



CAS SCIFINDER®

快速入门 指南

随着科学信息量不断增长，在混乱信息中找到您真正所需的数据关联可能极具挑战。无论您是需要查阅大量文献以申请资金、撰写文章、为新的项目制定实验计划或寻找合作者以推动您所在领域的研究进程，CAS SciFinder® 都能助力您更快找到相关见解。

目录

欢迎使用 CAS SciFinder ⁿ	04
检索	05
物质检索	06
物质结果	06
物质详情	08
CAS Draw	09
可添加片段结构至自定义R基团中	11
CAS Lexicon Query Builder	13
文献检索	14
文献结果集	15
文献详情	16
查看知识图谱	18
PatentPak Viewer 专利在线浏览	20
Prior Art Analysis 现有技术分析	21
反应检索	21
反应结果集	22
按反应转化类型对反应结果进行分组	23
将反应式发送至结构编辑器	24
反应详情	25
逆合成反应路线设计	26



供应商结果	30
供应商详情	31
序列检索	31
序列检索结果	32
Bioscape	34
Chemscape	35
管理已保存的检索和结果集	36
合并已保存的检索结果	37
检索历史的查看、管理和下载	38
项目 Project	41
将文献添加至项目	42
管理项目	43
CAS SciFindern 支持	43

欢迎使用 CAS SciFinder®

本快速参考指南将介绍如何开始使用 CAS SciFinder® 这一业界领先、可靠全面的科学相关性检索引擎。

使用您的用户名和密码登录。

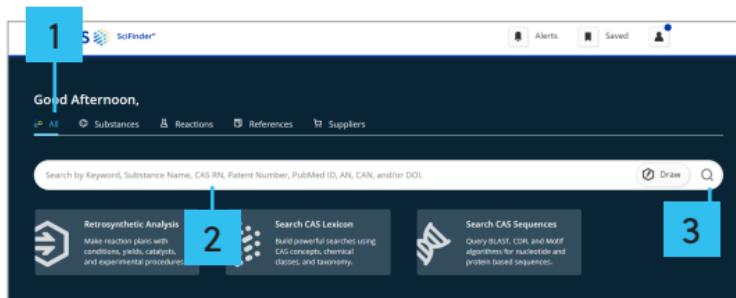
The screenshot shows the CAS SciFinder login interface. At the top is the CAS SciFinder logo. Below it is the heading "Log In to SciFinder®". A text input field is labeled "Username or Email Address" and contains the placeholder "User". A blue "Next" button is positioned below the input field. At the bottom of the page are links for "Create an account." and "Can't log in?", and a note stating "By using CAS SciFinder®, you agree to the License Agreements and Policies".

This screenshot shows the same login page as above, but with a password input field containing "*****" and a blue "Log In" button below it. There is also a checkbox labeled "Keep me signed in". The footer links and policy agreement are identical to the first screenshot.



检索

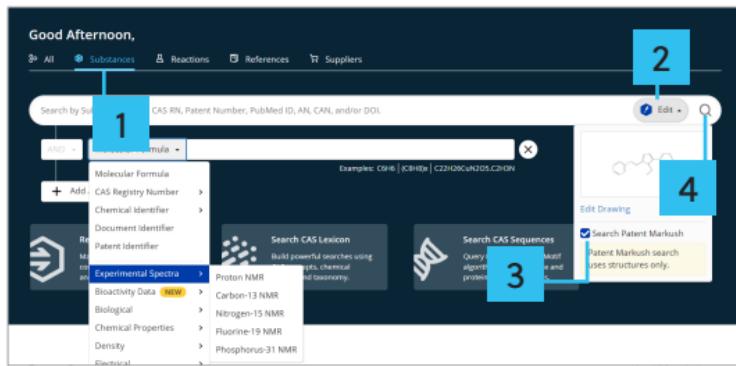
使用关键词、物质名称、CAS 登记号、专利号或结构来检索所需的结果类型。注：您可以在 All 和 References 检索框中输入 DOI。



1. 选择检索类型。
2. 输入文本或绘制/导入结构式以进行查询。
3. 单击执行检索。

使用文献和物质高级检索时，您可以按特定信息类型（例如，作者姓名或物质属性）进行检索。

专利马库什检索：如需进行专利马库什检索，请选择“Substance”，使用结构编辑器绘制/导入结构式，然后选中“Search Patent Markush”进行检索。



1. 选择 Substances。
2. 单击以绘制/导入结构式。
3. 选择 “Search Patent Markush”。
4. 单击执行检索。

物质检索

The screenshot shows the ChEMBL search interface. At the top, there is a search bar with placeholder text "Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, URL, C4N, and/or DOI". Below the search bar are several filter categories: Molecular Formula, CAS Registry Number, Chemical Identifier, Document Identifier, Patent Identifier, Experimental Spectra, Bioactivity Data, Biological, Chemical Properties, Density, Electrical, and Magnetic. A sidebar on the left lists "Recent Search" history from August 14, including "Substances", "219 PM", and "Thermal". On the right, there is a "Search CAS Sequences" section with a "Draw" button and a "View All Search History" link.

Numbered callouts point to specific features:

- 1: "Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, URL, C4N, and/or DOI"
- 2: "Draw" button
- 3: "Molecular Formula" dropdown
- 4: "CAS Lexicon" dropdown
- 5: Filter categories: AND, OR, NOT, and various experimental spectra and bioactivity data filters.

1. 输入物质名称、CAS 登记号、专利号、文献 DOI 号等。
2. 单击 “Draw”，打开结构式绘制面板，然后绘制结构式。
3. 物质高级检索词，包括分子式、属性值、谱图峰值等。
4. 输入格式示例。
5. 连接检索字段的逻辑运算符。

物质结果

The screenshot shows the ChEMBL search results page. The search query is "Substances search for drawn". The results are filtered by "Stereosechemistry: 2 Selected". The results table includes columns for "Sort: Reference", "View", and "Full". Each result row contains a "Key Physical Properties" section with details like Molecular Weight, Melting Point, Boiling Point, Density, and pKa. There are also sections for "Experimental Properties | Spectra" and "Condition". The sidebar on the left provides navigation and filtering options, including "Structure Match", "Chemspace Analysis", "Filter Behavior", and "Filter Content Report".

Numbered callouts point to specific features:

- 1: "Substances search for drawn"
- 2: "References", "Reactions", and "Full" buttons
- 3: "Stereosechemistry: 2 Selected" filter
- 4: "Sort: Reference", "View", and "Full" buttons
- 5: "Clear All Filters" button
- 6: "Save and Alert" button
- 7: Structure diagram of compound 31456-25-4
- 8: Key Physical Properties for compound 31456-25-4
- 9: Condition for compound 31456-25-4
- 10: Filter behavior sidebar
- 11: Structure diagram of compound 110351-92-3
- 12: Key Physical Properties for compound 110351-92-3
- 13: Filter Content Report sidebar
- 14: Structure diagram of compound 91926-09-9
- 15: Key Physical Properties for compound 91926-09-9
- 16: Structure diagram of compound 1416-31
- 17: Key Physical Properties for compound 1416-31



1. 按结构匹配度筛选。
2. 获取物质结果集的文献、反应和供应商信息。
3. 单击 X 移除一个筛选项或清除所有筛选项。
单击以从下拉菜单中的多个筛选项中选择。
4. 下载结果。
5. 通过电子邮件发送结果。
6. 保存结果/检索式, 创建提醒。
7. 保留或删除选定的结果。
8. 按相关性、CAS 登记号、分子式或分子量、文献或供应商数量对结果进行排序。
9. 更改结果显示。
10. 单击对结构检索结果进行专利可视化分析。
11. 获取某物质关联的文献、反应和供应商信息。
12. 单击属性名称, 查看有关物质详情的
更多信息。
13. 选择筛选项以缩小结果范围。
14. 单击查看物质信息。
15. 单击选择结果。
16. 单击打开物质详情。
17. 单击以下载所有或应用筛选项的内容
(筛选项目和结果数值) 的 .xlsx 文件。

物质详情

1. CAS Registry Number: 7689-03-4

2. Download icon

3. Save icon

4. Email icon

5. Chemical structure

6. Key Physical Properties table

7. Expand All / Collapse All buttons

8. Category list

C₂₀H₁₆N₂O₄
1H-Pyran[3,4;6,7]indolizino[1,2-b]quinoxine-3,14(4H,12H)-dione, 4-ethyl-4-hydroxy-, (4S)- (9CI, ACI)

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	348.35	-
Melting Point (Experimental)	255-277 °C (decomp)	-
Boiling Point (Predicted)	757.0±60.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.51±0.1 g/cm ³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
pKa (Predicted)	11.24±0.20	Most Acidic Temp: 25 °C

Experimental Properties | Spectra

Other Names and Identifiers

Experimental Properties

Experimental Spectra

Structure Activity Relationships

Absorption, Distribution, Metabolism, and Excretion Data

Toxicity

Predicted Properties

Predicted Spectra

Bioactivity Indicators

Target Indicators

Regulatory Information

GHS Hazard Statements

Additional Details

CAS LIFE SCIENCES

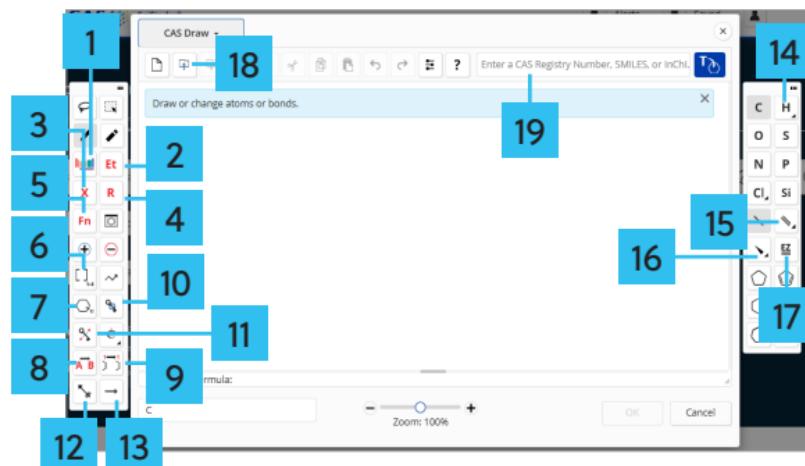
CAS LIFE SCIENCES

CAS LIFE SCIENCES

1. 检索物质相关数据。
2. 下载详情。
3. 通过电子邮件发送详情。
4. 保存详情。
5. 点击结构，在弹出的物质信息窗口中可以查看详情、开始逆合成路线设计、编辑或下载结构文件。
6. 单击属性名称或类型，查看下方展开的数据。
7. 展开或折叠所有类别。
8. 单击类别，展开并查看其他物质信息。

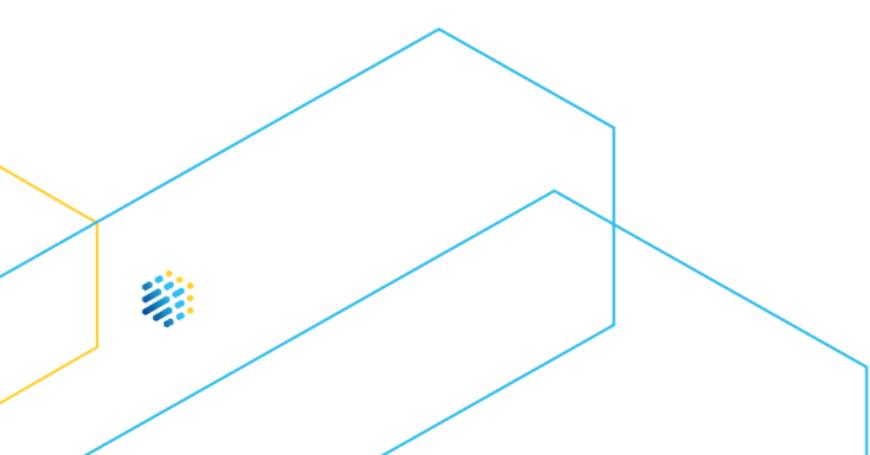


CAS Draw

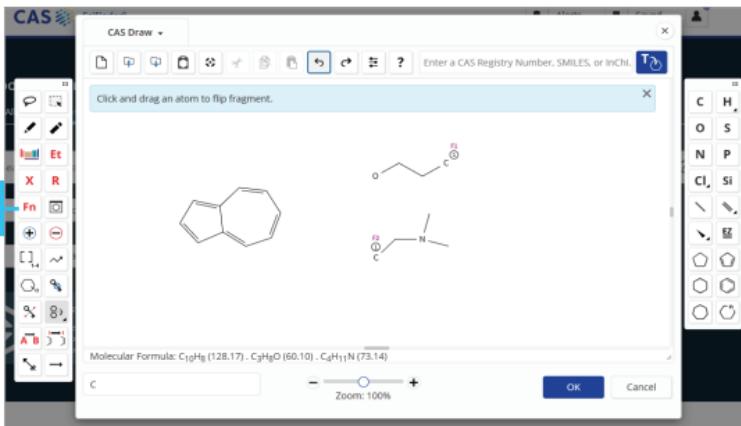


1. 元素周期表。
2. 常见官能团。
3. 可变基团定义工具。
4. R 基团定义工具:单击 Atoms 打开元素周期表选择目标原子。点击 Variables 选择可变基团,单击 Shortcuts 选择常用官能团。当某位点的取代为两个或更多(最多 20 个)原子、或/和可变基团或/和常见官能团中任意一个即可时,则可使用R工具定义。
5. Fn 工具:可用于标记片段结构,并将标记的片段结构添加至自定义 R 基团中。
6. 重复结构单元工具:可用于绘制在一定范围内重复的原子结构或片段结构,重复范围可以是 0-20 次。
7. 可变位置定义工具:可用于绘制环上取代基位置不确定的结构式。
8. 反应角色定义工具:定义物质在反应中的物质角色。
9. 反应原子标记工具:标记反应前后原料和产物中的同一个原子。
10. 环锁定工具:锁定的环无法成为更大环系的组成部分;锁定的链键无法成为环上的键。
11. 原子锁定工具:被锁定的原子或官能团不发生非氢取代。
12. 化学键标记:标记在反应中发生变化的化学键,包括断裂、生成和键级变化。

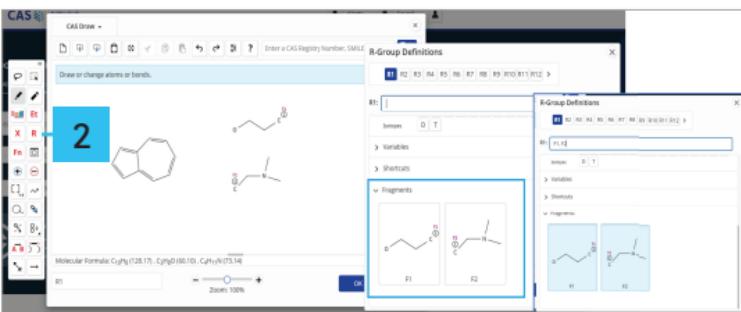
13. 反应箭头：箭头前面的物质默认为反应物，箭头后面的物质默认为产物。
14. 单击可绘制氢或其他同位素标记 D 或 T。
15. 单击可绘制双键、三键或不确定键。
16. 手性键：该键可用于精确检索自旋异构体。
17. 顺反异构键：该键可用于精确检索含双键结构的顺反异构体 (ZE 型)。
18. 导入 .cxf 文件或 .mol 文件。
19. 输入物质的 CAS 登记号、smiles 字符串或 InChI，然后单击回车键以将其转换为相应物质结构。



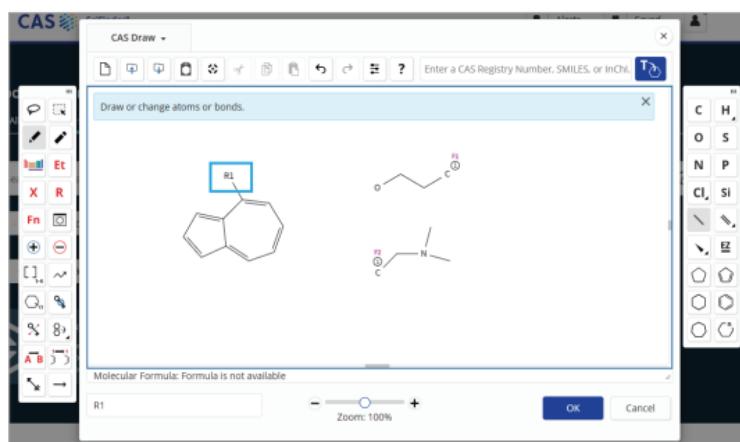
可添加片段结构至 自定义 R 基团中



1. 在 CAS Draw 结构式绘图面板中, 根据需要绘制一个或多个片段结构。单击 Fn 工具之后, 单击片段结构, 即完成片段结构标记。



2. 点击 R 基团工具, 在打开的窗口中, 可以看到新增的Fragments项及已标记的 F1 和 F2 片段结构。点击 R 基团定义设置窗口中的 F1 和 F2 片段, 即可将片段结构添加进 R1 基团。



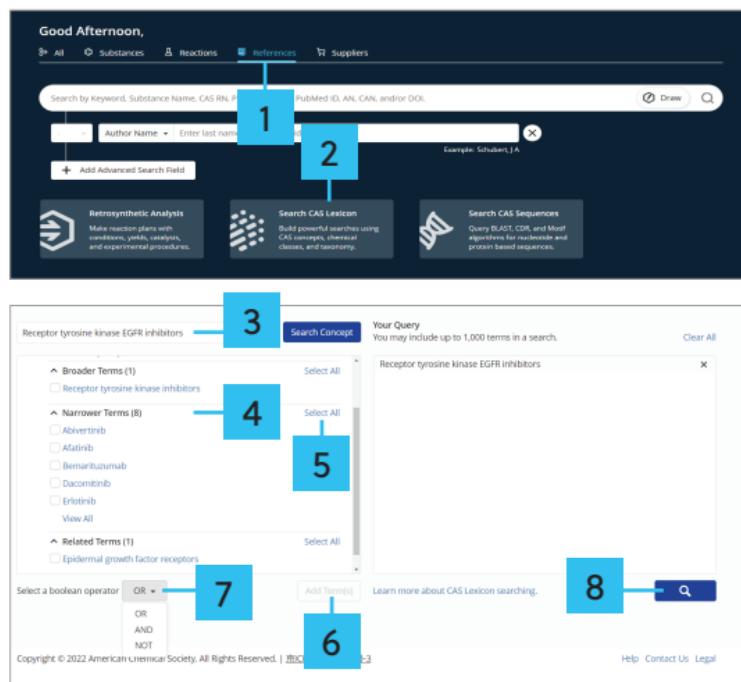
3. 根据需要, 将 R1 基团与目标结构相连。
关闭 R 基团定义设置窗口, 点击 OK 即可检索
绘制的结构。

4. 查看检索结果。



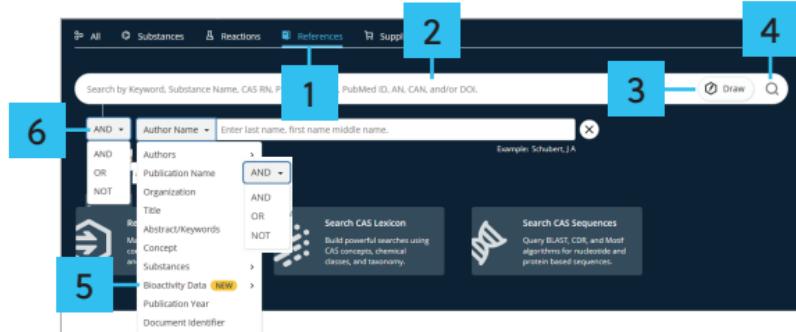
CAS Lexicon Query Builder

CAS Lexicon Query Builder, 让用户可以在 CAS 整个词库层级中浏览 CAS 科学家标引的概念词和物质，并构建检索文献的检索式(最多可使用 1000 词)。



1. 在 CAS SciFinderⁿ 主界面, 选择左侧的 References。
2. 单击页面中间的 Launch CAS Lexicon, 即可打开 CAS 词库。
3. 输入检索词, 单击 Search Concept; CAS SciFinderⁿ 将提供多个与目标词相似的词以供选择, 然后选择一个概念词即可展开词库级别。
4. 选择概念词的上位词 (Broader Terms)、下位词 (Narrower Terms) 或相关词 (Related Terms)。
5. 单击 Select All 以选中全部。
6. 单击 Add Terms 将所选词添加到右侧检索式中。
7. 在页面左下角, 在 Select a boolean operator 中选择布尔逻辑运算符 (OR、AND、NOT), 可联合多个词进行检索。
8. 单击放大镜开始检索。

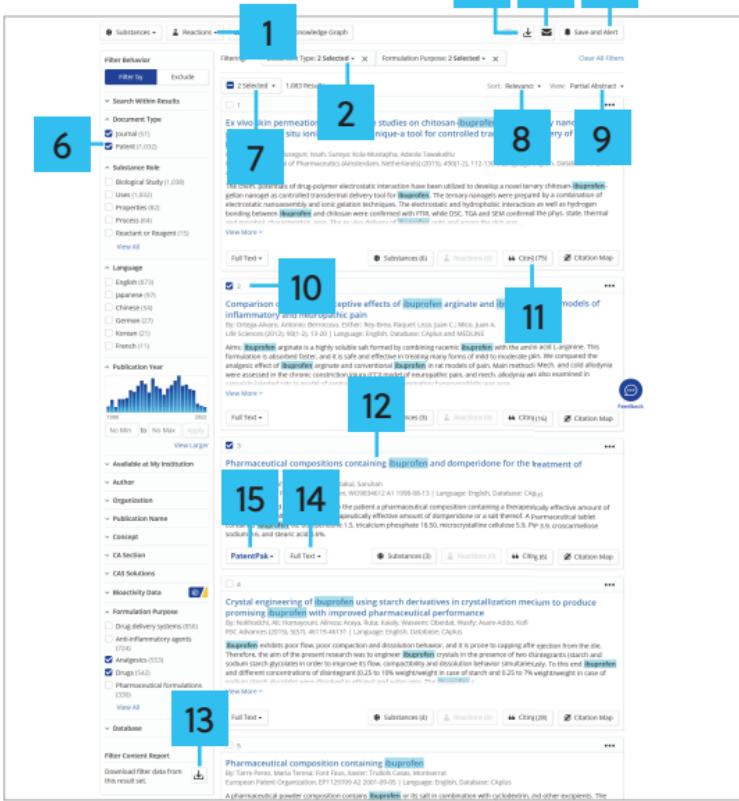
文献检索



1. 在页面左侧选择 References。
2. 输入关键词、物质名称、CAS 登记号、专利号、DOI 等。
3. 单击 Draw, 打开结构编辑面板以绘制结构图。
4. 单击检索。
5. 高级检索项中的多个检索字段。
6. 可以使用逻辑运算符 and、or、not 连接多个不同字段，进行文献检索。



文献结果



1. 检索相关数据结果。
 2. 单击 X 移除一个筛选项或清除所有筛选项。从下拉菜单中的多个筛选项中进行选择。
 3. 下载结果。
 4. 通过电子邮件发送结果。
 5. 保存结果/检索，创建提醒。
 6. 选择筛选项以缩小结果范围。
 7. 保留或删除选定的结果。
 8. 按相关性、引用时间、文献入库号或出版日期对结果进行排序。
 9. 更改结果显示。
 10. 单击选择结果。
 11. 检索特定结果的相关数据。
 12. 单击打开文献详情。
 13. 单击以下载所有或应用筛选项的内容 (筛选项和结果数) 的 .xlsx 文件。
 14. 单击以访问全文。
 15. 单击 PatenPak 查看专利同族及获取专利全文。

文献详情

1 PATENT
Pub. EP
2001-03-01
Application Number
EP2001-500053
Application Date
2001-03-01
Kind Code
A2
Assignee
Laboratorio de Aplicaciones Farmacodinámicas, S.A., Spain
Source
European Patent Organization
Coden: EP2001W
Database Information
AN: 2001505466
CAN: 1351005693
CAplus
Language
English

2 Citation Map
3 Save
4 X
5 CAS For users, I
6 Comprehensive formulations database and workflow solution, now available for Ciba FormulatTM in this document. Learn more about FormulatTM.
By: Tarre Perez, Agent Faus, Xavier; Trullols Cases, Montserrat.

A pharmaceutical powder composition contains **ibuprofen** or its salt in combination with cyclodextrin, and other excipients. The composition involves sieving step, the **ibuprofen** salt and the cyclodextrin mixing these components, submitting the mixture to an ultra-rapid mixing, and sieving and mixing the resulting mixture along with the excipients. Thus, a composition contained **ibuprofen** lysinate and β -cyclodextrin 13:55, sodium saccharin 0.10-0.20, sodium cyclamate 0.10-0.30, lemon oil 0.30-0.60, sodium citrate 0.50-1.50 and sucrose 35-70%.

Keywords: **ibuprofen** pharmaceutical cyclodextrin
7 PatentPak Viewer | Get Prior Art Analysis | Full Text →
Similar Patents 8 Options for 9
[JPN-112852295 A 1991-10-19] Language: Japanese, Database: Caplus
Taste-masked powder for suspension compositions of methylprednisolone
World Intellectual Property Organization WO201110173A2 2011-08-25 | Language: English, Database: Caplus
Composition of water-proof permissible explosive without using TNT
China CN1102287 A 1995-10-18 | Language: Chinese, Database: Caplus

8 Patent Family
9 10
11 Priority Application
12 IPC Data
13 Substances
14 Formulations
15 Cited Documents

Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
EP1129709	English	A2	PDF PDF+ Viewer	2001-09-05	EP2001-500053	2001-03-01
ES2171110	Undetermined	A1		2002-08-16	ES2000-522	2000-03-03
ES2171110	Undetermined	B1		2003-06-16	ES2000-522	2000-03-03
CZ301553	Czech	B6		2010-04-14	CZ2001-714	2001-02-26
EP1129709	English	A3		2001-11-14	EP2001-500053	2001-03-01
EP1129709	English	B1		2005-06-29	EP2001-500053	2001-03-01
AT298567	Undetermined	T		2005-07-15	AT2001-500053	2001-03-01
PT1129709	Portuguese	E		2005-10-31	PT2001-500053	2001-03-01
SK858338	English	B6	PDF	2006-11-03	SK2001-293	2001-03-01

16 Expand All | Collapse All

17 Feedback

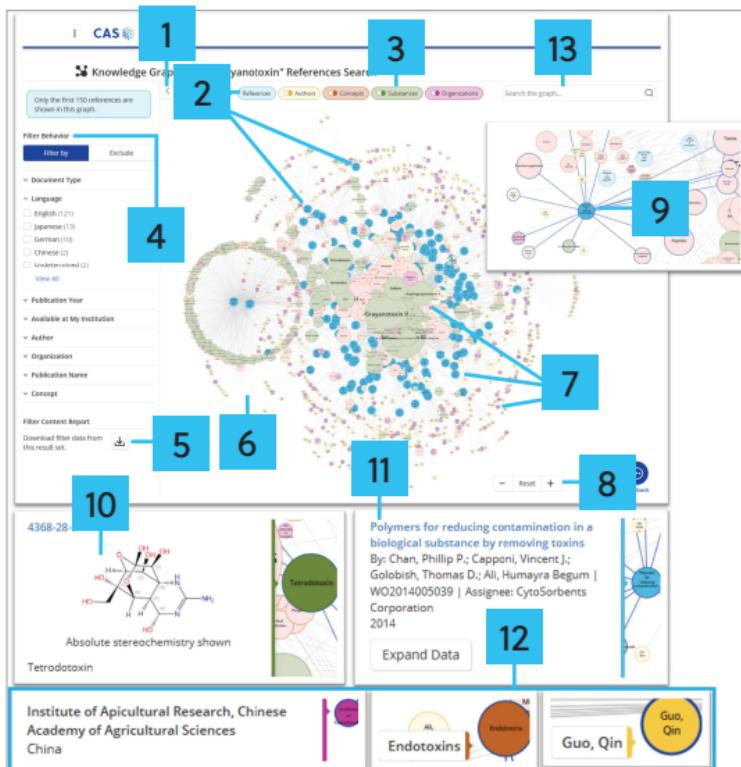
18 19
20 21
22 23
24 25
26 27
28 29
30 31
32 33
34 35
36 37
38 39
40 41
42 43
44 45
46 47
48 49
50 51
52 53
54 55
56 57
58 59
60 61
62 63
64 65
66 67
68 69
70 71
72 73
74 75
76 77
78 79
80 81
82 83
84 85
86 87
88 89
90 91
92 93
94 95
96 97
98 99
99 100
100 101
101 102
102 103
103 104
104 105
105 106
106 107
107 108
108 109
109 110
110 111
111 112
112 113
113 114
114 115
115 116
116 117
117 118
118 119
119 120
120 121
121 122
122 123
123 124
124 125
125 126
126 127
127 128
128 129
129 130
130 131
131 132
132 133
133 134
134 135
135 136
136 137
137 138
138 139
139 140
140 141
141 142
142 143
143 144
144 145
145 146
146 147
147 148
148 149
149 150
150 151
151 152
152 153
153 154
154 155
155 156
156 157
157 158
158 159
159 160
160 161
161 162
162 163
163 164
164 165
165 166
166 167
167 168
168 169
169 170
170 171
171 172
172 173
173 174
174 175
175 176
176 177
177 178
178 179
179 180
180 181
181 182
182 183
183 184
184 185
185 186
186 187
187 188
188 189
189 190
190 191
191 192
192 193
193 194
194 195
195 196
196 197
197 198
198 199
199 200
200 201
201 202
202 203
203 204
204 205
205 206
206 207
207 208
208 209
209 210
210 211
211 212
212 213
213 214
214 215
215 216
216 217
217 218
218 219
219 220
220 221
221 222
222 223
223 224
224 225
225 226
226 227
227 228
228 229
229 230
230 231
231 232
232 233
233 234
234 235
235 236
236 237
237 238
238 239
239 240
240 241
241 242
242 243
243 244
244 245
245 246
246 247
247 248
248 249
249 250
250 251
251 252
252 253
253 254
254 255
255 256
256 257
257 258
258 259
259 260
260 261
261 262
262 263
263 264
264 265
265 266
266 267
267 268
268 269
269 270
270 271
271 272
272 273
273 274
274 275
275 276
276 277
277 278
278 279
279 280
280 281
281 282
282 283
283 284
284 285
285 286
286 287
287 288
288 289
289 290
290 291
291 292
292 293
293 294
294 295
295 296
296 297
297 298
298 299
299 300
300 301
301 302
302 303
303 304
304 305
305 306
306 307
307 308
308 309
309 310
310 311
311 312
312 313
313 314
314 315
315 316
316 317
317 318
318 319
319 320
320 321
321 322
322 323
323 324
324 325
325 326
326 327
327 328
328 329
329 330
330 331
331 332
332 333
333 334
334 335
335 336
336 337
337 338
338 339
339 340
340 341
341 342
342 343
343 344
344 345
345 346
346 347
347 348
348 349
349 350
350 351
351 352
352 353
353 354
354 355
355 356
356 357
357 358
358 359
359 360
360 361
361 362
362 363
363 364
364 365
365 366
366 367
367 368
368 369
369 370
370 371
371 372
372 373
373 374
374 375
375 376
376 377
377 378
378 379
379 380
380 381
381 382
382 383
383 384
384 385
385 386
386 387
387 388
388 389
389 390
390 391
391 392
392 393
393 394
394 395
395 396
396 397
397 398
398 399
399 400
400 401
401 402
402 403
403 404
404 405
405 406
406 407
407 408
408 409
409 410
410 411
411 412
412 413
413 414
414 415
415 416
416 417
417 418
418 419
419 420
420 421
421 422
422 423
423 424
424 425
425 426
426 427
427 428
428 429
429 430
430 431
431 432
432 433
433 434
434 435
435 436
436 437
437 438
438 439
439 440
440 441
441 442
442 443
443 444
444 445
445 446
446 447
447 448
448 449
449 450
450 451
451 452
452 453
453 454
454 455
455 456
456 457
457 458
458 459
459 460
460 461
461 462
462 463
463 464
464 465
465 466
466 467
467 468
468 469
469 470
470 471
471 472
472 473
473 474
474 475
475 476
476 477
477 478
478 479
479 480
480 481
481 482
482 483
483 484
484 485
485 486
486 487
487 488
488 489
489 490
490 491
491 492
492 493
493 494
494 495
495 496
496 497
497 498
498 499
499 500
500 501
501 502
502 503
503 504
504 505
505 506
506 507
507 508
508 509
509 510
510 511
511 512
512 513
513 514
514 515
515 516
516 517
517 518
518 519
519 520
520 521
521 522
522 523
523 524
524 525
525 526
526 527
527 528
528 529
529 530
530 531
531 532
532 533
533 534
534 535
535 536
536 537
537 538
538 539
539 540
540 541
541 542
542 543
543 544
544 545
545 546
546 547
547 548
548 549
549 550
550 551
551 552
552 553
553 554
554 555
555 556
556 557
557 558
558 559
559 560
560 561
561 562
562 563
563 564
564 565
565 566
566 567
567 568
568 569
569 570
570 571
571 572
572 573
573 574
574 575
575 576
576 577
577 578
578 579
579 580
580 581
581 582
582 583
583 584
584 585
585 586
586 587
587 588
588 589
589 590
590 591
591 592
592 593
593 594
594 595
595 596
596 597
597 598
598 599
599 600
600 601
601 602
602 603
603 604
604 605
605 606
606 607
607 608
608 609
609 610
610 611
611 612
612 613
613 614
614 615
615 616
616 617
617 618
618 619
619 620
620 621
621 622
622 623
623 624
624 625
625 626
626 627
627 628
628 629
629 630
630 631
631 632
632 633
633 634
634 635
635 636
636 637
637 638
638 639
639 640
640 641
641 642
642 643
643 644
644 645
645 646
646 647
647 648
648 649
649 650
650 651
651 652
652 653
653 654
654 655
655 656
656 657
657 658
658 659
659 660
660 661
661 662
662 663
663 664
664 665
665 666
666 667
667 668
668 669
669 670
670 671
671 672
672 673
673 674
674 675
675 676
676 677
677 678
678 679
679 680
680 681
681 682
682 683
683 684
684 685
685 686
686 687
687 688
688 689
689 690
690 691
691 692
692 693
693 694
694 695
695 696
696 697
697 698
698 699
699 700
700 701
701 702
702 703
703 704
704 705
705 706
706 707
707 708
708 709
709 710
710 711
711 712
712 713
713 714
714 715
715 716
716 717
717 718
718 719
719 720
720 721
721 722
722 723
723 724
724 725
725 726
726 727
727 728
728 729
729 730
730 731
731 732
732 733
733 734
734 735
735 736
736 737
737 738
738 739
739 740
740 741
741 742
742 743
743 744
744 745
745 746
746 747
747 748
748 749
749 750
750 751
751 752
752 753
753 754
754 755
755 756
756 757
757 758
758 759
759 760
760 761
761 762
762 763
763 764
764 765
765 766
766 767
767 768
768 769
769 770
770 771
771 772
772 773
773 774
774 775
775 776
776 777
777 778
778 779
779 780
780 781
781 782
782 783
783 784
784 785
785 786
786 787
787 788
788 789
789 790
790 791
791 792
792 793
793 794
794 795
795 796
796 797
797 798
798 799
799 800
800 801
801 802
802 803
803 804
804 805
805 806
806 807
807 808
808 809
809 810
810 811
811 812
812 813
813 814
814 815
815 816
816 817
817 818
818 819
819 820
820 821
821 822
822 823
823 824
824 825
825 826
826 827
827 828
828 829
829 830
830 831
831 832
832</b

1. 获取该文献报道的物质。
2. 下载详情。
3. 保存详情。
4. 通过电子邮件发送详情。
5. 设置引用提醒。
6. 查看文献引文地图 (包括引用和被引文献)。
7. 单击以访问全文。
8. 通过 PatentPak Viewer 获取专利全文及定位专利披露的物质。
9. 点击获取现有技术分析。
10. 单击 PatentPak 选项以查看专利源文档。
11. 查看基本专利及同族专利的IPC分类号。
12. 查看描述文献的重要技术术语。
13. 文献中报道的重要物质及 CAS 为该物质添加的标引信息。
14. 查看文献披露的制剂/配方信息。
15. 查看文献的参考文献。

查看知识谱图

1 References search for "Grayanotoxin" 1
Substances Reactions Citing Knowledge Graph

- 单击文献结果集中的 Knowledge Graph，即可获得知识图谱。如结果集中的文献超过 150 个文档，知识图谱中将仅包含基于当前排序的前 150 篇。



- 单击以展开或关闭选项栏。展开即显 Knowledge Graph Key 和聚类选项。
- 知识图谱键以不同的颜色来标识节点类型。若将鼠标悬停在Knowledge Graph Key 某一项上, 当前图谱中会突出显示该类型的所有节点; 图示为突出显示References 相关的节点。
- 您可以选择打开或关闭显示内容的类型, References 除外。



4. 可利用聚类选项缩小文献范围, 注意仅限于知识图谱中包含的文献。
5. 聚类选项内容可下载为 .xlsx 格式文件。
6. 单击并拖动图表中的空白区域, 可移动知识图谱。
7. 文献节点的大小一致; 其他节点的相对大小取决于其连线数量: 连线数量越多, 节点越大。如需获得更好的可视化效果, 可单击并拖动节点至其它位置。
8. 使用缩放控件或鼠标滚轮缩放知识图谱, 以移动知识图谱。
9. 将鼠标悬停在某一节点上, 会突出显示该节点及其所连接的节点和连接线。
10. 单击物质节点, 即可显示物质登记号 (RN)、物质名称、图像及物质详情的链接(点击蓝色 CAS 登记号即可在新选项卡中打开链接)。
11. 单击参考文献节点, 即可显示文献标题、作者和来源信息。单击文献标题可查看文献详情。
12. 单击节点将弹出式显示机构名称、作者姓名和重要研究点Concept。
13. 可输入关键词对图谱中展示的信息进一步检索。

PatentPak Viewer 专利在线浏览

The screenshot shows a patent document page with several numbered callouts:

- 3**: Points to a chemical structure of a substituted pyrazine derivative.
- 4**: Points to a chemical structure of a substituted benzimidazole derivative.
- 5**: Points to a chemical structure of a substituted benzimidazole derivative.
- 1**: Points to a chemical structure of a substituted pyridine derivative.
- 2**: Points to a chemical structure of a substituted imidazolopyrazine derivative.

Text on the page includes:

Key Substances in Patent
CAS RN: 13225059-30-6
Analyst Markup Locations (1)
Page 92
CAS RN: 13225059-30-6
Analyst Markup Locations (1)
Page 93

PAGE: 64 ZOOM: DOWNLOAD: PDF RCF

[00215] 1.04 (1H, m), 1.06 (1H, m), 7.38-7.59 (2H, m), 7.90 (1H, m), 12.37 (1H, m) ppm; MS (ES⁺) 366
wing compounds were all prepared using Method A.
and I-2 (1-(5-amino-6-(6-methyl-1H-benzod[d]imidazol-2-yl)pyrazin-2-
yl)peridin-4-yl)methanol
[00216] ¹H NMR (400.0 MHz, DMSO) δ 1.22 (2H, m), 1.59 (1H, m), 1.79 (2H, m), 2.45 (3H,
s), 2.72 (2H, m), 3.31 (1H, m), 4.30 (2H, d), 4.52 (1H, s), 7.04 (1H, m), 7.18 (2H, s), 7.37-7.57
(3H, m), 7.98 (1H, s), 12.45 (1H, s) ppm; MS (ES⁺) 339
[00217] **Compound I-3** 3-(6-methyl-1H-benzod[d]imidazol-2-yl)-5-morpholinopyrazin-2-
amine
[00218] ¹H NMR (400.0 MHz, DMSO) δ 2.45 (3H, s), 3.45 (4H, m), 3.79 (4H, m), 7.08 (1H,
s), 7.27-7.58 (4H, m), 7.98 (1H, s), 12.50 (1H, s) ppm; MS (ES⁺) 311
[00219] **Compound I-4** (S)-N-(1-(5-amino-6-(6-methyl-1H-benzod[d]imidazol-2-yl)pyrazin-2-
yl)pyrrolidin-3-yl)ethanamide

1. 下载专利全文 PDF 文件。
2. 下载包含 CAS 科学家标引信息
(包括物质位置信息、结构、名称和 CAS 登记号信息) 的专利 PDF 全文文件。
3. CAS 科学家标引出的专利中的重要物质。
4. 正文和左侧浏览器中的物质通过定位符进行双向互动；点击任意位置的物质定位符，其颜色将从蓝色变为紫色。
5. 点击左侧浏览器中的物质结构，弹出物质信息详情。



Prior Art Analysis 现有技术分析

在专利文献详情中，可以选择进行现有技术分析，并在检索历史中查看结果。

- 以单一专利文件作为分析起点。
- 基于专利中由 CAS 科学家标引的 CAS Concept、物质及专利 IPC 分类及全文进行分析
- 基于人工智能的相关性自动生成分析结果。所有结果都早于目标专利的申请日。分析结果包括专利和非专利文献

The screenshot shows the PatentPak Viewer interface. At the top, there are tabs for 'PatentPak Viewer', 'Get Prior Art Analysis', and 'Full Text'. Below this is a 'Patent Family' section with columns for 'Patent', 'Language', 'Kind', 'PatentPak Options', 'Publication Date', 'Application Number', and 'Application Date'. A specific entry is shown: WO2010054398, English, A1, PDF | PDF+ | Viewer, 2010-05-14, WO2009-U563922, 2009-11-10. A blue box labeled '1' points to the 'Get Prior Art Analysis' button. Below this is a search history section for August 5, 2022, showing a search for 'Preparation of pyrazine compounds as inhibitors of ATR kinase for use in treating disease and as biological tools'. A blue box labeled '2' points to the 'View Results' button.

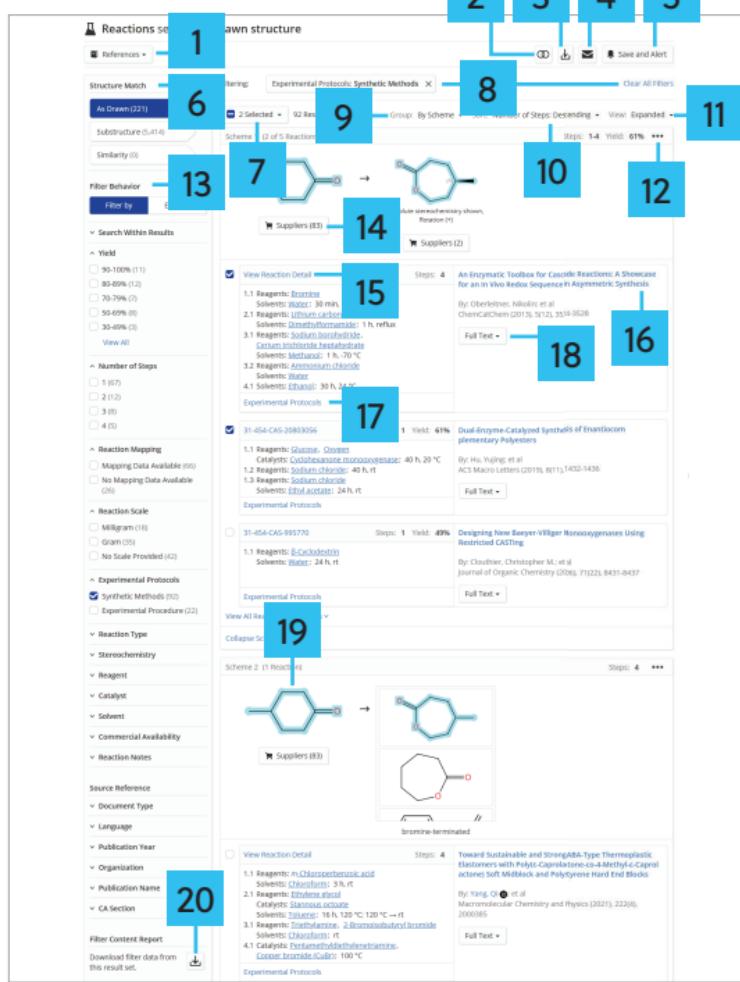
1. 单击 Get Prior Art Analysis, 进行指定专利的现有技术分析。
2. 在 CAS SciFinderⁿ 主界面的最近检索历史(Recent Search History)中, 单击 View Results 以查看分析结果。

反应检索

The screenshot shows the CAS SciFinder Reactions search interface. At the top, there are tabs for 'All', 'Substances', 'Reactions', 'References', and 'Suppliers'. Below this is a search bar labeled 'Search by CAS Reaction Number' with a blue box labeled '1'. To the right is a search bar for 'Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI' with a blue box labeled '2'. Further right is a search bar for 'Edit Drawing' with a blue box labeled '3'. At the far right is a magnifying glass icon with a blue box labeled '4'.

1. 选择 Reactions。
2. 可输入 CAS 反应登记号、物质名称、CAS 登记号、专利号、文献 DOI 号等进行反应检索。
3. 单击结构绘制面板, 输入结构式或反应式。
4. 单击放大镜图标执行检索。

反应结果集



1. 检索相关文献。
 2. 合并已保存的检索结果。
 3. 下载结果。
 4. 通过电子邮件发送结果。
 5. 保存检索式或检索结果, 创建提醒。
 6. 按结构匹配度筛选。
 7. 保留或删除选定结果。
 8. 单击 X 移除单个筛选项, 单击 Clear All Filters 清除所有筛选项。
 9. 更改反应结果的分组方式: 可选择按合成方法、来源文献或反应转化类型分组。
 10. 更改反应结果的排序方式。
 11. 更改结果的显示方式。

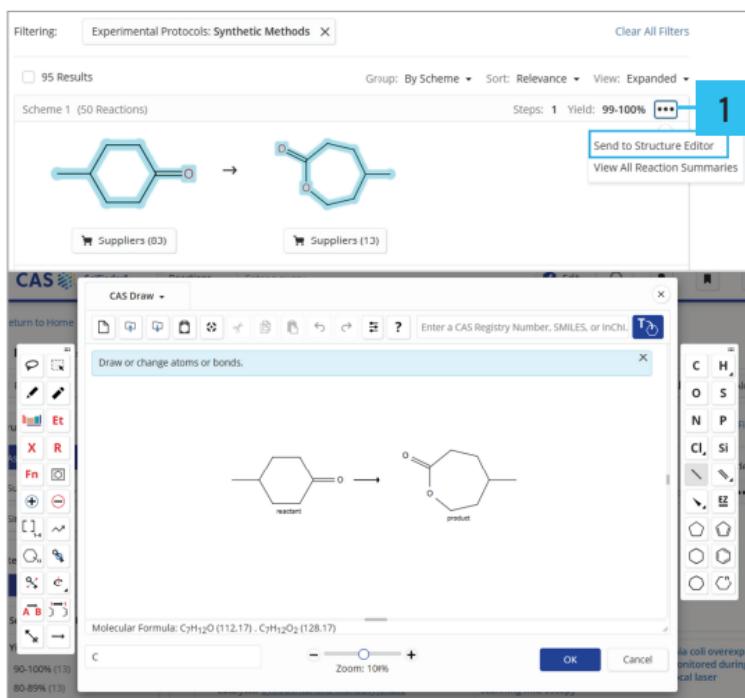


12. 将反应式发送至结构编辑器。
13. 选择筛选选项以缩小结果范围。
14. 查看物质供应商。
15. 查看反应详情。
16. 单击以查看该反应的文献详情页面。
17. 查看反应实验步骤。
18. 查看文献的访问链接。
19. 单击物质结构图片，展示物质信息窗口，可以获得物质详情、生成逆合成路线、编辑或下载结构文件。
20. 下载所有或应用筛选项的内容(筛选项和结果数量)为.xlsx文件。

按反应转化类型对反应结果进行分组

1. 在 Group By 的下拉菜单中选择 By Transformation, 即可根据反应转化类型来对反应结果集进行分组。
2. 根据反应转化类型分组后, 可以点击感兴趣的反应类型下方的超链接, 查看该类型反应的结果。

将反应式发送至结构编辑器



1. 点击反应右上角的省略号, 单击 Send to Structure Editor, 即可将反应式发送至结构编辑器以进一步编辑、检索。

反应详情

Multi-Step Reaction for Scheme 2, Reaction 1

1 2 3

Suppliers (83) Suppliers (13)

71% Suppliers (92)

4

5

6

7

Reaction Overview

Steps: 4

JOURNAL

Toward Sustainable and Strong ABA-Type Thermosets Enabled by Poly(*m*-Caprolactone-co-*4*-Methyl-*n*-Caprolactone) Soft Midblock and Poly(ether Ester) Hard Blocks

8 et al. *Macromol Chem Phys.* (2013), 222(4), 200-210

View Source Full Text

Company/Organization

Key Laboratory of Rubber-Plastics,
Ministry of Education/Shandong
Province Key Laboratory of
Rubber plastic, School of Polymer
Science and Engineering,
Qingdao University of Science and
Technology
Qingdao 266042
China

Reaction Number: 31-454-CAS-23167633

Experimental Protocols

Synthetic Methods

Products: *4*-Methylcaprolactone, Yield: 71%

Reactants: *4*-Methylcyclohexanone

Reagents: *m*-Chloroperbenzoic acid

Solvents: Chloroform

Procedure

- Add a solution of 4-methylcyclohexanone (20.0 g, 156.0 mmol) in CHCl₃ (150 mL) to a stirred solution of 90% MCPBA (32.3 g, 187.2 mmol) in CHCl₃ (75 mL).
- After 3 h, filter the solution through celite, wash twice with saturated NaHCO₃ and once with brine, dry with MgSO₄, and concentrate in vacuo.
- Isolate the monomer by fractional vacuum distillation from calcium hydride and store under argon atmosphere.

Transformation: Baeyer-Villiger Rearrangement

Scale: gram

Characterization Data

¹H NMR Spectrum: (CDCl₃, 400 MHz) δ 4.21 (m, 2H), 2.66 (m, 2H), 2.02–1.71 (m, 3H), 1.56–1.27 (m, 2H), 1.00 (d, 3H)

¹³C NMR: (CDCl₃, 400 MHz) δ 175.6, 67.7, 37.0, 34.7, 32.8, 30.6, 21.8

State: colorless liquid

CAS Method Number: 3-054-CAS-32134794

Transformations: 1. Baeyer-Villiger Rearrangement

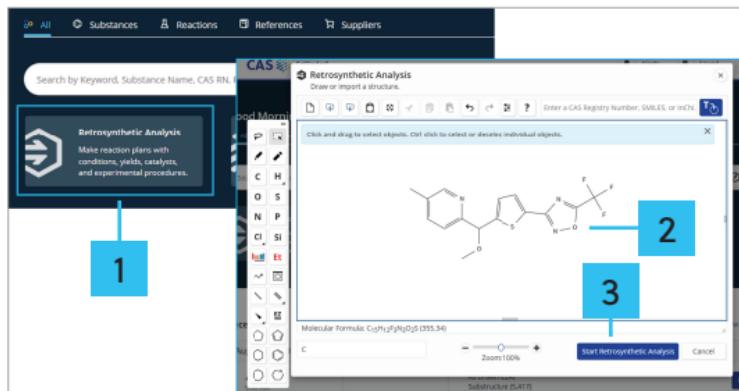
Reaction Notes: Baeyer-Villiger oxidation

Feedback

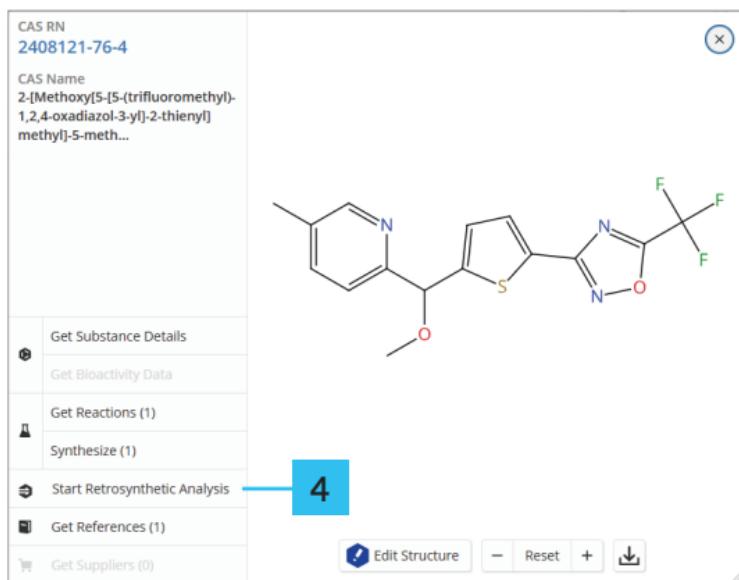
1. 下载反应详情。
2. 通过电子邮件分享反应详情。
3. 保存反应详情。
4. 查看物质供应商。
5. 单击 Step 以查看某一步反应详情。
6. 查看反应的来源文献信息详情页面。
7. 查看生成同一产物的其它反应。
8. 查看文献来源。
9. 获取文献全文的访问链接。

逆合成反应路线设计

逆合成反应路线设计工具 (Retrosynthetic) 可针对一个单一、具体的、已被报道或未报道的结构设计逆合成反应路线。



1. 单击页面左侧的 Retrosynthesis。
2. 在页面中间的结构面板中绘制或导入一个具体的、单一的结构。
3. 点击页面右下角的 Start Retrosynthetic Analysis, 开始逆合成反应路线设计。

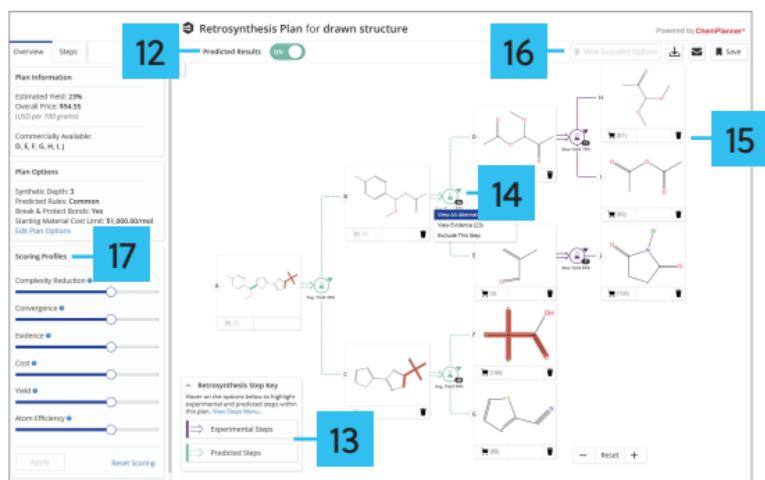


4. 如果是已报告的结构, 在物质结果中点击物质结构, 弹出详情显示窗口; 在弹出窗口中单击 Start Retrosynthetic Analysis, 可以对此物质进行逆合成反应路线设计。

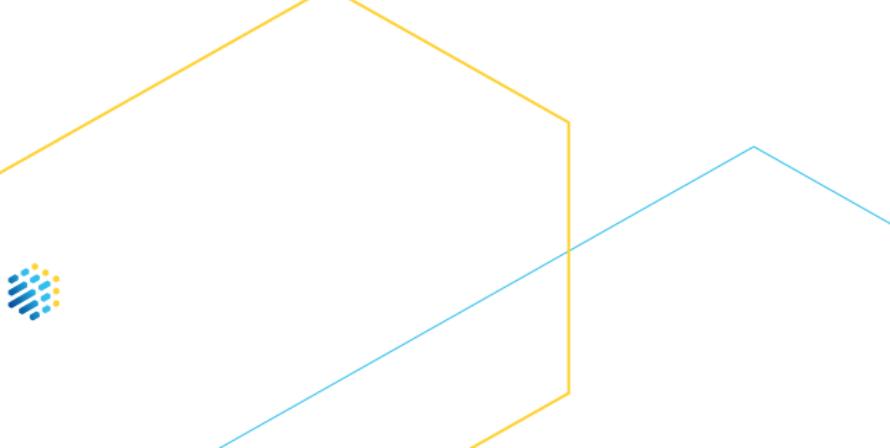


The screenshot shows the ChemPlanner retrosynthesis planning interface. Step 5: 'Select Synthetic Depth' (radio button for 3 selected). Step 6: 'Set Rules Supporting Predicted Reactions' (checkboxes for Common, Uncommon, and Rare rules). Step 7: 'Set Starting Materials Cost Limit' (dropdown set to 1000). Step 8: 'Break bond' button. Step 9: 'Protect bond' button. Step 10: 'Clear All bond Selections' button. Step 11: 'Create Retrosynthesis Plan' button.

5. 通过 Select Synthetic Depth, 设置合成深度。合成深度 (synthetic depth) 和起始原料价格 (starting materials cost) 决定逆合成反应路线何时终止运算。
6. 通过 Set Rules Supporting Predicted Reactions, 选择预测反应的规则 (常见、不常见和罕见规则)。
7. 设置起始原料的价格, 单位可为美元/摩尔 (USD/mol) 或 美元/克 (USD/g)。
8. 选择 Break bond, 然后点击结构上的某一个键, 即可指定其为断裂键。
9. 选择 Protect bond, 然后点击结构上的某一个或多个键, 即可指定其为被保护键。
注意:设置为被保护的键在逆合成路线结果中不会断裂, 但键级可能会发生变化。
10. 单击 Clear All bond selections, 可取消所有断裂键或被保护键的设置。
再次点击结构上某一个被标亮的键, 也可单独取消对此键的设置。
11. 点击页面左下角的 Create Retrosynthesis Plan, 即可开始逆合成反应路线设计。

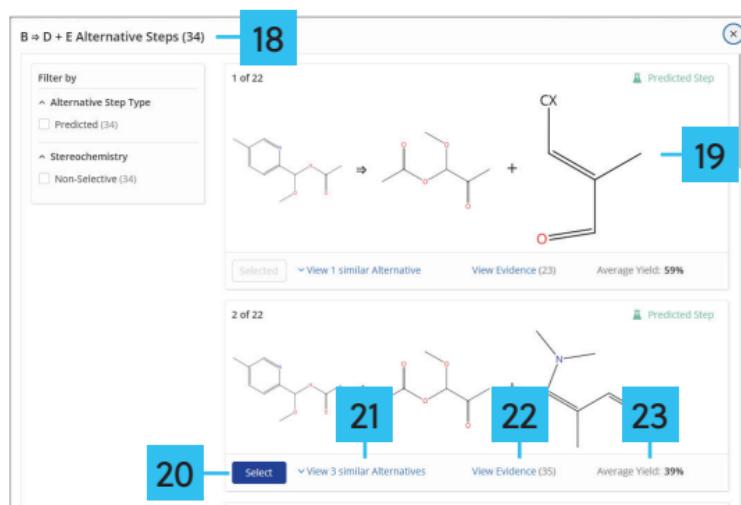


12. 页面顶部的 Predicted Results 状态为 ON 时，才能查看预测的逆合成反应路线。
13. 页面的反应路线中，绿色虚线表示预测的合成路线；紫色实线表示报道的实验路线。
14. 单击试剂瓶图标旁边的下拉箭头，即可查看该逆合成反应路线的所有替代反应路线 (View All Alternatives)、此步反应的文献依据 (View Evidence)，也可删除此步反应 (Exclude This Step)。
15. 点击路线中结构右下角的垃圾桶图标，可在路线中删除该物质。
16. 被删除的反应步骤或物质可通过页面右上角的 View Deleted Options 查看，也可以恢复。



17. 在页面左侧, 可通过 Scoring Profiles 对整个逆合成反应路线的评分项进行级别调整。从左向右滑动, 共有四个级别 (Off, Low, Medium, High)。

- Complexity Reduction: 降低每一步的原料相对于产物的复杂度
- Convergence: 对终产物而言, 整条路线的汇聚程度
- Evidence: 每一步反应的依据文献数量
- Cost: 基于起始原料的价格计算的整条路线的经济成本
- Yield: 整条路线的平均产率
- Atom Efficiency: 整个路线的原子经济性



18. 查看某一步反应的其他替代反应路线。

19. 查看替代路线中的原料结构。

20. 点击 Select 以选择感兴趣的替代反应。

21. 点击 View 3 Similar Alternatives, 展开此步反应的三个相似的替代反应。

22. 单击 View Evidence 以查看此步反应的参考文献。

23. 查看替代反应的平均产率 (Average Yield)。

供应商结果

The screenshot shows the 'Supplier Results' page. At the top, there's a search bar with 'Filtering: Purity: 95-98%' and a dropdown '1 Selected' with '68 Results'. To the right are icons for download (3), email (4), and clear filters (Clear All Filters). On the left is a 'Filter Behavior' sidebar with sections like 'Preferred Suppliers', 'Supplier' (with a purity filter set to '95-98%'), 'Quantity', 'Ships Within', 'Stock Status', 'Order From Supplier', and 'Country/Region'. Below the sidebar is a 'Filter Content Report' section with a download button. The main area displays a table of products:

Supplier	Substance	Purity	Purchasing Details	Availability
Enamine Enamine Stock Building Blocks United States Last Updated: 1 Aug 2023	5-Bromo-1-(2,5-dihydro-2H-pyridin-5-yl)-1,3-dioxane	95-98%	Order From Supplier 100 mg. USD 19.00 250 mg. USD 19.00 500 mg. USD 21.00 1 g. USD 26.00 2.5 g. USD 27.00 View all	Maintained in stock Ships within 1 week
Saron Chem Saron Chem Chemicals Product List United States Last Updated: 25 Jul 2023	128-08-5 2,5-Pyrrolidinediex	95-98%	Order From Supplier 25 g. USD 1.00	Maintained in stock Ships within 1 week
Matrix Scientific Matrix Scientific United States Last Updated: 1 Aug 2023	128-08-5 1-Bromodihydro-1H-pyrole-2,5-dione	95-98%	Product Information	Typically in stock Ships within 1 week

Numbered callouts point to specific elements: 1 points to the purity filter; 2 points to the search bar; 3 points to the download icon; 4 points to the email icon; 5 points to the availability column header; 6 points to the supplier name; 7 points to the substance name; 8 points to the supplier name; 9 points to the substance name; 10 points to the availability column header; 11 points to the download button; and 12 points to the purchasing details.

- 选择筛选项以缩小结果范围。
- 单击 X 移除一个筛选项或清除所有筛选项。单击以从下拉菜单中的多个筛选项中选择。
- 下载结果。
- 通过电子邮件发送结果。
- 按相关性、供应商名称、发货时间或纯度对结果进行排序。
- 单击打开物质详情。
- 单击结构打开物质信息窗口，查看物质信息、生成逆合成路线，编辑/下载结构文件。
- 单击选择结果。
- 单击拇指向上/拇指向下标识，设置供应商首选项。
- 打开供应商网站上的产品信息页面。
- 单击以下载所有或应用筛选器的内容（筛选行和结果数量）的.xlsx文件。
- 打开供应商网站上的产品订购页面。



供应商详情

The screenshot shows a product list for Aaron Chem. Numbered callouts point to specific features:

- 1: Preferred Supplier icon.
- 2: Substance Information: CAS Registry Number 128-08-5, CAS Name N-Bromosuccinimide.
- 3: Download icon.
- 4: Email icon.
- 5: Last Updated: 25 Jul.
- 6: Chemical structure of N-Bromosuccinimide.

1. 单击拇指向上标识, 将供应商设置为首选供应商, 或单击拇指向下标识, 将其设置为非首选供应商。
2. 单击打开物质详情。
3. 下载详情。
4. 通过电子邮件发送详情。
5. 打开供应商网站上的产品订购页面。
6. 单击结构打开物质信息窗口, 查看物质信息、生成逆合成路线, 编辑或下载结构。

序列检索

从 CAS SciFinderⁿ 主页面的左侧菜单中选择 Sequences, 将提供三类可用检索:

- BLAST: 检索相似序列
- CDR: 利用 CDR 检索抗体或 T 细胞受体
- Motif: 检索氨基酸或核苷酸位点可变的序列

The screenshot shows the CAS SciFinder sequences search interface. Numbered callouts point to various search parameters and features:

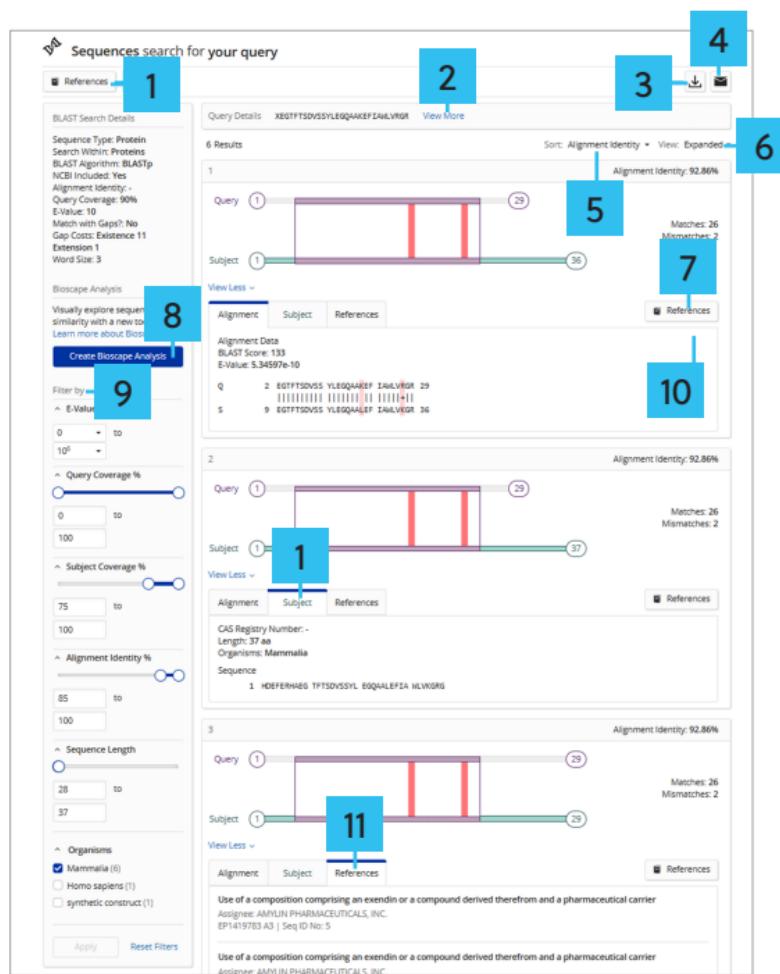
- 1: Search CAS Sequences button.
- 2: Sequence input field: SKEPTPSFSTLRLQASGFLAKVWIR.
- 3: Clear Search button.
- 4: Sequence Type: Nucleotide and Protein options.
- 5: Advanced Sequence Search section.
- 6: Search Sequences button.
- 7: Alignment identity %: 90.

1. 选择检索方法。
2. 在页面中央的输入区，直接输入或粘贴核苷酸或氨基酸序列的单字母代码。
注：BLAST 检索还支持 FASTA、EMBL、GCG 和 Genbank 格式。直接复制、粘贴至序列输入区，各种格式的序列会被自动进行标准化处理，用于检索。
3. 单击 Upload Sequence，可上传 .txt 或 .fasta 序列格式文件。
请注意，.fasta 格式文件支持 100 条序列一起检索，.txt 格式文件支持单条序列检索。
4. 选择检索序列类型：Nucleotide (RNA 或 DNA) 或 Protein (蛋白质或肽)。
5. 选择数据库类型：Nucleotide (RNA 或 DNA) 或 Protein (蛋白或肽序列库)。
6. 单击 Start Sequence Search 检索序列。
7. 可选择使用高级检索，并调整 BLAST 或 Motif 的检索参数。

序列检索结果

在检索历史中查看序列结果，可在 CAS SciFinderⁿ 主页面下方近期检索结果 (Recent Search History) 中查看，也可通过顶部的 Saved and History 或 Alerts 按钮访问序列检索历史。点击序列检索右侧的 View Results 按钮，即可查看检索结果。

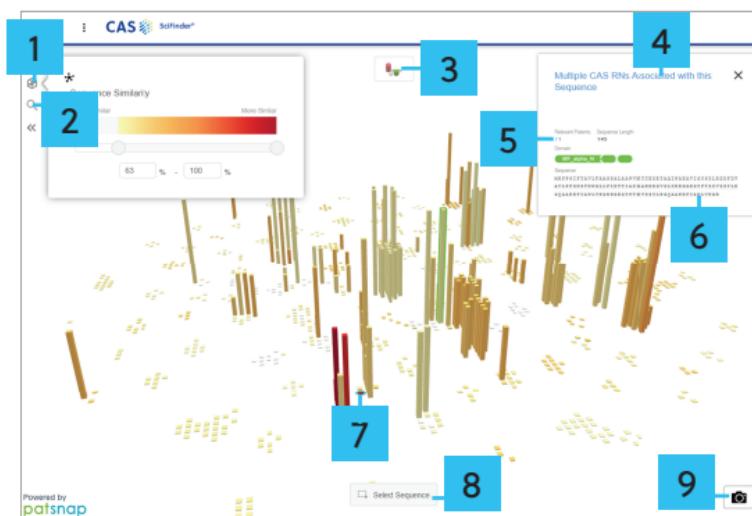




1. 获取披露该序列结果集的文献结果集。
2. 单击查看查询序列。
3. 下载序列检索结果。
4. 通过电子邮件分享序列结果。
5. 根据序列比对一致性百分比、E-Value、查询序列覆盖率或目标序列覆盖率，对序列结果进行排序。
6. 更改结果显示方式。
7. 查看披露该序列的文献结果。
8. 创建序列专利可视化分析地图。
9. 可利用筛选项缩小结果范围。

10. 查看目标序列信息，包括序列、序列长度、物种来源；如有关联，可通过 CAS 登记号和 NCBI identifier 超链接，获取序列材料详情和 NCBI 的序列详情。
11. 查看包含匹配序列的专利或期刊结果。

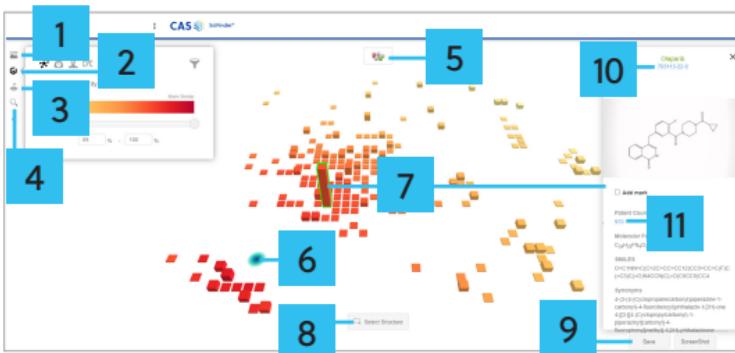
Bioscape



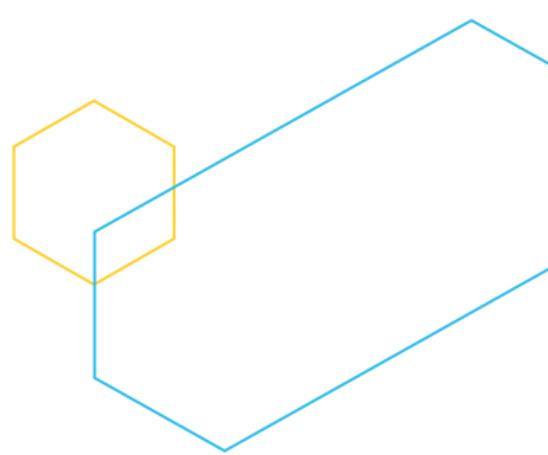
1. 按相似度细化序列结果栏。
2. 按专利关键词和简单的法律状态细化序列结果栏。
3. 更改序列结果栏的显示方式。
4. 单击查看物质。
5. 单击查看相关专利。
6. 单击一列以查看其专利数量和序列长度。
7. 查询的序列。
8. 单击 Select Sequence 按钮，然后单击并拖动以选择多个序列结果进行查看。
9. 序列结果栏快照。



Chemscape



1. 查看和管理保存的 Chemscape。
 2. 对 Chemscape 结构进行分组和精炼，以显示关键信息。
 3. 将新结构添加到您的 Chemscape，并在可视化地图上显示其所在位置。
 4. 按关键词或精确匹配的化学结构精炼您的 Chemscape。
 5. 更改结构结果栏的显示方式。
 6. 查询的结构。
 7. 单击一个柱状图以查看其结构和相关专利数量。
 8. 单击 Select Structure 按钮，然后单击并拖动以选择多个结构结果进行查看或选择一个新 Chemscape。
 9. 单击保存您的 Chemscape 以供以后在 MyChemscape 中进行访问。
 10. 单击打开物质详情页面。
 11. 单击查看相关专利。



管理已保存的检索和结果集

The screenshot shows the SciFinder interface with a dark theme. At the top, there is a navigation bar with links for 'Alerts' and 'Saved'. A blue box labeled '1' highlights the 'Saved' link. Below the navigation bar, there is a search bar and three main search modules: 'Retrosynthetic Analysis', 'Search CAS Lexicon', and 'Search CAS Sequences'. The 'Saved' section is the active page, indicated by a blue background.

- 单击查看保存项。

This screenshot shows the 'Saved Items' list. The left sidebar contains filters for 'Result Type' (Patient Markush, Reactions, References, Substances), 'Alerts' (Alerts Set, No Alerts), and 'Tags' (Reaction, Task, Other field, Reference). A 'Combine' button is at the bottom of this sidebar, labeled '11'. The main area lists saved items with their details and actions:

- 1** "Hollow fiber membrane" and enzyme (August 17, 2023, 4:24 PM) - Includes 'References' (View Saved, Run Search).
- 2** BV_biotransformation (August 17, 2023, 4:19 PM) - Includes 'Reactions' (View Saved, Run Search), 'Filters' (View), and 'Substances' (View).
- 3** Enzyme preparation (August 17, 2023, 4:10 PM) - Includes 'Reactions' (View Saved, Run Search), 'Substances' (View), and 'As Drawn' (View).

Actions for each item include 'Alerts' (dropdown), 'Add Tags' (button), and 'Delete' (button). A 'Run Search' button is also present in the bottom right of the main area.

- 单击以选中保存的项目。
- 通过电子邮件分享选定的项目。
- 删除选定的项目。
- 筛选保存的项目。
- 重新运行保存的检索式, 获得最新检索结果。
- 查看保存的检索结果。
- 编辑保存项的名称。
- 查看或设置结果更新提醒。
- 创建或添加标签。
- 删除标签。
- 合并已保存的检索结果。



12. 将 SciFinder 中保存和设置提醒的结果迁移到 SciFinderⁿ中；鉴于 SciFinder 与 SciFinderⁿ 的检索方法和算法的不同，迁移会影响检索结果，建议在 SciFinderⁿ 中重新运行新的检索。

合并已保存的检索结果

The screenshot shows the SciFinder interface with the 'Saved' tab selected. On the left, there's a sidebar for 'Alerts by Result Type' and a 'Combine Saved Results' section with a 'Combine' button highlighted by a blue box labeled '1'. The main area displays two saved items: 'Hollow fiber membrane' and enzyme (from August 17, 2023) and BV_biotransformation (from August 17, 2023). Each item has a 'Rerun Search' and 'View Saved' button.

1. 单击以合并已保存的检索结果。

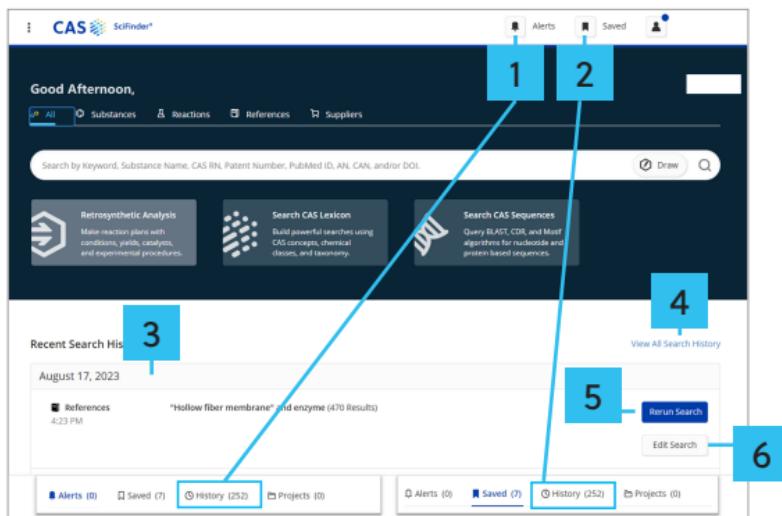
This screenshot shows the 'Combine Saved Results' dialog. Step 1 highlights the 'Substances' result type. Step 2 highlights the 'Add' option. Step 3 highlights the 'Select' button for the first item. Step 4 highlights the checked items in the list. Step 5 highlights the 'View Results' button at the bottom. The dialog also includes sections for 'Patient Markus', 'Reactions', and 'References'.

Selected Item	Date
BV_Biotransformation	December 29, 2022
BV_Microwave irradiation	December 29, 2022
4-Methylcyclohexanone Oxidation	December 28, 2022
Semaglutide 175:621496	November 21, 2022
Semaglutide No.	November 21, 2022
113231-05-3 sm	November 8, 2022
113231-05-3	November 8, 2022
IDAlast	November 8, 2022

1. 选择需要合并的结果类型。
2. 选择结果集的合并方式。

3. 重新设置合并的结果类型。
4. 选择需要合并的结果集, 最多可选择 5 项。
5. 重新设置结果集的合并方式。
6. 查看合并后的结果。
7. 取消合并。

检索历史的查看、管理和下载



1. 单击 Alerts, 可查看设置提醒的检索式及提醒的结果; 在界面上方选择 History 可查看检索历史。
2. 单击 Saved, 可查看保存的检索式和(或)检索结果; 在界面上方选择 History 可查看检索历史。
3. 在 SciFinderⁿ 主页下方可查看近期检索历史。
4. 查看全部检索历史。
5. 重新运行检索式。
6. 编辑检索式。



Alerts (0) Saved (7) History (205) Projects (0)

Filter by

- All (3)
- Sequences (1)
- Patent Markush (3)
- Reactions (28)
- References (109)
- Retrosynthesis (5)
- Substances (55)
- Suppliers (1)

Date

Start Date: 01/01/2023 End Date: 08/17/2023

August, 2023

SU	MO	TU	WE	TH	FR	SA
1	2	3	4	5	6	7
13	14	15	16	17	18	19
20	21	22	23	24	25	26
27	28					

Reset 7

Your Search History

205 Searches

August 17, 2023

References 4:48 PM *Hollow fiber membrane* and enzyme (470 Results)

Substances 3:58 PM As Drawn (0) Substructure (71) Similarity (22K)

Chemical structure: O=C1C=CC2=C1C3=C(C=C2)C(=O)OC3

Patent Markush 3:58 PM As Drawn (3) Substructure (406)

Chemical structure: O=C1C=CC2=C1C3=C(C=C2)C(=O)OC3

Download 1 Rerun Search 2 Edit Search 3 Edit Search 4 Rerun Search 5 Edit Search 6 Rerun Search 7

1. 下载检索历史。
2. 删除检索。
3. 按照此前的检索类型筛选。
4. 显示指定日期范围的检索历史。
5. 重新运行检索以获得最新检索结果。
6. 编辑检索式, 以重新运行。
7. 重置所显示的日期范围。

Download Your Search History

File Name 1 History_20221229_0917

Select a Range 2

Date 12/02/2022

Time 09:00 AM to 06:00 PM

3 Download 4 Cancel

1. 编辑文件名称。
2. 设置检索历史的日期及时间范围。
3. 下载检索历史为 word 文件。
4. 取消下载。

SciFinder™

Detailed History

December 2, 2022

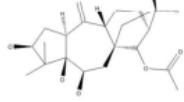
Time	Action
09:37 AM	Substance Search: 2021-00-2 Sort by: Relevance (3 Results)
09:37 AM	Substance Detail: 2021-00-2
11:48 AM	Substance Search: 2027-13-4 Sort by: Relevance (3 Results)
11:49 AM	Get References from Substance Sort by: Relevance (28 Results)
11:50 AM	Print All References CA Section Selected Toxicology (2 Results)
11:59 AM	Reference Detail: Structure-toxicity relationships applied to grayanotoxins
12:06 PM	View Citation Map for Relationship between structure, positive inotropic potency and lethal dose of grayanotoxins in guinea pig
12:06 PM	Expand Citation Map for Influence of calcium or sodium efflux in isolated axons
12:06 PM	Expand Citation Map for Contribution of cytosolic ionic and energetic milieu change to ischemia- and reperfusion-induced injury in guinea pig heart: Dose-response and time course resonance studies
01:39 PM	Get References from Substance Sort by: Relevance (0 Results)
01:54 PM	Reference Search: 2021-00-2

09:37 PM Filtered Reaction by: Experimental Protocols, Selected Methods (308 Results)

09:37 PM Filtered Reaction by: Non-participating Functional Groups: Selected/Validated (276 Results)

09:52 PM Reaction Detail: 31-958-CAS-21238876

09:58 PM Super As-Drawn Structure Search Sort by: Relevance (3 Results)



04:07 PM Filtered Reaction by: Document Type: Selected/Patent (75 Results)

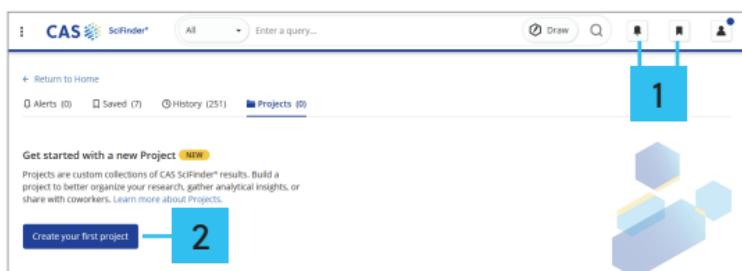
Copyright © 2022 American Chemical Society (ACS). All Rights Reserved.

1. 查看下载的检索历史详情。

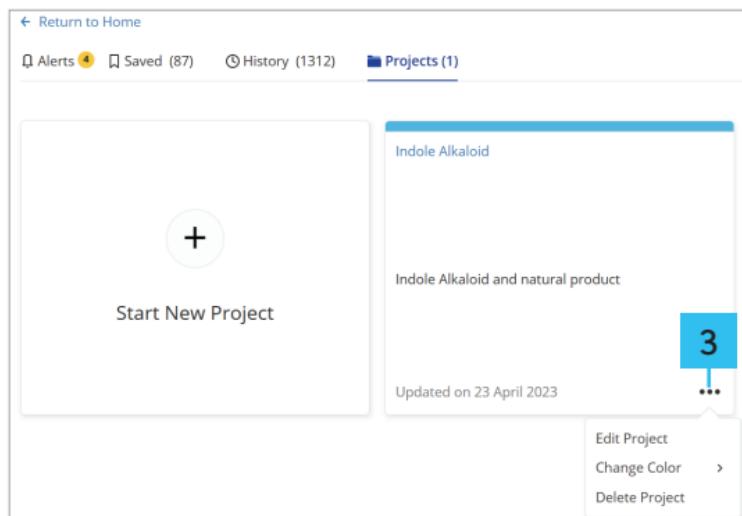


项目 Projects

检索结果的项目管理功能 (Projects) 有助于便捷管理、储存和共享具体项目中的文献。



1. 点击更新提醒或保存项按钮，进入 Project 页面。
2. 单击Create your first project, 创建新项目。
3. 创建项目后，可编辑、更改颜色或删除项目。



将文献添加至项目

在文献详情页面上,点击 Save 按钮,
可将文献加入指定项目。

The screenshot shows a detailed view of a scientific publication. At the top right, there is a 'Save' button with a blue border and a white icon. To its right, a dropdown menu is open, showing options like 'Create a New Project', 'Indole Alkaloid', 'Save', 'Add to Project', and 'View'. Below the title, there's a section for 'JOURNAL' with details like the journal name, volume, issue, and DOI. On the right side, there are two chemical structures labeled 'New Natural Product Framework' and 'Neglected Antibacterial'. A legend at the bottom right indicates that blue represents 'Natural Product Framework' and green represents 'Neglected Antibacterial'.

在文献结果页面的选择所有需添加至项目中的文献,点击 Save and Alert 按钮,批量添加到项目中。

This screenshot shows a search results page with a sidebar for filtering by document type, language, publication year (with a histogram), availability at the user's institution, and author. In the center, a search result for a specific article is displayed. At the top right of this result, there is a 'Save and Alert' button with a blue border and a white icon. A dropdown menu is open next to it, showing 'Save', 'Add to Project', and 'View: Partial Abstract'. Below the search result, there are buttons for 'Full Text', 'Substances (5)', 'Reactions (0)', 'Citing (30)', and 'Citation Map'.



管理项目

在项目页面中, 可查看、分享或删除已添加的文献。

The screenshot shows a project page for 'Indole Alkaloid'. At the top, there's a title bar with the project name and a 'More' button. Below it is a 'References (50)' section with a blue highlighted link. The main content area displays a research article about 'Myrindole A', showing its chemical structure, a photograph of the compound, and some text. To the right of the text is a context menu with options like 'Add to Project', 'Share', 'Delete', 'Use My Default Mail App', and 'Send with CAS SciFinder®'. Below the main text are buttons for 'Full Text', 'Substances (3)', 'Reactions (4)', 'Citing (6)', and 'Citation Map'. Another section below discusses 'Generation of Indoles with Agrochemical Significance through Biotransformation by Chaetomium globosum', also with a blue highlighted link.

CAS SciFinderⁿ 支持

获取 CAS SciFinderⁿ 支持, 请点击任意页面底部的 **Help**链接或从 **Account**菜单中选择 **Help**。

The screenshot shows the CAS SciFinder homepage. At the top, there's a 'Good Afternoon,' greeting and a user profile icon. Below the header are navigation links for 'All', 'Substances', 'Reactions', 'References', and 'Suppliers'. On the right, there's a 'Saved' section and a 'Help' dropdown menu. The 'Help' menu is open, showing options like 'What's New?', 'Help and Support', 'My CAS Profile', 'Settings', and 'Log Out'. At the bottom of the page is a search bar and a 'Draw' button.

如需获取有关 CAS SciFinderⁿ 使用的其他帮助, 请联系 **CAS 中国代表处**。

电话: 010-62508026/7

电子邮箱: china@acs-i.org

网址: cas.org/support

CAS 是领先的科学信息解决方案提供机构，携手全球创新者以加速科学突破。

CAS 拥有 1400 多名数据专家，负责收录分析科学文献，创建数据间的关联，从科学知识中获得洞察。100 多年来，科学家、专利专家和商业人士依靠 CAS 的解决方案和专业知识，来提供他们所需要的 hindsight（回顾）、insight（洞察）和 foresight（预见），连接前人的科学发现和现有知识，探索更美好的未来。CAS 为美国化学会 (ACS) 旗下机构。

欢迎访问 cas.org 与我们联系



010.62508026/7 | china@acs-i.org



ACS
International

