

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。无论您是需査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。




Log In to SciFinder[®]

Username or Email Address

[Next](#)

[Create an account.](#) | [Can't log in?](#)

By using CAS SciFinder[®], you agree to the License Agreements and Policies



Log In to SciFinder[®]

Welcome, User [Not You?](#)

Password

[Log In](#)

Keep me signed in

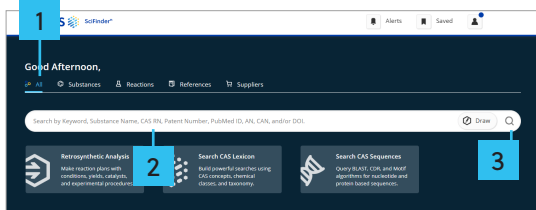
[Create an account.](#) | [Can't log in?](#)

By using CAS SciFinder[®], you agree to the License Agreements and Policies



检索

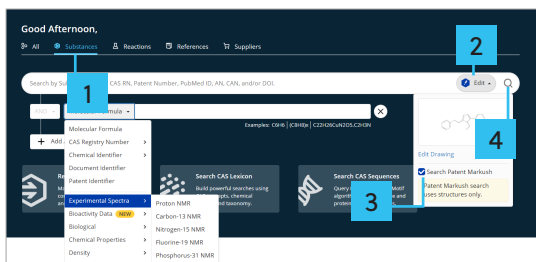
使用关键词、物质名称、CAS 登记号、专利号或结构来检索所需的结果类型。注：您可以在 All 和 References 检索框中输入 DOI。



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。

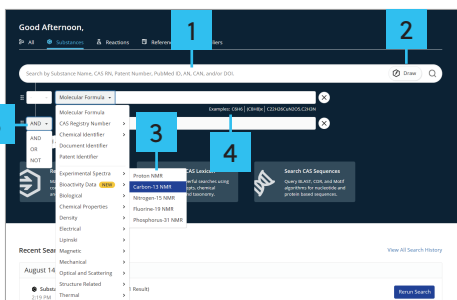
使用文献和物质高级检索时，您可以按特定信息类型（例如，作者姓名或物质属性）进行检索。

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。



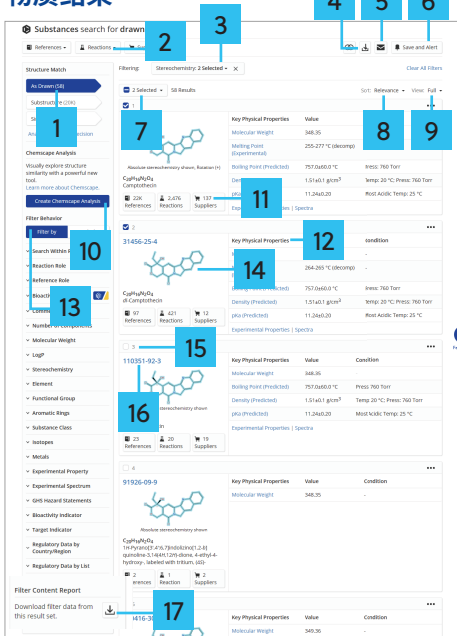
1. 选择 Substances。
2. 单击以绘制/导入结构式。
3. 选择“Search Patent Markush”。
4. 单击执行检索。

物质检索



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



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
(筛选项和结果数值) 的 .xlsx 文件。

物质详情

CAS Registry Number: 7689-03-4

References (22K) Reactions (2,475) Suppliers (137)

1 2 3 4

5

Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)

$C_{20}H_{16}N_2O_4$
1H-Pyran[3',4':6,7]indolizin[1,2-b]quinoline, 3,16-dihydro-dione, 4-ethyl-4-hydroxy-, (4S)-, (RCL, AC)

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

Expand All | Collapse All

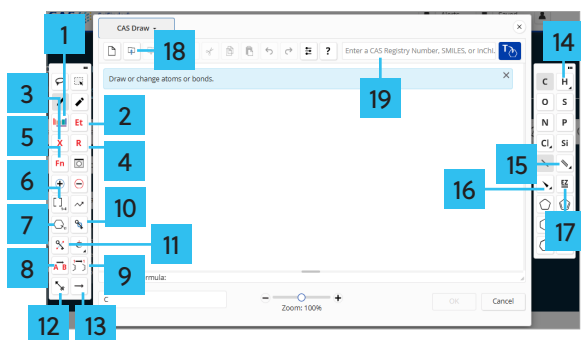
- Other Names and Identifiers
- Experimental Properties
- Experimental Spectra
- Structure Activity Relationships
- Absorption, Distribution, Metabolism, and Excretion Data
- Toxicity
- Predicted Properties
- Predicted Spectra
- Bioactivity Indicators
- Target Indicators
- Regulatory Information
- GHS Hazard Statements
- Additional Details

7 8

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

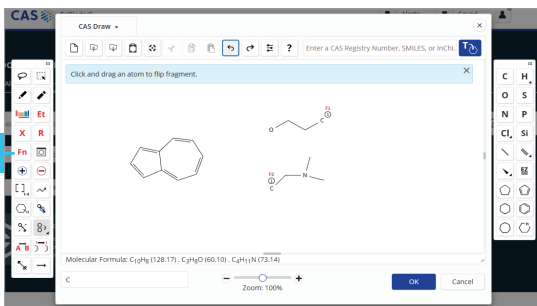


1. 元素周期表。
2. 常见官能团。
3. 可变基团定义工具。
4. R 基团定义工具:单击 Atoms 打开元素周期表选择目标原子。点击 Variables 选择可变基团,单击 Shortcuts 选择常用官能团。当某位点的取代为两个或更多(最多 20 个)原子、或/和可变基团或/和常见官能团中任意一个即可时,则可使用R工具定义。
5. Fn 工具:可用于标记片段结构,并将标记的片段结构添加至自定义 R 基团中。
6. 重复结构单元工具:可用于绘制在一定范围内重复的原子结构或片段结构,重复范围可以是 0-20 次。
7. 可变位置定义工具:可用于绘制环上取代基位置不确定的结构式。
8. 反应角色定义工具: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。

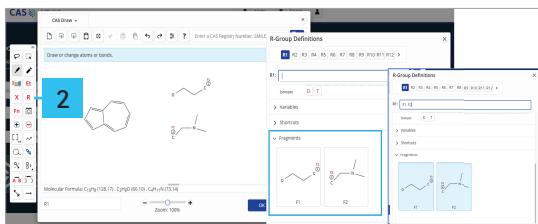
13. 反应箭头:箭头前面的物质默认为反应物,箭头后面的物质默认为产物。
14. 单击可绘制氢或其他同位素标记 D 或 T。
15. 单击可绘制双键、三键或不确定键。
16. 手性键:该键可用于精确检索自旋异构体。
17. 顺反异构键:该键可用于精确检索含双键结构的顺反异构体 (ZE 型)。
18. 导入 .cxf 文件或 .mol 文件。
19. 输入物质的 CAS 登记号、smiles 字符串或 InChI, 然后单击回车键以将其转换为相应物质结构。



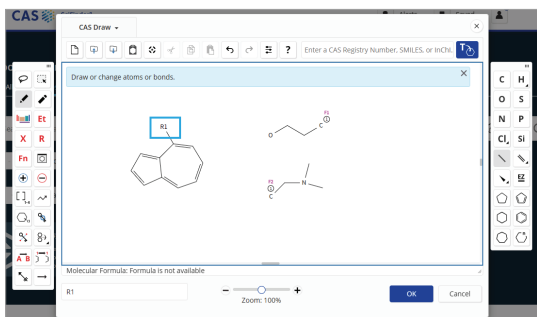
可添加片段结构至自定义 R 基团中



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。



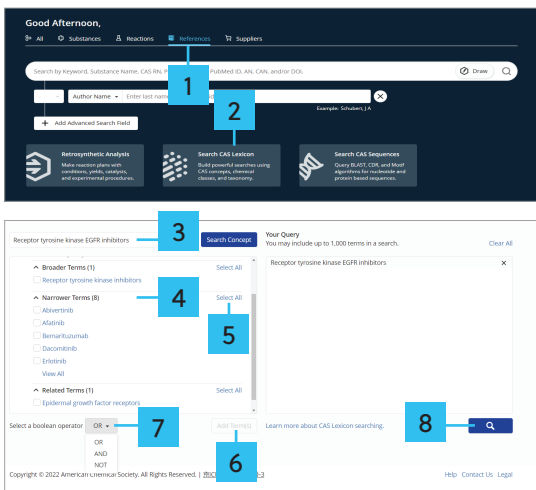
3. 根据需要, 将 R1 基团与目标结构相连。
关闭 R 基团定义设置窗口, 点击 OK 即可检索绘制的结构。

4. 查看检索结果。



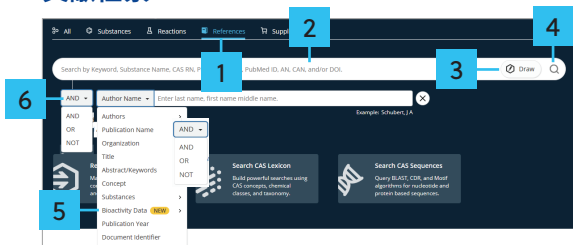
CAS Lexicon Query Builder

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 SciFinder[®] 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 SciFinder[®] 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

The screenshot displays the CAS SciFinder search results interface. On the left, there is a 'Filter Behavior' sidebar with various filters such as Document Type, Substance Role, Language, Publication Year, and Availability at My Institution. The main area shows a list of search results, each with a title, abstract snippet, and options for viewing full text, citation maps, and PatenPak. Numbered callouts (1-15) highlight specific UI elements: 1. Filter Behavior; 2. Filter X; 3. Download; 4. Email; 5. Save and Alert; 6. Filter Behavior; 7. Filter X; 8. Sort; 9. View; 10. Full Text; 11. Citation Map; 12. Full Text; 13. Download; 14. Full Text; 15. PatenPak.

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

Pharmaceutical composition containing **ibuprofen**

Substances (7) Reactions (0) Citing (6) Citation Map

1 PATENT

Application Number: EP2001-500053
Application Date: 2001-03-01
Kind Code: A2

Assignee: Laboratorio de Aplicaciones Farmacodinamicas, S.A., Spain
Source: European Patent Organization CODEN: EPKODW

Database Information: AN: 2001-654646, CAN: 135-200493, CAPUS

Language: English

2 **3**

4 CAS For users, improve formulations database and workflow solution, is now available for this CAS Formulae in this document. Learn more about Formulae.

By: Torre Perrot, Font Faus, Xavier; Trullós Casas, 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 0.15-0.30, lemon oil 0.30-0.60, sodium citrate 0.50-1.50 and sucrose 30-70%.

Keywords: **ibuprofen** pharmaceutical cyclodextrin

PatentPak Viewer Get Prior Art Analysis Full Text **7**

Similar **8** **9**

Taste-masked powder for suspension compositions of methylprednisolone
World Intellectual Property Organization WO2011101734 A2 2011-08-25 | Language: English, Database: Caplus

Composition of water-proof permissive explosive without using TNT
China CN1110287 A 1995-10-18 | Language: Chinese, Database: Caplus

Patent Family

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	10	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
AT238567	Undetermined	T		2005-07-15	AT2001-500053	2001-03-01
PT1129709	Portuguese	E		2005-10-31	PT2001-500053	2001-03-01
SK285338	English	B6	PDF	2006-11-03	SK2001-293	2001-03-01

Previous Application

Application Number: Application Date: 2000-03-03

Expand All | Collapse All

▼ IPC Data **12**

▼ Concepts

▼ Substances

Substances (7)

13 **14**

13 CC(C)C(C)C1=CC=C(C=C1)C(=O)O
C₁₃H₁₈O₂
Ibuprofen
PatentPak
Role: Therapeutic Use, Biological Study, Uses

14 C12H22O11
Sucrose
Role: Therapeutic Use, Biological Study, Uses

57469-77-9 CC(C)C(C)C1=CC=C(C=C1)C(=O)O
C₁₃H₁₈O₂ · Na
Ibuprofen lysine
PatentPak
Role: Therapeutic Use, Biological Study, Uses

7585-39-9 C4H7O2
β-Cyclodextrin
PatentPak
Role: Therapeutic Use, Biological Study, Uses

139-05-9 C12H22O11
C₁₂H₂₂O₁₁ · Na
Sodium cyclamate
PatentPak
Role: Therapeutic Use, Biological Study, Uses

128-44-9 C12H22O11
C₁₂H₂₂O₁₁ · Na
Sodium saccharin
PatentPak
Role: Therapeutic Use, Biological Study, Uses

68-04-2 C12H22O11
C₁₂H₂₂O₁₁ · 3Na
Tri sodium citrate
PatentPak
Role: Therapeutic Use, Biological Study, Uses

▼ Formulations

▼ Cited Documents **15**



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

References search for "Grayanotoxin" 1

Substances Reactions Citing Knowledge Graph

1. 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。

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13

Knowledge Graph Key

References Author Concepts Substances Organization

Filter Behavior

Filter by Exclude

Document Type

Language

English (127)

Japanese (13)

German (10)

Chinese (2)

Undetermined (2)

View All

Publication Year

Available at My Institution

Author

Organization

Publication Name

Concept

Filter Content Report

Download filter data from this result set.

4368-28

Absolute stereochemistry shown

Tetrodotoxin

Polymers for reducing contamination in a biological substance by removing toxins

By: Chan, Phillip P.; Capponi, Vincent J.; Golobish, Thomas D.; Ali, Humayra Begum | WO2014005039 | Assignee: CytoSorbents Corporation 2014

Expand Data

Institute of Apicultural Research, Chinese Academy of Agricultural Sciences China

Endotoxins

Guo, Qin

1. 单击以展开或关闭选项栏。展开即显示 Knowledge Graph Key 和聚类选项。
2. 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。
3. 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 displays the PatentPak Viewer interface. At the top, there are navigation controls for 'PAGE' (94), 'ZOOM', and 'DOWNLOAD PDF'. The main content area shows a patent document with several chemical structures and text. Callout 1 points to the 'DOWNLOAD PDF' button. Callout 2 points to the 'CAS 141' and 'CAS 151' identifiers. Callout 3 points to the 'Key Substances in Patent' section. Callout 4 points to a chemical structure in the main text. Callout 5 points to a chemical structure in the left sidebar.

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 interface. At the top, there are tabs for 'PatentPak Viewer', 'Get Prior Art Analysis', and 'Full Text'. Below this is a 'Patent Family' table with columns for Patent, Language, Kind, PatentPak Options, Publication Date, Application Number, and Application Date. A row shows patent WO2010054398 in English, kind A1, published on 2010-05-14, with application number WO2009-US63922 and application date 2009-11-10. A blue box with the number '1' points to the 'Get Prior Art Analysis' button. Below the table, there is a section for 'August 5, 2022' with a 'References' section showing 'Prior Art Analysis (193)' for the preparation of pyrazine compounds. A blue box with the number '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 with the text 'Search by CAS Reaction Num... Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI'. A blue box with the number '1' points to the search bar. Below the search bar are three buttons: 'Retrosynthetic Analysis', 'Lexicon', and 'Search CAS Sequences'. A blue box with the number '2' points to the 'Lexicon' button. To the right of the search bar is a chemical structure drawing area with a blue box with the number '3' pointing to the 'Edit' button. At the top right, there is a blue box with the number '4' pointing to the search icon.

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

The screenshot shows a web-based interface for searching and filtering chemical reactions. The interface is divided into several sections:

- Top Bar:** Includes a search bar, a 'Save and Alert' button, and a 'Clear All Filters' button.
- Left Sidebar:** Contains various filters such as 'Yield', 'Number of Steps', 'Reaction Mapping', 'Reaction Scale', 'Experimental Protocols', 'Reaction Type', 'Stereochemistry', 'Reagent', 'Catalyst', 'Solvent', 'Commercial Availability', 'Reaction Notes', 'Source Reference', 'Document Type', 'Language', 'Publication Year', 'Organization', 'Publication Name', and 'CA Section'. A 'Filter Content Report' is also present at the bottom of the sidebar.
- Main Content Area:** Displays a list of reaction results. Each result includes a chemical structure, a list of reagents and conditions, and a brief description of the reaction. The results are numbered 1 through 20, corresponding to the callouts in the image.

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。



- 将反应式发送至结构编辑器。
- 选择筛选项以缩小结果范围。
- 查看物质供应商。
- 查看反应详情。
- 单击以查看该反应的文献详情页面。
- 查看反应实验步骤。
- 查看文献的访问链接。
- 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。
- 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

The screenshot displays the 'Reactions search for drawn structure' interface. A dropdown menu for 'Group By' is open, showing options: 'By Transformation' (selected), 'By Scheme', and 'By Document'. Below the menu, three reaction types are listed:

- 1. Baeyer-Villiger Rearrangement:** Shows a chemical reaction where a carboxylic acid derivative ($R-C(=O)-R^1-CO_2H$) is converted to an ester ($R-C(=O)-OR^1$).
- 2. Oxidation of Aldehydes to Carboxylic Acids:** Shows a chemical reaction where an aldehyde ($R-CHO$) is converted to a carboxylic acid ($R-COOH$).
- 3. Reduction of Aldehydes and Ketones:** Shows a chemical structure of a carbonyl group ($C=O$).

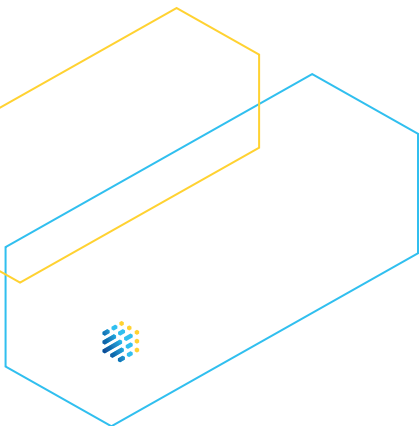
Each reaction type has a corresponding 'Reactions search for drawn structure' window open, showing a list of results for that specific transformation type.

- 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。
- 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

The image shows a software interface for chemical reactions. At the top, there is a search filter for 'Experimental Protocols: Synthetic Methods' and a 'Clear All Filters' button. Below this, a reaction scheme is displayed for 'Scheme 1 (50 Reactions)'. The reaction shows a cyclohexanone derivative reacting to form a bicyclic product. A blue callout box with the number '1' points to a three-dot menu icon next to the yield '99-100%'. This menu contains two options: 'Send to Structure Editor' and 'View All Reaction Summaries'. Below the reaction scheme, there are two 'Suppliers' buttons: 'Suppliers (83)' and 'Suppliers (13)'. In the foreground, a 'CAS Draw' window is open, showing the same reaction scheme. The window has a toolbar at the top with icons for drawing and editing. Below the toolbar is a text input field for 'Enter a CAS Registry Number, SMILES, or InChI'. The main drawing area shows the reaction with 'reactant' and 'product' labels. At the bottom of the window, the molecular formula is given as 'C₁₂H₂₀O (112.17) · C₇H₁₂O₂ (128.17)'. There is also a zoom slider set to 100% and 'OK' and 'Cancel' buttons.

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) 71% Suppliers (13)

Suppliers (92) 4

Suppliers (106) 5

Reaction Overview
Steps: 4 6

JOURNAL
Toward Sustainable and Strong A-BA-Type Thermoplastic Elastomers with Poly(ϵ -Caprolactone-co-4-Methyl- ϵ -Caprolactone) Soft Midblock and Poly(styrene-*b*-PEE) End Blocks
Wang, Y. et al.
Phys. Chem. Chem. Phys. 2012, 14, 20, 5028-5035
View Source Full Text

Company/Organization
Key Laboratory of Rubber-Plastics, Ministry of Education/Shandong Provincial Key Laboratory of Rubber-plastics, School of Polymer Science and Engineering, Qingdao University of Science and Technology
Qingdao 266042
China

Step 1 Step 2 Step 3 Step 4

Stage	Reagents	Catalysts	Solvents	Conditions
1	<i>m</i> -Chloroperbenzoic acid	-	Chloroform	3 h, rt

CAS Reaction Number: 31-454-CAS-32167633

7 Alternative Steps (141)

Experimental Protocols

Synthetic Methods

Products 4-Methylcaprolactone Yield: 71%

Reactants 4-Methylcyclohexanone

Reagents *m*-Chloroperbenzoic acid

Solvents Chloroform

Procedure
1. Add a solution of 4-methylcyclohexanone (20.0 g, 156.0 mmol) in CHCl₃ (150 mL) to a stirred solution of 80% MCPBA (32.3 g, 187.2 mmol) in CHCl₃ (175 mL).
2. After 3 h, filter the solution through celite, wash twice with saturated NaHCO₃ and once with brine, dry with MgSO₄, and concentrate in vacuo.
3. Isolate the monomer by fractional vacuum distillation from calcium hydride and store under argon atmosphere.

Transformation Baeyer-Villiger Rearrangement

Scale gram

Characterization Data

4-Methylcaprolactone

Proton NMR Spectrum	(CDCl ₃ , 400 MHz) δ 4.21 (m, 2H), 2.66 (m, 2H), 2.02–1.71 (m, 3H), 1.58–1.27 (m, 2H), 1.00 (d, 3H)
Carbon-13 NMR	(CDCl ₃ , 400 MHz) δ 175.6, 67.7, 37.0, 34.7, 32.8, 30.6, 21.8
State	colorless liquid

CAS Method Number 3-454-CAS-32134794

Transformations
1. Baeyer-Villiger Rearrangement

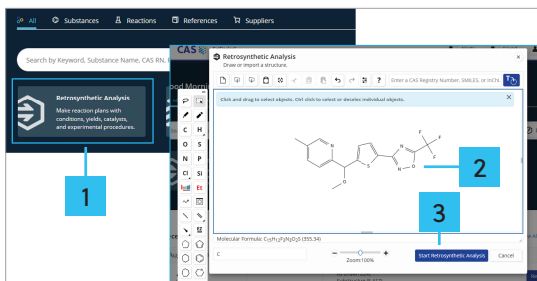
Reaction Notes
Baeyer-Villiger oxidation

8 9

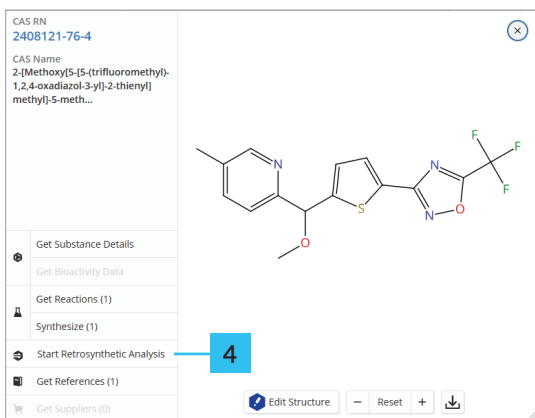
1. 下载反应详情。
2. 通过电子邮件分享反应详情。
3. 保存反应详情。
4. 查看物质供应商。
5. 单击 Step 以查看某一步反应详情。
6. 查看反应的来源文献信息详情页面。
7. 查看生成同一产物的其它反应。
8. 查看文献来源。
9. 获取文献全文的访问链接。

逆合成反应路线设计

逆合成反应路线设计工具 (Retrosynthesis) 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。

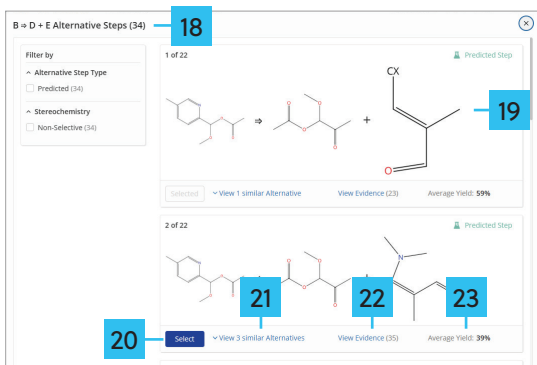


- 通过 Select Synthetic Depth, 设置合成深度。合成深度 (synthetic depth) 和起始原料价格 (starting materials cost) 决定逆合成反应路线何时终止运算。
- 通过 Set Rules Supporting Predicted Reactions, 选择预测反应的规则 (常见、不常见和罕见规则)。
- 设置起始原料的价格, 单位可为美元/摩尔 (USD/mol) 或 美元/克 (USD/g)。
- 选择 Break bond, 然后点击结构上的某一个键, 即可指定其为断裂键。
- 选择 Protect bond, 然后点击结构上的某一个或多个键, 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。
- 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。
- 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 Alternative, 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 a web interface for viewing supplier results. On the left, there is a 'Filter Behavior' panel with sections for 'Preferred Suppliers', 'Supplier', 'Purity', 'Quantity', 'Ships Within', 'Stock Status', 'Order From Supplier', and 'Country/Region'. A 'Filter Content Report' section at the bottom left has a download icon. The main area displays a table with columns: Supplier, Substance, Purity, Purchasing Details, and Availability. The table lists three suppliers: Enamine, Perron Chem, and Matrix. Numbered callouts (1-12) point to various UI elements: 1 points to the 'Supplier' filter section; 2 points to the 'Purity: 95-98%' filter with an 'X' to remove it; 3 points to a download icon; 4 points to an email icon; 5 points to the 'Availability' column; 6 points to the 'Enamine' supplier name; 7 points to a chemical structure icon; 8 points to a selection checkbox; 9 points to a thumbs-up/down icon; 10 points to the 'Matrix' supplier name; 11 points to the 'Filter Content Report' download icon; 12 points to the 'Purchasing Details' column.

1. 选择筛选项以缩小结果范围。
2. 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。
3. 下载结果。
4. 通过电子邮件发送结果。
5. 按相关性、供应商名称、发货时间或纯度对结果进行排序。
6. 单击打开物质详情。
7. 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
8. 单击选择结果。
9. 单击拇指向上/拇指向下标识, 设置供应商首选项。
10. 打开供应商网站上的产品信息页面。
11. 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。
12. 打开供应商网站上的产品订购页面。



供应商详情

The screenshot shows the 'Aaron Chem Product List' interface. Callout 1 points to a thumbs-up icon for 'Preferred Supplier'. Callout 2 points to the 'CAS Registry Number' field. Callout 3 points to a download icon. Callout 4 points to an email icon. Callout 5 points to the 'Order From Supplier' link. Callout 6 points to the 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 SciFinder[®] 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 'Search CAS Sequences' page. Callout 1 points to the search tabs (BLAST, CDR, Motif). Callout 2 points to the search input field. Callout 3 points to the 'Upload Sequences' button. Callout 4 points to the 'Sequence Type' dropdown. Callout 5 points to the 'Search Within' dropdown. Callout 6 points to the 'Search Sequences' button. Callout 7 points to the 'Advanced Sequence Search' link.

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 SciFinder[®] 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。

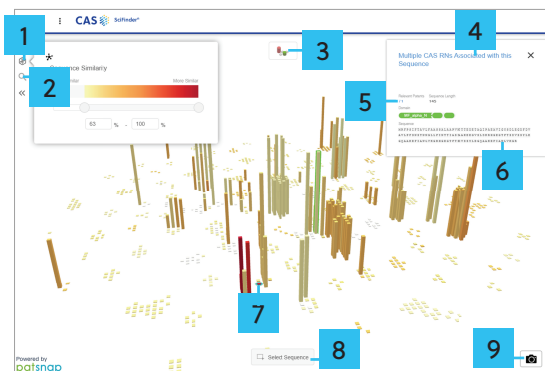


The screenshot shows the BLAST search results interface. On the left is a sidebar with search details and filters. The main area displays search results for the query sequence XEGFTSDVSSYLEGQAQKEF IALVLRGR. Callouts 1-11 point to various elements: 1. References link; 2. View More link; 3. Download icon; 4. Share icon; 5. Sort dropdown; 6. View toggle; 7. References link; 8. Create Bioscape Analysis button; 9. Filter by E-Value dropdown; 10. Alignment Data section; 11. Reference link for the third result.

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。

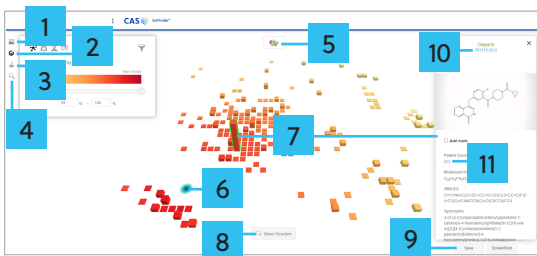
Bioscope



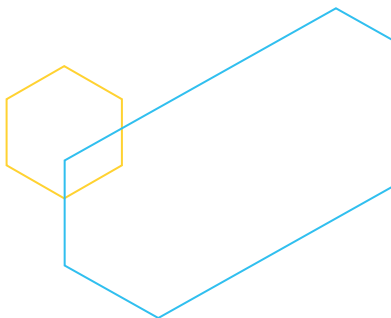
1. 按相似度细化序列结果栏。
2. 按专利关键词和简单的法律状态细化序列结果栏。
3. 更改序列结果栏的显示方式。
4. 单击查看物质。
5. 单击查看相关专利。
6. 单击一列以查看其专利数量和序列长度。
7. 查询的序列。
8. 单击 Select Sequence 按钮, 然后单击并拖动以选择多个序列结果进行查看。
9. 序列结果栏快照。



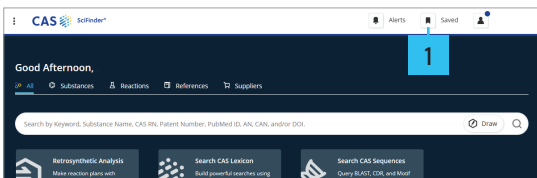
Chemscape



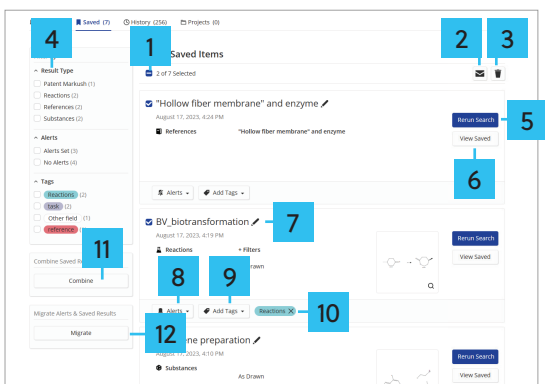
1. 查看和管理保存的 Chemscape。
2. 对 Chemscape 结构进行分组和精炼，以显示关键信息。
3. 将新结构添加到您的 Chemscape，并在可视化地图上显示其所在位置。
4. 按关键词或精确匹配的化学结构精炼您的 Chemscape。
5. 更改结构结果栏的显示方式。
6. 查询的结构。
7. 单击一个柱状图以查看其结构和相关专利数量。
8. 单击 Select Structure 按钮，然后单击并拖动以选择多个结构结果进行查看或选择一个新 Chemscape。
9. 单击保存您的 Chemscape 以供以后在 MyChemscape 中进行访问。
10. 单击打开物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



管理已保存的检索和结果集



1. 单击查看保存项。

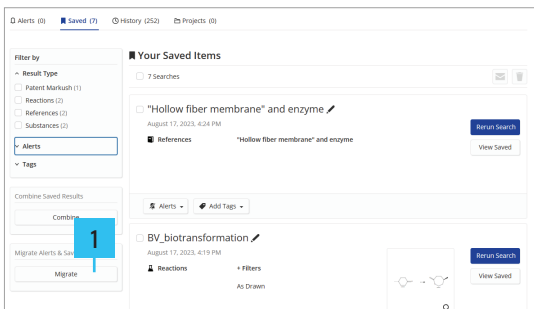


1. 单击以选中保存的项目。
2. 通过电子邮件分享选定的项目。
3. 删除选定的项目。
4. 筛选保存的项目。
5. 重新运行保存的检索式, 获得最新检索结果。
6. 查看保存的检索结果。
7. 编辑保存项的名称。
8. 查看或设置结果更新提醒。
9. 创建或添加标签。
10. 删除标签。
11. 合并已保存的检索结果。

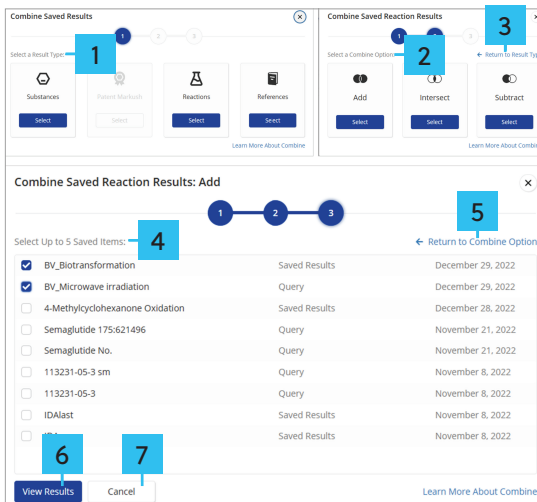


- 将 SciFinder 中保存和设置提醒的结果迁移到 SciFinderⁿ中；鉴于 SciFinder 与 SciFinderⁿ 的检索方法和算法的不同，迁移会影响检索结果，建议在 SciFinderⁿ 中重新运行新的检索。

合并已保存的检索结果



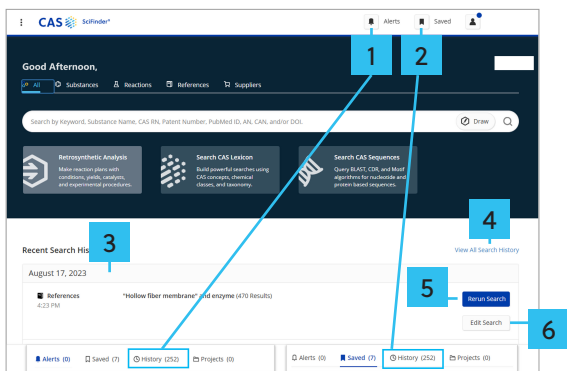
- 单击以合并已保存的检索结果。



- 选择需要合并的结果类型。
- 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。



The screenshot shows the 'Your Search History' page in CAS SciFinder. The interface includes a top navigation bar with 'Alerts (0)', 'Saved (7)', 'History (206)', and 'Projects (0)'. On the left, there is a 'Filter by' section with 'Result Type' and 'Date' filters. The main area displays search results for 'August 17, 2023', including 'References', 'Substances', and 'Patent Markush' categories. Numbered callouts (1-7) point to: 1. Download icon; 2. Delete icon; 3. Result Type filter; 4. Date filter; 5. Rerun Search button; 6. Edit Search button; 7. Reset button.

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 **3** 09:00 AM to 06:00 PM

Download **Cancel** **4**

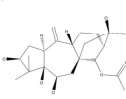
1. 编辑文件名称。
2. 设置检索历史的日期及时间范围。
3. 下载检索历史为 word 文件。
4. 取消下载。

Scholar- **1** Detailed History

December 2, 2022

- 09:37 AM Substance Search: **2021-80-2**
Sort by: Relevance (3 Results)
- 09:37 AM Substance Detail: 2021-80-2
- 11:48 AM Substance Search: **30275-17-4**
Sort by: Relevance (3 Results)
- 11:49 AM Get References from Substances
Sort by: Relevance (20 Results)
- 10:52 AM Filtered References for
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 on sodium efflux in squid axons
- 12:06 PM Expand Citation Map for Contribution of synaptic ionic and energetic release change to ischemic- and reperfusion-induced injury in guinea pig heart:
Fluorimetry and nuclear magnetic resonance studies
- 03:39 PM Get References from Substances
Sort by: Relevance (8 Results)
- 03:54 PM Reference Search: **2021-80-2**

- 03:37 PM Filtered Reaction by:
Experimental Protocol:
Selected Synthesis Methods
(508 Results)
- 03:37 PM Filtered Reaction by:
Non-Participating Functional Groups:
Selected Halide
(276 Results)
- 03:52 PM Reaction Detail: 31-358 CAS-21238978
- 03:58 PM Supplier As Drawn Structure Search
Sort by: Relevance (12 Results)



- 04:07 PM Filtered Reaction by:
Discovered Type:
Selected Patent
(75 Results)

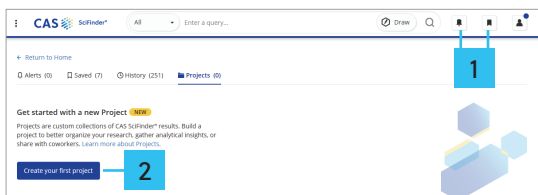
Copyright © 2022 American Chemical Society (ACS). All Rights Reserved.

1. 查看下载的检索历史详情。

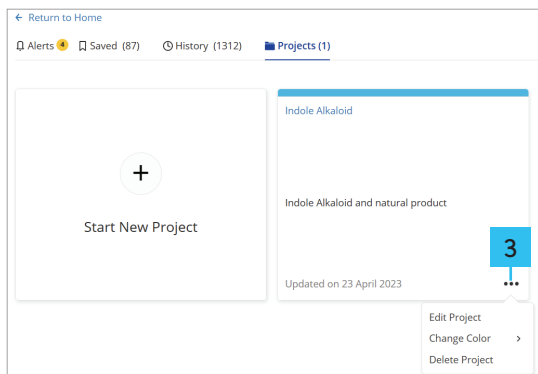


项目 Projects

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。

Antibiotic Indole Sesquiterpene Alkaloid from Greenwayodendron suaveolens with a New Natural Product Framework

Substances (5) Reactions (0) Citing (30) Citation Map Save

JOURNAL
Source
Journal of Natural Products
Volume: 73
Issue: 5
Pages: 1008-1011
Journal Article: Research Support, Non-U.S. Govt
2010
DOI: [10.1021/jnp1001225](https://doi.org/10.1021/jnp1001225)
CODEN: JNPRDF
E-ISSN: 1520-6025
ISSN-L: 0163-3864
Database Information
AN: 2010:492950

By: Williams, Russell B.; Hu, Jin-Feng; Olson, Krista M.; Norman, Vanessa L.; Goering, Matt G.; O'Neil-Johnson, Mark; Eldridge, Gary R.; Starks, Courtney M.

High-throughput natural products chem. methods have led to the isolation of three new (4-6) and two known indole sesquiterpene alkaloids (4, 5) from Greenwayodendron suaveolens. Their structures were determined using CapNMR and MS. Pentacyclindole (1) was determined to possess a new natural product framework. Pentacyclindole (1) and polyalthenol (4) showed activity against clin. isolates of Staphylococcus aureus with polyalthenol (4) demonstrating a MIC₅₀ of 4 µg/mL.

New Natural Product Framework

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。

Substances (5) Reactions (0) Citing (30) Knowledge Graph Save and Alert

Filter Behavior
Filter by Exclude

Document Type
Language
Publication Year
Available at My Institution
Author

Filtering: Concept: 6 Selected X

+ Create New Project
Indole Alkaloid

Save
Add to Project
View: Partial Abstract

50 Selected 122 Results

1

Antibiotic Indole Sesquiterpene Alkaloid from Greenwayodendron suaveolens with a New Natural Product Framework

By: Williams, Russell B.; Hu, Jin-Feng; Olson, Krista M.; Norman, Vanessa L.; Goering, Matt G.; O'Neil-Johnson, Mark; Eldridge, Gary R.; Starks, Courtney M.
Journal of Natural Products (2010), 73(5), 1008-1011 | Language: English; Database: CAPUS and MEDLINE

High-throughput natural products chem. methods have led to the isolation of three new (4-6) and two known indole sesquiterpene alkaloids (4, 5) from Greenwayodendron suaveolens. Their structures were determined using CapNMR and MS. Pentacyclindole (1) was determined to possess a new natural product framework. Pentacyclindole (1) and polyalthenol (4) showed activity against clin. isolates of Staphylococcus aureus with polyalthenol (4) demonstrating a MIC₅₀ of 4 µg/mL.

View More

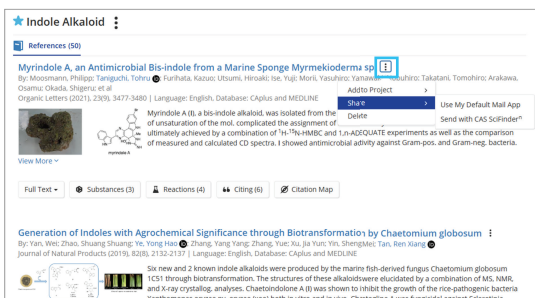
Full Text

Substances (5) Reactions (0) Citing (30) Citation Map



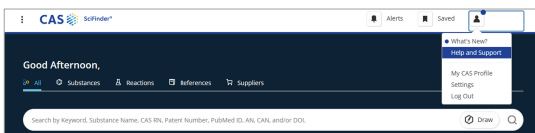
管理项目

在项目页面中,可查看、分享或删除已添加的文献。



CAS SciFinder[®] 支持

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



如需获取有关 CAS SciFinder[®] 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

CAS

A division of the
American Chemical Society



© 2023 American Chemical Society. All rights reserved.

SCIGENZH-CNBR0100794230712