

CAS SCIFINDER<sup>®</sup>

# 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信息与数据间关联可能极具挑战。无论您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<sup>®</sup> 都能助力您更快找到相关见解。




## 目录

欢迎使用 CAS SciFinder <sup>n</sup>	4
检索	5
物质检索	6
物质结果	6
物质详情	8
CAS Draw	9
CAS Lexicon Query Builder	11
文献检索	12
文献结果集	13
文献详情	14
PatentPak Viewer 专利在线浏览	16
Prior Art Analysis 现有技术分析	17
反应检索	17
反应结果集	18
反应详情	19
逆合成反应路线设计	20
供应商结果	24
供应商详情	25
序列检索	25
序列检索结果	26
Bioscape	28
Chemscape	29
保存检索和结果集	30
检索历史	31
CAS SciFinder <sup>n</sup> 支持	31

## 欢迎使用 CAS SciFinder<sup>®</sup>

本快速入门指南将介绍如何开始使用 CAS SciFinder<sup>®</sup> 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<sup>®</sup>

Username or Email Address

**Next**

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

By using CAS SciFinder<sup>®</sup>, you agree to the License Agreements and Policies



### Log In to SciFinder<sup>®</sup>

Welcome, User [Not You?](#)

Password

**Log In**

Keep me signed in

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

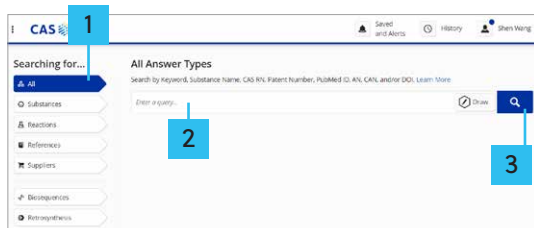
By using CAS SciFinder<sup>®</sup>, you agree to the License Agreements and Policies



## 检索

使用关键词、物质名称、CAS 登记号®、专利号或结构式检索所需结果类型。

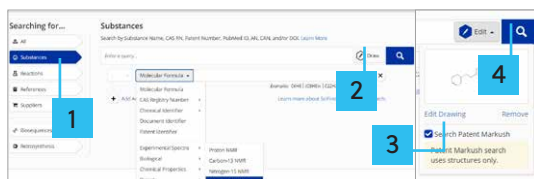
注意：您可在 All 和 References 检索框中输入 DOI。



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“Substances”，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. 选中“Search Patent Markush”。
4. 单击执行检索。

## 物质检索

The screenshot shows the search interface for substances. Callout 1 points to the search input field where the user enters the query. Callout 2 points to the 'Draw' button used to open the structure drawing panel. Callout 3 points to the dropdown menu for selecting search terms like 'Molecular Formula', 'CAS Registry Number', etc. Callout 4 points to the search terms entered in the input field, such as 'C22H26ClN2O5'. Callout 5 points to the logical operator dropdown menu (AND, OR, NOT).

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 displays the search results for 'Camptothecin'. Callout 1 points to the 'As Drawn (58)' button. Callout 2 points to the 'Structure Match' section. Callout 3 points to the 'Filtering' section showing 'Stereochemistry: 2 selected'. Callout 4 points to the 'Sort: Relevance' dropdown. Callout 5 points to the 'View: Full' dropdown. Callout 6 points to the 'Save and Alert' button. Callout 7 points to the chemical structure of Camptothecin. Callout 8 points to the 'Key Physical Properties' table. Callout 9 points to the 'Molecular Weight' value. Callout 10 points to the 'Filter Behavior' section. Callout 11 points to the 'References' count. Callout 12 points to the 'Key Physical Properties' table for the second result. Callout 13 points to the 'Reference Role' section. Callout 14 points to the 'Density (Predicted)' value. Callout 15 points to the 'References' count for the second result. Callout 16 points to the 'Commercial Availability' section. Callout 17 points to the 'Filter Content Report' section.

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 <sup>3</sup>	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
Density (Experimental)	11.24±0.20	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
Most Acidic Temp	25 °C	-



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 (21K) Reactions (2,423) Suppliers (121)

1 2 3 4

5

6

7

8

**Key Physical Properties**

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	348.35	-
Melting Point (Experimental)	259-277 °C (decompt)	-
Boiling Point (Predicted)	757.8x10.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.51x10.1 g/cm <sup>3</sup>	Tempo: 20 °C Press: 760 Torr
pKa (Predicted)	11.2x10.29	Most Acidic Tempo: 25 °C

Experimental Properties | Spectra

Expand All | Collapse All

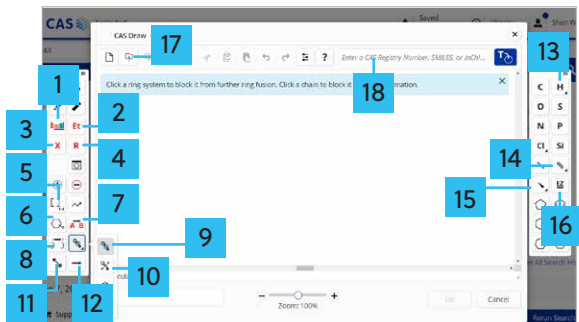
- Other Names and Identifiers
- Experimental Properties
- Experimental Spectra
- Predicted Properties
- Predicted Spectra
- Bioactivity Indicators
- Target Indicators
- Regulatory Information
- Additional Details

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



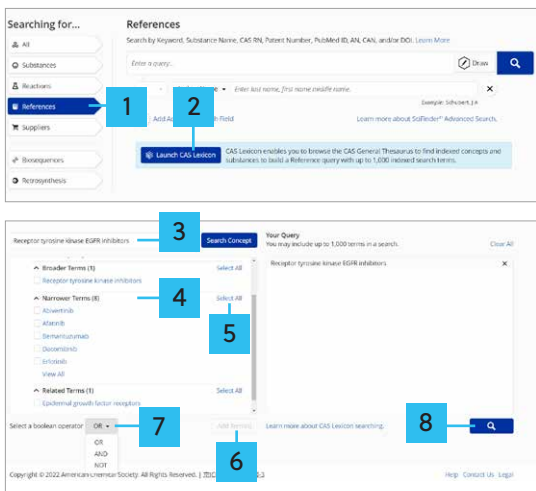
1. 元素周期表。
2. 常见官能团。
3. 可变基团定义工具。
4. R 基团定义工具: 单击 Atoms 打开元素周期表选择目标原子, 点击 Variables 选择可变基团, 点击 Shortcuts 选择常用官能团。当某位点的取代为在两个或更多 (最多 20) 原子、或/和可变基团或/和常见官能团中任意一个即可时, 则可使用 R 工具进行定义。
5. 重复结构单元工具: 可用于绘制在一定范围内重复的原子结构或片段结构, 重复范围可以是 0-20 次。
6. 可变位置定义工具: 可用于绘制环上取代基位置不确定的结构式。
7. 反应角色定义工具: 定义物质在反应中的物质角色
8. 反应原子标记工具: 标记反应前后原料和产物中的同一个原子
9. 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。

10. 原子锁定工具：被锁定的原子或官能团不发生非氢取代。
11. 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。
12. 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。
13. 单击可绘制氢或其同位素标记 D 或 T。
14. 单击可绘制双键、三键或不确定键。
15. 手性键：可用于精确检索旋光异构体。
16. 顺反异构键：可用于精确检索含双键结构的顺反异构体 (ZE 型)。
17. 导入 .cxf 文件或 .mol 文件。
18. 输入物质的 CAS 登记号、smiles 字符串或 InChI，然后单击回车以将其转换为相应物质结构。



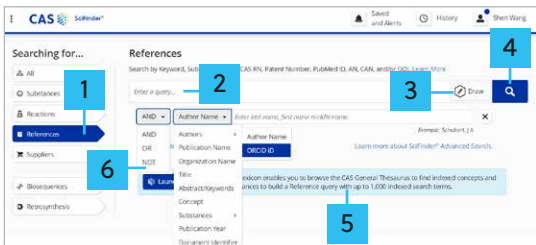
## CAS Lexicon query builder

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<sup>®</sup> 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<sup>®</sup> 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。



## 文献结果集

The screenshot shows the CAS SciFinder search results page. The interface includes a left sidebar with filter categories such as Document Type, Substance Role, Language, Publication Year, and Formulation Purpose. The main area displays search results with columns for document type, number of results, and sorting options. Three search results are visible, each with a title, author information, and abstract. Numbered callouts (1-15) highlight specific UI features: 1. Filter Behavior section; 2. Filter removal (X) and selection (X) buttons; 3. Download icon; 4. Email icon; 5. Save and Alert icon; 6. Document Type filter; 7. Substance Role filter; 8. Sort dropdown menu; 9. View icon; 10. Document title; 11. Document author; 12. Document abstract; 13. Download filter data button; 14. PatentPak button; 15. PatentPak button.

1. 检索相关数据。
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/检索式，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 PatentPak 查看专利同族及获取专利全文。

# 文献详情

**Camptothecin drug combinations and methods with reduced side effects**

1 **Abstract**

2 **Download**

3 **Share**

4 **Close**

5 **Text**

6 **Chemical**

7 **PatentPak**

8 **IPC Data**

9 **Patent Family**

10 **IPC Classifications**

11 **Substances**

12 **Concepts**

13 **Substances (75)**

14 **Role**

15 **Formulations**

16 **Cited Documents**

**Abstract**

Methods, compositions, and kits are provided to reduce the toxicity of camptothecin drugs, e.g., irinotecan (CPT-11). Therapeutic and diagnostic uses are disclosed which employ such drugs in combination with agents that increase conjugative enzyme activity or glucuronidation/phase activity, and agents that decrease tubulin dependent activity, e.g., colchicine. The resultant effects of which are to overcome the significant side effects previously associated with treatment using these drugs.

**Keywords:** camptothecin drug combination; side effect reduction; irinotecan; 4 camptothecin combination; side effect; side transport; anti-inhibitor; camptothecin combination; glucuronidation; transport agent; camptothecin combination; conjugative enzyme agent; camptothecin combination.

**Patent Family**

Patent	Len	IPC Class	PatentPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
US5796349	Eng	B01D 20/00	View	1998-07-28	US7965-623631	1995-04-17
CA2194277	Undetermined	A1	View	1996-01-18	CA1945-0194277	1995-07-05
EP03931127	English	A1	View	1994-01-18	940105-US3334	1995-07-05
AU520905	Undetermined	A	View	1994-01-25	AU1945-20905	1995-07-05
EP163395	Undetermined	A1	View	1997-04-23	EP1605-323474	1995-07-05

**IPC Data**

**Concepts**

**Substances**

**Substances (75)**

140-140-140

**Substance 1:** C<sub>22</sub>H<sub>32</sub>N<sub>4</sub>O<sub>6</sub> Lurtotecan  
 Absolute stereochemistry shown. Rotation (+)  
**Role:** Adverse Effect, Including Toxicity; Biological Activity or Effector, Except Adverse; Biological Study, Unclassified; Therapeutic Use, Biological Study, Uses

**Substance 2:** C<sub>31</sub>H<sub>32</sub>N<sub>4</sub>O<sub>6</sub> Carbolic acid, (2,3,10,11,12,13-hexahydro-10-methoxy-9-methyl-1,3-dioxo-9,13-epoxy-1H,3H-indolo[1,2,3-g]3,2'-imino[pyrrolo[3,4-f][1,7]benzodiazonin-11-yl)methyl-, ethyl ester. (9S,10S,11S,12R)  
**Role:** Biological Activity or Effector, Except Adverse; Biological Study, Unclassified; Therapeutic Use, Biological Study, Uses

**Substance 3:** C<sub>31</sub>H<sub>32</sub>N<sub>4</sub>O<sub>6</sub> 280-446  
 Absolute stereochemistry shown  
**Role:** Biological Activity or Effector, Except Adverse; Biological Study, Unclassified; Therapeutic Use, Biological Study, Uses

**Formulations**

**Cited Documents**



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. 查看该文献的引文地图（包括引用和被引用文献）。
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. 查看基本专利和同族专利的 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. 该文献披露的制剂/配方信息。
15. 该文的参考文献。

## PatentPak Viewer 专利在线浏览

The screenshot displays the PatentPak Viewer interface. On the left, there is a sidebar with a 'Key Substances in Patent' section, a chemical structure, and a 'CAS RN' field. The main area shows a patent document with several entries. Five blue callout boxes are overlaid on the interface: 1 points to the 'DOWNLOAD' button, 2 points to the 'PDF' button, 3 points to the 'PAGE' dropdown menu, 4 points to a blue highlight on the text '12.44', and 5 points to a chemical structure in the 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。

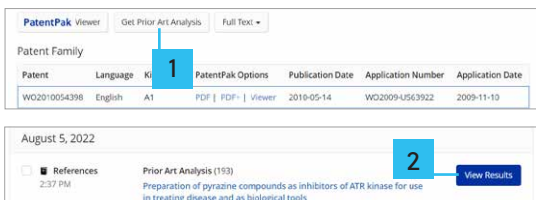




## Prior Art Analysis 现有技术分析

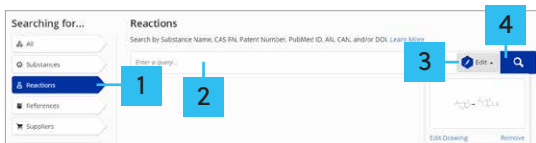
在专利文献详情中，可以选择进行现有技术分析，并在检索历史中查看结果。

- 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



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

## 反应检索



1. 选择 Reactions。
2. 可以输入物质名称、CAS 登记号、专利号、DOI 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 interface for chemical reaction results. It features a sidebar with filter options (1), a main results area with a reaction scheme (7, 8, 9, 10), and a detailed view of a reaction step (11, 12, 13, 14, 15, 16, 17). The interface includes search filters, a list of results, and detailed information for each reaction, such as reagents, solvents, and experimental conditions.

1. 检索相关数据。
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. 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. 按反应或文献对反应进行分组。
9. 更改结果显示。
10. 查看物质供应商。
11. 单击结构图片，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。
12. 单击打开该反应的文献详情页面。
13. 查看反应详情页面。
14. 查看反应实验步骤。
15. 点击 PatentPak 可在线阅读或下载专利。
16. 查看其他的访问链接。
17. 点击以下载所有或应用筛选项的内容（筛选项和和结果数量）的 .xlsx 文件。



## 反应详情

Multi-Step Reaction for Scheme 10, Reaction 1

Steps: 2

Suppliers (22)

Suppliers (22)

Step 1 Step 2

Number: 01-094-CAS-450095

Step	Reagents	Catalysts	Solvents
1	Sodium bromide Thionyl chloride	-	Dimethylformamide

Experimental Protocols

Synthetic Methods	Experimental Procedure
Products	2-Pyridine-2,3,4,5-tetracarboxyl chloride, 4-chloro-, hydrochloride (1:1)
Reactants	2-Pyridine-2,3,4,5-tetracarboxylic acid
Reagents	Sodium bromide Thionyl chloride
Solvents	Dimethylformamide
Procedure	1. Add 2,3,4,5-tetracarboxylic acid (10-dc; 200 mg, 3.15 mmol; CDCl <sub>3</sub> ), thionyl chloride (5.0 mL), sodium bromide (96 mg, 6.33 mmol) and DMF (0.080 mL) to a four-bottom flask. 2. Heat the mixture at reflux for 72 h. 3. Cool the mixture to room temperature. 4. Dilute the reaction with toluene. 5. Concentrate the mixture in vacuo. 6. Repeat the work-up. 7. Place the crude material under high vacuum for several hours to afford 4-chloro-3,5,6-dipyridinyl chloride hydrochloride.

Transformation: Halogenation of Aromatic Compounds

PATENT  
Preparation of deuterated diaryl urea derivatives for treatment of diseases  
By: Liu, Julie  
World Intellectual Property Organization  
PatentPak Full text

Application Number: WO2009-1050595  
Application Date: 2009-05-12  
Kind Code: A2  
Assignee: Concert Pharmaceuticals, Inc., United States

1. 下载详情。
2. 通过电子邮件发送详情。
3. 保存详情。
4. 查看物质供应商。
5. 单击 Step 以查看某一步的反应。
6. 查看生成同一产物的其他反应。
7. 点击获得反应的文献信息详情页面。
8. 点击查看实验详情。
9. 单击 PatentPak 可在线阅读或下载专利全文。
10. 查看其他的访问链接。

## 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，已被报道结构或未报道的结构设计逆合成反应路线。

The screenshot shows the Retrosynthesis tool interface. On the left, a sidebar lists various search categories, with 'Retrosynthesis' selected and highlighted by a blue box labeled '1'. The main workspace displays a chemical structure of a complex molecule, with a blue box labeled '2' pointing to it. At the bottom right, there is a button labeled 'Start Retrosynthetic Analysis' with a blue box labeled '3' pointing to it. The molecular formula is shown as C<sub>17</sub>H<sub>12</sub>F<sub>3</sub>O<sub>2</sub>S (355.34).

1. 点击页面左侧的 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。

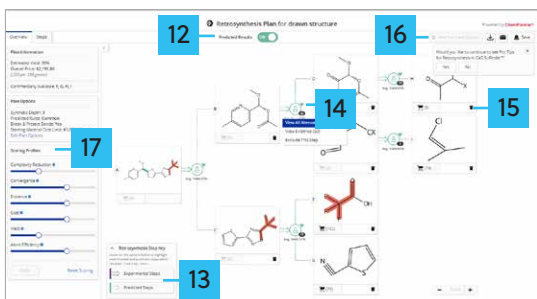
The screenshot shows the substance detail window for a specific compound. The CAS RN is 2408121-76-4 and the CAS Name is Pyridine, 2-[methoxy[5-[5-(trifluoromethyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl]-2-thienyl]meth...]. The chemical structure is displayed in the center. A blue box labeled '4' points to the 'Start Retrosynthetic Analysis' button in the left sidebar. Other options in the sidebar include 'Substance Detail', 'Reactions (1)', 'Synthesize (1)', 'References (1)', and 'Suppliers (0)'. At the bottom, there are buttons for 'Edit Structure', 'Reset', and a download icon.

4. 如果是已报道的结构，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。





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，但键级可能发生变化。
10. 单击 Clear All bond selections，可取消所有的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. 页面中的反应路线中，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，可在路线中的删除该物质。
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
- Evidence: 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

B → D + E Alternative Steps (40) — 18

Filter by

- Alternative Step Type
  - Predicted (40)
- Stereochemistry
  - Non-Selective (40)

1 of 27 Predicted Step

Selected View Evidence (83) Average Yield: 54% — 19

2 of 27 Predicted Step

20 Select View 3 similar Alternatives View Evidence (18) Average Yield: 50%

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 searching suppliers. On the left, there is a 'Filter Behavior' sidebar with sections for 'Preferred Suppliers', 'Supplier', 'Purity', 'Quantity', 'Ships Within', 'Stock Status', 'Order From Supplier', and 'Country/Region'. Below this is a 'Filter Content Report' section with a download icon. The main area displays a table of search results with columns for 'Supplier', 'Substance', 'Purity', 'Purchasing Details', and 'Availability'. A filter bar at the top shows 'Purity: 95-99%' with a clear button. The table lists three results, each with a checkmark and a thumbs-up/down icon. Callout numbers 1-12 point to various UI elements: 1 (Purity filter), 2 (Clear filter button), 3 (Download icon), 4 (Email icon), 5 (Sort dropdown), 6 (Supplier name), 7 (Substance name), 8 (Checkmark), 9 (Thumbs icon), 10 (Purchasing details), 11 (Filter report download), and 12 (Order from supplier).

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. 点击打开物质信息窗口，查看物质信息、反应信息、生成逆合成路线，编辑或下载结构。
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项的内容（筛选项和结果数量）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 'Supplier List' page for AstaTech. It features a table of suppliers with columns for 'Preferred Supplier', 'Web', 'Email', 'Phone', 'Item Details', and 'Substance Information'. The 'Preferred Supplier' column has a thumbs-up icon (1) and a thumbs-down icon (2). The 'Substance Information' column shows 'CAS Registry Number' (3), 'CAS Name' (4), and a chemical structure (6). The 'Item Details' column shows 'Chemical Name', 'Order Number', 'Purity', 'Quantity Price', 'Stock Status', 'Ships Within', 'Pricing Information', and 'Order From Supplier' (5).

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<sup>n</sup> 主页面的左侧菜单中选择 Biosequences，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 'Biosequences' search interface. It includes a search bar (1) with a 'Search' button (4). The search results are displayed in a table (2). The search parameters are shown in a sidebar (3) with a 'Start Biosequence Search' button (8). The search parameters include 'Sequence Type' (4), 'Search Within' (5), 'Link Total Sequence Results to' (6), 'Advanced Biosequence Search' (7), 'Match with Gaps?' (3), 'Gap Costs' (3), 'Existence Extension' (3), 'Query Coverage %' (3), 'Word Size' (3), 'Scoring Matrix' (3), 'BLAST Algorithms' (3), 'E-value' (3), and 'Exclude Low Complexity Regions' (3).

1. 选择检索方法。
2. 直接输入或粘贴核苷酸或氨基酸序列单字母代码至页面中央的输入区。
3. 或者单击 Upload Sequence, 上传 .txt 或 .fasta 序列格式文件。  
**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: Nucleotides (RNA 或 DNA 库) 或 Proteins (蛋白或肽序列库)。
6. 选择呈现序列检索结果数量上限为 10 至 20000。
7. 可选择使用高级检索, 并调整 BLAST 或 Motif 检索的参数。
8. 单击 Start Biosequence Search, 检索生物序列。

## 序列检索结果

要查看序列结果, 请转到最近检索历史 (Recent Search History), 可在 CAS SciFinder<sup>®</sup> 主页面的底部或使用该页面顶部的 View Search History 按钮对其进行访问。每个序列检索都有一个 View Results 按钮, 可通过该按钮检索结果。





1. 获取披露该序列的文献结果。
2. 单击查看查询序列。
3. 下载结果。
4. 通过电子邮件发送结果。
5. 根据序列比对一致性百分比, E-Value, 查询序列覆盖率, 以及目标序列覆盖率对结果进行排序。
6. 更改结果显示。
7. 创建生物序列专利可视化分析地图。
8. 点击查看目标序列信息 (如有关联, 可通过 CAS 登记号和 NCBI identifier 超链接、序列长度、获取序列物质详情和来自 NCBI 中序列详情)。
9. 点击查看包含匹配序列的专利/期刊结果。
10. 点击查看披露该序列的文献结果。
11. 选择筛选项以缩小结果范围。

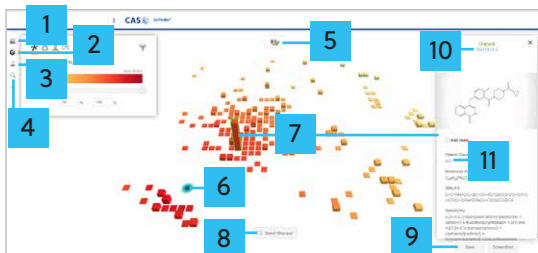
# Bioscape



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（如果存在）。
5. 单击查看相关专利。
6. 查询的序列。
7. 单击一栏以查看其专利数和序列长度。
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。

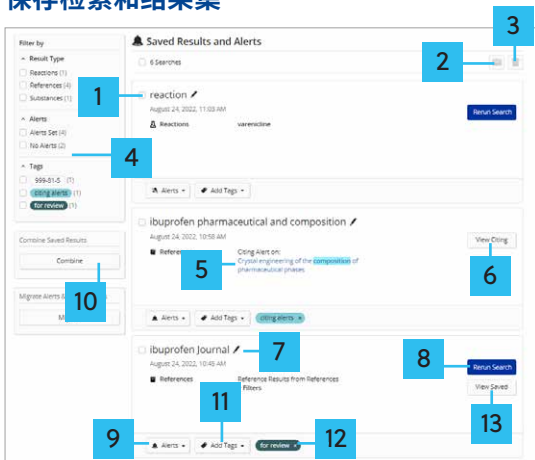


## Chemscape



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。

## 保存检索和结果集



1. 单击以选中保存的项目。
2. 通过电子邮件发送选定的项目。
3. 删除选定的项目。
4. 筛选保存的项目。
5. 单击打开文献详情。
6. 查看此篇保存文献的引文信息。
7. 编辑名称。
8. 重新运行保存的检索式，获得最新检索结果。
9. 设置或编辑结果更新提醒，或查看更新的结果集。
10. 合并之前保存过的检索结果。
11. 创建/添加标签。
12. 单击删除标签。
13. 显示保存的结果集。



## 检索历史

The screenshot shows the CAS SciFinder search history page. On the left, there is a 'Filter by' section with 'Results Type' and 'Date' filters. The 'Results Type' section includes options like 'All (21)', 'Patent Markush (3)', 'Prior Art Analysis (1)', 'Reactions (15)', 'References (76)', 'Retrosynthesis (4)', 'Substances (44)', and 'Suppliers (9)'. The 'Date' section shows a calendar for August 2022. The main area displays a list of search results with columns for search type, time, and results. Five blue callout boxes with numbers 1 through 5 are overlaid on the interface: 1 points to the 'Results Type' filter, 2 points to the 'Search History' header, 3 points to the 'Run Search' button, 4 points to the 'Edit Search' button, and 5 points to the date '5' in the calendar.

1. 按照之前的检索类型进行筛选。
2. 删除检索。
3. 重新运行检索以获得最新检索结果。
4. 编辑检索式，然后重新运行。
5. 显示指定日期范围的检索历史。

## CAS SciFinder<sup>®</sup> 支持

获取 CAS SciFinder<sup>®</sup> 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 footer of the CAS SciFinder website. It includes the copyright notice 'Copyright © 2022 American Chemical Society. All Rights Reserved.' and the contact information '1-800-424-9300'. There are links for 'Help', 'Contact Us', and 'Legal'. A dropdown menu is open, showing options for 'My CAS Profile', 'What's New?', 'Help', and 'Log Out'.

如需获取有关 CAS SciFinder<sup>®</sup> 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）分支机构。

**欢迎联系我们 [cas.org](https://cas.org)**



010.62508026/7 | [china@acs-i.org](mailto:china@acs-i.org)



**ACS**  
International

**CAS**

A division of the  
American Chemical Society



© 2023 American Chemical Society. All rights reserved.

SCIGENZH-CNBR0100794220816