾选 **Always Show**，可以一直显示检索限定条件）。

[Advanced Search](#) Always Show

Characteristics

- Single component
- Commercially available
- Included in references

Classes

- Alloys
- Coordination compounds
- Incompletely defined
- Mixtures
- Polymers
- Organics, and others not listed

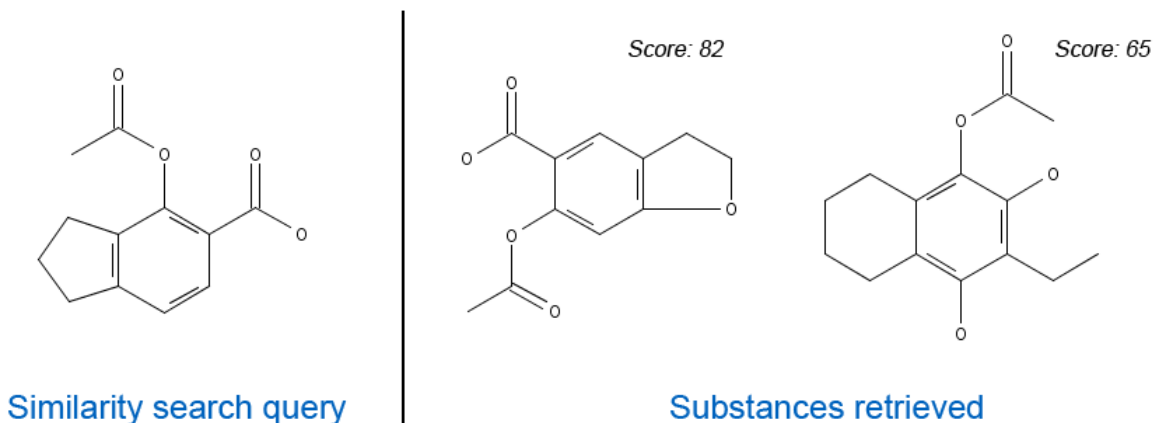
Studies

- Analytical
- Biological
- Preparation
- Reactant or reagent

7. 点击 **Search**

相似结构检索

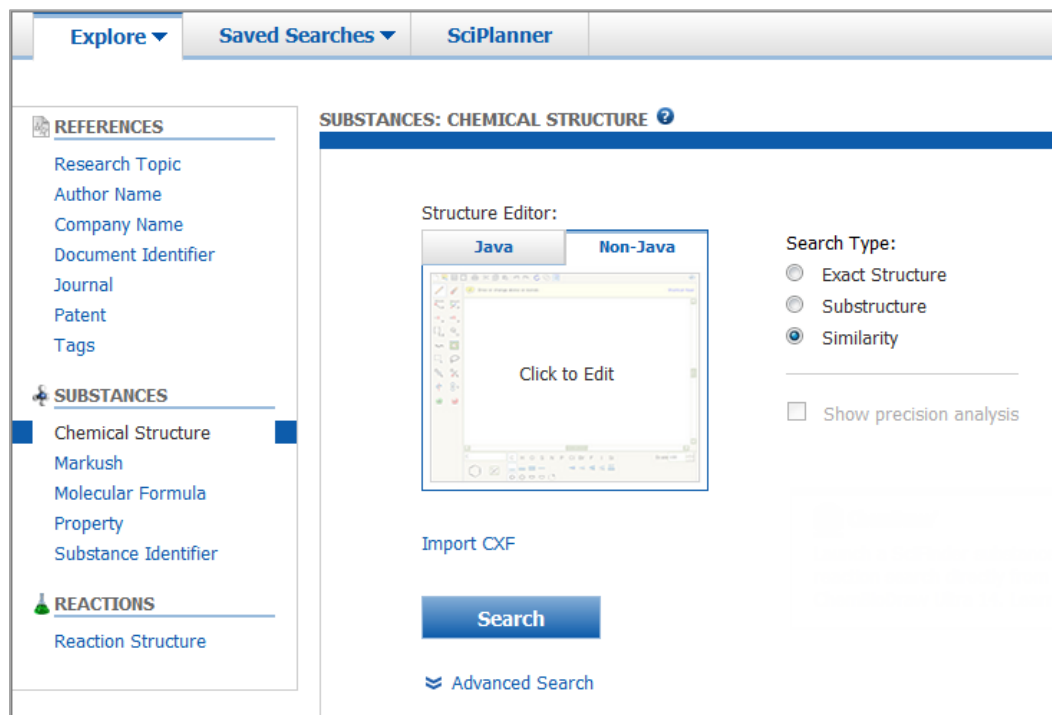
- 相似结构检索可以获取到与输入的结构式相似的物质
- [Similarity scores](#)（相似分数）是根据结构描述符计算的
- 相似分数越高的物质，与输入的结构式越相似



- 与亚结构检索不同，相似结构检索获取到的物质不会完全包含输入结构式的所有片断。
- 亚结构检索式使用的一些功能（如，可变原子），在相似结构检索时不允许被使用。

操作步骤

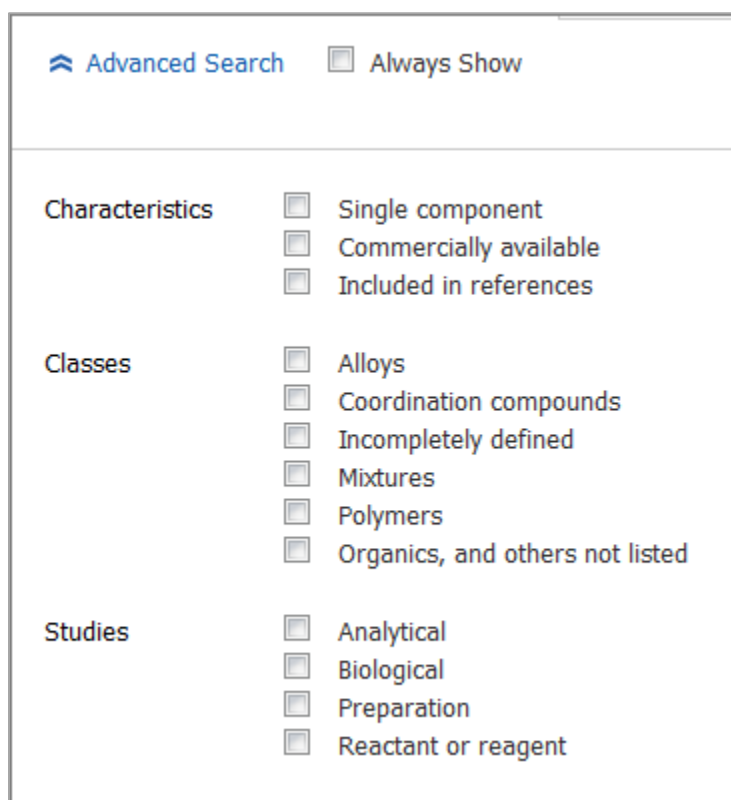
- 选择 **Explore > Chemical Structure**.



The screenshot shows the SciPlanner interface with the following elements:

- Navigation tabs: Explore, Saved Searches, SciPlanner.
- Left sidebar menu:
 - REFERENCES: Research Topic, Author Name, Company Name, Document Identifier, Journal, Patent, Tags.
 - SUBSTANCES: Chemical Structure (selected), Markush, Molecular Formula, Property, Substance Identifier.
 - REACTIONS: Reaction Structure.
- Main content area:
 - Section: SUBSTANCES: CHEMICAL STRUCTURE
 - Structure Editor: Java, Non-Java tabs, a central area with "Click to Edit".
 - Search Type:
 - Exact Structure (radio button)
 - Substructure (radio button)
 - Similarity (radio button, selected)
 - Show precision analysis (checkbox, unchecked)
 - Buttons: Import CXF, Search, Advanced Search.

2. 点击 **Import CXF** 导入之前用 CXF 格式保存的结构
3. 使用 **Structure Editor**
 - a. 点击编辑器图像启动结构编辑器（可以点击选项卡切换 **Java** 和 **Non-Java** 编辑器。**Java** 编辑器需要 **Java JRE** 和插件。）
 - b. 绘制结构
 - c. 单击 **OK** 将结构传输到检索页面。
4. 选择 **Similarity** 作为检索类型
5. （可选）点击 **Advanced Search**，通过指定其他检索条件来限制检索结果（勾选 **Always Show**，可以一直显示检索限定条件）。



Advanced Search Always Show

Characteristics

- Single component
- Commercially available
- Included in references

Classes

- Alloys
- Coordination compounds
- Incompletely defined
- Mixtures
- Polymers
- Organics, and others not listed

Studies

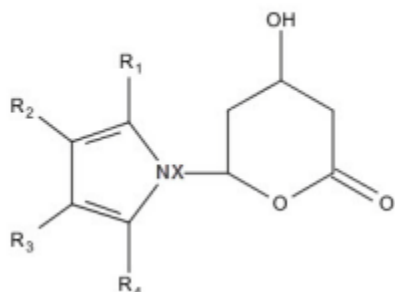
- Analytical
- Biological
- Preparation
- Reactant or reagent

6. 点击 **Search**

使用 Markush 结构检索专利

专利中包含的马库什结构指的是专利权利要求覆盖的通式结构和预测的化合物。例如：

trans-6-[2-(Substituted pyrrol-1-yl)alkyl]pyran-2-one inhibitors of cholesterol synthesis



R1 = (un)substituted Ph, naphthyl, cyclohexyl, norbornenyl, etc.

R2, R3 = H, Br, Cl, cyano, C1-4 alkyl, etc.

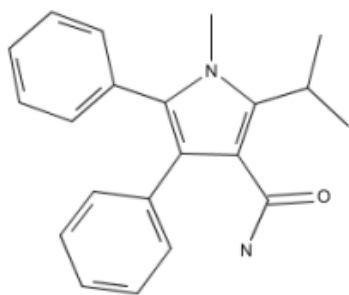
R2R3 = atoms required to form a fused heterocycle

R4 = C1-4 alkyl, cycloalkyl, CF3

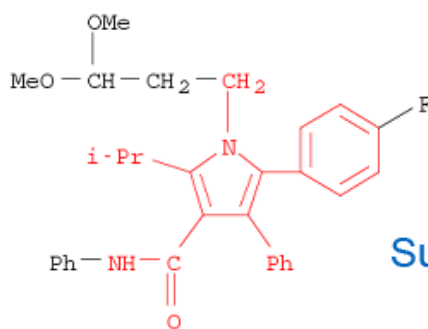
X = CH2, CH2CH2, CHMeCH2

发明人不需要测试或制备通式结构中的所有物质，但是可以通过马库什结构做化学上可能合理的等同权利要求。

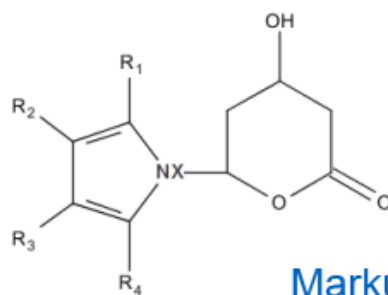
Markush 检索不同于亚结构检索，Markush 检索时，输入的结构式是与专利中的通式结构进行匹配，获取到的结果是专利文献。



Structure query



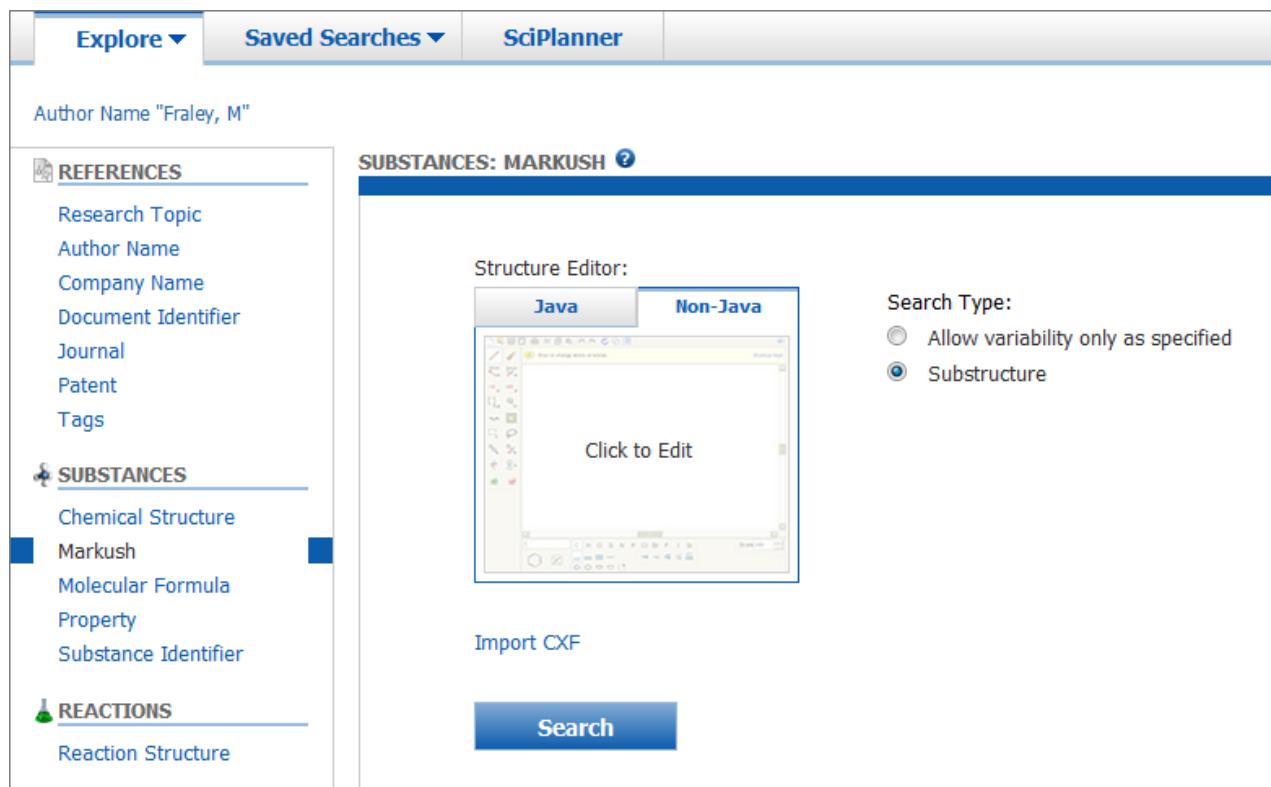
Substructure match



Markush match

操作步骤

1. 选择 **Explore > Markush**



2. 点击 **Import CXF** 导入之前用 CXF 格式保存的结构

3. 使用 **Structure Editor**

- 点击编辑器图像启动结构编辑器（可以点击选项卡切换 **Java** 和 **Non-Java** 编辑器。**Java** 编辑器需要 **Java JRE** 和插件。）
- 绘制结构。（注：马库什检索将自动锁定结构式中的环，在检索结果中不会出现稠环。被定义的预设参数有助于对专利进行初步评估。不能更改预设参数）。
- 点击“OK”将结构上传到检索页面。

4. 选择检索类型

- **Allow variability only as specified** 表示只在指定的位点有取代
- **Substructure** 表示未被锁定的位置都可以有取代

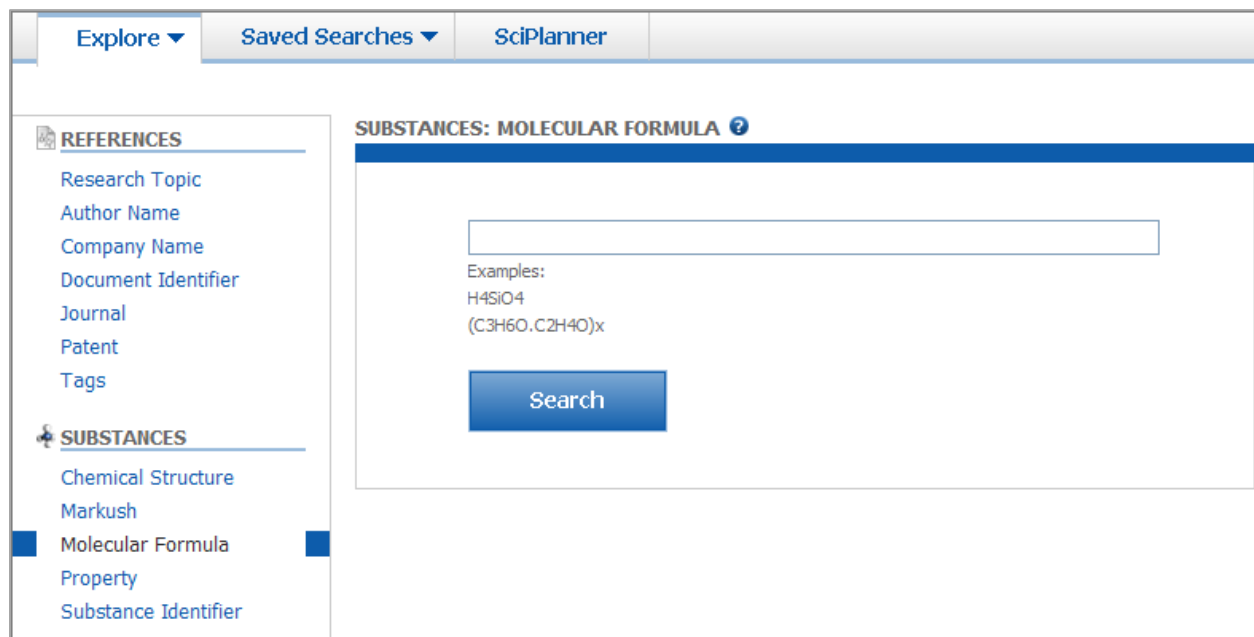
5. 点击 **Search**

分子式检索

用分子式检索获取到的结果为与输入的分子中元素符号和原子数完全匹配的物质

操作步骤

1. 选择 **Explore > Molecular Formula**



2. 输入要查询的分子式

3. 点击 **Search**

输入分子式技巧:

- 避免歧义:
 - 对于多字符的元素, 只需要首字母大写 (如: Ca, Fe)
 - 元素符号/数字间用空格隔开 (如: C21 H26 N2 S2)
- 原子数为 1 时, 没必要用 1 指定原子数 (如: C O2)
- 多组分分子式:
 - 用点分隔组分 (如: C4 H11 N O3 . C2 H4 O2)
 - 在分子式中使用括号 (如: (C15 H10 N2 O2 . C6 H14 O3 . 3(C3 H6 O . C2 H4 O)x)x
 - 使用括号表示聚合物中重复结构单元, 并用 n 代表重复次数, 如(C2 H3)_n C14 H13 N4 O2
- 可用以下方式表示分子式:
 - 整数系数 (如: C2 H4 O2 . 3 H2 O . Na)

- 分数系数 (如, $C_2 H_4 O_2 \cdot 1/2 Ca$)
- 未知系数 X ($(C_8 H_8 O_3 S)_x \cdot (C_8 H_8 O_3 S)_x \cdot x H_3 N \cdot x K$)
- 基于单体的聚合物分子式:
 - 单组分均聚物的分子式: 用括号将单体分子式括起来, 括号外用重复的数字或 x (如: $(C_2 H_3)_x$)
 - 多组分的聚合物分子式: 用括号将各组分分子式括起来, 组分分子式间用点隔开, 括号外用重复的数字或 x

通过物理性质检索

可以根据实验或预测的物理性质数据检索物质

操作步骤

1. 选择 **Explore > Property**

2. 点击单选按钮检索实验 (**Experimental**) 或预测 (**Predicted**) 性质

3. 从下拉列表中选择性质

4. 在文本框中输入数值或数值范围

5. 点击 **Search**

注: 对于以下物理属性，查询值将四舍五入到指定的小数位数进行检索。

- 沸点, 1
- 密度, 3
- 蒸发焓, 2
- 闪点, 1
- logD, 2
- logP, 3

- 摩尔体积, 1
- 分子量, 2
- pKa, 2

如, 对于沸点, 查询值将四舍五入到一位小数。因此, 如果查询沸点为 100.4, 则将不匹配 100、100.1 或范围为 99-100 之间的值。但是, 如果查询沸点为 100.43, 则将四舍五入为 100.4, 因此将匹配 100.4 或范围为 99-100.4 的值。

实验性质定义

Boiling point	<p>液体蒸汽压力等于大气压力时的摄氏温度。与沸点一起列出的压力表示的是测试沸点时的大气压力。</p> <p>最低: -273°</p> <p>最高: (无限制)</p> <p>以托为单位的压力:</p> <p>最小: 0</p> <p>最大: (无限制)</p> <p>输入的沸点保留到小数点后 1 位数</p>
Density	<p>物质单位体积的质量, 用 g/cm³ 表示</p> <p>条件:</p> <p>以°C 为温度单位</p> <p>以°C 为 RefTemp (参考温度) 的单位</p> <p>以托为压力单位</p> <p>输入的密度保留到小数点后 3 位数</p>
Electrical Conductance	<p>表示电流流过材料的容易程度, 由通过材料的电流比率与施加的电位差来定义。单位是西门子 (S)。</p> <p>条件:</p> <p>室温, 以°C 为温度单位</p>

Electric Conductivity	<p>单位面积或体积的电导。以西门子/厘米 (S/cm) 为单位。</p> <p>条件： 室温，以°C 为温度单位</p>
Electric Resistance	<p>表示导体对电流阻碍作用的大小，由流过导体的电流电压比定义。以欧姆为单位。</p> <p>条件： 室温，以°C 为温度单位</p>
Electric Resistivity	<p>单位面积或体积的电阻。单位为欧姆/厘米 (ohm/cm)。</p> <p>条件： 室温，以°C 为温度单位</p>
Glass Transition Temperature	<p>无定形材料从硬的、玻璃态或脆性状态转变为柔性流体或弹性体状态的温度范围内的近似中点。以摄氏度 (°C) 为单位。</p>
IR (Infrared) Spectra	<p>记录给定物质的红外光谱数据。IR 光谱图像的显示仅包括吸收光谱。</p> <p>通过 IR 光谱数据的可用性限定可以检索标记为 IR 吸收，反射率或发射/发光光谱数据的物质，包括可以提供光谱图像的物质。</p> <p>条件： 光谱仪 (例如, JASCO FT-IR-410, Nicolet 170SX)</p>
Magnetic Moment	<p>在磁场中施加在原子或分子上的扭矩对磁场强度的比率 (μB)。</p> <p>条件： 温度以 K 为单位，室温</p>
Mass Spectra	<p>记录给定物质的质谱数据。</p> <p>通过质谱数据的可用性来限定可以检索标记为质谱数据的物质，包括可以提供光谱图像的物质。</p> <p>条件： 电子能量 (如 75eV)</p>

	<p>入口系统（如：DIRECT, Reservoir）</p> <p>离子加速电压（如 8-10kV）</p> <p>公称质量（如 266）</p> <p>峰数（如 11）</p> <p>压力（如 0.001Torr）</p> <p>光谱仪（如：Varian HA-100, JASCO FT-IR-410）</p> <p>技术（如：电子电离）</p> <p>温度（° C）</p>
Median Lethal Dose (LD50)	<p>导致 50% 测试受试者死亡的给定物质的剂量统计估计，以毫克/千克（mg / kg）表示。</p> <p>条件：</p> <p>生物体</p> <p>给药路径</p>
Melting Point	<p>物质从固态变为液态的温度（摄氏度）。与熔点同时列出的溶剂，表明物质是从该溶剂中进行的重结晶。</p> <p>最低：-273° C</p> <p>最高：（无限制）</p> <p>可用以下代码标记一些熔点：</p> <p>Polymorph - 物质的多种结晶形式之一的熔点或物质从一种结晶形式转变为另一种结晶形式的温度（多晶型熔点）。</p> <p>Sublm - 固体的蒸气压等于大气压（升华点）的温度。列出的具有升华点的压力表示测量升华点的大气压力。</p> <p>Decomp - 固体经历可见变化而不是熔化或升华（分解点）的温度。</p>
NMR Spectra	<p>核磁共振（NMR）光谱数据，记录了给定物质的特定原子核。NMR 光谱数据（光谱）的图像包括碳-13，氟-19，磷-31，硅-29 和质子 NMR。</p> <p>通过 NMR 光谱数据的可用性可以对有如下标记的物质进行限定：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 硼-11

	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 碳-13 ▪ 氟-19 ▪ 金属 ▪ 氮-15 ▪ 磷-31 ▪ 质子（氢-1） ▪ 硅-29 ▪ 二维谱 <p>条件：</p> <p>溶剂（如：乙酸；如果可获得，包括 CAS 注册号;可以是多于一个，以逗号分隔）</p> <p>温度（°C）</p> <p>标准（如：四甲基硅烷;如果可能，包括 CAS 登记号）</p> <p>光谱仪（如：Varian HA-100）</p> <p>工作频率（如：300MHz）</p> <p>光谱峰标签：</p> <p>在 NMR 光谱中，这些标记应用于峰：</p> <ul style="list-style-type: none"> <input type="checkbox"/>D - 双击 <input type="checkbox"/>Q - 四重奏 <input type="checkbox"/>S - 单线 <input type="checkbox"/>T - 三重 <input type="checkbox"/>U - 未分配（未提供或没有分配信息）
Optical Rotatory Power	<p>通过包含一个或多个不对称碳原子的分子时光束的偏振面的左（-）或右（+）旋转度。</p> <p>条件：</p> <p>温度（°C）</p> <p>浓度，单位 g / 100m</p> <p>溶剂</p> <p>波长（Wavlen），单位 nm</p>

	长度 (Len) 以 dm 为单位
Raman Spectra	记录给定物质的拉曼光谱数据。 通过拉曼光谱数据的可用性进行限定, 可以检索标记为拉曼光谱数据的物质, 包括可能提供光谱图像的物质。
Refractive Index	对于通过两种介质界面的光线, 入射角的正弦与折射角的正弦之比。 条件: 温度 (° C) 波长 (Wavlen), 单位为 nm
Tensile Strength	承受拉伸载荷的材料能够承受而不撕裂的最大纵向应力, 单位为兆帕 (MPa)。 类型: 产率, 断裂 条件: 温度 (° C)

预测性质定义

Bioconcentration Factor	水生生物中物质的浓度与周围水中物质的平均浓度的比率, 由相应的预测 logD 值得出。在 25°C 下计算。 最小值: 0 最大: (无限制) 可用 pH: pH 值从 1 到 10 (默认值为 7)。pH 值的任何组合可以指定为精确检索的一部分。
Boiling Point	以摄氏度表示的温度, 在该温度下液体的蒸汽压等于大气压力。 最低: -273° C 最高: (无限制) 压力: 760Torr。

	沸点查询四舍五入到小数点后 1 位。
Density	<p>每单位体积物质的质量，克/立方厘米 (g / cm³)。</p> <p>最小值：0</p> <p>最大：（无限制）</p> <p>温度：20°C</p> <p>压力：760Torr。</p> <p>密度查询四舍五入到 3 个小数位。</p>
Enthalpy of Vaporization	<p>将液体在其沸点下转化为蒸气所需的能量 (kJ / mol)。</p> <p>最小值：0</p> <p>最大：（无限制）</p> <p>压力：760Torr。</p> <p>蒸发查询的焓四舍五入到小数点后两位。</p>
Flash Point	<p>以摄氏温度计的最低温度，在该温度下液体或挥发性固体释放足够的蒸气以与空气形成可燃混合物。</p> <p>最低：-273° C</p> <p>最大：（无限制）</p> <p>闪点查询四舍五入到小数点后 1 位。</p>
Freely Rotatable Bonds	<p>旋转导致分子中原子的相对位置发生显著物理化学变化的单个非环键的总数。</p> <p>最小值：0</p> <p>最大：（无限制）</p>
Hydrogen acceptors	<p>分子中氮和氧原子的总数。（这些原子能够与连接到氮或氧原子的氢原子形成氢键。）</p> <p>最小值：0</p> <p>最大：（无限制）</p>

Hydrogen donors	<p>连接到分子中的氮原子和氧原子的氢原子的总数。（这些氢原子能够与氢受体原子形成氢键。）</p> <p>最小值：0</p> <p>最大：（无限制）</p>
Hydrogen donors/acceptors sum	<p>氢供体和氢受体的总和。</p> <p>最小值：0</p> <p>最大：（无限制）</p>
Koc (Organic Carbon Adsorption Coefficient)	<p>对于添加到土壤和水的混合物中的物质，土壤中每单位重量有机碳吸附的物质的量与平衡时保留在水中的物质的浓度的比率由相应的预测 logD 值。在 25°C 计算。</p> <p>最小值：0</p> <p>最大：（无限制）</p> <p>可用 pH: pH 值从 1 到 10.可以指定任何 pH 值组合作为精确检索的一部分。</p>
logD	<p>对于化合物的中性和离子形式的混合物，在给定 pH 下辛醇和水之间的分配系数的对数。在 25°C 衡量。</p> <p>最低：-10</p> <p>最大：10</p> <p>可用 pH: pH 值从 1 到 10.可以指定任何 pH 值组合作为精确检索的一部分。</p> <p>logD 查询四舍五入为小数点后 2 位。</p>
logP	<p>化合物的中性形式的辛醇和水之间的分配系数的对数。在 25°C 下计算</p> <p>最小值：0</p> <p>最大：（无限制）</p> <p>logP 查询四舍五入到小数点后 3 位。</p>
Mass Intrinsic Solubility	<p>化合物的中性形式的溶解度，以溶质的克数/升 (g / L) 表示。 值为：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 极易溶: value >= 100 g / L ▪ 可溶 (默认): 10 <= 值 < 100 g / L ▪ 微溶: 1 <= 值 < 10 g / L

	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 微溶: 值<1 g / L <p>温度: °C, 室温</p>
Mass Solubility	<p>溶解在缓冲或未缓冲的水中以产生一升饱和溶液的化合物的克数。对于在未缓冲的水中的溶解度, 所得的 pH 在 25°C 下计算。 值为:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 极易溶: value >= 100 g / L ▪ 可溶 (默认): 10 <= 值 < 100 g / L ▪ 微溶: 1 <= 值 < 10 g / L ▪ 微溶: 值 < 1 g / L <p>可用 pH:</p> <p>缓冲水: pH 值从 1 到 10. 可以指定任何 pH 值组合作为精确检索的一部分。</p> <p>无缓冲水: 指定的 pH 范围 (可以是开放式)。</p>
Molar Intrinsic Solubility	<p>化合物的中性形式的溶解度以溶质的摩尔数/每升 (mol / L) 溶液表示。 值为:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 极易溶: value >= 1 mol / L ▪ 溶解 (默认): 0.1 <= 值 < 1 mol / L ▪ 微溶: 0.01 <= 值 < 0.1 mol / L ▪ 微溶: 值 < 0.01 mol / L <p>温度: 25°C, 室温</p>
Molar Solubility	<p>溶解在缓冲或未缓冲的水中以产生一升饱和溶液的化合物的摩尔数。 值为:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 极易溶: value >= 1 mol / L ▪ 溶解 (默认): 0.1 <= 值 < 1 mol / L ▪ 微溶: 0.01 <= 值 < 0.1 mol / L ▪ 微溶: 值 < 0.01 mol / L <p>可用 pH:</p> <p>缓冲水: pH 值从 1 到 10. 可以指定任何 pH 值组合作为精确检索的一部分。</p> <p>无缓冲水: 指定的 pH 范围 (可以是开放式)。</p> <p>温度: 25°C, 室温</p>
Molar Volume	<p>每立方厘米每摩尔 (cm³ / mol) 表示的物质的量。</p> <p>最小值: 0</p>

	<p>最大：（无限制）</p> <p>温度：25°C，室温</p> <p>压力：760Torr。</p> <p>摩尔体积查询四舍五入为小数点后 1 位。</p>
Molecular Weight	<p>使用 1997 IUPAC 原子量计算的分子中原子的原子量的和。</p> <p>最小值：0</p> <p>最大：（无限制）</p> <p>分子量查询四舍五入为小数点后 2 位。</p>
NMR Spectra	<p>核磁共振（NMR）光谱数据，为给定物质的特定核预测。NMR 光谱数据（光谱）的图像包括碳-13 和 1-H NMR。</p> <p>条件：</p> <p>温度（° C）</p> <p>标准（如：四甲基硅烷；如果可能，包括 CAS 登记号）</p> <p>工作频率（如：300MHz）</p>
pKa	<p>在 25°C 下酸碱解离常数（在 0-14 范围内）的负对数，以及对于分子中最酸性或最碱性位点的水溶液中的零离子强度。</p> <p>最基本位点的 pKa 是最基本位点质子化后分子的 pKa。</p> <p>最低：（无限制）</p> <p>最大：（无限制）</p> <p>限制：</p> <p>最酸性</p> <p>最碱性</p> <p>pKa 查询四舍五入到小数点后 2 位。</p>
Polar Surface Area	<p>分子中极性原子（氧，氮和连接的氢）的表面积的总和，以埃平方（Å²）表示。</p> <p>最小值：0</p>

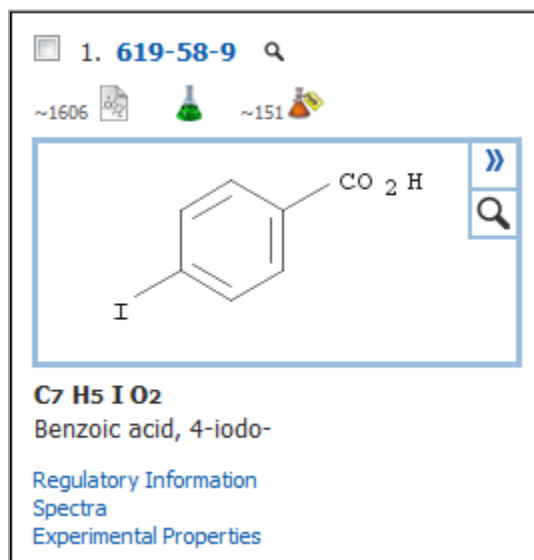
	最大：（无限制）
Vapor Pressure	在 25°C 下与其液体或固体形式平衡的蒸汽施加的压力（Torr）。


利用物质结果进行新检索

物质检索完成后，检索结果将被显示在“**Substances**”页面上。此时，可以将鼠标光标放置在任何物质上，激活对该物质进一步检索的选项（包括使用结构进行新检索）。

操作步骤

1. 将光标放在结构上。结构将被高亮显示，并出现两个图标。如：



Quick View 图标  可让您在不离开当前页面的情况下就能预览该物质信息。

2. 点击  显示物质选项，就可以基于物质开始一个新的检索。

1. 619-58-9

~1606 ~151

CAS Registry Number: 619-58-9

View Substance Detail

Explore by Structure

Synthesize this...

Get Reactions where Substance is a

Get Commercial Sources

Get Regulatory Information

Get References

Export as Image

Export as molfile

Send to SciPlanner

C₇ H₅ I O₂
Benzoic acid, 4-iodo-

Regulatory Information
Spectra
Experimental Properties

3. 选择如下的检索选项

Explore by Structure	<p>从二级菜单中选择检索类型：</p> <p>Chemical Structure - 将结构上传到“物质检索”页面上的“化学结构”区域。在此处，可以将检索类型设置为精确结构、亚结构或相似结构检索。</p> <p>Markush Patents by Structure - 将结构上传到物质检索页面上的 Markush 区域。在此处，可以将检索类型设置为仅允许指定位点可变或亚结构检索。</p> <p>Reactions - 将结构上传“反应检索”页面上的“反应结构”区域。在此处，可以将检索类型设置为仅允许指定位点可变或亚结构反应检索。反应角色设置为任意。</p>
Synthesize this	获取该物质作为产物的反应
Get Reactions where Substance is a	<p>获取物质作为指定角色的反应</p> <p>从二级菜单中选择反应角色</p> <p>Product, Reactant, Reagent, Reactant/Reagent, Catalyst, Solvent, Any Role</p>
Get Commercial Sources	检索物质的商业来源。（若该选项为灰色，则表明无法获取到该物质的商业信息）

Get Regulatory Information	获取物质的管控信息（如果该选项为灰色，则表明无法获取到该物质的管控信息）
Get References	获取报道该物质的文献

通过物质标识符检索物质

通过 CAS 登记号或完整的化学品名称（通用名、商品名或首字母缩写）检索物质。

操作步骤

1. 选择 Explore > Substance Identifier

2. 最多可以输入 25 个物质标识符，每个标识符单独一行。每个标识符最多可包含 200 个字符。
3. 点击 Search

查看，分析和限定选项

SciFinder 帮助您评估检索结果，并快速定位最相关的结果。

查看物质检索结果

检索完成后，结果将显示在“**Substances**”页面上。此时可以快速浏览物质结构和相关数据，或点击“**Substance Detail**”链接查看完整的物质记录。有控制每页显示的物质数量和列数的选项。

对物质检索结果排序

可以根据所选条件对结果进行排序。如，可以按分子量或加进数据库中的先后进行排序。

查看物质详情

点击 CAS 登记号查看物质详情。在 **Substance Detail** 页面提供了化学名称、预测和实验性质数据、光谱、引文和标引数据。

分析检索结果集

根据生物活性或物质角色等标准分析结果集。可以根据分析子集创建新的结果集，也可以清除分析以查看完整的结果集。

保留或删除所选物质

手动选择物质，然后选择保留或删除所选物质。

指定检索条件限定结果集

使用“**Refine**”选项可指定其他检索条件，例如物理属性、存在同位素或商业可提供性

返回到之前的检索结果

在执行完检索或限定操作创建一个新结果集后，一条新的操作记录就会被添加到“物质”页面顶部的“历史踪迹”中。可以点击“历史踪迹”中的操作记录获取之前的检索结果。

合并结果集


使用布尔运算符将结果集合并、取交集或排除一个结果集。

物质页面图

物质检索完成后，结果就被展示在物质结果集页面上。

A

用网格显示物质结果。在本例中，亚结构检索结果会用红色高亮显示输入的检索结构。

点击 CAS 登记号（在本例中为 619-58-9）转到“[Substance Detail](#)”页面查看物质详情。点击快速查看图标 ，就能在不离开当前页面的情况下查看物质数据。

点击以下图标，分别获取相关信息：



references 文献（在本例中，有 1802 篇）



reactions 反应



commercial sources 商业来源（在本例中，有 200 个）

	<p>点击 Key Physical Properties 显示物理属性（如熔点和沸点）的数据值。可以点击 Regulatory Information, Spectra 和 Experimental Properties 跳转到“物质详细信息”页面上的数据。</p>
<p>B</p>	<p>在当前结果集中有 460 个物质（目前，未选中任何物质）。</p> <p>点选物质旁边的选项框选中物质，或通过下拉箭头选择 Select All 选中所有物质。</p> <p>下拉菜单中还有其它选项 Deselect All, Keep Selected, 或者 Remove Selected。</p> <p>区域 D 显示的功能（如，Get References）将对选中的物质起作用。如果没有选中任何物质，则该功能将对整个结果集起作用。</p> <p>Sort by 功能能够让结果按照相关性、CAS 登记号、文献数量、供应商数量、分子量或分子式排列。</p> <p>点击蓝色箭头指定升序或降序。在本例中，物质按照相关性（物质与查询结构的匹配度）降序排列。</p>
<p>C</p>	<p>点击 Display Options 更改每页显示的物质结果数或列数（结构显示尺寸将会做相应的调整）。从出现的对话框中进行选择，然后点击“OK”。</p> <p>点击箭头转到第一页、上一页、下一页或最后一页。或者，输入页码数直接跳转到该页。</p>
<p>D</p>	<p>Get References 获取报道选中物质的文献。</p> <p>Get Reactions 获取包括所选物质的反应。</p> <p>Get Commercial Sources 获取所选物质的商业来源。</p> <p>Tools 提供了一个包含以下选项的下拉菜单：</p> <p>Combine Answer Sets 将当前结果集与已保存结果集合并</p> <p>Create Keep Me Posted Alert 运行当前结果集相同的检索式，定期获取新信息。</p> <p>Send to SciPlanner 将所选文献发送到 SciPlanner。</p>
<p>E</p>	<p>使用“Analyze”，按照所选标准分析物质。</p> <p>例，可以点击“Biological Study”子集栏，查看在生物学研究文献中出现的 90 个物质</p> <p>在 Analyze 选项卡上显示的是结果数量最多的前 10 个子集。点击“Show More”查看所有子集。</p> <p>点击“Analyze by”的下拉箭头更改分析标准：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Bioactivity Indicators ▪ Commercial Availability ▪ Elements ▪ Reaction Availability ▪ Substance Role

	<ul style="list-style-type: none">▪ Target Indicators
	通过 Refine 可以为初步检索增加检索限定标准，将物质限定为更相关的结果集。 选择 “ Refine by ” 选项，然后在出现的对话框中输入检索条件。 单击 Refine 生成新的答案集。
	“检索踪迹” 记录了结果集的改变。可以点击 “检索踪迹” 中的条目返回到之前的检索结果集。
	点击 Save , Print 或 Export 保存、打印或导出所选物质。

物质详情页面图

物质详情页面提供了物质的详细信息

Explore Saved Searches SciPlanner

Substance Identifier "118-42-3" > substances (1) > 118-42-3

Get References Get Reactions Get Commercial Sources Send to SciPlanner

Return

CAS Registry Number 118-42-3

$C_{18}H_{26}ClN_3O$

Ethanol, 2-[[4-[(7-chloro-4-quinolinyl)amino]pentyl]ethylamino]-

Molecular Weight 335.87

Melting Point (Experimental) Value: 90 °C

Boiling Point (Predicted) Value: 516.7±50.0 °C | Condition: Press: 7

Density (Predicted) Value: 1.176±0.06 g/cm3 | Condition: Temp: 20 °C Press: 760 Torr

pKa (Predicted) Value: 14.76±0.10 | Condition: Most Acidic Temp: 25 °C

Other Names
Ethanol, 2-[[4-[(7-chloro-4-quinolinyl)amino]pentyl]ethylamino]- (6Cl,8Cl)
(±)-Hydroxychloroquine
7-Chloro-4-[4-(*N*-ethyl-*N*-β-hydroxyethylamino)-1-methylbutylamino]quinoline
7-Chloro-4-[4-[ethyl(2-hydroxyethyl)amino]-1-methylbutylamino]quinoline
7-Chloro-4-[5-(*N*-ethyl-*N*-2-hydroxyethylamino)-2-pentylamino]quinoline
View more...

Expand All | Collapse All

- EXPERIMENTAL PROPERTIES
- EXPERIMENTAL SPECTRA
- PREDICTED PROPERTIES
- PREDICTED SPECTRA
- REGULATORY INFORMATION
- BIOACTIVITY INDICATORS
- TARGET INDICATORS
- CAS REFERENCE ROLES
- ADDITIONAL DETAILS

点击图中的字母, 查看物质详情页面各项的对应解释

<p>A</p>	<p>点击以下选项保存或分享当前物质：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Link 复制可粘贴到书签、文档或电子邮件中的物质的 URL ▪ Save 将物质保存到 SciFinder 中的保存的结果集 (Saved Answer Sets) 处 ▪ Print 将物质数据打印为 PDF 文件 ▪ Export 将物质数据导出为外部文件
<p>B</p>	<p>点击以下图标获取相关信息：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Get References 或者  图标获取报道该物质的文献 ▪ Get Reactions 或者  图标获取包括该物质的反应 ▪ Get Commercial Sources 或者  图标获取物质的商业信息 <p>点击 Send to SciPlanner，将物质发送到 SciPlanner library.</p>
<p>C</p>	<p>点击 Return 返回到物质结果集页面</p>
<p>D</p>	<p>物质识别信息包括 CAS 登记号、化学结构、分子式、化学名称和其他化学性质。</p> <p>点击超链接数据（如，Molecular Weight），跳转到列出该属性的数据类别处（如，“Predicted Properties”）。</p> <p>Other Names 显示物质的其他五种化学名称。点击 View more 显示化学名称的完整列表。</p> <p>将鼠标指向结构，即可以获得结构检索选项，启动新的检索。</p>
<p>E</p>	<p>实验性质数据 (Experimental Properties) 显示在选项卡上。</p> <p>点击选项卡查看该类型的属性数据。</p> <p>点击任何超链接的 Notes 获取文献。</p> <p>点击 Quick View  图标可在不离开此页面的情况下就可预览文献信息。</p>
<p>F</p>	<p>实验图谱 (Experimental Spectra) 按类型列在选项卡上。</p> <p>点击 See spectrum 在弹出窗口中显示谱图。</p> <p>可以点击任何超链接的 Notes 获取文献。</p> <p>点击 Quick View  图标可在不离开此页面的情况下即可预览文献信息。</p>
<p>G</p>	<p>预测性质数据 (Predicted Properties) 显示在选项卡上。</p> <p>点击选项卡查看该类型的属性数据。</p>

H	<p>预测图谱（Predicted Spectra）按类型列在选项卡上。</p> <p>点击 See spectrum 在弹出窗口中显示谱图。</p>
I	<p>管制信息（Regulatory Information）提供管制物质的机构信息。</p>
J	<p>生物活性（Bioactivity Indicators）信息由预定义的一组生物活性术语组成。</p> <p>每个指标的文献数量表明有多少文献同时包括了该生物活性术语和物质。</p> <p>如，有 145 篇文献同时包括了 Antimalarials 和当前物质。</p> <p>大量的文献表明该物质在该活性研究方面的可能性很大。</p> <p>点击 Bioactivity Indicator 超链接获取文献。</p>
K	<p>靶点信息（Target Indicators）由预定义的一组蛋白质、酶和其他靶点术语组成。</p> <p>每个靶点的文献数量表明有多少文献同时包括靶点术语和物质。</p> <p>如，有 110 篇文献同时包含 C-reactive protein 和当前物质。</p> <p>点击靶点链接获取文献。</p>
L	<p>文献角色（CAS Reference Roles）表格总结了物质在不同文献中的角色（研究方向）。</p> <p>点击任何蓝色超链接角色、文献或复选标记获取文献。</p>
M	<p>其他信息（Additional Details）、注册来源和已删除的 CAS 登记号等信息（这些 CAS 登记号曾与该物质关联，但目前已被替换）。</p>

查看物质结果集

检索完成后，结果将被显示在物质页面上。

Chemical Structure substructure with limiters > substances (460)

Substances: [Get References](#) [Get Reactions](#) [Get Commercial Sources](#) [Tools](#) [Create Keep Me Posted Alert](#) [Send to SciPlanner](#)

Analyze **Refine** Sort by: Relevance [Display Options](#)

0 of 460 Substances Selected Page: 1 of 31

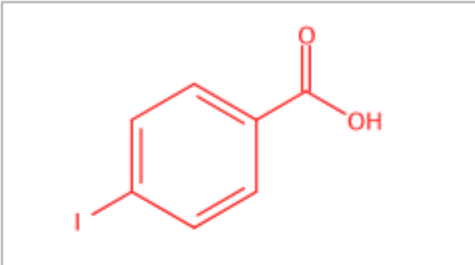
Analyze by:	Substance Role
Preparation	409
Reactant or Reagent	269
Properties	91
Biological Study	90
Uses	62
Process	46
Analytical Study	41
Prophetic in Patents	20

1. 619-58-9	2. 64297-66-1	3. 52107-87-6
C₇ H₅ I O₂ Benzoic acid, 4-iodo-	C₇ H₅ I O₄ Benzoic acid, 4-iodyl-	C₈ H₇ I O₂ Benzoic acid, 4-iodo-3-methyl-
Key Physical Properties Regulatory Information Spectra Experimental Properties	Key Physical Properties Experimental Properties	Key Physical Properties Spectra Experimental Properties

- 点击“Key Physical Properties”显示物理属性（如熔点和沸点）的数据值。

1. **619-58-9** 🔍

~1801 📄 ~200 🧪



C₇ H₅ I O₂
Benzoic acid, 4-iodo-

Key Physical Properties

Molecular Weight
248.02

Melting Point (Experimental)
Value: 270 °C

Boiling Point (Predicted)
Value: 318.5±25.0 °C | Condition:
Press: 760 Torr

Density (Predicted)
Value: 1.999±0.06 g/cm³ | Condition:
Temp: 20 °C Press: 760 Torr

pKa (Predicted)
Value: 4.02±0.10 | Condition: Most
Acidic Temp: 25 °C

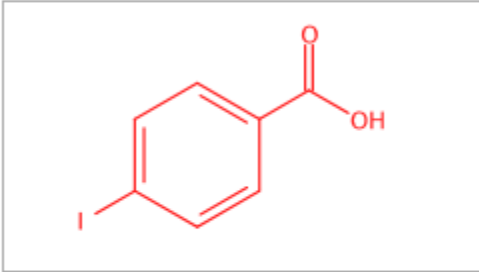
Regulatory Information
Spectra
Experimental Properties

可以点击这些物理属性的链接以及“Regulatory Information”、“Spectra”和“Experimental Properties”的链接，跳转到“[Substance Detail screen](#).”页面上的数据处。

- 也可以点击结构上方的 **CAS Registry Number** 跳转到“[Substance Detail screen](#)”页面。或者点击 **CAS Registry Number** 旁边的 [Quick View](#) 图标，在不离开当前页面情况下即可预览物质信息。

1. **619-58-9** 🔍

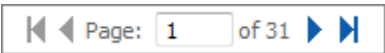

~1802 📄 ~200 🧪



C₇ H₅ I O₂
Benzoic acid, 4-iodo-

▶ **Key Physical Properties**

Regulatory Information
Spectra
Experimental Properties

- 点击箭头  Page: of 31  转到第一页、上一页、下一页或最后一页。或者，输入页码直接跳转到该页。
- 点击 **Display Options** 更改每页显示的物质数或列数。从出现的对话框中选择，然后点击 **OK**。

Display Options

Answers per Page

15 20 25 50

Displaying more answers per page may increase page-loading time.

Layout Options

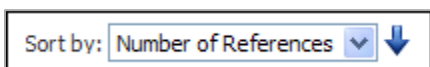
2 columns 3 columns 4 columns

物质排序

可以按照选定的标准排序结果集中的物质

操作步骤

1. 点击“**Sort by**”下拉箭头，然后选择排序选项



Relevance	按照与输入结构式的相关性排序。
CAS Registry Number	按 CAS 登记号®排序（由 CAS 分配给化学物质的唯一标识号）。数字没有化学意义。
Number of References	按照报道物质的文献数量排序
Number of Commercial Sources	按照物质的供应商数量排序
Molecular Weight	按预测的分子量值排序。
Molecular Formula	按元素数排序。
Similarity Score	按照结构相似性检索的结果进行排序。分值越高越相似

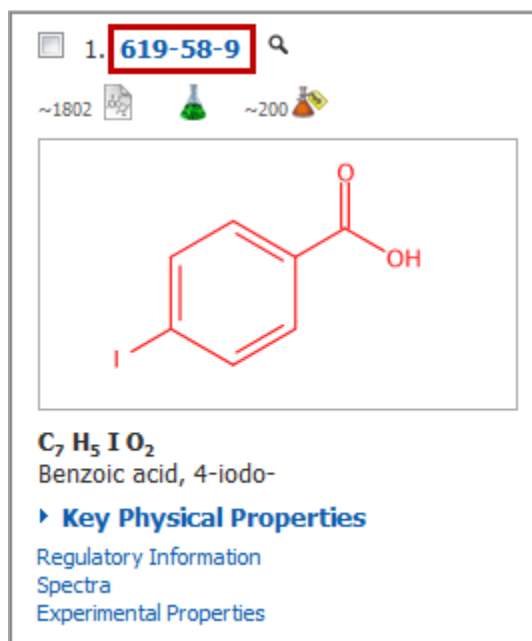
2. 点击箭头更改升序或降序，箭头向上按升序排，箭头向下按降序排

查看物质详细信息

物质详细信息显示在物质详情页面

操作步骤

1. 在物质页面，点击物质的 **CAS Registry Number**



1. **619-58-9** 🔍

~1802 📄 ~200 🧪

O=C(O)c1ccc(I)cc1

C₇H₅IO₂
Benzoic acid, 4-iodo-

▶ **Key Physical Properties**

Regulatory Information
Spectra
Experimental Properties

2. 点击 **Return** 返回物质结果集页面。

- 或者 -

点击 **Next** 或 **Previous** 查看下一个或上一个物质。

分析当前结果集

检索完成后，可以根据分析标准（如，生物活性或物质角色等）将结果筛选为子集。然后显示感兴趣的子集、或清除分析返回到完整的结果集。

注：如果结果集中物质数量超过 20,000 个，则无法完成完整的分析。在分析栏中将看到一个分析示例

操作步骤

1. Choose the **Analyze by** option (see descriptions below).

2. Click an analysis bar to view the substances in that subset.

– Or –

Click **Show More** to see more than the top ten subsets.

The screenshot shows the following analysis options in the sidebar:

Analysis Category	Count
Hypolipemic agents (all)	411
Cardiovascular agents (all)	248
Enzyme inhibitors (all)	243
Anti-inflammatory agents (all)	154
Nervous system agents (all)	140
Antidiabetic agents	107
Antitumor agents (all)	97
Cytoprotective agents (all)	90
Antiobesity agents (all)	75
Immune agents (pharmaceutical)	54

The main grid displays six substance cards, each with a chemical structure and key physical properties. The cards are numbered 1 through 6, corresponding to the instructions. The first card (1) is highlighted with a red arrow pointing to the 'Analyze by' dropdown. The second card (2) is highlighted with a red arrow pointing to the analysis bar. The 'Show More' button is highlighted with a red arrow pointing to it.

分析选项:

- **Bioactivity Indicators** -指预定义的一组大约 260 个广义和狭义的生物活性术语，CAS REGISTRYSM 物质与 CPlusSM 文献之间的关系已经被确认
- **Commercial Availability** -是否可从 CHEMCATS[®] 数据库获取商业来源信息列表
- **Elements** -物质中的元素列表
- **Reaction Availability** -是否可在 CASREACT[®] 数据库中找到反应的物质列表
- **Substance Role** -指文献中物质的描述角色（如，药物副作用、生物研究、制备等）
- **Target Indicators** -指预定义的一组约 5800 种蛋白质、酶和其他靶标术语，CAS REGISTRY 物质和 CPlus 文献之间的关系已经被确认

如果选择 **Show More**

To sort the subsets alphabetically, choose **Natural Order**. To sort the subsets by the number of associated substances, choose **Frequency**.

Click to export a list of the selected subsets to an Excel spreadsheet or PDF file.

Category	Count
<input type="checkbox"/> Hypolipemic agents (all)	411
<input checked="" type="checkbox"/> Cardiovascular agents (all)	248
<input type="checkbox"/> Enzyme inhibitors (all)	243
<input type="checkbox"/> Anti-inflammatory agents (all)	154
<input type="checkbox"/> Nervous system agents (all)	140
<input checked="" type="checkbox"/> Antidiabetic agents	107
<input type="checkbox"/> Antitumor agents (all)	97
<input type="checkbox"/> Cytoprotective agents (all)	90
<input type="checkbox"/> Antiobesity agents (all)	75
<input type="checkbox"/> Immune agents (pharmaceutical)	54

Check the selection boxes for the subsets that you want to view.

Click to view selected subsets.

查看子集后，可以：

点击Keep Analysis创建一个基于当前结果集的新结果集

- 或 -

点击Clear Analysis清除分析，返回完整结果集

Explore ▾ Saved Searches ▾ SciPlanner Save Print Export

⚠ 256 substances with the Bioactivity Indicators **Antidiabetic agents, Cardiovascular agents (all)** are displayed [Keep Analysis](#) [Clear Analysis](#)

Chemical Structure substructure > substances (2204)

SUBSTANCES ⓘ Get References Get Reactions Get Commercial Sources Tools ▾ Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

Analyze Refine Sort by: Relevance ↓ Display Options

0 of 2204 Substances Selected Page: 1 of 18

Analyze by: Bioactivity Indicators

Hypolipemic agents (all) 411

Cardiovascular agents (all) 248

Enzyme inhibitors (all) 243

Anti-inflammatory agents (all) 154

Nervous system agents (all) 140

Antidiabetic agents 107

Antitumor agents (all) 97

Cytoprotective agents (all) 90

Antiobesity agents (all) 75

Immune agents (pharmaceutical) 54

Show More

2. 811864-61-6 C27H25FN2O
1H-Pyrrole-3-carboxamide, 5-(4-fluorophenyl)-1-methyl-2-(1-methylethyl)-N,4-diphenyl-
Key Physical Properties
Experimental Properties

5. 862260-40-0 C28H23FN2O
1H-Pyrrole-3-carboxamide, 1-ethynyl-5-(4-fluorophenyl)-2-(1-methylethyl)-N,4-diphenyl-
Key Physical Properties
Experimental Properties

7. 351426-86-3 C28H27FN2O2
1H-Pyrrole-3-carboxamide, 5-(4-fluorophenyl)-1-(2-hydroxyethyl)-2-(1-methylethyl)-N,4-diphenyl-
Key Physical Properties
Experimental Properties

12. 811864-73-0 C27H25FN2O
1H-Pyrrole-3-carboxamide, 5-(4-fluorophenyl)-1-methyl-2-(1-methylethyl)-N,4-diphenyl-
Key Physical Properties
Experimental Properties

14. 811864-93-4 C28H25FN2O
1H-Pyrrole-3-carboxamide, 1-(2-hydroxyethyl)-5-(4-fluorophenyl)-2-(1-methylethyl)-N,4-diphenyl-
Absolute stereochemistry.
Key Physical Properties
Experimental Properties

17. 666714-63-2 C28H27FN2O2
1H-Pyrrole-3-carboxamide, 5-(4-fluorophenyl)-1-(2-hydroxyethyl)-2-(1-methylethyl)-N,4-diphenyl-
Key Physical Properties
Experimental Properties

注：子集栏黄色部分代表当前显示的物质。例：在显示的物质中，与 **Bioactivity Indicators**、**Cardiovascular agents (all)** 和 **Antidiabetic agents** 相关的一些物质也被包含在 **Antitumor agents (all)** 子集中。

带有词 (all) 的生物活性指标术语也是 CA 索引词。

保留或者移除选中物质

可以手动选择物质修改当前结果集，然后选择保留或删除所选物质。

操作步骤

1. 在物质页面，勾选物质
2. 选择 **Keep Selected** 或者 **Remove Selected**

The screenshot displays the SciFinder 'SUBSTANCES' interface. At the top, there are navigation buttons for 'Get References', 'Get Reactions', 'Get Commercial Sources', and 'Tools'. Below these, the 'Analyze' and 'Refine' tabs are visible. The 'Analyze' tab is selected, and a dropdown menu is open over the '2 of 460 Substances Selected' header. The menu options are 'Select All', 'Deselect All', 'Keep Selected', and 'Remove Selected'. The main area shows three chemical structures, each with a red checkmark indicating it is selected. The structures are: 1. 4-iodobenzoic acid, 2. 4-iodobenzamide, and 3. 3-iodobenzoic acid.

添加检索标准缩小结果集

使用“**Refine**”为当前结果集增加指定的检索标准。

操作步骤

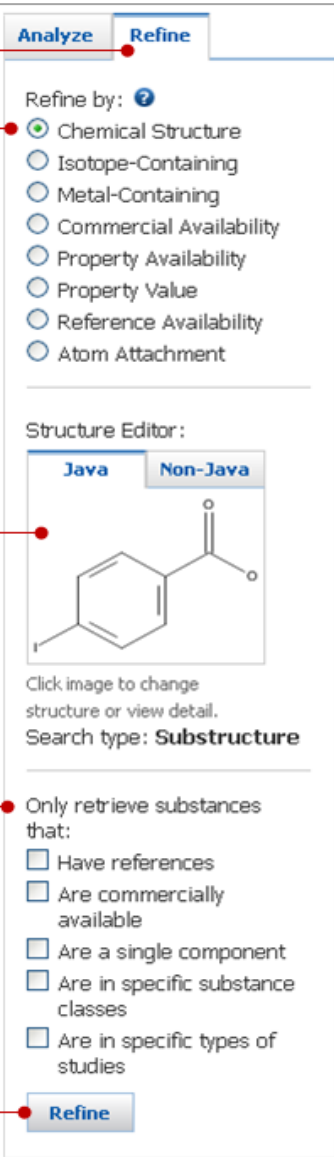
1. Click the **Refine** tab to make it active.

2. Click a **Refine by** option. Search criteria appropriate for that option appear below.

3. Enter the search criteria.

4. (Optional) Specify additional characteristics.

5. Click **Refine**.



The screenshot shows the 'Refine' tab selected. Under 'Refine by:', 'Chemical Structure' is selected. The 'Structure Editor' shows a chemical structure of a benzene ring with a carboxyl group and a substituent. Below it, the search type is 'Substructure'. Under 'Only retrieve substances that:', several checkboxes are listed: 'Have references', 'Are commercially available', 'Are a single component', 'Are in specific substance classes', and 'Are in specific types of studies'. A 'Refine' button is at the bottom.

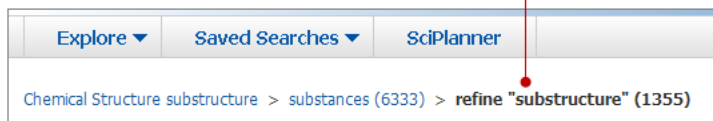
限定选项	检索标准
Chemical Structure	<p>点击 Chemical Structure 启动结构编辑器。（如果无法使用 Java 编辑器，请点击选项卡切换到 non-Java 编辑器。）</p> <p>修改查询结构，然后单击 OK 将新的查询结构上传到 Refine 选项卡。</p> <p>（可选）选中选项框将物质限定为有文献报道的物质结果集、商业可获得性结果集、单组分结果集、指定物质类别的结果集（出现一系列类别）或特定研究领域的结果集（出现一系列研究领域）。</p>
Isotope-Containing	<p>点击单选按钮选择只包含同位素（Include only isotope-containing substances）或不包含同位素的物质（Exclude isotope-containing substances）。</p>

Metal-Containing	点击单选按钮选择只包含金属原子（ Include only metal-containing substances ）或者不包含金属原子的物质（ Exclude metal-containing substances ）。
Commercial Availability	点击单选按钮选择仅包含商业可获得性（ Commercially available ）或商业不可获得（ Not commercially available ）性物质。
Property Availability	点击单选按钮获取任何属性（ Any property ）、任何预测属性（ Any predicted property ）、任何实验属性（ Any experimental property ）或者任何选中的实验属性（ Any selected experimental property ，出现一系列属性）的物质。
Property Value	<p>点击 Select Property 按钮。在 Refine by Property Value 对话框中，勾选一个 Experimental 或 Predicted property，在其右边就会出现输入区域，在此可以输入属性数值。可以选择多个属性；请在选择其他属性之前输入每个属性的值。</p> <p>（可选）勾选 Include substances with no values for selected properties 选项框。如果未选中，则限定后的结果集中将不包括这些物质。</p> <p>点击 Refine。</p>
Reference Availability	点击单选按钮获取有一篇或多篇文献（ 1 or more references ）报道的物质或无文献（ 0 references ）报道的物质
Atom Attachment	<p>点击 Select Attachments 按钮。在 Refine by Atom Attachment 对话框中，在显示的结构上点击一个原子。在右边就会列出该位点连接的原子类型（如：S, Heterocycle, Ak-Alkyl chain），同时还显示有该类型取代基的物质数量。</p> <p>选中感兴趣的附着原子选项框，然后点击 Refine。</p>

回到前一个结果集

当执行完检索或限定创建一个新结果集时，就会有一个新条目添加到物质页面顶端的“检索踪迹”里。可以点击踪迹里的条目返回到之前的检索结果集。

导航条会记录结果集的变化



操作步骤

1. 将光标放置在“历史踪迹”条目上，查看有关结果集的信息。信息将显示在弹出窗口中。

2. 点击历史条目，即可获取之前的物质结果。

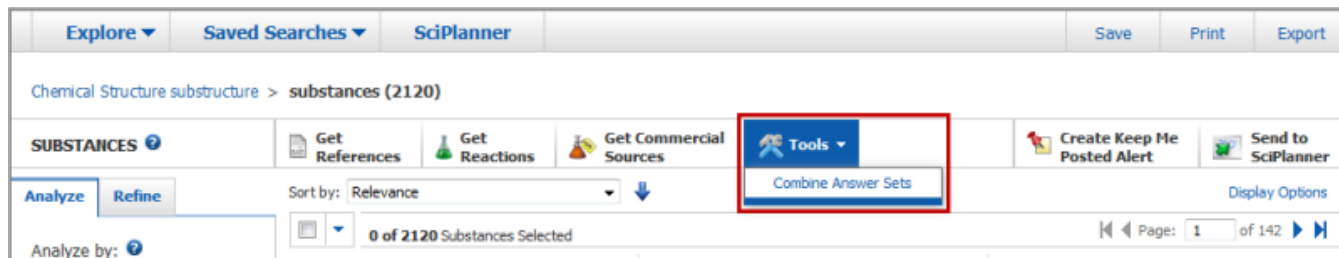
合并物质结果集

可以使用布尔运算符对结果集进行合并、取交集或排除

操作步骤

将当前结果集和之前保存的结果集进行合并

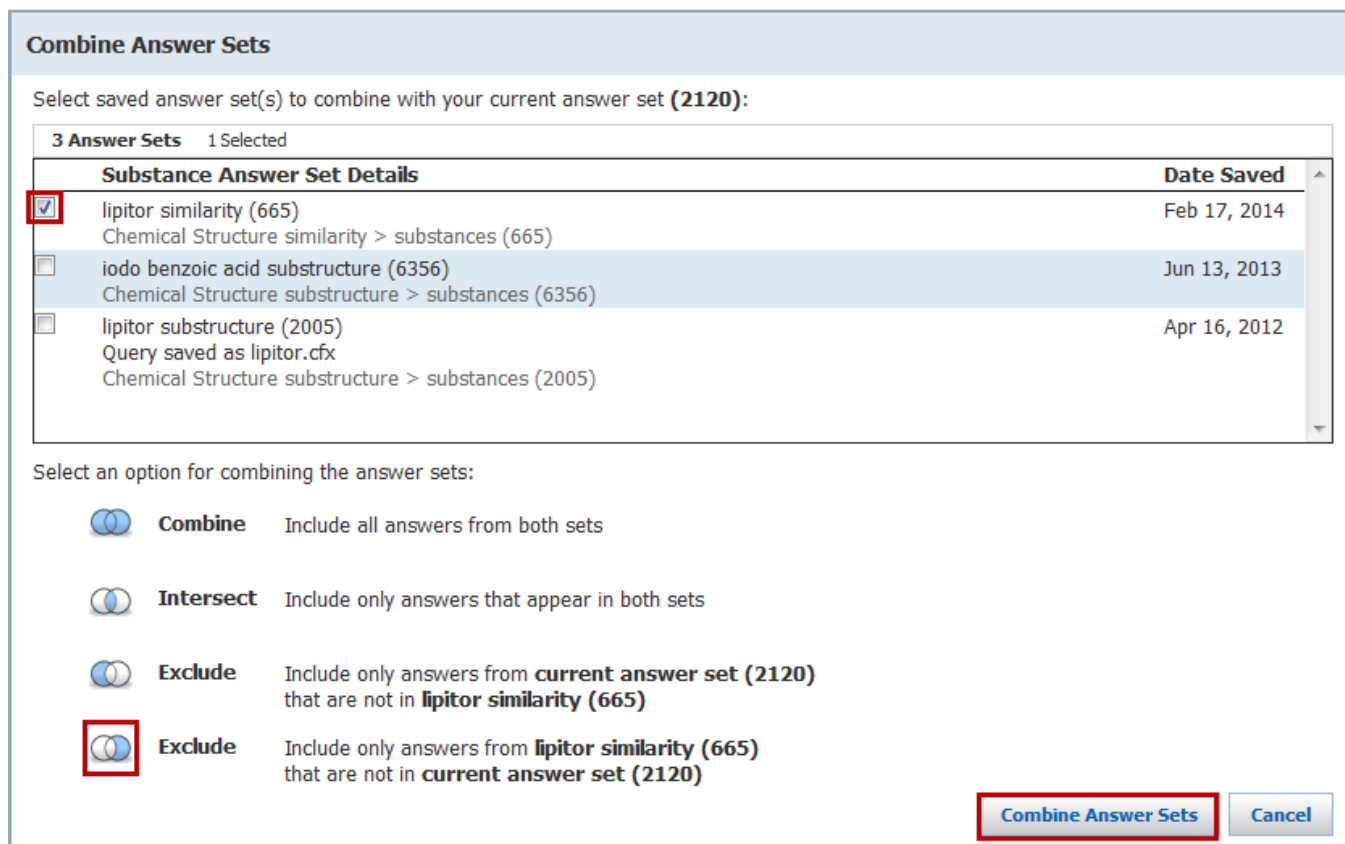
1. 选择 **Tools > Combine Answer Sets**



2. 从保存的结果集列表中，选中一个或多个已保存结果集的选择框。

注：如果选择多个保存结果集，则步骤 3 中的合并选项将被限制为合并和相交。

3. 选择您希望合并的选项。



4. 点击 **Combine Answer Sets**

合并之前保存的结果集

1. 选择 **Saved Searches > Saved Answer Sets**.
2. 点击 “**Substances**” 选项卡显示已保存的物质结果集。
3. 选中要组合的两个或多个结果集的选择框，然后点击 “**Combine Answer Sets**”。

Chemical Structure substructure > substances (2120)

SAVED ANSWER SETS **Combine Answer Sets**

SAVED SEARCHES

Saved Answer Sets
Keep Me Posted
History

2 of 3 Substance Answer Sets Selected **References (2)** **Substances (3)** **Reactions (3)**

<input checked="" type="checkbox"/>	lipitor similarity (665) Chemical Structure similarity > substances (665)	Edit	Link	Saved Feb 17, 2014
<input type="checkbox"/>	iodo benzoic acid substructure (6356) Chemical Structure substructure > substances (6356)	Edit	Link	Saved Jun 13, 2013
<input checked="" type="checkbox"/>	lipitor substructure (2005) Query saved as lipitor.cfx Chemical Structure substructure > substances (2005)	Edit	Link	Saved Apr 16, 2012

注：如果选择两个以上已保存结果集，则步骤 4 中的合并选项将被限制为合并和相交。

4. 点击需要使用的合并方式

Combine Answer Sets

Select an option for combining the two selected saved answer sets:

- Combine** Include all substances from both sets
- Intersect** Include only substances that appear in both sets
- Exclude** Include only answers from lipitor similarity that are not in lipitor substructure
- Exclude** Include only answers from lipitor substructure that are not in lipitor similarity

Combine Answer Sets **Cancel**

5. 点击 **Combine Answer Sets**

获得物质相关数据

获得相关数据的方式

按照以下操作获取单个、选中的、或整个结果集中物质的相关数据。

获得报道物质的文献

获取报道物质的文献。可以通过指定物质角色（如，分析研究、生物学研究）限定获取到的文献或获取所有相关文献。获得的结果是一个新的文献结果集，而不是物质结果集。

获取包括物质的反应

获取包括物质的反应。可以通过指定反应角色（如，产物、催化剂）限定获取到的反应或获取物质参与的所有反应。获得的结果集是一个新的反应结果集，而不是物质结果集。

获取物质供应商信息

获取物质供应商信息。获得的结果是供应商信息列表。

获取管控信息

获取物质的国际、国家或州政府机构监管的管控信息。一次可获得一个物质的管控信息。

获得报道物质的文献

可以获取单个、选中或整个物质结果集中物质的文献。

操作步骤

在物质页面

1. 点击结构上方的 **References** 图标获得单个物质的文献。

1. 619-58-9

~1802

CIc1ccc(cc1)C(=O)O

C₇ H₅ I O₂
Benzoic acid, 4-iodo-

▶ **Key Physical Properties**

Regulatory Information
Spectra
Experimental Properties

或者

勾选多个物质，然后点击 **Get References** 获得多个物质的文献

SUBSTANCES

Get References Get Reactions Get Commercial Sources Tools

Analyze Refine

Analyze by: Substance Role

Preparation 409

Reactant or Reagent 269

Properties 91

Biological Study 90

Uses 62

Process 46

Sort by: Relevance

2 of 460 Substances Selected

1. 619-58-9

~1802

CIc1ccc(cc1)C(=O)O

C₇ H₅ I O₂
Benzoic acid, 4-iodo-

2. 64297-66-1

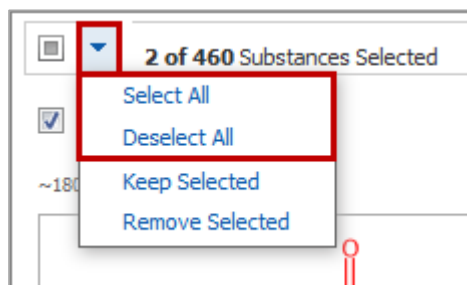
~7

CIc1ccc(cc1)C(=O)C(=O)O

C₇ H₅ I O₄
Benzoic acid, 4-iodyl-

如果未选中任何物质，则 SciFinder 会假定您想获取结果集中所有物质的文献。

注：可以通过选择下拉菜单中全选或不选所有物质。



2. 在 **Get Reference** 对话框中，选择获取所有物质（**All substances**）或选中物质（**Selected substances**）的文献。

Get References

Retrieve references for:

All substances
 Selected substances

Limit results to:

<input type="checkbox"/> Adverse Effect, including toxicity	<input type="checkbox"/> Preparation
<input type="checkbox"/> Analytical Study	<input type="checkbox"/> Process
<input type="checkbox"/> Biological Study	<input type="checkbox"/> Properties
<input type="checkbox"/> Combinatorial Study	<input type="checkbox"/> Prophetic in Patents
<input type="checkbox"/> Crystal Structure	<input type="checkbox"/> Reactant or Reagent
<input type="checkbox"/> Formation, nonpreparative	<input type="checkbox"/> Spectral Properties
<input type="checkbox"/> Miscellaneous	<input type="checkbox"/> Uses
<input type="checkbox"/> Occurrence	

For each sequence, retrieve:

Additional related references, e.g., activity studies, disease studies.

3. （可选）可以勾选物质角色限定获取到的文献。

4. 点击 **Get**。获得的文献将成为新的结果集。

可用相似的方法，在物质详情页面点击 **Get References** 获取单个物质的文献。

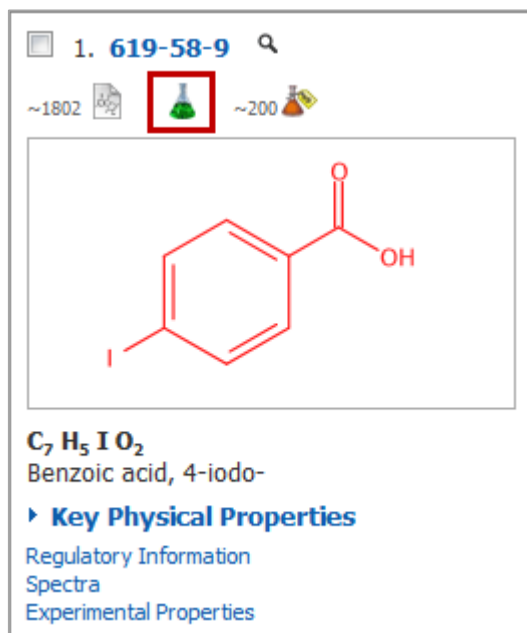
获取物质的反应

可以获得单个、选中或整个物质结果集中物质的反应。




操作步骤

在物质页面：

1. 点击结构上方的 **Reactions** 图标获取单个物质的反应



1. 619-58-9

~1802   ~200 

O=C(O)c1ccc(I)cc1

C₇H₅IO₂
Benzoic acid, 4-iodo-

▶ **Key Physical Properties**

[Regulatory Information](#)

[Spectra](#)

[Experimental Properties](#)

– 或者 –

勾选多个物质，点击 **Get Reactions** 获得多个物质的反

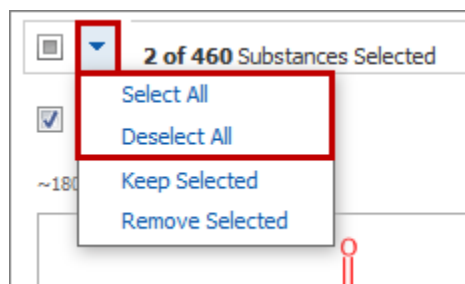
The screenshot shows the SciFinder 'SUBSTANCES' interface. At the top, there are buttons for 'Get References', 'Get Reactions' (highlighted with a red box), and 'Get Commercial Sources'. Below these is a 'Tools' dropdown. The main area shows '2 of 460 Substances Selected'. Two substances are listed:

- 1. 619-58-9: Benzoic acid, 4-iodo- ($C_7H_5IO_2$). The chemical structure is a benzene ring with a carboxylic acid group (-COOH) and an iodine atom (-I) at the para position.
- 2. 64297-66-1: Benzoic acid, 4-iodyl- ($C_7H_5IO_4$). The chemical structure is a benzene ring with a carboxylic acid group (-COOH) and an acyl iodide group (-COI) at the para position.

On the left, there is an 'Analyze by:' section with a 'Substance Role' dropdown and several horizontal bar charts representing different categories: Preparation (409), Reactant or Reagent (269), Properties (91), Biological Study (90), Uses (62), and Process (46).

如果未勾选任何物质，则 SciFinder 会假定您想获取所有物质的反应。

注： 可以通过选择下拉菜单全选或不选所有物质。



- 在 **Get Reactions** 对话框中，选择获取所有物质 (**All substances**) 或选中物质 (**Selected substances**) 的反应。

Get Reactions

Retrieve reactions for:

All substances
 Selected substances

Limit results by reaction role:

Product
 Reactant
 Reagent
 Reactant or reagent
 Catalyst
 Solvent
 Any role

3. (可选) 可通过选择反应角色限定获得的反应。

4. 点击 **Get**。获得的反应就变成一个新的结果集。

用相似的方法，可以从物质详情页面点击 **Get Reactions** 获得单个物质的反应。

获得物质的商业来源

可以获得单个、选中的或物质结果集中所有物质的供应商信息。

操作步骤

从物质页面

1. 点击结构上方的 **Commercial Sources** 图标获取单个物质的供应商信息。

1. 619-58-9

~1802 ~200

CIc1ccc(cc1)C(=O)O

$C_7 H_5 I O_2$
Benzoic acid, 4-iodo-

▶ **Key Physical Properties**

Regulatory Information
Spectra
Experimental Properties

– 或者

勾选多个物质， 然后选择 **Get Commercial Sources** 获取多个物质的供应商信息。

SUBSTANCES

Get References Get Reactions **Get Commercial Sources** Tools ▾

Analyze Refine

Sort by: Relevance ▾ ↓

2 of 460 Substances Selected

1. 619-58-9 ~200

CIc1ccc(cc1)C(=O)O

$C_7 H_5 I O_2$
Benzoic acid, 4-iodo-

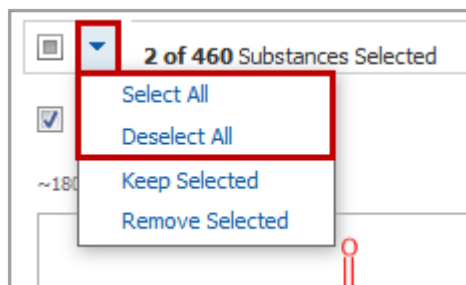
2. 64297-66-1 ~2

CIc1ccc(cc1)C(=O)O

$C_7 H_5 I O_4$
Benzoic acid, 4-iodyl-

如果未选中任何物质，则 SciFinder 会假定您希望获得所有物质的供应商信息。

注： 可以从选择下拉菜单中选择全选或取消全选所有物质。



用相似的方法，在物质详情页面点击 **Get Commercial Sources** 获取单个物质的供应商信息。

获得物质的管控信息

一次可以获得一个物质的管控信息。

操作步骤

1. 从物质页面，点击结构下方的 **Regulatory Information** 链接。

1. 619-58-9

~1802

~200

O=C(O)c1ccc(I)cc1

$C_7H_5IO_2$
Benzoic acid, 4-iodo-

▶ **Key Physical Properties**

Regulatory Information

Spectra

Experimental Properties

– 或者

在物质详情页面，点击 **REGULATORY INFORMATION**.

SUBSTANCE DETAIL [?](#) [Get References](#) [Get Reactions](#) [Get Commercial Sources](#) [Send to SciPlanner](#)

[Return](#) [Previous](#) [Next](#)

1. CAS Registry Number 619-58-9

~1,802 ~200

C₇H₅I O₂
Benzoic acid, 4-iodo-

Molecular Weight
248.02

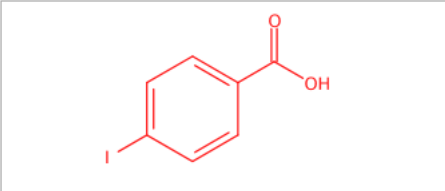
Melting Point (Experimental)
Value: 270 °C

Boiling Point (Predicted)
Value: 318.5±25.0 °C | Condition: Press: 760 Torr

Density (Predicted)
Value: 1.999±0.06 g/cm³ | Condition: Temp: 20 °C Press: 760 Torr

pKa (Predicted)
Value: 4.02±0.10 | Condition: Most Acidic Temp: 25 °C

Other Names
Benzoic acid, *p*-iodo- (6CI,8CI)
4-Iodobenzoic acid
Iodobenzene-4-carboxylic acid
NSC 176127
NSC 3773
[View more...](#)



[Expand All](#) | [Collapse All](#)

- ▶ EXPERIMENTAL PROPERTIES
- ▶ EXPERIMENTAL SPECTRA
- ▶ PREDICTED PROPERTIES
- ▶ PREDICTED SPECTRA
- ▶ **REGULATORY INFORMATION**
- ▶ CAS REFERENCE ROLES
- ▶ ADDITIONAL DETAILS

保存和分享物质结果

保存和分享物质选项

在获取到物质后，您可能需要保存物质信息以备将来使用，或者与其他 SciFinder 用户分享。

保存当前结果集

结果集保存在 SciFinder 服务器上。保存的结果集，可以在以后登录进 SciFinder 后进行获取。

打开之前保存的结果集

保存结果集中的物质将成为当前结果集，并被显示在物质页面上。

分享物质结果集

可以将单个物质、一个已保存的结果集或 KMP 结果的链接与他人分享。收到链接的人必须登录 SciFinder 才能查看相关信息。

导出物质

可以将物质导出为不同的几种格式：MOL 和 SDF 文件。

导入物质

可以将保存为 AKX 格式文件的物质导入进 SciFinder。导入的结果集将成为当前结果集。

打印物质

将物质信息打印为 PDF 文件。

将物质推送至 SciPlanner

可利用 SciPlanner 在可视化工作区将物质和其他 SciFinder 类型结果进行组织，组织后的结果可以被保存和与他人分享。

编辑已保存的结果集信息

可以更改已保存结果集的名称和描述。

删除已保存的结果集

可以从 SciFinder 服务器上删除保存的结果集。将无法再访问删除了的结果集。

保存当前结果集

结果集将被保存在 SciFinder 服务器上。可以选择 **Saved Searches > Saved Answer Sets** 获取保存的结果集。

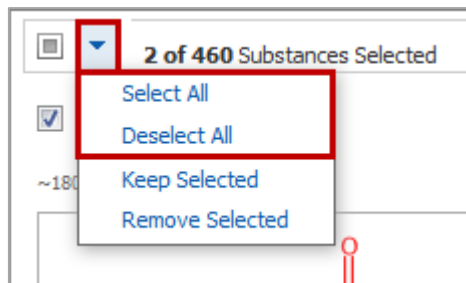
操作步骤

1. 从物质页面，选择要保存的物质，然后点击 **Save**。

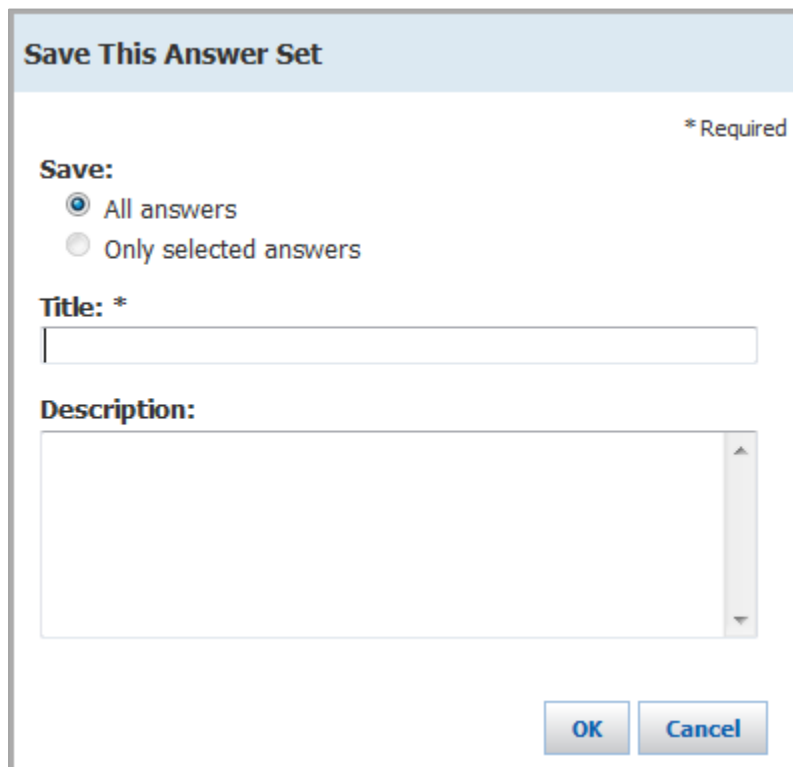
The screenshot shows the SciFinder search results page for 'substances (460)'. At the top right, there are buttons for 'Save', 'Print', and 'Export'. The 'Save' button is highlighted with a red box. Below the search bar, there are options for 'Get References', 'Get Reactions', 'Get Commercial Sources', and 'Tools'. On the left, there is an 'Analyze' sidebar with various filters. The main content area shows three search results, each with a chemical structure and associated data. The first result is '619-58-9' (Benzoic acid, 4-iodo-), the second is '64297-66-1' (Benzoic acid, 4-iodyl-), and the third is '52107-87-6' (Benzoic acid, 4-iodo-3-methyl-). Each result has a 'Key Physical Properties' link and other links like 'Regulatory Information', 'Spectra', and 'Experimental Properties'.

如果没有选择任何物质，则 SciFinder 将假定您需要保存所有物质。

注： 可以从选择下拉菜单中全选或取消全选所有物质。



2. （可选）在出现的对话框中，选择保存所有物质（**All answers**）或仅保存选中的物质（**Only selected answers**）。



Save This Answer Set

* Required

Save:

All answers

Only selected answers

Title: *

Description:

OK Cancel

3. 为结果集输入一个题目（**Title**）
4. （可选）输入描述（**Description**）
5. 点击 **OK**。

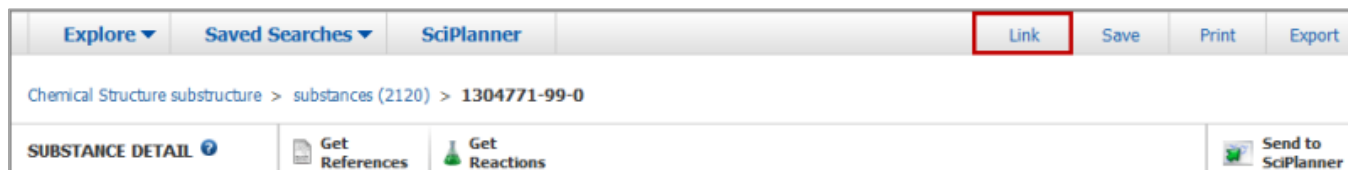
用相似的方法，在物质详情页面（[Substance Detail screen](#)）点击 **Save** 保存单个物质。

分享物质结果集

可以与他人分享单个物质、一个保存的结果集或 KMP 结果。收到链接的人必须登录 SciFinder 后才能查看相关信息。

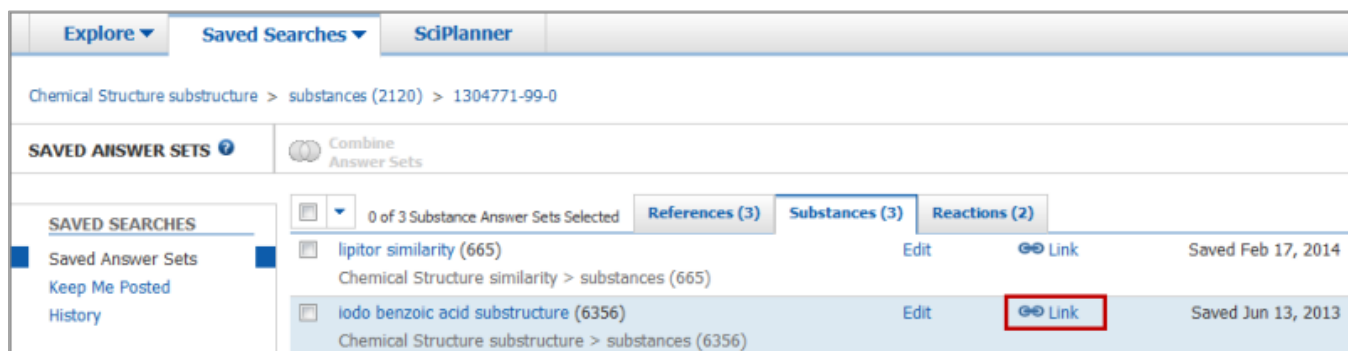
操作步骤

1. 从 **Substance Detail** 页面，点击 **Link**。



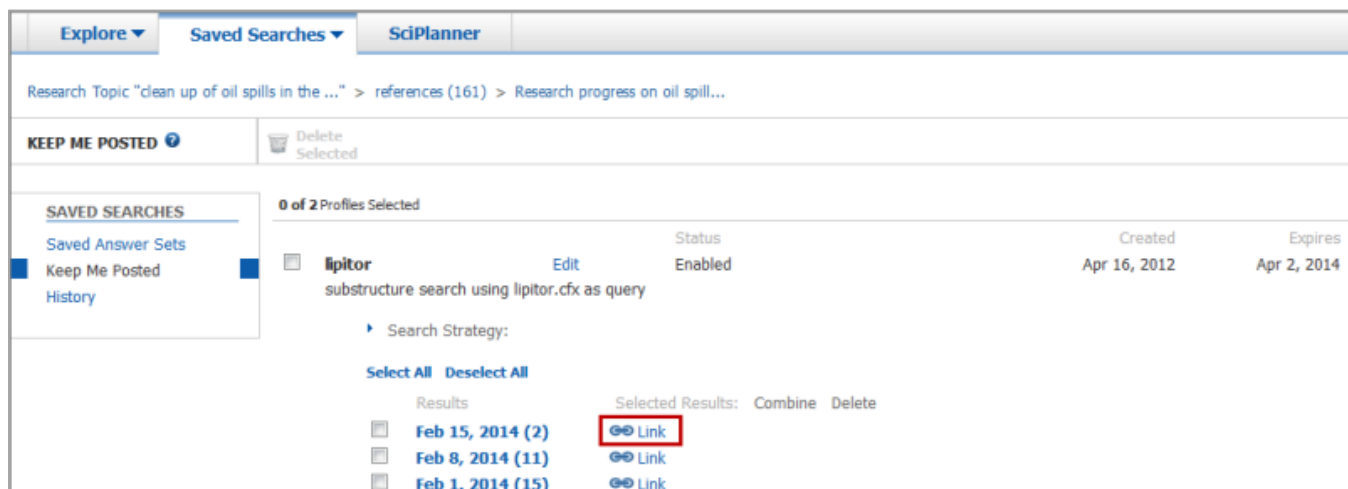
– 或者 –

从 **Saved Searches > Saved Answer Sets** 页面，点击结果集旁边的 **Link** 图标。



– 或者 –

从 **Saved Searches > Keep Me Posted** 页面，点击结果集旁边的 **Link** 图标。



2. 使用 **Ctrl-C** 或其他复制方法从弹出文本框中复制链接内容的 URL。

Copy and paste link for quick access to this result.

https://scifinder.cas.org/scifinder/view/link_v1/kmpresult.html?l=-q

Create a bookmark, save in a document, or e-mail to a colleague. If you delete this result, the link will no longer be available.

3. 将 URL 粘贴到电子邮件、文档中或用作浏览器书签。

导出物质结果集

可将物质数据导出为几种不同的格式（包括 excel 表格）。

操作步骤

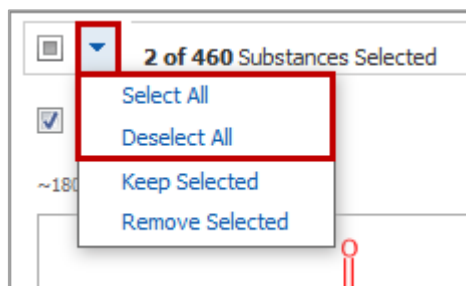
1. 在物质页面，选择要导出的物质，然后点击 **Export**。

The screenshot shows the SciFinder interface for a search of "substances (460)". The "Export" button is highlighted in red. The interface displays a list of substances with their chemical structures and names. Three substances are selected, and their details are shown below:

Substance ID	Chemical Name	Chemical Formula
1. 619-58-9	Benzoic acid, 4-iodo-	$C_7H_5IO_2$
2. 64297-66-1	Benzoic acid, 4-iodyl-	$C_7H_5IO_4$
3. 52107-87-6	Benzoic acid, 4-iodo-3-methyl-	$C_8H_7IO_2$

如果没有选择任何物质，则 SciFinder 将假定您需要导出所有物质。

注：可以在选择下拉菜单中全选或取消全选所有物质。



2. 在 **Export** 对话框中，选择导出所有结果（**ALL**）、选择的结果（**Selected**）或某个您指定范围（**Range**）内的结果。

Export * Required

Export:

All

Selected

Range

Example: 2-20

For:

Offline review

Portable Document Format (*.pdf)

Rich Text Format (*.rtf)

Properties Only - Microsoft Excel Worksheet (*.xls)

Answer Keys (*.bt)

Quoted Format (*.bt)

Tagged Format (*.bt)

Saving locally

Answer Key eXchange (*.akx)

Chemical structure processing

SDFFile (*.sdf)

Details:

File Name: *

Format:

Summary

Detail

Include:

Task History

3. 在 **For** 选项中，选择文件类型。

File type	Usage
Portable Document Format (*.pdf)	将结构图片和概要数据或详细数据导出为 PDF 文件。需要 PDF 阅读器查看和打印。
Rich Text Format (*.rtf)	将结构图片和概要数据或详细数据导出为文字处理软件（如，Microsoft® Word®）可以读取的 RTF 文件。

Properties only - Microsoft Excel worksheet	<p>将所选的实验、预测属性数据导出到 Microsoft®Excel®表格中。用 CAS 注册号、CAS 索引名称标识物质。</p> <p>当您选择此选项时，就会出现一个选择属性按钮 Select Properties。点击按钮指定实验或预测属性数据。</p>
Answer keys (*.txt)	<p>导出物质收录号（Accession Number）。可以从.txt 文件中复制登录号并粘贴到 SciFinder 物质标识符检索区，在 SciFinder 中执行物质标识符检索（Substance Identifier search）。</p>
Quoted format (*.txt)	<p>使用引用格式（quoted format）导出物质标识符信息。系统将提示您选择用于包含数据项的引用字符和用于分隔数据项的定界符。</p>
Tagged format (*.txt)	<p>用标记格式（tagged format）导出物质标识符信息。记录由 START RECORD 和 END RECORD 语句分隔。每个数据字段由名称标识，并出现在一行上。</p>
Answer Key eXchange (*.akx)	<p>可以使用导入按钮 Import 将导出为 AKX 格式的物质导入到 SciFinder 中。导入的物质会变为当前结果集。</p>
SDFFile (*.sdf)	<p>将结构和物质标识符导出为一些分子数据库程序可读的文件格式。结构以 molfile 格式表示。</p> <p>SDF 文件导出目前仅适用于商业机构。如果您在学术机构并且想将结果导出为 SDF 文件，请联系 Help@cas.org。</p>

4. 在 **Details** 下方输入相应的数据。**Details** 下方出现的字段取决于在第三步中选择的导出格式。（概要格式中的结构以 3 列显示。详细格式的结构以 1 列显示。结构图片尺寸会相应调整）。

5. 点击 **Export**

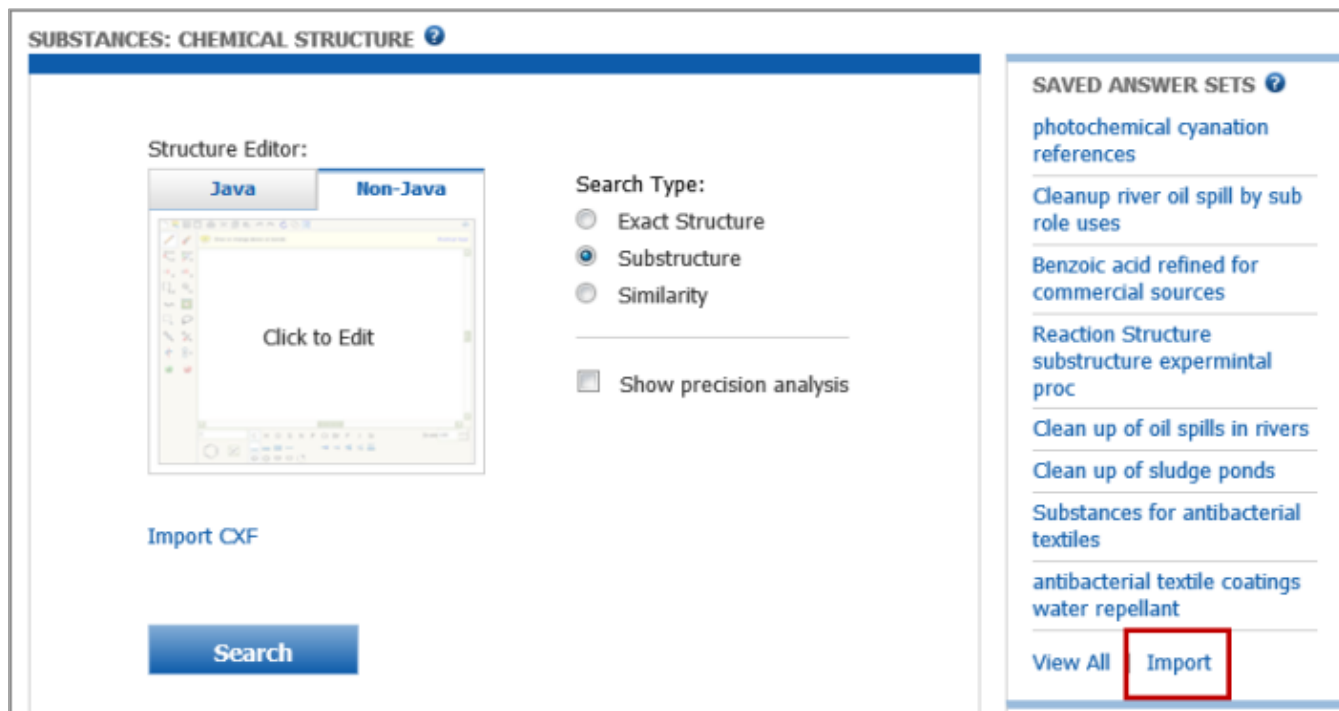
用相似的方法，在物质详情页面点击 **Export** 导出单个物质。

导入物质结果集

可以将保存为 AKX 格式文件的物质导入到 SciFinder 中。导入的结果集将成为当前结果集。

操作步骤

1. 在检索页面右侧的 **Saved Answer Sets** 下方，点击 **Import**。



2. 点击 **Browse** 定位 AKX 文件。
3. 双击 AKX 文件，或者点击选择文件，然后点击 **Open**
4. 点击 **OK**

打印物质

将物质打印为 PDF 文件。

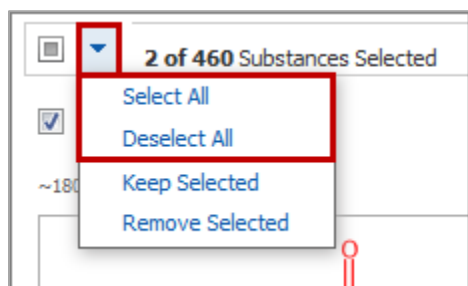
操作步骤

1. 在物质页面选择需要打印的物质，然后点击 **Print**。

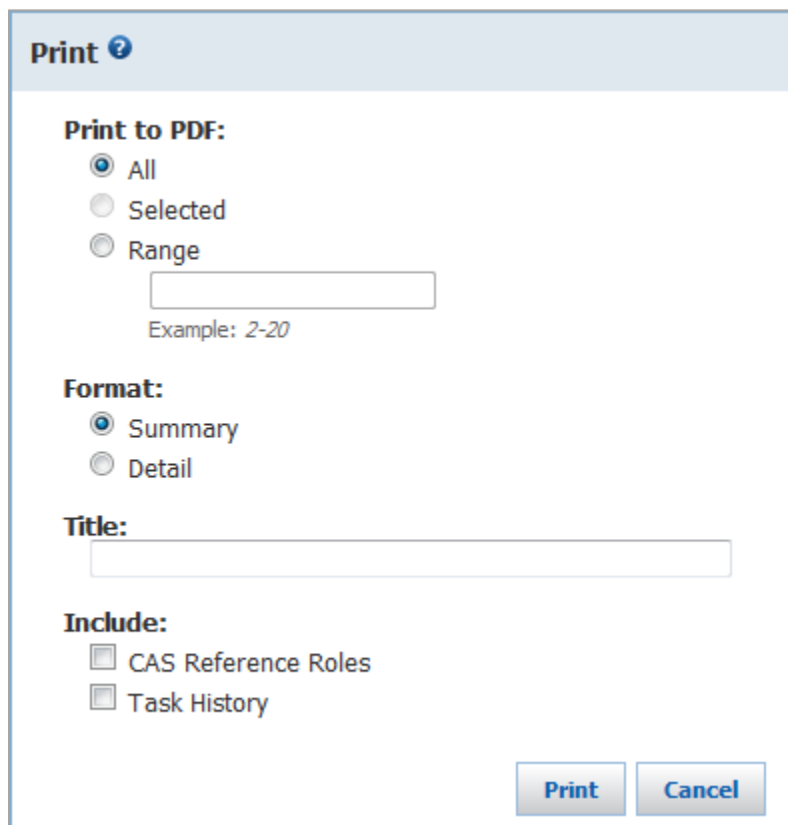
The screenshot shows the SciFinder interface for a search of substances. At the top, there are navigation tabs: 'Explore', 'Saved Searches', 'SciPlanner', 'Save', 'Print' (highlighted with a red box), and 'Export'. Below this, the search results are displayed for 'substances (460)'. The interface includes a sidebar for 'Analyze' and 'Refine' with various filters like 'Substance Role', 'Preparation', 'Reactant or Reagent', etc. The main area shows three selected substances, each with a chemical structure and a list of links for 'Key Physical Properties', 'Regulatory Information', 'Spectra', and 'Experimental Properties'. The 'Print' button is highlighted in red.

如果未选择任何物质，则 SciFinder 会假定您需要打印所有物质。

注： 可以从选择下拉菜单中全选或取消全选所有物质。



2. 在 **Print** 下方，选择打印全部物质 (**All**)、选中的物质 (**Selected**) 或者您指定范围内的物质 (**Range**)。



The image shows a 'Print' dialog box with a light blue header and a white body. The header contains the word 'Print' followed by a question mark icon. The body is divided into four sections: 'Print to PDF:', 'Format:', 'Title:', and 'Include:'. Under 'Print to PDF:', there are three radio buttons: 'All' (selected), 'Selected', and 'Range'. Below 'Range' is a text input field with the example '2-20' below it. Under 'Format:', there are two radio buttons: 'Summary' (selected) and 'Detail'. Under 'Title:', there is a long text input field. Under 'Include:', there are two checkboxes: 'CAS Reference Roles' and 'Task History'. At the bottom right, there are two buttons: 'Print' and 'Cancel'.

3. 选择 **Format**。（概要（**Summary**）格式中的结构以 3 列显示，详细（**Detail**）格式中的结构以 1 列显示，结构图片尺寸会做相应调整）。
4. （可选）输入包含在 PDF 文件中的 **Title**
5. （可选）检查 **Include** 下方的选项（概要和详情格式会有不同的选项）。
6. 点击 **Print**

用相似的方法，可在物质详细信息页面打印单一物质。输入 **Title**，并且勾选想要包含的数据，然后单击 **Print**。

Print ?

Print to PDF

Title:

Include:

- Select All
- Chemical Names
- GenBank[®] Definition & Feature Table
- Experimental Properties
- Experimental Spectra
- Predicted Properties
- Predicted Spectra
- Regulatory Information
- Bioactivity Indicators
- Target Indicators
- CAS Reference Roles
- Task History

将物质发送到 SciPlanner

利用 SciPlanner 在可视化工作区组织物质和 SciFinder 其他类型的结果集，可以保存和分享组织后的结果集。按照以下步骤将选中的物质发送到 SciPlanner。

操作步骤

1. 在物质页面，勾选想要发送到 SciPlanner 的物质，然后点击 **Send to SciPlanner**。

The screenshot displays the SciFinder interface for a search of "substances (460)". The top navigation bar includes "Explore", "Saved Searches", "SciPlanner", "Save", "Print", and "Export". Below the search bar, there are buttons for "Get References", "Get Reactions", "Get Commercial Sources", and "Tools". A "Send to SciPlanner" button is highlighted with a red box. The main content area shows a list of substances with checkboxes and chemical structures. Three substances are visible:

Substance ID	Chemical Name	Chemical Formula
1. 619-58-9	Benzoic acid, 4-iodo-	$C_7H_5IO_2$
2. 64297-66-1	Benzoic acid, 4-iodyl-	$C_7H_5IO_4$
3. 52107-87-6	Benzoic acid, 4-iodo-3-methyl-	$C_8H_7IO_2$

Each substance entry includes a checkbox, a chemical structure, and a list of properties such as "Key Physical Properties", "Regulatory Information", "Spectra", and "Experimental Properties".

用相似的方法，可以在物质详情页面点击 **Send to SciPlanner** 将一个物质发送到 SciPlanner。

打开一个已保存的结果集

已保存结果集中的物质将成为当前结果集，并显示在物质页面上。

操作步骤

1. 点击检索页面右侧边栏中的 **Saved Answer Sets** 下的结果集名称，打开一个已经被保存的结果集。如：

The screenshot shows the SciPlanner interface. On the left is a navigation menu with categories: REFERENCES, SUBSTANCES, and REACTIONS. The main area is titled 'SUBSTANCES: CHEMICAL STRUCTURE' and contains a 'Structure Editor' with 'Java' and 'Non-Java' tabs, a search type selection (Exact Structure, Substructure, Similarity), and a 'Search' button. On the right, the 'SAVED ANSWER SETS' sidebar lists several saved sets, with 'iodo benzoic acid substructure' highlighted by a red box. Below this sidebar is a 'KEEP ME POSTED' section with dates.

或者

1. 如果结果集未列在 SAVED ANSWER SETS 下方，则请点击右侧栏上的 **View All**，或点击 **Saved Searches > Saved Answer Sets**。

This screenshot shows the same SciPlanner interface as above, but with the 'Saved Searches' dropdown menu open. The 'Saved Answer Sets' option is highlighted with a red box. The main interface remains the same, showing the search options and the 'View All' button in the 'SAVED ANSWER SETS' sidebar, which is also highlighted with a red box.

2. 点击 **Substance**。
3. 点击结果集名称

The screenshot shows the SciFinder interface with the 'Saved Searches' tab active. Under 'SAVED ANSWER SETS', there are two tabs: 'References (3)' and 'Substances (2)'. The 'Substances (2)' tab is selected. Below the tabs, there are two search results:

Search Result	Actions	Saved Date
Iodo benzoic acid substructure (6356) Chemical Structure substructure > substances (6356)	Edit, Link	Saved Jun 13, 2013
lipitor substructure (2005) Query saved as lipitor.cfx Chemical Structure substructure > substances (2005)	Edit, Link	Saved Apr 16, 2012

编辑已保存的结果集信息

可以更改已保存结果集的名称或描述。

操作步骤

1. 选择 **Saved Searches > Saved Answer Sets**。
2. 点击要编辑的结果集类型（文献、物质、反应）。
3. 点击要更改的结果集旁边的 **Edit**。

This screenshot is similar to the previous one, but the 'Edit' button for the 'lipitor substructure (2005)' result is highlighted with a red box.

Search Result	Actions	Saved Date
Iodo benzoic acid substructure (6356) Chemical Structure substructure > substances (6356)	Edit, Link	Saved Jun 13, 2013
lipitor substructure (2005) Query saved as lipitor.cfx Chemical Structure substructure > substances (2005)	Edit , Link	Saved Apr 16, 2012

4. 根据需要修改 **Title** 或 **Description**。

Edit Answer Set

* Required

Title: *
lipitor substructure

Description:
Query saved as lipitor.cfx

OK Cancel

5. 点击 OK。

删除已保存的结果集

可以从 SciFinder 服务器中删除已保存的结果集。将不能再获取到删除的结果。

操作步骤

1. 选择 Saved Searches > Saved Answer Sets。
2. 点击要删除的结果集类型（文献、物质、反应）。
3. 点击要删除的结果集旁边的选择框。
4. 从选择选项中选择 Delete Selected。

Explore Saved Searches SciPlanner

SAVED ANSWER SETS Combine Answer Sets

SAVED SEARCHES

1 of 2 Substance Answer Sets Selected

Select All
Deselect All
Delete Selected

Substance Answer Sets	References (3)	Substances (2)	Reactions (3)
lipitor substructure (6356)			Edit Link Saved Jun 13, 2013
lipitor substructure > substances (6356)			
Query saved as lipitor.cfx (2005)			Edit Link Saved Apr 16, 2012
Chemical Structure lipitor.cfx > substances (2005)			



SciFinder® 使用手册

第八卷 反应检索

美国化学文摘社

CAS, a division of American Chemical Society

8. 反应检索

反应检索操作流程.....	1
检索反应选项视图.....	2
反应检索	4
反应检索选项.....	4
通过反应结构检索.....	5
高级检索选项.....	7
指定溶剂	10
指定不参与反应的官能团.....	14
获得相似反应.....	17
查找其他反应.....	18
查看, 分析和筛选反应结果集.....	20
查看, 分析和筛选选项.....	20
反应页面图示.....	21
反应详情页面图示.....	25
查看反应结果.....	27
反应分类	29
反应排序	30
查看实验操作过程.....	31
查看反应详情.....	34
保留或取消选中的反应.....	38
分析当前结果集.....	39
添加检索标准缩小结果集.....	42
返回到先前的一个结果集.....	44
合并反应结果集.....	45
获取与反应相关的数据.....	47
获取文献	47
获取一篇反应文献的全文.....	48
获取物质信息.....	50
获取反应参与物的商业来源.....	53
保存和分享反应的选项.....	54

保存当前结果集.....	56
分享反应结果.....	57
导出反应结果.....	58
导入反应结果.....	60
打印反应	61
将反应发送到 SciPlanner.....	63
打开一个保存的结果集.....	64
编辑保存的结果集信息.....	65
删除保存的结果集.....	66

反应检索操作流程

请按照下述流程查找感兴趣的反应并与他人分享。您可以浏览相应的目录查看每步操作详情。

进行 反应检索

执行一次反应检索

在 **Reaction Structure** 中，您可以将结构指定为反应物、试剂或产物。可以通过更多其他指定的条件（如溶剂或不参与反应的官能团等）来限定检索结果。

基于一条获取到的反应，您可以通过 **Get Similar Reactions**（具有相似反应中心的反应），或 **Find Additional Reactions**（获取来自文献的反应，这些文献中报道了相同产物制备信息）

查看、分析和筛选 反应结果

查看、分析和筛选反应结果

聚焦最相关的结果：

- 查看反应式、浏览反应步数、反应阶段和实验操作过程。可以通过 [MethodsNow](#) 查看反应详情。
- 通过 **Transformation**（按照转化类型分类反应）或 **Document**（每篇文献只显示一条代表性反应）对反应进行分类。
- 根据选择的标准（如产率等）对反应进行排序。
- 使用如催化剂、溶剂或创建筛选展示选项等参数分析反应
- 添加更明确的检索标准（如反应步数等）缩小结果集

可以保留或删除选中的反应以及合并多个结果集。

获得反应相关数据

获得反应相关数据

可以获取到反应的文献或获取反应参与物的物质信息（包括商业来源）

保存分享反应结果

保存并分享反应结果

保存、打印或导出反应结果集。也可以将某条反应链接发送给同事。

检索反应选项视图

当您选择检索反应（反应结构）时，就出现该界面。

点图中字母，查看反应检索页面各项的对应解释

A

Reaction Structure 检索使用的是图形检索，您可以在结构编辑器中绘制结构式。

	<p>点击编辑器图标，打开结构编辑器并绘制反应式。（可以点击标签，转换 Java 或非 Java 编辑器。Java 编辑器需要 Java JRE 插件）。</p> <p>另外，可以点击 Import CXF 导入一条之前被保存为 .cxf 文件的反应式。</p> <p>可以通过从  中选择限制条件限定检索结果。点击 Search 执行检索。</p>
	<p>当点击 Advanced Search 时，检索限定条件就会出现。如果希望一直显示检索限定条件，则请勾选 Always Show。</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 点击 Select Solvents 指定需要的溶剂。 ▪ 点击 Select Groups 指定不参与反应的官能团。 ▪ 输入限定条件或点击选项指定其他限制条件。 <p>除非检索要求非常确定，否则一般不建议在开始检索时就使用限定条件（如果确实需要，则可以在获取到检索结果后，使用 Refine 功能限定检索结果）。</p>
	<p>此处显示的是最近保存的结果集。</p> <p>请点击结果集名称（如 Multistep 2）获取保存的结果集。</p> <p>点击 View All 查看、编辑、删除或合并所有保存的结果集。</p> <p>点击 Import 导入之前以 AKX 格式导出的文件（或已被转化为 AKX 的文件）。</p>
	<p>此处显示的是来自定题提醒（KMP）的最新结果。KMP 会每周或每月自动检索新的结果。不能为反应检索创建 KMP。</p> <p>点击 KMP 名称下面的日期（如：Jan 30, 2016），可以查看结果集中的结果。括号中的数字表示结果集中的结果数量。</p> <p>点击 View All 查看、删除或合并 KMP 结果集中所有的结果。</p>
	<p>从已保存的检索选项中选择访问：</p> <p>Saved Answer Sets – 查看、编辑、删除或合并保存的结果集</p> <p>Keep Me Posted – 查看、删除或合并定题提醒的结果集</p> <p>History – 查看、打印或导出当前或之前 SciFinder 检索时的操作历史</p>
	<p>进入 SciPlanne 可视化组织文献、物质和反应。</p>
	<p>使用以下功能：</p> <p>Preferences – 设置 SciFinder 系统参数</p> <p>SciFinder Help – 进入选项：</p>

<ul style="list-style-type: none">▪ Help 帮助▪ Training 培训▪ What's New 新内容▪ Contact Us 联系我们 <p>Sign Out – 退出 SciFinder</p>

反应检索

反应检索选项

通过反应结构检索

通过反应结构检索

获取与反应参与物（反应物、试剂或产物）结构匹配的反应

限定检索结果

限定检索结果

通过指定其他检索标准（如溶剂、不参与反应的官能团、反应步数、分类、来源、公开年等）限定检索结果

指定溶剂

指定溶剂

通过指定某个或某类溶剂限定反应

指定不参与反应的官能团

指定不参与反应的官能团

通过指定某个或某类不参与反应的官能团限定反应

获得相似反应

获得相似反应

根据当前结果集中的一条反应，获取到与其具有相似反应中心的反应。

发现其他反应

发现其他反应

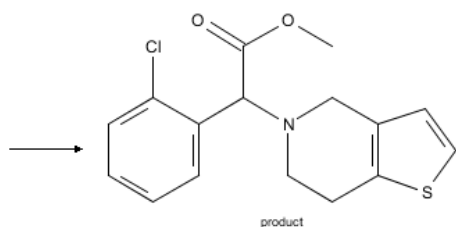
根据当前结果集中被选中的反应，获取到来自文献的其他反应（这些文献报道了同一个产物的制备信息）

通过反应结构检索

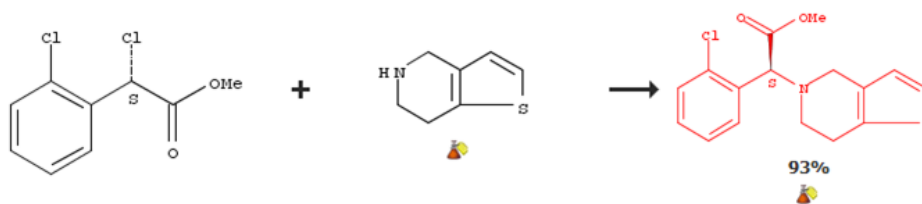
反应结构检索获取到的反应是指与绘制的反应物、试剂或产物结构匹配的反应。根据需求按以下方式指定想要获取的结构：

- **Variable only at the specified positions:** 除在查询结构中定义的可变基团（如可变原子或 R-group, X=卤素）外，获取到的物质必须与输入的结构完全匹配。
- **Substructures of more complex structures:** 将获取到查询结构所有原子和键都开放的更复杂结构。

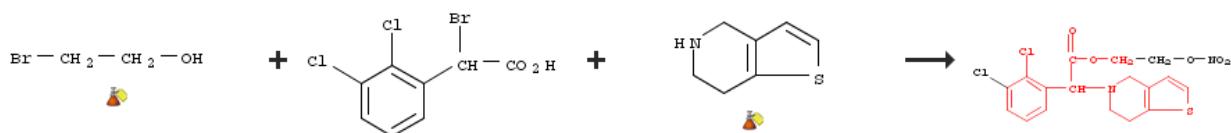
Example reaction query



Variable only at the specified positions result

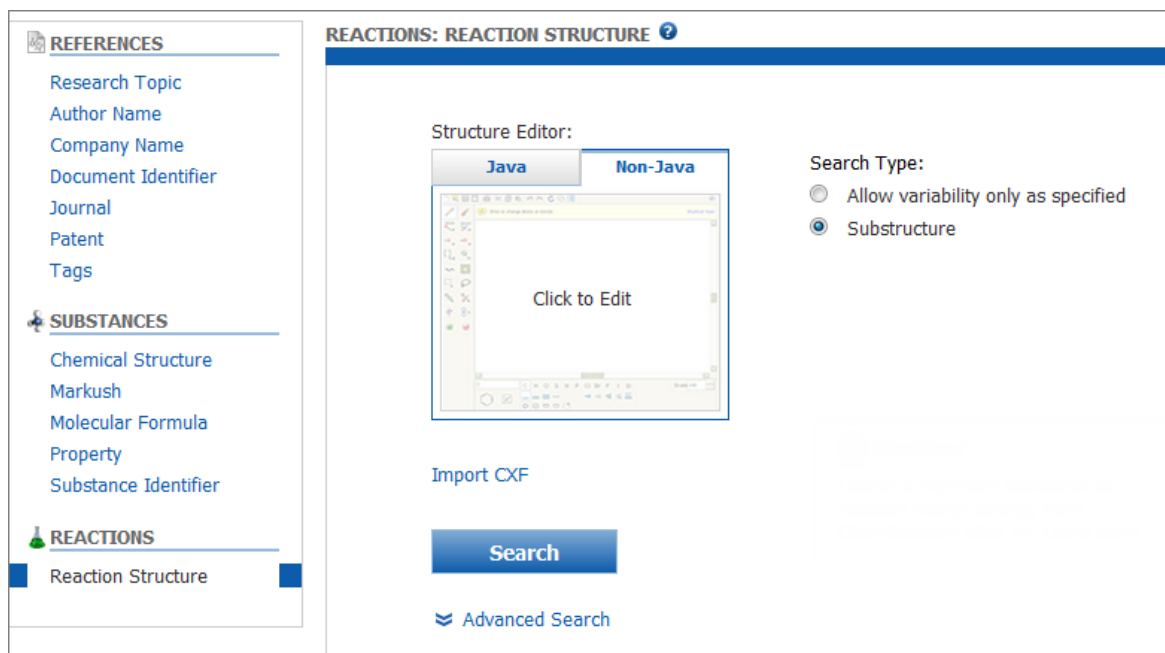


Substructures of more complex structures result



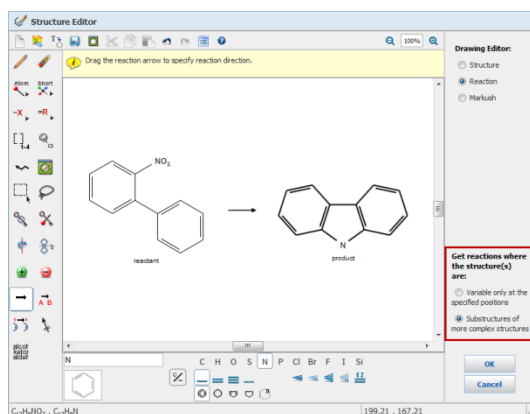
操作步骤

1. 选择 **Explore > Reaction Structure**。



2. 点击 **Import CXF** 导入之前保存为 **CXF 格式** 的结构。
3. 请点击结构编辑器打开使用**结构编辑器**。（可以点击标签切换 **Java** 和非 **Java** 编辑器。**Java** 编辑器需要一个 **Java JRE** 插件。）

通过结构式画反应，并指定反应角色： 反应物、试剂或产物。



4. 指定检索类型：
 - **Variable only at the specified positions** 除了查询结构中的可变基团（如：X = 任意卤素或 R-基团）外，获取到的物质必须和输入的查询结构完全一致。
 - **Substructures of more complex structures:** 获取到包括查询结构所有原子和键都开放的更复杂的结构。

5. 点击 **OK**，将查询结构上传到检索页面。
6. （可选）点击 **Advanced Search**，指定其他检索限定条件。如果希望一直显示检索限定条件，则请勾选 **Always Show**。

The screenshot shows the 'Advanced Search' interface with the following options:

- Advanced Search** (selected) and **Always Show** (checkbox)
- Solvents**:
- Non-participating Functional Groups**:
- Number of Steps**: Examples: 1, 1-3, 1-, -3
- Classifications**:

<input type="checkbox"/> Biotransformation	<input type="checkbox"/> Non-catalyzed
<input type="checkbox"/> Catalyzed	<input type="checkbox"/> Photochemical
<input type="checkbox"/> Chemoselective	<input type="checkbox"/> Radiochemical
<input type="checkbox"/> Combinatorial	<input type="checkbox"/> Regioselective
<input type="checkbox"/> Electrochemical	<input type="checkbox"/> Stereoselective
<input type="checkbox"/> Gas-phase	
- Sources**:
 - Any source
 - Patents only
 - Sources other than patents
- Publication Years**: Examples: 1995, 1995-1999, 1995-, -1995

注：除非检索要求非常明确，否则不建议在一开始就使用限定选项。如果确实有需要，则可以使用 **Refine** 缩小结果集。

7. 点击 **Search**。

高级检索选项

除了限定反应结构外，还可以通过其他限定条件进一步限制检索结果。点击 **Advanced Search** 显示检索限定条件。（勾选 **Always Show**，将始终显示检索限定条件。）

⏪ Advanced Search
 Always Show

Solvents

Non-participating Functional Groups

Number of Steps

Classifications

Sources

Publication Years

[Select Solvents](#)

[Select Groups](#)

Examples: 1, 1-3, 1-, -3

Biotransformation

Non-catalyzed

Catalyzed

Photochemical

Chemoselective

Radiochemical

Combinatorial

Regioselective

Electrochemical

Stereoselective

Gas-phase

Any source

Patents only

Sources other than patents

Examples: 1995, 1995-1999, 1995-, -1995

反应检索限定条件

检索限定条件	要指定的标准:
Solvents	点击 Select Solvents 。在溶剂层级对话框中，选择某个或某类溶剂（参阅 Specify Solvents 获取详细操作信息）。点击 Close 关闭对话框。被选中的溶剂数量将出现在溶剂限定条件页面上。
Non-participating Functional Groups	点击 Select Groups 。在对话框中，选择某个或某类不参与反应的官能团。（参阅 指定不参与反应的官能团 获取详细操作信息）。点击 Close 关闭对话框。选中的官能团数量将出现在不参与反应官能团限定条件页面上。

Number of Steps	输入一个数字或一个数字范围。可以使用连字符指定一个开放的范围，如 -3 代表 3 步或少于 3 步的反应。
Classifications	<p>勾选感兴趣的反应分类：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ .Biotransformation: 利用微生物细胞或细胞产物（如脂肪酶）影响类似于生物体系中看到的分子变化的反应，如酶还原。 ▪ Catalyzed: 需要催化剂的反应。 ▪ Chemoselective: 通常在其他不参与反应的官能团存在的情况下，倾向于在某个特定的官能团发生反应的反应 ▪ Combinatorial: 组合化学合成路线中的反应。 ▪ Electrochemical: 发生在电化学电池中，并在电池中产生电流通道的化学反应 ▪ Gas-phase: 所有参与反应的物质都是气相的反应。 ▪ Non-catalyzed: : 不需要催化剂的反应。 ▪ Photochemical: 需要使用光的反应。 ▪ Radiochemica: 同位素标记物的反应。 ▪ Regioselective: 其中一个可能的异构体为主要产物的反应。 ▪ Stereoselective: 倾向于生成其中一个可能的立体异构体产物的反应。
Sources	选择文献类型。
Publication Years	输入一个四位数的年份或年份范围。可以使用一个连接符指定一个开放的范围，比如 1995- 代表 1995 年及之后的年份。

指定溶剂

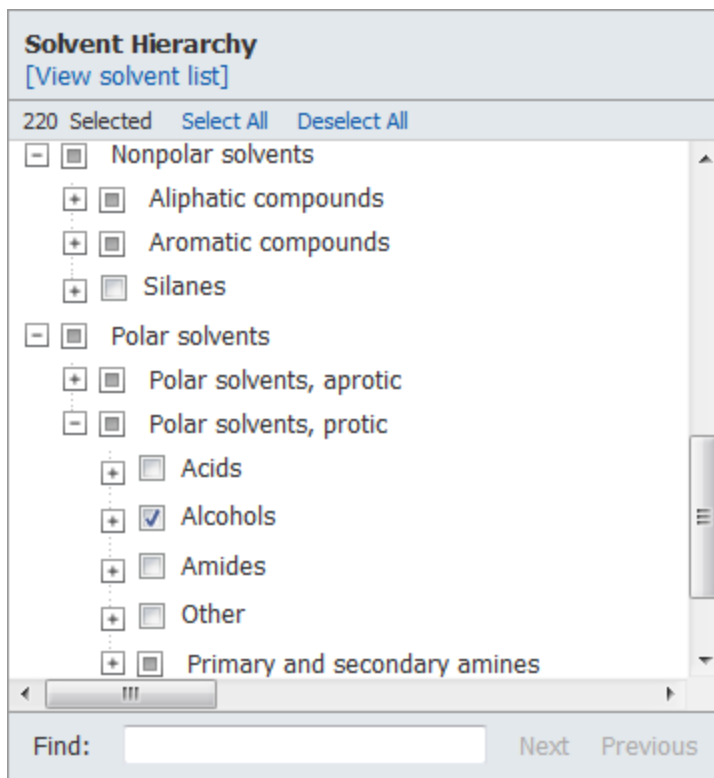
可以通过指定某种或某类溶剂限定反应检索结果。

操作步骤

1. 如果需要，请点击 **Advanced Search** 显示检索限定条件。然后点击 **Select Solvents**。

The screenshot displays the 'REACTIONS: REACTION STRUCTURE' search interface. It features a 'Structure Editor' with 'Java' and 'Non-Java' tabs. A chemical structure is shown in the editor, with an arrow pointing to it and the text 'Click image to change structure or view detail.' Below the editor is an 'Import CXF' button and a 'Search' button. To the right of the editor, there are search type options: 'Allow variability only as specified' (unselected) and 'Substructure' (selected). At the bottom of the interface, there is a 'Solvents' section with a 'Select Solvents' button highlighted by a red box.

2. 在溶剂层级对话框中：
 - 如果需要，请点击加号可展开某一类溶剂。
 - 勾选某一种溶剂前的选项框，或勾选某一类溶剂前的选项框来选择溶剂。

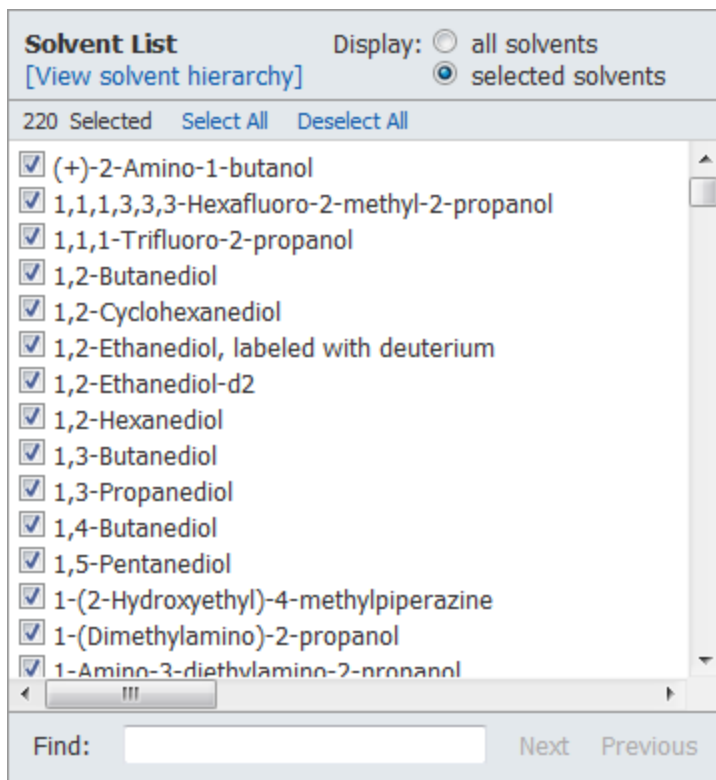


某一类溶剂旁出现的阴影选项框表示已经选中了此类溶剂中的部分溶剂，但是没有选择所有溶剂。

由于某种溶剂可能会属于多种类型的溶剂，因此选择一种溶剂可能会导致多类溶剂旁出现阴影选项框。

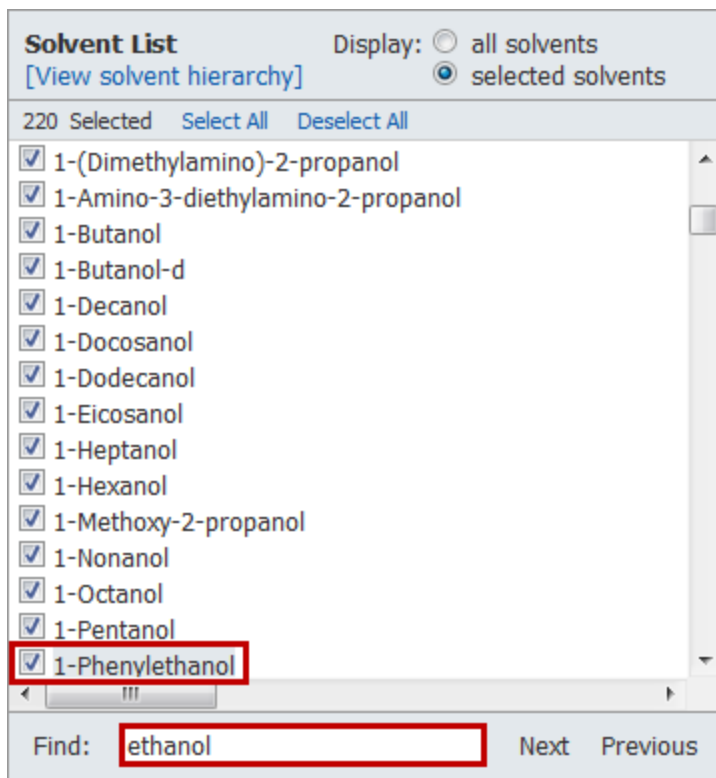
选中溶剂的总数（在这个例子中是 **220**）会显示在状态条上。取消所有选中的溶剂，可以点击 **Deselect All**。

3. 点击 **View solvent list** 按字母顺序显示溶剂，对话框则变为显示溶剂列表。（点击 **View solvent hierarchy**, 即重新回到溶剂层级页面）



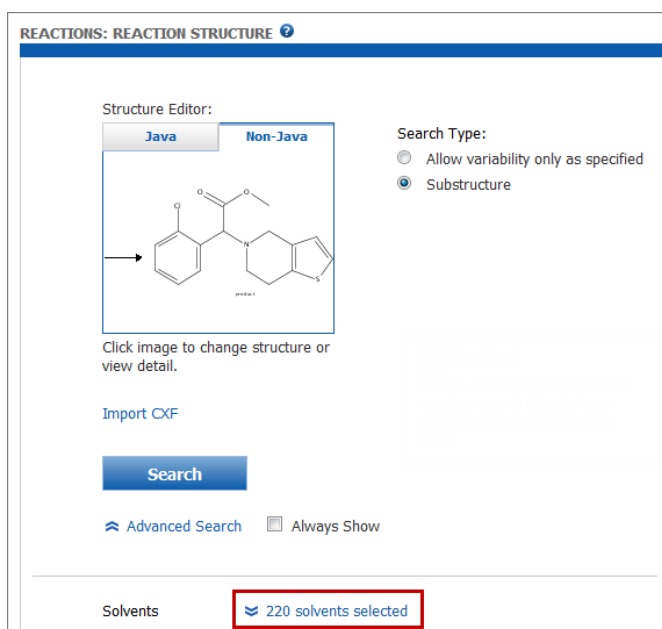
可以点击单选按钮来显示**所有溶剂**，或显示部分**被选中的溶剂**（如上所示）。可以选择或取消选择来自溶剂列表的个别溶剂。

4. 要检索一个指定的溶剂，则请在在对话框的最底部的 **Find** 框中输入溶剂名称。然后点击 **Next**。



首先出现的包含有指定名称片断的溶剂名会被高亮显示。要查找下一个物质，则请点击 **Next**。要返回到上一个物质，则请点击 **Previous**。

- 当完成了溶剂选择，则请点击对话框上方的 **Close** 链接。被选中的溶剂数会出现在溶剂限定条件旁。



指定不参与反应的官能团

可以通过指定在反应中必须出现不参与反应的官能团限定反应检索结果。

操作步骤

1. 如果需要，请点击 **Advanced Search** 来显示检索限定条件。然后点击 **Select Groups**。

REACTIONS: REACTION STRUCTURE ?

Structure Editor:

Java Non-Java

Search Type:

- Allow variability only as specified
- Substructure

Click image to change structure or view detail.

Import CXF

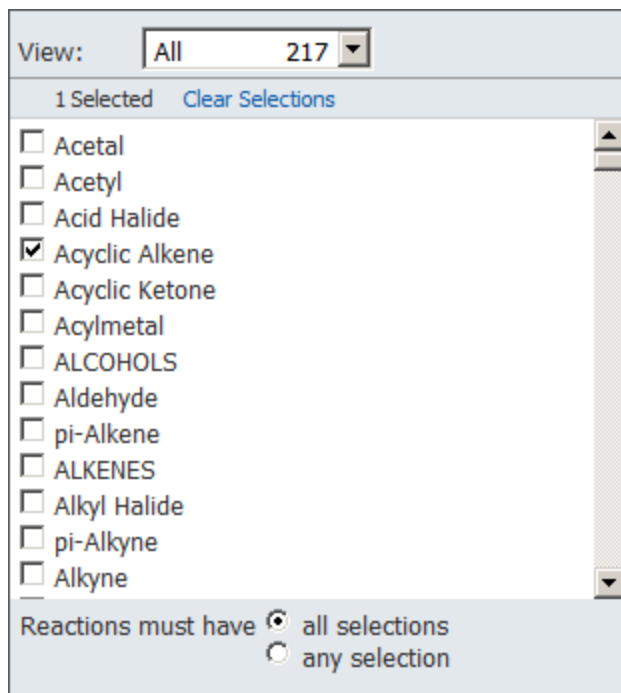
Search

Advanced Search Always Show

Solvents [Select Solvents](#)

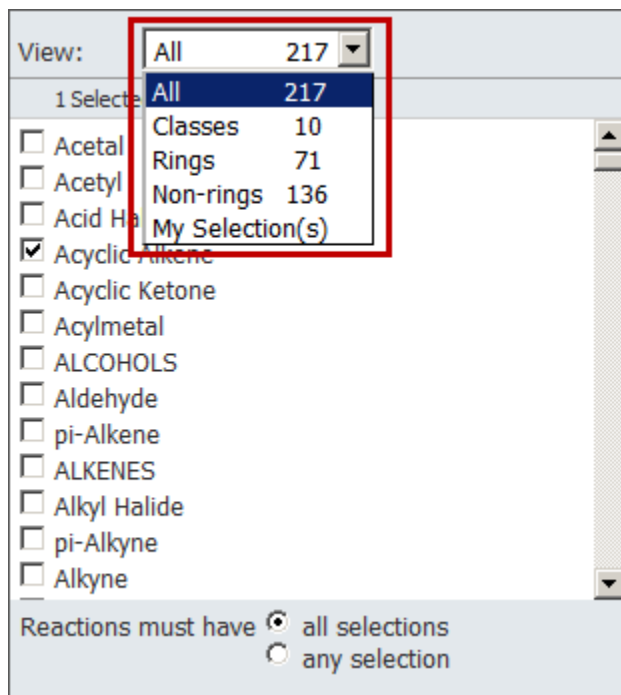
Non-participating Functional Groups [Select Groups](#)

2. 在对话框中，选择官能团或官能团的类型。

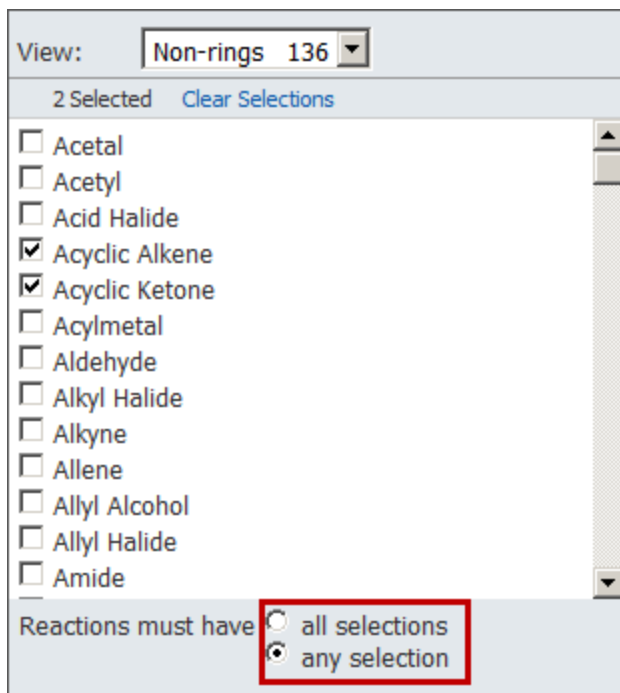


被选中的官能团数（当前为 **1**）被显示在状态条中。点击 **Clear Selections**，取消所有选中的官能团。

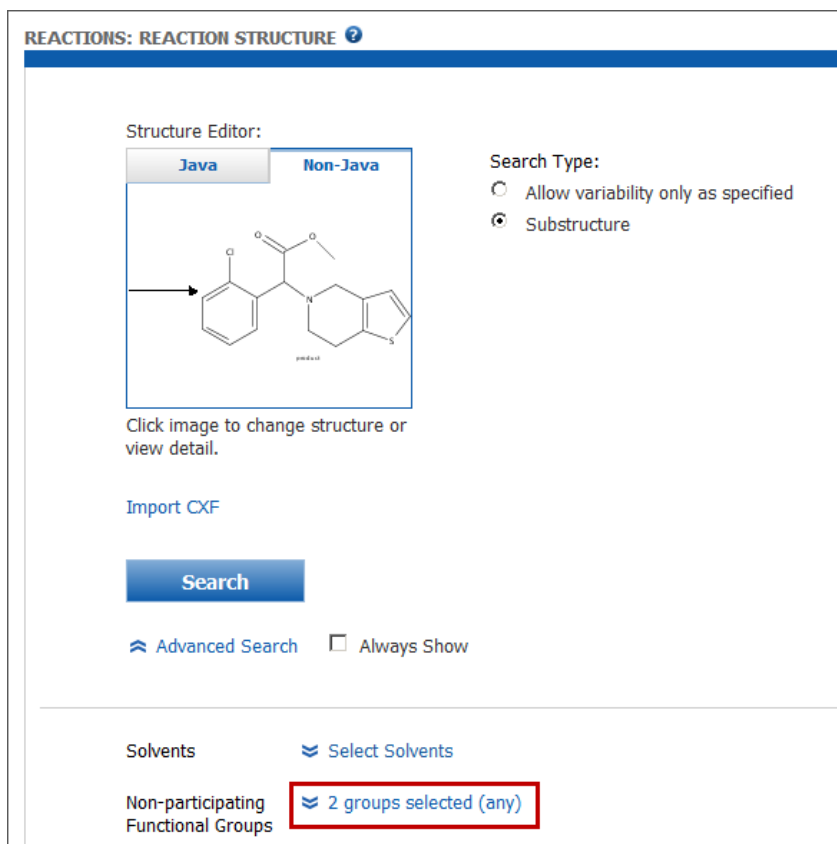
3. 要按照类型显示官能团，则请在 **View** 下拉菜单中选择类型。



4. 在选择完官能团后，要指定是需要所有选中的官能团还是只需要选中的任意一个官能团出现在反应中就可以。



5. 点击对话框上方的 **Close** 链接。被选中的官能团数会出现在 **Non-participating Functional Groups** 旁，同时还显示是需要所有选中的官能团还是只要选中官能团其中一个就可以。

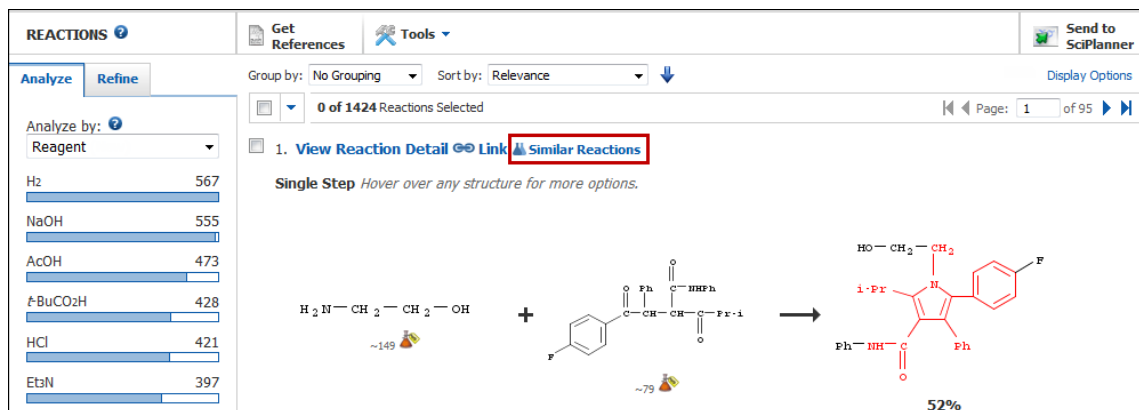


获得相似反应

根据当前结果集中的一条反应，可以获取与其具有相似反应中心的反应。相似反应功能仅适用于单步反应。

操作步骤

1. 在反应页面，点击感兴趣反应上方的 **Similar Reactions**。



2. 在对话框中，选择是从数据库的所有反应中还是只从当前结果集中获取相似反应。

The 'Get Similar Reactions' dialog box provides the following options:

Retrieve similar reactions from:

- All reactions
- Current answer set

Include this level of similarity:

- Broad - Reaction centers only (1401)
- Medium - Reaction centers plus adjacent atoms and bonds (306)
- Narrow - Reaction centers plus extended atoms and bonds (46)

Each similarity level is illustrated with a chemical reaction diagram showing the highlighted atoms and bonds. The 'Medium' option is selected. At the bottom, there are 'Get Reactions' and 'Cancel' buttons.

当选择 **All reactions** 时，每个相似层级的反应数就会出现在括号中。在这个例子中：

- **Broad** 相似级，仅对比了反应中心，将获取到 1401 条反应。
 - **Medium** 相似级要求反应中心及与反应中心相邻的原子和键都要匹配。**Medium** 比 **Broad** 有更多的限制，将获取到 306 条反应。
 - **Narrow** 相似级要求反应中心及外围原子和键（处于反应中心的 α 和 β 位）都要匹配，将获取到 46 条反应。
3. 通过点击 **Broad, Medium** 或 **Narrow** 的选择按钮，选择相似级。
 4. 点击 **Get Reactions**。

查找其他反应

根据当前结果集中选中的反应，可以获取到文献中的其他反应（这些文献对同样的产物制备进行了报道）。

操作步骤

1. 在反应页面，选择感兴趣的产物反应。然后在 **Tools** 菜单中选择 **Find Additional Reactions**。

The screenshot shows the SciFinder interface. On the left, there is a list of reagents with their respective counts: NaHCO₃ (1079), NaOH (799), HCl (760), Et₃N (590), H₂SO₄ (560), and H₂O (523). The main area displays a chemical reaction scheme. The starting material is a benzene ring with a chlorine atom and a carboxylic acid group. The reaction is catalyzed by a metal complex. The product is a benzene ring with a chlorine atom and a carboxylic acid group, with a yield of 100%. The interface also shows a 'Tools' menu with 'Find Additional Reactions' highlighted.

注：如果没有选中任何反应，**Find Additional Reactions** 将会对当前结果集中所有的产物进行检索。

2. 获取到的其他反应会被自动添加至当前结果集的底部。在分析标签中，会出现原始结果集（**Reactions**）和新结果集（**Additional Reactions**）。

Explore Saved Searches SciPlanner Save Print Export

⚠ 213 additional reactions have been added to your answer set.

Reaction Structure substructure > reactions (2089) > find additional reactions (2302)

REACTIONS Get References Tools Send to SciPlanner

Analyze Refine Group by: No Grouping Sort by: Relevance

Analyze by: Answer Type

Reactions 2089
Additional Reactions 213

Show More

0 of 2302 Reactions Selected

1. View Reaction Detail Link

Single Step Hover over any structure for more options.

3. 要显示其他反应，则请点击 **Additional Reactions** 子集显示条。

Explore Saved Searches SciPlanner Save Print Export

⚠ 213 reactions with the Answer Type **Additional Reactions** are displayed Keep Analysis Clear Analysis

Reaction Structure substructure > reactions (2089) > find additional reactions (2302)

REACTIONS Get References Tools Send to SciPlanner

Analyze Refine Group by: No Grouping Sort by: Relevance

Analyze by: Answer Type

Reactions 2089
Additional Reactions 213

Show More

0 of 2302 Reactions Selected

2090. View Reaction Detail Link

Hover over any structure for more options.

- 点击 **Keep Analysis**，将显示的反应变为当前结果集。
- 点击 **Clear Analysis**，显示完整结果集。

查看，分析和筛选反应结果集

查看，分析和筛选选项

SciFinder 将帮助您评估您的检索结果，并快速定位最相关的结果。

查看反应结果

查看反应结果

当检索完成后，结果就会被展示在**反应**页面。有控制反应结果展示的选项。

分类反应

分类反应

通过 **Transformation**（按转化类型分类反应）或 **Document**（每篇文献只显示一条代表反应）对反应进行分类。

排列反应

排列反应

根据以下选中的标准排列反应：相关性、收录号、实验操作过程、反应步数、产率和公开年份。

查看实验操作过程

查看实验操作过程

实验操作过程是从原始文件中（如期刊，专利）获得的。可以根据实验操作步骤的可获得性分类或分析结果集，然后查看这些实验操作步骤。

查看实验详情

查看实验详情

通过 **MethodsNow**，可以快速获取 2000 年至今的 80 多种英文期刊中的反应详情。

保留或删除选中的反应

保留或删除选中的反应

手动选择反应，然后选择保留或删除选中的反应。

分析当前结果集

分析当前结果集

根据下面的选项分析结果集：作者名、催化剂、公司/机构名、文件类型、实验操作过程、期刊名、语言、反应步数、产率、公开年份和溶剂。

**添加检索条件
限定结果集**

添加检索条件限定结果集

使用 **Refine** 标签上的选项指定其他检索条件：反应结构、产率、反应步数、反应分类和不参与反应的官能团。

**返回先前的
结果集**

返回先前结果集

当执行了一次检索或创建新结果集的筛选操作后，在反应页面顶端的“检索足迹”中就会增加一条新的记录。可以点击检索足迹中的记录获取先前的反应结果集。

合并结果集

合并结果集

通过布尔逻辑运算合并、交集或排除合并反应结果集，然后创建一个新的结果集。

反应页面图示

当一个反应结构检索完成时，反应结果就出现在反应页面上。

Reaction Structure substructure > reactions (820) > keep analysis "Document Type" (686) > refine "1 step" (65) > remove 25 reactions (40)

REACTIIONS Get References Tools Send to SciPlanner

Analyze Refine Group by: No Grouping Sort by: Relevance Display Options

Analyze by: Reagent

NaHCO ₃	15
H ₂ SO ₄	14
HCl	11
Disodium carbonate	7
H ₂ O	7
HCO ₂ H	3
AcOH	1
Carbon	1
CH ₂ Cl ₂	1
HBr	1

0 of 40 Reactions Selected

1. View Reaction Detail Link Similar Reactions

Single Step *Hover over any structure for more options.*

Click the letters in the diagram to view the corresponding explanations for each item on the page.

Overview

Steps/Stages	Notes
1.1 S:H ₂ O, rt	Reactants: 2, Reagents: 1, Solvents: 2, Steps: 1, Stages: 2, Most stages in any one step: 2
1.2 R:Disodium carbonate, S:H ₂ O, S:CH ₂ Cl ₂ , rt, pH 7-8	

References

Process for the preparation of clopidogrel bisulfate

Quick View **PATENTPAK**
By Rao, Jagadeeshwar et al
From PCT Int. Appl., 2011012961, 03 Feb 2011

Experimental Procedure


Preparation of (+)-S)-2-(2-Chlorophenyl)-2-(4,5,6,7-tetrahydrothieno[3,2-c]pyridin-5-yl)acetic acid methyl ester hydrogensulfate (clopidogrel bisulfate of formula (V)): To an aqueous solution of formaldehyde (1 L) at 25 to 35°C was added methyl-(+)-S)-α-(2-thienylethylamino)(2-chlorophenyl)acetate hydrochloride and stirred for the completion of the reaction. After completion of reaction, water and methylene dichloride were added to the reaction mass and the pH was adjusted to 7 to 8 using solid sodium bicarbonate solution. The layers were separated and methylene dichloride layer was distilled out completely under vacuum at to obtain methyl-(2α)-(2-chlorophenyl)(6,7-dihydrothieno[3,2-c]pyridine-5-(4H)-yl)acetate freebase as a residue.

A


点击 **View Reaction Detail**，查看反应详情。

点击 **Link**，可以拷贝一个反应记录的 URL，将其分享给 SciFinder 的其他用户。

点击 **Similar Reactions**，获取显示的反应的相似反应（该选项仅适用于单步反应）。

如果一个物质可以商业获得，在物质下方就会出现一个烧瓶图标 ，并同时显示供应商数量。点击图标，就可以获取到供应商信息。

可以查看物质信息或检索反应中的任何物质。要实现该操作，请将鼠标放置在物质上。

然后点击  显示物质选项，或点击  在无需离开当前页面的情况下预览物质信息。

B

点击链接可以展开或隐藏概览信息。

文献标题是超链接的。可以点击标题进入 **Reference Detail** 页面。

使用 **Quick View** 选项，无需离开当前页面就能浏览文献信息。

	可能会看到 PatentPak （获取专利及其同族的全文 PDF 文件）或 Other Sources （链接到 SciFinder 外的全文选项）选项（专利 PDF 功能需要订购 PatentPak 后才能使用）。
C	<p>点击链接展开或隐藏 Experimental Procedure。</p> <p>如果可以获得实验详情，则信息会被列在 MethodsNow 下方（需要订购 MethodsNow）。</p>
D	<p>当前结果集中一共有 40 条反应，而且当前没有任何反应被选中。</p> <p>可以勾选反应中的选择框或点击下拉箭头并选择 Select All 选择所有的反应。</p> <p>下拉菜单中的其他选项为 Deselect All, Keep Selected 或 Remove Selected。</p> <p>Group by 功能帮助您根据 Document（一篇文献只显示一条代表反应）或 Transformation（通过转化类型分类反应）对反应进行分类。</p> <p>Sort by 功能有助于根据相关性、收录号、实验操作过程、反应步数、产率或公开年份对反应进行排序。</p>
E	<p>点击 Display Options，可以改变每页展示的结果数或改变显示的反应信息。在出现的对话框中进行选择，然后点击 OK。</p> <p>要查看其它页码，则可以点击箭头，转至第一页、前一页、下一页或最后一页。或可以输入一个页码直接跳转到指定页。</p>
F	<p>通过 Analyze 标签，根据选中的标准如试剂筛选反应（如：要显示将 HCl 作为试剂的 11 条反应，则请点击 HCl 子集条）。</p> <p>在分析标签中，将显示 10 个结果数量最大的子集。要查看所有的子集，则请点击 Show More。</p> <p>要改变分析选项，则请点击 Analyze by 下拉箭头。分析选项有：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Author Name 作者名 ▪ Catalyst 催化剂 ▪ Company – Organization 公司-机构 ▪ Document Type 文献类型 ▪ Experimental Procedure 实验操作过程 ▪ Journal Name 期刊名 ▪ Language 语言 ▪ Number of Steps 反应步数 ▪ Product Yield 产率 ▪ Publication Year 公开年份

	<ul style="list-style-type: none">▪ Reagent 试剂▪ Solvent 溶剂
	通过 Refine 标签，可以为之前的查询增加新的检索条件。 选择 Refine by 选项，然后在出现的检索区输入限制条件。 点击 Refine ，产生新的结果集。
	通过 Get References 获取选中反应的文献。 选择 Tools > Combine Answer Sets ，将当前结果集和一个已保存的结果集进行合并。 Send to SciPlanner 将选中的反应发送至 SciPlanner library
	“检索足迹”记录了结果集的变化。通过点击一条足迹记录，就可以返回到先前的结果集。
	点击 Save, Print 或 Export 保存、打印或导出选中的反应。

反应详情页面图示

在 **Reaction Detail** 页面展示某条指定反应的详细信息。

Reaction Structure substructure > reactions (820) > keep analysis "Document Type" (686) > refine "1 step" (65) > remove 25 reactions (40) > reaction 1 (of 40)

REACTION DETAIL Get Reference Detail View with PATENTPAK Get Similar Reactions Link to Other Sources Send to SciPlanner

Return Previous Next

1. Single Step *Hover over any structure for more options.*

A Click the letter in the figure to view the corresponding explanation of each item on the reaction detail page.

B **Stages**
 1.1 S:H₂O, rt
 1.2 R:Disodium carbonate, S:H₂O, S:CH₂Cl₂, rt, pH 7-8

C **Experimental Procedure**
 Preparation of (+)-(S)-2-(2-Chlorophenyl)-2-(4,5,6,7-tetrahydrothieno[3,2-c]pyridin-5-yl)acetic acid methyl ester hydrogensulfate (clopidogrel bisulfate of formula (V)): To an aqueous solution of formaldehyde (1 L) at 25 to 35°C was added methyl-(+)-(S)-α-(2-thienylethylamino)(2-chlorophenyl)acetate hydrochloride and stirred for the completion of the reaction. After completion of reaction, water and methylene dichloride were added to the reaction mass and the pH was adjusted to 7 to 8 using solid sodium bicarbonate solution. The layers were separated and methylene dichloride layer was distilled out completely under vacuum at to obtain methyl-(2α)-(2-chlorophenyl)(6,7-dihydrothieno[3,2-c]pyridine-5-(4H)-yl)acetate freebase as a residue.

D **SOURCE**
 Process for the preparation of clopidogrel bisulfate
 Rao, Jagadeeshwar; Nandam, Harikrishna; Redamalla, Anjireddy; Reguri, Buchi Reddy Assignee Orchid Chemicals and Pharmaceuticals Ltd., India 2011




PATENT INFORMATION
 Feb 3, 2011
 WO 2011012961
 A1






NUMBER OF STEPS
 1

Notes
 Reactants: 2, Reagents: 1, Solvents: 2, Steps: 1, Stages: 2

Transformation:
 1. Aminoalkylation and Amidoalkylation of Aromatic Compounds

Yield

<p>A</p>	<p>如果一个物质可商业获得，则在物质下方会出现一个烧瓶图标，供应商数量也会同时显示。点击烧瓶，就能获取到供应商的信息。</p> <p>也可以查看物质信息或检索反应中的物质。将鼠标放置在物质上高亮显示物质。</p> <p>然后点击显示物质选项，或点击，无需离开当前页面就能预览物质信息。</p>
<p>B</p>	<p>如果有实验阶段、注释、转化类型和产率信息，也将被展示。</p>
<p>C</p>	<p>点击链接，可以展开或隐藏 Experimental Procedure。</p> <p>如果一条反应有详细信息，则详细信息将被列在 MethodsNow 下方（需要订购 MethodsNow）。</p>

	<p>此处显示的是书目信息。</p> <p>点击文献标题进入 Reference Detail 页面。</p> <p>或者点击 ，在无需离开当前界面的情况下就可快速查看文献。</p>
	<p>点击 Get Reference Detail 进入 Reference Detail 页面。</p> <p>点击 View with PatentPak，然后选择专利，即可打开专利或专利族的 PDF 全文。 (需要购买 PatentPak 才能使用。)</p> <p>点击 Get Similar Reactions 检索与当前反应相似的反应。</p> <p>点击 Link to Other Sources 获取 SciFinder 以外的全文。</p> <p>点击 Send to SciPlanner 将反应推送至 SciPlanner library。</p>
	<p>保存或分享当前反应，可以：</p> <ul style="list-style-type: none">▪ 点击 Link，拷贝可以复制到书签、文件或邮件的反应 URL。▪ 点击 Save 将反应保存在 SciFinder 的保存结果集位置中。▪ 点击 Print 将反应数据打印为 PDF 文件。▪ 点击 Export 将反应数据导出为外部文件。
	<p>使用导航链接：</p> <ul style="list-style-type: none">▪ 回到反应页面的结果集。▪ 进入上一条或下一条反应的反应详情。

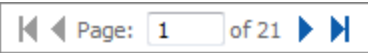

查看反应结果


当检索完成后，结果就会显示在反应页面。可获取到控制反应显示的选项。

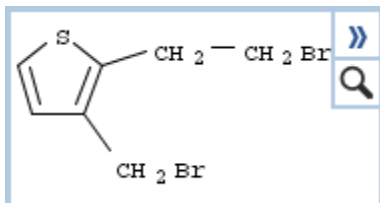
- 点击 **Display Options** 改变每页显示的结果数或显示的反应信息。在出现的对话框中进行选择，然后点击 **OK**。


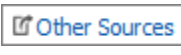
选择 **Reaction Scheme** 则只显示反应式（概述和实验操作过程则被隐藏）。

选择 **Reaction Scheme and Overview** 则显示反应式和概述信息（实验操作过程将被隐藏）。

- 要查看另一页，点击箭头 ，转至第一页，前一页，后一页或最后一页。或者，输入一个页码，直接跳转到指定页。
- 点击文献标题旁的 ，无需离开当前页面就可以预览文献信息。信息会显示在弹出的 **Quick View** 窗口中。

将鼠标放置在一个物质上高亮显示物质，然后点击出现的快速浏览图标 ，就可以在不离开当前页面就能预览物质信息。信息出现在一个弹出的 **Quick View** 窗口中。



- 点击文献标题旁的  打开专利或专利族成员的 PDF 全文。（需要 **PatentPak** 模块。）
- 点击文献标题旁的 （没有在上面的图片中显示），链接到 **SciFinder** 以外的全文。获取到的全文资源可能来自您所在机构图书馆、网络免费在线资源或需要花钱购买的资源。
- 点击 **Experimental Procedure** 展示实验操作过程。
- 点击 **View with MethodsNow**，查看反应详情。（需要购买 **MethodsNow** 模块。）

▼ **METHODSNow™**

Procedure

1. Cool a solution of 2-(3-(((2R,3S,6S)-2-(methoxymethyl)-6-phenyl-3,6-dihydro-2H-pyran-3-yl)oxy)prop-1-yn-1-yl)aniline (99.0 mg, 0.283 mmol) in CH₃NO₂ (2.8 mL) to 0 °C.
2. Add PtCl₂ (15.0 mg, 0.566 mmol) to the reaction mixture.

[View more...](#)

Available Experimental Data

¹H NMR, ¹³C NMR, IR, HRMS, Mass Spec, R_f, State

[View with MethodsNow](#)

反应分类

可通过 **Transformation**（通过转化类型分类反应）或 **Document**（每篇文件只显示一条代表性反应）来分类反应，评估反应结果集。

操作步骤

通过文献分类反应

1. 从 **Group by** 菜单中选择 **Document**。报道反应的文献标题会被展示,如下所示:

The screenshot shows the SciFinder interface for reaction classification. The 'Group by' dropdown is set to 'Document'. The main area displays a reaction scheme for the synthesis of clopidogrel, with a red box highlighting '2 Reactions' and a link to 'Similar Reactions'.

2. 点击反应数量的超链接（上面例子中显示为 **2 条反应**），获取文献中的所有相关反应。

通过转化类型分类反应

1. 在 **Group by** 菜单中选择 **Transformation**。单步反应即被按照转化类型进行分类。没有被分类的单步反应和多步反应则列在结果集的末尾。

The screenshot shows the SciFinder Reactions interface. At the top, there are tabs for 'Explore', 'Saved Searches', and 'SciPlanner'. Below these, there are buttons for 'Save', 'Print', and 'Export'. The main area is titled 'Reaction Structure substructure > reactions (740)'. On the left, there is a 'REAGENTS' section with a list of reagents and their counts: NaHCO₃ (411), HCl (391), NaOH (379), H₂O (364), H₂SO₄ (242), Et₃N (179), 716-61-0 (120), AcCl (116), K₂CO₃ (102), and HCHO (92). A 'Show More' button is at the bottom of this list. The main area is divided into sections for different reaction types. Section 1 is 'Aminoalkylation and Amidoalkylation of Aromatic Compounds' with 64 reactions. Section 2 is 'Alkylation/Silylation of Amines and Phosphines' with 17 reactions, highlighted with a red box. Section 3 is 'Esterification of Carboxylic Acids' with 6 reactions. Section 4 is 'Friedel-Crafts Alkylation' with 2 reactions. Section 5 is 'Uncategorized Single-Step Reactions' with 2 reactions. The 'Group by' dropdown is set to 'Transformation' and 'Sort by' is set to 'Frequency'.

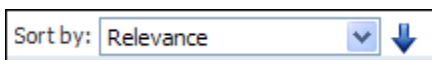
2. 点击反应数量的超链接（如：上面显示的 **17 条反应** 是胺和磷化氢的烷基化/硅烷化反应）获取某个转化类型的反应。

反应排序

可以根据选中的标准，对结果集中的反应进行排序。

操作步骤

1. 点击 **Sort by** 下拉箭头，然后选择排序标准。



Relevance	根据与查询反应的相关度排列反应
Accession Number	根据反应进入数据库的收录号排列反应。数字大的号代表新的记录，数字小的号代表较早的记录。

Experimental Procedure	根据实验操作过程的可获得性排列反应。默认情况下，优先显示有实验操作过程的反应。
Number of Steps	根据反应步数排列反应。
Product Yield	根据产率排列反应。默认情况下，最后显示无产率的反应。
Publication Year	根据公开年份的时间顺序排列反应。
Similarity	根据与查询反应的相似度排列反应（该选项仅在相似反应检索结果集中可用）。

2. 点击箭头改变排列顺序。箭头向上表示按照升序排列，箭头向下表示按照降序排列。

查看实验操作过程

实验操作过程是从原始文件（期刊文章、专利）中获得的。可以根据实验操作过程可获得性排列或分析反应结果集，然后查看操作过程。

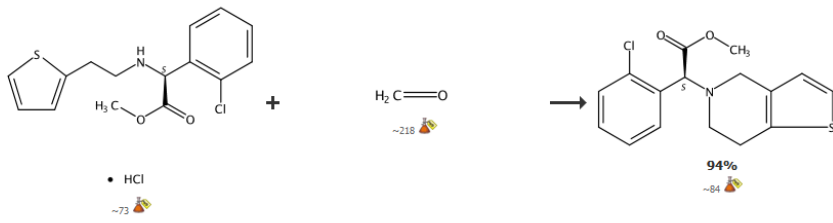
操作步骤

查看实验操作过程

1. 点击 **Experimental Procedure** 链接展开数据（默认情况下，实验操作过程信息被隐藏）。

1. [View Reaction Detail](#) [Link](#) [Similar Reactions](#)

Single Step *Hover over any structure for more options.*



• HCl
-73

94%
-84

~218

~84

▼ Overview

Steps/Stages

1.1 R:HCl, S:H₂O, 2 h, 80°C; cooled

Notes

paraformaldehyde used, workup-after cooling down pH of solution carefully adjusted to 2.2 before extraction, Reactants: 2, Reagents: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1

References

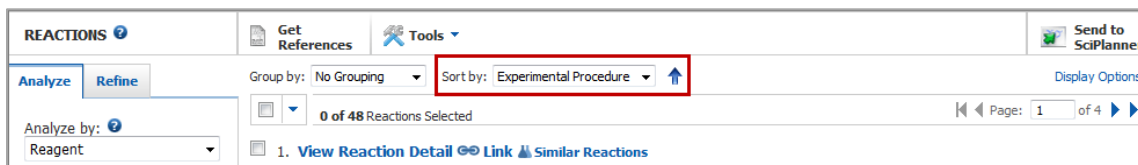
Deuterated Clopidogrel Analogues as a New Generation of Antiplatelet Agents
Quick View [Other Sources](#)
By Zhu, Yaoqiu et al
From ACS Medicinal Chemistry Letters, 4(3), 349-352; 2013

▼ **Experimental Procedure**

ACS Medicinal Chemistry Letters **d₅-CPG (1), d₂-CPG (2), d₃-CPG (3) and d₆-CPG (4)** To a suspension of **10** (or **11**, 500 mg, 1.44 mmol) and paraformaldehyde (121 mg, or d₂-paraformaldehyde, 130 mg, 4.32 mmol) in H₂O (10 mL) was added HCl (1 M, 24 μL). The reaction mixture was stirred for 2 h at 80 °C. After it cooled down, the pH of the solution was carefully adjusted to 2.2. The resulting cloudy mixture was extracted by hexane (3 x 15 mL). The combined organic layers were washed with brine (50 mL), dried (Na₂SO₄) and concentrated to yield **1** (or **2, 3, 4**). **d₅-CPG (1)**: Colorless oil (429 -450 mg, 90 -94% yield). ¹H NMR (500 MHz, CDCl₃) δ 7.70 (dd, 1H, J = 7.5, 2.0 Hz), 7.41 (dd, 1H, J = 7.5, 1.5 Hz), 7.24 -7.31 (m, 2H), 7.05 (d, 1H, J = 5.0 Hz), 6.67 (d, 1H, J = 5.0 Hz), 4.92 (s, 1H), 3.76 (dd, 1H, J = 14.0 Hz), 3.72 (s, 3H), 3.63 (dd, 1H, J = 14.0 Hz), 2.88 (br, 4H); ¹³C NMR (125 MHz, CDCl₃) δ 171.5, 134.9, 134.0, 133.5, 133.4, 130.2, 130.0, 129.6, 127.4, 125.4, 122.9, 68.1, 52.4, 50.9, 48.5, 25.7; ESI-MS *m/z* 322.3 [M+H]⁺; HRMS *m/z* calcd for C₁₇H₁₇ClNO₂S⁺ [M+H]⁺ 322.06630, found 322.06643. The chiral purity of the desired *S*-enantiomer was found to be 97.8%.

根据实验操作过程排序

1. 从 **Sort by** 菜单中选择 **Experimental Procedure**。有实验操作过程的反应将被显示在最前面。



REACTIONS [Get References](#) [Tools](#) [Send to SciPlanner](#)

Analyze Refine

Group by: No Grouping Sort by: **Experimental Procedure** [Display Options](#)

0 of 48 Reactions Selected Page: 1 of 4

1. [View Reaction Detail](#) [Link](#) [Similar Reactions](#)

分析实验操作过程可获得性

1. 在分析标签中，从 **Analyze by** 菜单中选择 **Experimental Procedure**。
2. 点击 **Experimental Procedures Available** 子集，仅显示有实验操作过程的反应。

The screenshot shows the SciFinder interface with the 'Experimental Procedures Available' filter selected. The 'Keep Analysis' and 'Clear Analysis' buttons are highlighted with red boxes. The interface displays 466 reactions with experimental procedures available and 264 without. A chemical reaction scheme is visible in the center.

3. 可以：

- 点击 **Keep Analysis** 创建一个仅包含有实验操作过程的反应结果集。
- 点击 **Clear Analysis** 返回到完整结果集展示页面。

打印实验操作过程

1. 选择感兴趣的反应，然后点击 **Print**。

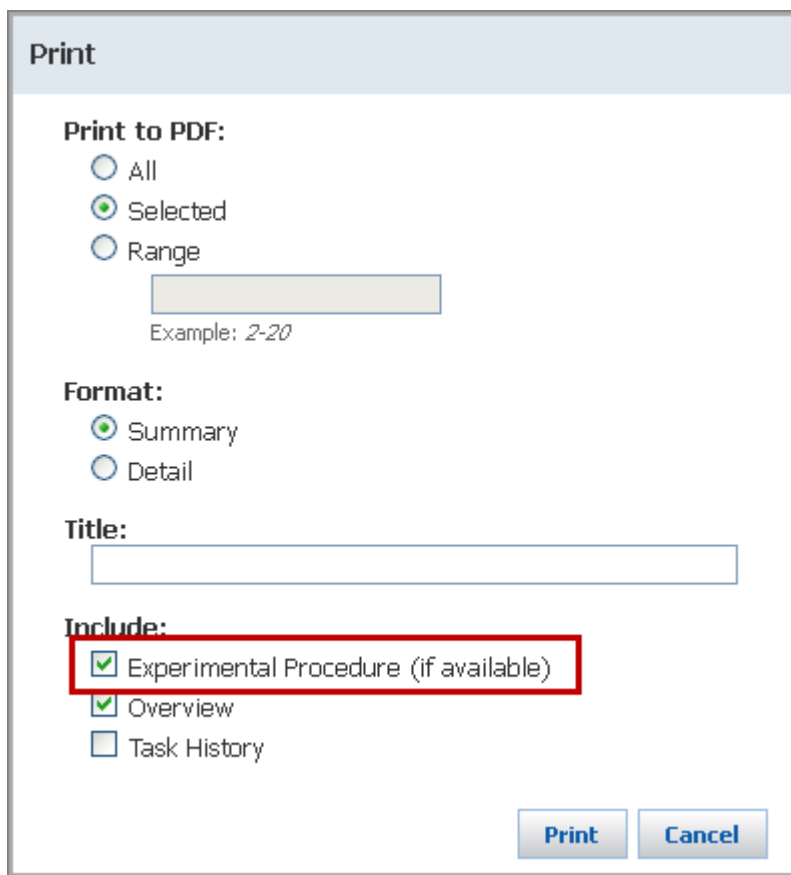
The screenshot shows the SciFinder interface with the 'Print' button highlighted in a red box. The 'View Reaction Detail' checkbox is also highlighted in a red box. The interface displays 3 of 739 reactions selected.

如果没有选择任何反应，SciFinder 会认为您希望打印结果集中所有的反应。

注： 可以通过选择下拉菜单中的选项来选择或取消选择所有的反应。

The screenshot shows a dropdown menu with the following options: 'Select All', 'Deselect All', 'Keep Selected', and 'Remove Selected'. The 'Select All' and 'Deselect All' options are highlighted with a red box.

2. 在打印对话框中，确认勾选 **Experimental Procedure (if available)**。



The image shows a 'Print' dialog box with the following sections:

- Print to PDF:**
 - All
 - Selected
 - Range

Below the 'Range' option is a text input field with the example text 'Example: 2-20'.
- Format:**
 - Summary
 - Detail
- Title:**

A text input field for the title.
- Include:**
 - Experimental Procedure (if available)
 - Overview
 - Task History

At the bottom right are two buttons: 'Print' and 'Cancel'.

也可以选择导出反应，在导出反应时，在导出对话框中确认勾选 **Experimental Procedure**。

3. 点击 **Print**。

查看反应详情

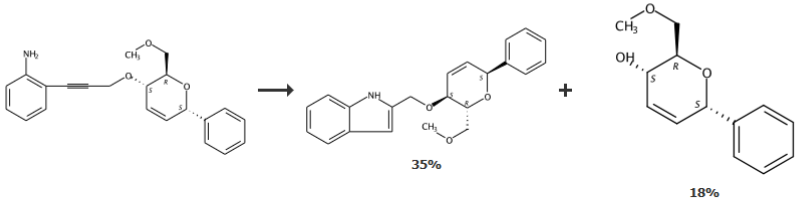
通过 [MethodsNow](#) 获取反应详情（[MethodsNow](#) 是一个单独授权的模块）。并非所有反应都有相应的反应详情。

操作步骤

1. 在反应或反应详情页面，点击 **View with MethodsNow**。

11. [View Reaction Detail](#) [Link](#) [Similar Reactions](#)

Single Step *Hover over any structure for more options.*



Overview

Steps/Stages

1.1 C:PtCl₂, S:MeNO₂, 20 min, 0°C; 1 h, rt; 3 h, 40°C

Notes

Reactants: 1, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1

References

A Cycloisomerization/Friedel-Crafts Alkylation Strategy for the Synthesis of Pyrano[3,4-b]indoles
 Quick View [Other Sources](#)
 By Medeiros, Matthew R. et al
 From Organic Letters, 13(15), 4012-4015; 2011

Experimental Procedure

METHODSNow™

Procedure

- Cool a solution of 2-(3-((2R,3S,6S)-2-(methoxymethyl)-6-phenyl-3,6-dihydro-2H-pyran-3-yl)oxy)prop-1-yn-1-yl)aniline (99.0 mg, 0.283 mmol) in CH₂NO₂ (2.8 mL) to 0 °C.
- Add PtCl₂ (15.0 mg, 0.566 mmol) to the reaction mixture.

[View more...](#)

Available Experimental Data

¹H NMR, ¹³C NMR, IR, HRMS, Mass Spec, R_f, State

[View with MethodsNow](#)

反应详情将出现在新窗口中。

MethodsNow

A Cycloisomerization/Friedel-Crafts Alkylation Strategy for the Synthesis of Pyrano[3,4-b]indoles

By Medeiros, Matthew R.; Schaus, Scott E.; Porco, John A., Jr.
From Organic Letters, 13(15), 4012-4015; 2011
Published by American Chemical Society

Products	D- <i>erythro</i> -Hex-2-entol, 1,5-anhydro-2,3-dideoxy-4- <i>O</i> -(1 <i>H</i> -indol-2-ylmethyl)-6- <i>O</i> -methyl-1- <i>C</i> -phenyl-, (1 <i>S</i>)-, 35%, CAS RN: 1314595-76-0 D- <i>erythro</i> -Hex-2-entol, 1,5-anhydro-2,3-dideoxy-6- <i>O</i> -methyl-1- <i>C</i> -phenyl-, (1 <i>S</i>)-, 18%, CAS RN: 1314595-77-1
Reactants	D- <i>erythro</i> -Hex-2-entol, 4- <i>O</i> -[3-(2-aminophenyl)-2-propyn-1-yl]-1,5-anhydro-2,3-dideoxy-6- <i>O</i> -methyl-1- <i>C</i> -phenyl-, (1 <i>S</i>)-, CAS RN: 1314595-75-9
Catalysts	Platinum chloride (PtCl ₂), CAS RN: 10025-65-7
Solvents	Nitromethane, CAS RN: 75-52-5
Procedure	<ol style="list-style-type: none"> 1. Cool a solution of 2-(3-(((2<i>R</i>,3<i>S</i>,6<i>S</i>)-2-(methoxymethyl)-6-phenyl-3,6-dihydro-2<i>H</i>-pyran-3-yl)oxy)prop-1-yn-1-yl)aniline (99.0 mg, 0.283 mmol) in CH₂NO₂ (2.8 mL) to 0 °C. 2. Add PtCl₂ (15.0 mg, 0.566 mmol) to the reaction mixture. 3. Stir the reaction mixture for 20 minutes at 0 °C. 4. Remove the reaction mixture from the ice bath when TLC analysis shows no reaction . 5. Stir the reaction mixture at room temperature.

Print/Export Close

2. 可点击反应步数查看多步反应或系列反应的具体步数详情。

MethodsNow

Anion-Binding Properties of a Cyclic Pseudoheptapeptide Containing 1,5-Disubstituted 1,2,3-Triazole Subunits
 By Krause, Martin R.; Goddard, Richard; Kubik, Stefan
 From Journal of Organic Chemistry, 76(17), 7084-7095; 2011
 Published by American Chemical Society

Sequence 1: Reaction Steps [1](#) [2](#) [3](#)

Sequence 2: Reaction Steps [1](#) [2](#) [3](#) [4](#) [5](#)

Sequence 3: Reaction Steps [1](#) [2](#) [3](#) [4](#) [5](#) [6](#) [7](#)

(Converging)

Products	2-Pyridinamine, 6-[2-(trimethylsilyl)ethynyl]-, 97%, CAS RN: 173314-97-1
Reactants	2-Pyridinamine, 6-bromo-, CAS RN: 19798-81-3 Ethynyltrimethylsilane, CAS RN: 1066-54-2
Catalysts	Phosphine, 1,1'-[[oxydi-2,1-phenylene]]bis[1,1-diphenyl-, CAS RN: 166330-10-5 Cuprous iodide, CAS RN: 7681-65-4 Dichlorobis(triphenylphosphine)palladium, CAS RN: 13965-03-2
Solvents	Triethylamine, CAS RN: 121-44-8
Procedure	1. Stir 2-Amino-6-bromopyridine (1.5 g, 8.7 mmol), (Ph ₃ P) ₂ PdCl ₂ (240 mg, 345 μmol, 4 mol %), bis(2-

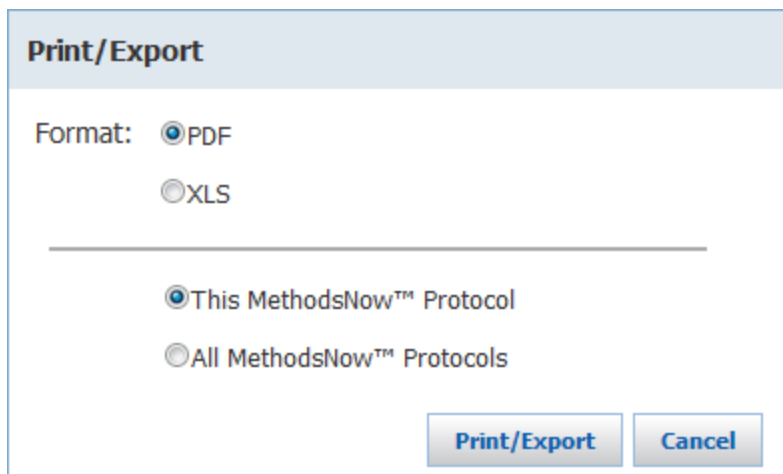
[Print/Export](#) [Close](#)

3. 点击 **Print/Export**，打印或导出详情。

Procedure	<ol style="list-style-type: none"> 1. Cool a solution of 2-(3-(((2R,3S,6S)-2-(methoxymethyl)-6-phenyl-3,6-dihydro-2H-pyran-3-yl)oxy)prop-1-yn-1-yl)aniline (99.0 mg, 0.283 mmol) in CH₃NO₂ (2.8 mL) to 0 °C. 2. Add PtCl₂ (15.0 mg, 0.566 mmol) to the reaction mixture. 3. Stir the reaction mixture for 20 minutes at 0 °C. 4. Remove the reaction mixture from the ice bath when TLC analysis shows no reaction . 5. Stir the reaction mixture at room temperature.
------------------	--

[Print/Export](#) [Close](#)

选择是仅打印当前详情还是反应中的所有详情，然后点击 **Print/Export**。



保留或取消选中的反应

可以手动选择反应来修改当前结果集，然后选择保留或取消选中的反应。

操作步骤

1. 在反应页面，勾选反应的选项框。
2. 从选择项中选择 **Keep Selected** 或 **Remove Selected**。

The screenshot shows the 'REACTIONS' interface. On the left, there is a 'Reagent' list with counts: HCl (214), BuLi (176), I₂ (170), H₂O (115), and ZnCl₂ (99). The main area shows a chemical reaction between a cyclohexane ring and a benzene ring connected by a sulfur atom. A context menu is open over the reaction, showing '3 of 604 Reactions Selected'. The menu options are: 'Select All', 'Deselect All', 'Keep Selected' (highlighted with a red box), and 'Remove Selected' (also highlighted with a red box). The reaction is shown with a red outline, indicating it is selected. The interface also includes 'Group by: No Grouping', 'Sort by: Relevance', and a 'Send to SciPlanner' button.

分析当前结果集

当检索完成后，可以根据选择的标准（如催化剂或溶剂等）筛选结果集生成新的子集。然后可以选择展示感兴趣的子集、创建一个新的结果集或清除分析返回到完整结果集。

注：当结果集中数量超过 20000 时，就不能进行完整的分析，将只能看到样例分析。

操作步骤

从反应页面中：

1. 选择 **Analyze by** 选项（分析选项描述见下文）

2. 点击某一类别，查看相应子集内反应

或

点击 **Show More** 查看各更多子集

The screenshot shows the SciPlanner interface with the following components:

- Navigation:** Explore, Saved Searches, SciPlanner, Save, Print, Export.
- Page Header:** Reaction Structure substructure > reactions (799).
- REACTIONS Panel:**
 - Buttons: Analyze, Refine, Get References, Tools, Send to SciPlanner.
 - Group by: No Grouping, Sort by: Experimental Procedure.
 - 0 of 799 Reactions Selected.
 - 1. View Reaction Detail Link.
 - 5 Steps Hover over any structure for more options.
- Analyze by Panel:**
 - Dropdown: Catalyst.
 - Horizontal bar chart showing counts for various catalysts:

Bu ₄ N ⁺ •Br ⁻	128
Pd	66
HCl	36
KI	18
LiBr	13
4-DMAP	10
HCO ₂ H	10
InCl ₃	10
9001-92-7	8
H ₂ SO ₄	8
 - Show More button.
- Chemical Reaction Scheme:**
 - Reactants: A furan ring with a -CH₂-C(=O)-Oste group, a benzene ring with a -Cl and -Me group, and a benzene ring with a -Cl and -NH₂ group.
 - Steps: [Step 3.1], [Step 4.1], [Step 5.1].
 - Product: A complex polycyclic structure with multiple stereocenters and a chlorine atom.

分析选项：

- **Author Name** – 列出反应文献中的作者
- **Catalyst** – 列出反应中使用的催化剂
- **Company - Organization** – 列出文献的公司或机构名
- **Document Type** – 列出原始文献类型
- **Experimental Procedure** – 列出实验操作过程是否可获得
- **Journal Name** – 列出文献发表的期刊名
- **Language** – 列出文献的原始撰写语言
- **MethodsNow** – 列出是否可获得 [MethodsNow](#) 详情。
- **Number of Steps** – 列出反应步数

- **Product Yield** –以百分数列出产率
- **Publication Year** – 列出文献公开年份
- **Reagent** – 列出反应中使用的试剂
- **Solvent** – 列出反应中使用的溶剂

如果选择 Show More:

选择 **Natural Order**，子集将按照字母顺序排序。选择 **Frequency**，子集将按照相关反应数量排序。

点击 **Export**，将已选子集用 EXCEL 或 PDF 文件导出。

Catalyst	Count
Reactions not containing information for this analysis	514
Bu ₄ N ⁺ •Br	128
<input checked="" type="checkbox"/> Pd	66
<input type="checkbox"/> HCl	36
<input checked="" type="checkbox"/> KI	18
<input type="checkbox"/> LiBr	13
<input type="checkbox"/> 4-DMAP	10
<input type="checkbox"/> HCO ₂ H	10
<input type="checkbox"/> InCl ₃	10
<input type="checkbox"/> 9001-92-7	8

点击勾选您想浏览的子集。

点击查看选好的子集。

查看子集后，可以：

1. 点击 **Clear Analysis**，将清空分析并返回至分析前的结果集。

2. 点击 **Keep Analysis** 将分析结果生成新的结果集。

Reaction Structure substructure > reactions (799)

REACTIONS **Analyze** Refine

Get References Tools

Send to SciPlanner

Analyze by: Catalyst

Bu ₄ N ⁺ •Br	128
Pd	66
HCl	36
KI	18
LiBr	13
4-DMAP	10
HCO ₂ H	10
InCl ₃	10
9001-92-7	8
H ₂ SO ₄	8

Show More

Group by: No Grouping Sort by: Experimental Procedure

0 of 799 Reactions Selected

44. View Reaction Detail

7 Steps

Reaction scheme showing the synthesis of a complex molecule from starting materials, with yellow bars indicating the catalysts used in the reaction steps.

注：黄色的子集条代表当前展示的反应（如，此处展示的是包含催化剂 **Pd**、**KI** 以及 **LiBr** 的反应子集）。

添加检索标准缩小结果集

Refine 为当前结果集提供了更多检索限定条件。

操作步骤

The screenshot shows the 'Refine' tab in the SciFinder interface. It includes a 'Refine by:' section with radio buttons for 'Reaction Structure', 'Product Yield', 'Number of Steps', 'Reaction Classification', 'Excluding Reaction Classification', and 'Non-participating functional groups'. Below this is a 'Structure Editor' with 'Java' and 'Non-Java' tabs, a chemical structure, and a 'Refine' button at the bottom. Red lines and numbers point to these elements:

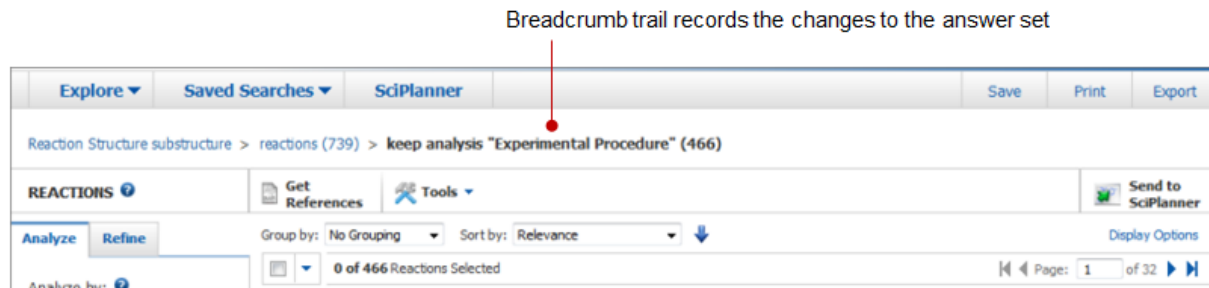
1. 点击激活**Refine**标签
2. 点击一个**Refine by**选项。
查找下面显示的合适标准。
3. 输入检索标准。
4. 点击**Refine**。

筛选选项	检索标准
Reaction Structure	<p>点击打开结构编辑器。（如果无法使用 Java 编辑器，则请点击切换到非 Java 编辑器。）</p> <p>修改查询反应式，然后点击 OK，在 Refine 标签下导入新的查询反应式。</p>
Product Yield	<p>输入产率范围的最高值和最低值。如果希望结果中包含未报道产率的反应，请勾选该选项。</p>
Number of Steps	<p>输入一个数字或一个数字范围。可以使用连接符指定范围，如-3代表3或小于3的步数。</p>
Reaction Classification	<p>勾选感兴趣的反应分类：</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Biotransformation: 利用微生物细胞或细胞产物（如，脂肪酶）影响类似于生物体系中看到的分子变化的反应，比如酶还原。

	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Catalyzed: 需要催化剂的反应 ▪ Chemoselective: 通常在其他不参加反应的官能团存在的情况下, 倾向于在某个特定的官能团发生反应的反应 ▪ Combinatorial: 组合化学合成路线中的反应。 ▪ Electrochemical: 发生在电化学电池中, 并在电池中产生电流通道的化学反应 ▪ Gas-phase: 所有参与反应的物质都是气相的反应。 ▪ Non-catalyzed: 不需要催化剂的反应。 ▪ Photochemical: 需要使用光的反应。 ▪ Radiochemical: 同位素标记物的反应。 ▪ Regioselective: 其中一个可能的异构体为主要产物的反应。 ▪ Stereoselective: 倾向于生成其中一个可能的立体异构体产物的反应
Excluding Reaction Classification	勾选上您希望排除的反应类型。(请参考上面的定义)
Non-participating functional groups	指定在反应中必须出现不参与反应的官能团。从查看菜单中, 选择显示 All 、 Classes 、 Rings 或 Non-rings 。勾选某个或某类官能团。点击选项指明是所有被选中的官能团还是选中的任意官能团必须出现在反应中。

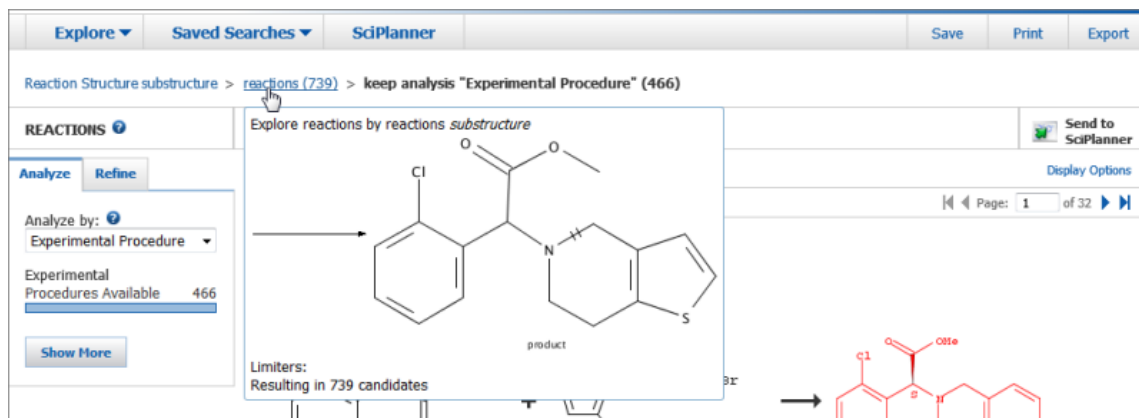
返回到先前的一个结果集

当执行了一个检索或筛选操作并创建了一个新的结果集后，一个新的记录就会被添加到反应页面顶端的“检索足迹”中。点击足迹记录获取先前结果集中的反应。



操作步骤

1. 将鼠标放置在足迹记录上查看一个结果集。信息会出现在下拉窗口中。



2. 点击检索足迹记录，获取先前结果集中的反应。

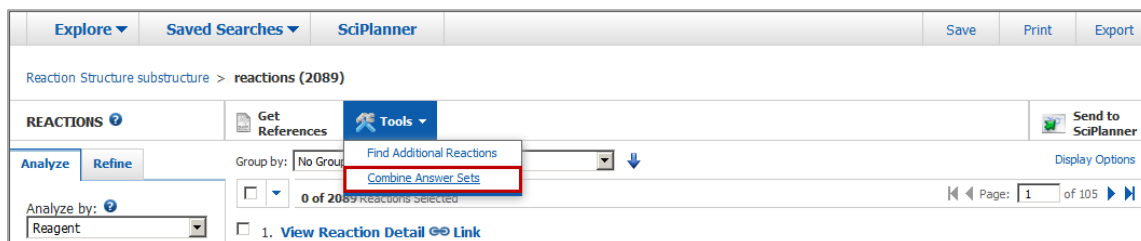
合并反应结果集

通过布尔运算合并、交集或排除合并反应结果集，然后创建一个新的结果集。

操作步骤

将当前结果集和已保存的结果集进行合并

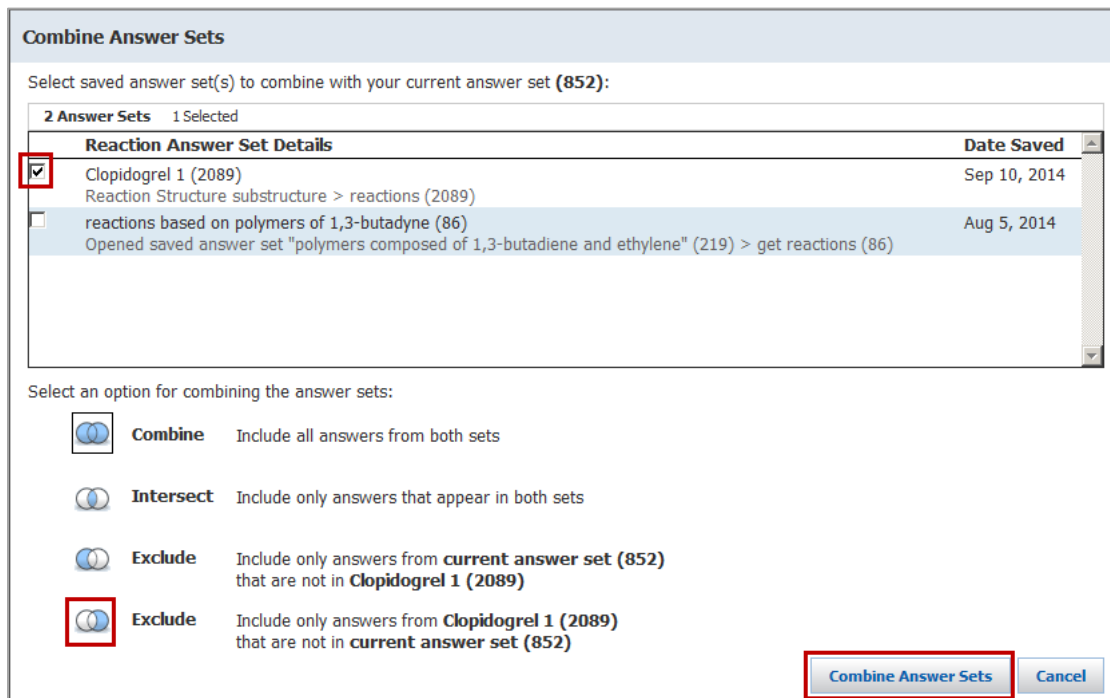
1. 从 **Tools** 菜单选择 **Combine Answer Sets**。



2. 在保存的结果集列表中，勾选一个或多个保存的结果集。

注：如果选择保存的结果集超过 1 个，则在第 3 步时，只能选择 **Combine** 或 **Intersect**。

3. 点击希望使用的合并选项。



4. 点击 **Combine Answer Sets**。

将已保存的结果集进行合并

1. 选择 **Saved Searches > Saved Answer Sets**。
2. 点击 **Reactions** 标签显示已保存的结果集。
3. 勾选两个或多个希望合并的结果集，然后点击 **Combine Answer Sets**。

The screenshot shows the SciFinder interface with the 'Combine Answer Sets' dialog box open. The dialog is titled 'Combine Answer Sets' and contains a list of saved answer sets. Two sets are selected: 'lipitor product (10)' and 'patents with expt procedures (26)'. The 'Combine Answer Sets' button is highlighted with a red box. The interface also shows a sidebar with 'SAVED SEARCHES' and a main area with 'SAVED ANSWER SETS' and a 'Combine Answer Sets' button.

注：如果选择的结果集超过 2 个，则第 4 步中的合并选项就只能选择 **Combine** 或 **Intersect**。

4. 点击希望使用的合并选项。

The screenshot shows the 'Combine Answer Sets' dialog box with the following options:

- Combine**: Include all reactions from both sets
- Intersect**: Include only reactions that appear in both sets
- Exclude**: Include only answers from lipitor product that are not in patents with expt procedures
- Exclude**: Include only answers from patents with expt procedures that are not in lipitor product

The 'Combine' option is selected. At the bottom right, there are two buttons: 'Combine Answer Sets' and 'Cancel'.

5. 点击 **Combine Answer Sets**。

获取与反应相关的数据

按照以下操作获取与反应相关的数据。

获取文献

获取文献

获取整个结果集或选中的反应的文献。

获取反应文献全文

获取一篇反应文献的全文

使用 [PatentPak](#) 获取专利 PDF 全文、或从特定站点的图书馆或网络资源获取全文。

获取物质信息

获取物质信息

在查看一条反应时，可以获取到以结构显示的反应物和产物的物质信息，和以文本显示的试剂和溶剂的物质信息。反应参与物也可以被用作其他检索的基础（如，查找这些物质的合成反应）。

获取反应参与物的物质来源信息

获取反应参与物的商业来源信息

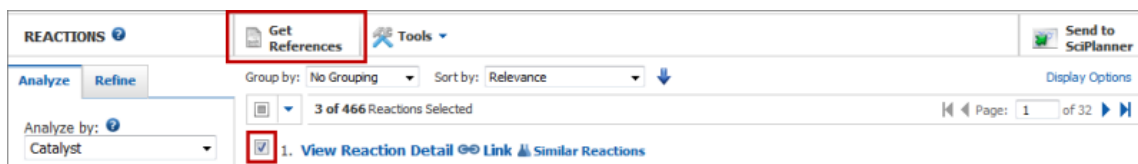
获取反应中某个物质的化学品供应商。

获取文献

可以获取到选中的反应或整个反应结果集的文献。

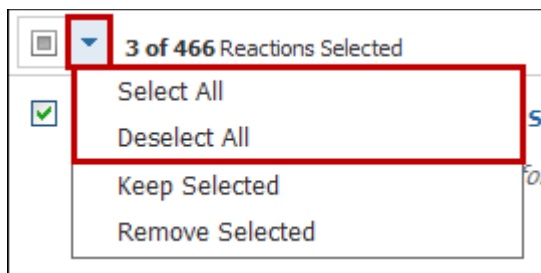
操作步骤

勾选感兴趣的反应，然后点击 **Get References**。



如果没有选中任何反应，SciFinder 将会认为您需要获取结果集中所有反应的文献。

注: 可以从下拉选项中，选择或取消选择所有的反应。



用相似的方法，也可以在 **Reaction Detail** 页面点击 **Get Reference Detail** 获取单条反应的文献。

获取一篇反应文献的全文

根据文献可用的选项，可以使用：

- **PatentPak** 查看一篇专利或专利族成员的 PDF 全文（需要订购 [PatentPak](#)）。
- **Other Sources** 链接到 SciFinder 外的全文资源。可以从您所在机构图书馆、网络免费资源或付费订购资源中获取全文。

操作步骤

打开一篇专利或专利族成员的 PDF 全文：

在反应页面的 **Overview** 区域，点击文献标题旁的 **PatentPak**。然后从下拉列表中点击文献。PDF 文件中使用的是原始专利语言。

2. [View Reaction Detail](#) [Link](#) [Similar Reactions](#)

Single Step *Hover over any structure for more options.*

Overview

Steps/Stages

1.1 R: t-BuCO₂H, S: THF, S: PhMe, S: Me(CH₂)₅Me, 3-4 h, 110-120°C

Notes

Paal-Knorr synthesis, azeotropic, Reactants: 2, Reagents: 1, Solvents: 3, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1

References

Preparation of pyrrololethoxyphenylethoxypropanoates and related compounds for treatment of hyperglycemia, hypertension, cardiovascular disease, and eating disorders.

Quick View **PATENTPAK**

Patent No.	Kind	Language
WO 2001053257	A2	English
Patent Family		
EP 1250323	B1	English
JP 5144421	B2	Japanese

Experimental Procedure

General/Typical Procedure: **Preparation of 1-(2-hydroxyethyl)** mixture of hexan-2,5-dione (5 g), ethanolamine (26.7 g), pivalic heptane: tetrahydrofuran: toluene (4:1:1, 5 mL) was refluxed with stirring at 110–120 °C. Water formed during the reaction was removed azeotropically during 3 - 4 h. The mixture was cooled and the solvent was removed. The residue

Patent No. 2): A containing n-

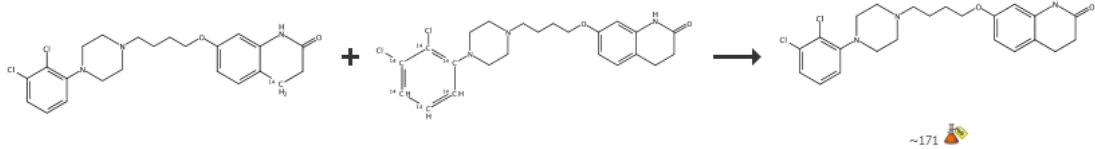
也可以在文献的 [Quick View](#) 窗口中点击 **PatentPak**，或在 [Reaction Detail](#) 页面点击 **View with PatentPak**。


链接到其他全文资源

在反应页面的 **Overview** 区域，点击文献标题旁的 **Other Sources**。

50. [View Reaction Detail](#) [Link](#) [Similar Reactions](#)

Single Step *Hover over any structure for more options.*



~171 

▼ [Overview](#)

Steps/Stages	Notes
1.1 S:CH ₂ Cl ₂	Reactants: 2, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1
	References
	Synthesis of multi-labeled [14C]aripiprazole
	Quick View Other Sources
	By Bonacorsi, Samuel J., Jr. et al
	From Journal of Labelled Compounds & Radiopharmaceuticals, 49(1), 1-9; 2006

也可以在文献的 [Quick View](#) 页面点击 **Other Sources**，或在 [Reaction Detail](#) 页面点击 **Link to Other Sources**。

获取物质信息

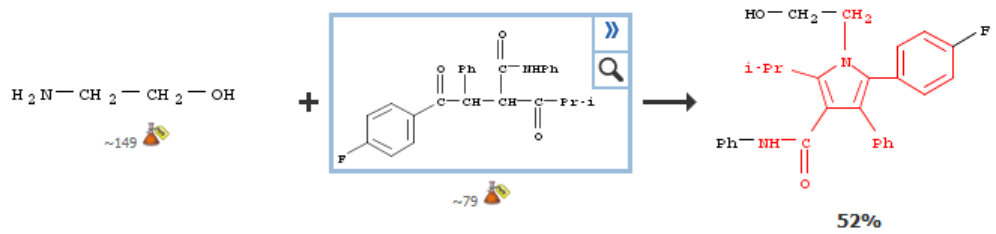
在查看一条反应时，可以获取到以结构显示的反应物和产物的物质信息，和以文本显示的试剂和溶剂的物质信息。反应参与物也可以被用作其他检索的基础（如，查找这些物质的合成反应）。

操作步骤

1. 将鼠标放置在反应中的某个结构或 **Overview** 区域的试剂或溶剂上。目标物质被高亮显示，同时出现 2 个图标。例：

1. [View Reaction Detail](#) [Link](#) [Similar Reactions](#)

Single Step Hover over any structure for more options.



~149 ~79 52%

▼ Overview

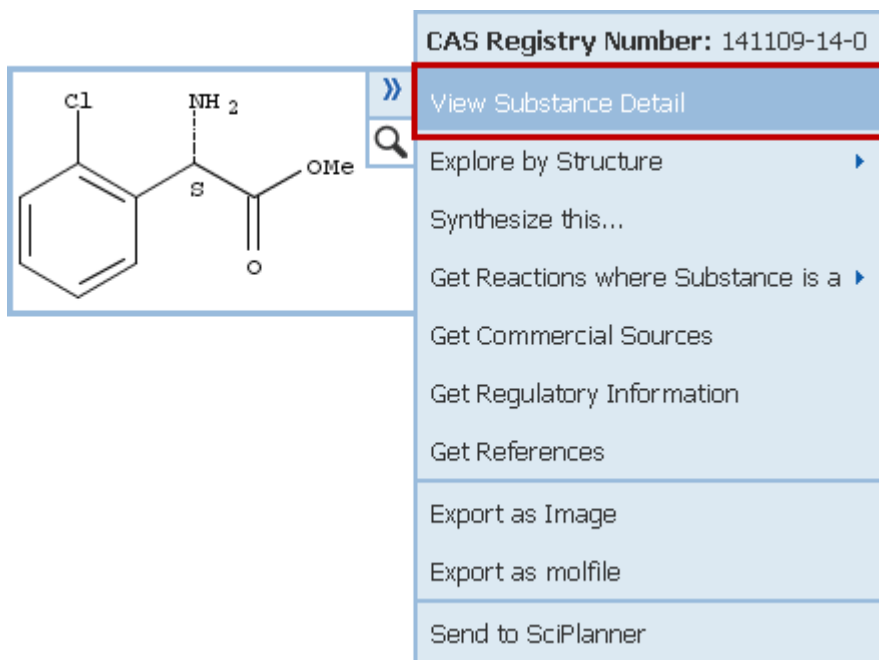
Steps/Stages	Notes
1.1 R: t-Bu » , S: THF, S: PhMe, S: Me(CH ₂) ₅ Me, 3-4 h, 110-12 Q	Paal-Knorr cyclization, Reactants: 2, Reagents: 1, Solvents: 3, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1

References

Preparation of pyrrolylethoxyphenylethoxypropanoates having hypolipidemic and hypocholesteremic activity

[Q Quick View](#) **PATENTPAK** ▼
By Lohray, Braj Bhushan et al
From U.S. Pat. Appl. Publ., 20030236254, 25 Dec 2003

2. 想不离开当前页面就能预览物质信息，请点击 [Quick View](#) 图标 [Q](#)
3. 要查看物质详情，则请点击 [»](#) 显示物质选项，然后选择 **View Substance Detail**。



CAS Registry Number: 141109-14-0

- View Substance Detail**
- Explore by Structure ▶
- Synthesize this...
- Get Reactions where Substance is a ▶
- Get Commercial Sources
- Get Regulatory Information
- Get References
- Export as Image
- Export as molfile
- Send to SciPlanner

4. 要使用物质作为其他检索的基础，则请点击 [»](#) 显示物质选项（如上所示），然后选择：

Explore by Structure	<p>从二级菜单中选择检索类型：</p> <p>Chemical Structure – 将结构上传到物质检索页面的化学结构区域。然后选择检索类型：Exact Structure、Substructure 或 Similarity。</p> <p>Markush Patents by Structure – 将结构上传到物质检索页面中的 Markush 区域。然后选择检索类型：Allow variability only as specified 或 Substructure。</p> <p>Reactions – 将结构上传到反应检索页面的反应结构区域。然后选择检索类型：Allow variability only as specified 或 Substructure。反应角色被设定为任意。</p>
Synthesize this	获取此物质作为产物的反应。
Get Reactions where Substance is a	<p>获取此物质作为某个设定的角色参与的反应。</p> <p>在二级菜单中选择反应角色：</p> <p>Product (产物), Reactant (反应物), Reagent (试剂), Reactant/Reagent (反应物/反应试剂), Catalyst (催化剂), Solvent (溶剂), Any Role (任意角色)</p>
Get Commercial Sources	获取物质的商业来源信息（如果该选项显示为暗色，则表明不能获取到该物质的商业来源信息）。
Get Regulatory Information	获取物质的管控信息（如果该选项为暗色，则表明不能获取到该物质的管控信息）。
Get References	获取报道该物质的文献。

5. 要导出物质，则请点击  显示物质选项，然后选择：

Export as image	<p>Substance image is saved as a GIF file.</p> <p>将物质图片保存为 GIF 文件。</p>
Export as molfile	<p>Substance is saved as a MOL file.</p> <p>将物质保存为 MOL 文件。</p>

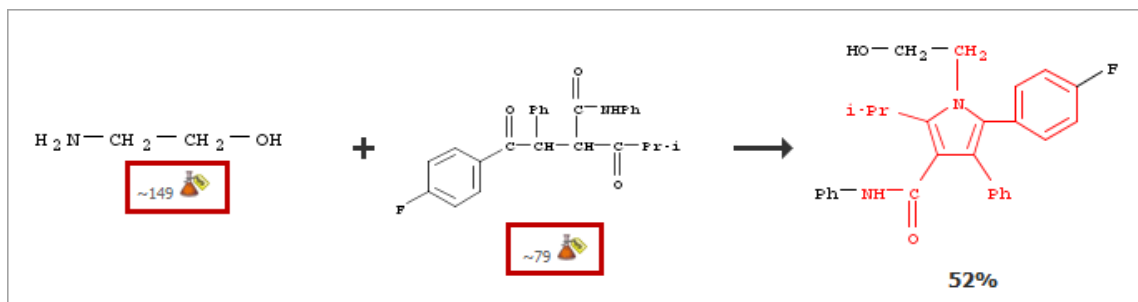
6. 点击  显示物质选项，然后选择 **Send to SciPlanner** 将物质发送到 SciPlanner.

获取反应参与物的商业来源

可以获取到反应中化学品的商业来源。

操作步骤

如果反应中某个物质下方有一个烧瓶图标，就表明可以获取到该物质的商业来源。点击烧瓶可以获取到化学品供应商的信息。



或者:

1. 将鼠标放置在反应中的某个结构、或 Overview 区域的试剂或溶剂上。目标物质将被高亮显示，并同时出现 2 个图标。

1. [View Reaction Detail](#) [Link](#) [Similar Reactions](#)

Single Step *Hover over any structure for more options.*


Reaction scheme showing the synthesis of a pyrrole derivative. The reactants are 2-aminoethanol ($\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{OH}$) and a substituted benzamide derivative. The product is a pyrrole ring substituted with an ethoxy group ($\text{HO}-\text{CH}_2-\text{CH}_2$), a phenyl group (Ph), and a 4-fluorophenyl group (F). The yield is 52%.

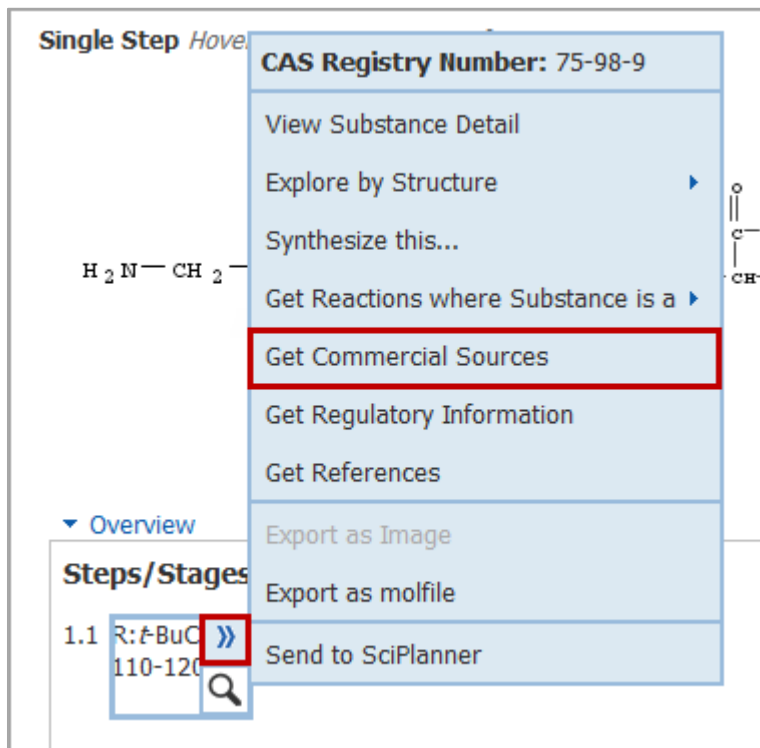
Overview

Steps/Stages	Notes
1.1 R: t-BuO S: THF S: PhMe S: Me(CH₂)₅Me , 3-4 h, 110-12	Paal-Knorr cyclization, Reactants: 2, Reagents: 1, Solvents: 3, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1

References

Preparation of pyrrolylethoxyphenylethoxypropanoates having hypolipidemic and hypocholesteremic activity
 Quick View **PATENTPAK**
 By Lohray, Braj Bhushan et al
 From U.S. Pat. Appl. Publ., 20030236254, 25 Dec 2003

2. 点击  显示物质选项，然后选择 **Get Commercial Sources**。



保存和分享反应的选项

在获取到与工作有关的反应后，可以保存这些反应以备将来使用，或与其他 SciFinder 用户分享。

保存当前结果集

保存当前结果集

结果集将被保存在 SciFinder 服务器上。在以后 SciFinder 检索中可以访问已保存的结果集。

分享反应结果

分享反应结果

可以将单条反应或一个已保存结果集的链接与他人分享。收到链接的用户必须登录 SciFinder 后才可以查看反应。

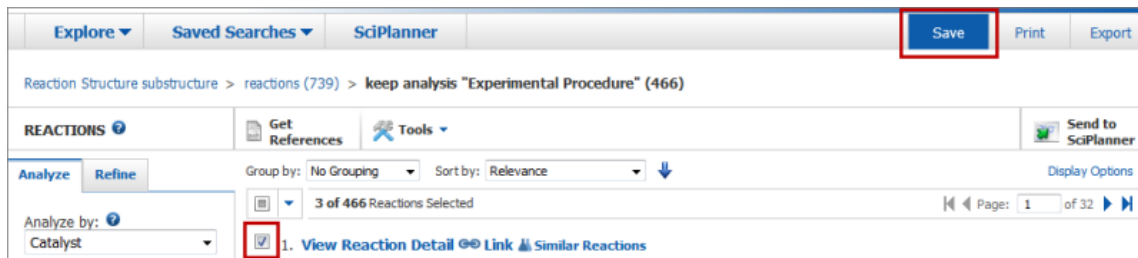
导出反应结果	<p>导出反应结果</p> <p>反应结果可以被导出为 PDF、文字处理软件可读的 RTF 文件、或 SciFinder 可读的 AKX 文件。</p>
导入反应结果	<p>导入反应结果</p> <p>可以导入被存为 AKX 格式文件的反应。被导入的反应即成为当前结果集并被展示在反应页面。</p>
打印反应结果	<p>打印反应结果</p> <p>将反应结果打印为 PDF 文件。</p>
将反应推送到 SciPlanner	<p>将反应发送到 SciPlanner</p> <p>SciPlanner 有助于在可视化的工作区组织反应和其他 SciFinder 检索结果，组织后的信息可以被保存和分享。</p>
打开保存的结果集	<p>打开一个已保存的结果集</p> <p>保存的结果集中的反应就变为当前结果集并被展示在反应页面。</p>
编辑保存的结果集信息	<p>编辑已保存的结果集信息</p> <p>可以改变一个已保存结果集的名称或描述。</p>
删除保存的结果集	<p>删除已保存的结果集</p> <p>可以从 SciFinder 服务器上删除一个已保存的结果集。删除的结果集将无法再访问。</p>

保存当前结果集

结果集将被保存在 SciFinder 服务器上。选择 **Saved Searches > Saved Answer Sets** 访问已保存的结果集。

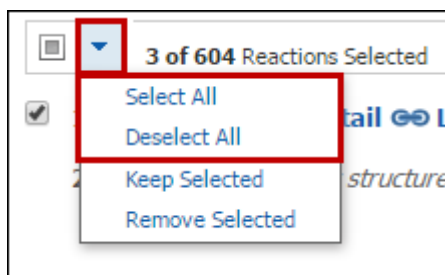
操作步骤

1. 在反应页面，勾选想要保存的反应，然后点击 **Save**。



如果没有选中任何反应，SciFinder 则认为您希望保存结果集中的所有反应。

注：可以通过下拉选项，选择或取消选择所有的反应。



2. （可选）在出现的对话框中，选择保存 **All answers** 或 **Only selected answers**。

Save This Answer Set * Required

Save:

All answers

Only selected answers

Title: *

Description:

3. 为结果集输入一个 **Title**。
4. （可选）输入一个 **Description**。
5. 点击 **OK**。

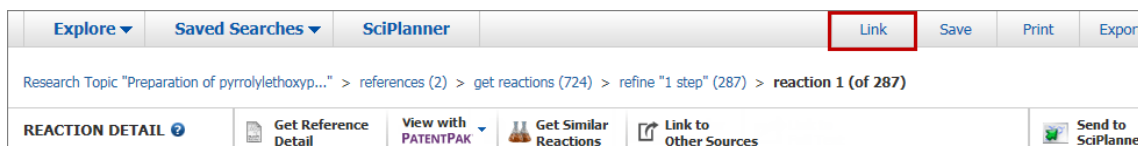
用相似的方法，在反应详情页面点击 **Save**，保存单条反应。

分享反应结果

可以将单条反应或一个已保存的结果集的链接与他人分享。收到链接的用户必须登录 SciFinder 后才能查看反应。

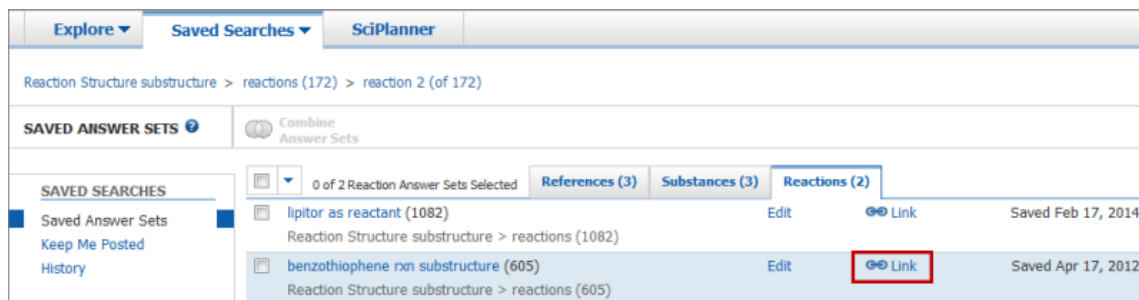
操作步骤

1. 在 **Reaction Detail** 页面点击 **Link**。

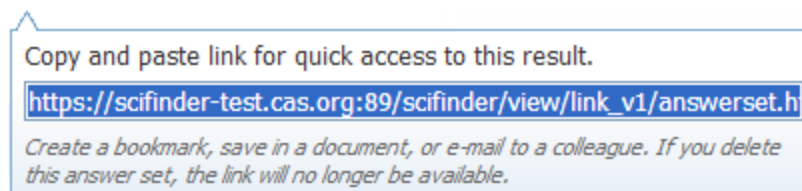


— 或者 —

在 **Saved Searches > Saved Answer Sets** 页面点击结果集旁的 **Link** 图标。



2. 用 **Ctrl-C** 或其他复制方法，复制文本框中的 URL 链接。



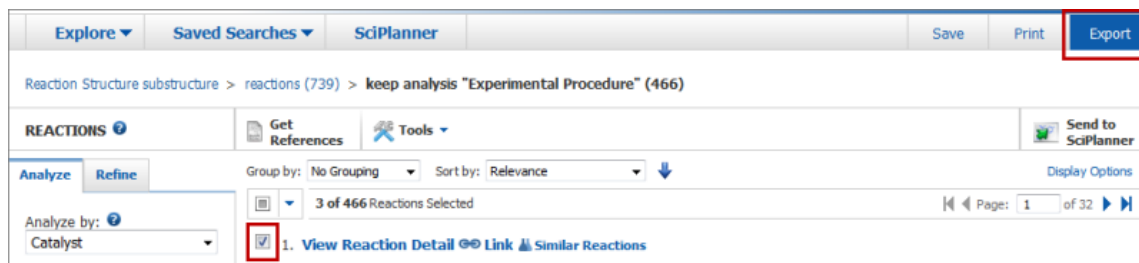
3. 将 URL 粘贴到 e-mail 或文件中，或作为浏览器标签使用。

导出反应结果

反应结果可以被导出为 PDF 文件、文字处理软件可读的 RTF 文件、或者为 SciFinder 可读的 AKX 文件。

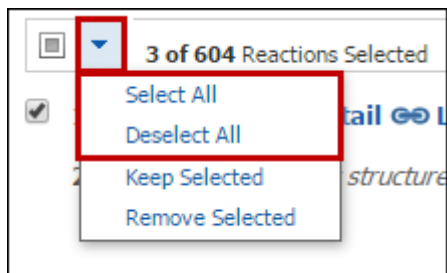
操作步骤

1. 在反应页面勾选想要导出的反应，然后点击 **Export**。



如果没有选中任何反应，SciFinder 则认为您希望导出结果集中的所有反应。

注：可以通过下拉选项，选择或取消选择所有的反应。



2. 在导出页面中，选择是导出所有的（**All**）结果、选中的（**Selected**）结果还是指定范围（**Range**）内的结果。

3. 在 **For** 下方，选择文件类型。

文件类型	使用
Portable Document Format (*.pdf) *.pdf	将反应图和概要或详情数据导出为 PDF 文件。需要 PDF 阅读器查看和打印 PDF 文件。
Rich Text Format (*.rtf)	将反应图和概要或详情数据导出为文字处理软件可读的 RTF 文件。

*.rtf	
Answer Key eXchange (*.akx) *.akx	将反应导出为 AKX 格式，可使用 Import 按钮将 AKX 文件导入到 SciFinder 中，被导入的反应即成为当前结果集。

4. 输入 **Details** 的数据。（出现在 **Details** 下方的选项取决于第 3 步选择的文件类型。）
5. 点击 **Export**。

用相似的方法，可以在文献详情页面点击 **Export** 导出单条反应。

导入反应结果

可以将 AKX 格式的反应导入进 SciFinder 中。被导入的反应即成为当前结果集并被展示在反应结果集页面。

操作步骤

1. 在检索页面右侧 **Saved Answer Sets** 的下方，点击 **Import**。

The screenshot displays the SciFinder interface for reaction structure editing and search. On the left, the 'Structure Editor' is active, showing a 'Click to Edit' prompt. Below it, there is an 'Import CXF' button and a 'Search' button. The 'Search Type' section has 'Substructure' selected. On the right, the 'SAVED ANSWER SETS' sidebar is visible, listing several saved sets. The 'Import' button in the 'View All' section of this sidebar is highlighted with a red box.

2. 点击 **Browse** 查找 AKX 文件。

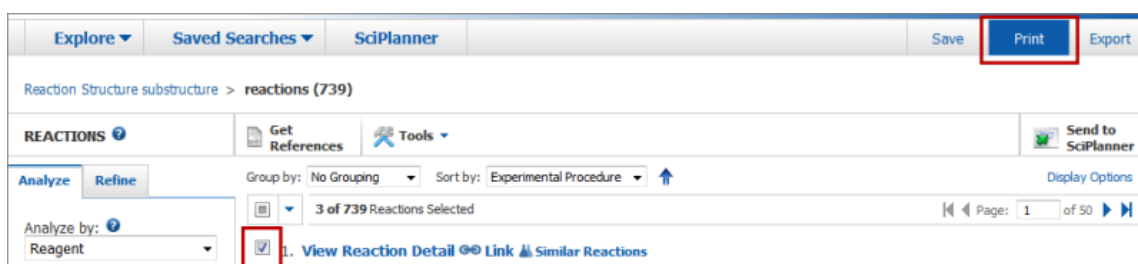
3. 双击 AKX 文件，或点击文件并选中，然后点击 **Open**。
4. 点击 **OK**。

打印反应

将反应打印为一个 PDF 文件。

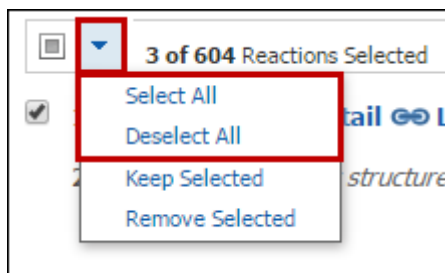
操作步骤

1. 在反应页面，勾选想要打印的反应，然后点击 **Print**。

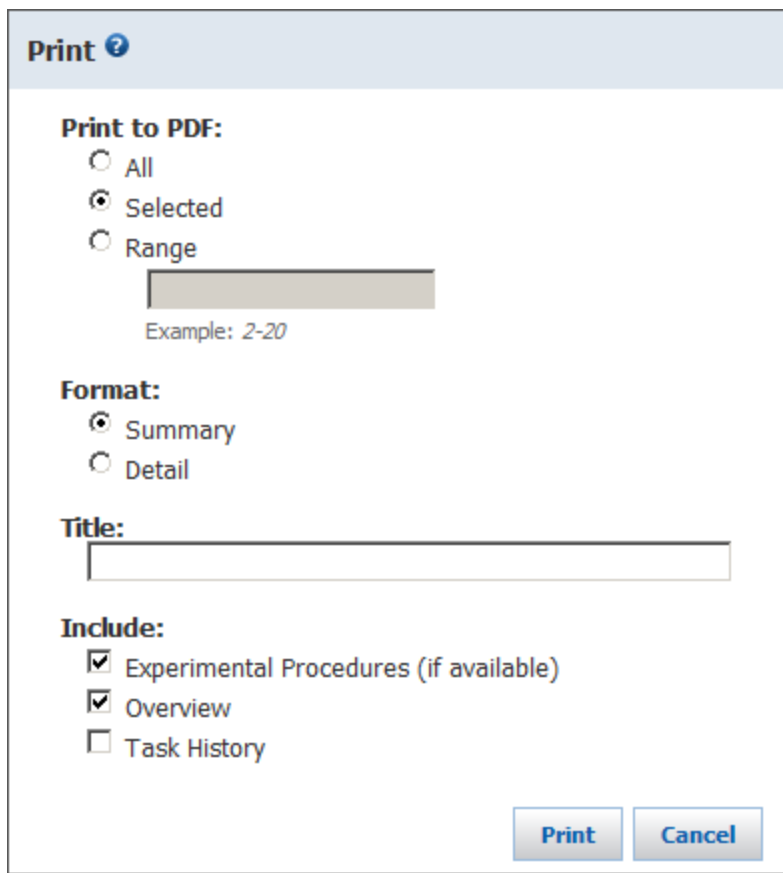


如果没有选中任何反应，SciFinder 则认为您希望打印结果集中的所有反应。

注：可以通过下拉选项，选择或取消选择所有反应。



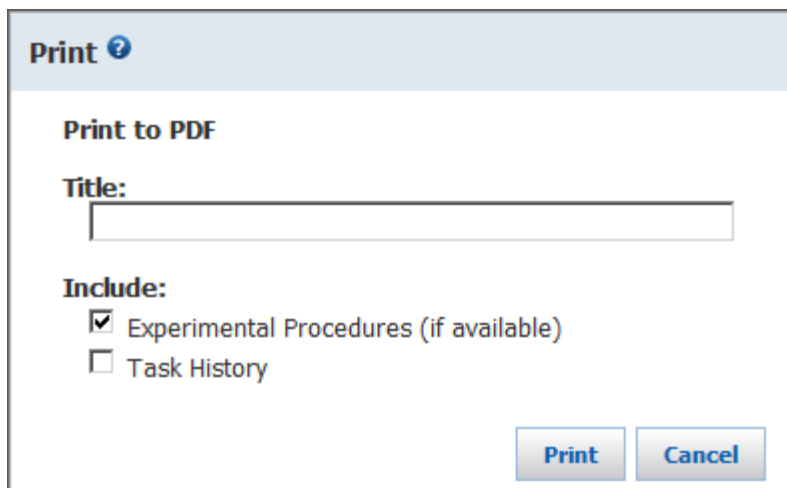
2. 在 **Print to PDF** 下方，选择是打印所有的 (**All**) 结果、选中的 (**Selected**) 结果还是指定范围 (**Range**) 内的结果。



The image shows a 'Print' dialog box with a light blue header and a white body. The title 'Print' is followed by a question mark icon. The dialog is organized into four sections: 'Print to PDF:' with radio buttons for 'All', 'Selected' (selected), and 'Range' (with a text input field and 'Example: 2-20'); 'Format:' with radio buttons for 'Summary' (selected) and 'Detail'; 'Title:' with a text input field; and 'Include:' with checkboxes for 'Experimental Procedures (if available)', 'Overview' (both checked), and 'Task History' (unchecked). At the bottom right are 'Print' and 'Cancel' buttons.

3. 选择 **Format**。
4. （可选）输入包含在 PDF 中的一个 **Title**。
5. （可选）勾选 **Include** 下方的选项。
6. 点击 **Print**。

用相似的方法，点击反应详情页面的 **Print** 打印单条反应。输入一个 **Title**，并勾选 **Include** 下方的选项。然后点击 **Print**。

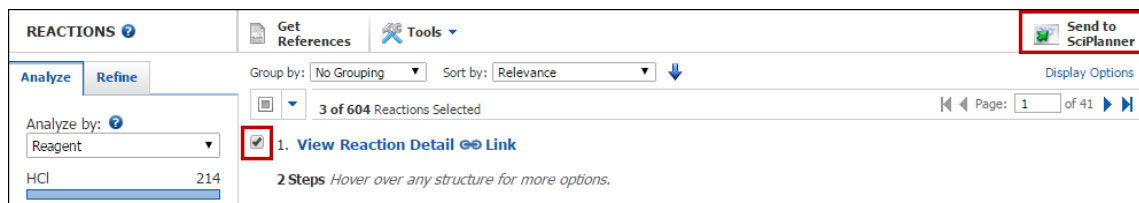


将反应发送到 SciPlanner

SciPlanner 有助于在可视化的工作区组织反应和其他 SciFinder 检索结果，组织后的信息可以被保存和分享。按照以下操作步骤，将选中的反应发送到 SciPlanner。

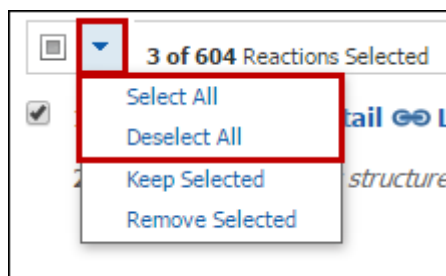
操作步骤

在反应页面，勾选想要发送到 SciPlanner 的反应，然后点击 **Send to SciPlanner**。



如果没有选中任何反应，SciFinder 则认为您希望发送结果集中所有的反应。

注：可以选择下拉选项，选择或取消选择所有的反应。



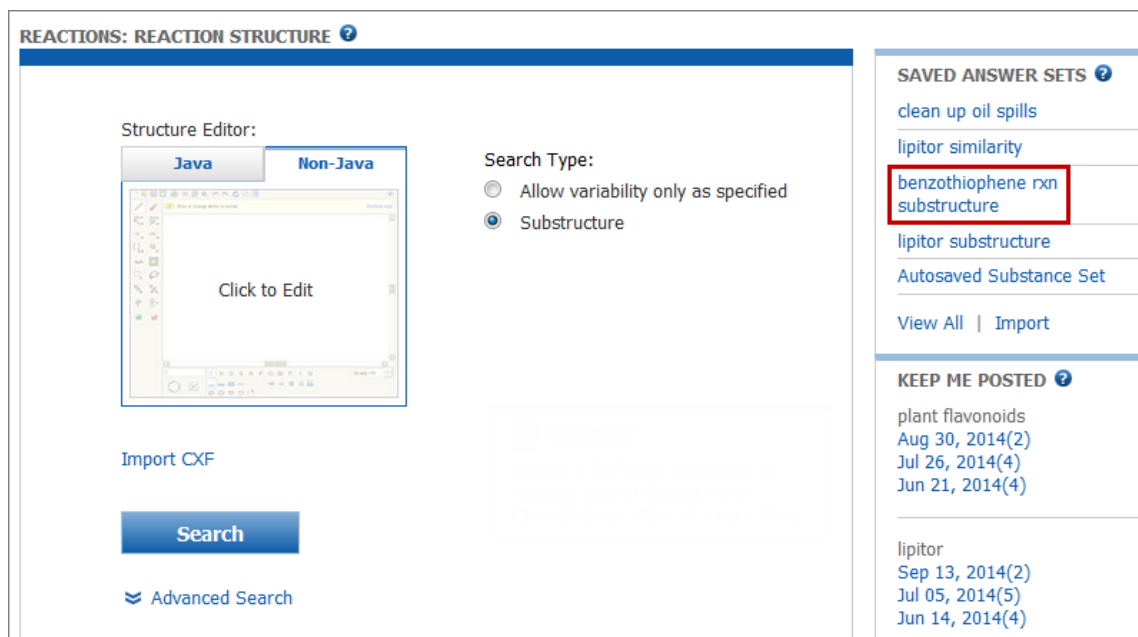
用相似的方法，在反应详情页面点击 **Send to SciPlanner** 将单条反应发送到 SciPlanner。

打开一个已保存的结果集

一个已保存的结果集被打开后，会被展示在反应页面并成为当前结果集。

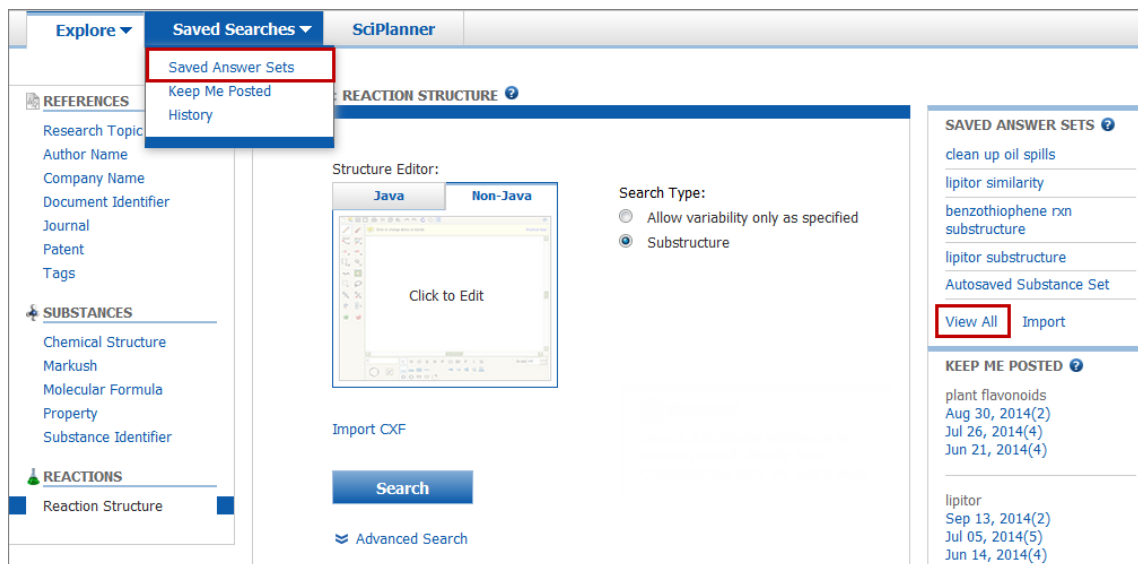
操作步骤

1. 点击检索页面 **Saved Answer Sets** 下方结果集名称，打开一个保存的结果集。

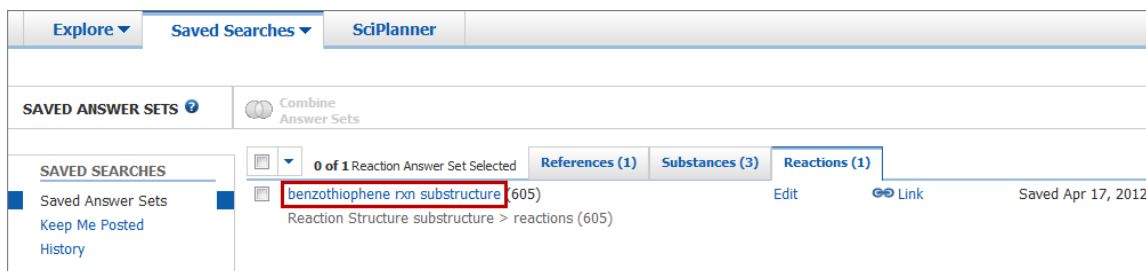


– 或者 –

1. 点击右侧的 **View All**，或选择 **Saved Searches > Saved Answer Sets** 打开没有被列出的结果集。



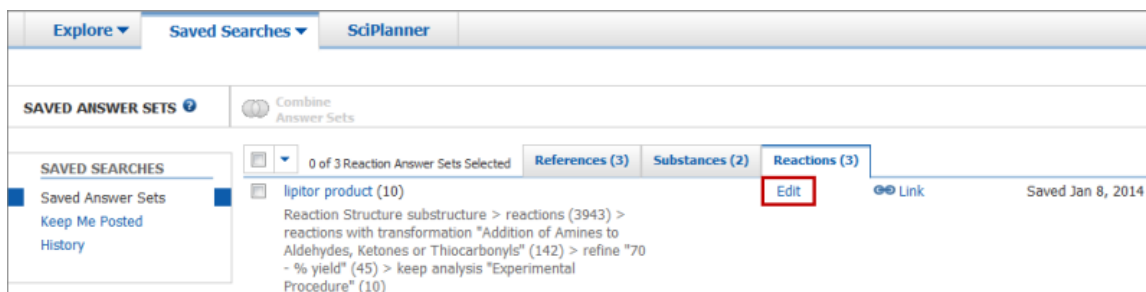
2. 点击 **Reaction** 标签。
3. 点击结果集的名称。



编辑保存的结果集信息

操作步骤

1. 选择 **Saved Searches > Saved Answer Sets**。
2. 点击想要编辑的结果集类型（文献、物质、反应）。
3. 点击想要编辑的结果集旁边的 **Edit**。



4. 根据需要，修改 **Title** 或 **Description**。

Edit Answer Set

* Required

Title: *
lipitor product

Description:

OK Cancel

5. 点击 **OK**。

删除已保存的结果集

可以从 SciFinder 服务器上删除一个已保存的结果集。删除的结果集不能再被访问。

操作步骤

1. 选择 **Saved Searches > Saved Answer Sets**。
2. 点击想要删除的结果集类型（文献、物质、反应）。
3. 勾选想要删除的结果集。
4. 在选项中选择 **Delete Selected**。

Explore Saved Searches SciPlanner

SAVED ANSWER SETS Combine Answer Sets

SAVED SEARCHES Saved Answer Sets Keep Me Posted History

2 of 3 Reaction Answer Sets Selected References (3) Substances (2) Reactions (3)

Answer Set	Count	Action	Link	Save Date
substructure > reactions (3943) > formation "Addition of Amines to Aldenhyues, Ketones or Thiocarbonyls" (142) > refine "70 - % yield" (45) > keep analysis "Experimental Procedure" (10)	10	Edit	Link	Saved Jan 8, 2014
patents with expt procedures (26) Opened saved answer set "clopidogrel rxn substructure" (691) > keep analysis "Number of Steps" (58) > keep analysis "Experimental Procedure" (26)	26	Edit	Link	Saved Oct 5, 2012
benzothioephene rxn substructure (605)	605	Edit	Link	Saved Apr 17, 2012



SciFinder[®] 使用手册

第九卷 什么是 MethodsNow[™]?

美国化学文摘社
CAS, a division of American Chemical Society

9. 什么是 **MethodsNow™**?

什么是 MethodsNow™? 1

什么是 MethodsNow™?

MethodsNow™是一个单独许可的模块，涵盖了超过 180 种英文期刊、2000 年至今的化学反应。

在反应或反应详细信息页面，在 MethodsNow 下列出了有反应详情的反应。

11. [View Reaction Detail](#) [Link](#) [Similar Reactions](#)

Single Step *Hover over any structure for more options.*

35% 18%

▼ Overview	Notes
<p>Steps/Stages</p> <p>1.1 C:PtCl₂, S:MeNO₂, 20 min, 0°C; 1 h, rt; 3 h, 40°C</p>	<p>Reactants: 1, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1</p>
	<p>References</p> <p>A Cycloisomerization/Friedel-Crafts Alkylation Strategy for the Synthesis of Pyrano[3,4-b]indoles</p> <p>Quick View Other Sources</p> <p>By Medeiros, Matthew R. et al</p> <p>From Organic Letters, 13(15), 4012-4015; 2011</p>

▶ **Experimental Procedure**

▼ **METHODSNow™**

Procedure

- Cool a solution of 2-(3-(((2R,3S,6S)-2-(methoxymethyl)-6-phenyl-3,6-dihydro-2H-pyran-3-yl)oxy)prop-1-yn-1-yl)aniline (99.0 mg, 0.283 mmol) in CH₃NO₂ (2.8 mL) to 0 °C.
- Add PtCl₂ (15.0 mg, 0.566 mmol) to the reaction mixture.

[View more...](#)

Available Experimental Data

¹H NMR, ¹³C NMR, IR, HRMS, Mass Spec, R_f, State

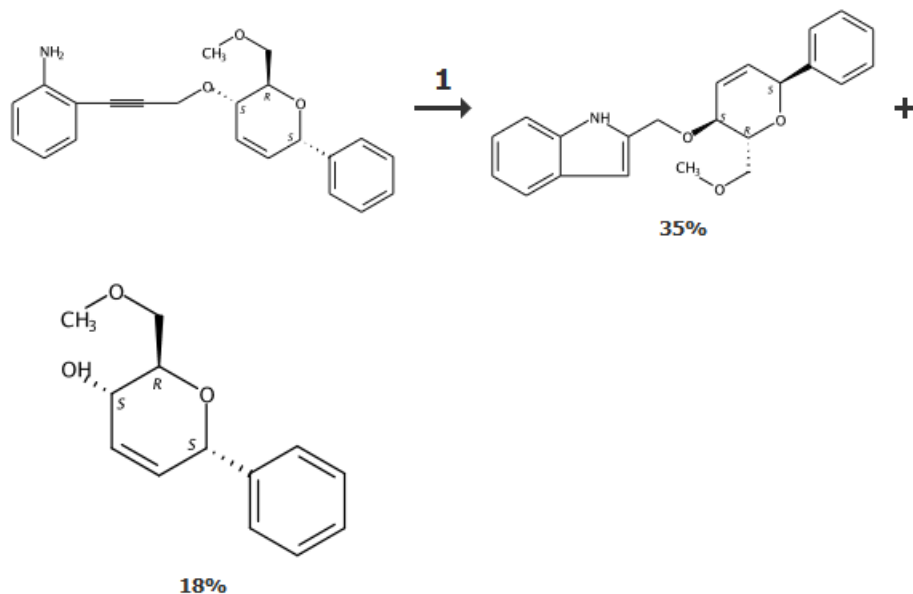
[View with MethodsNow](#)

- 点击 **View more** 或 **View with MethodsNow** 在新窗口中显示方法详情。

MethodsNow

A Cycloisomerization/Friedel-Crafts Alkylation Strategy for the Synthesis of Pyrano[3,4-b]indoles

By Medeiros, Matthew R.; Schaus, Scott E.; Porco, John A., Jr.
 From Organic Letters, 13(15), 4012-4015; 2011
 Published by American Chemical Society



Products	D- <i>erythro</i> -Hex-2-enitol, 1,5-anhydro-2,3-dideoxy-4- <i>O</i> -(1 <i>H</i> -indol-2-ylmethyl)-6- <i>O</i> -methyl-1- <i>C</i> -phenyl-, (1 <i>S</i>)-, 35%, CAS RN: 1314595-76-0 D- <i>erythro</i> -Hex-2-enitol, 1,5-anhydro-2,3-dideoxy-6- <i>O</i> -methyl-1- <i>C</i> -phenyl-, (1 <i>S</i>)-, 18%, CAS RN: 1314595-77-1
Reactants	D- <i>erythro</i> -Hex-2-enitol, 4- <i>O</i> -[3-(2-aminophenyl)-2-propyn-1-yl]-1,5-anhydro-2,3-dideoxy-6- <i>O</i> -methyl-1- <i>C</i> -phenyl-, (1 <i>S</i>)-, CAS RN: 1314595-75-9
Catalysts	Platinum chloride (PtCl ₂), CAS RN: 10025-65-7
Solvents	Nitromethane, CAS RN: 75-52-5
Procedure	<ol style="list-style-type: none"> 1. Cool a solution of 2-(3-(((2<i>R</i>,3<i>S</i>,6<i>S</i>)-2-(methoxymethyl)-6-phenyl-3,6-dihydro-2<i>H</i>-pyran-3-yl)oxy)prop-1-yn-1-yl)aniline (99.0 mg, 0.283 mmol) in CH₃NO₂ (2.8 mL) to 0 °C. 2. Add PtCl₂ (15.0 mg, 0.566 mmol) to the reaction mixture. 3. Stir the reaction mixture for 20 minutes at 0 °C. 4. Remove the reaction mixture from the ice bath when TLC analysis shows no reaction . 5. Stir the reaction mixture at room temperature.

Print/Export

Close

- 滚动页面查看方法详细信息。

MethodsNow	
	(1S)-, 35%, CAS RN: 1314595-76-0 D-erythro-Hex-2-enitol, 1,5-anhydro-2,3-dideoxy-6-O-methyl-1-C-phenyl-, (1S)-, 18%, CAS RN: 1314595-77-1
Reactants	D-erythro-Hex-2-enitol, 4-O-[3-(2-aminophenyl)-2-propyn-1-yl]-1,5-anhydro-2,3-dideoxy-6-O-methyl-1-C-phenyl-, (1S)-, CAS RN: 1314595-75-9
Catalysts	Platinum chloride (PtCl ₂), CAS RN: 10025-65-7
Solvents	Nitromethane, CAS RN: 75-52-5
Procedure	<ol style="list-style-type: none"> 1. Cool a solution of 2-(3-(((2R,3S,6S)-2-(methoxymethyl)-6-phenyl-3,6-dihydro-2H-pyran-3-yl)oxy)prop-1-yn-1-yl)aniline (99.0 mg, 0.283 mmol) in CH₃NO₂ (2.8 mL) to 0 °C. 2. Add PtCl₂ (15.0 mg, 0.566 mmol) to the reaction mixture. 3. Stir the reaction mixture for 20 minutes at 0 °C. 4. Remove the reaction mixture from the ice bath when TLC analysis shows no reaction . 5. Stir the reaction mixture at room temperature. 6. After 1 hour, heat the reaction mixture to 40 °C. 7. Stir the reaction mixture for 3 hours. 8. Remove the solvent. 9. Adsorb the residue onto silica gel. 10. Purify the residue by flash chromatography (gradient elution, 90:10 to 60:40, hexanes:EtOAc).
Transformation	Formation of Alkyl Halides/ Alcohols from Ethers /Silyl Ethers
Scale	milligram
¹H NMR	¹ H NMR (400 MHz ,CDCl ₃) δ = 7.45 - 7.41 (m, 2 H), 7.40 - 7.30 (m, 3 H), 6.12 - 6.02 (m, 2 H), 5.28 (br. s., 1 H), 4.29 (br. s., 1 H), 3.67 - 3.60 (m, 1 H), 3.56 - 3.50 (m, 2 H), 3.38 (s, 3 H), 2.52 (d, J= 3.1 Hz, 1 H).
¹³C NMR	¹³ C NMR (101 MHz , CDCl ₃) δ = 139.3, 129.6, 128.7, 128.4, 128.1, 128.0, 73.9, 73.8, 70.5, 65.9, 59.5.
IR	IR (thin film, NaCl) ν 3419, 2889, 1452, 1193, 1073, 740, 700.
HRMS	HRMS calculated for C ₂₂ H ₂₄ NO ₃ [M+H] ⁺ :350.1756; found:350.174614.
Mass Spec	LRMS Calculated for C ₂₂ H ₂₃ NNaO ₃ [M+Na] ⁺ : 243.1; found: 243.1.
R_f	R _f = 0.36 (60:40, hexanes: EtOAc).
State	Yellow oil.
CAS Method Number	3-049-CAS-80983

Print/Export

Close

- 如果是一个多步反应，则可点击反应步骤号查看每步反应详情。

MethodsNow

Anion-Binding Properties of a Cyclic Pseudoheptapeptide Containing 1,5-Disubstituted 1,2,3-Triazole Subunits

By Krause, Martin R.; Goddard, Richard; Kubik, Stefan
 From Journal of Organic Chemistry, 76(17), 7084-7095; 2011
 Published by American Chemical Society

Sequence 1: Reaction Steps [1](#) [2](#) [3](#)

Sequence 2: Reaction Steps [1](#) [2](#) [3](#) [4](#) [5](#)

Sequence 3: Reaction Steps [1](#) [2](#) [3](#) [4](#) [5](#) [6](#) [7](#)

(Converging)

Products	2-Pyridinamine, 6-[2-(trimethylsilyl)ethynyl]-, 97%, CAS RN: 173314-97-1
Reactants	2-Pyridinamine, 6-bromo-, CAS RN: 19798-81-3 Ethynyltrimethylsilane, CAS RN: 1066-54-2
Catalysts	Phosphine, 1,1'-[(oxydi-2,1-phenylene)]bis[1,1-diphenyl-, CAS RN: 166330-10-5 Cuprous iodide, CAS RN: 7681-65-4 Dichlorobis(triphenylphosphine)palladium, CAS RN: 13965-03-2
Solvents	Triethylamine, CAS RN: 121-44-8
Procedure	1. Stir 2-Amino-6-bromopyridine (1.5 g, 8.7 mmol), (Ph ₃ P) ₂ PdCl ₂ (240 mg, 345 μmol, 4 mol %), bis(2-

[Print/Export](#) [Close](#)

- 要导出方法详情，则请点击 **Print/Export**。可以用 PDF 或 XLS 格式导出，并可选择是仅导出当前方法还是导出反应中的所有方法。

Print/Export

Format: PDF
 XLS

This MethodsNow™ Protocol
 All MethodsNow™ Protocols



SciFinder[®] 使用手册

第十卷 查找化合物商业来源

美国化学文摘社

CAS, a division of American Chemical Society

10. 查找化合物商业来源

查找化合物商业来源选项.....	1
获取供应商信息.....	2
操作步骤.....	2
商业来源信息页面图示.....	3
商业来源信息详情页面图示.....	5
重排供应商信息.....	6
操作步骤.....	6
保留或者移除选择的供应商.....	7
操作步骤.....	7
分析供应商信息.....	8
操作步骤.....	8
查看供应商信息详情.....	11
指定首选和非首选供应商.....	12
操作步骤.....	13
打印供应商信息.....	14
操作步骤.....	14
导出供应商信息.....	15
操作步骤.....	15

查找化合物商业来源选项

如果一个物质是商业可获得的，则可以通过 [SciFinder](#) 获取到其全球供应商的信息。

获得商业来源信息

可获取物质结果集、反应结果集或 [SciPlanner](#) 中物质的商业来源信息

商业来源信息排序

当获取到物质商业来源信息后，可以选择相应条件对商业来源信息进行排序

保留或移除商业来源信息列表

可以手动选择修改产品商业来源信息列表，可以保留或者移除选择的商业来源信息

分析商业来源信息

可以按照不同的标准筛选供应商并展示目标供应商，可以根据展示的信息创建一个新结果集或返回初始检索结果集。

查看商业来源信息详情

商业来源信息包括供应商名称、联系方式、地址和物质信息。

指定首选或非首选供应商

可以指定首选或非首选供应商。查看供应商信息时，首选的供应商将被首先展示。也可以根据供应商的优选状态排序或分析商业来源

打印供应商信息

供应商信息可以被打印成 [PDF](#) 格式文件

导出供应商信息

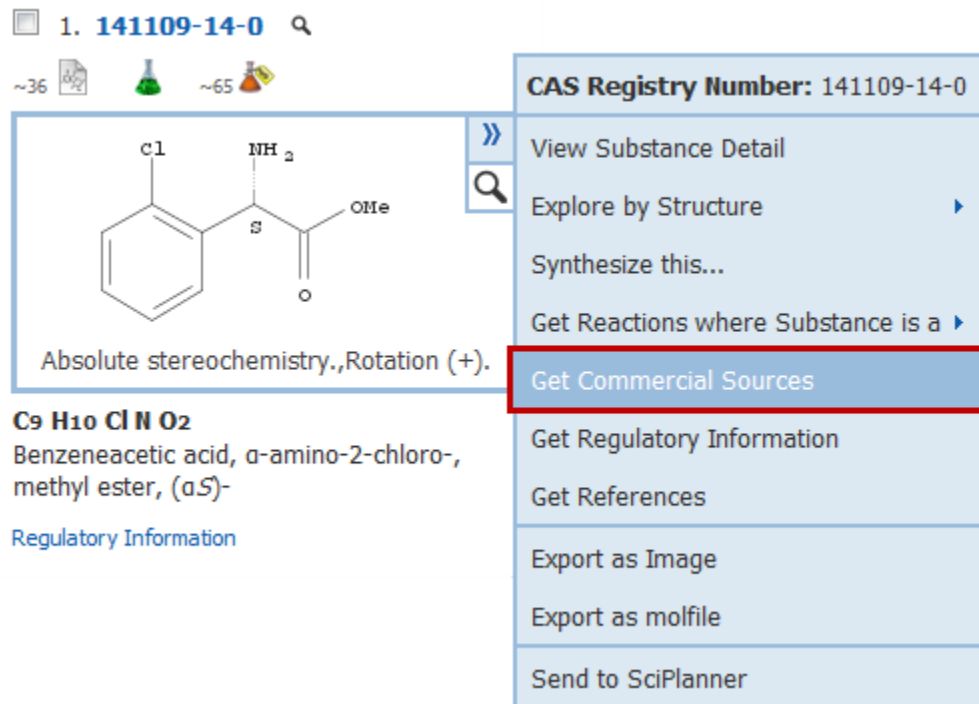
供应商信息可以导出成几种文件格式，包括 [excel](#) 格式文件

获取供应商信息




可以获取物质结果集、反应结果集或 SciPlanner 中物质的商业来源信息。

操作步骤

1. 请将光标放在物质上高亮显示物质，然后点击  显示物质选项。
2. 点击 **Get Commercial Sources**



1. 141109-14-0

~36   ~65 

COC(=O)[C@H](Cl)Cc1ccc(Cl)cc1

Absolute stereochemistry.,Rotation (+).

C₉ H₁₀ Cl N O₂
Benzeneacetic acid, α-amino-2-chloro-, methyl ester, (αS)-
Regulatory Information

CAS Registry Number: 141109-14-0

- View Substance Detail
- Explore by Structure
- Synthesize this...
- Get Reactions where Substance is a
- Get Commercial Sources**
- Get Regulatory Information
- Get References
- Export as Image
- Export as molfile
- Send to SciPlanner

物质的商业来源信息将被展示在**商业来源信息**页面中。

在 SciFinder 不同页面，获取物质商业来源信息方法不同。更多信息，请参阅：

- 在物质结果集中获取商业来源信息
- 在反应结果集中获取商业来源信息
- 在 SciPlanner 中获取商业来源信息

商业来源信息页面图示

一次可以获取一个或多个物质的商业来源信息。结果将被展示在商业来源信息页面上。

Substance Identifier "619-58-9" > substances (1) > commercial sources (200)

COMMERCIAL SOURCES

Analyze by: Stock Status

Maintained in stock: 42
Typically in stock: 42
Intermittently available: 34
Synthesis on demand: 6
No Stock Status: 76

Show More

Sort by: Preferred Sources

0 of 200 Commercial Sources Selected


Commercial Source	Substance	Purity	Quantity	Purchasing Details	Stock Status	Ships Within
1. ALDRICH United States Preferred	619-58-9 4-Iodobenzoic acid	95-98%	Grams	Order from Source 5 g 25 g	Maintained in stock	
2. TCI America Fine Chemicals United States Preferred					Maintained in stock	1 week
3. 3B Scientific Corporation Product List United States Set Preference	619-58-9 4-IODOBENZOIC ACID	95-98%	Grams	100g, USD 311.67 250g, USD 759.69 500g, USD 1480.42 Bulk	Intermittently available	4 weeks
4. A Chemtek Product List United States Set Preference	619-58-9 4-Iodobenzoic acid	95-98%	Grams	1g 5g	Intermittently available	
5. Aaron Chemistry GmbH Product List Germany Set Preference	619-58-9 4-Iodo-benzoic acid	95-98%	Grams	25 g, EUR39.59 10 g, EUR19.26 5 g, EUR10.70		

点击图中的字母，查看商业来源信息页面各项的对应解释





A

要查看某个供应商的详细信息，则请点击供应商名称（如：ALDRICH）。信息将被展示在信息详情页面（[Source Detail screen](#)）。

在下拉菜单中，使用 **Set Preference** 指定首选供应商（Preferred）、非首选供应商（Non-Preferred）或不选择（No Preference）。

点击 **Quick View** 按钮 ，无需离开当前页面，就可查看物质信息详情。

点击购买详情列（Purchasing Details）中的 **Order from Source** 链接就可以链接到供应商的订购网页。

	<p>点击表格每列顶端的选项，对供应商的展示顺序进行重排。要按照相反的顺序排列，则请再点一次列表顶端的选项。</p> <p>也可以从 Sort by 下拉菜单中选择排序条件。此时，请点击蓝色箭头指定按升序或降序排列。</p>
	<p>使用 Analyze 工具条按照选择条件创建供应商子结果集。</p> <p>点击子结果集工具条查看子集信息。</p> <p>在分析条中，将显示数量最多的前 10 个子集。要选择所有的子集，则请点击 Show More。在出现的对话框中，可以选择展示一个或多个子集。</p>
	<p>点击链接打印或导出供应商信息。</p>
	<p>点击 Display Options 改变每一页展示的结果数量</p> <p>要查看另外一页，则可点击箭头跳转到第一页、前一页、下一页或者最后一页。也可以直接输入页码直接跳转到指定页。</p>

商业来源信息详情页面图示

商业来源信息详情页面展示了某一特定商业来源记录的详细信息。

Explore ▾ Saved Searches ▾ SciPlanner F Print Export

Substance Identifier "619-58-9" > substances (1) > commercial sources (200) > TCI America Fine Chemicals

SOURCE DETAIL ⓘ

Return E ◀ Previous | Next ▶

2. TCI America Fine Chemicals ✔ Preferred A

Commercial Source Information B

Chemical Name: 4-Iodobenzoic Acid
 Order Number: I0054
 Purity: >98.0%(GC)(T)
 Grade: EP
 Quantity: 25 g, Price: USD 93.00
 Quantity: 5 g, Price: USD 27.00
 Bulk Available
 Stock Status: Maintained in stock
 Ships Within: 1 week
 Purity Category: 95-98%
 Quantity Category: Grams
 Pricing Information Last Updated: 4 Dec 2015

[Order from Source](#)

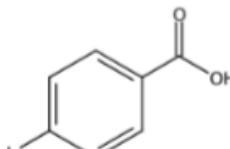
Contact & Address Information D

TCI America
 9211 N. Harborside Street
 Portland, OR, 97203
 United States

对应图中的字母，查看
商业来源详情页面各项的对应解释

Substance Information C

CAS Registry Number: 619-58-9
 CAS Index Name: Benzoic acid, 4-iodo-



Distributors

Distributor Name	Address	Contact Information
TCI America (East Coast Office)	One Broadway, 14th floor Cambridge, MA, 02142 United States	Phone: 1-800-423-8616 Fax: 1-888-520-1075 Email: Sales-US@TCIchemicals.com
TCI America (Philadelphia Distribution Center)	121 Domerah Drive Montgomeryville, PA, 18936 United States	Phone: 1-800-423-8616 Fax: 1-888-520-1075 Email: Sales-US@TCIchemicals.com
Tokyo Chemical Industry Co., Ltd. (Tokyo Kasei Kogyo Co., Ltd.) (Overseas Sales Office)	TCI Bldg. 4-10-2, Nihonbashi-Honcho Chuo-ku Tokyo, 103-0023 Japan	Phone: +81-3-5640-8878 Fax: +81-3-5640-8902 Email: globalbusiness@TCIchemicals.com

A

你可以将某一商业来源列为 **Preferred**, **Non-Preferred**, 或者 **No Preference**。在下拉菜单进行选择。

商业来源信息可以按照首选偏好进行排序和分析。

B

商业来源信息包含的所有数据在此展示。

点击 **Order from Source** 链接直达你要购买的物质所在网站。

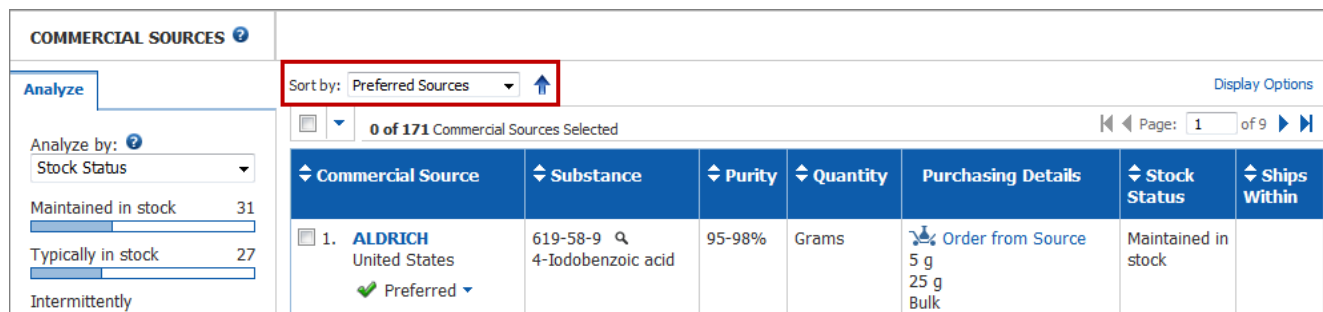
C	点击按钮 Quick View  ，在本页面下查看更多物质信息。
D	商业来源信息联系地址。如果有多个销售商，销售商信息将以列表形式展示。
E	使用导航链接： <ul style="list-style-type: none"> ▪ Return 返回至商业信息来源页面 ▪ 前往商业信息详情页面的前一页 Previous 或者后一页 Next
F	点击： <ul style="list-style-type: none"> ▪ Print 存成 PDF 文件 ▪ Export 输出其他格式文件



重排供应商信息

在获得物质供应商信息后，可以按照选择的条件对供应商重新排序

操作步骤

1. 点击 **Sort by** 下拉工具条，选择排序条件



Commercial Source	Substance	Purity	Quantity	Purchasing Details	Stock Status	Ships Within
1. ALDRICH United States ✔ Preferred	619-58-9  4-Iodobenzoic acid	95-98%	Grams	 Order from Source 5 g 25 g Bulk	Maintained in stock	

CAS Registry Number	按照 CAS 登记号排序（CAS 登记号是由 CAS 分配给每一个物质的独特识别号）
Commercial Source	按照供应商名称字母顺序排列

Country	按照供应商来源国家的字母顺序进行排列
Order from Source	按照供应商信息中是否包含所购物质的直接网页链接进行排列
Preferred Sources	按照首选、非首选或者无定义首选进行排列
Purity	按照物质的纯度进行排列
Quantity	按照数量单位进行排列
Ships Within	按照预计运输时间排列
Stock Status	按照是否有库存排列

- 若想改变排列顺序，则请点击**蓝色箭头**改变从升序变降序，或者从降序变升序。

或者

- 点击**表格列顶端**。如果希望按相反顺序排列，则请再点一次列顶端。

The screenshot shows the 'COMMERCIAL SOURCES' interface. The 'Sort by' dropdown is set to 'Purity' with an upward arrow. The table has columns: Commercial Source, Substance, Purity, Quantity, Purchasing Details, Stock Status, and Ships Within. The first row shows 'AK Scientific' for '4-Iodobenzoic acid' with a purity of '>=99%'. The 'Purity' column header is highlighted with a red box.

Commercial Source	Substance	Purity	Quantity	Purchasing Details	Stock Status	Ships Within
1. AK Scientific Product Catalog United States Set Preference ▾	619-58-9 4-Iodobenzoic acid	>=99%		Order from Source 25g, \$15 100g, \$50 500g, \$210 1Kg, \$413 Bulk	Maintained in stock	1 week

保留或者移除选择的供应商

可以手动选择修改供应商列表，可以保留或者移除选择的供应商

操作步骤

- 在**供应商信息**页面，勾选某个供应商前面的方框
- 选择 **Keep Selected** 或者 **Remove Selected**

The screenshot displays the 'COMMERCIAL SOURCES' interface. On the left, the 'Analyze' tab is selected, showing a filter for 'Country' with a bar chart for United States (87), China (39), and United Kingdom (24). The main table shows '2 of 158 Commercial Sources Selected' with a dropdown menu open, highlighting 'Keep Selected' and 'Remove Selected'. A sample entry for '4-Iodobenzoic acid' is visible.

分析供应商信息

可以按不同的标准筛选供应商，然后展示筛选后的子集，可以根据展示的信息创建一个新的结果集或者清除分析返回到初始的检索结果集。

注：如果结果集中超过了 20,000 个供应商，则不能进行完整的分析，在分析条中只能看到一个样例分析。

操作步骤

从供应商信息页面进行以下操作：

，

选择 **Analyze by** 选项
(查看下面描述)

点击一个分析工具条
查看子集中的结果

或者

点击 **Show More** 查
看更多子集

COMMERCIAL SOURCES
Display Options

Analyze
Sort by: Preferred Sources

Analyze by: Country
0 of 171 Commercial Sources Selected

Commercial Source	Substance	Purity	Quantity	Purchasing Details	Stock Status	Ships Within
1. ALDRICH United States Preferred	619-58-9 4-Iodobenzoic acid	95-98%	Grams	Order from Source 5 g 25 g Bulk	Maintained in stock	
2. TCI America Fine Chemicals United States Preferred	619-58-9 4-Iodobenzoic Acid			Order from Source 25 g, \$93.00 5 g, \$27.00		
3. 3B Scientific Corporation Product List United States Set Preference	619-58-9 4-Iodobenzoic acid		Grams	100g, \$311.67 500g, \$935	Intermittently available	4 weeks
4. A Chemtek Product List United States Set Preference	619-58-9 4-Iodobenzoic acid					
5. Aaron Chemistry GmbH Product List Germany	619-58-9 4-Iodo-benzoic acid			5g, EUR10.70 10g, EUR19.26 25g, EUR39.59		

分析选项:

- **Bulk**-通过大宗数量的可获得性进行筛选
- **CAS Registry Number**-按照每个物质的 CAS 登记号筛选
- **Commercial Source**-按照供应商名称筛选
- **Country**-按照供应商的国家筛选
- **Order from Source**-按照是否有购买物质网站链接筛选
- **Preferred Sources**-按照优选、非优选或者不设置优选对供应商进行筛选
- **Purity**-按照物质的纯度筛选
- **Quantity**-按照数量单位筛选
- **Screening**-按照高通量筛选获得
- **Ships Within**-按照预计运输时间筛选
- **Stock Status**-按照是否有库存筛选

如果选择 **Show More**:

需要根据字母顺序排列，则选择 **Natural Order**。需
要根据结果集数量排序，则选择 **Frequency**。

点击 **Export** 生成一个已选结果集的子集文件，
可以是 Excel 格式或者 PDF 格式

Analyze - Country

24 Items 2 Selected **Export**

Sort by: **Frequency**

Select bars to view only those commercial sources within the current answer set.

Country	Frequency
<input type="checkbox"/> United States	93
<input type="checkbox"/> China	46
<input checked="" type="checkbox"/> United Kingdom	24
<input checked="" type="checkbox"/> Germany	22
<input type="checkbox"/> Japan	13
<input type="checkbox"/> India	8
<input type="checkbox"/> Belgium	7
<input type="checkbox"/> Canada	6
<input type="checkbox"/> Hong Kong	5
<input type="checkbox"/> Netherlands	4

Apply **Cancel**

点击选择框查看感兴趣的子集

点击查看选择的结果集

查看过子集之后，可以：

点击 **Clear Analysis**，清除分析并返回到初始检索结果集

根据当前的分析结果创建一个新的结果集，则点击 **Keep Analysis**

38 commercial sources with the Countries **Germany, United Kingdom** are displayed

Substance Identifier "619-58-9" > substances (1) > commercial sources (171) > TCI America Fine Chemicals

COMMERCIAL SOURCES

Analyze by: Country

Country	Count
United States	93
China	46
United Kingdom	24
Germany	22
Japan	13
India	8
Belgium	7
Canada	6
Hong Kong	5
Netherlands	4

Sort by: Preferred Sources

0 of 171 Commercial Sources Selected

Commercial Source	Substance	Purity	Quantity	Purchasing Details	Stock Status	Ships Within
2. TCI America Fine Chemicals United States Preferred	619-58-9 4-Iodobenzoic Acid			Order from Source 25 g, \$93.00 5 g, \$27.00		
5. Aaron Chemistry GmbH Product List Germany Set Preference	619-58-9 4-Iodo-benzoic acid			5g, EUR10.70 10g, EUR19.26 25g, EUR39.59		
9. ABCR Product List Germany Set Preference	619-58-9 4-Iodobenzoic acid, 97%			10g, EUR25.40		
11. ABI Chem Stock Building Blocks Germany Set Preference	619-58-9 4-IODOBENZOIC ACID					
16. Activate Scientific Product List Germany	619-58-9 4-Iodobenzoic acid	90-95%		Bulk	Maintained in stock	1 week

注：黄色的子集条为当前展示的结果集。例如，此处展示的供应商主要来自德国和英国，但有些也来自美国或其他子集。

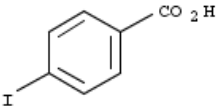
查看供应商信息详情

当获取到物质供应商信息时，供应商信息就被展示在供应商信息页面。

1. 要查看供应商信息详情，则请点击供应商名称

COMMERCIAL SOURCES ?						
Analyze						
Analyze by: ? Country		Sort by: Preferred Sources			Display Options	
United States 93		0 of 171 Commercial Sources Selected			Page: 1 of 9	
Commercial Source	Substance	Purity	Quantity	Purchasing Details	Stock Status	Ships Within
1. ALDRICH United States Preferred	619-58-9 4-Iodobenzoic acid	95-98%	Grams	Order from Source 5 g 25 g Bulk	Maintained in stock	
2. TCI America Fine Chemicals United States Preferred	619-58-9 4-Iodobenzoic Acid			Order from Source 25 g, \$93.00 5 g, \$27.00		

展示在供应商信息详情页面的信息

SOURCE DETAIL ?	
Return	Previous Next
1. ALDRICH Preferred	
Commercial Source Information Chemical Name: 4-Iodobenzoic acid Order Number: 206547 Purity: 98% Grade: 98% Quantity: 5 g, Price: contact source Quantity: 25 g, Price: contact source Bulk Available Stock Status: Maintained in stock Purity Category: 95-98% Quantity Category: Grams Pricing Information Last Updated: 1 Jul 2014 Order from Source	Contact & Address Information Sigma-Aldrich P O Box 14508 St. Louis, MO, 63178 United States Phone: 1-800-325-3010 Phone: 1-314-771-5765 Phone: 1-314-771-5750 (Call Collect) Fax: 1-800-325-5052 Fax: 1-314-771-5757 Web: http://www.sigma-aldrich.com Notes: Please see website for additional locations around the world.
Substance Information CAS Registry Number: 619-58-9 CAS Index Name: Benzoic acid, 4-iodo-	

指定首选和非首选供应商

可以将某供应商指定为首选或非首选供应商。查看供应商信息时，首选设置状态会被展示在供应商信息页面。首选的供应商将被优先展示，如果仅想查看首选供应商，则可以通过首选供应商分析结果。

可以在查看**供应商信息**页面中标注首选或者非首选，也可以在查看某个**供应商信息详情**时标注其为首选或非首选。

操作步骤

1. 在**供应商信息**页面中，点击下拉菜单 **Set Preference**

COMMERCIAL SOURCES ?

Analyze by: Country

United States	7
United Kingdom	4
China	2
France	1
India	1
Israel	1

Sort by: Purity ↑

0 of 8 Commercial Sources Selected

Commercial Source	Substance
<input type="checkbox"/> 1. ApexBio Technology Product List United States Set Preference ▼	50-18-0 Cyclophosphamide
<input type="checkbox"/> 2. Selleck Chemicals Product List United States Set Preference ▼	50-18-0 Cyclophosphamide

— 或者 —

- 在**信息详情**页面中，点击下拉菜单 **Set Preference**

SOURCE DETAIL ?

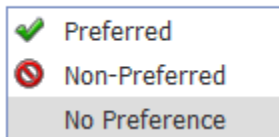
[Return](#)

1. **ApexBio Technology Product List** **Set Preference** ▼

Commercial Source Information	Contact & Address Information
Chemical Name: Cyclophosphamide Order Number: A2343 Purity: 98% Quantity: 100mg, Price: \$80	Apexbio Technology LLC 7505 Fannin St., Suite 210 Houston, TX, 77054 United States

2. 查看状态

Set Preference ▾



打印供应商信息

可以将供应商信息打印成 PDF 文件

操作步骤

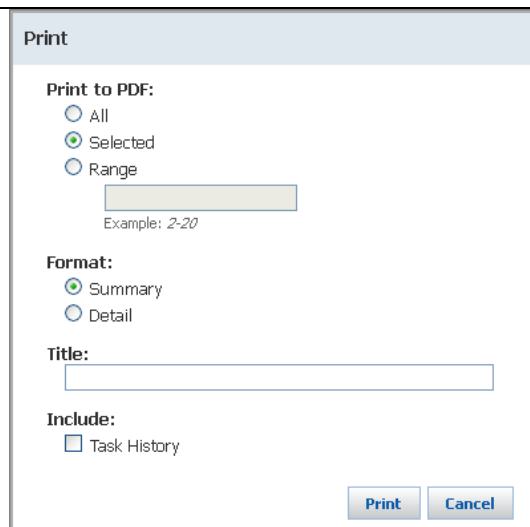
1. 在供应商信息页面，勾选想要打印的供应商，然后点击 **Print**。

Commercial Source	Substance	Purity	Quantity	Purchasing Details	Stock Status	Ships Within
<input checked="" type="checkbox"/> 1. ApexBio Technology Product List United States Preferred	50-18-0 Cyclophosphamide	95-98%	Milligrams	Order from Source 100mg, \$80 Bulk Screening	Maintained in stock	1 week
<input checked="" type="checkbox"/> 2. 3B Scientific Corporation Product List United States Set Preference	50-18-0 Cyclophosphamide		Grams	50g, \$500 100g, \$750	Intermittently available	4 weeks
<input type="checkbox"/> 3. A Chemtek Product List United States Set Preference	50-18-0 Cyclophosphamide				Typically in stock	

如果没有选择任何供应商，则 SciFinder 将打印结果集中的所有供应商。

注：可以通过**选择**下拉菜单，选择或不选所有供应商。

2. 在打印为 PDF 文件之前，需要确定是打印**所有**结果、仅打印**选择**的结果、还是打印指定范围内的结果。



The image shows a 'Print' dialog box with the following sections:

- Print to PDF:** Three radio buttons: 'All', 'Selected' (which is selected), and 'Range'. Below 'Range' is a text input field with the example '2-20'.
- Format:** Two radio buttons: 'Summary' (which is selected) and 'Detail'.
- Title:** A text input field.
- Include:** A checkbox labeled 'Task History' which is currently unchecked.

At the bottom right of the dialog are two buttons: 'Print' and 'Cancel'.

3. 选择 **Format**
4. (可选) 为 PDF 文件输入一个名称
5. (可选) 勾选 **Include** 下方的方框 (**Summary** 或 **Detail** 的选项有所不同)
6. 点击 **Print**

用相似的步骤，可以在信息详情页面点击 **Print** 打印某一个供应商的信息。

导出供应商信息

供应商信息可以导出成几种文件格式，包括 excel 格式文件

操作步骤

1. 在**供应商信息**页面，勾选想要导出的供应商，然后点击 **Export**.

Explore ▾ Saved Searches ▾ SciPlanner Print **Export**

Substance Identifier "50-18-0" > substances (1) > commercial sources (67)

COMMERCIAL SOURCES ⓘ

Analyze by: ?
Country ▾

United States 44
China 10
United Kingdom 9
Germany 4
France 3
Hong Kong 3
Austria 2
Canada 2
Czech Republic 1

Sort by: Preferred Sources ↑

Display Options

2 of 67 Commercial Sources Selected

Commercial Source	Substance	Purity	Quantity	Purchasing Details	Stock Status	Ships Within
<input checked="" type="checkbox"/> 1. ApexBio Technology Product List United States Preferred ▾	50-18-0 Cyclophosphamide	95-98%	Milligrams	Order from Source 100mg, \$80 Bulk Screening	Maintained in stock	1 week
<input checked="" type="checkbox"/> 2. 3B Scientific Corporation Product List United States Set Preference ▾	50-18-0 Cyclophosphamide		Grams	50g, \$500 100g, \$750	Intermittently available	4 weeks
<input type="checkbox"/> 3. A Chemtek Product List United States Set Preference ▾	50-18-0 Cyclophosphamide				Typically in stock	

2. 在导出之前，需要选择是导出**所有**结果、仅导出**选择**的结果还是导出**指定**范围内的结果。

3. 选择导出文件格式

File type	Usage
Portable Document Format (*.pdf)	Exports data in Summary or Detail format to a PDF file. Requires a PDF Reader for viewing and printing.以简要或详细格式导出到 PDF 文件（需要使用 PDF Reader 查看和打印）
Rich Text Format (*.rtf)	Exports data in Summary or Detail format to an RTF file readable by word processing software such as Microsoft® Word® 以简要或详细格式导出到 word 处理软件（如微软 word）能够读取的 RTF 文件
Microsoft Excel Worksheet	Exports the data to a Microsoft® Excel® worksheet.导出到 EXCEL 表格
Quoted Format (*.txt)	Exports the data in quoted format. You are prompted to select the Quote Character to be used to enclose data items and the Delimiter to be used to separate data items.

	以 Quoted 格式导出数据。您会被提示需要选择用于包括数据条目的文本符号和分隔数据条目的分隔符
Tagged Format (*.txt)	Exports the data in tagged format. Records are delimited by START RECORD and END RECORD statements. Each data field is identified by name and appears on a single line. 以标签格式 (tagged format) 导出。记录将以 START RECORD 和 END RECORD 分隔。每个数据将由名称和出现的一条竖线来识别。

4. 输入数据**详情** (这一栏是否出现取决于您在步骤三选择的文件格式)

5. 点击 **Export**

用相似的方法，也可以在**供应商信息**页面点击 **Export** 导出某一个供应商。



SciFinder[®] 使用手册

第十一卷 创建定题追踪（KMP）提醒

美国化学文摘社

CAS, a division of American Chemical Society

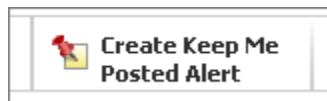
11. 创建定题追踪(KMP)提醒

总览	1
创建一个 KMP 提醒	1
设置邮件提醒 KMP 结果	3
查看 KMP 结果	4
查看操作过程	4
KMP 页面视图	6
分享 KMP 结果	7
合并 KMP 结果	8
修改 KMP	10
暂停或者重启 KMP 提醒	12
删除 KMP 提醒	14
删除 KMP 结果	16

总览

KMP 功能可以让您快速而简单地进行自动提醒设置，通过自动提醒功能，可以及时获取感兴趣领域的最新动态。

根据当前检索结果集创建 KMP。点击 **Create Keep Me Posted Alert** 可以通过 SciFinder 检索，定期获得新结果。



注：可以基于物质或者文献检索创建 KMP，但是无法通过反应结构检索创建。

系统将提示您选择提示频率（每周或每月）和其他参数。

要申请通过电子邮件通知 KMP 结果，请前往 **Preferences** 查看 **Keep Me Posted Notification** 选项。

电子邮件信息将包括前十个结果的链接。当点击一个链接，并登陆 SciFinder 后，就可以快速查看每条结果的详情。或者，也可以选择 **Saved Searches > Keep Me Posted** 查看之前的 KMP 结果。

也可以在智能手机上使用 [SciFinder Mobile](#) 查看 KMP 结果。使用 SciFinder Mobile, 无需下载相关 APP（也没有 IP 地址限制）。

创建一个 KMP 提醒

KMP 将为以前的检索式提供新的检索结果。

注：可以为物质和文献创建 KMP, 但是不能为反应创建。

操作步骤

1. 在 KMP 提醒中按照要求进行检索。
2. 点击 **Create Keep Me Posted Alert**



提示：如果该图标是灰的，则意味着此时不能创建 KMP。但可能可以在检索路径中为之前的结果集创建 KMP。要返回到之前的结果集，则请点击检索路径导航条。

3. 在 **Create Keep Me Posted Profile** 对话框中指定选项

- 可通过 **Title** 确认 KMP，因此必须填写 Title。
- **Description** 是对 KMP 的描述，可以选填。
- **Duration** 指定提醒过期时间。默认情况下，提醒将在一年内过期。要更改**持续时间**，请点击 **Change**。可以将提醒设置为在 1, 3, 6 或 12 个月内到期。
- **Frequency** 指定了提醒运行的频率。在下拉列表中选择 **Week** 或 **Month**。
- 如果未勾选“**Exclude previously retrieved results**”，则结果中将包含新记录及之前的记录。如果勾选了该选项，则结果中仅包含新结果。

注： **Search** 概要描述了运行提醒时将执行的操作。不能更改此处描述的检索操作。要使用不同的操作创建 KMP，则必须创建一个新的提醒。

4. 点击 **Create**。

5. 点击屏幕右上角的 **Preferences**，设置通过邮件通知 KMP 结果。在系统设置页面，勾选 **Receive e-mail notification of Keep Me Posted results**。

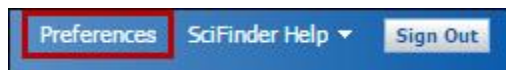
必须有一个和 SciFinder 账号关联的邮箱。如果需要，请点击 **Add or update e-mail address** 添加或更新邮箱地址。(查看 [Set e-mail notification of KMP results](#) 获得更多信息)

设置邮件提醒 KMP 结果

可以设置通过邮件接收 KMP 结果。

操作步骤

1. 点击屏幕右上角的 **Preferences**



在设置页面，勾选 **Receive e-mail notification of Keep Me Posted results**. 必须有一个和 SciFinder 账号关联的电子邮箱。

- 2.



3. 点击 **OK** 保存和退出。



查看 KMP 结果

KMP 结果是由 KMP 提醒执行的日期来标识的。使用以下步骤查看单个日期的结果，要查看多个日期的结果，则请通过合并 KMP 结果。

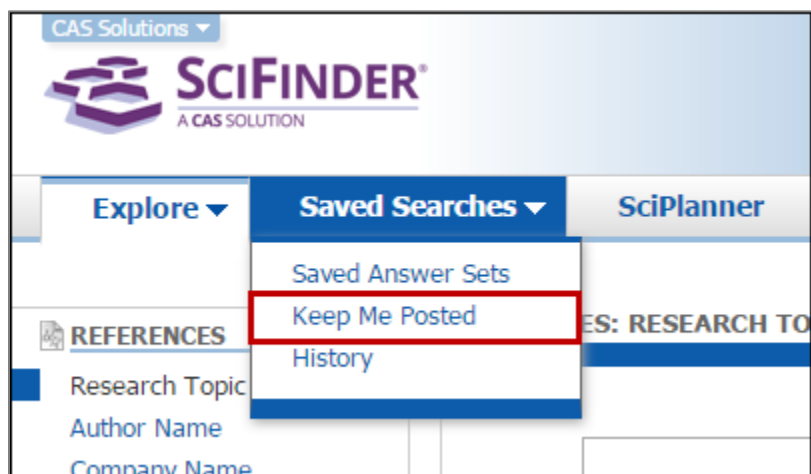
查看操作过程

操作步骤

在检索页面右侧边栏上显示了最新 3 个 KMP 的最新 3 个结果。单击想要查看结果的日期。



或者：



1. 单击 **View All**，查看所有 KMP 结果。或选择 **Saved Searches > Keep Me Posted** 查看所有结果

2. 点击想要获取结果的日期

The screenshot displays the 'KEEP ME POSTED' interface. On the left, a sidebar contains 'SAVED SEARCHES' with options for 'Saved Answer Sets', 'Keep Me Posted', and 'History'. The main area shows a search profile for 'lipitor' with the query 'substructure search using lipitor.cfx as query'. The profile is 'Enabled', created on 'Apr 16, 2012', and expires on 'Mar 26, 2015'. Under the 'Results' section, there is a list of dates with counts and links: 'May 3, 2014 (2)', 'Apr 26, 2014 (1)', 'Apr 12, 2014 (8)', and 'Mar 29, 2014 (1)'. The date 'Apr 12, 2014 (8)' is highlighted with a red box.

	Status	Created	Expires
<input type="checkbox"/> lipitor substructure search using lipitor.cfx as query	Enabled	Apr 16, 2012	Mar 26, 2015
Search Strategy:			
<input type="checkbox"/> Results Combine Delete			
<input type="checkbox"/> May 3, 2014 (2)	Link		
<input type="checkbox"/> Apr 26, 2014 (1)	Link		
<input type="checkbox"/> Apr 12, 2014 (8)	Link		
<input type="checkbox"/> Mar 29, 2014 (1)	Link		

KMP 页面视图

通过该页面，可以获取到所有 KMP 提醒及其检索结果。



A 按日期列出每个 KMP 结果。括号中显示了结果数量。
点击日期，查看某个结果集。

点击 **Link**，可以与其它 SciFinder 用户分享 KMP 结果。也可以复制链接内容的网址，并将其粘贴到电子邮件或文档中与他人分享。

B 可以点击 **Combine** 或 **Delete**，合并或删除单个 KMP。也可以点击 **Results** 旁边的选择框快速选择或取消选择所有结果。

使用 **Combine**，系统将提示选择合并选项。合并结果将成为当前答案集。

使用 **Delete**，所选结果将被删除，但“Keep Me Posted”提醒将继续按计划运行。

C 点击展开箭头显示“**Search Strategy**”。

D 此处显示的是 KMP 的标题、描述、状态（启用还是禁用）、创建和到期日期。
点击 **Edit**，更改这些和其他选项

E 要删除“Keep Me Posted”提醒，则请选中配置文件的选择框，然后从“选择”下拉菜单中选择“**Delete Selected**”。当删除 Keep Me Posted 提醒时，结果也会被删除。

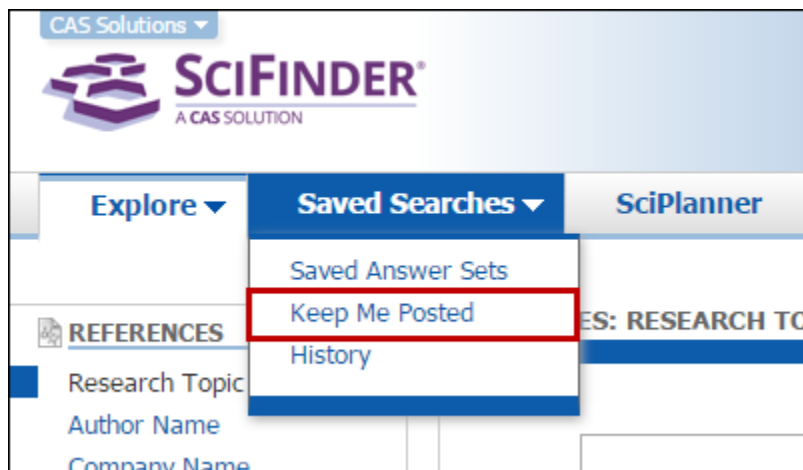
可以使用其他下拉选项快速全选或删除所有 KMP 配置文件。

分享 KMP 结果

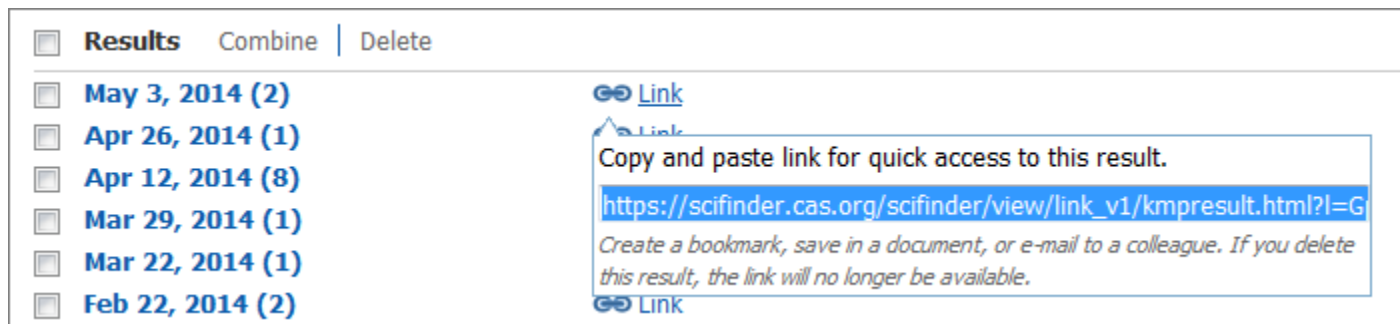
可以通过包含链接的电子邮件或文档，与其他 SciFinder 用户分享 KMP 结果。收到链接的用户，需要登录 SciFinder 才能查看结果。

操作步骤

1. 选择 **Saved Searches > Keep Me Posted**.



2. 点击要分享的结果旁边的 **Link**。链接内容的 URL 将显示在弹出的文本框中。



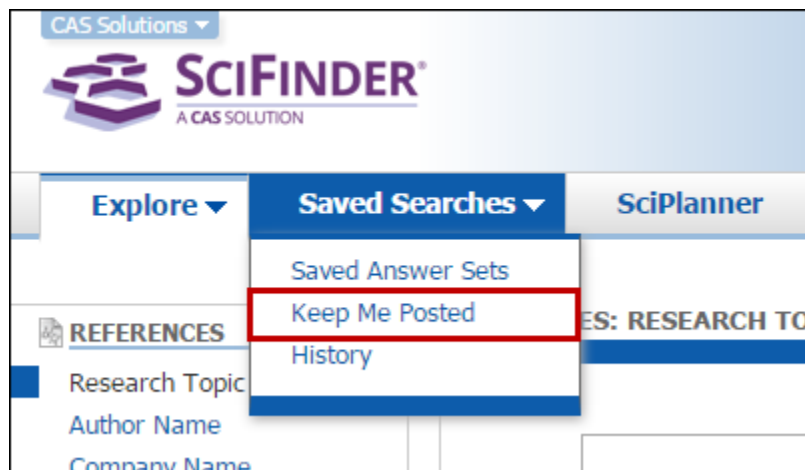
3. 复制 URL，然后将其粘贴到电子邮件或文档中。收到链接的用户需要登录 SciFinder 才能查看结果。

合并 KMP 结果

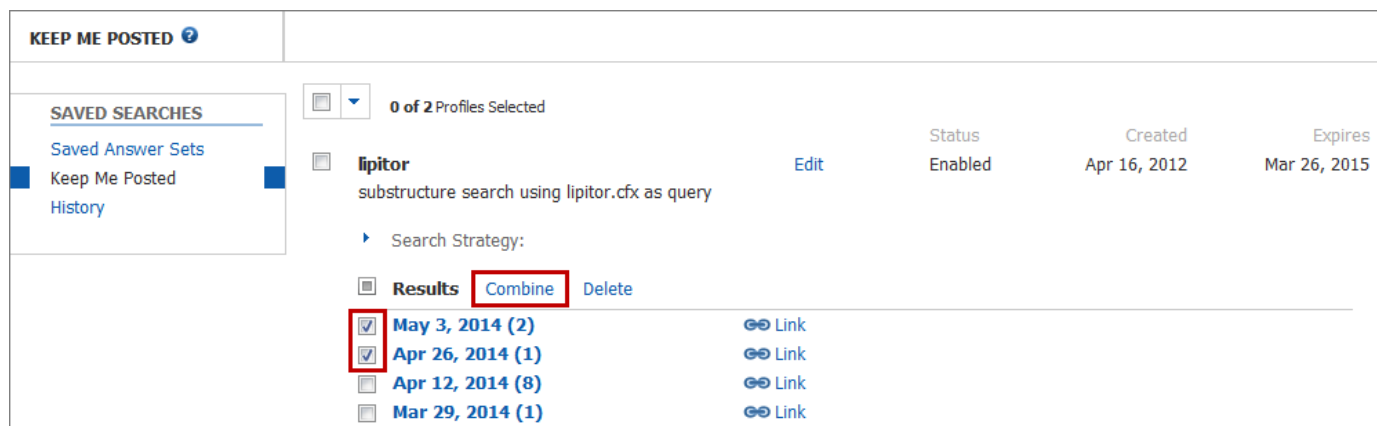
可以合并 KMP 的多个结果，然后在单一的结果集中查看。

操作步骤

1. 选择 **Saved Searches > Keep Me Posted**.



2. 勾选想要合并的结果集。



3. 点击 **Combine**。
4. 点击要使用的合并选项。

Combine Keep Me Posted Results

Select an option for combining **2 results** from profile lipitor

<input checked="" type="radio"/>	Combine	Include all answers from both result sets
<input type="radio"/>	Intersect	Include only answers that appear in both result sets
<input type="radio"/>	Exclude	Include only answers from May 03, 2014 that are not in Apr 26, 2014
<input type="radio"/>	Exclude	Include only answers from Apr 26, 2014 that are not in May 03, 2014

注：如果在步骤 2 中选择两个以上的结果集，则**合并**选项将被限制为 **Combine** 和 **Intersect**。

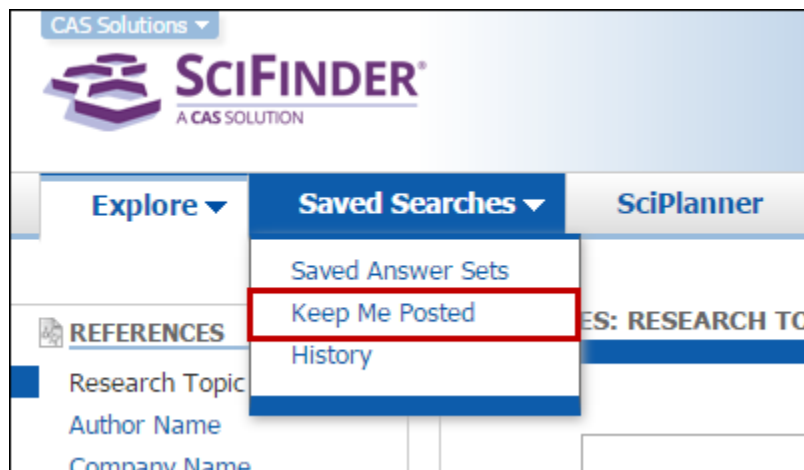
5. 点击“**Combine Results**”。显示的是合并后的结果。

修改 KMP

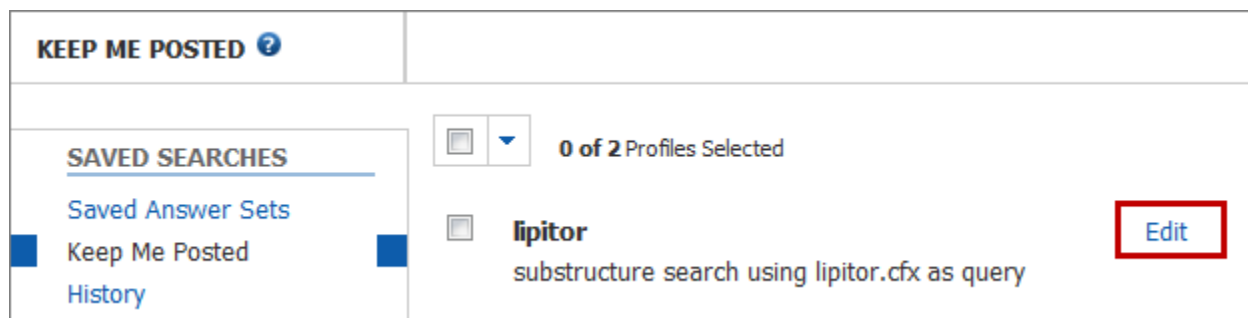
可以修改 KMP 的标题、描述、状态、频率和到期日。但是不能更改检索步骤。要更改检索步骤，则必须创建一个新的提醒。

操作步骤

1. 选择 **Saved Searches > Keep Me Posted**.



2. 点击要修改的 KMP 配置文件的 **Edit**。



3. 改变文件选项

Edit Keep Me Posted Profile ?

* Required

Title: *

Description:

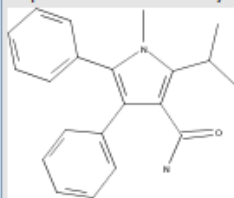
Characters Remaining: **978**

Status:
 Enabled
 Disabled

Duration
Expires On: Mar 26, 2015 [Change](#)

Frequency
Send updates once every
 Exclude previously retrieved substances.

Search:
Explore substances by structure: **SUBSTRUCTURE**



- 可通过 **Title** 确认 KMP，因此必须填写 **Title**。
- **Description** 是对 KMP 的描述，可以选填。
- **Status** 设置 **Disabled** 失活提醒，或 **Enabled** 激活提醒
- **Duration** 指定提醒过期时间。默认情况下，提醒将在一年内过期。要更改持续时间，请点击 **Change**。可以将提醒设置为在 1, 3, 6 或 12 个月内到期。
- **Frequency** 指定了提醒运行的频率。在下拉列表中选择 **Week** 或 **Month**。
- 如果未勾选 **Exclude previously retrieved results**，则结果中将包含新记录及之前的记录。如果勾选了该选项，则结果中仅包含新结果。

注： **Search** 概要描述了运行提醒时将执行的操作。不能更改此处描述的检索操作。要使用不同的操作创建 KMP，则必须创建一个新的提醒。

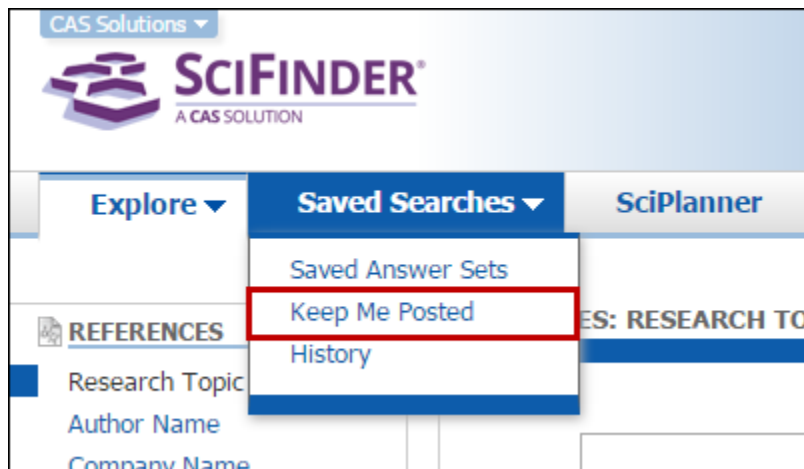
4. 点击 **Edit**

暂停或者重启 KMP 提醒

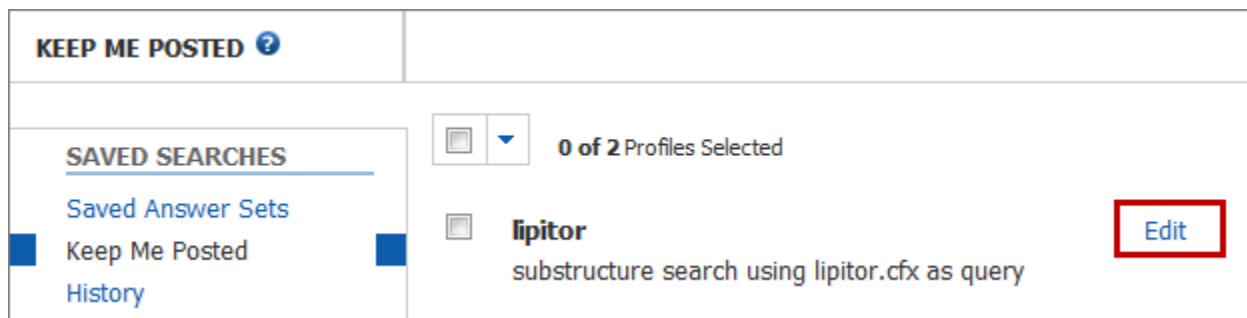
通过更改提醒状态，停止 Keep Me Posted 提醒。现有 Keep Me Posted 的结果不会受到影响。

操作步骤

1. 选择 **Saved Searches > Keep Me Posted**.



2. 点击要修改的 Keep Me Posted 配置文件的 **Edit**。



3. 将 **Status** 更改为 **Disabled**, KMP 将被暂停。更改为 **Enabled**, KMP 提醒将被激活。

Edit Keep Me Posted Profile ⓘ

Title: * * Required
lipitor

Description:
substructure search using lipitor.cfx as query

Characters Remaining: **978**

Status: Enabled Disabled

Duration
Expires On: Mar 26, 2015 [Change](#)

Frequency
Send updates once every
 Exclude previously retrieved substances.

Search:
Explore substances by structure: **SUBSTRUCTURE**

The image shows a chemical structure of Lipitor (rosuvastatin), which is a statin drug. It features a central five-membered ring with a nitrogen atom, substituted with a phenyl group, an isopropyl group, and a carboxamide group. The carboxamide group is further substituted with a phenyl ring.

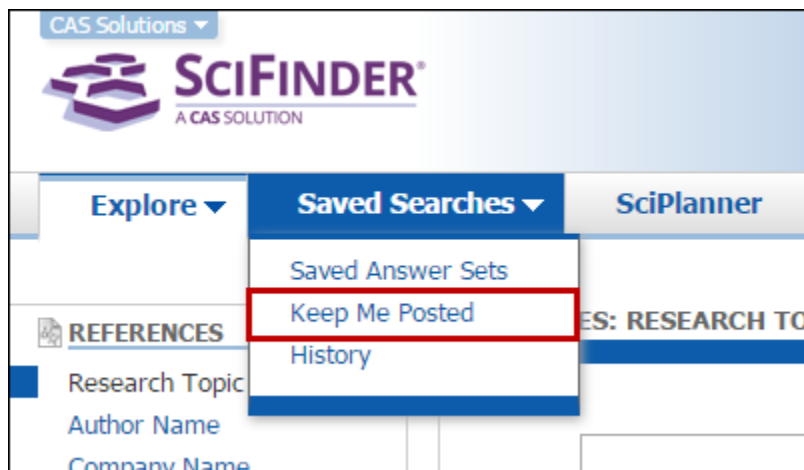
4. 点击 **Edit**.

删除 KMP 提醒

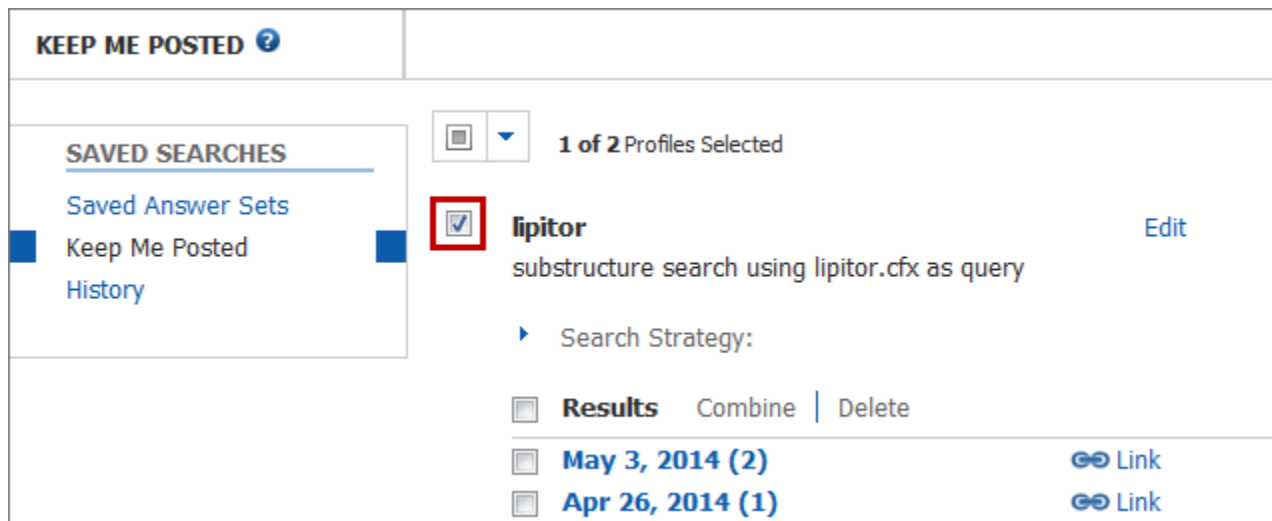
删除 Keep Me Posted 提醒也会删除所有结果。

操作步骤

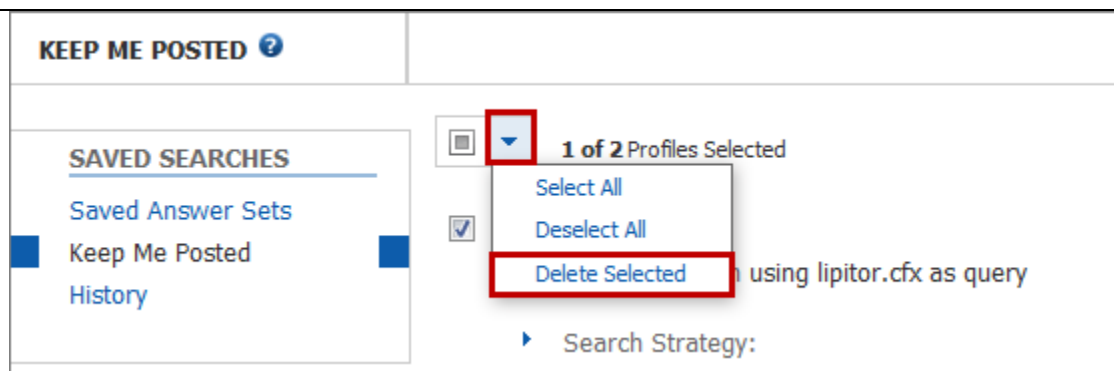
1. 选择 **Saved Searches > Keep Me Posted**.



2. 勾选要删除的“Keep Me Posted”配置文件旁边的选项框。



3. 从选择下拉菜单中选择 **Delete Selected**。



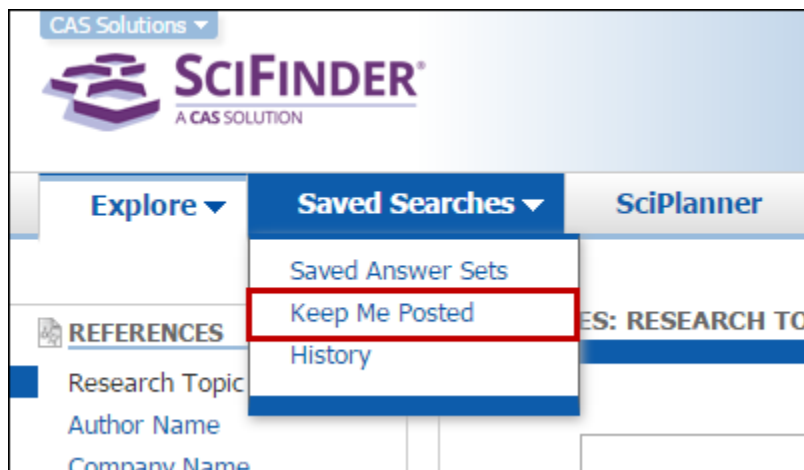
Keep Me Posted 文件及其所有结果将被删除。

删除 KMP 结果

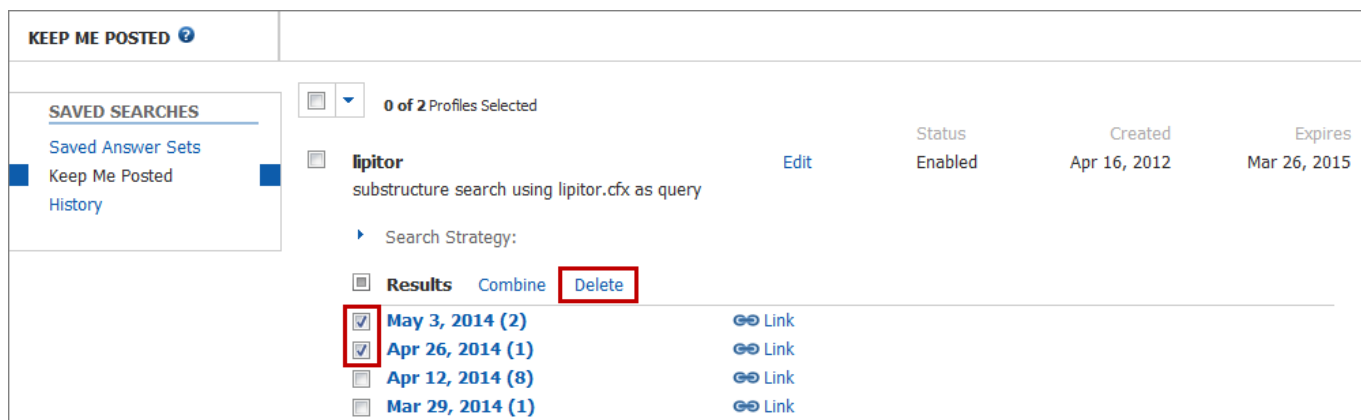
使用以下步骤删除一个或多个 KMP 结果。删除结果不会影响 Keep Me Posted 的提醒。

操作步骤

1. 选择 **Saved Searches > Keep Me Posted**.



2. 勾选要删除结果的日期。（或者，选中 **Results** 的选择框，选择特定配置文件的所有结果。）



3. 点击 **Delete**.



SciFinder[®] 使用手册

第十二卷 在 SciPlanner 中组织信息

美国化学文摘社
CAS, a division of American Chemical Society

12. 在 SciPlanner 中组织信息

总览.....	1
SciPlanner 页面图.....	2
将结果集发送到 SciPlanner.....	4
进入 SciPlanner.....	5
查看 library 中的对象.....	6
将对象移动到工作区.....	7
在工作区里移动对象.....	8
更改工作区显示.....	9
获取工作区对象相关数据.....	10
合并工作区的反应.....	17
删除工作区的对象.....	19
从 library 中删除对象.....	20
删除 library 标签中所有对象.....	21
分享项目.....	22
打印项目.....	23
导出引文.....	24
保存一个项目.....	26
打开一个项目.....	26
创建一个新项目.....	27
重命名一个项目.....	28
删除一个项目.....	29

总览

在 SciPlanner 中，可以可视化组合和组织文献、物质和反应等检索结果。可以创建并保存最多 1000 个 SciPlanner 项目，可以打印或与其他 SciFinder 用户共享 SciPlanner 项目。

SciPlanner 项目中的文献、物质和反应直接链接到 SciFinder 数据库内容，因此，可以随时获取到文献、物质或反应的详细信息。也可以利用 SciPlanner 中的物质、文献或反应作为新的 SciFinder 检索基础 (如，获取反应参与物的商业来源或检索相似物质)。

SciPlanner 工作流程

将检索结果推送
至 SciPlanner

完成检索后，可以将选择的结果发送到 SciPlanner (或发送整个结果集到 SciPlanner)。发送的结果将被存储在 SciPlanner library 中，以备创建项目时使用。

进入 SciPlanner

可以随时点击位于 SciFinder 页面右上角的 SciPlanner 链接进入 SciPlanner。

创建 SciPlanner
工作区

要创建 SciPlanner 项目，则请将 SciPlanner library 中的信息拖进工作区。

在工作区移动对象

可以在工作区内自由移动操作对象。

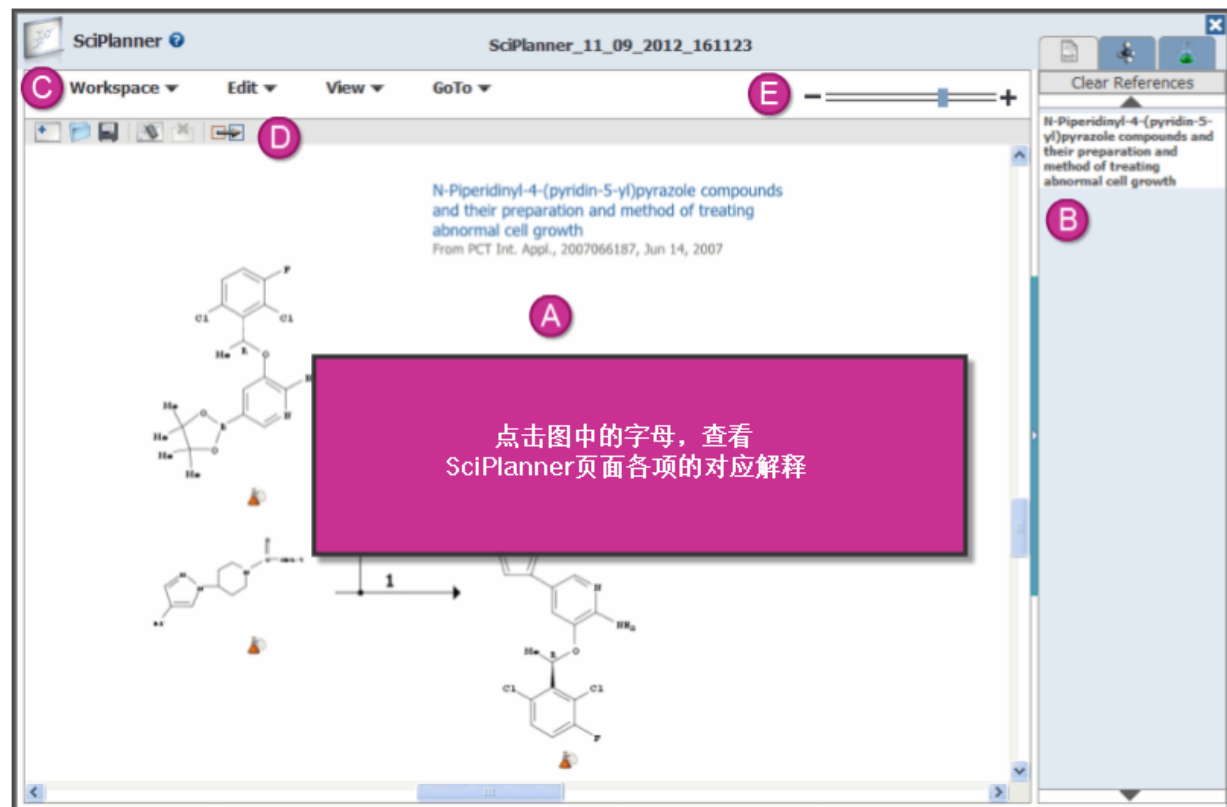
分享 SciPlanner
项目

SciPlanner 工作区的内容可以导出为其他 SciFinder 用户导入的 PKX 文件。项目也可以被打印成为 PDF 文件 (或将引文导出到可由引文软件识别的 RIS 文件)。

创建新的
SciPlanner 项目

可以创建并保存最多 1000 个 SciPlanner 项目。

SciPlanner 页面图



<p>A</p>	<p>该区域为 SciPlanner 工作区，在此，您可以可视化组织某个项目的物质、反应和文献。</p> <p>在工作区内：可以自由移动数据对象；也可以利用对象在 SciFinder 中启动其他检索（如，获取反应参与物的商业来源）。</p> <p>从 SciPlanner library 中拖动对象，可将其放置在 SciPlanner 工作区中（请参阅 B）。</p>
<p>B</p>	<p>发送到 SciPlanner 的检索结果被存储在 SciPlanner library 中。文献、物质和反应在 SciPlanner library 中有单独的存储区。</p> <p>从 SciPlanner library 中拖动目标，即可将目标移至工作区。对象将从 library 中删除。</p> <p>在从 library 中拖动对象到工作区时，按住 CTRL 键，副本将被移动到工作区，而对象则被保留在 library 中以备将来使用。</p>
<p>C</p>	<p>以下为 SciPlanner 工作选项：</p> <p>Workspace</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ New-在空白工作区创建一个新的 SciPlanner 项目 ▪ Open-打开现有项目。“打开”对话框包含用于删除和重命名项目的选项。 ▪ Save-保存当前工作区内容。 ▪ Duplicate- 创建可以用新名称保存的当前项目的副本。

	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Import-导入已经导出为 PKX 文件的 SciPlanner 项目。 ▪ Export-将工作区内容导出为 PDF, PNG, RIS 和 PKX 文件。 ▪ Print-将工作区的内容打印为 PDF 文件。 ▪ Close-关闭 SciPlanner 并返回 SciFinder. <p>Edit</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Delete Selected - 从工作区中删除所选对象。（此选项仅在选择工作区中的单个对象时有效，要选择反应，则请选择反应编号。） ▪ Clear All - 删除工作区中的所有对象。 <p>View</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Zoom In - 每选择一次此选项，工作区对象的尺寸就放大 25%。 ▪ Zoom Out-每选择一次此选项，工作区对象的尺寸就缩小 25% ▪ Hide Library-隐藏 Library 增大工作区面积（当隐藏 Library 时，菜单选项将变为 Show Library） <p>Go To</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ Selected References-为工作区中选择的文献或反应创建一个文献结果集。SciPlanner 将关闭，文献将被显示在文献页面上 ▪ Selected Substances-为工作区中选择的物质或选择的反应参与物创建一个物质结果集。SciPlanner 将关闭，物质将被显示在物质页面上。 ▪ Selected Reactions-为工作区中选择的反应或选择的文献创建一个反应结果集。SciPlanner 将关闭，反应将被显示在反应页面上。 ▪ Participant Search-启动包含指定反应物和产物的反应检索（首先选择此选项，然后在出现提示时指定反应物和产物）。
<p>D</p>	<ul style="list-style-type: none">  New -在空白工作区创建一个新的 SciPlanner 项目  Open -打开现有项目。“打开”对话框中有删除一个项目和重命名一个项目两个选项。  Save -保存当前工作区配置。  Clear -删除工作区所有对象。  Delete -删除工作区选定的对象（只有在工作区选择单个对象才有效）  Participant Search -启动检索包含指定反应物和产物的反应（先选择此选项，然后在出现提示时指定反应物和产物）
<p>E</p>	<p>拖动“Zoom Control”上的滑块可增大或减小工作区对象尺寸</p>

将结果集发送到 SciPlanner

完成检索后，可以选择要发送到 SciPlanner 的结果，也可以发送整个结果集到 SciPlanner。结果将被存储在 SciPlanner library 中，以备创建项目时使用。

SciPlanner library 中最多可存储 100 个对象（文献、物质和反应）。

操作步骤

在结果集页面，选中要发送到 SciPlanner 的结果，然后点击 **Send to SciPlanner**。例：

The screenshot displays the SciFinder search results page for 'substances (460)'. The interface includes a top navigation bar with 'Explore', 'Saved Searches', 'SciPlanner', 'Save', 'Print', and 'Export'. Below this, there are buttons for 'Get References', 'Get Reactions', 'Get Commercial Sources', and 'Tools'. A red box highlights the 'Send to SciPlanner' button. The main content area shows a list of substances with their chemical structures and names. Three results are visible:

1. 619-58-9: C7H5IO2 Benzoic acid, 4-iodo-
2. 64297-66-1: C7H5IO4 Benzoic acid, 4-iodyl-
3. 52107-87-6: C8H7IO2 Benzoic acid, 4-iodo-3-methyl-

Each result includes a chemical structure, a molecular formula, and a name. The 'Send to SciPlanner' button is located in the top right corner of the results area.

注：可以从“Select”下拉列表中选择 **Select All** 或 **Deselect All** 来选择全部结果或取消所有选择。

The close-up screenshot shows the 'Select' dropdown menu. The menu is open, and the options are:

- Select All
- Deselect All
- Keep Selected
- Remove Selected

The 'Select All' and 'Deselect All' options are highlighted with a red box.

同样，可以通过点击物质详情页面上的 **Send to SciPlanner** 将物质发送到 SciPlanner。例，

The screenshot shows the 'SUBSTANCE DETAIL' page for 4-iodobenzoic acid. The 'Send to SciPlanner' button is highlighted with a red box. The page includes a navigation bar with options like 'Get References', 'Get Reactions', 'Get Commercial Sources', and 'Get Regulatory Information'. The main content area displays the CAS Registry Number (619-58-9), molecular formula (C₇H₅IO₂), and chemical name (Benzoic acid, 4-iodo-). A chemical structure of 4-iodobenzoic acid is shown on the right.

进入 SciPlanner

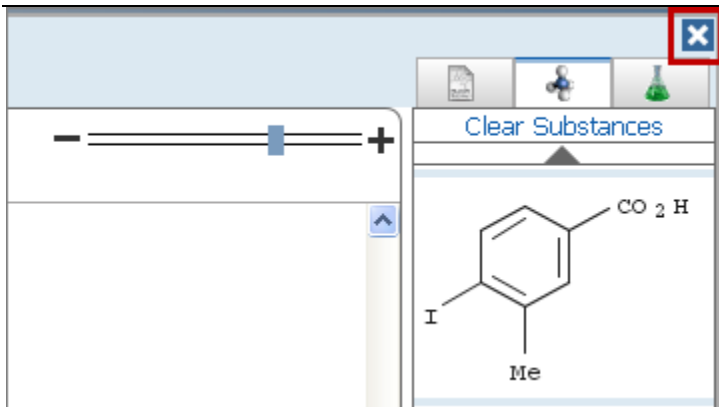
可以随时点击菜单栏上的 **SciPlanner** 进入 SciPlanner。

The screenshot shows the main navigation menu with three buttons: 'Explore', 'Saved Searches', and 'SciPlanner'. The 'SciPlanner' button is highlighted with a red box.

在向 SciPlanner 发送结果后，可以在黄色信息栏中点击 **SciPlanner** 链接进入 SciPlanner。例：

The screenshot shows the SciPlanner interface. A yellow notification bar at the top states '3 Substances sent to SciPlanner.' Below this, the breadcrumb trail reads 'Chemical Structure substructure > substances (2582) > refine "include commercially available" (484) > remove 2 substances (482)'. The main navigation bar includes 'SUBSTANCES', 'Get References', 'Get Reactions', 'Get Commercial Sources', 'Tools', 'Create Keep Me Posted Alert', and 'Send to SciPlanner'. The 'Send to SciPlanner' button is highlighted with a red box. The interface also shows 'Analyze' and 'Refine' tabs, a 'Sort by: Relevance' dropdown, and a 'Page: 1 of 33' indicator.

要退出 SciPlanner，则请点击 SciPlanner 页面右上角的 。



查看 *library* 中的对象

发送到 SciPlanner 的文献、物质和反应会被存储在 SciPlanner library 中。SciPlanner library 最多可存储 100 个对象（文献、物质和反应）。

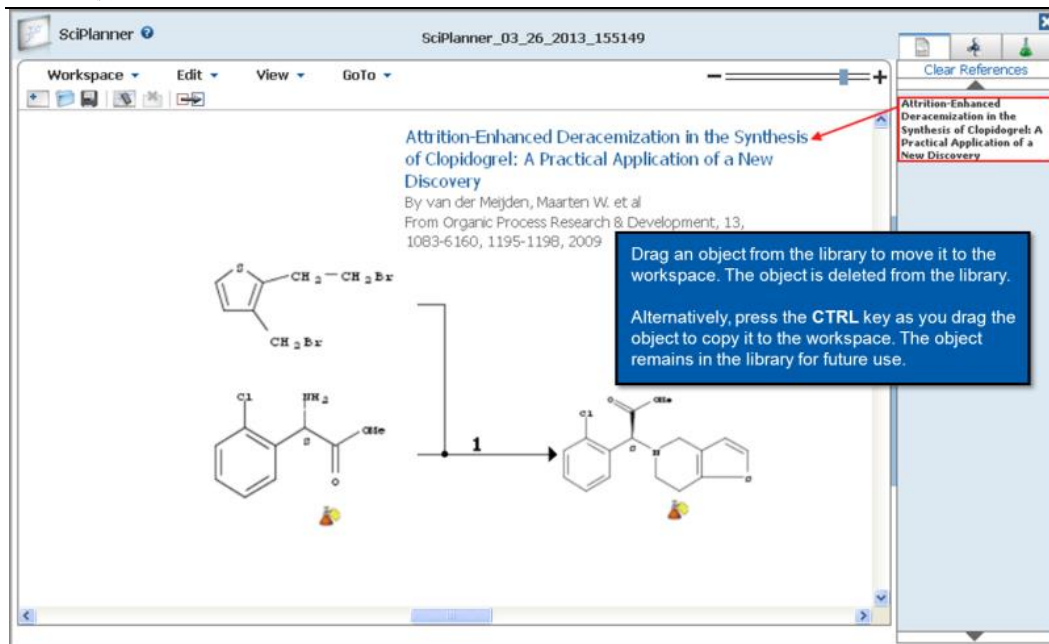
文献、物质和反应分别被单独存储在 SciPlanner library 中。



将对象移动到工作区

要创建 SciPlanner 项目，则请将对象从 library 中拖动到工作区。工作区最多可包含 200 个对象。每条文献、反应或物质（包括参与反应的物质）被认为是一个对象。

从 library 中拖动对象



在工作区里移动对象

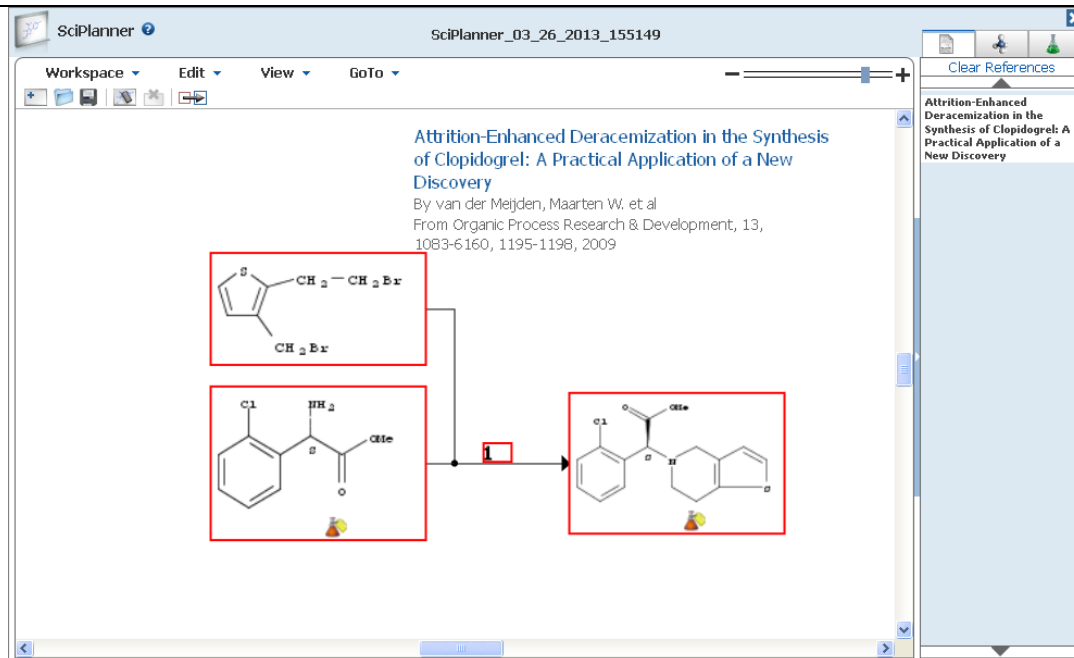
可以自由地在工作区内移动对象

操作步骤

1. 选择要移动的对象：

- 点击选择一个对象。
- **CTRL**-点击选择多个对象。
- 在对象周围拖动选择矩形框（使用此方法选择一条反应）

被选择的对象将被红色高亮显示。例：



2. 将所选对象拖动到工作区中的新位置。

更改工作区显示

要更改工作区显示，则可以通过缩放工作区显示来调整对象尺寸，或通过隐藏 library 来扩展工作区。

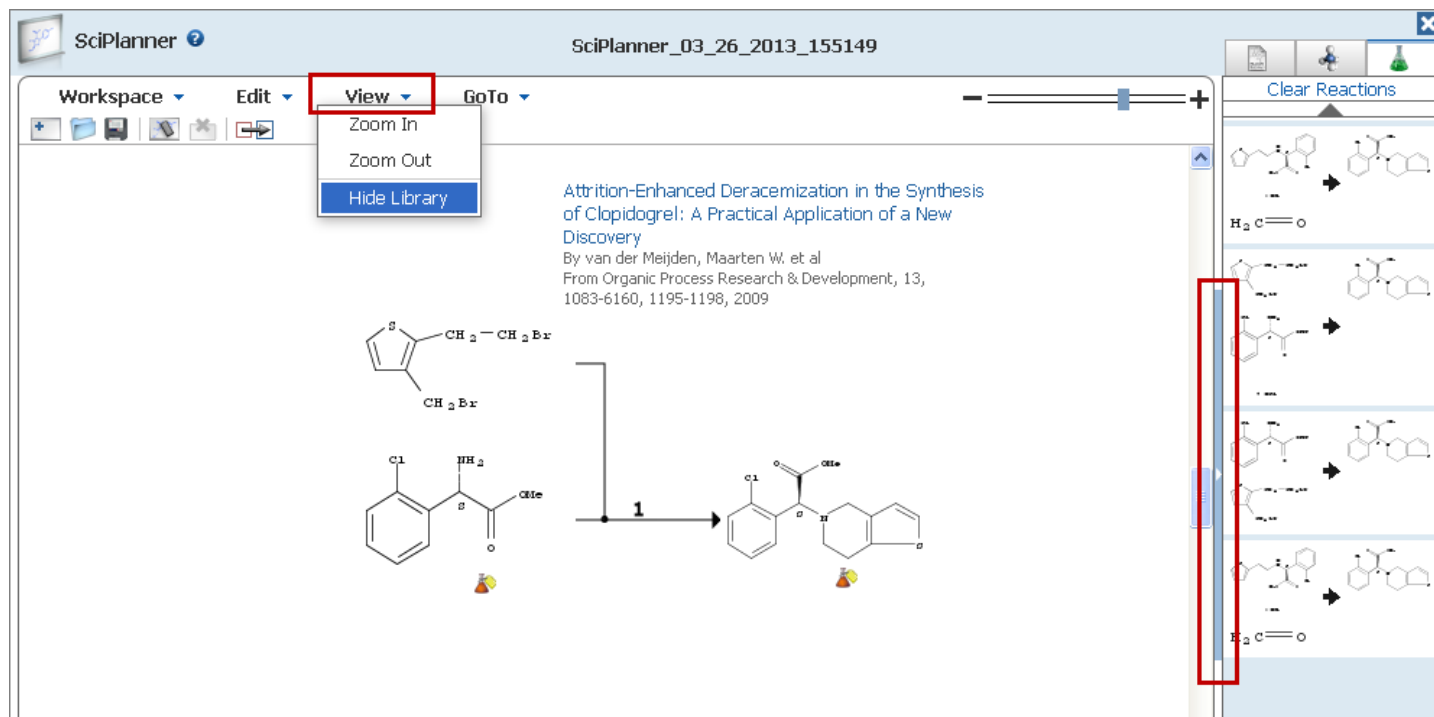
调整工作区对象尺寸

拖动 **Zoom Control** 上的滑块扩大或缩小工作区对象尺寸，或从 **View** 菜单中选择 **Zoom In** 或 **Zoom Out**。每选择一次“缩放”选项，工作区对象尺寸就增加或缩小 25%。



隐藏或显示 library

要隐藏 library，则请点击分开工作区与 library 分隔线上的蓝色条，或从 **View** 菜单中选择 **Hide Library**。当 library 被隐藏时，菜单选项将更改为“**Show Library**”。




获取工作区对象相关数据

获取文献数据

将光标放在工作区中的文献上时，就会出现两个图标。

- 点击  显示菜单，然后点击 **View Reference Detail** 进入文献信息详情页面。



- 点击 ，无须离开 SciPlanner 就可快速查看 ([Quick View](#)) 文献信息。

SciPlanner 03_26_2013_155149

Quick View

Attrition-Enhanced Deracemization in the Synthesis of Clopidogrel: A Practical Application of a New Discovery

Full Text
By van der Meijden, Maarten W.; Leeman, Michel; Gelens, Edith; Noorduyn, Wim L.; Meekes, Hugo; van Enckevort, Willem J. P.; Kaptein, Bernard; Vlieg, Elias; Kellogg, Richard M.
From Organic Process Research & Development (2009), 13(6), 1195-1198. | Language: English, Database: CAPLUS

The recently discovered technique of deracemization by means of attrition-induced grinding of a solid conglomerate in contact with a soln. wherein racemization occurs has been used with a deriv. of 2-chlorophenyl glycine, the key chiral component in the synthesis of Clopidogrel (Plavix). Deracemization of the racemate proceeds to a single enantiomer and in essentially abs. enantiomeric excess. Further conversion of enantiomerically pure material to Clopidogrel was achieved in 88% yield.

Reference Images Substance Images

Heat, Racemize, Cool, Seed & Grind

Filter

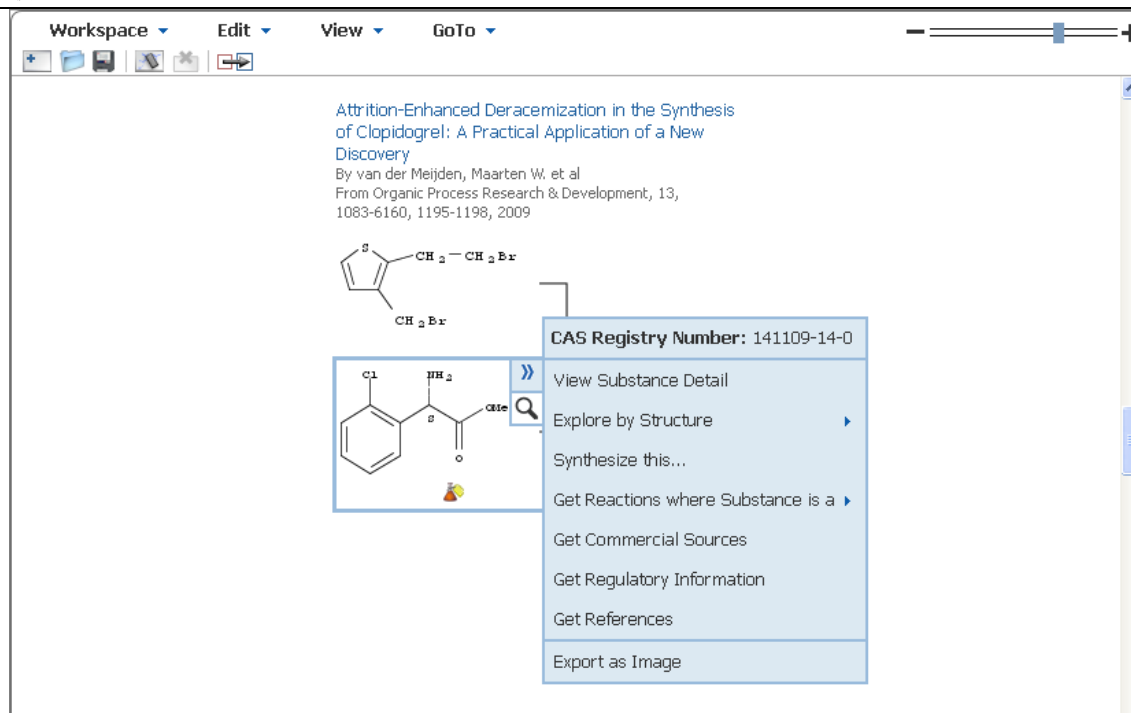
>99.5% ee
80% yield

Clopidogrel (Plavix)

获取物质数据

将光标放在工作区中的物质上时，就会出现两个图标。

- 点击  显示物质选项

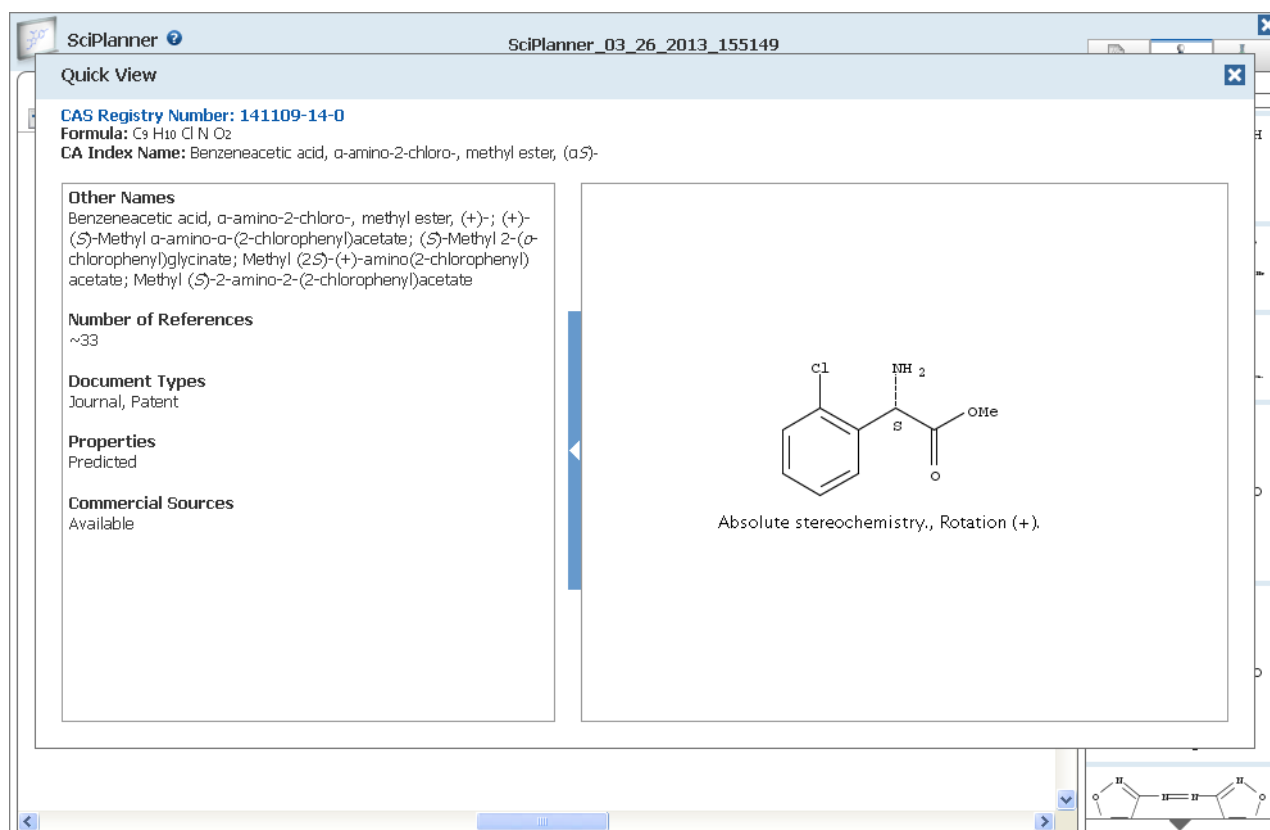


在下表中查看物质选项定义。

View Substance Detail	退出 SciPlanner，并在物质详情页面显示该物质详细信息
Explore by Structure	<p>从第二个菜单中选择检索类型：</p> <p>Chemical Structure - 将结构转移到“物质检索”页面上的“化学结构”检索。可以在此处将检索类型设置为精确结构检索、亚结构检索或相似结构检索。</p> <p>Markush Patents by Structure - 将结构转移到物质检索页面上的 Markush 检索。可以在此处将检索类型设置为仅允许指定位置可变（Allow variability only as specified）或亚结构检索（Substructure）。</p> <p>Reactions - 将结构转移到“反应检索”页面上的“反应结构”检索。可以在此处将检索类型设置为仅允许指定位置可变（Allow variability only as specified）或亚结构（Substructure）。可将反应角色（reaction role）设置为任意。</p>
Synthesize this	获取该物质为产物的反应。
Get Reactions where Substance is a	<p>获取该物质作为指定反应角色的反应。</p> <p>从第二个菜单中选择反应角色：</p> <p>Product, Reactant, Reagent, Reactant/Reagent, Catalyst, Solvent, Any Role</p>

Get Commercial Sources	获取该物质的商业来源。（如果此选项为暗灰色，则表示不能获取到该物质的商业来源信息。）
Get Regulatory Information	获取该物质的管控信息。（如果此选项为暗灰色，则表示不能获取到该物质的管控信息）
Get References	获取报道该物质的文献
Export as image	将物质保存为 GIF 文件
Export as molfile	将物质保存为 mol 文件

- 点击 ，无须离开 SciPlanner 就可快速查看 ([Quick View](#)) 物质信息。



SciPlanner
SciPlanner_03_26_2013_155149

Quick View

CAS Registry Number: 141109-14-0
Formula: C₉ H₁₀ Cl N O₂
CA Index Name: Benzeneacetic acid, alpha-amino-2-chloro-, methyl ester, (alphaS)-

Other Names
Benzeneacetic acid, alpha-amino-2-chloro-, methyl ester, (+)-; (+)-(S)-Methyl alpha-amino-alpha-(2-chlorophenyl)acetate; (S)-Methyl 2-(o-chlorophenyl)glycinate; Methyl (2S)-(+)-amino(2-chlorophenyl)acetate; Methyl (S)-2-amino-2-(2-chlorophenyl)acetate

Number of References
~33

Document Types
Journal, Patent

Properties
Predicted

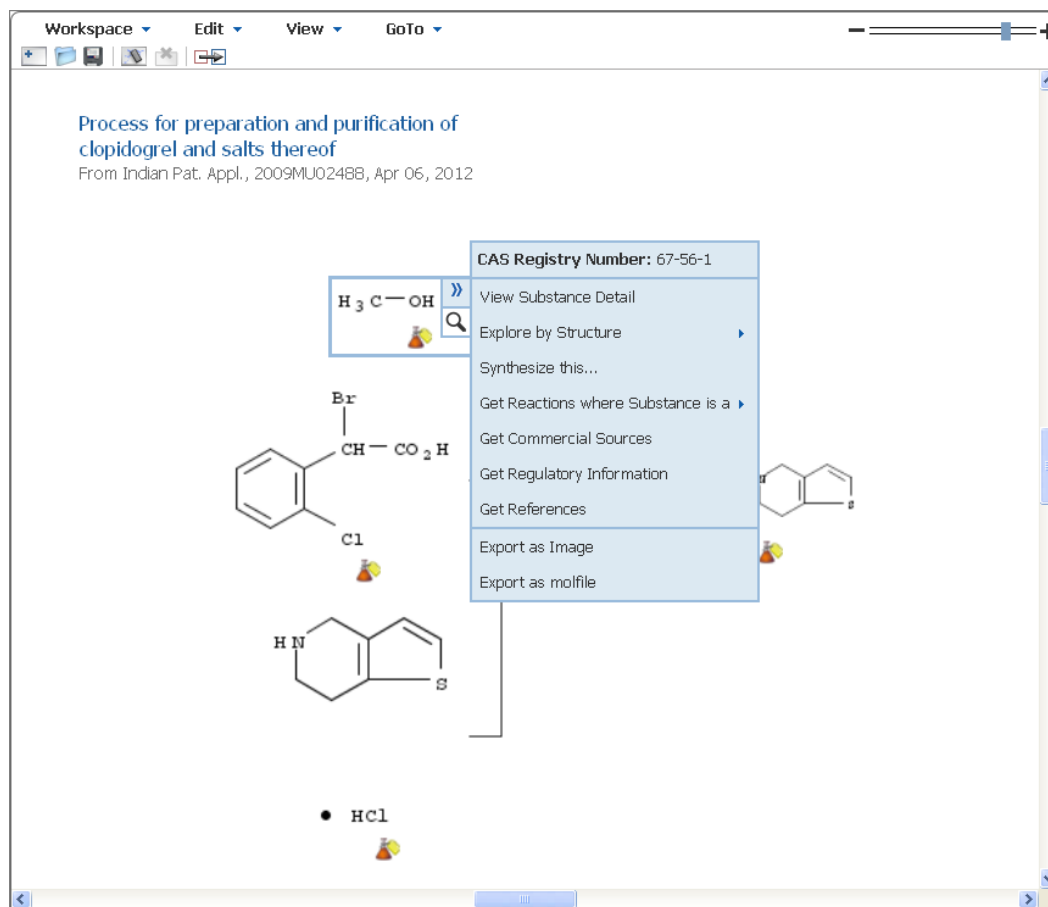
Commercial Sources
Available

Absolute stereochemistry, Rotation (+).

获取反应参与物的数据

将光标放在工作区中的反应参与物上时，就会出现两个图标。

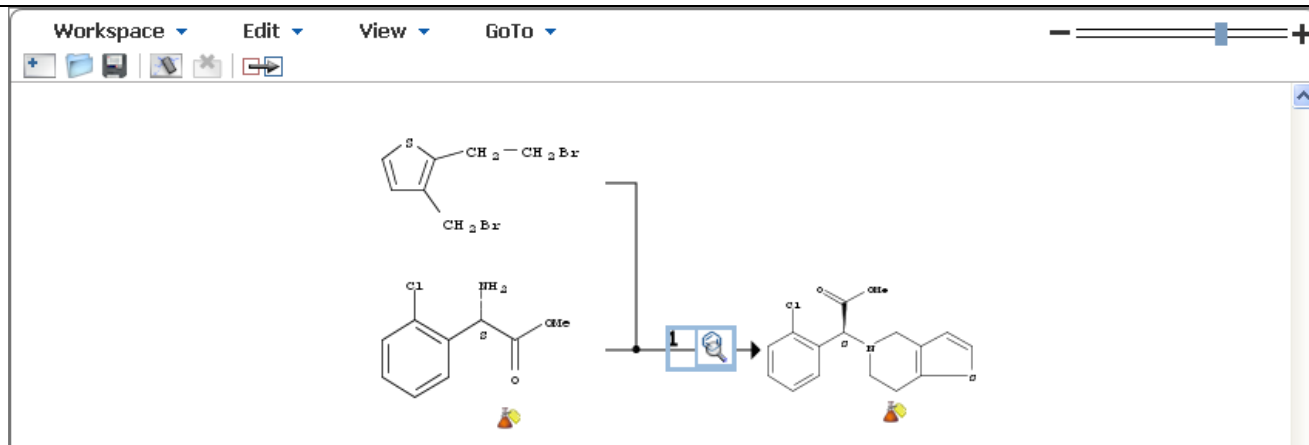
单击  显示物质选项。




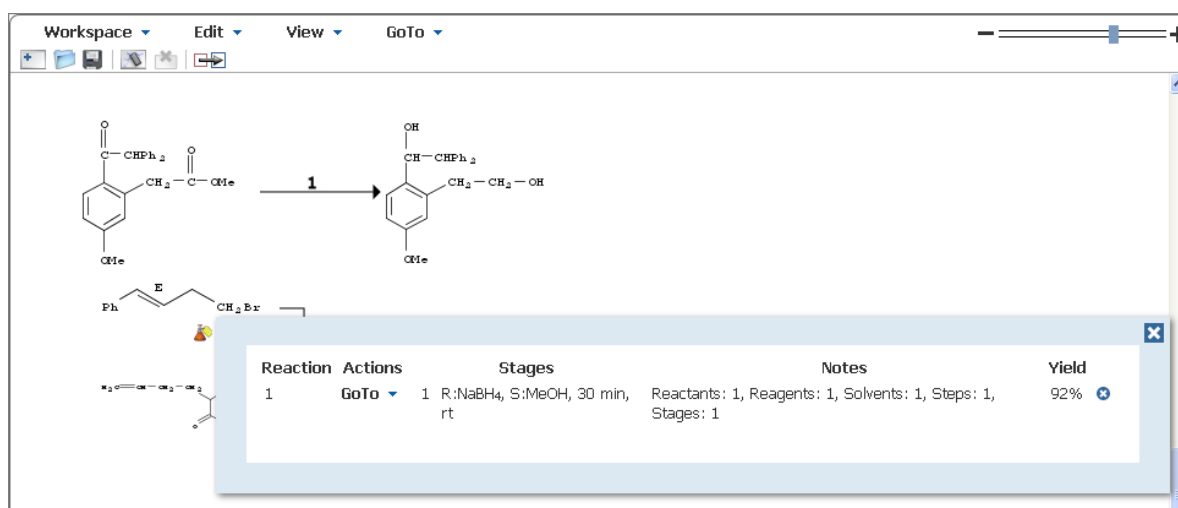
- 单击 , 无须离开 SciPlanner 就可快速浏览 ([Quick View](#)) 物质信息。

获取反应数据


将光标放在工作区中的反应编号上时，反应编号旁边就会出现一个图标。



1. 点击  显示反应简要信息。




2. 点击 **GoTo** 箭头显示选项:

Reaction	Actions	Stages	Notes	Yield
1	GoTo ▾ Reference Reaction	1 R:NaBH ₄ , S:MeOH, 30 min, rt	Reactants: 1, Reagents: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1	92% 

- 选择 **Reference** 退出 SciPlanner, 并在文献详情页面查看文献信息。
- 选择 **Reaction** 退出 SciPlanner, 并在反应详情信息页面上查看反应信息。


注: 点击反应简要信息中的图标 , 可将反应从工作区中删除。

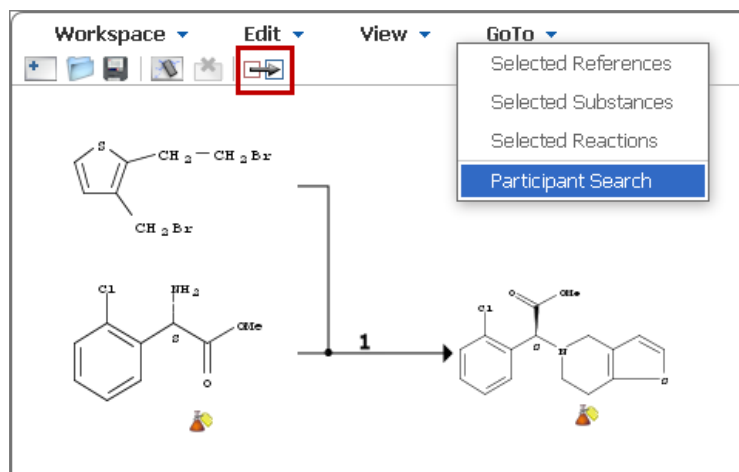
Reaction	Actions	Stages	Notes	Yield
1	GoTo ▾	1 R:NaBH ₄ , S:MeOH, 30 min, rt	Reactants: 1, Reagents: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1	92% 

系统将提示确认删除。勾选 **Delete substances that will no longer be part of a reaction** 选项框，删除反应和所有涉及的物质。取消选中该框将只删除反应信息，但会将这些物质作为单独对象保留在工作区中。然后单击 **OK**。

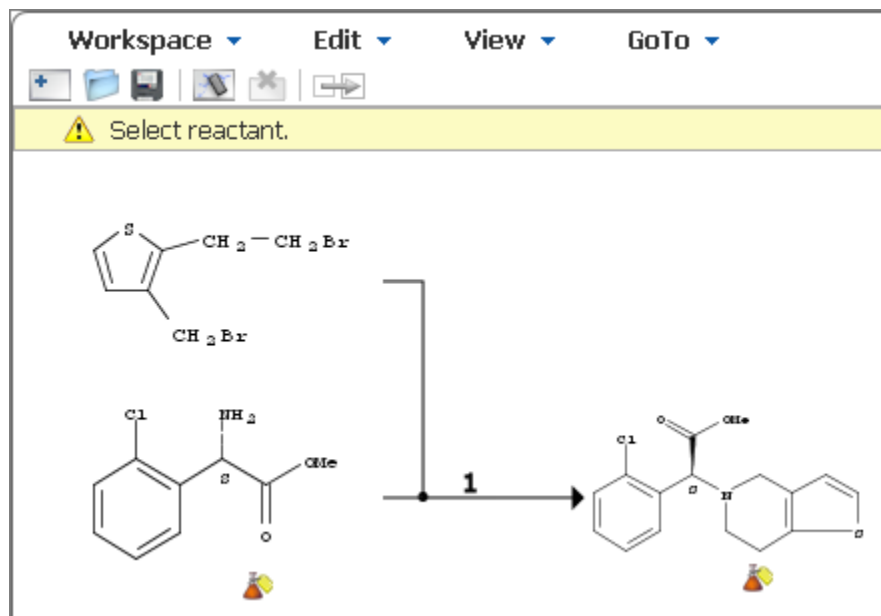
获取指定反应参与物的反应 (Participant Search)

参与物检索获得的反应包括了指定的反应物和产物。反应物和产物不必为工作区中同条反应的反应物和产物。

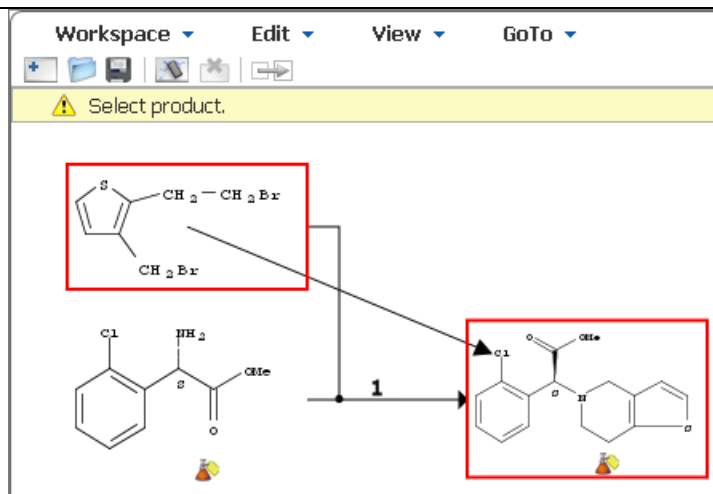
1. 单击 **Participant Search** 图标 , 或从 **GoTo** 菜单中选择 **Participant Search**。



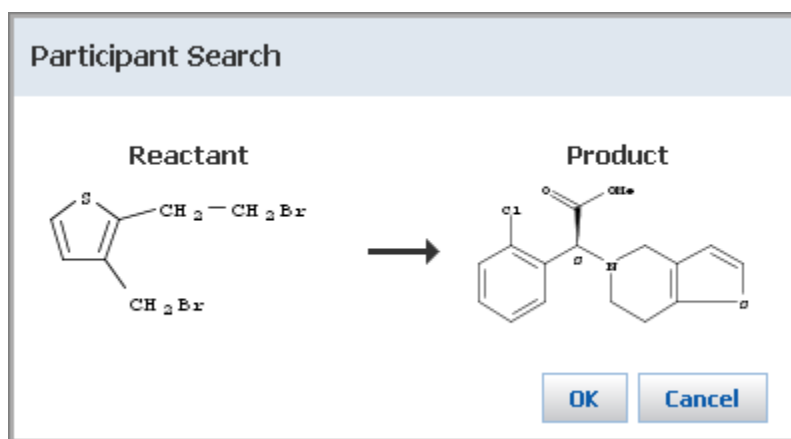
2. 系统将提示选择反应物，在工作区点击反应物结构。



3. 系统将提示选择产物，在工作区选择产物结构。产物和反应物间将会出现一个箭头。



4. 在出现的确认框中，点击“OK”。

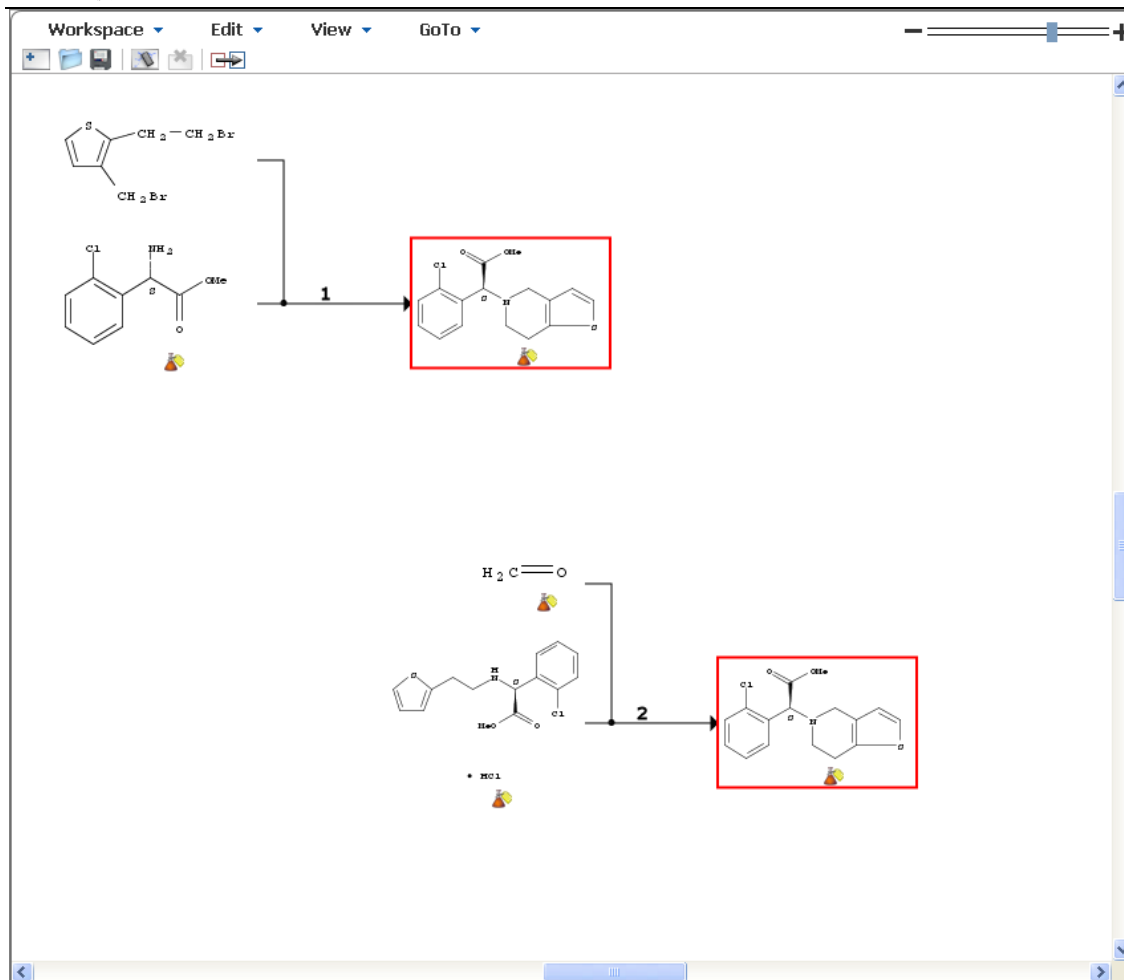


SciPlanner 关闭，在反应显示页面将显示包含指定反应物和产物的反应。

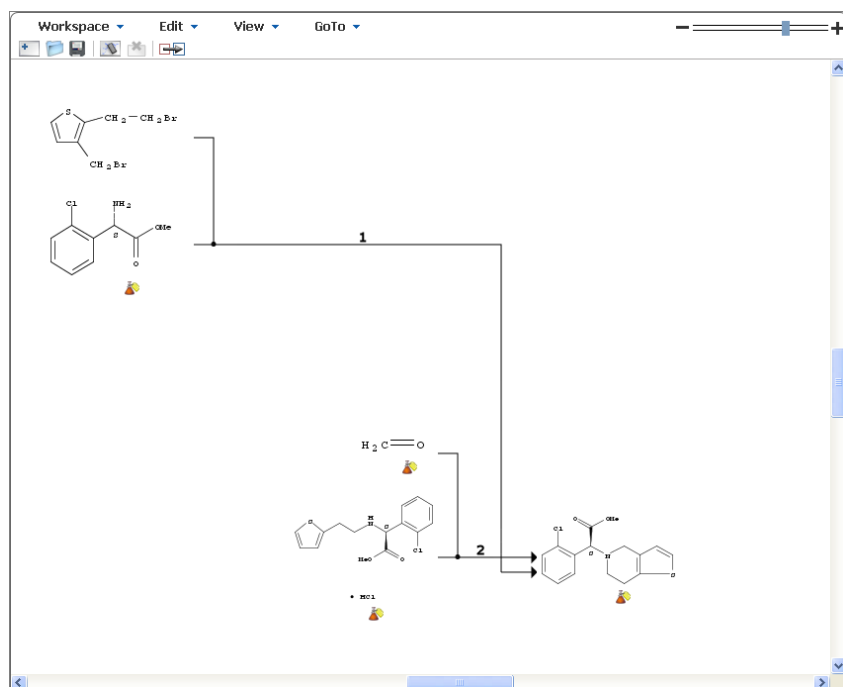
合并工作区的反应

如果工作区中的多条反应中有相同的物质，则可以将它们合并成一条反应。

在下面的示例中，工作区有两条不同的反应。两条反应中的相同物质已被高亮显示。



拖动某条反应中的物质与另一条反应中的相同物质重合，就能将两篇不同文献中的反应合并为一条反应。



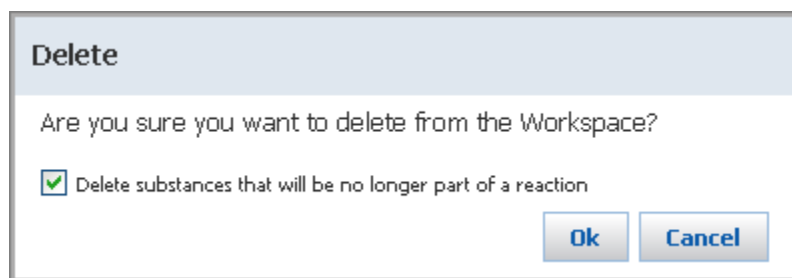
删除工作区的对象

一次可以删除一个对象，也可以同时删除工作区中的所有对象

删除一个对象

1. 点击要删除的对象。要删除一条反应，则请选择反应编号。
2. 按 **Delete** 键，或从 **Edit** 菜单中选择 **Delete Selected**。

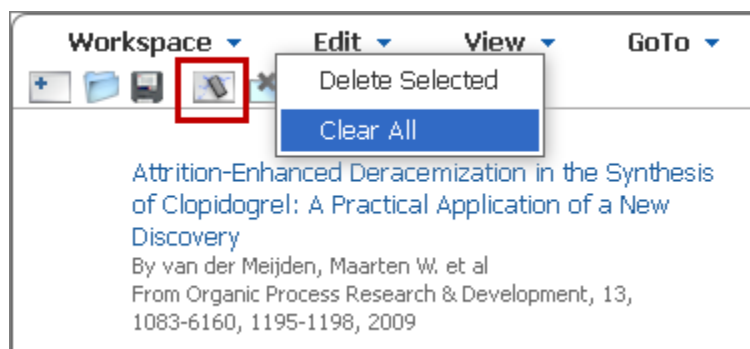
注：在删除反应时，会出现一个对话框。



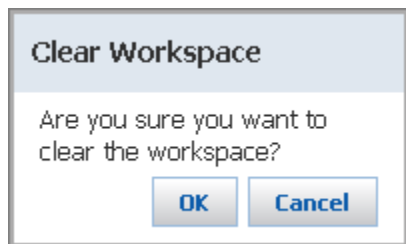
勾选 **Delete substances that will no longer be part of a reaction** 选项框，将删除反应和所有涉及的物质。取消选中该框则只删除反应信息，而将物质作为单独的对象保留在工作区中。然后点击 **OK**。

删除所有对象

1. 点击清除图标 ，或从 **Edit** 菜单中选择 **Clear All**。



2. 当提示确认时，点击 **OK**。



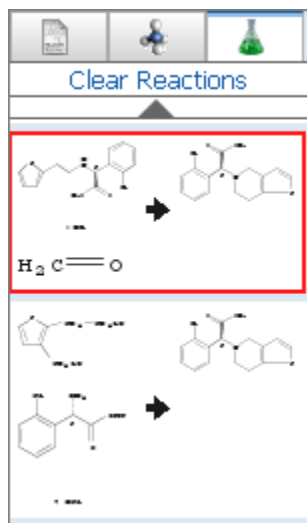
从 *library* 中删除对象

当一个对象从 *library* 中删除后，其将再也不能被添加到 **SciPlanner** 项目中。删除操作将无法撤销。

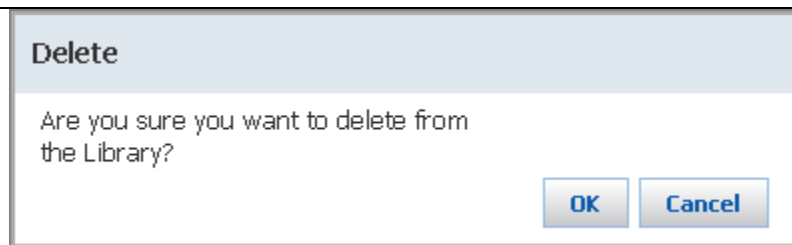
注：SciPlanner *library* 中最多可包含 100 个对象（文献、物质和反应）。

删除一个选中的对象

1. 点击要选择的对象（一次只能选择一个 *library* 项目）。

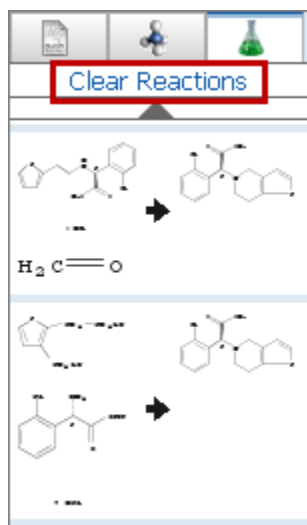


2. 按 **Delete** 键。
3. 当提示确认时，点击 **OK**。

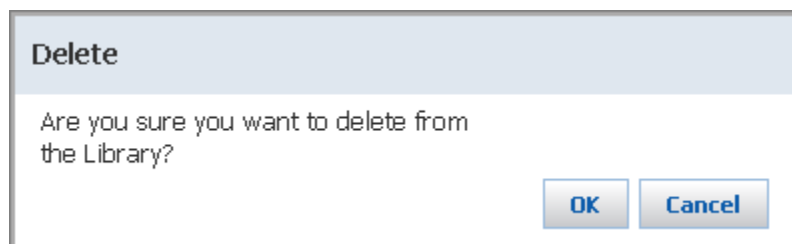


删除 library 标签中所有对象

1. 点击标签顶部的 **Clear** 选项（如：**Clear Reactions**）。



2. 当提示确认时，点击 **OK**。

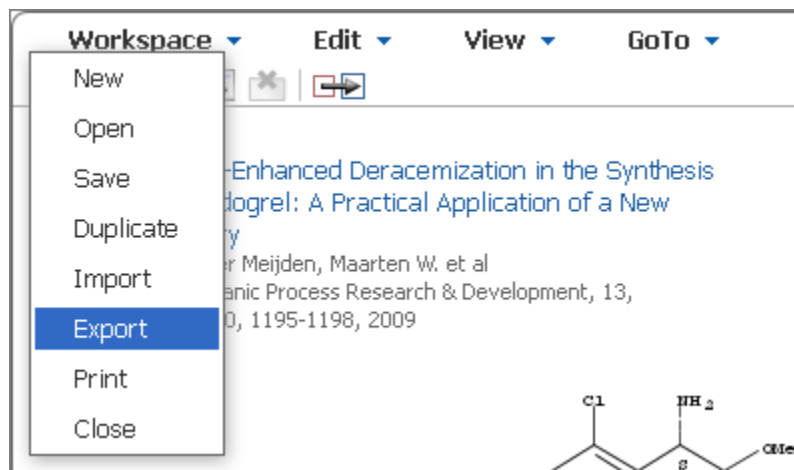


分享项目

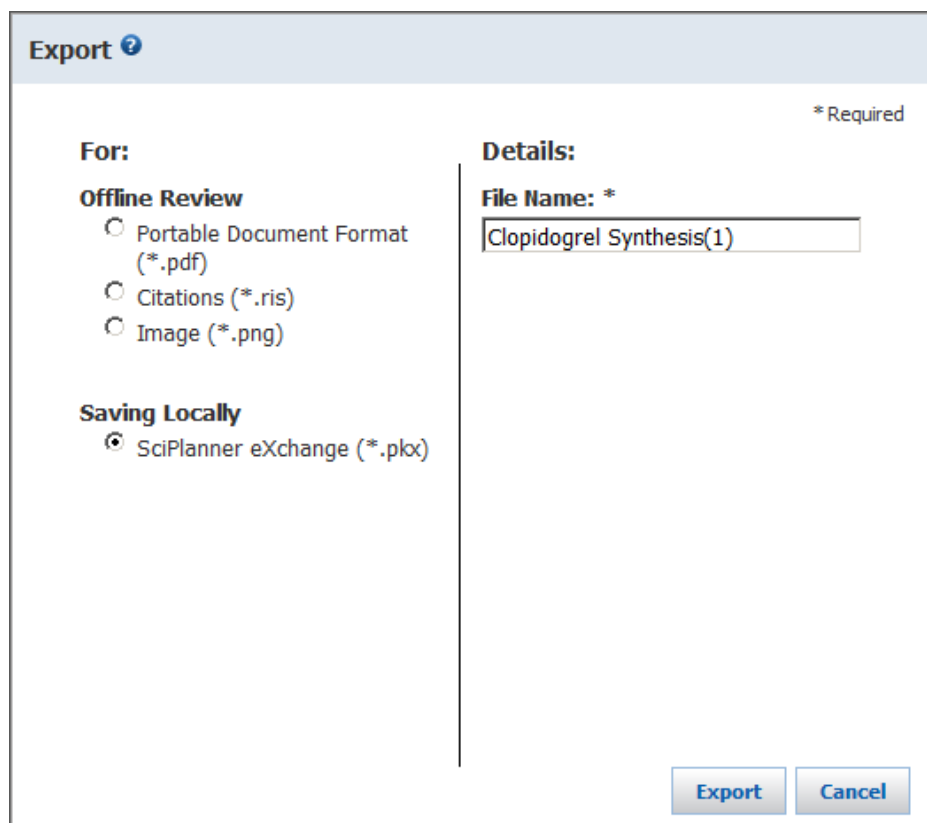
SciPlanner 工作区的内容可以导出为可由其他 SciFinder 用户导入的 PKX 文件。也可以将项目打印为 PDF 文件（print a project to a PDF file），或用 export the citations 将项目导出为引文工具能够识别的文件类型。

导出 PKX 文件

1. 从 **Workspace** 菜单中选择 **Export**。



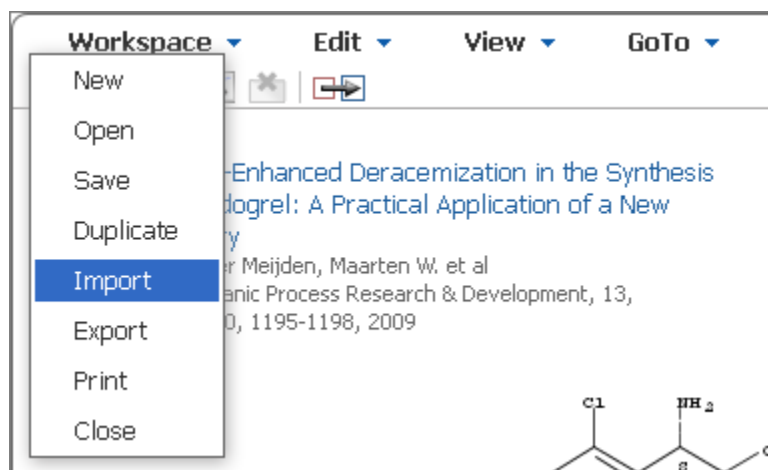
2. 点击圆点保存为 **SciPlanner eXchange (*.pkx)**。



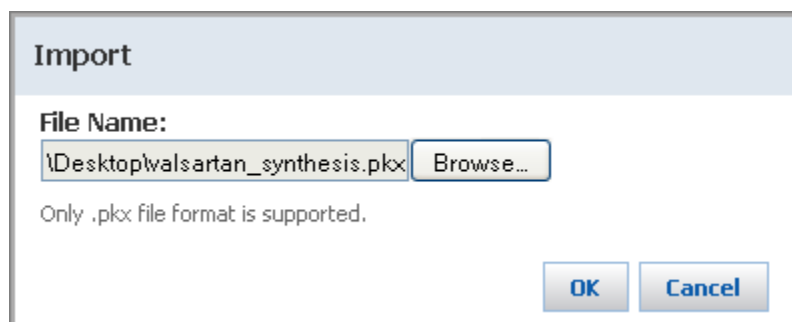
3. 输入一个 **File Name**, 或者用默认文件名保存。
4. 点击 **Export**.

导入一个 PKX 文件

1. 从 **Workspace** 菜单中选择 **Import**。



2. 输入文件名, 或使用 **Browse** 按钮找到文件。



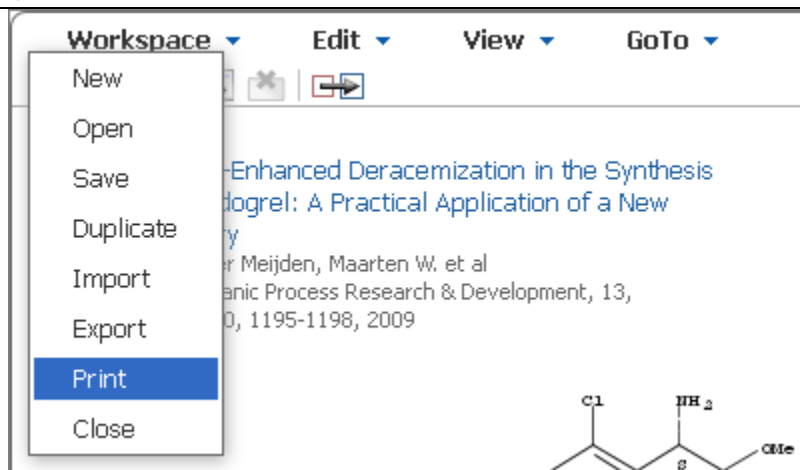
3. 点击 **OK**

打印项目

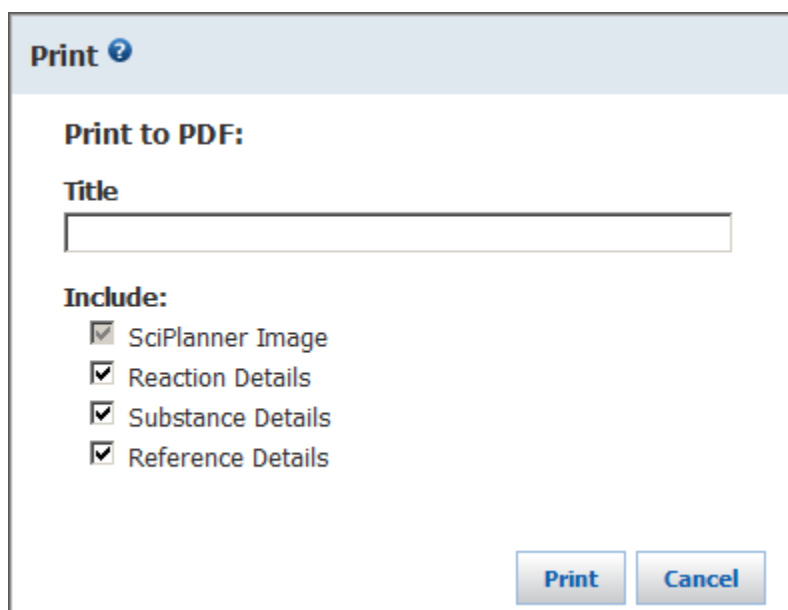
可以将工作区的内容打印为 PDF 文件（包括文献、物质和反应的详细信息）。

操作步骤

1. 从 **Workspace** 菜单中选择 **Print**。



2. 输入 Title



默认情况下，工作区内容会被打印为 SciPlanner 图像（包括反应、物质和文献详情。可以不勾选任何不想要的信息的选项框）。

3. 点击 Print

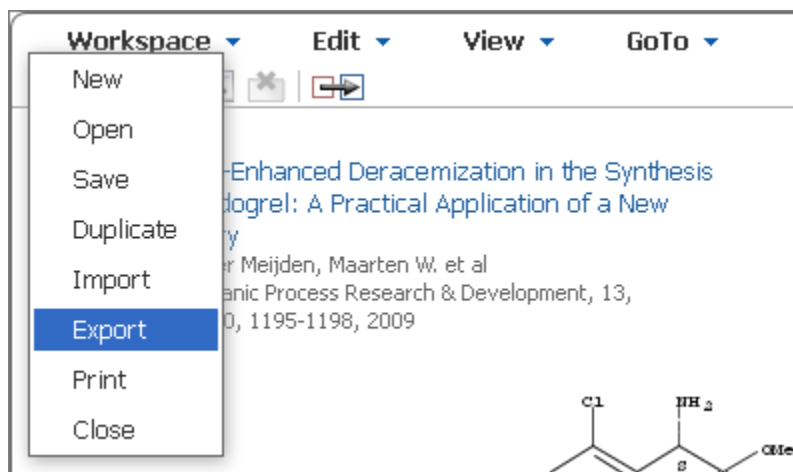
注：也可以用导出方式将工作区内容导出为 PDF 文件。要导出工作区内容，则请从 **Workspace** 菜单中选择 **Export**。

导出引文

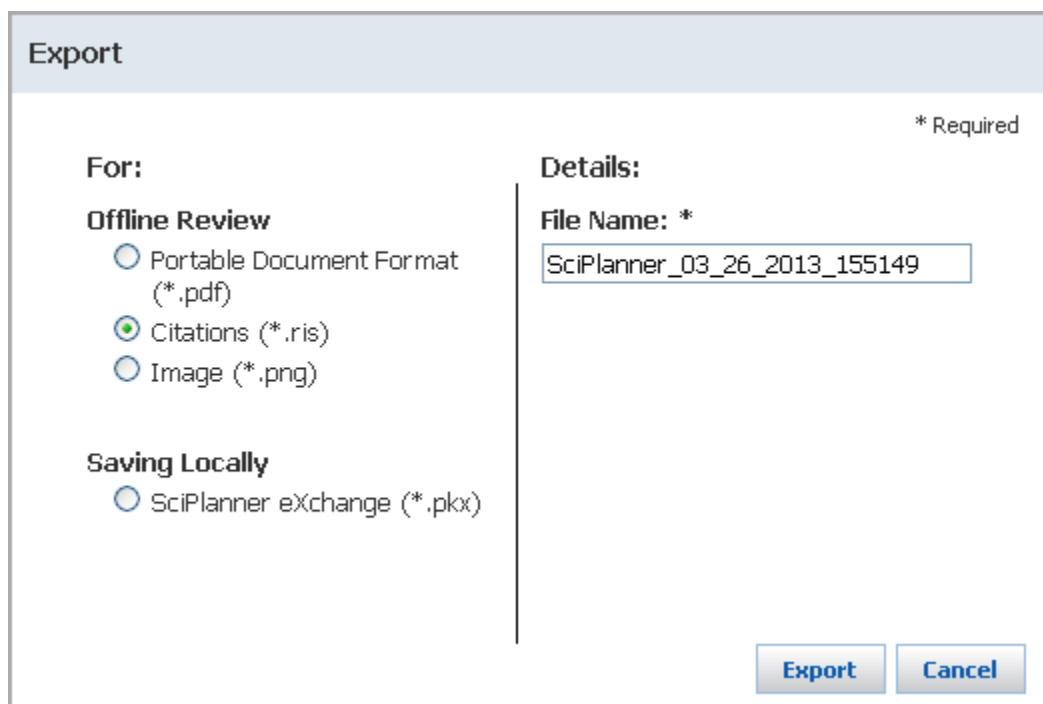
可将工作区文献引文导出为引文管理软件（ChemWorx™，EndNote®和 ReferenceManager®）识别的 RIS 文件。

操作步骤

1. 从 **Workspace** 菜单中选择 **Export**。



2. 点击 **Citations** (*.ris) 选项。



3. 输入一个 **File Name**，或者用默认文件名保存。
4. 点击 **Export**

保存一个项目

要保存工作区中的一系列对象，请：

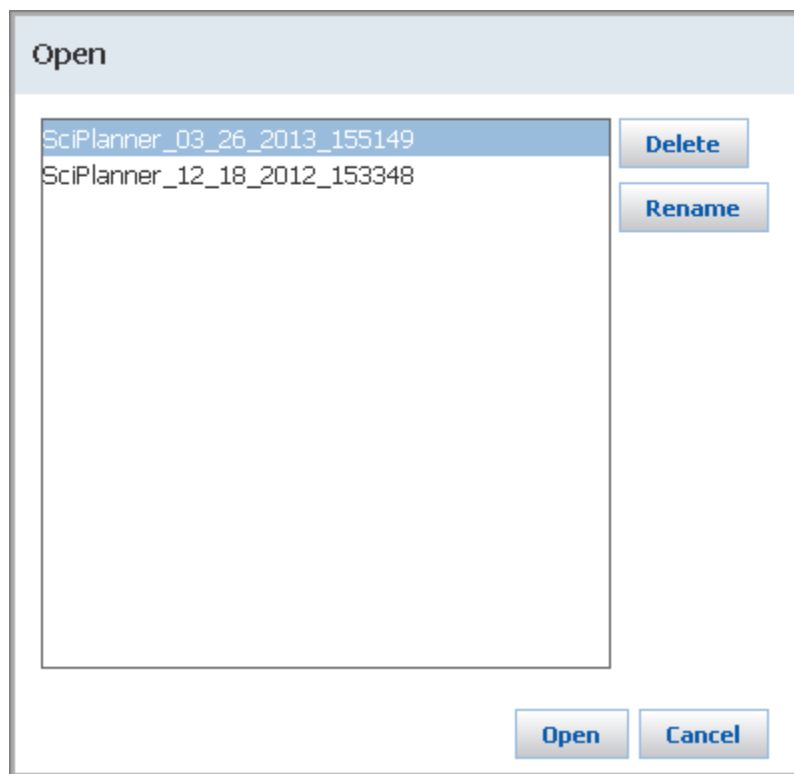
- 点击 **Save** 图标 。
- 从 **Workspace** 菜单中选择 **Save**。

打开一个项目

可以创建并保存最多 1000 个 SciPlanner 项目。按照以下步骤打开一个保存的项目。

操作步骤

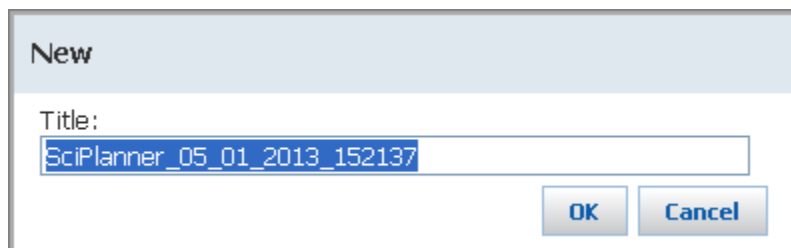
1. 从 **Workspace** 菜单中选择 **Open**，或直接点击 **Open** 图标 。
2. 点击想要打开项目的文件名，然后点击 **Open**。



创建一个新项目

可以创建并保存最多 1000 个 SciPlanner 项目。

1. 从“**Workspace**”菜单中选择 **New**，或点击 **New** 图标 。
2. 输入项目的 **Title**，或用系统提供的默认文件名。



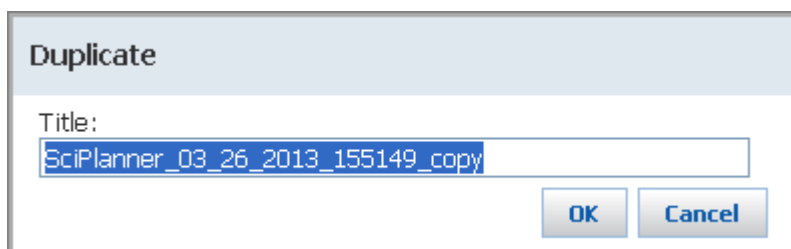
New

Title:

SciPlanner_05_01_2013_152137

OK Cancel

3. 点击 **OK**



Duplicate

Title:

SciPlanner_03_26_2013_155149_copy

OK Cancel

创建当前项目的副本

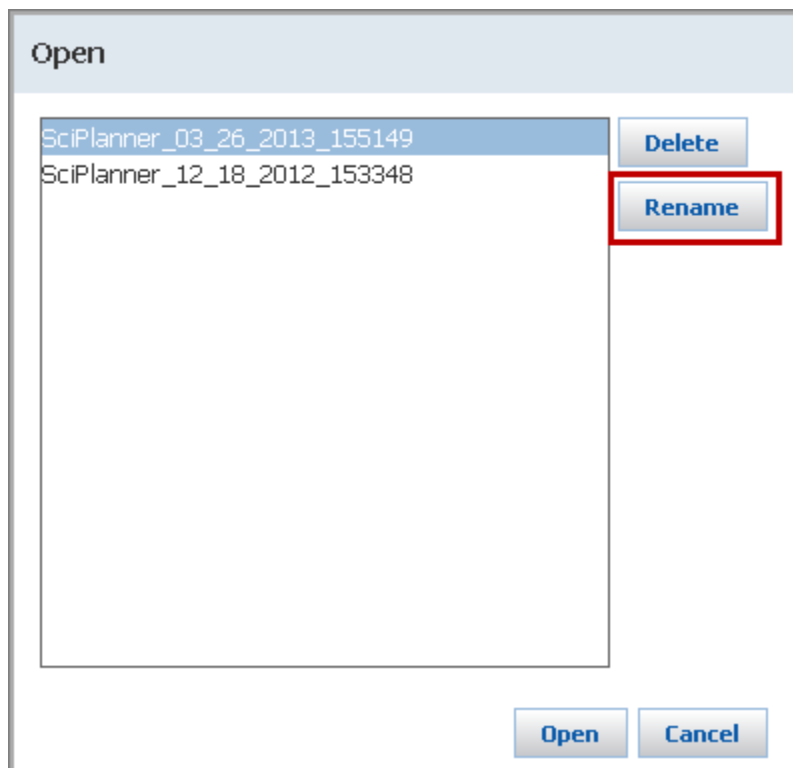
1. 从 **Workspace** 菜单中选择 **Duplicate**。
2. 输入副本的 **Title**，或用系统提供的默认文件名。
3. 点击 **OK**

重命名一个项目

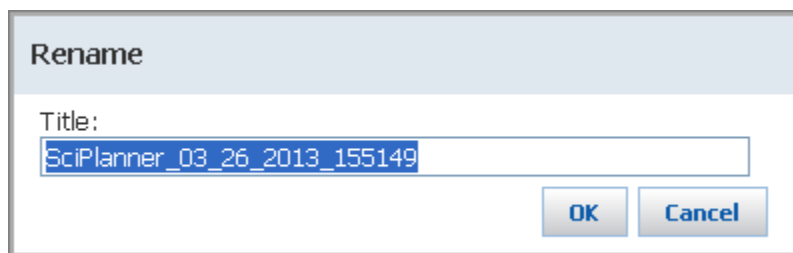
当创建一个新项目时，SciPlanner 会提供一个默认名称。您可以随时更改项目名称。

操作步骤

1. 从 **Workspace** 菜单中选择 **Open**，或点击 **Open** 图标.
2. 点击要重命名的项目的名称，然后点击 **Rename**。



3. 输入一个新 **Title**



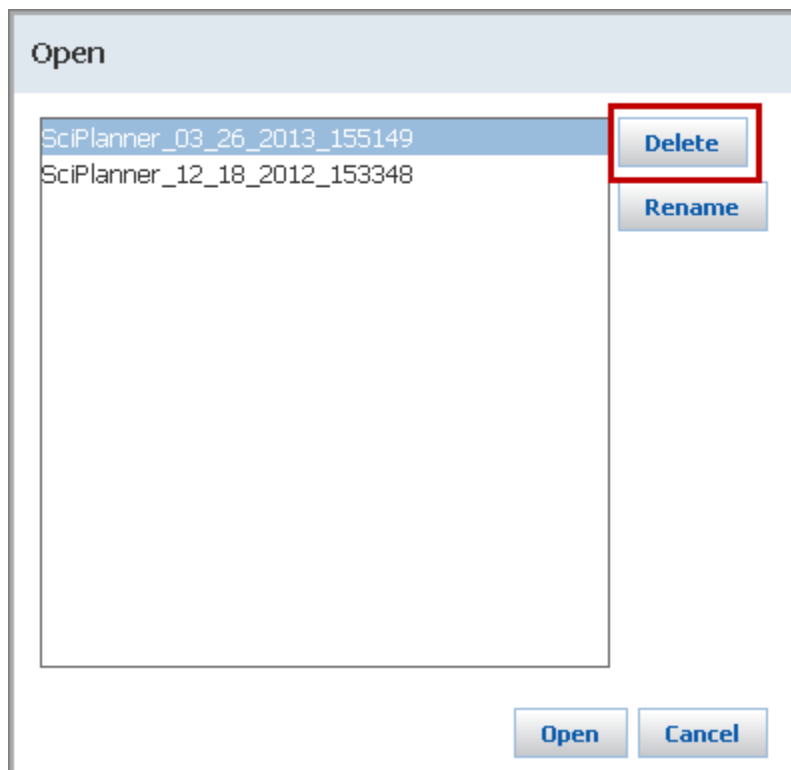
4. 点击 **OK**.

删除一个项目

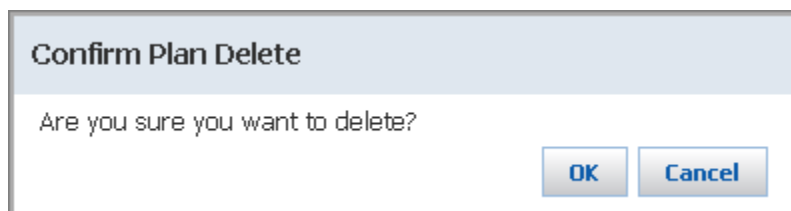
可以创建并保存最多 1000 个 SciPlanner 项目。根据以下步骤删除不再需要的项目：

操作步骤

1. 从 **Workspace** 中选择 **Open**，或点击 **Open** 图标。
2. 点击要删除的项目的名称，然后点击 **Delete**。



3. 当提示确认时，点击 **OK**。





SciFinder[®] 使用手册

第十三卷 查看检索历史

美国化学文摘社

CAS, a division of American Chemical Society

13. 查看检索历史

总览.....	1
历史页面图.....	2
查看，打印或导出当前检索的历史记录.....	3
导出以前检索的历史记录.....	4

总览

SciFinder 中的检索过程将被记录在检索历史中。可以查看、打印或导出当前会话的检索历史记录，也可以导出之前的某个历史记录。

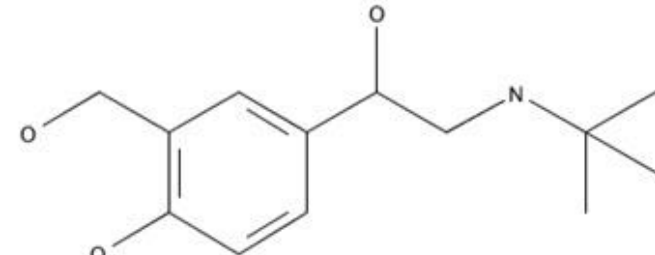
导出历史示例

SciFinder®

Session Began September 04, 2012 at 10:08 AM

Task Began September 04, 2012 10:09 AM

Explore reactions by substructure (ID 1)



product

Limiters:

Classifications:	
Source:	Patents only
Number of Steps:	1

Answer Type: Reactions

Result Count: 312

Refine Answer set by Product Yield (ID 2)

Product Yield:	80 -
From ID:	1

Answer Type: Reactions

Result Count: 42

Kept all reaction answers from Answer set 2 for transformation

Transformation: Reduction of Aldehydes and Ketones to Alcohols

历史页面图

Research Topic "tyrosine kinase inhibitors in ..." > references (3051) > Multi-institutional randomized...

HISTORY

SAVED SEARCHES
 Saved Answer Sets
 Keep Me Posted
 History

Session began April 15, 2013 at 3:16 PM **A**
 Explore references by research topic tyrosine kinase inhibitors April 15, 2013 3:18 PM
 in treatment of cancer initiated, resulting in 12 candidates

Explore complete
Candidates Selected
 3051 references
 "treatment" a

Explore results
 Answer set 1
 2,187 answers
 864 answers

Detailed
 trial of g
 lung cancer

PREVIOUS SESSIONS **B**

- Apr 15 2013, 01:53 PM
- Apr 11 2013, 02:57 PM
Thyrotoxicosis during sunitini...
- Apr 09 2013, 12:52 PM
refine by categories
- Apr 04 2013, 04:12 PM
- Apr 03 2013, 09:23 PM
Opened saved answer set
"clopidogrel rxn
substructure" (691)
- Apr 03 2013, 07:02 PM
- Apr 03 2013, 03:59 PM 7-
Lactam residues in raw milk ...
- Apr 03 2013, 01:49 PM
references (139)
- Apr 02 2013, 11:08 AM
- Mar 25 2013, 02:46 PM
Fluka

Print **Export** **C**

点击图中的字母，查看历史
页面各项的对应解释

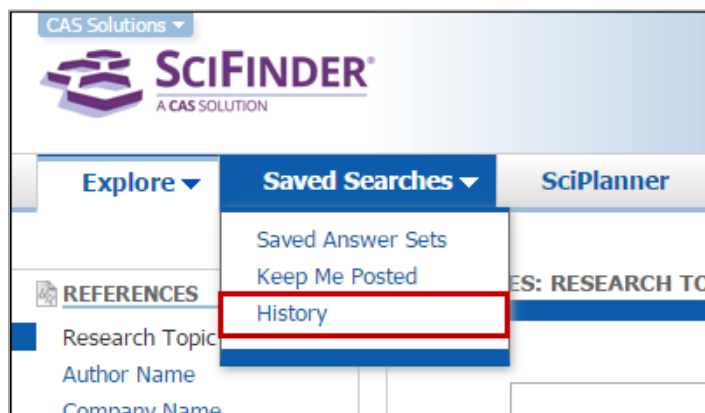
A	在 SciFinder 中执行的操作，被记录在检索历史中。
B	此处列出了前十次的检索历史。 要查看之前的某个检索历史，请点击 session ，历史记录将以富文本格式（.rtf）显示。
C	点击 Print 将当前历史记录打印为 PDF 文件。 点击 Export 将当前历史记录导出为富文本格式（.rtf）文件。

查看，打印或导出当前检索的历史记录

在 SciFinder 中查看、打印或导出当前检索的历史记录。要查看以前检索的历史记录，则必须导出历史记录，然后打开导出的文件查看。

操作步骤

1. 选择 **Saved Searches > History**.



当前检索的历史记录显示在历史记录页面上。

A screenshot of the SciFinder 'History' page. The page title is 'Reaction Structure substructure > reactions (1899) > refine "substructure" (708)'. In the top right corner, 'Print' and 'Export' buttons are highlighted with red boxes. The main content area shows a search session starting on May 2, 2013, at 9:05 AM. The query is 'Explore reactions by substructure structure initiated'. A chemical structure of a product is shown, which is a benzamide derivative with a chlorine atom on the benzene ring and a thiazole ring system. Below the structure, it says 'product'. The session is complete, and the results are displayed as 'Answer set 1 created with 1,899 reactions from CASREACT'. A second search is shown where the answer set is refined by substructure, resulting in 'Answer set 2 created with 708 reactions from CASREACT'. On the right side, there is a 'PREVIOUS SESSIONS' list with dates and times, including 'May 02 2013, 09:05 AM substances (0)', 'May 01 2013, 04:15 PM', 'May 01 2013, 03:33 PM', 'May 01 2013, 02:48 PM', 'May 01 2013, 12:14 PM', 'Apr 30 2013, 04:03 PM', 'Apr 30 2013, 01:19 PM 619-58-9', 'Apr 30 2013, 12:13 PM keep analysis "Commercial Availability" (484)', 'Apr 25 2013, 09:09 AM', and 'Apr 24 2013, 03:51 PM commercial sources (133)'.

2. 要将检索历史打印为 PDF 文件，则请点击 **Print**.
3. 要将检索历史导出为富文本（RTF）格式文件，则请点击 **Export**.

导出以前检索的历史记录

最近十个 SciFinder 检索的历史记录显示在历史记录页面的右侧边栏中。要查看上一次检索的历史记录，请导出历史记录，然后使用 Microsoft Word 等应用程序打开 RTF 格式（RTF）文件。

操作步骤

1. 选择 **Saved Searches > History**。
2. 从右边栏点击想要导出的历史。

Reaction Structure substructure > reactions (1899) > refine "substructure" (708)

HISTORY ⓘ

SAVED SEARCHES
 Saved Answer Sets
 Keep Me Posted
 History

Session began May 2, 2013 at 9:05 AM
 Explore reactions by *substructure* structure initiated May 2, 2013 9:06 AM
 Query

product

Explore complete
 Explore results
 Answer set 1 created with 1,899 reactions from CASREACT

Refine Answer set 1 by *substructure* structure

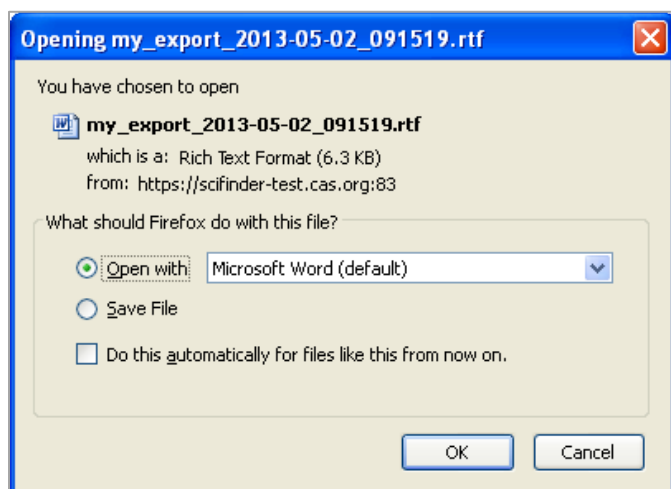
product

Answer set 2 created with 708 reactions from CASREACT

PREVIOUS SESSIONS

- May 02 2013, 09:05 AM substances (0)
- May 01 2013, 04:15 PM
- May 01 2013, 03:33 PM
- May 01 2013, 02:48 PM
- May 01 2013, 12:14 PM
- Apr 30 2013, 04:03 PM Opened saved answer set "Benzoic acid refined for comme..." (484)
- Apr 30 2013, 01:19 PM 619-58-9**
- Apr 30 2013, 12:13 PM keep analysis "Commercial Availability" (484)
- Apr 25 2013, 09:09 AM Opened saved answer set "Benzoic acid refined for comme..." (484)
- Apr 24 2013, 03:51 PM commercial sources (133)

3. 选择是否打开或者保存文件





SciFinder[®] 使用手册

第十四卷 SciFinder 系统设置

美国化学文摘社

CAS, a division of American Chemical Society

14. SciFinder 系统设置

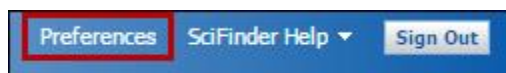
总览.....	1
偏好屏幕图示.....	2
在 CAS profile 中修改邮件、密码和安全问题.....	4
设置定题追踪提醒的电子邮箱.....	4
查看供应商信息偏好设定.....	6
自动去除重复的 MEDLINE 结果集.....	7
选择默认的起始页.....	9
编辑绘图偏好项（非 Java 编辑器）.....	10
编辑绘图偏好项（Java 编辑器）.....	11

总览

SciFinder 系统设置:

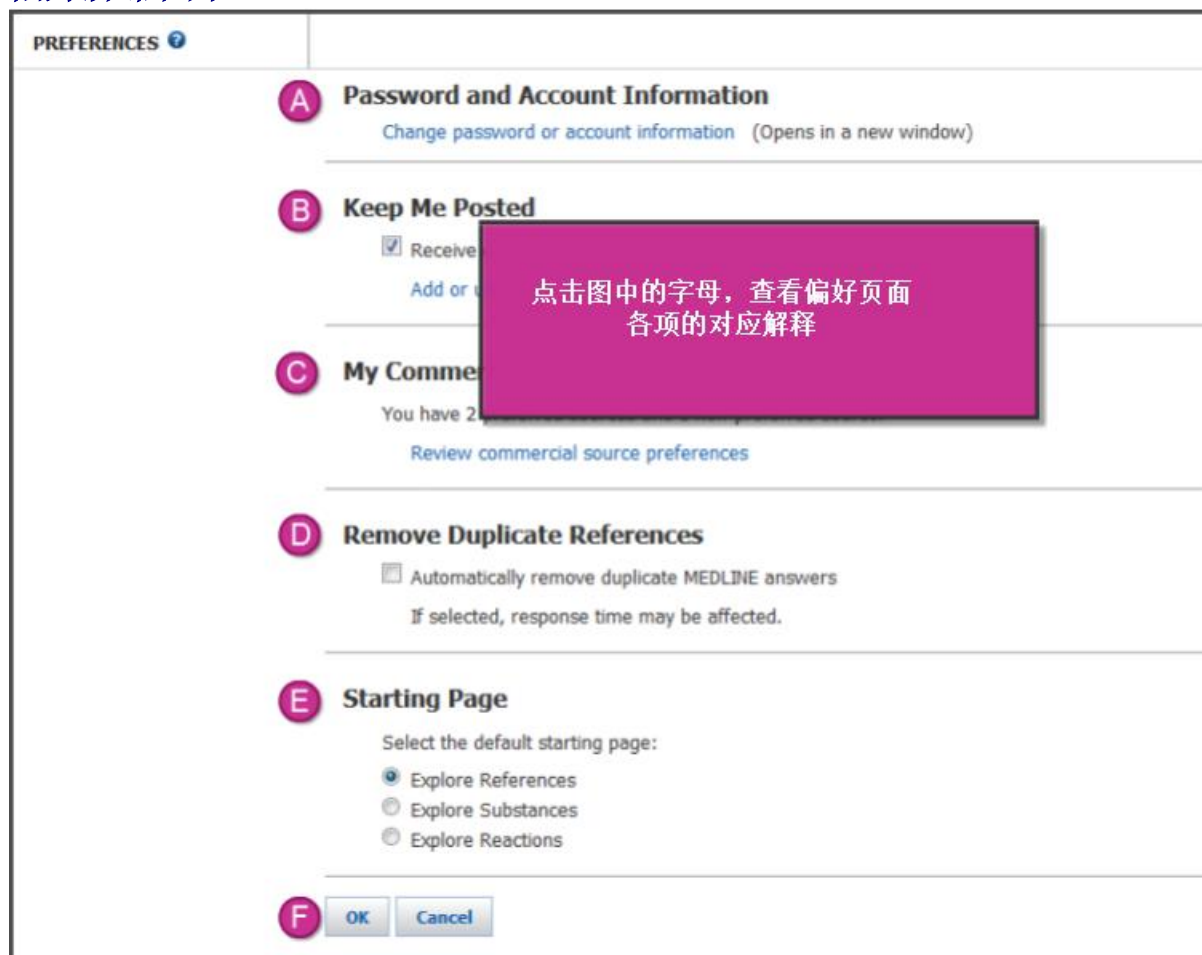
- 修改 SciFinder 密码或者账户信息
- 设置定题追踪 (KMP) 结果邮件提醒
- 管理首选化学品供应商
- 自动去除重复的 MEDLINE 结果
- 选择默认的检索页面

点击屏幕右上角的 **Preferences**, 访问 SciFinder 偏好设置页面





另一组管理结构编辑器偏好设置。(有关详细信息, 请参阅 [Customize the Structure Editor](#)。)

偏好屏幕图示



A	进入 CAS Profile 页面，点击 Change password or account information 更改您的密码或其他用户帐户信息，例如您的安全问题或个人信息。
B	进入 CAS Profile 页面，选中此项以在您的 Keep Me Posted 提醒有新结果可用时接收到电子邮件。您必须具有与您的 SciFinder 帐户相关联的当前电子邮件地址。 单击 Add or update e-mail address 以根据需要添加或更改您的电子邮件地址。
C	您可以为供应商信息列表指定偏好和非偏好来源。 点击 Review commercial source preferences 以查看偏好和非偏好的列表，并从任一列表中删除供应商信息。
D	文献检索的结果可以包括 MEDLINE®和 CAplus SM 数据库的结果。 选中此选项将自动去除与结果集中的与 CAplus 记录重复的 MEDLINE 记录。

	当您登录 SciFinder 时，会话将自动打开您在此处选择的页面。
	单击 OK 将更改保存到 SciFinder 偏好项。 单击 Cancel 退出首偏好项，而不保存任何更改。

在 CAS Profile 中修改邮件、密码和安全问题

在偏好 **Preferences** 页面, 点击下列内容打开 **CAS Profile** 进行修改:

- 修改密码和账户信息
- 增加或更新邮件地址

The screenshot shows the 'PREFERENCES' section of the SciFinder interface. It is divided into two main areas:

- Password and Account Information:** Contains a button labeled 'Change password or account information' with a tooltip that says '(Opens in a new window)'. This button is circled in green in the image.
- Keep Me Posted:** Contains a checked checkbox for 'Receive e-mail notification of Keep Me Posted results'. Below this is a button labeled 'Add or update e-mail address' with a tooltip that says '(Opens in a new window)'. This button is also circled in green in the image.

如果你之前不曾验证过邮件, 在登陆 **CAS Profile** 前需强制认证。

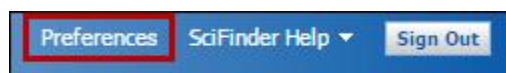
重要信息: 进行更改后不要登出 CAS Profile; 因登出 CAS Profile 后会自动登出 SciFinder。只需关闭窗口即可。

设置定题追踪提醒的电子邮箱

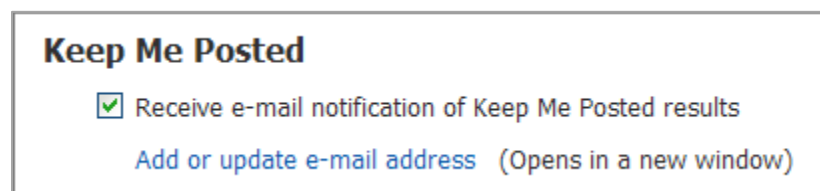
您可以设置偏好项以接收 Keep Me Posted 结果的电子邮件通知。

操作步骤

1. 在右上角点击 **Preferences**



2. 在偏好项页面, 点击 **Receive e-mail notification of Keep Me Posted results**



您必须具有与您的 SciFinder 帐户相关联的当前电子邮件地址。

注：如需要添加或更新电子邮件地址，请单击 **Add or update e-mail address** 在 **CAS Profile** 修改。

3. 单击 **OK** 保存修改并退出。



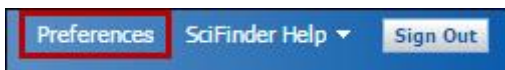
查看供应商信息偏好设定

您可以使用偏好项来查看偏好和非偏好供应商来源的列表，并从任一列表中删除来源。

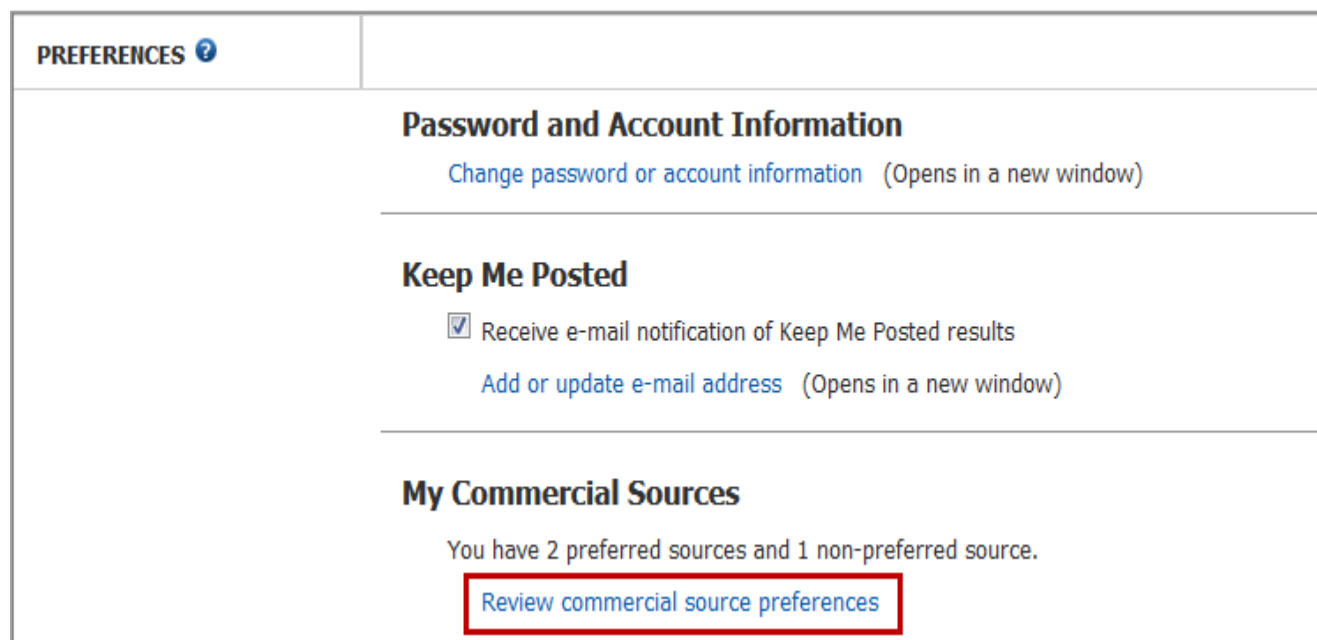
要将商业来源添加到偏好或非偏好列表，请参阅第 10 章指定首选和非首选供应商。

操作步骤

1. 在右上角点击 **Preferences**



2. 在偏好项页面，在 **My Commercial Sources** 下，点击 **Review commercial source preferences**.



3. 在我的供应商信息屏幕上，单击 X 以从偏好或非偏好列表中删除供应商信息。从这些列表中删除供应商信息会将其状态更改回无偏好项。

MY COMMERCIAL SOURCES ?					
	<p style="text-align: right;">« Return to Preferences Click 'x' to remove source from Preferred list.</p> <p>Preferred Commercial Sources (2)</p> <table border="1"> <tr> <td data-bbox="407 247 1414 275">ALDRICH</td> <td data-bbox="1414 247 1476 275" style="text-align: right;">✕</td> </tr> <tr> <td data-bbox="407 275 1414 302">TCI America Fine Chemicals</td> <td data-bbox="1414 275 1476 302" style="text-align: right;">✕</td> </tr> </table>	ALDRICH	✕	TCI America Fine Chemicals	✕
ALDRICH	✕				
TCI America Fine Chemicals	✕				
	<p style="text-align: right;">Click 'x' to remove source from Non-Preferred list.</p> <p>Non-Preferred Commercial Sources (1)</p> <table border="1"> <tr> <td data-bbox="407 495 1414 522">Aaron Chemistry GmbH Product List</td> <td data-bbox="1414 495 1476 522" style="text-align: right;">✕</td> </tr> </table>	Aaron Chemistry GmbH Product List	✕		
Aaron Chemistry GmbH Product List	✕				
	<p style="text-align: right;">« Return to Preferences</p> <p style="text-align: center;">Set or remove Commercial Source Preferences from either the Commercial Source Answer Set page or the Detail page.</p>				

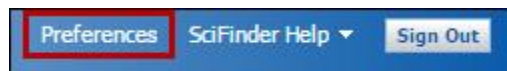
4. 点击 **Return to Preferences**
5. 点击 **OK** 保存修改，退出偏好页

自动去除重复的 MEDLINE 结果集

文献检索的结果可以包括 MEDLINE®和 CAplusSM数据库的结果。您可以设置偏好项以自动去除与结果集中的 CAplus 记录重复的 MEDLINE 记录。

操作步骤

1. 在右上角点击 **Preferences**



2. 选择选项 **Automatically remove duplicate MEDLINE answers**

Remove Duplicate References

Automatically remove duplicate MEDLINE answers

If selected, response time may be affected.

如上所述，显示文献结果所需的响应时间可能有延迟。

3. 点击 **OK** 保存修改，退出偏好页

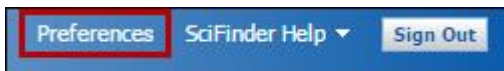
或者，您可以选择在完成文献检索后手动删除重复的 MEDLINE 结果。从文献检索结果屏幕中，从工具菜单中选择删除重复项。

选择默认的起始页

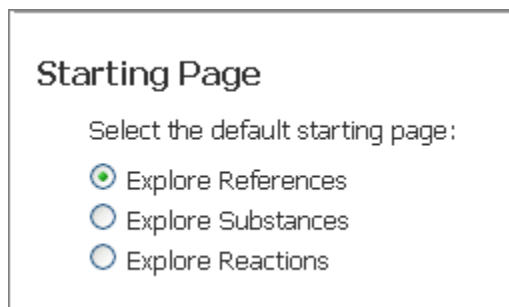
您可以设置偏好项，以在登录 SciFinder 时将“检索参考文献”，“检索物质”或“检索反应”设置为默认起始页。

操作步骤

1. 在右上角点击 **Preferences**




2. 单击单选按钮选择默认起始页。

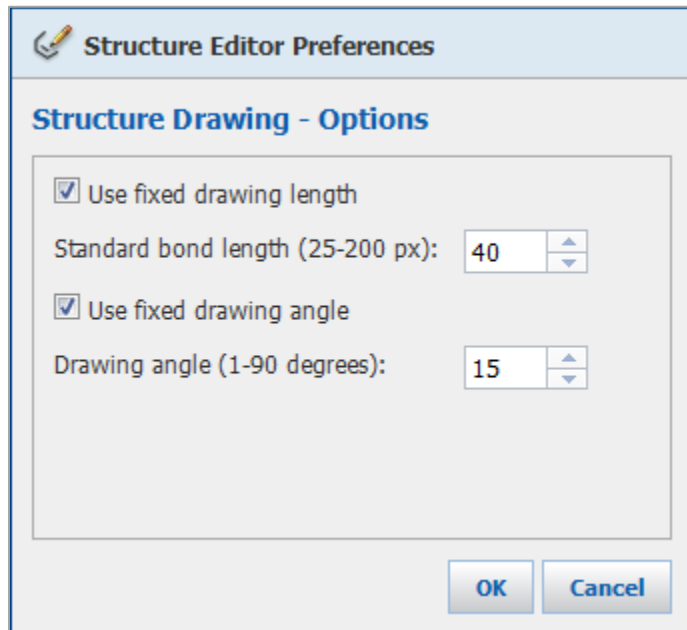


3. 点击 **OK** 保存修改，退出偏好页

编辑绘图偏好项 (非 Java 编辑器)

1. 在结构编辑器中，单击偏好项图标 。


2. 改变偏好项



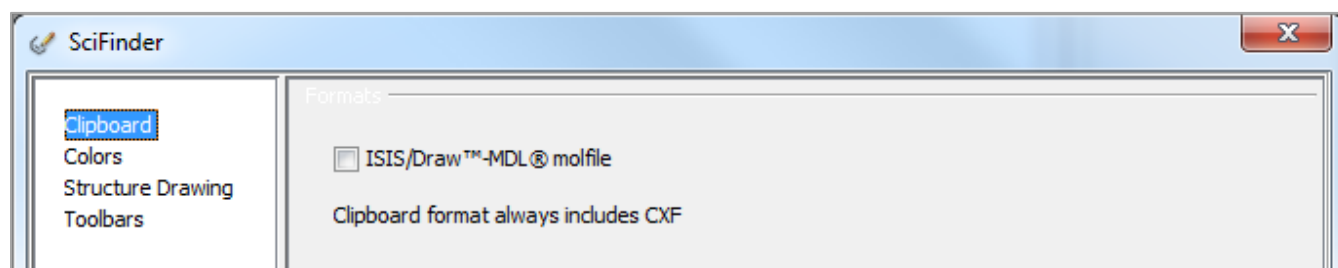
Option	Description
Use fixed drawing length	当选中此选项时，您绘制的键将自动对齐到设置的长度。此选项还设置绘制的环和模板的大小。 标准键长度值为 25 - 200 px。默认长度为 40px。
Use fixed drawing angles	当选中此选项时，您新绘制的键将自动调整为标准角度。 角度值为 1 - 90 度。默认值为 15 度。

3. 点击 **OK** 保存偏好项

编辑绘图偏好项 (Java 编辑器)

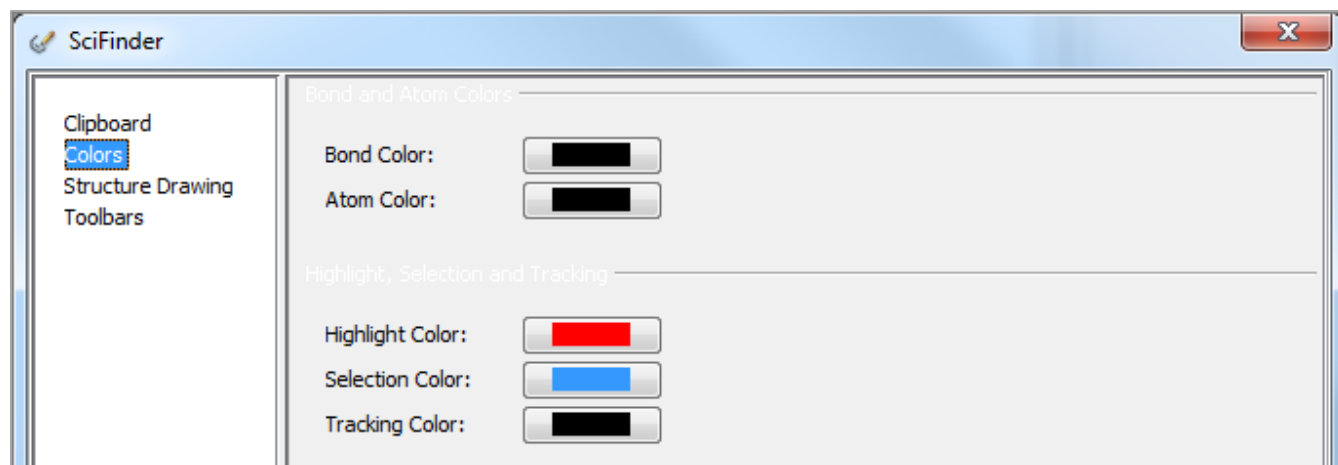
1. 在结构编辑器中，单击偏好项图标 。
2. 单击要更改的偏好项类别：剪贴板，颜色，结构图，工具栏。
3. 更改下表中描述的偏好项。
4. 单击“确定”保存偏好项。

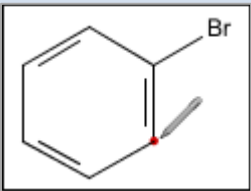
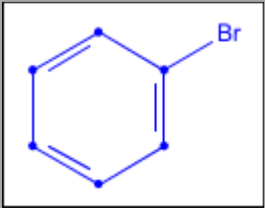
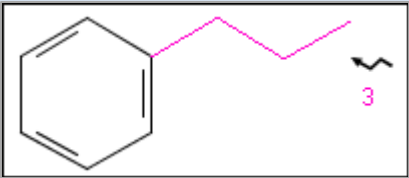
剪贴板



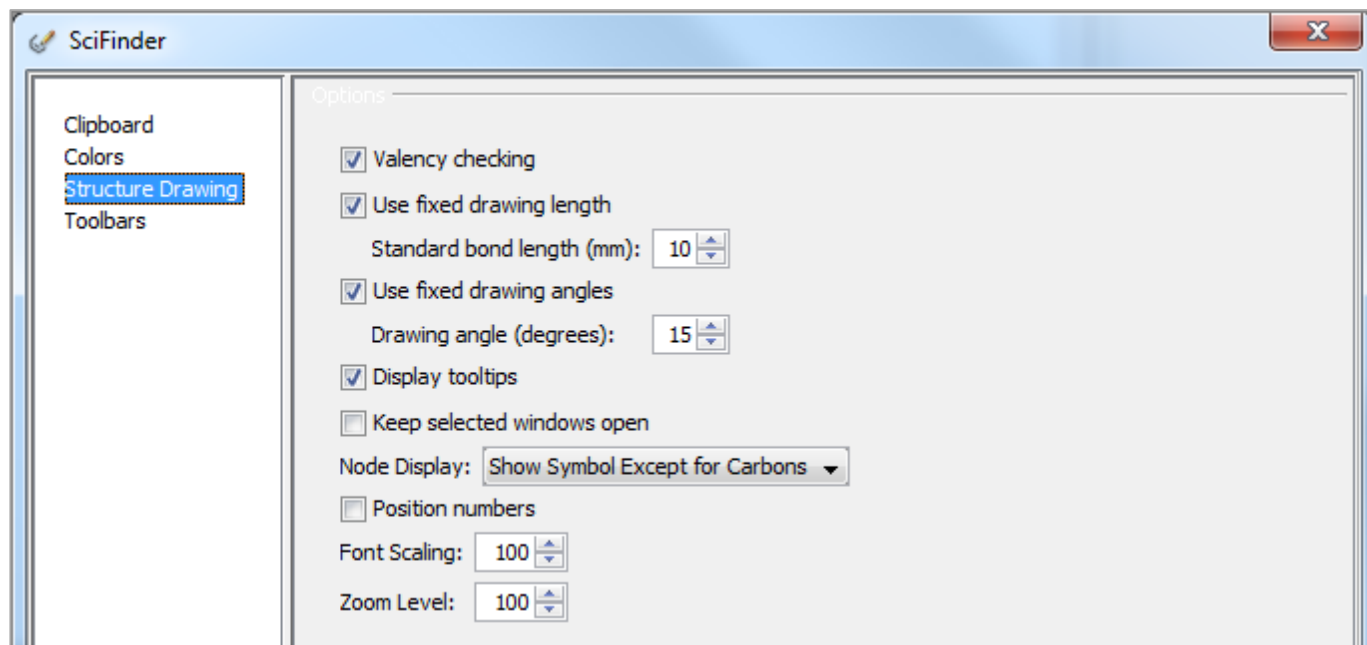
选项	描述
ISIS/Draw-MDL molfile	勾选选项以指定从结构编辑器复制到剪贴板的结构应包含 molfile 格式信息。这样的结构随后可以被粘贴到接受 molfile 格式的其他绘图程序中。

颜色

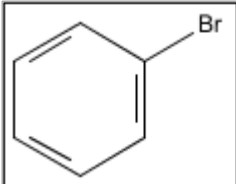
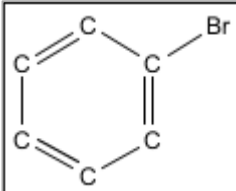
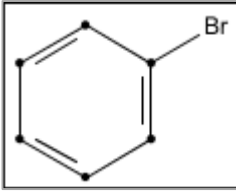


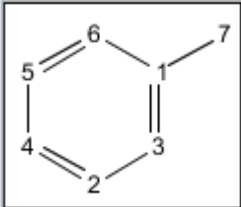
选项	描述
Bond Color	指定绘制的结构中的键的颜色。
Atom Color	指定绘制的结构中原子的颜色。
Highlight Color	<p>指定在使用光标指向原子或键时，用于突出显示原子或键的颜色。</p> <p>例如，当铅笔工具被激活，并指向需要更改的原子时，原子将突出显示为红色，即默认的突出显示颜色。</p> 
Selection Color	<p>指定用于高亮显示已选择的原子和键的颜色。</p> <p>例如，当使用 Lasso 工具选择结构时，选定的原子和键将以蓝色显示，即默认选择颜色。</p> 
Tracking Color	<p>指定用于在绘制时高亮显示正在绘制的颜色。</p> <p>例如，当使用链工具绘制键链时，链的长度在被拖动时高亮显示。如果跟踪颜色设置为粉色，它将如下所示：</p>  <p>默认情况下，跟踪颜色为黑色。</p>

结构绘制

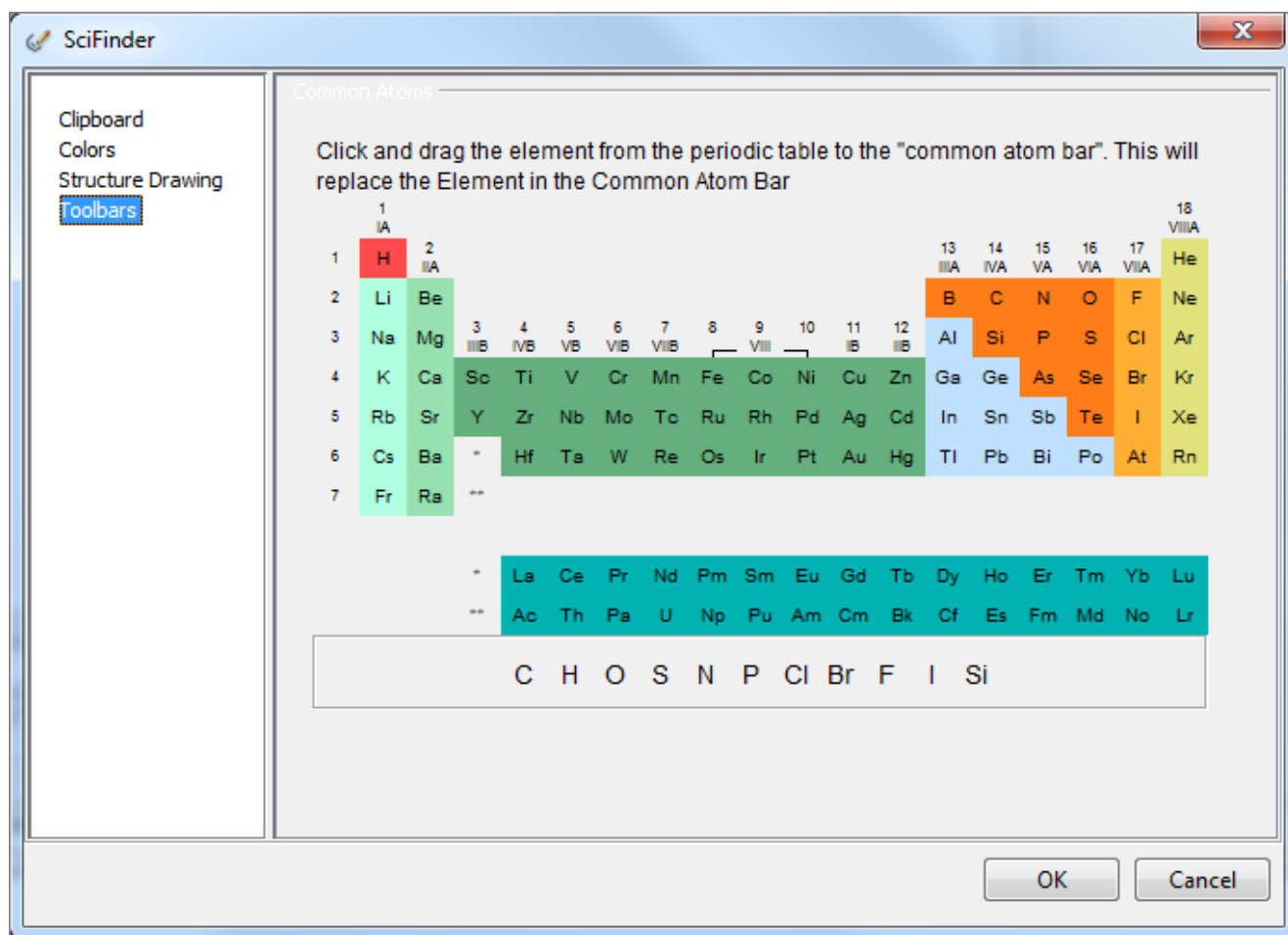


选项	描述
Valency checking	<p>如果您希望在绘制结构时如果价态超过元素的常见值 SciFinder 会给出提示，请勾选此项。您将需要回复以下消息以继续绘图。</p>  <p>如果未选中此选项，则当您单击 OK 退出编辑器时，SciFinder 将仅执行价态检查。</p>
Use fixed drawing length	<p>当选中此选项时，您绘制的键将自动对齐到设置的长度。此选项还设置绘制的环和模板的大小。</p> <p>标准键长度值为 8 - 50 mm。默认长度为 10 mm。</p>
Use fixed drawing angles	<p>当选中此选项时，您绘制的键将自动按照由绘制角度定义的增量捕捉到标准角度。</p>

	绘制键角为 1 - 90 度。默认值为 15 度。
Display tooltips	选中此选项可在指向任何绘图工具时显示说明。
Keep selected windows open	选中此选项可保持所有可以同时打开对象的窗口（例如，Atoms, Functional Groups, Shortcuts）。 取消选中该选项时，每次只能保持打开一个窗口。
Node display	<p>选择节点将如何显示在您绘制的结构中。</p> <p>Show Symbol Except for Carbons</p> <p>显示除碳原子之外的标识</p>  <p>Always Show Symbol</p> <p>一直显示标识</p>  <p>Show Carbons as Dots</p> <p>将碳原子显示为原点</p> 
Position numbers	选中此选项可将原子显示有位置编号。

	
Font Scaling	设置为 25 - 200 之间的值以调整图形中显示的文本的字体大小。
Zoom Level	设置为 25 - 400 之间的值以指定结构图的默认比例。该值可以以 25 为增量设置。

工具条



选项	描述
Common Atoms	要更改原子，可从常用原子栏或元素周期表中选择需要的原子，然后就鼠标移动到需要被替换的原子上点击即可。