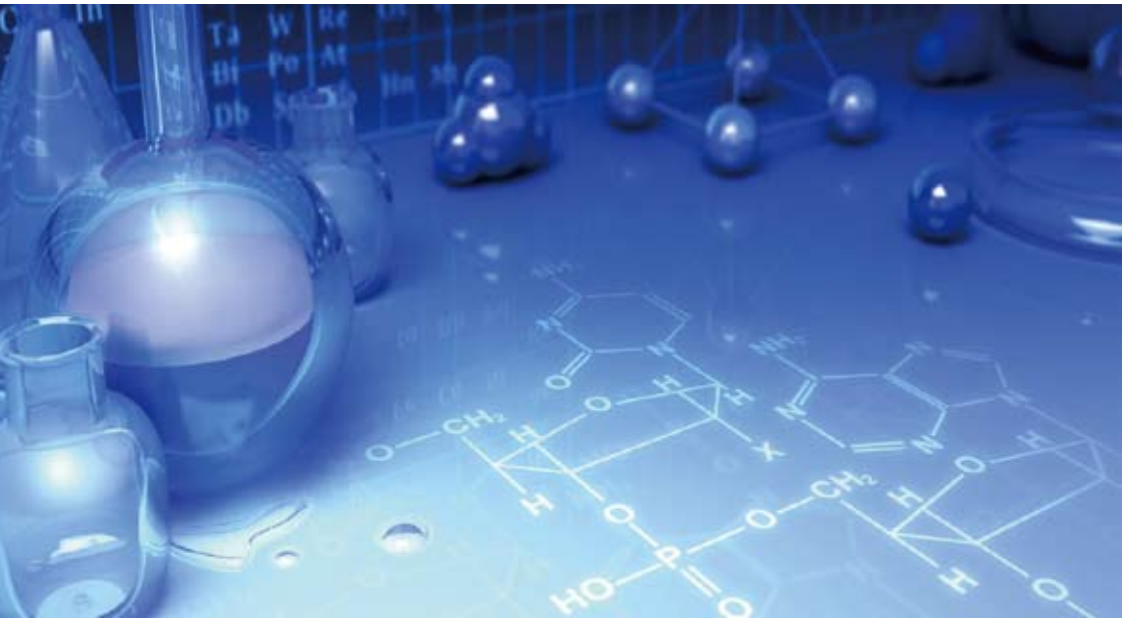
SciFinder®

The choice for chemistry research.™

www.cas.org

https://scifinder.cas.org



The choice for chemistry research.™

SciFinder 快速参考手册

目录

SciFinder中的文献记录.....3

SciFinder中的文献检索方法及举例.....4

SciFinder中的物质记录.....8

SciFinder中的物质检索方法及举例.....9

SciFinder中的反应记录.....14

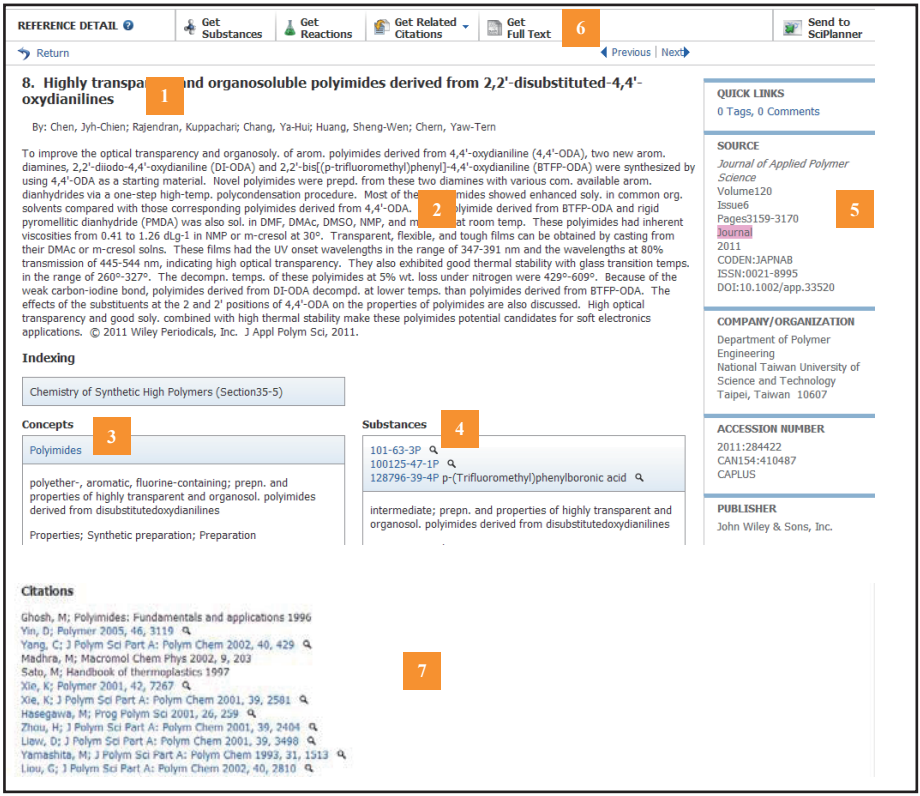
SciFinder中的反应检索方法及举例.....15

SciFinder中的SciPlanner及使用.....18

SciFinder®

The choice for chemistry research.™

SciFinder中的文献记录



1. 题录信息
2. 摘要信息
3. 文献中重要的概念
4. 文献中重要的物质
5. 书目信息
6. 获得文献中的物质，反应，引文等
7. 文献中的引文信息

SciFinder中的文献检索方法

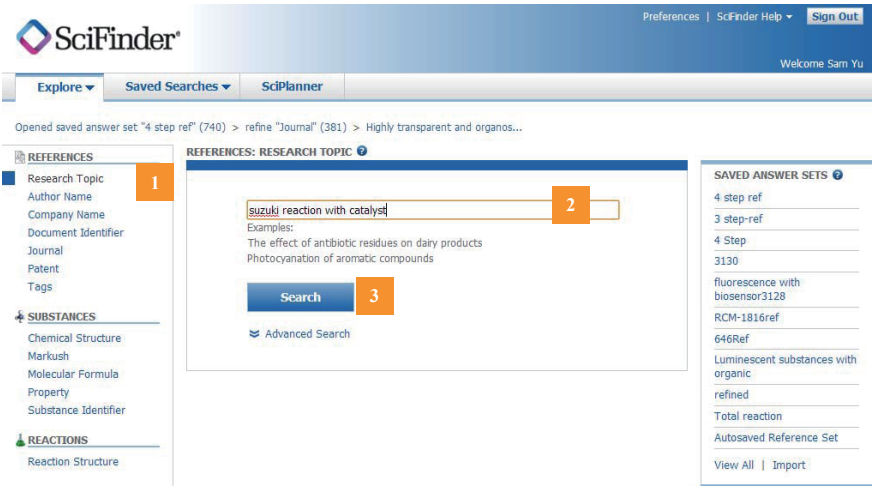
功能方面

- 主题检索
- 作者名检索
- 机构名检索
- 文献标示符检索
- 从物质，反应获得文献

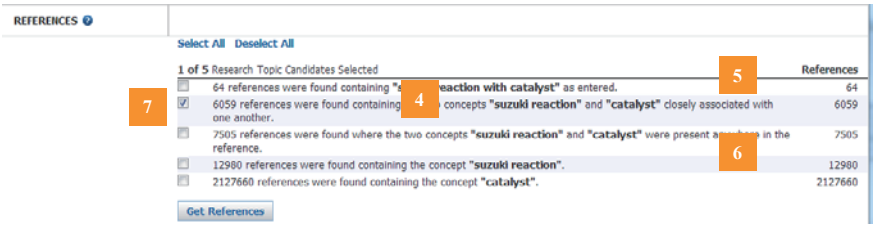
检索方法推荐

- 关注某特定领域的文献——-主题检索
- 关注物质有关的文献————-先获得物质，再获得文献
- 关注某科研人员的文献——-作者名检索

SciFinder中的主题检索

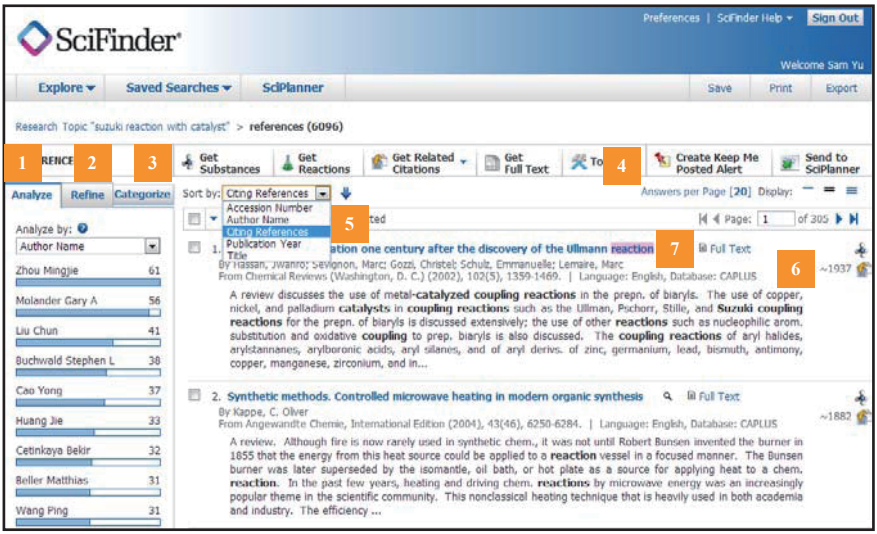


1. 选择Research Topic
2. 输入关键词，用介词（of, with, to, in)将关键词连接
3. 点击Search



4. Concept，表示SciFinder后台做了同义词，近义词扩展
5. Closed associated with one another,表示两个关键词出现在同一个检索字段中
6. Were present anywhere in the reference，表示两个关键词出现在记录的任意位置
7. 一般选择同时包含Concept和Closed associated with one another的选项

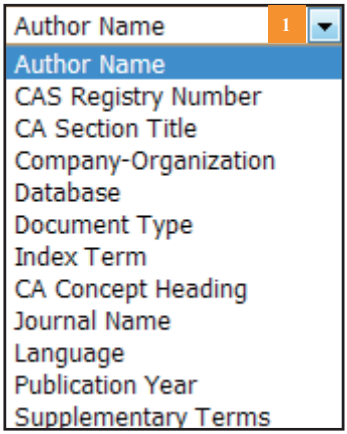
SciFinder中的文献筛选

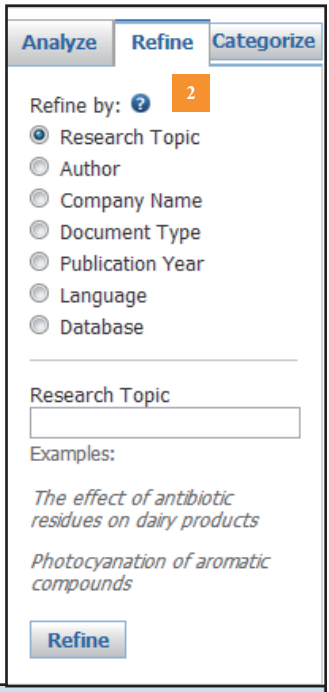


1. Analysis分析工具
2. Refine限定工具
3. Categorize系统分析工具
4. Create Keep me posted alert创建提醒
5. 依据引文排序
6. 文献的被引次数
7. Full Text链接

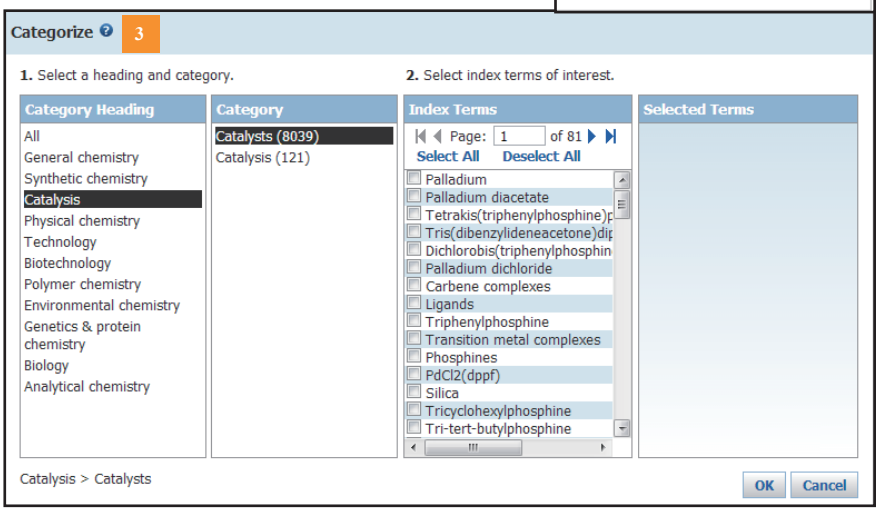
SciFinder®
The choice for chemistry research.™

SciFinder中的筛选工具

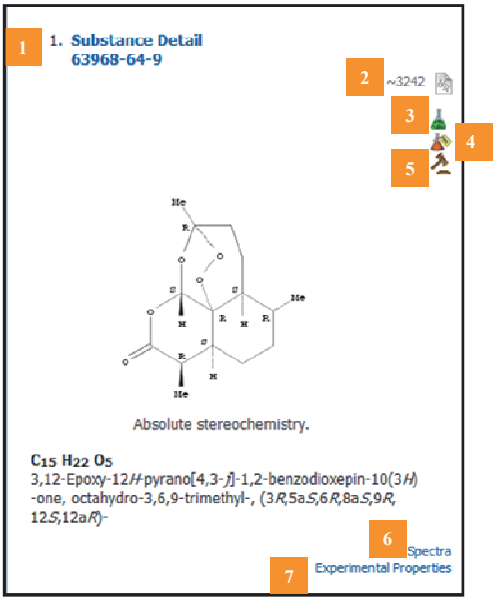




1. Analysis中的12种分析方法
2. Refine中的7种限定方法
3. Categorize系统分类工具，依据学科自动分类



SciFinder中的物质记录



1．物质详情链接
2．物质文献链接
3．物质反应链接
4．物质商品名链接
5．物质管制品链接
6．物质谱图链接
7．物质实验性质链接

SciFinder中的物质检索方法

功能方面

- 物质名称，CAS No检索
- 分子式检索
- 结构检索
- Markush检索
- 理化性质检索

检索方法推荐

- 有机物，天然产物———结构式检索
- 专利中的Markush结构——Markush检索
- 无机化合物————————分子式检索
- 高分子化合物————————分子式和结构检索

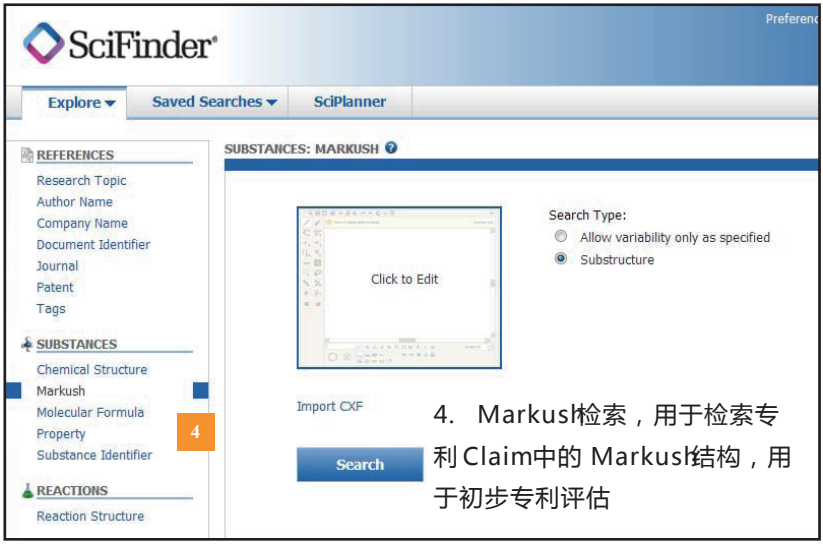
SciFinder中的物质检索举例

1. 物质名称检索，输入物质名称，CAS No，商品名，俗名等

2. 理化性质检索，可以通过实验性质，预测性质检索物质

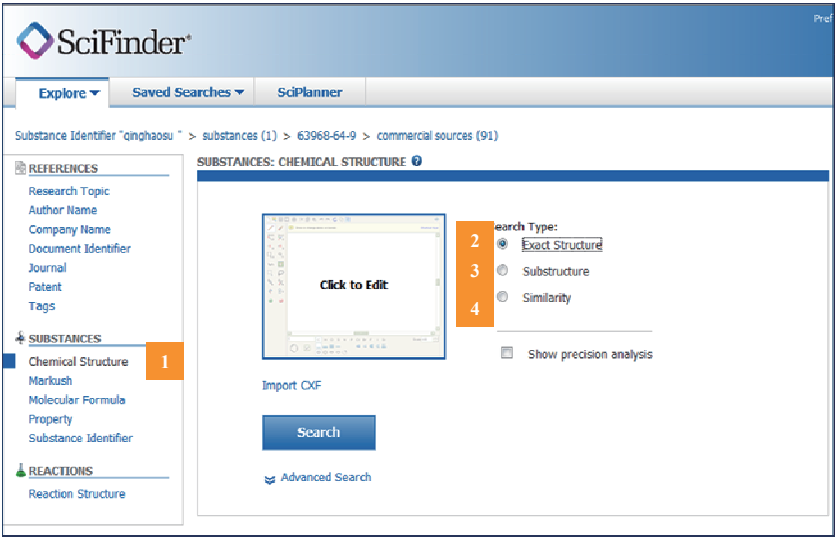
SciFinder中的物质检索举例

3. 分子式检索，分子式输入需要遵守 Hill排序原则



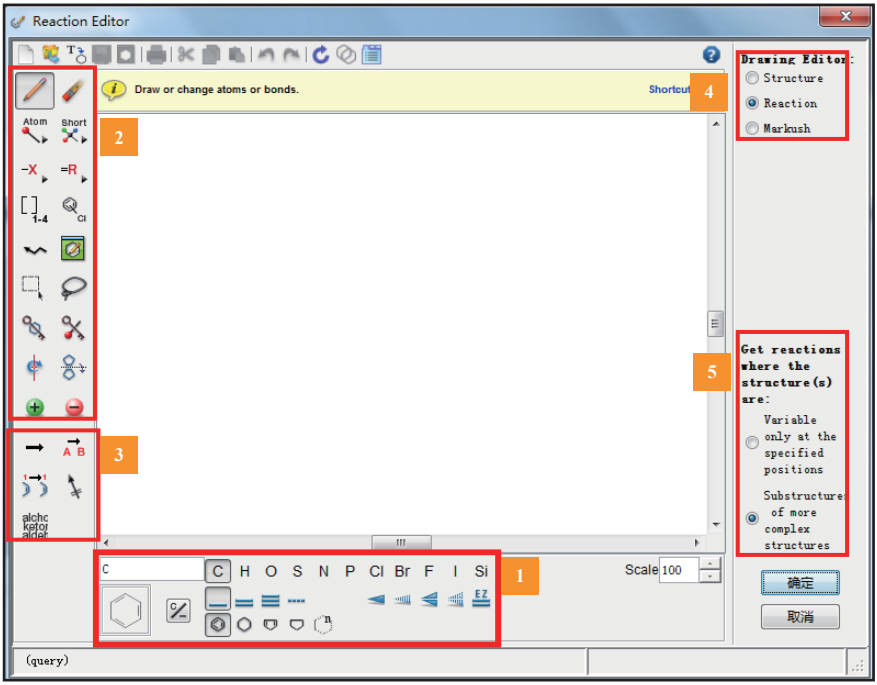
4. Markush检索，用于检索专利Claim中的 Markush结构，用于初步专利评估

SciFinder中的物质检索举例



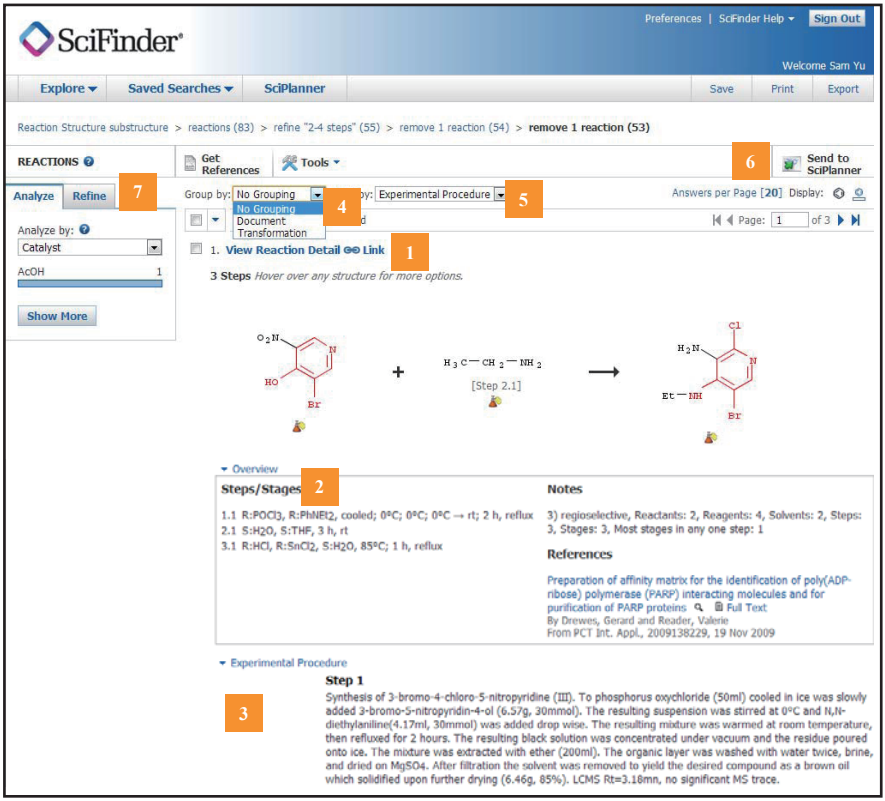
1. 结构检索
2. 精确结构检索：可以检索到具体结构的盐，混合物，配合物，聚合物等，母体结构不能取代，不能修改
3. 亚结构检索：可以检索到结构的修饰修饰结构，母体结构可以被取代，但不可以修改
4. 相似结构检索：可以检索到和母体结构相似度在60分以上的结构，母体结构可以被取代，也可以被修饰，以相似度控制结构的输出。

SciFinder中的结构面板



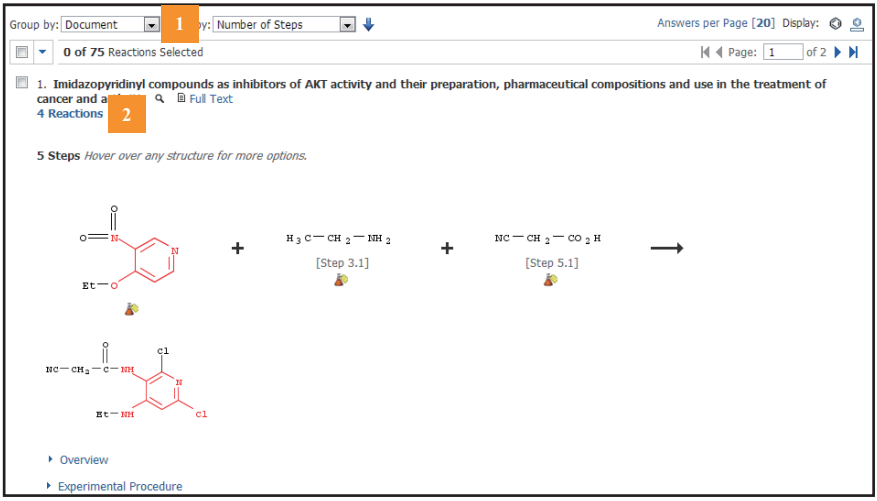
1. 常见原子，环，化学键的绘制
2. 结构绘制工具组
3. 反应定义工具组
4. 结构检索，反应检索，Markush 检索切换
5. 当前检索模式下的功能选择

SciFinder中的反应记录

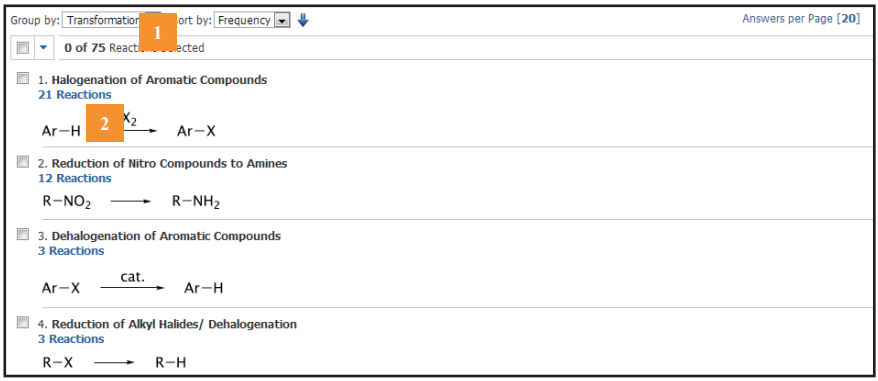


1. 反应详情链接
2. 反应总览
3. 反应实验过程
4. 反应分组
5. 反应排序
6. 将反应推送到SciPlanner
7. 反应分析与限定

SciFinder中的反应分组举例



1. 选择Group by Document
2. 所有来自同一片文献的反应全部合并到一条记录中



1. 选择Group By Transformation
2. 依据反应的变化方式，将具备同样转换的反应总结归纳

SciFinder中的反应检索方法

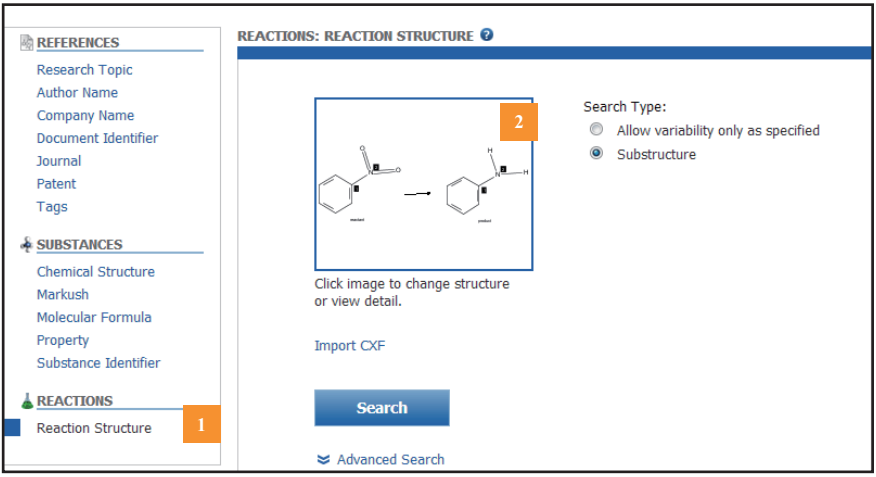
功能方面

- 特定位点上的反应检索
- 亚结构反应检索
- 相似反应检索

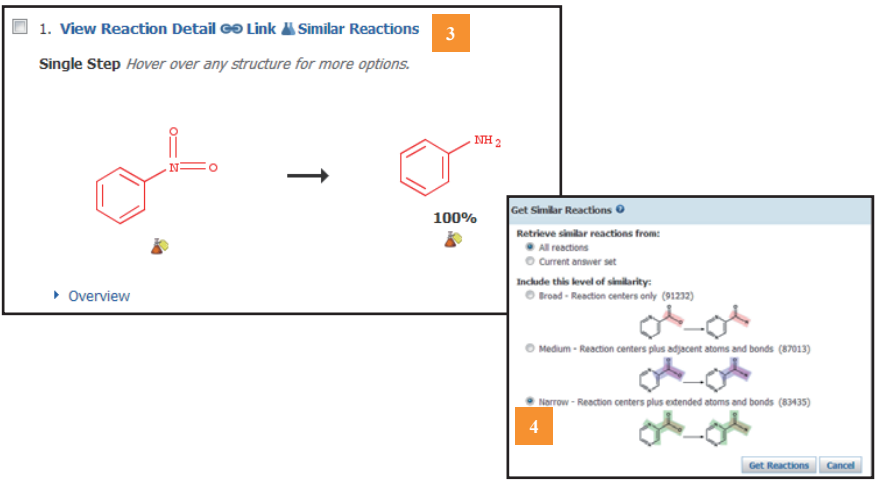
检索方法推荐

- 有明确反应中心或核心结构的反应：特定位点上的反应检索，或亚结构反应检索
- 寻找反应中心一样的单步反应：相似反应检索

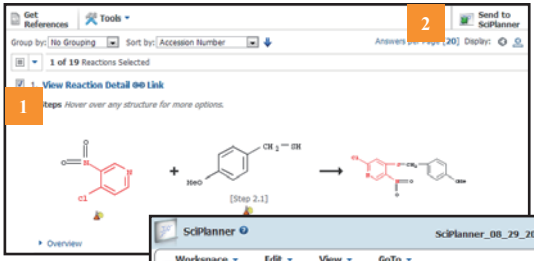
SciFinder中的反应检索举例



1. 反应检索
2. 具有明确反应中心或核心结构的反应，结构绘制好后，直接检索
3. 获得和该条反应的反应中心一样的反应
4. 选择不同的相似级别，获得相似反应

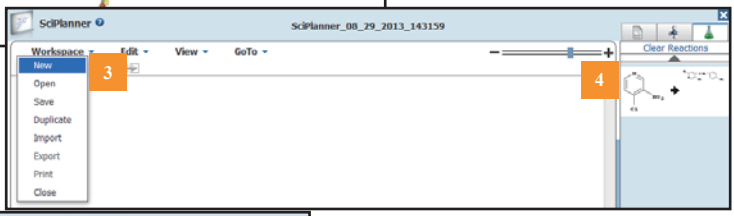


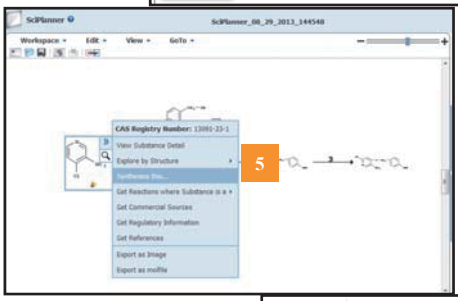
SciFinder中的SciPlanner使用



1. 勾选想要的反应

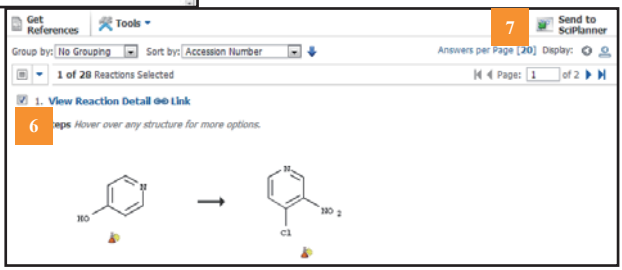
2. 点击屏幕上的Send to Sciplanner





3. workspace 下新建一个文件

4. 进入Sciplanner 将刚推送过来的反应拖动到屏幕中间

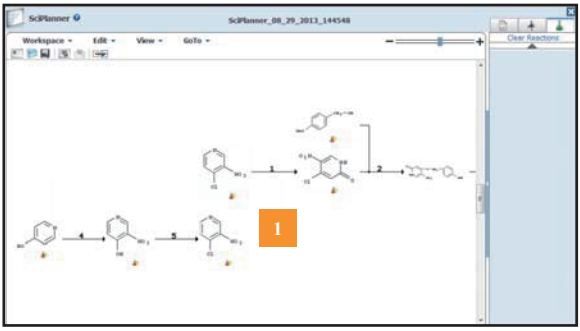


5. 点击反应中的一个中间产物，单击上面的双向箭头，选择Synthesis this

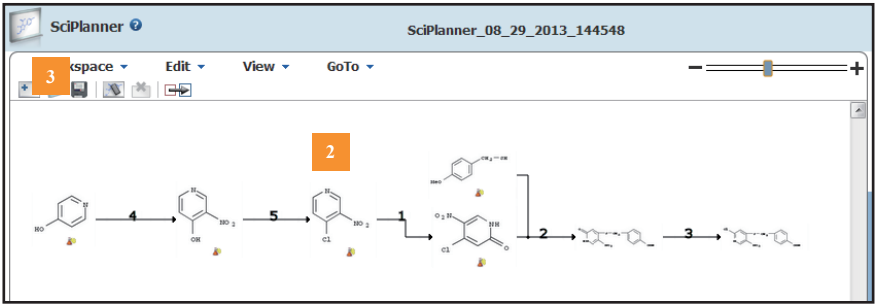
6. 在检索到的反应中，选择中意的反应

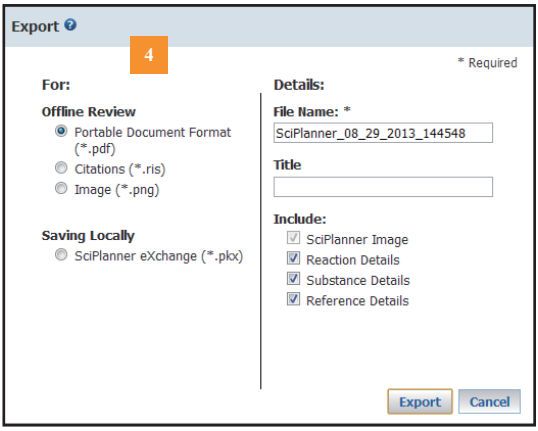
7. 将该条反应继续推送到Sciplanner中

SciFinder中的SciPlanner应用



1. 同前页步骤，将推送过来的反应拖动到SciPlanner中，可以看到两条反应中存在同样的结构





2. 用鼠标将两个同样的结构拖动至重叠状态，两条反应合并

3. 点击Workspace，选择其中的Export输出结果

4. 选择适当的输出格式，输出结果

美国化学文摘社(CAS)，美国化学学会分支机构，是全球化学信息的最权威机构。CAS是全球唯一一家致力于发现、收集和整合所有已知化学物质信息的权威机构。我们的数据库由 CAS 的科学家进行管理和质量控制，并被全世界的化学制品和制药公司、大学、政府机构和专利局公认为最权威和最全面的数据库。 通过将这些数据库与先进的搜索和分析技术 (SciFinder® and STN®), 相结合，CAS 能为科学发明 提供最新、最完整和交联式的信息环境。

想了解更多，请访问 **www.cas.org**

CAS中国代表处
美国艾赛思国际有限公司北京代表处 Tel: 010-62508026/7
Email: china@acsi.info

CAS is a division of the American Chemical Society

scifinder.cas.org