

目录

第一章 简介.....	4
1.1 SciFinder 概况.....	4
1.2 SciFinder 内容.....	4
1.3 SciFinder 注册.....	6
1.4 SciFinder 使用.....	8
第二章 文献检索.....	9
2.1 主题检索.....	9
2.1.1 分析功能 (Analysis).....	11
2.1.2 通过分析功能进行二次检索.....	12
2.1.3 限定功能 (Refine).....	13
2.1.4 系统分类功能 (Categorize).....	15
2.1.5 文献结果排序功能 (Sort by).....	16
2.2 定题服务功能 (Keep me posted).....	16
2.2.1 如何查看定题服务 (keep me posted) 的结果.....	17
2.3 文献中的相关物质、反应获取.....	18
2.3.1 相关物质获取 (get substances).....	18
2.3.2 相关反应获取 (get reactions).....	18
2.4 获取引用与被引用文献 (get citing/cited references).....	19
2.5 检索结果的全文链接、组合、保存、打印等.....	19
2.5.1 链接全文 (Full Text).....	19
2.5.2 结果保存 (save).....	20
2.5.3 查看已保存的结果.....	20
2.5.4 对已保存文献结果集进行组合.....	21
2.5.5 打印结果 (print).....	22
2.5.6 导出结果.....	23
2.6 检索历史记录.....	24
2.6.1 通过导航条获取之前某步的检索结果.....	24
2.6.2 回顾检索历史 (History).....	25
2.7 作者名检索 (Author Name).....	25

2.8 机构名称检索 (Company Name)	26
2.9 期刊和专利检索	27

第三章 物质检索 29

3.1 物质检索概览及物质结果界面	29
3.1.1 物质检索 (Explore Substances)	29
3.1.2 物质检索答案集的界面	29
3.2 物质标识符检索 (Explore Substances by Substance Identifier)	31
3.2.1 概览	32
3.2.2 检索举例	32
3.2.3 物质详情	33
3.2.4 物质标准菜单	36
3.3 结构编辑器 (Structure Editor)	37
3.3.1 启动结构编辑器的方法	37
3.3.2 结构编辑器的构成	39
3.4 结构检索	63
3.4.1 概览	63
3.4.2 精确结构检索 (Exact research)	63
3.4.3 亚结构检索 (Substructure Search)	70
3.4.4 相似结构检索	89
3.5 Markush 检索	96
3.5.1 概览	96
3.5.2 检索方法举例	97
3.6 分子式检索 (Molecular Formula)	98
3.6.1 分子式输入规则:	98
3.6.2 分子式检索举例	99

第四章 化学反应检索 101

4.1 概述	101
4.2 反应结构编辑器	102
反应箭头工具 (Reaction Arrow Tool)	102
反应角色工具 (Reaction Role Tool)	103
原子对应工具 (Atom Mapping Tool)	103

反应位置标记工具 (Reaction Site Marking)	103
官能团工具 (Functional Group Tool)	104
4.3 从结构去检索反应 (Search from One Side of Reaction)	104
4.3.1 多步反应显示 (View Reaction Detail)	108
4.3.2 有关化学反应的文献 (Get References)	108
4.4 分析反应结果 (Analyze Reaction Result)	109
4.4.1 作者名分析 (Author Name)	110
4.4.2 催化剂分析 (Catalyst)	111
4.4.3 公司和组织机构名分析 (Company/Organization)	112
4.4.4 反应文献类型分析 (Document Type)	114
4.4.5 反应过程分析 (Experimental Procedure)	114
4.4.6 期刊名分析 (Jornal Name)	115
4.4.7 语种分析 (Language)	117
4.4.8 反应步骤分析 (Number of Steps)	118
4.4.9 反应产率分析 (Product Yield)	119
4.4.10 出版年限分析 (Publication Year)	120
4.4.11 溶剂分析 (Solvent)	121
4.5 反应结果限定 (Refine)	123
4.5.1 限定反应化学结构 (Refine Reaction Structure)	124
4.5.2 限定反应产率 (Product Yield)	125
4.5.3 限定反应步骤 (Number of steps)	125
4.5.4 限定反应类型 (Reaction of Classification)	126
4.5.5 排除反应类型 (Excluding Reaction Classification)	126
4.5.6 排除不参与反应的官能团 (Non-participation functional groups)	127
4.6 相似反应检索 (similar Reactions)	127
4.7 指定反应物/试剂和产物的化学反应 (Define the Reactant/Reagent and Product)	128
4.8 官能团检索反应 (Search by functional group)	130
4.9 组和官能团和结构检索 (Search by combination of functional group and structure) ..	133
4.10 Sciplanner	135
4.11 返回历史检索界面 (Back to the history interface)	140

第一章 简介

1.1 SciFinder 概况

SciFinder 的前身是美国《化学文摘》(Chemical Abstracts, 简称 CA)。CA 是世界最大的化学文摘库,也是目前世界上应用最广泛,最为重要的化学、化工及相关学科的检索工具。CA 创刊于 1907 年,由 CAS 编辑出版,被誉为“打开世界化学化工文献的钥匙”。CA 报道的内容几乎涉及了化学家感兴趣的所有领域,其中除包括无机化学、有机化学、分析化学、物理化学、高分子化学外,还包括冶金学、地球化学、药理学、毒物学、环境化学、生物学以及物理学等诸多学科领域。

随着网络技术的发展,1995 年 CAS 推出了 SciFinder 联机检索数据库。自推出以来,SciFinder 一直都是全世界的科学家进行化学课题研究、成果查阅、学术期刊浏览、以及把握科技发展前沿的最得力工具。SciFinder 数据库整合了 Medline 医学数据库、全球 200 多个国家和地区的 60 多种语言的 1 万多份期刊、62 家专利机构的专利、评论、会议录、论文、技术报告和图书中的各种化学研究成果。内容不仅涵盖了 CA 从 1907 至今的所有内容,更整合了其他 5 个数据库(包括生物医学,物质,反应数据库),能通过主题、分子式、结构式和反应式等多种方式进行检索。SciFinder 超越了检索工具的范畴,能够使研究过程更有效率,更有创意。

1.2 SciFinder 内容

SciFinder 包含六大数据库:

- CAplus 覆盖化学相关众多学科领域的多种参考文献。
- Registry 世界上最大的物质数据库。
- CASReact 反应信息数据库。
- ChemList 查询备案/管控化学信息的工具。
- Chemcats 化学品的商业信息,包括价格、质量等级、供应商信息。
- MedLine 美国国立医学图书馆出品的生命科学医学信息数据库。

SciFinder 数据库一览表

	CAplus/Medline	CAS REGISTRY	CASREACT	CHEMLIST	CHEMCATS
记录数	CAplus>3500 万条 Medline>1800 万条	>6500 万个有机物和无机物 >6300 个基因序列	>3940 万条反应 >1400 万制备信息	>29.3 万储存/管制品信息	>6300 万商业产品信息
内容	CAplus-化学及相关科学的期刊论文和专利文献 Medline-由 NLM 出版, 广泛覆盖生物医学的各个领域	多种不同类型的物质信息, 包括: △别名 △分子式 △环分析数据 △结构式 △实验及预测数据 △文献信息	反应信息包括: △反应物和产物的结构式 △所有产物、试剂、溶剂的 CAS 登记号 △详细的反应条件	全球主要市场受管制的化学品: △化学名称 △别名 △管制目录 △化学品储备状态	商业化学品及全球供应商的信息: △CAS 登记号 △供应商信息 △品质 △价格
覆盖范围	CAplus △19 世纪早期至今 △1 万多份期刊 △1500 多份核心期刊 △全球 62 家专利机构的专利 △会议公报及论文 △技术报告 △学位论文 △书籍 △综述 △电子刊物 △网络预印版 Medline △1949 年至今 △4800 种生物医学期刊	△来自期刊、专利、化学品目录及优质网络资源中的物质, 可回溯至 19 世纪早期 △基因库序列 △有机物及 -合金 -矿物 -配合物 -混合物 -聚合物 -盐 -序列 -有机金属 -蛋白质 -无机物	△1840 年至今 △来自期刊、专利、学位论文和经评估的参考资料	△从 1985 年 TSCA 目录及附录中摘录的原始数据 △1778-1987 年美国联邦政府登记物质 △13 项国家目录 △州列表	△>1089 家全球商业化学品供应商 △>1215 个化学品目录
更新	每天 4500 条记录	每日新增 1.2 万新物质	每周新增 3-5 万单步及多步反应	每周更新	每周更新

1.3 SciFinder 注册

SciFinder 注册，仅适合高等院校和中科院用户，注册步骤如下：

- 1) 访问用户注册网页。使用 SciFinder 是以互联网的用户形式注册，允许用户建立自己的 SciFinder 用户名和密码。用户要先从学校指定的 IP 地址访问图书馆网页，点击注册链接，打开注册网页，单击 Next。



- 2) 输入联系信息。用户的姓名和电子邮件必填，其它信息则是帮助 CAS 更好地了解用户，从而改进产品和服务。
- 3) 指定用户名和密码。

用户名必须是唯一的，且包含 5-15 个字符。它可以只包含字母或字母组合、数字和/或以下特殊字符：

- -（破折号）
- _（下划线）
- .（句点）
- @（表示“at”的符号）

密码必须包含 7-15 个字符，并且至少包含三个以下字符：

- 字母
- 混合的大小写字母
- 数字
- 非字母数字的字符（例如 @、#、%、&、*）

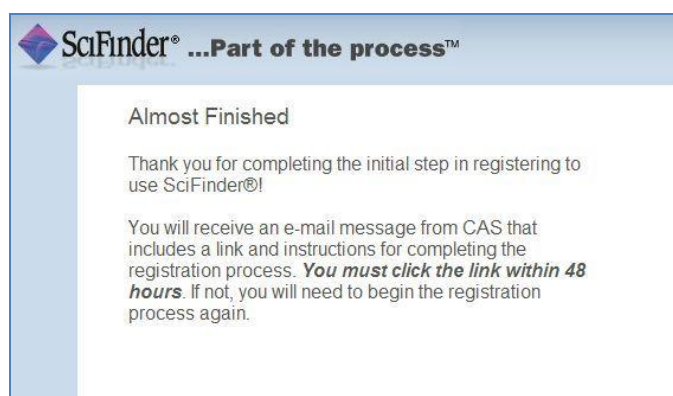
4) 从下拉列表中选择一个密码提示问题并给出答案。单击 Register。

--CONTACT INFORMATION--	
First Name:	<input type="text"/>
Last Name:	<input type="text"/>
Email:	<input type="text"/>
Confirm Email:	<input type="text"/>
Phone Number:	<input type="text"/>
Fax Number:	<input type="text"/>
Area of Research:	<input type="text" value="Select one"/>
Job Title:	<input type="text" value="Select one"/>

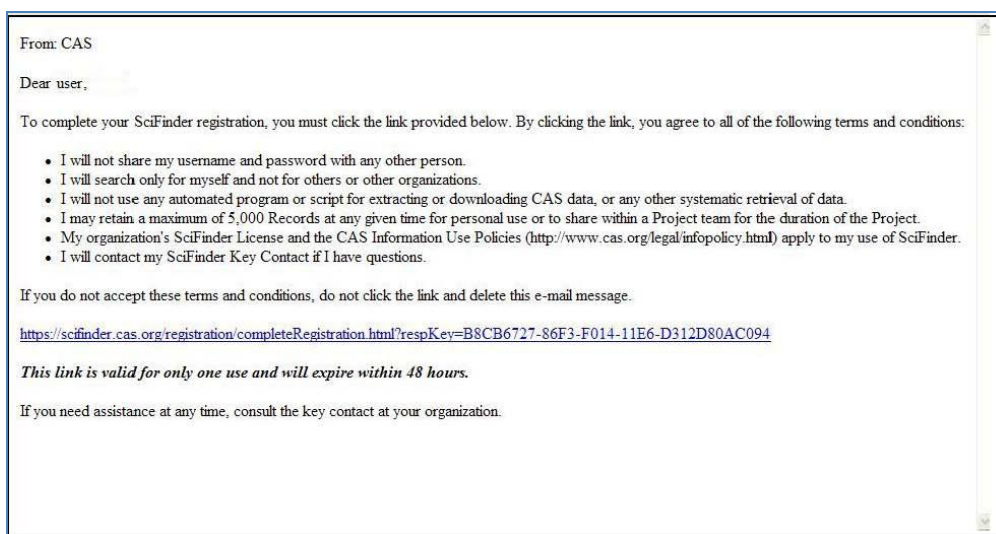
--USERNAME AND PASSWORD--	
Username:	<input type="text"/>
Password:	<input type="password"/>
Re-enter Password:	<input type="password"/>

--SECURITY INFORMATION--	
Security Question:	<input type="text" value="Select one"/>
Answer:	<input type="text"/>

系统消息显示，CAS 将发送确认邮件至用户在表格中提供的邮件地址。如用学校邮箱注册，请注意查收垃圾邮箱。



5) 确认。打开 CAS 的电子邮件，阅读并接受 SciFinder 的使用条款，单击邮件内的链接完成注册过程。



系统显示注册成功确认页面。



1.4 SciFinder 使用

SciFinder Web 对用户系统有以下要求：Windows 用户支持 IE 8.x 或 FireFox 2.x；Mac 用户支持 Firefox 和 Safari；初次使用结构时系统提醒用户自动安装 Java，并要求将 Java 升级。

直接点击以下链接访问 SciFinder。<http://Scifinder.cas.org> 或 <http://origin-scifinder.cas.org>。

由于 SciFinder Web 更新频率较快，用户需要随时关注新功能的发布，可以直接访问 www.cas.org，或是登陆及 www.cas-china.org，获得新功能的相关信息。

第二章 文献检索

SciFinder 中的文献检索是使用最广泛的检索功能。检索的结果主要包括以下的文献类型。

- 期刊
- 专利
- 会议录
- 图书
- 学位论文
- 技术报告

该途径提供以下的功能和特点：

- Analyze功能。强大的分析功能，提供了十二种分析方式，对检索结果有全面深入的了解；
- Categorize功能 对文献进行系统分类，通过选择CAS为文献增值的索引使检索更精确；
- Refine功能。提供六种二次检索方式；
- Keep me posted功能。定期自动检索已设定的课题；

History 功能。浏览已进行的检索历程。

2.1 主题检索

下图是 SciFinder Web 的主页面显示，在页面上端



检索文献（默认）

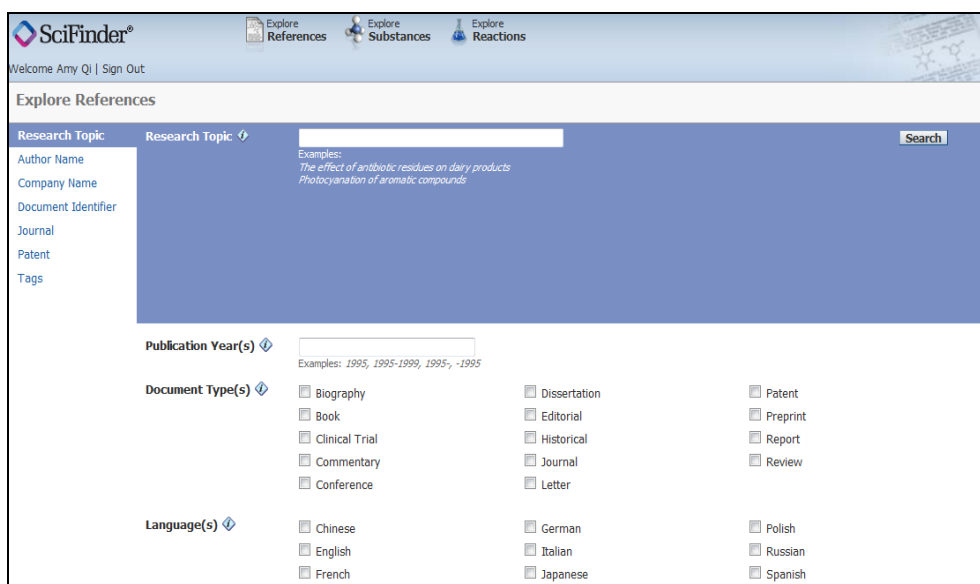


切换到检索物质的页面



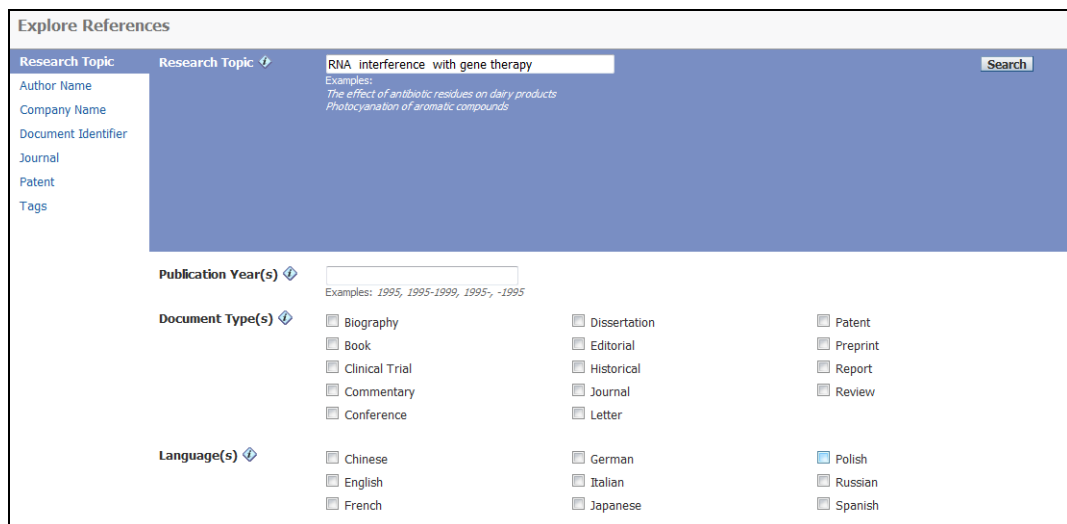
切换到检索反应的页面

SciFinder 关于检索文献提供了 7 种检索途径，页面默认为主题检索。



以检索“RNA 干扰在基因治疗领域的应用”为例，来详解 SciFinder 中的主题检索。检索步骤如下：

- 1) 在空白处输入您要检索的课题。RNA interference with gene therapy



注意：

- 最多输入 5 个术语，三个左右最好
- 术语之间最好用英文的介词如 of, with, beyond, in, on, as 等链接，介词没有实际含义，只起到间隔作用。
- 如果术语多于一个单词时（如 anabolic steroids），SciFinder 除按照这些词为专用词来进行检索，也按照这些词分散在同一句中进行检索，这非常重要，因为在我们已输入的词之间常常有别的词，也就是有许多含有“anabolic androgenic steroids”的检索结果。
- 在输入关键词的下方，提供了对检索文献通过年代、文献类型、出版语言、作者姓名、机构名称等条件限制。但是在获取文献后 SciFinder 提供了更多的二次检索工具，所以不建议作初步限定。

- 2) 点击 Search。

Research Topic Candidates		References
<input type="checkbox"/>	292 references were found containing "RNA interference with gene therapy" as entered.	292
<input checked="" type="checkbox"/>	3446 references were found containing the two concepts "RNA interference" and "gene therapy" closely associated with one another.	3446
<input type="checkbox"/>	7800 references were found where the two concepts "RNA interference" and "gene therapy" were present anywhere in the reference.	7800
<input type="checkbox"/>	66860 references were found containing the concept "RNA interference".	66860
<input type="checkbox"/>	168731 references were found containing the concept "gene therapy".	168731

各个选项的含义：

- 292 篇文献包含输入的短语，介词可被任意的单词代替。
- 3446 篇文献含输入的两个关键词的概念并且这两个同时出现在同一个检索字段中（可以认为是在一个句子中）。
- 7800 篇文献含两个关键词的概念，并出现在文献中的任意地方（题目、摘要、索引，不是指全文）
- 66860 篇文献包含“RNA 干扰”这个概念
- 168731 篇文献包含“基因治疗”这个概念

注意：

有“concept”概念选项的具体含义为 SciFinder 的智能检索系统会自动把关键词的名词的单复数、英美文法上的差异、这个单词的动词、形容词、副词、名词形式都囊括进来，让检索结果更加全面。

3) 根据检索者自己的需求选择相关的选项。从检索结果全面性和相关性两方面考虑，选择有“concept”和“closely associated with one another”的选项，点击 get reference，如下图所示。

2.1.1 分析功能 (Analysis)

文献结果页面的右侧是分析功能，共提供了一下十二种分析选项。

作者姓名	物质	学科名称	机构名称
所属数据库	文献类型	索引词	CA 概念标题
期刊名称	出版语言	出版年代	附加词

默认的是作者姓名的分析结果。

1) 点击下拉选项共提供 12 种分析选项，选择要分析的选项，选项的下面会出现文献结果的分析结果。

- 2) 点击页面显示的某项分析结果，获取该项相关的文献。
- 3) 如果想查看完整的分析结果，点击右下端的 show more。


The screenshot displays a 'References' section with three entries and an 'Analysis' sidebar. The references are:

- Directed HIV-1 evolution of protease inhibitor resistance by second-generation short hairpin RNAs** (Full Text). By Schopman, Nick C. T.; Braun, Anja; Berkhout, Ben. From *Antimicrobial Agents and Chemotherapy* (2012), 56(1), 479-486. 1 Language: English, Database: CAPLUS. Despite the success of antiretroviral drugs in decreasing AIDS-related mortality, a substantial fraction of HIV-infected patients experience therapy failure due to the emergence of drug-resistant virus variants. For durable inhibition of HIV-1 replication, the emergence of such escape viruses must be controlled. In addn, antiretroviral drugs, **RNA interference (RNAi)-based gene therapy** can be used to inhibit HIV-1 replication by targeting the viral **RNA genome**. **RNAi** is an evolutionary conserved **gene silencing** mechanism that mediates the sequence-specific breakdown of the targeted mRNA. Here we investigated an alternative strategy combining the activity of a protease inhibitor (PI) with second-generation short hairpin RNAs (shRNAs) designed to specifically block the emergence of PI-resistant HIV-1 variants. We demonstrate that dominant viral escape routes can be effectively blocked by second-generation shRNAs and that virus evolution can be redirected toward less-fit variants. These results are of importance for a deeper understanding of HIV-1 evolution under combined drug and **RNAi** pressure and may be used to design future **therapeutic** approaches.
- Tumor-targeted delivery of siRNA by surface-modified LPC nanoparticles** (Full Text). By Yang, Ting; Zhao, Zh-Nai; Xu, Zhen-Zhong; Zhao, En-Hui; Liu, Xiao-Yan; Chen, Cheng-Jun; Wang, Jian-Cheng; Zhang, Qiang. From *Journal of Chinese Pharmaceutical Sciences* (2011), 20(6), 590-596. 1 Language: English, Database: CAPLUS. With increasing knowledge of the mol. mechanisms of endogenous **RNA interference**, systemic delivery of small **interfering RNA (siRNA)** via targeted nanoparticles has emerged as a potential strategy for cancer **gene therapy**. In this study, a novel formulation [liposome-protamine-chondroitin sulfate nanoparticles (LPC-NP)] was developed for siRNA delivery by self-assembling with charge-charge interaction. The LPC-NP was further modified by DSPE-PEG2000 and DSPE-PEG2000-T7 by the **post-insertion** method. **T7**, a transferrin-like seven-amino **acid** peptide, is a targeting ligand for transferrin receptor-overexpressed MCF-7 breast cancer cells. The particle size and zeta potential of LPC-NP were approx. 90 nm and +35 mV, resp. It was shown that PEG modification could significantly decrease aggregation of LPC-NP in serum, and T7 peptide modified LPC-NP could significantly increase the cellular uptake and the **gene-silencing** effect of siRNA. In vitro cytotoxicity assay exhibited that significant cell growth inhibition was achieved in MCF-7 cells after the delivery of anti-EGFR siRNA. Our encouraging results suggested that T7-modified LPC-NP might be a promising carrier for **RNAi**-based tumor **therapy**.
- Effects of silencing cyclin D1 gene on proliferation and apoptosis of pancreatic carcinoma AsPC-1 cells by RNA interference** (Full Text). By Xiao, Weidong; Li, Yong; Li, Xueming; Cai, Jun; Deng, Jun; Zeng, Linshang; Hu, Wei. From *Shandong Yixue* (2011), 51(43), 20-22. 1 Language: Chinese, Database: CAPLUS. The effect of **silencing Cyclin D1 gene** on the proliferation, cell cycle and apoptosis of pancreatic carcinoma AsPC-1 cells by **RNA interference** was investigated to provide evidence for the targeted **therapy** of pancreatic carcinoma. AsPC-1 cells were cultured in DMEM supplemented with 10% fetal bovine serum and incubated in a cell incubator with 5% carbon dioxide (CO₂) at 37°C. Cells at exponential growth phase were planted on 96 well culture plate and randomly divided into exptl. group, neg. control group and blank control group. Cyclin D1-siRNA, neg.-siRNA and lipofectamine were transfected into AsPC-1 cells mediated by LipofectamineTM2000, and the cells

The analysis sidebar shows the following data:

Journal Name	Count
PCT Int. Appl.	363
U.S. Pat. Appl. Publ.	112
Gene Therapy	72
Biochemical and Biophysical Research Communications	47
Jpn. Kokai Tokkyo Koho	46
Faming Zhuanli Shenqing	36
Cancer Biology & Therapy	35
Di San Junyi Daxue Xuebao	35
Molecular Therapy	32
Shijie Huaren Xiaohua Zazhi	31


- 4) 弹出完整的分析结果图。分析结果的排序默认为按照出现频率的高低来排布，也可点击下拉选项选择

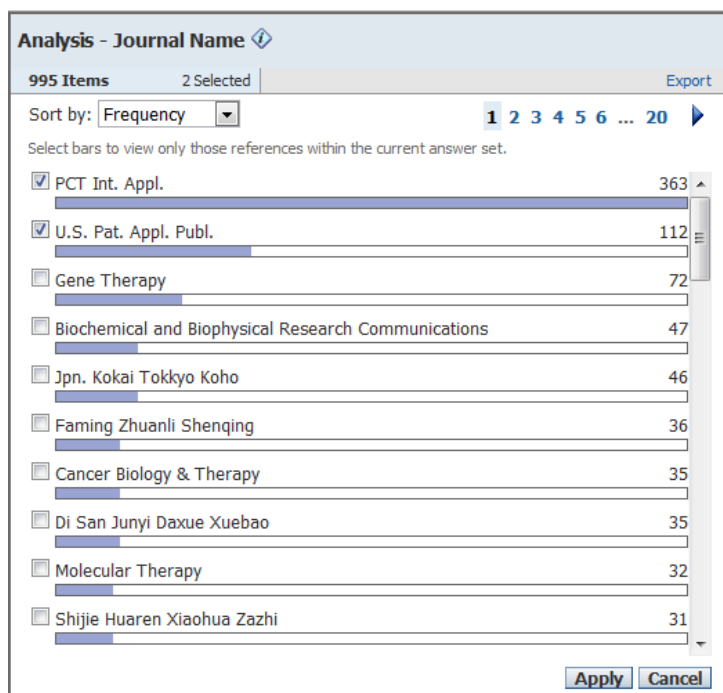
按照字母顺序  进行排列。用鼠标选择在一个或多个选项。

The 'Analysis - Journal Name' dialog box shows the following data:

Journal Name	Count
PCT Int. Appl.	363
U.S. Pat. Appl. Publ.	112
Gene Therapy	72
Biochemical and Biophysical Research Communications	47
Jpn. Kokai Tokkyo Koho	46
Faming Zhuanli Shenqing	36
Cancer Biology & Therapy	35
Di San Junyi Daxue Xuebao	35
Molecular Therapy	32
Shijie Huaren Xiaohua Zazhi	31

2.1.2 通过分析功能进行二次检索

- 1) 在获取全部的分析结果的页面上，用鼠标选择您想要获取相关文献的选项。如鼠标右键点击在 PCT Int. Appl. 和 U.S. Pat. Appl. Publ. 前空白 。然后点击页面下方的 Apply。



2) 页面右端的分析结果用黄色柱状图显示刚才所点击的选项中涉及文献在其他选项中所占的比例。当前页面并不是限制后的文献结果，需要继续点击上方黄色条状中的 keep Analysis。

References

3446 References 0 Selected

475 references with the Journal Names PCT Int. Appl., U.S. Pat. Appl. Publ. are displayed

Select All Deselect All Sort by: Accession Number

Answers per Page [20] 1 2 3 4 5 6 ... 24

Display: - +

8. Method for identification of MCAK and other p53 target genes useful for therapeutic intervention in cancer

By Zfilou, Jack

From U.S. Pat. Appl. Publ. (2011), US 20110313021 A1 20111222. | Language: English, Database: CAPLUS

The present invention discloses an RNAi-based method in Murine Embryo Fibroblasts (MEFs) to rapidly identify crit. p53 target genes involved in the p53-mediated cell death. This method is based on the inventor's observation that a very small amt. of p53 (residual p53) can induce p53-mediated cell death in the MEFs stably expressing oncogenes (MEFs stably expressing certain oncogenes undergo p53-dependent cell death). The present inventor found that residual p53 regulates a unique set of genes compared to wild type p53. The common genes regulated by both wild type and residual p53 represent the crit. subset of genes important for p53-mediated cell death. The genes in this subset are prioritized by selecting p53-repressed enzymes, whereby said enzymes are overexpressed in human tumors lacking functional p53. Other p53 targets that are equally modulated by WT and residual p53 may also represent key target genes for therapeutic intervention. MCAK (mitotic centromere assoc. kinesi) represents an example of an enzyme repressed by both WT p53 and residual p53, and thus is probably an important component of the p53 network. It was found that p53 represses MCAK expression in MEFs and various human cancer cell lines, and that expression levels of MCAK correlate to p53 status (whereby cells with high levels of MCAK will often be either deficient for p53 or contain a compromised p53 gene). This finding demonstrates that the crit. p53 target genes found in the MEFs are also important in human cells. The present invention discloses that suppression of MCAK in p53-deficient cells, which overexpress MCAK, can cause selective cell death of said cells. Said suppression can occur via utilization of RNAi techniques to reduce expression of MCAK gene, or via utilization of an inhibitor of the MCAK protein. MCAK is one example of the numerous crit. genes discovered or can be discovered utilizing this method. These genes represent crit. genes for therapeutic intervention to treat a variety of human diseases.

9. Inhibitor of expression of dominant allele comprising RNAi molecule, and use thereof

By Hohjoh, Hirohiko; Takahashi, Masaki

From PCT Int. Appl. (2011), WO 2011159924 A1 20111222. | Language: Japanese, Database: CAPLUS

Disclosed is a method for designing an RNAi mol. which permits the expression of a wild-type or desired allele and can selectively and effectively inhibit the expression of only a specific dominant allele. Also disclosed is an inhibitor of the expression of a dominant allele contg. the RNAi as an active ingredient. The inhibitor of the expression of a dominant allele contains an RNAi mol. having a structure in which a base length from a base point where a dominant point mutation occurs in a target dominant allele to the 5' end is set to a predet. length and one mismatched base different from that in the sequence of a target gene is introduced at a predet. position downstream of the base point. The allele-specific RNAi(ASP-RNAi) is suitable for use for treatment of fibrodysplasia ossificans progressis (FOP), Huntington's disease, and non-small cell lung cancer.

12. Recombinant RNA viruses comprising heterologous RNA involved in post-transcriptional gene silencing (PTGS) and therapeutic uses thereof

By Tannever, Benjamin R.

Analysis Refine

Analyze by: Journal Name

Click-bar to view only those references within the current answer set

PCT Int. Appl.	363
U.S. Pat. Appl. Publ.	112
Gene Therapy	72
Biochemical and Biophysical Research Communications	47
Jpn. Kokai Tokkyo Koho	46
Faming Zhuanyi Shenqing	36
Cancer Biology & Therapy	35
Di San Junyi Daxue Xuebao	35
Molecular Therapy	32
Shijie Huaren Xiaohua Zazhi	31

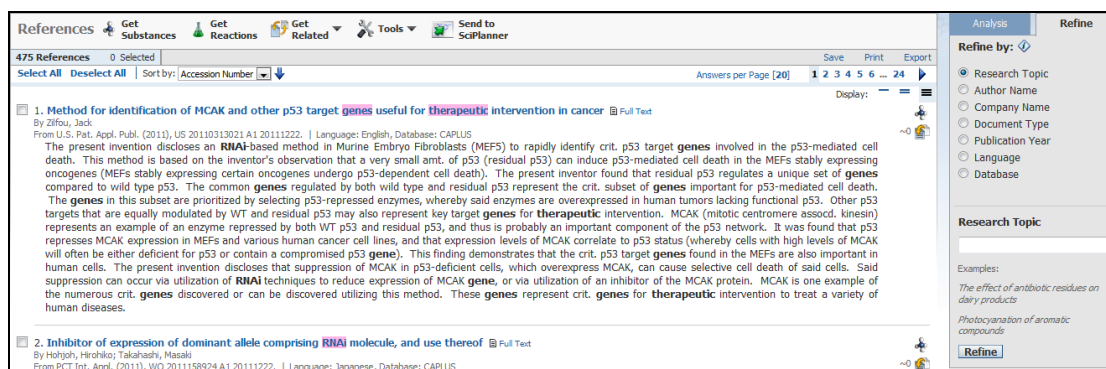
Show More

3) 获取到通过分析功能进行二次检索的结果。

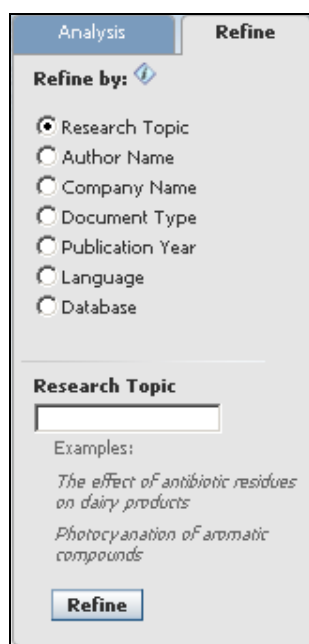
2.1.3 限定功能 (Refine)

限定 (Refine) 功能在文献结果页面的右端。共提供了主题词、作者姓名、机构名称、出版年代、语言、所属数据库 (CAplus/Medline) 六种限定途径。

1) 点击页面右端的 Refine, 从分析页面切换到限定页面。



2) 切换后，默认的是通过关键词进行再限定；可根据自己的需要选择限定途径。选择好之后，输入限定条件，点击下方 Refine，获取得到限定后的结果。

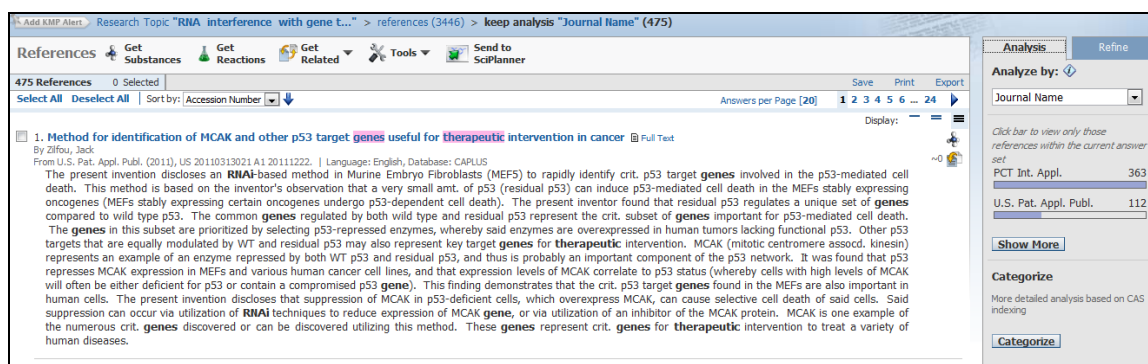


注意：

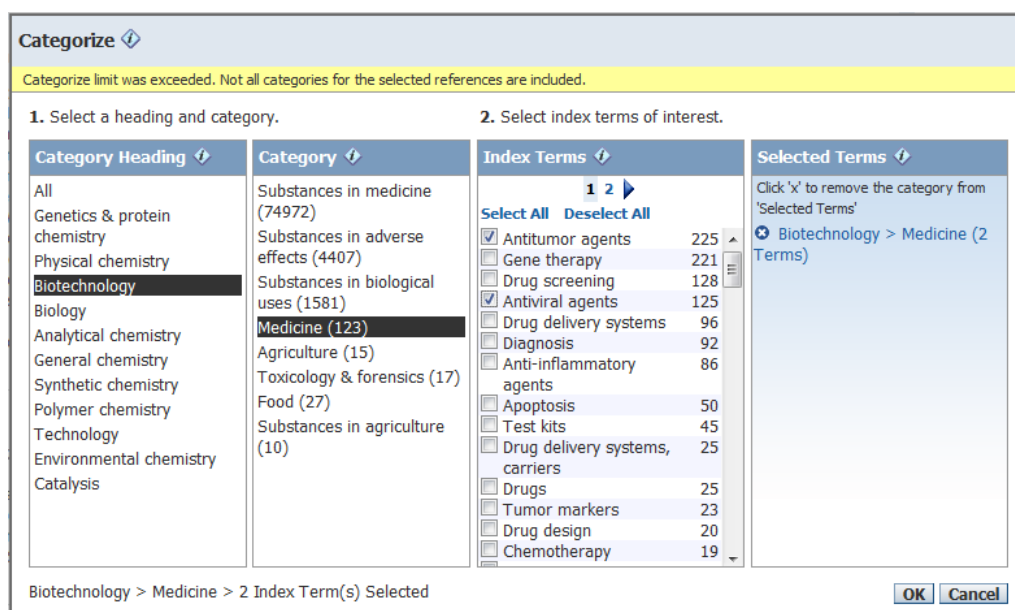
- 由于限定功能中的各种途径囊括了输入关键词页面下方的限制条件，所以可以最开始不进行限制，先获取一个最全面的结果，再利用分析或限定功能来进行二次检索。
- 限定功能中的选项和分析功能中的选项有部分重合。两者区别是分析功能先让使用者看到蓝色柱状图之后再进行选择，而限定功能让使用者直接输入限制条件。
- 限定功能中 **Research Topic** ，允许使用者在下方的空白框中再次输入关键词来进行限制。在关键词的前面可加上 NOT，意味着获取不包括该关键词的文献。
- 通过再输入关键词来进行限定与最开始在关键词检索时输入关键词的差别。在 Refine 功能中输入某个关键词是不能够控制该词与其他检索词的相关位置，也就是说不能够直接获取多个词出现在同一句话的文献 (closely associated)，只能够获取该词与其他词出现在题目、摘要、索引中任意的地方 (anywhere in the reference)。

2.1.4 系统分类功能 (Categorize)

在文献结果的右下角是 Categorize 功能的图标，该功能也是文献结果特有的一个后处理选项。



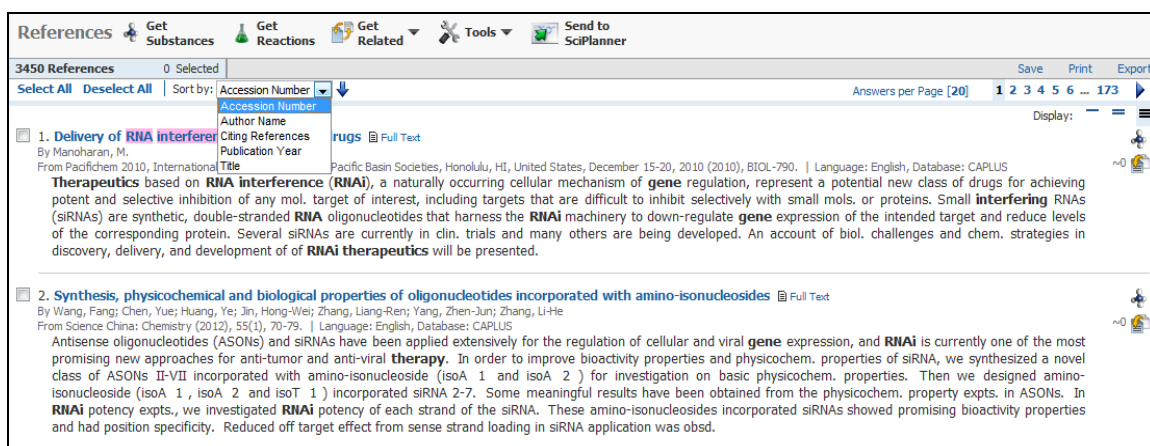
- 1) 点击 Categorize，系统会把当前页面的文献结果（或者已选择的）分成几个学科类别罗列在 Category heading 下面；
- 2) 点击某一个学科类型，系统会在 Category 下面罗列出该学科下属的子学科；
- 3) 选择 Category 中感兴趣的子学科，Index terms 栏中会出现该子学科下属的索引词或索引物质。
- 4) 选择某一个或某几个索引词（索引物质）后，点击右下方的 OK 获取该索引词（索引物质）所涉及的文献。

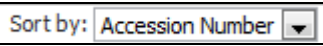



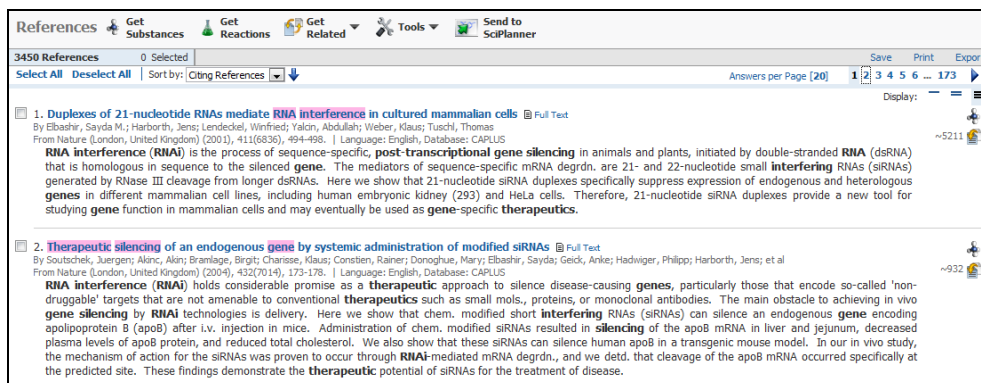
注意:

- 该功能只能在文献数目小于 5000 时使用。
- 可多选位于不同子学科 (category heading) 的索引词 (索引物质)。
- 该功能中的相关物质索引选项可以让检索结果达到其他功能做不到的精确。如上图显示在生物技术学 (Biotechnology) 中选取药品 (medicine) 中的抗肿瘤药物 (Antitumor agents) 和抗病毒药物 (Antiviral agents) 就可获取 RNA 干扰在生物技术中用于治疗抗肿瘤和抗病毒的药物的文献。

2.1.5 文献结果排序功能 (Sort by)




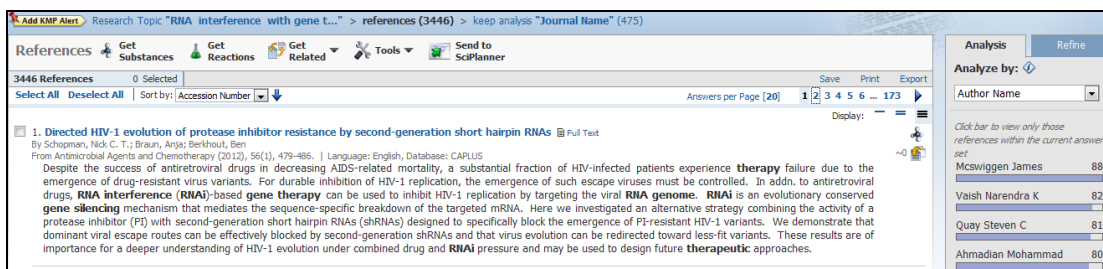
- 在文献检索结果页面上端点击  (如上图), 下拉菜单中共有 5 中排序方式, 分别是登陆号 (Accession number)、作者名 (Author Name)、引文排序 (Citing References)、出版年限 (Publication Year)、标题 (Title)。
- 其中点击 Citing References 可以将被引用次数最多的文献显示在检索结果的最前面, 如下图, 在文献记录的右边, 显示第一篇文献被引用了 5211 次, 点击 , 可以直接获得被引用的 5211 篇文章。



2.2 定题服务功能 (Keep me posted)

定题服务 (Keep me posted) 在设置好之后, 系统会自动每周检索数据库中是否有符合已设置检索条件的新文献出现。

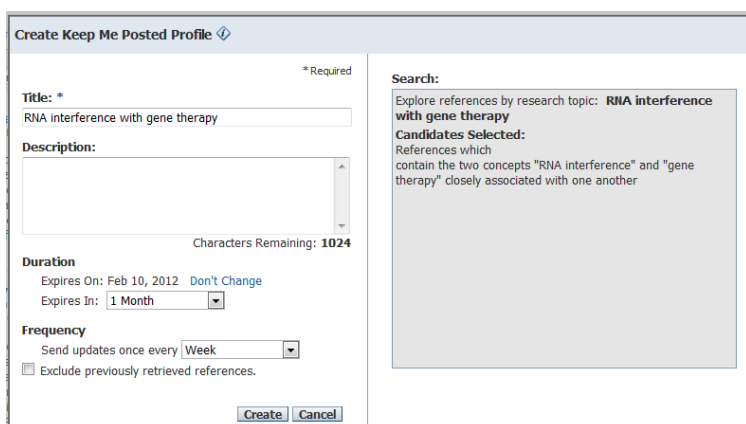
- 1) 在文献结果页面上端点击 .



注意:

定题服务的功能系统可记住最初的检索式以及通过 Refine 功能设置的检索式，但分析 Analysis 和系统分类 category 的二次检索获取的文献结果无法设置定题服务。

2) 在 title 下面的空白框输入名称，可以为中文。



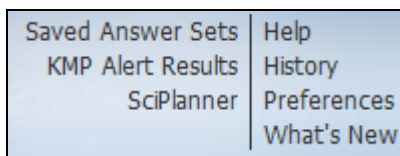
3) 在 Duration 处设置提醒失效时间

4) 在 Frequency 处设置提醒频率，设置好后，系统会在有效期内每隔一段时间就会自动检索一次。

2.2.1 如何查看定题服务 (keep me posted) 的结果

当设置后定题服务后想要查看系统自动检索的结果

1) 点击主页面右上角的 KMP Alert Results.

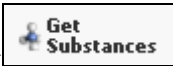


2) 查看结果

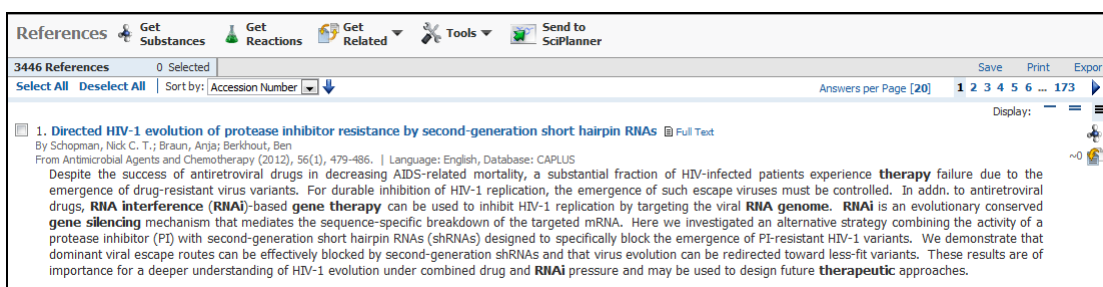
Keep Me Posted					
1 Profile 0 Selected Delete Selected Profiles					
Profiles and Results	Status	Created	Expires		
<input type="checkbox"/> RNA interference with gene therapy Edit Search Strategy: Results No results are available	Enabled	Jan 10, 2012	Feb 10, 2012		

2.3 文献中的相关物质、反应获取

2.3.1 相关物质获取 (get substances)

Get substances 功能可以帮助我们获取文献中涉及的物质，这些物质是 CAS 在阅读完原文之后认为文章中比较重要的物质，也是每一篇文献物质索引中所包含的物质。在页面上端点击 

注意：该功能操作的文献数目上限是 1000 篇。



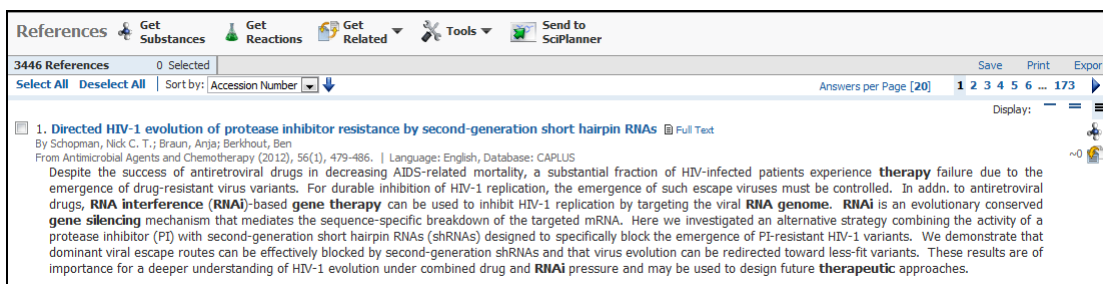
The screenshot shows the top navigation bar of the 'References' page. The 'Get Substances' button, represented by a flask icon, is highlighted. Other buttons include 'Get Reactions', 'Get Related', 'Tools', and 'Send to SciPlanner'. Below the navigation bar, the page displays a list of references, with the first one selected. The selected reference is titled '1. Directed HIV-1 evolution of protease inhibitor resistance by second-generation short hairpin RNAs'.

2.3.2 相关反应获取 (get reactions)

Get reactions 可以帮助使用者获取反应数据库 CAS reaction 中收录了文献中包含的哪些化学反应。

点击页面上端的 

注意：该功能操作的文献数目上限是 500 篇。

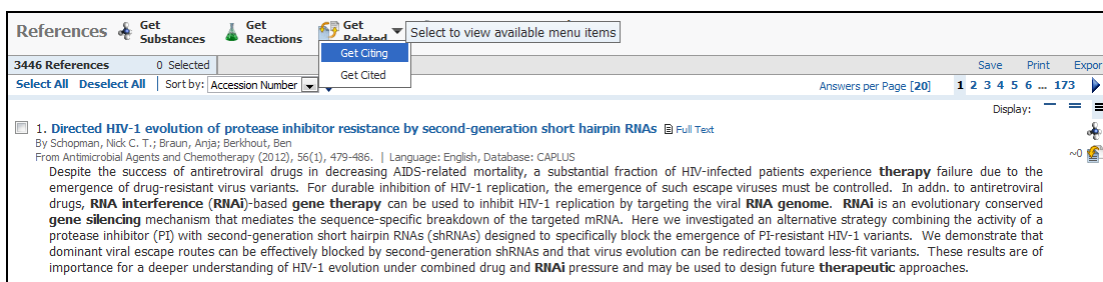
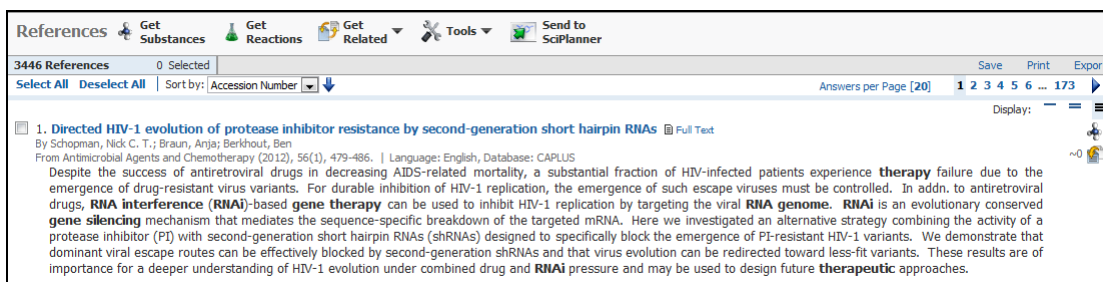


The screenshot shows the top navigation bar of the 'References' page. The 'Get Reactions' button, represented by a flask icon, is highlighted. Other buttons include 'Get Substances', 'Get Related', 'Tools', and 'Send to SciPlanner'. Below the navigation bar, the page displays a list of references, with the first one selected. The selected reference is titled '1. Directed HIV-1 evolution of protease inhibitor resistance by second-generation short hairpin RNAs'.

2.4 获取引用与被引用文献 (get citing/cited references)

Get Related 中 Get cited reference 可以获取文献结果集或者选择的部分文献引用了哪一些文献。

Get Related 中 Get citing reference 可以获取文献结果集或者选择的部分文献被哪一些文献引用了。



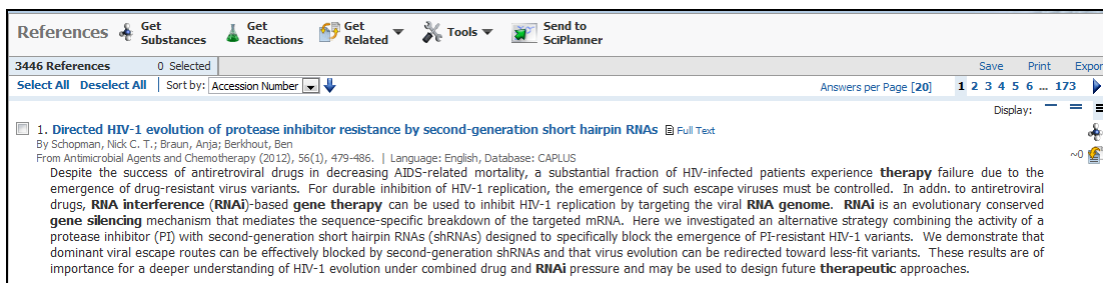
注意：该功能操作的文献数目上限是 500 篇，获取引用与被引用文献的数据最早回溯到 1997 年。

2.5 检索结果的全文链接、组合、保存、打印等

2.5.1 链接全文 (Full Text)


由于 SciFinder 中的 CA plus 和 Medline 都是文摘数据库，如果想获取某篇文献的全文，只需要点击每篇文献旁边的 Full Text。

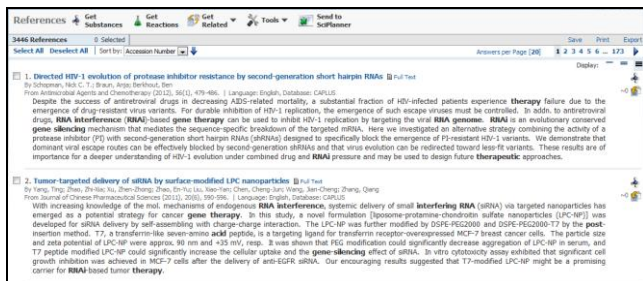
注意：该功能是通过 Chempot 平台来链接全文，如果使用者所在机构已经订购了该篇文章所属的全文数据库或者是网络上免费的资源，可以直接链接到。



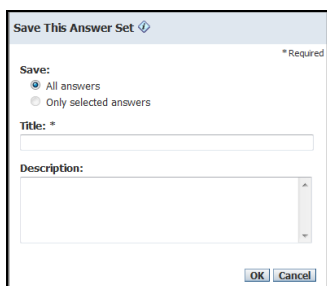
2.5.2 结果保存 (save)

SciFinder 的保存功能不是把检索结果保存到使用者的个人电脑，而是指检索结果保存到 CAS 的服务器上，保存文献的上限是 20000 条。

- 1) 点击页面右上角的 



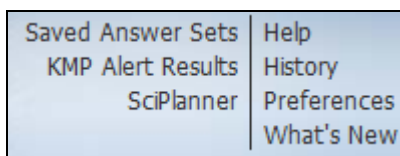
- 2) 在弹出的对话框中选择是所有的文献还是选择的部分文献，在 title 下写下保存的名称。点击 OK。



2.5.3 查看已保存的结果

如果需要查看已保存的结果，必须进入 SciFinder 数据库。

- 1) 点击页面右上角的 Saved Answer sets。



- 2) 如果之前没有进行特别设置，已保存的结果集中显示的就是该账号下保存的所有文献结果集。点击名称就可获取该名称所包含的所有文献；点击 Edit 可以编辑该结果的名称和描述。点击 link；可获取该名称包含所有文献的网址，该网址可保存也可发送给其他有 SciFinder 帐号的人查看。

Saved Answer Sets		Combine Answer Sets		
References (9)	Substances (3)	Reactions (5)		
9 Answer Sets 0 Selected Delete Selected				
Reference Answer Set Details			Date Saved	
<input type="checkbox"/>	1 (9) Research Topic "HPLC of Vitamin B12 in dairy products" > references (17) > refine by categories	Edit	Link	Jan 9, 2012
<input type="checkbox"/>	cyclodextrin (9182) Substance Identifier "cyclodextrin; ferrocene" > substances (2) > get references (9182)	Edit	Link	Nov 25, 2011
<input type="checkbox"/>	14048 (14048) Company Name "Tongji University, shanghai" > references (14048)	Edit	Link	Nov 23, 2011
<input type="checkbox"/>	14128 (14127) Company Name "Tongji University" > references (40024) > refine "shanghai" (14127)	Edit	Link	Nov 23, 2011
<input type="checkbox"/>	200070 (32) Company Name "Tongji" > references (40368) > refine "200070" (32)	Edit	Link	Nov 23, 2011
<input type="checkbox"/>	200331 (39) Company Name "Tongji" > references (40368) > refine "200331" (39)	Edit	Link	Nov 23, 2011
<input type="checkbox"/>	201804 (284) Company Name "Tongji" > references (40368) > refine "201804" (284)	Edit	Link	Nov 23, 2011
<input type="checkbox"/>	20092 (10095) Company Name "Tongji" > references (40368) > refine "200092" (10095)	Edit	Link	Nov 23, 2011
<input type="checkbox"/>	shengqing (347) Research Topic "modification of fiber materials" > references (4404) > keep analysis "Journal Name" (347)	Edit	Link	Nov 2, 2011

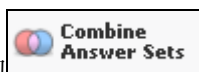
注意：打开的文献结果集可以进行后处理如分析、限定、系统分类等操作。

2.5.4 对已保存文献结果集进行组合

组合功能（Combine）可以允许使用者对多个已保存的文献结果集进行 AND，OR，NOT 等操作。

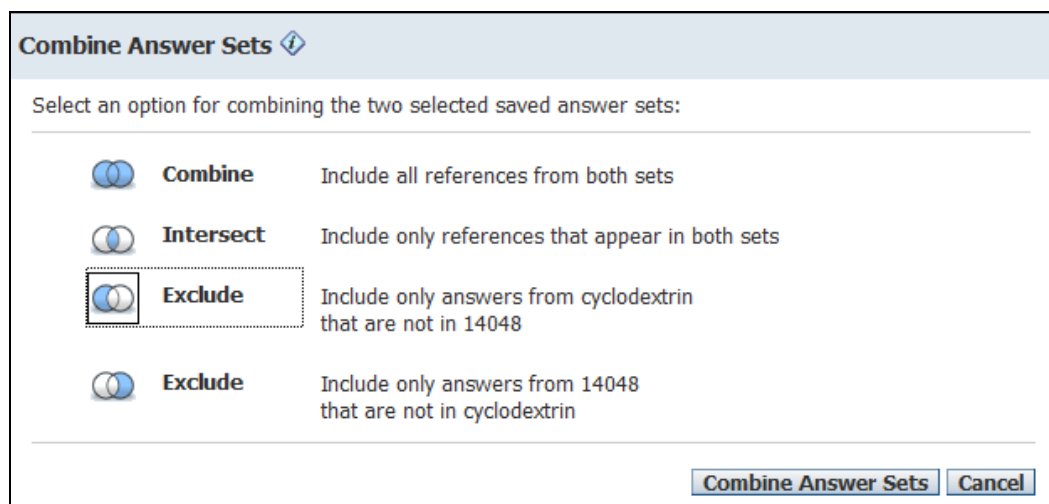
1) 在 saved answer sets 中选择两个或者多个文件。

Saved Answer Sets		Combine Answer Sets		
References (9)	Substances (3)	Reactions (5)		
9 Answer Sets 2 Selected Delete Selected				
Reference Answer Set Details			Date Saved	
<input type="checkbox"/>	1 (9) Research Topic "HPLC of Vitamin B12 in dairy products" > references (17) > refine by categories	Edit	Link	Jan 9, 2012
<input checked="" type="checkbox"/>	cyclodextrin (9182) Substance Identifier "cyclodextrin; ferrocene" > substances (2) > get references (9182)	Edit	Link	Nov 25, 2011
<input checked="" type="checkbox"/>	14048 (14048) Company Name "Tongji University, shanghai" > references (14048)	Edit	Link	Nov 23, 2011
<input type="checkbox"/>	14128 (14127) Company Name "Tongji University" > references (40024) > refine "shanghai" (14127)	Edit	Link	Nov 23, 2011
<input type="checkbox"/>	200070 (32) Company Name "Tongji" > references (40368) > refine "200070" (32)	Edit	Link	Nov 23, 2011
<input type="checkbox"/>	200331 (39) Company Name "Tongji" > references (40368) > refine "200331" (39)	Edit	Link	Nov 23, 2011
<input type="checkbox"/>	201804 (284) Company Name "Tongji" > references (40368) > refine "201804" (284)	Edit	Link	Nov 23, 2011
<input type="checkbox"/>	20092 (10095) Company Name "Tongji" > references (40368) > refine "200092" (10095)	Edit	Link	Nov 23, 2011
<input type="checkbox"/>	shengqing (347) Research Topic "modification of fiber materials" > references (4404) > keep analysis "Journal Name" (347)	Edit	Link	Nov 2, 2011



2) 点击上方的 。

3) 在弹出的对话框中选择您需要的组合类型。

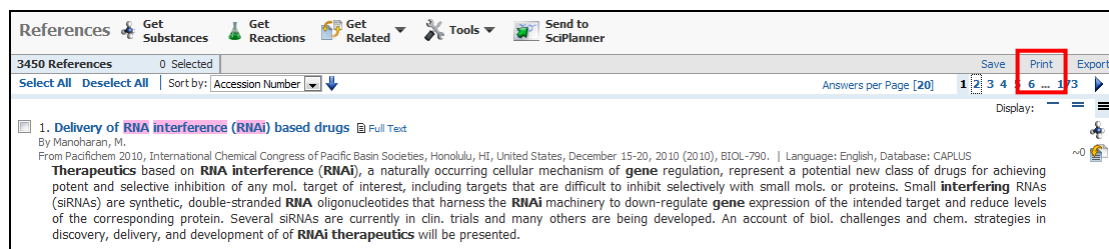


注意:

- Combine 进行布尔逻辑运算符 OR 操作
- Intersect 进行布尔逻辑运算符 AND 操作
- Exclude 进行布尔逻辑发 NOT 操作

2.5.5 打印结果 (print)

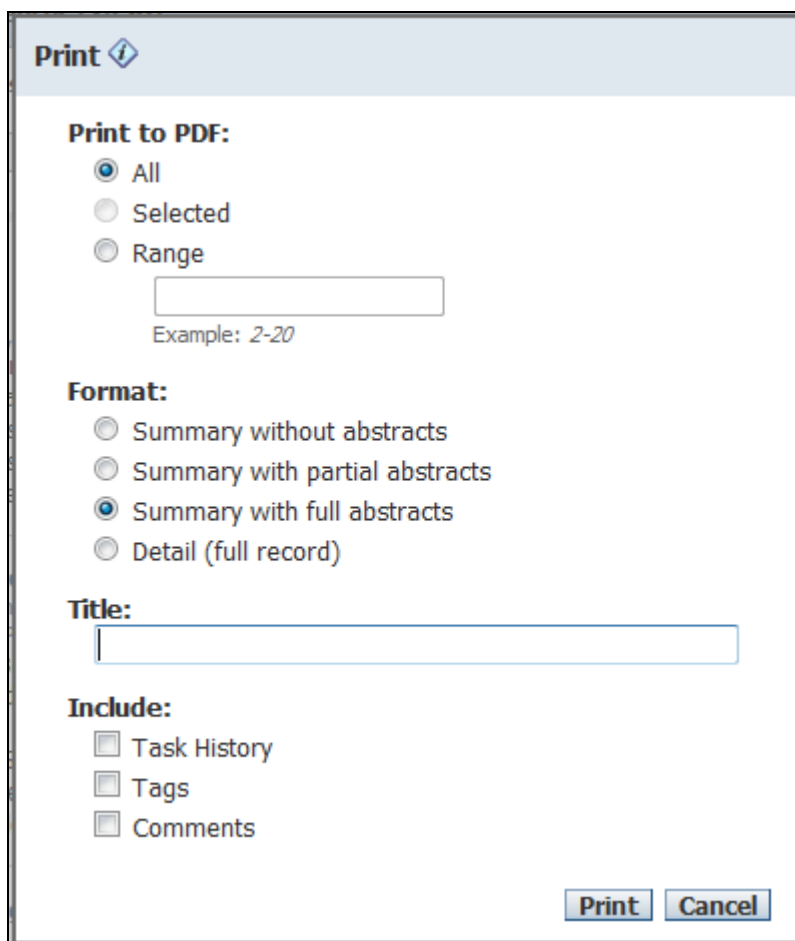
1) 在文献结果页面中点击 Print。



2) 在弹出的对话框中可以选择 ALL 打印所有的结果，也可选 selected 打印选择的部分结果，或者选择 Range 打印感兴趣的记录范围（如 2-20 篇）。在 Format 中根据个人的需求选择打印每篇文献结果不同的部分。在 Title 中输入名称，点击 print 即可。

注意:

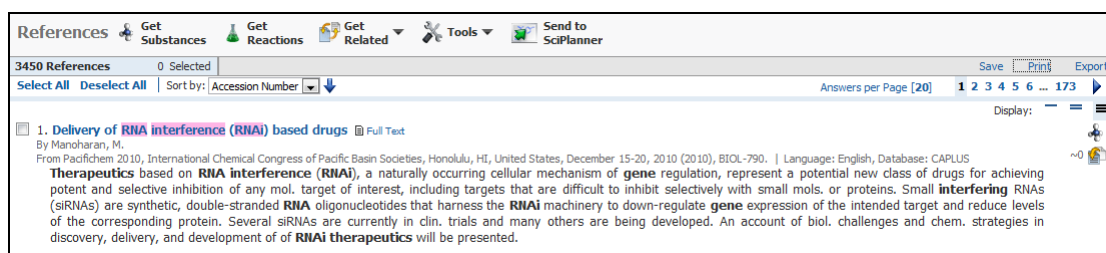
- 选择 Summary 格式，打印文献数目的上限是 500 篇
- 选择 Detail 格式，打印文献数目的上限是 100 篇



2.5.6 导出结果

如果要将检索的结果保存到个人电脑中，需要使用 SciFinder 的导出（export）功能。

- 1) 在页面的右上角点击 Export。

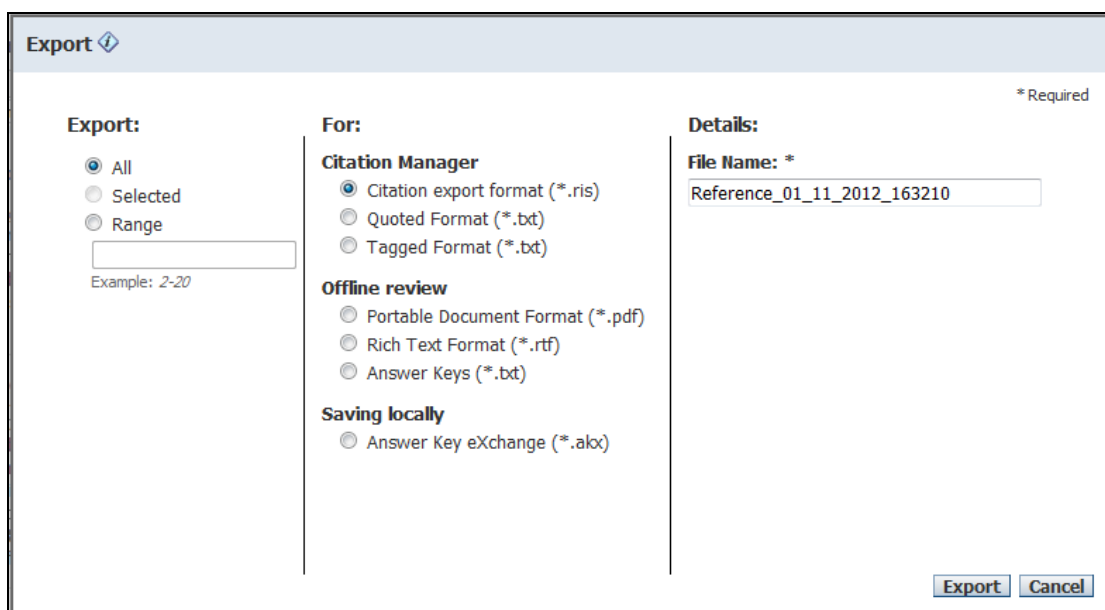


- 2) 在弹出的对话框中选择导出所有的文献结果集还是选择的部分文献或者是某个范围。在 file name 中输入英文名称，For 下面有多种保存格式，常用的为 ris、akx、pdf、rtf 格式。选择之后点击 export。

注意：

- ris 可以导入到 Endnote 等文献管理工具中。
- akx 为系统自带格式，如果需要打开已保存的 akx 文件，需要再次进入 scifinder。该格式保存上限数目为 20000。

- 打开已保存的 rtf 格式，不需要安装任何软件，打开后是一个类似 word 的文档。该格式和 pdf 格式如果选择 format 中的 summary，保存的上限是 500；选择 format 中的 detail，保存的上限是 100 篇。

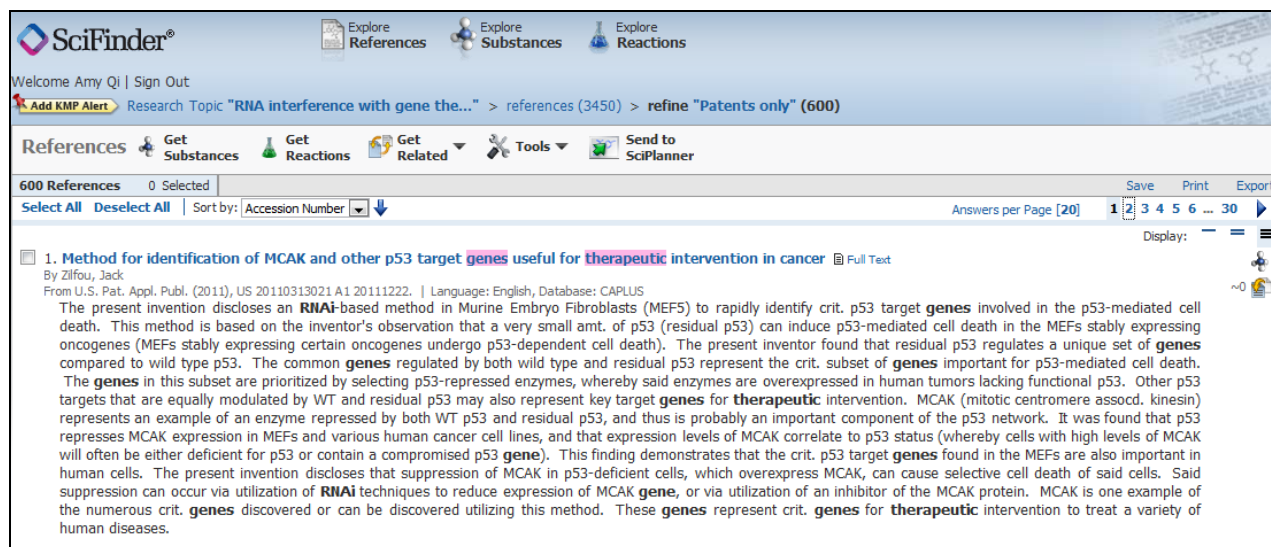


3) 选择您要保存途径。

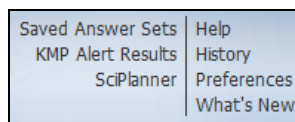
2.6 检索历史记录

2.6.1 通过导航条获取之前某步的检索结果

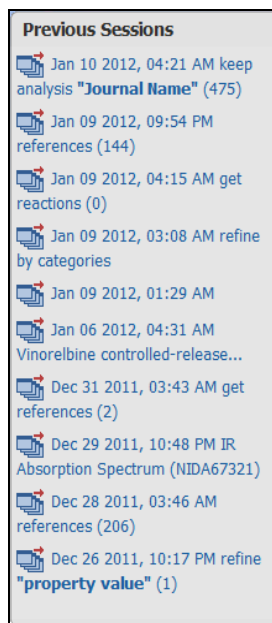
SciFinder 的检索历史有时候会比较长，如果使用者想要获取之前某一步的检索结果，不需要不断的点击网页浏览器上的上一页工具。只需要在 SciFinder 页面中的导航条选择您想要退回的那一步就可以获取该步操作所有的文献。导航条中还简要写明了该部的基本操作以及所包含文献的数目。



2.6.2 回顾检索历史 (History)

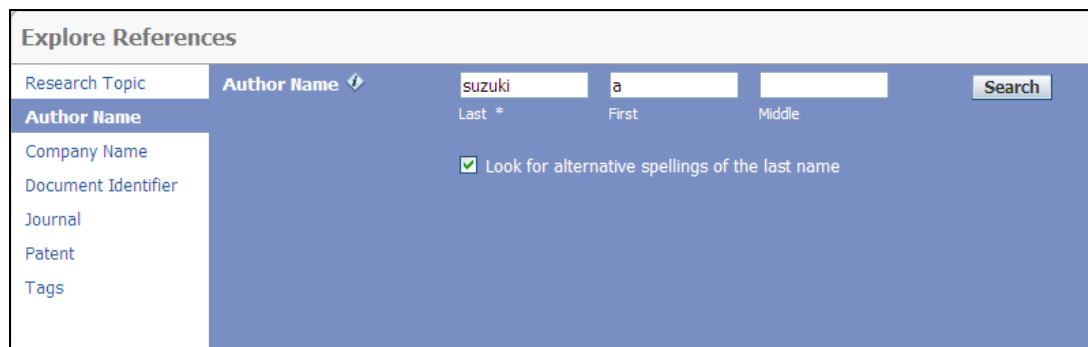


点击主页面右上角的 history, 可下载获取最近十次的检索历程。



2.7 作者名检索 (Author Name)

1) 在 explore reference 页面下, 点击 author name 切换到作者姓名检索页面。



2) 在作者姓名的空白框中输入作者姓名的信息。

注意:

- 作者名检索, 姓 (Last Name) 必须写全, 名 (First Name) 只需要写首字母即可
- 手写时如果有空格, -, ' 也请输入。
- 复杂的人名尝试不同的检索, 确定哪个是最好的检索结果。
- 选择 Look for alternative spelling of the last name。

- 3) 点击 search。
- 4) 选择感兴趣的候选名单，点击 get reference。

Author Name Candidates	
18 Authors 2 Selected	
Select All Deselect All	
Author Name Candidates	References
<input type="checkbox"/> SUZUKI	17
<input checked="" type="checkbox"/> SUZUKI A	3207
<input type="checkbox"/> SUZUKI A C	2
<input type="checkbox"/> SUZUKI A E	2
<input type="checkbox"/> SUZUKI A G	1
<input type="checkbox"/> SUZUKI A H	3
<input type="checkbox"/> SUZUKI A K	29
<input type="checkbox"/> SUZUKI A M	2
<input type="checkbox"/> SUZUKI A M M	2
<input type="checkbox"/> SUZUKI A R	1
<input type="checkbox"/> SUZUKI A S	7
<input type="checkbox"/> SUZUKI A T	129
<input checked="" type="checkbox"/> SUZUKI AKIRA	3256
<input type="checkbox"/> SUZUKI AKIRA C O KIRIN BEER K	1
<input type="checkbox"/> SUZUKI AKIRA C O KIRIN BEER KA	1
<input type="checkbox"/> SUZUKI AKIRA C O NEC CORPORATI	1
<input type="checkbox"/> SUZUKI AKIRA G	1
<input type="checkbox"/> SUZUKI AKIRA K	119

Get References

2.8 机构名称检索 (Company Name)

- 1) 在 Explore Reference 页面下，点击 Company Name 切换到结构名称检索页面。

Explore References

Research Topic	Company Name	<input type="text" value="pfizer"/>	Search
Author Name	Examples: 3M DuPont		
Company Name			
Document Identifier			
Journal			
Patent			
Tags			

- 2) 在 company name 中输入要查询机构的名称。

注意:

- 输入机构名称单词数目多检索结果比较多，反之相反。
- 在进行机构名称检索时，SciFinder 自动考虑了不同的拼写，首字母缩写，全称缩写等情况。但是并不能包含合并和收购的公司。
- SciFinder 自动检索一系列的有关词条，比如输入“company”和“Co”，“university”和“univ”得到的结果是一样的。

- 3) 查看结果

注意: 可通过机构名称的分析结果来获取名称的变化情况。Scifinder 机构名称检索会获取到输入单词中

间间隔其他单词的情况。

References

23279 References 0 Selected Save Print Export

Duplicates were not automatically removed. Answer set exceeds 10,000 reference limit.

Select All Deselect All Sort by: Accession Number ↓ Answers per Page [20] 1 2 3 4 5 6 ... 1164

1. Effective Targeting of Hedgehog Signaling in a Medulloblastoma Model with PF-5274857, a Potent and Selective Smoothed Antagonist That Penetrates the Blood-Brain Barrier [Full Text]

By Rohrer, Allison; Spiller, Mary E.; Lam, Justine L.; Pascual, Bernadette; Barikowski, Darian; Li, Qing John; Yang, Amy H.; Stevens, Greg; Xu, Meirong; Wells, Peter A.; et al

From Molecular Cancer Therapeutics (2012), 11(1), 57-65. | Language: English, Database: CAPLUS

Inhibition of the Smoothened (Smo) represents a promising therapeutic strategy for treating malignant tumors that are dependent on the Hedgehog (Hh) signaling pathway. PF-5274857 is a novel Smo antagonist that specifically binds to Smo with a K_i of 4.6 ± 1.1 nmol/L and completely blocks the transcriptional activity of the downstream gene Gli1 with an IC50 of 2.7 ± 1.4 nmol/L in cells. This Smo antagonist showed robust antitumor activity in a mouse model of medulloblastoma with an *in vivo* IC50 of 8.9 ± 2.6 nmol/L. The downregulation of Gli1 is closely linked to the tumor growth inhibition in patched⁺/medulloblastoma mice. Math. anal. of the relationship between the drug's pharmacokinetics and Gli1 pharmacodynamics in patched⁺/medulloblastoma tumor models yielded similar tumor and skin Gli1 IC50 values, suggesting that skin can be used as a surrogate tissue for the measurement of tumor Gli1 levels. In addn., PF-5274857 was found to effectively penetrate the blood-brain barrier and inhibit Smo activity in the brain of primary medulloblastoma mice, resulting in improved animal survival rates. The brain permeability of PF-5274857 was also confirmed and quantified in nontumor-bearing preclin. species with an intact blood-brain barrier. PF-5274857 was orally available and metabolically stable *in vivo*. These findings suggest that PF-5274857 is a potentially attractive clin. candidate for the treatment of tumor types including brain tumors and brain metastasis driven by an activated Hh pathway. Mol Cancer Ther; 11(1); 57-65.

2. Modeling sarcomagenesis using multipotent mesenchymal stem cells [Full Text]

By Rodriguez, Rene; Rubio, Ruth; Menendez, Pablo

From Cell Research (2012), 22(1), 62-77. | Language: English, Database: CAPLUS

Because of their unique properties, multipotent mesenchymal stem cells (MSCs) represent one of the most promising adult stem cells being used worldwide in a wide array of clin. applications. Overall, compelling evidence supports the long-term safety of *ex vivo* expanded human MSCs, which do not seem to transform spontaneously. However, *exptl.* data reveal a link between MSCs and cancer, and MSCs have been reported to inhibit or promote tumor growth depending on yet undefined conditions. Interestingly, solid evidence based on transgenic mice and genetic intervention of MSCs has placed these cells as the most likely cell of origin for certain sarcomas. This research area is being increasingly explored to develop accurate MSC-based models of sarcomagenesis, which will be undoubtedly valuable in providing a better

Analysis Refine

Sample Analysis: Company-Organization

Pfizer Inc, USA

Pfizer Global Research and Development, USA

Pfizer Products Inc, USA

Chas Pfizer & Co Inc

Pfizer Ltd, UK

Pfizer Inc

Pfizer Global Research and Development, UK

Pfizer Limited, UK

Pfizer Cent Res, USA

Pfizer Global Research & Development, USA

2.9 期刊和专利检索

如果知道一篇文章的期刊名称或者题目，一篇专利的专利号等细节信息，通过 SciFinder 进行检索就需要利用到下面几种途径。

如果知道一篇文章的 accession number (AN)。在 document Identifier 中输入。

Explore References

Research Topic Document Identifier(s) Search

Author Name

Company Name

Document Identifier

Journal

Patent

Tags

Enter one per line.

Examples:

1983:4296

107:12935

10.1021/pp050327j

如果需要通过期刊的名称，卷期号，题目，作者姓名来查找某篇文章可以通过 Journal 途径来查找

Explore References

Research Topic Journal Search

Author Name

Company Name

Document Identifier

Journal

Patent

Tags

Journal Name * Volume Issue Starting Page

Title Word(s)

Example: Antibiotic

Author Name

Last * First Middle

Publication Year(s)

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

如果需要通过专利号、专利权人的姓名、发明人的姓名来查找专利，可以通过 Patent 途径来检索

Explore References

Research Topic	Patent Number ⓘ	<input type="text"/>	<input type="button" value="Search"/>
Author Name		Examples: <i>WO 2001011365</i>	
Company Name	Assignee Name ⓘ	<input type="text"/>	
Document Identifier		Examples: <i>Cancer Research Technology Limited</i>	
Journal	Inventor Name ⓘ	<input type="text"/> <input type="text"/> <input type="text"/>	
Patent		Last * First Middle	
Tags			
	Publication Year(s) ⓘ	<input type="text"/>	
		Examples: <i>1995, 1995-1999, 1995-, -1995</i>	

第三章 物质检索

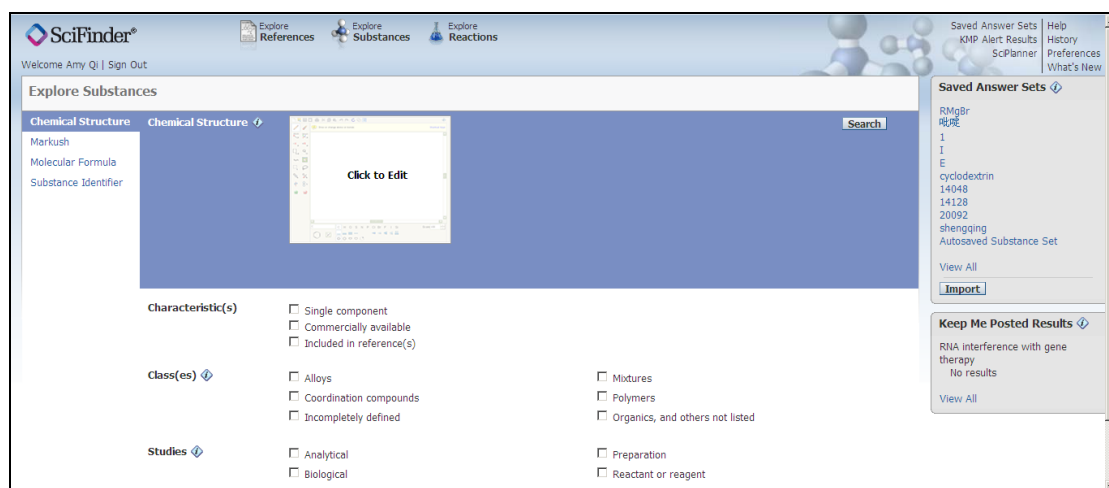
SciFinder 包含世界上最全，最大的物质数据库，所有有CAS No的物质都能在SciFinder中检索出来。

3.1 物质检索概览及物质结果界面

3.1.1 物质检索 (Explore Substances)

在 SciFinder® 物质检索页面有以下几种方式可选：

- 结构检索 (Chemical structure)
- Markush 检索 (Markush)
- 分子式检索 (Molecular formula)
- 物质标识符检索 (Substance identifier)



3.1.2 物质检索答案集界面

在检索到物质答案列表后，可进行查看或后处理等操作：

包括：

- 1) 改变排序方式 (Sort by) 。
- 2) 对物质答案集进行分析 (Analyze) 或限定 (refine)。
- 3) 选择 (Select All) 或取消选择 (Deselect All) 所有列表中的物质。
- 4) 删除 (Remove) 或保留 (keep) 所选物质。(在次工具栏的 Tool 下)
- 5) 基于物质相关任务创建 KMP Alert profile。(物质标识符检索下不能设置 KMP 提醒功能)
- 6) 使用菜单选项获得相关物质信息 (物质标准菜单)。
- 7) 将物质记录保存 (Save) 到服务器上。
- 8) 打印 (Print) 物质记录。
- 9) 将物质记录以文件格式输出 (export) 到本地电脑。
- 10) 发送答案到 SciPlanner
- 11) 获得以下信息:
 - a) 获得物质的参考文献 (Get References) , 包括全文链接 (full text)。
 - b) 获得物质的反应 (Get Reactions)
 - c) 查看物质的商业信息 (Commercial sources)

对于单个物质答案集可以进行如下操作。

目的	操作
查看物质详情 (substance details)	在物质答案列表中, 点击: <ul style="list-style-type: none"> • Substance Detail 查看物质详情。 • 一个答案的 CAS 登记号。 • 一个答案物质结构图。 • 查看物质的实验性质 (Experimental Properties) (如果存在)。 • 查看物质的谱图 (Spectra) (如果存在)。 • 查看生物活性标记物 (Bioactivity Indicators)。 • 查看靶点标记物 (Target Indicators)。
获得物质的文献 (Get references), 包括链接至全	在物质答案列表中, 点击: <ul style="list-style-type: none"> • 物质右侧的文献超链接  ,  ~21748 中 ~21748 显示的是相关

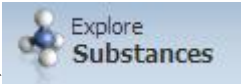
文 (full text)	<p>的文献数量。</p> <ul style="list-style-type: none"> 物质标准菜单里的 Get References 。 <p>在物质详情里显示，点击：</p> <ul style="list-style-type: none"> 次工具栏里的获得文献 (Get References) 超链接。
获得反应 (Get reactions)，可限定物质为某种反应角色。	<p>在物质答案集列表里，点击：</p> <ul style="list-style-type: none"> 物质标准菜单里的 Get Reactions 物质右侧的反应超链接  。 <p>在物质详情里显示，点击：</p> <ul style="list-style-type: none"> 次工具栏里的 Get Reactions 超链接。
查看商业信息 (Commercial Source Information)，市售化学品或供应商。	<p>在物质答案集列表里，点击：</p> <ul style="list-style-type: none"> 物质标准菜单里的 Get Commercial Sources 。 物质右侧的商业信息超链接 Commercial Sources  。 <p>在物质详情里显示，点击：</p> <ul style="list-style-type: none"> 次工具栏里的 Get Commercial Sources 超链接。
查看管制信息 (Regulatory Information)	<p>在物质答案集列表里，点击：</p> <ul style="list-style-type: none"> 物质标准菜单里的 Get Regulatory Information 。 物质右侧的管制品信息超链接 Regulatory Information  。 <p>在物质详情里显示，点击：</p> <ul style="list-style-type: none"> 次工具栏里的 Get Regulatory Information 超链接 。
发送至 SciPlanner	将所选物质发送到 SciPlanner.
对物质记录设置一个链接 (Link to)	<p>在物质详情里显示，点击：</p> <ul style="list-style-type: none"> 工具栏里的 Link 超链接。
获得物质相关信息(物质标准菜单)	<p>将鼠标悬停在物质结构上，点击  可以打开物质标准菜单。物质 CAS 登记号显示在第一列，下面是其它可用操作的列表。选择其中的某个可用操作。</p>
放大物质结构图像	<p>将鼠标悬停在物质结构上，点击  。</p>

3.2 物质标识符检索 (Explore Substances by Substance Identifier)

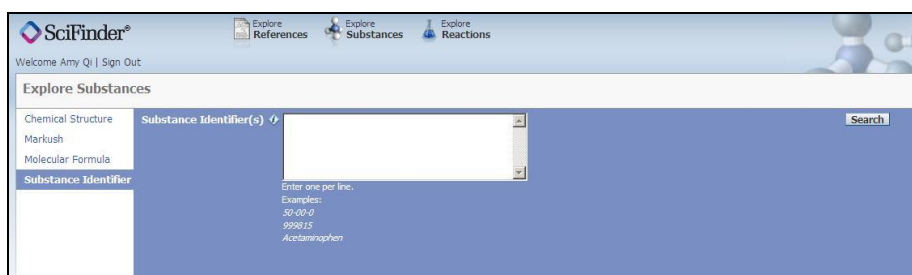
3.2.1 概览

在 SciFinder 中可以通过物质标识符查找化学物质，物质标识符包括化学名称（常用名，商品名，首字母缩略语）和 CAS 登记号（CAS Registry Number[®]），也可将化学名称和 CAS 登记号组合用进行查找。
注意：使用物质标识符检索不能设置 KMP 提醒功能。

3.2.2 检索举例

1) 在主工具栏，点击 。

2) 选择物质标识符检索



3) 在检索框内键入一个或多个物质标识符

注意：

- 最多可输入 25 个物质标识符。
- 每个标识符的字符数应小于 200。
- 每行输入一个标识符。不能用分号（；）分隔标识符。导航条中使用分号来分隔标识符，但检索查询时不能使用分号来分隔。
- 不区分大小写并且可以包括空格和标点符号。
- 可以包括连字符。如果连字符出现于 CAS 登记号中，必须是下列格式：n-2-1(例如，50-00-0)。

举例：

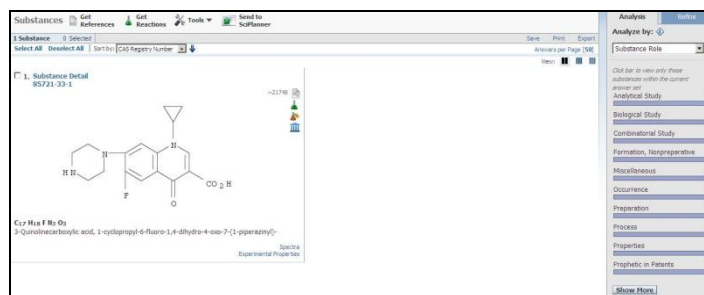


4) 点击 search 进行检索。

检索结果包括下列三种情况：

A. 显示检索结果。

举例：



B. 未发现符合检索条件的结果。

C. 出错。

出错信息:	操作:
A chemical name or CAS Registry Number is required.	▶ 在物质标识符文本框内输入化学名称或 CAS 登记号。
Only 25 identifiers can be searched at one time.	▶ 一次检索不能包括超过 25 个标识符。

5) 如果检索结果:

- 未找到感兴趣结果，点击导航条返回检索界面，修改检索条件。
- 包括感兴趣结果，可继续进行其他可用操作。

3.2.3 物质详情

点击 Substance Detail 可以查看该物质的详细信息，物质记录通常包括了 CAS 登记号、化学结构、分子式、名称、文献数量、文献类型、物质性质相关数据等。

可以使用 Save, Print, Export 用于不同形式的输出。

在专利和非专利文献中是否有有关该物质或者该物质衍生物在某些具体领域的报道，点击 ✓ 可以获得对应的文献。

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study	✓	✓	✓	✓
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Combinatorial Study		✓		
Formation, Nonpreparative		✓		✓
Miscellaneous	✓	✓		
Occurrence	✓	✓		✓
Preparation	✓	✓	✓	✓
Process	✓	✓	✓	✓
Properties	✓	✓	✓	✓
Prophetic in Patents	✓		✓	
Reactant or Reagent	✓	✓		✓
Uses	✓	✓	✓	✓

生物活性标记物和靶点标记物

Bioactivity Indicators <small>NEW</small>		References	Target Indicators <small>NEW</small>		References
Anti-infective agents (all) > Anti-infective agents		101	Apoptosis-regulating proteins (all) > Bcl-2 proteins		10
Anti-infective agents (all) >>> Antibacterial agents		2141	C-reactive protein		19
Anti-infective agents (all) >>> Tuberculostatics		121	Cytokines (all) >>> Interleukin 8		18
Anti-infective agents (all) >> Antibiotics		3539	Cytokines (all) > Cytokines		12
Anti-infective agents (all) >> Antimicrobial agents		649	Cytokines (all) > Interferons		21
Anti-infective agents (all) >>> Anti-HIV agents		29	Cytokines (all) >>> Interleukin 1 β		21
Anti-infective agents (all) >>> Antiviral agents		158	Cytokines (all) >> Interleukin 2		11
Anti-infective agents (all) >> Fungicides		254	Cytokines (all) >> Interleukin 6		32
Anti-infective agents (all) > Disinfectants		164	Cytokines (all) >> Interleukin 8		18
Anti-infective agents (all) >> Parasitocides		36	Cytokines (all) >> Tumor necrosis factors		70
Anti-infective agents (all) >>> Antimalarials		40	DNA-binding proteins (all) >>> Transcription factor NF- κ B		11
Anti-infective agents (all) >>> Protozoacides		30	DNA-binding proteins (all) >> Transcription factors		16
Anti-inflammatory agents (all) > Anti-inflammatory agents		227	Enzymes (all) > Coagulase		21
Anti-inflammatory agents (all) > Nonsteroidal anti-inflammatory drugs		99	Enzymes (all) > DNA gyrases		244
Antitumor agents (all) > Antitumor agents		196	Enzymes (all) > DNA transposases		15
Cytoprotective agents (all) > Cytoprotective agents		26	Enzymes (all) >> β -Lactamase		1043
Hematologic agents >> Anticoagulants		38	Enzymes (all) >>>> Angiotensin-converting enzyme		30
Immune agents (pharmaceutical) > Allergy inhibitors		26	Enzymes (all) >>>> Adenosine triphosphatase		10
Immune agents (pharmaceutical) >> Immunomodulators		56	Enzymes (all) >>>> Alkaline phosphatase		12
Immune agents (pharmaceutical) >> Immunosuppressants		67	Enzymes (all) >>>> CAMP phosphodiesterase		13
Immune agents (pharmaceutical) >> Vaccines		64	Enzymes (all) >>>>> Caspase-3		11
Natural products MD pharmaceutical		54	Enzymes (all) >>> Elastase		17
Nervous system agents (all) >>> Analgesics		66	Enzymes (all) > Integrase		26

预测性质(Predicated Properties)

显示由 Advanced Chemistry Development Inc. 所建立的 ACD/Labs 软件计算出的物性数据。计算特性的窗口如图显示。计算特性只适用于不含金属原子的单一物质(除聚合物之外)。

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal			
Biological Properties	Value	Condition	Note
Bioconcentration Factor	1.0	pH 1 Temp: 25 °C	(37)
Bioconcentration Factor	1.0	pH 2 Temp: 25 °C	(37)
Bioconcentration Factor	1.0	pH 3 Temp: 25 °C	(37)
Bioconcentration Factor	1.0	pH 4 Temp: 25 °C	(37)
Bioconcentration Factor	1.0	pH 5 Temp: 25 °C	(37)
Bioconcentration Factor	1.0	pH 6 Temp: 25 °C	(37)
Bioconcentration Factor	1.0	pH 7 Temp: 25 °C	(37)
Bioconcentration Factor	1.0	pH 8 Temp: 25 °C	(37)
Bioconcentration Factor	1.0	pH 9 Temp: 25 °C	(37)
Bioconcentration Factor	1.0	pH 10 Temp: 25 °C	(37)
Chemical Properties	Value	Condition	Note
Koc	1.0	pH 1 Temp: 25 °C	(37)
Koc	1.0	pH 2 Temp: 25 °C	(37)
Koc	1.0	pH 3 Temp: 25 °C	(37)
Koc	1.0	pH 4 Temp: 25 °C	(37)
Koc	1.0	pH 5 Temp: 25 °C	(37)
Koc	1.0	pH 6 Temp: 25 °C	(37)
Koc	2.01	pH 7 Temp: 25 °C	(37)
Koc	1.95	pH 8 Temp: 25 °C	(37)

Density Properties	Value	Condition	Note
Density	1.461±0.06 g/cm3	Temp: 20 °C Press: 760 Torr	(37)
Molar Volume	226.7±3.0 cm3/mol	Temp: 20 °C Press: 760 Torr	(37)
Lipinski and Related Properties	Value	Condition	Note
Freely Rotatable Bonds	3		(37)
H Acceptors	6		(37)
H Donors	2		(37)
H Donor/Acceptor Sum	8		(37)
logP	1.625±0.831	Temp: 25 °C	(37)
Molecular Weight	331.34		(37)
Spectra Properties	Value	Condition	Note
Carbon-13 NMR Spectrum	See spectrum		(38)
Proton NMR Spectrum	See spectrum		(38)
Structure-related Properties	Value	Condition	Note
Polar Surface Area	72.9 A2		(37)
Thermal Properties	Value	Condition	Note
Boiling Point	581.8±50.0 °C	Press: 760 Torr	(37)
Enthalpy of Vaporization	91.50±3.0 kJ/mol	Press: 760 Torr	(37)
Flash Point	305.6±30.1 °C		(37)

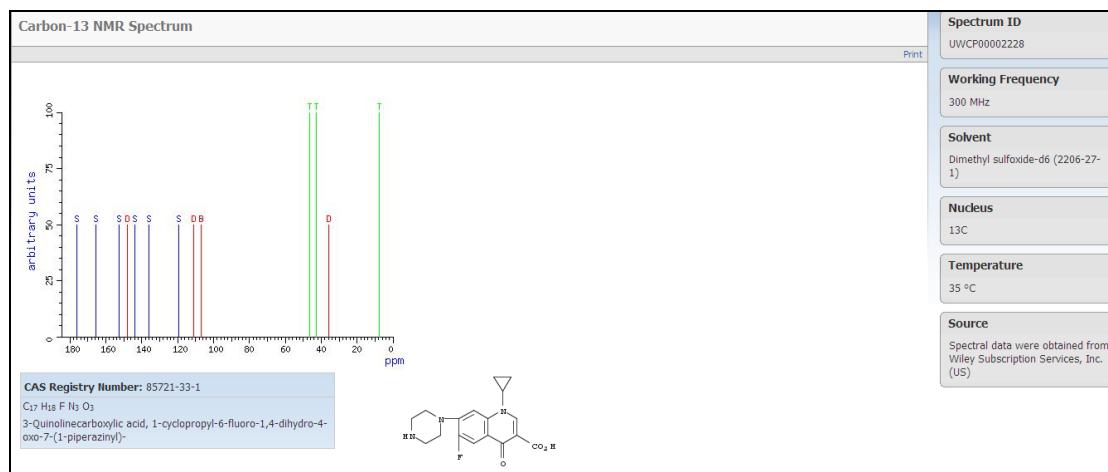
(37) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02 (© 1994-2012 ACD/Labs)
(38) Predicted NMR data calculated using Advanced Chemistry Development, Inc. (ACD/Labs) Software V11.01 (© 1994-2012 ACD/Labs)

实验性质 (Experimental Properties)

Experimental Properties, 显示其物质的实验性质。

Experimental Properties: Biological Chemical Flow and Diffusion Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal			
Biological Properties	Value	Condition	Note
ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion)	See full text	1 of 25	(2)CAS
Half-Life (Biological)	See full text	1 of 16	(9)CAS
LC50	See full text		(13)CAS
LD50	See full text		(14)CAS
Median Lethal Dose(LD50)	1165 mg/kg	Organism: mouse Route: intraperitoneal	(16)CAS
Median Lethal Dose(LD50)	1165 mg/kg	Organism: mouse Route: intraperitoneal	(17)CAS
Minimum Inhibitory Concentration	See full text	1 of 366	(29)CAS
Chemical Properties	Value	Condition	Note
Acid/Base Dissociation Constant (Ka/Kb)	See full text	1 of 15	(1)CAS
Dissociation Constant	See full text		(6)CAS
logP	See full text	1 of 13	(11)CAS
Solubility	See full text	1 of 4	(10)CAS
Flow and Diffusion Properties	Value	Condition	Note
Hydrodynamic Radius	See full text		(10)CAS
Lipinski and Related Properties	Value	Condition	Note
logP	See full text	1 of 13	(11)CAS
Spectra Properties	Value	Condition	Note
Carbon-13 NMR Spectrum	See spectrum		(3)WSS
Carbon-13 NMR Spectrum	See full text	1 of 5	(4)CAS
Emission/Luminescence Spectrum	See full text		(7)CAS
IR Absorption Spectrum	See full text	1 of 15	(11)CAS
Structure-related Properties	Value	Condition	Note
Crystal Structure	See full text		(5)CAS
Molecular Structure	See full text	1 of 2	(30)CAS
Particle Size	See full text		(32)CAS
X-Ray Diffraction Pattern	See full text	1 of 2	(5)CAS
Thermal Properties	Value	Condition	Note
Enthalpy	See full text		(8)CAS
Entropy	See full text		(8)CAS
Gibbs Free Energy	See full text		(8)CAS
Melting Point	318 °C		(18)CAS
Melting Point	266.0 °C		(19)CAS
Melting Point	266 °C		(20)CAS
Melting Point	265-267 °C (decomp)		(21)IC
Melting Point	261-263 °C		(22)IC
Melting Point	258 °C		(23)CAS
Melting Point	256-258 °C	Solv: acetic acid (64-19-7)	(15)CAS
Melting Point	255-257 °C (decomp)		(24)IC
Melting Point	255-257 °C	Solv: N,N-dimethylformamide (68-12-2)	(25)CAS
Melting Point	225-257 °C (decomp)		(26)NLM
Melting Point	208-210 °C		(4)CAS
Melting Point	187 °C	Solv: chloroform (67-66-3); ethanol (64-17-5)	(27)CAS
Melting Point	See full text	1 of 2	(28)IC
Thermal Analysis	See full text	1 of 3	(34)CAS

谱图:



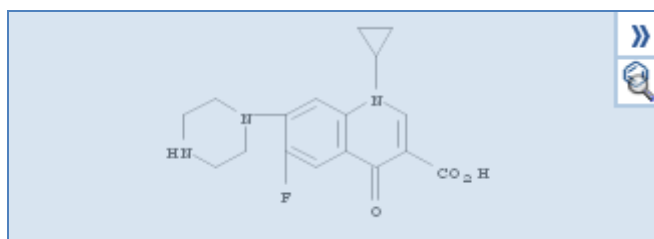
参考文献

- (1) Sekhon, B. S.; Journal of the Indian Chemical Society 2008, V85(2), P200-202 CAPLUS
- (2) Li, Ping; Acta Pharmacologica Sinica 2004, V25(10), P1262-1266 CAPLUS
- (3) Holzgrabe, Ulrike; Magnetic Resonance in Chemistry 1994, V32(3), P192-6 CAPLUS
- (4) Thumar, Nilesh J.; Archiv der Pharmazie (Weinheim, Germany) 2011, V344(2), P91-101 CAPLUS
- (5) Mahapatra, Sudarshan; Crystal Growth & Design 2010, V10(4), P1866-1870 CAPLUS
- (6) Sardohan, Tugba; Chemia Analityczna (Warsaw, Poland) 2009, V54(4), P629-642 CAPLUS
- (7) Wang, Jian; Science in China, Series B: Chemistry 2008, V51(1), P31-40 CAPLUS
- (8) Shareef, Kafia M.; Advances in Maritime and Naval Science and Engineering, Proceedings of the International Conference on Maritime and Naval Science and Engineering (MN '09), 2nd, Brasov, Romania, Sept. 24-26, 2009 2009, P129-139 CAPLUS
- (9) Albarellos, G. A.; Journal of Veterinary Pharmacology and Therapeutics 2004, V27(3), P155-162 CAPLUS
- (10) Therien-Aubin, Heloise; Biomacromolecules 2008, V9(4), P1248-1254 CAPLUS
- (11) Gu, Cheng; Environmental Science and Technology 2005, V39(23), P9166-9173 CAPLUS
- (12) Al-Mustafa, Jamil; Journal of Coordination Chemistry 2003, V56(2), P113-124 CAPLUS
- (13) Sanderson, Hans; Toxicology Letters 2009, V187(2), P84-93 CAPLUS
- (14) Shandil, Radha K.; Antimicrobial Agents and Chemotherapy 2007, V51(2), P576-582 CAPLUS
- (15) Heravi, Majid M.; Journal of Chemical Research 2005, (9), P578-579 CAPLUS
- (16) Nozaki, Masakatsu; Ensho 1991, V11(4), P343-8 CAPLUS
- (17) Tanaka, Kazuhiko; Gifu Daigaku Igakubu Kiyo 1993, V41(5), P850-65 CAPLUS
- (18) Arayne, M. Saeed; Medicinal Chemistry Research 2010, V19(8), P717-731 CAPLUS
- (19) Hughes, Laura D.; Journal of Chemical Information and Modeling 2008, V48(1), P220-232 CAPLUS
- (20) Habibi-Yangjeh, Aziz; Bulletin of the Korean Chemical Society 2008, V29(4), P833-841 CAPLUS
- (21) Grohe, Klaus; Liebigs Annalen der Chemie 1987, (1), P29-37 CAPLUS
- (22) Sanchez, Joseph P.; Journal of Medicinal Chemistry 1988, V31(5), P983-91 CAPLUS
- (23) Sekhon, B. S.; Journal of the Indian Chemical Society 2007, V84(12), P1205-1209 CAPLUS
- (24) Grohe, Klaus; DE 3142854 A1 1983 CAPLUS
- (25) Ye, Faqing; Yaoxue Xuebao 2003, V38(4), P260-263 CAPLUS

注意: 蓝色高亮显示的字段都是可以打开的链接。

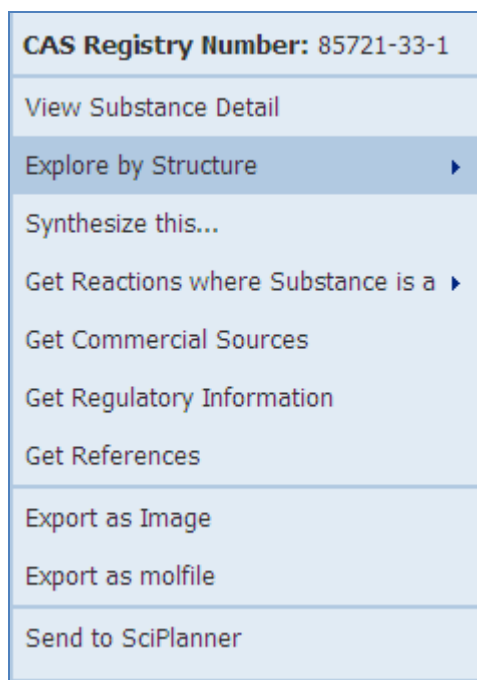
3. 2. 4 物质标准菜单

物质标准菜单里包含物质所有的相关信息。

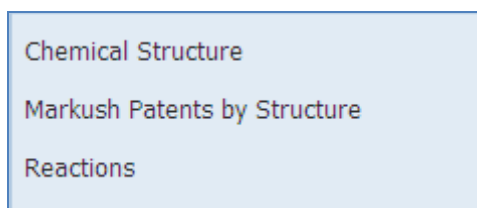


点击

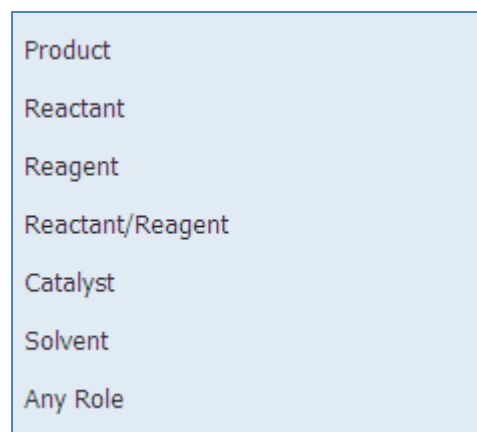




点击 Explore by Structure,



点击 Get Reactions where Substance is a

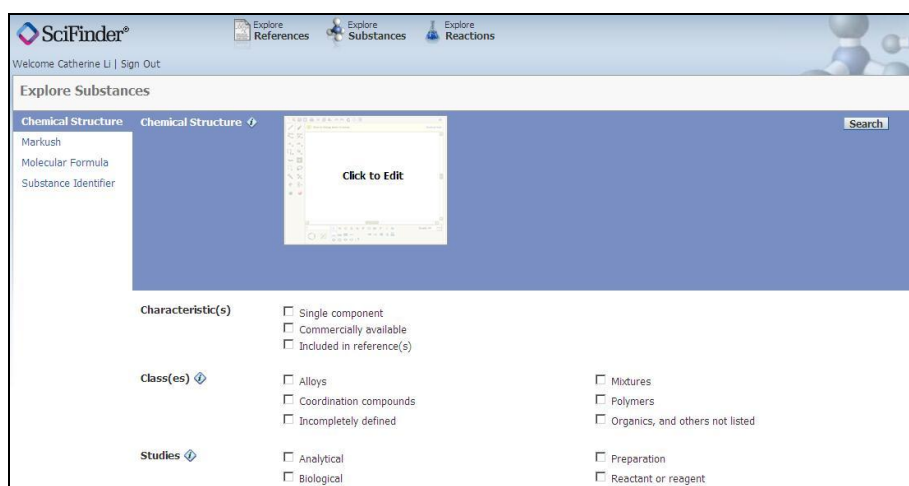


3.3 结构编辑器 (Structure Editor)

3.3.1 启动结构编辑器的方法

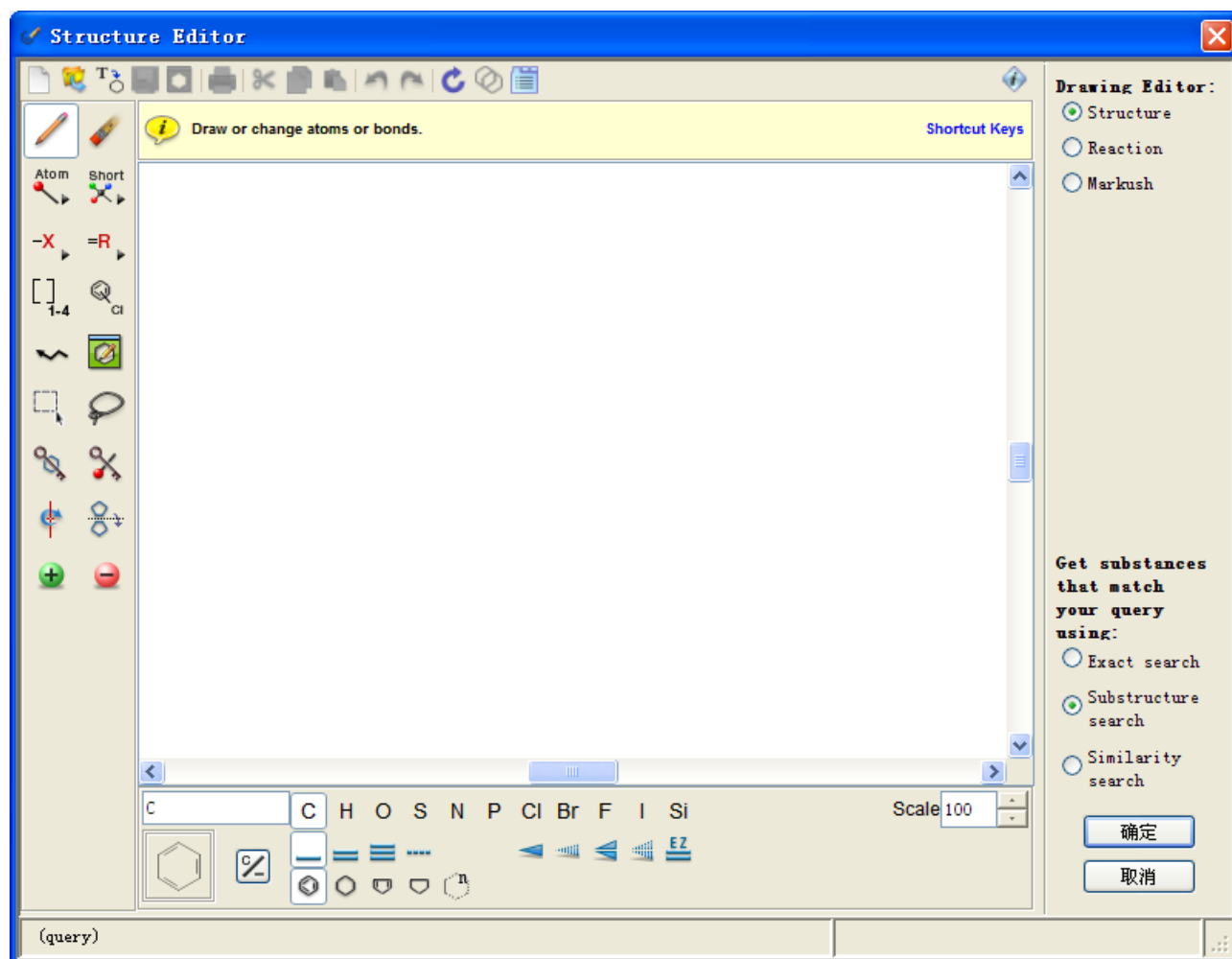


- 1) 点击 ，切换到物质检索界面。
- 2) 点击 Click to Edit。



注意：如果初次使用结构编辑器，需要按照提示下载 JAVA 插件。

3) 结构绘制窗口开启。







3.3.2 结构编辑器的构成

3.3.2.1 结构编辑器工具栏 (Structure Editor Toolbar)



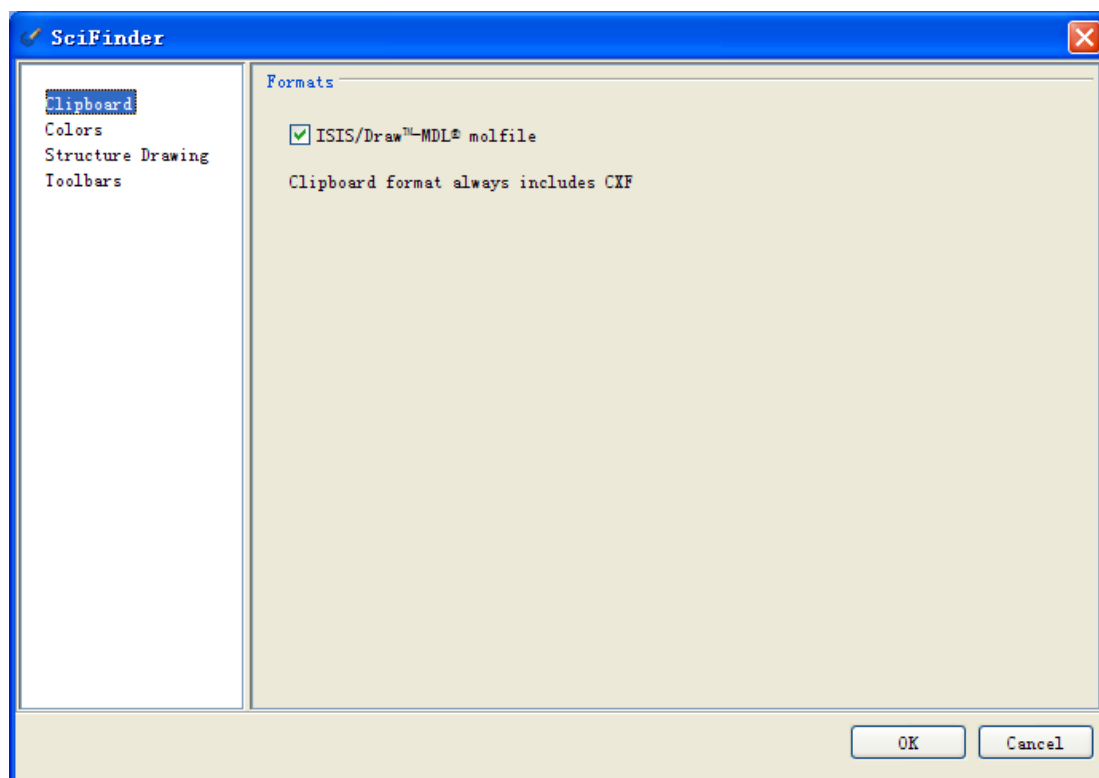
工具	图标	功能
新建 (New)		开启新的结构图标窗口。
导入 (Import)		导入以 . cxf 或 . mol 格式保存的结构。
添加 (Add to Editor)		打开添加工具, 通过外部标示符 (External Identifier) 文本框填写 SMILES 或 InChI 字符串, 将外部结构添加至编辑器。
导出 (Export)		保存当前结构 (. cxf 或 . mol 格式)。 注意: 默认保存在用户的根目录下 (如 C:\Documents and Settings\qxr77), 可以在导出对话框内选择其他地址。
保存为模板 (Save As Template)		保存当前结构为自定义模板。 可以在 Save As Template 对话框中为自定义模板指定名称。 注意: 1 模板以 . cxf 被保存至用户根目录 (C:\Documents and Settings\userid) 中的 SciFinder 子目录下。 2 点击垂直工具栏中的结构模板工具并打开自定义文件夹就可使用自定义模板。
打印 (Print)		打印当前结构。在打印对话框内可设定不超过 70 个字符长度的抬头。
剪切 (Cut)		剪切选中的结构或片段。
复制 (Copy)		复制选中的结构或片段。
粘贴 (Paste)		将剪切板中的内容粘贴至光标标示的位置。
撤销 (Undo)		撤销前一步的操作。允许多步撤销。
恢复 (Redo)		恢复前一步已撤销的操作。

刷新 (Repaint)		刷新绘图显示。
重叠检查 (Check Overlaps)		检查节点或键是否重叠。若重叠则该结构会被执行碎片检索。
参数设置 (Preferences)		结构编辑器参数设置。

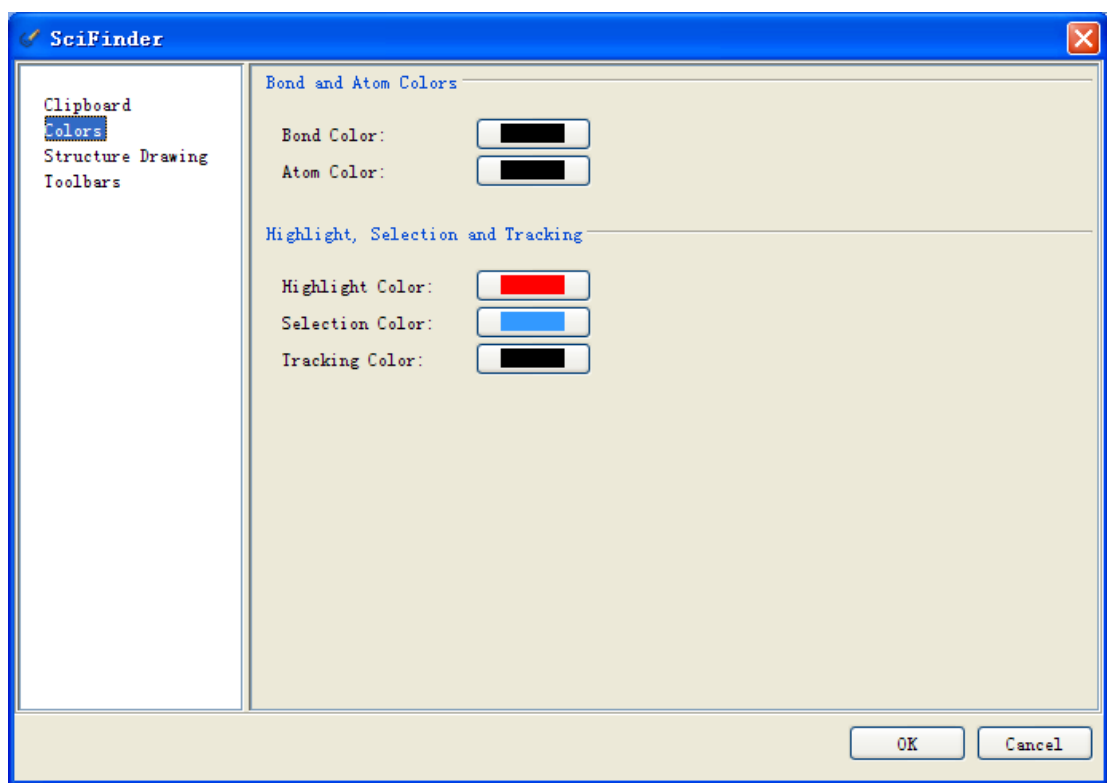
其中  (Preferences) 参数设置共分为四个部分：

粘贴板 (Clipboard)、颜色 (color)、结构绘制 (structure drawing)、工具条 (Toolbars)。

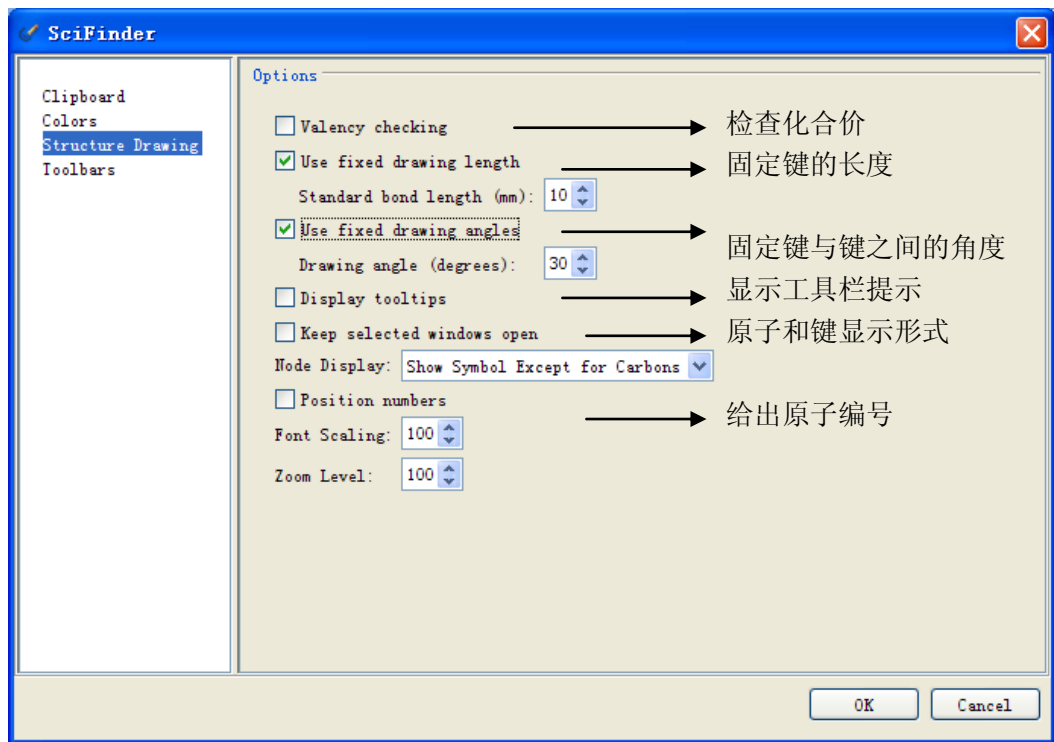
1) 粘贴板 (Clipboard) 可以设置粘贴板中结构式的格式。



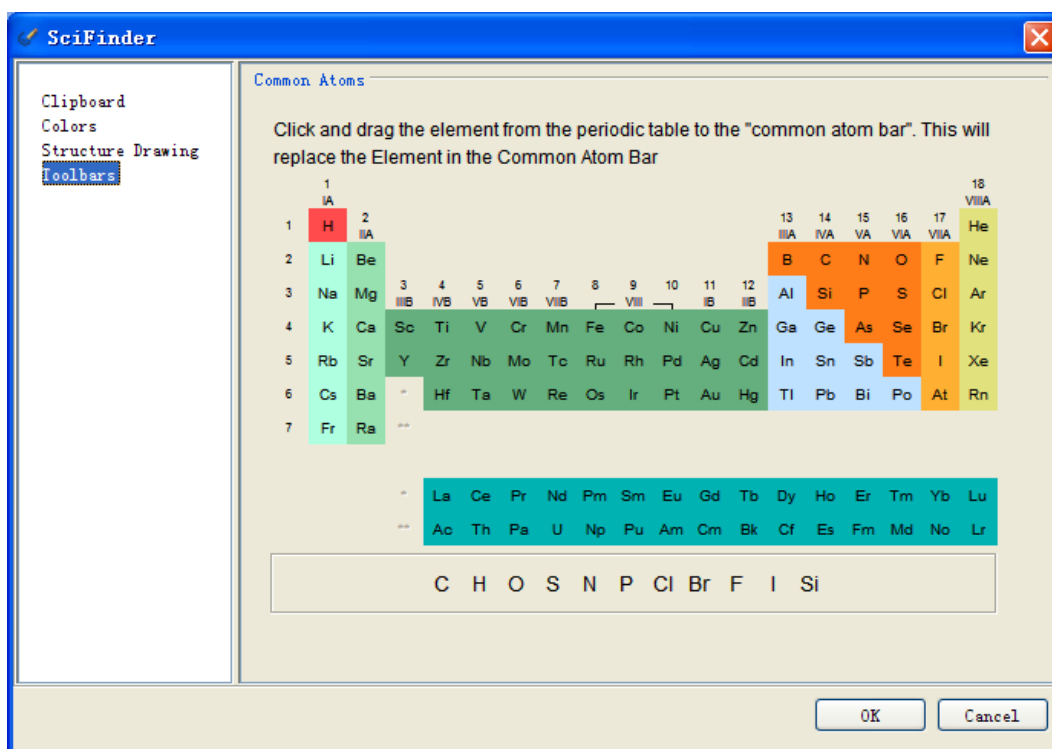
2) 颜色 (Colors) 可以设置结构式画图面板键的颜色、原子的颜色。



3) 结构绘制 (structure drawing)



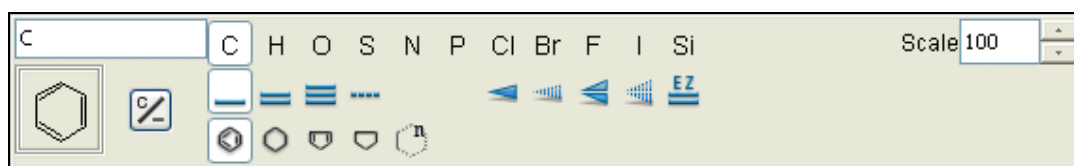
4) 工具条 (Toolbars) 可以设定面板下方显示的常用原子




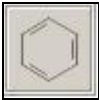





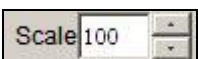
3.3.2.2 查询切换区 (Query Transfer Area)

切换至 Structure	Drawing Editor: <input checked="" type="radio"/> Structure <input type="radio"/> Reaction <input type="radio"/> Markush	将绘制面板和结构编辑器上的已有信息切换至物质检索页面
切换至 Reaction		将绘制面板和结构编辑器上的已有信息切换至反应检索页面
切换至 Markush		将绘制面板和结构编辑器上的已有信息切换至 Markush 检索页面

3.3.2.3 水平工具面板 (Horizontal Tool Palette)



水平工具面板位于结构编辑器绘图区域的下方，水平工具面板包括以下工具和面板

名称	工具/面板
当前原子框 (Current Atom box)	
当前结构框 (Current Structure box)	
碳/单键 (Carbon/Single Bond tool)	
常用原子面板 (Common Atoms palette)	
键面板 (Bonds palette)	
立体键面板 (Stereo Bonds palette)	
常用环面板 (Common Rings palette)	
比例框 (Scale box)	

水平工具面板中每个工具的功能如下：

1) 当前原子框 (Current Atom box)

当前原子框是结构编辑器绘图区域下方的矩形框，C (碳) 为默认设定。

当前的原子框显示目前选择的原子、快捷方式、可变基团、R 基团或官能团。当在结构图标窗口上绘图，表示在当前原子框中的标志将会出现。

改变在结构图标窗口中的原子的方法：


- 点击常用原子面板上的常用原子。
- 在当前原子框内键入一个原子、快捷基团、可变 X 基团、R-基团或官能团。
- 在原子菜单、快捷菜单、可变基团 X 菜单、R-基团或官能团工具中选择一个原子或基团。

2) 当前结构框 (Current Structure box)

当前结构框是结构编辑器绘图区域下方的矩形显示框。框内显示用于结构绘制的当前结构。

选择显示在当前结构框中当前结构的方法：

- 在常用环面板点击一个环。
- 使用模板工具选择模板。

默认显示：空白。当开启结构编辑器时框内显示为一个苯环。但在绘制苯环之前必须点击 。

3) 常用原子面板 (Common Atoms palette)

常用原子板位于结构编辑器绘图区域的下方。显示出一些最常用的原子。

当点击原子图标，该原子将显示在当前原子框中，并会变成默认原子。

如果想插入未显示在常用原子框中的原子，则：

- 在结构编辑器参数设置内编辑并改变显示在常用原子面板上的原子。
- 使用原子菜单工具。

4) 键面板 (Bonds palette)

键面板显示于常用原子面板的下方。

点击相应的键按钮就可以选择一个新的键类型并插入所绘制结构中。键的类型有：单键、双键、三键和任意键。默认设定为单键，选择任意键会检索所有可能的键类型（单键、双键或三键）。

5) 立体键面板 (Stereo Bonds palette)

立体键面板显示在结构编辑器窗口的下方。

可选立体键包括：




- 向前的立体单键
- 向后的立体单键
- 向前的立体双键
- 向后的立体双键
- E、Z 几何双键

6) 常用环面板 (Common Rings palette)

常用环面板显示为一些最常用的环。

点击环图标就可选择一个常用环，光标随即变为环图标的样子。所选中的环成为默认。

常用环面板中的绘图工具包括：

图标	工具
	苯环 (Benzene tool)
	环己烷 (Cyclohexane tool)
	环戊二烯 (Cyclopentadiene tool)
	环戊烷 (Cyclopentane tool)
	3-15 元环 (3-15 Member Ring tool)

7) 比例框 (Scale box)

比例框用于调整绘图区域中的结构或反应的显示尺寸。

默认设定是100%。要改变显示比例，只要在比例框中的按下Enter，然后输入新的比例。您可以在25%至400%之间改变显示比例。

水平工具面板的用途：


- 1) 选择和插入常用原子、键和环
- 2) 选择和插入立体键
- 3) 调整结构至合适的比例。

当编辑窗口首次打开，默认原子和键显示为被压下的状态。

3.3.2.4 状态条 (Status bar)



在水平工具面板下方，是状态条 (Status bar)，在状态条内，会显示当前所绘制结构的分子式和分子量。修改所查询结构时分子式和分子量会随之改变。

点击并拖拽绘制窗口右下角的图标，可以缩放绘制窗口的大小。也可以通过点击边线来调整窗口大小。

3.3.2.5 垂直工具面板 (Vertical Tool Palette)

垂直工具面板位于结构编辑器的左侧。垂直工具面板包括结构和反应绘制工具，每个绘制工具有一个特定按钮。









点击垂直工具面板上的图标，光标会相应地改变或弹出对话框。可用的绘制工具取决于帐号模式和您所操作的结构检索方式。





结构或反应检索 (Structure or reaction searching) - 如果您要进行结构检索或反应检索, 垂直面板中的以下 12 个绘制工具可用。

图标	工具	图标	工具
	铅笔 (Pencil) (默认选项)		橡皮 (Eraser)
	原子菜单 (Atom Menu)		快捷菜单 (Shortcut Menu)
	链 (Chain)		模板 (Template)
	选择工具 (Selection)		套索 (Lasso)
	旋转 (Rotation)		翻转结构 (Flip Structure)
	正电荷 (Positive Charge)		负电荷 (Negative Charge)

结构查询 (带有 SSM 模块) (Structure searching with SSM) - 如果带有亚结构模块 (SSM), 则以下六个绘图工具可用。

图标	工具	图标	工具
	可变基团 X 菜单 (Variables (X Menu))		R-基团 (R-group)
	重复基团 (Repeating Group)		可变连接位置 (Variable Attachment Position)
	环锁定 (Lock Rings)		原子锁定 (Lock Atoms)

反应检索 (Reaction search) - 以下五个反应定义工具只在反应检索下可用。

图标	工具	图标	工具
	反应箭头 (Reaction Arrow)		反应角色 (Reaction Role)
	原子对应 (Atom Mapping)		反应位置标记 (Reaction Site Marking)
	官能团 (Functional Group)		


铅笔工具 (Pencil Tool)

用来绘制或改变节点（原子、快捷键、可变基团（X 菜单）、R-基团、官能团）和键。铅笔工具插入显示于当前原子框并绘制一根选自键面板或立体键面板的键。

注意：默认绘制时 C（碳）不显示。可以在结构编辑器参数设置的 Structure Drawing > Options > Node display 下更改此设置。

绘制节点的方法：

- 1) 在常用原子面板上或原子菜单、快捷键菜单、可变（X 菜单），R-基团或官能团工具里选择合适的节点。

- 2) 在垂直工具面板上，点击 。

- 3) 在光标置于所需位置绘画，然后单击。节点绘制成功。

绘制键的方法：

- 1) 在键面板或立体键面板上选择合适的键。

- 2) 在垂直工具面板上，点击 。

- 3) 在光标置于所需位置绘画，按住鼠标按钮，拖拽光标至所需键长，然后松开鼠标按钮。



键绘制完成，键两端为节点。

改变节点或键：


- 1) 选择不同的节点或键。

- 2) 在垂直工具面板上，点击 。

- 3) 将光标置于已有节点或键上（会高亮显示节点或键），然后单击。新的节点或键绘制成功。

在已有节点上附加键：

- 1) 选择合适的键。

- 2) 在垂直工具面板上，点击 。

- 3) 将光标置于节点上（此时节点会高亮显示）

- 4) 按住鼠标按钮，拖拽光标至所需键长，然后松开鼠标按钮。键被成功连接到节点上。

橡皮擦工具 (Eraser Tool)


用来删除结构中的原子或键

若要删除	操作如下
一个节点	<p>在垂直工具面板上，点击。</p> <p>将光标置于想要删除的节点上（此时该节点会高亮显示），然后单击该节点以及其附加的所有键被删除。</p>
一个键	<p>在垂直工具面板上，点击。</p> <p>将光标置于想要删除的键上（此时该键会高亮显示），然后单击。键以及其附加的所有末端节点即被删除。</p>
多个节点和键	使用套索工具或选择工具，加<Delete> 键删除。

原子菜单工具 (Atom Menu Tool)

使用原子菜单工具来绘制结构中的原子。

原子绘制方法：


- 1) 在垂直工具面板上，点击。会显示类似元素周期表的菜单，



- 2) 点击所需原子。该原子将出现于当前原子框中，铅笔被自动选择。
- 3) 将光标置于结构绘制窗口或置于已有节点上（该节点会高亮显示），然后单击。完成原子绘制

快捷菜单工具 (Shortcut Menu Tool)

快捷菜单工具用于简单快捷地绘制结构中的一部分。使用方法：

- 1) 在垂直工具面板上，点击 ，会显示如下快捷列表，

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

Close

- 2) 点击所需快捷键，所选快捷键会显示于当前原子框并成为默认。此时，铅笔工具被自动选择。点击 **Close**。
- 3) 将光标置于结构编辑窗口或置于某一节点上（会高亮显示），点击。快捷键绘制成功。

注意：

- 当绘制/放置时，快捷键会自动反转。
- 在亚结构检索中，快捷键被认为是锁定状态，也就是说，在快捷键节点上不允许取代。同时快捷键不能使用原子锁定工具解锁。

注：

快捷符号/名称	快捷符号/名称	快捷符号/名称	快捷符号/名称	快捷符号/名称
CH methyne	Bu-n (n-Bu) n-butyl	o-C ₆ H ₄ o-phenylene	CI ₃ triiodomethyl	NH ₂ amino
CH ₂ methylene	Bu-i (i-Bu) iso-butyl	m-C ₆ H ₄ m-phenylene	CHO formyl	NH ₃ ammonia
Me (CH ₃) methyl	Bu-s (s-Bu) sec-butyl	p-C ₆ H ₄ p-phenylene	CN (with triple bond) cyano	NO ₂ nitro
OMe (MeO) methoxy	Bu-t (t-Bu) tert-butyl	CF ₂ difluoromethylene	C(O)CH ₃ acetyl	OH hydroxyl
Et ethyl	OBu-n (n-BuO) n-butoxy	CF ₃ trifluoromethyl	CO ₂ H carboxy or carboxyl	OP ₃ H ₂ phosphate


OEt (EtO) ethoxy	OBu-i (i-BuO) iso-butoxy	CCl ₂ dichloromethylene	COOH carboxy or carboxyl	OSO ₃ H sulfate
Pr-n (n-Pr) n-propyl	OBu-s (s-BuO) sec-butoxy	CCl ₃ trichloromethyl	COSH thiocarboxy	PO ₃ H ₂ phosphono
Pr-i (i-Pr) iso-propyl	OBu-t (t-BuO) tert-butoxy	CBr ₂ dibromomethylene	CS ₂ H dithiocarboxy	SH mercapto
OPr-n (n-PrO) n-propoxy	Ph phenyl	CBr ₃ tribromomethyl	CSSH dithiocarboxy	SO ₂ sulfonyl
OPr-i (i-PrO) iso-propoxy	OPh phenoxy	CI ₂ diiodomethylene	NH imino	SO ₃ H sulfo

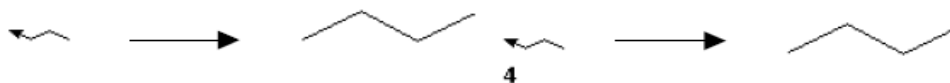
链工具 (Chain Tool)

链工具用于绘制链，最高可绘制 252 节点的链。

绘制链的方法：



- 1) 在垂直工具面板上，点击 。
- 2) 将光标置于绘制的链的起点。若要将链连接到已有节点上，则将光标置于该节点上高亮显示节点。
- 3) 按着鼠标的左键并拖曳鼠标至所需的长度。当拖曳链时，鼠标旁会显示链中的碳数。若要改变链的方向，在绘制链时按 Shift 键




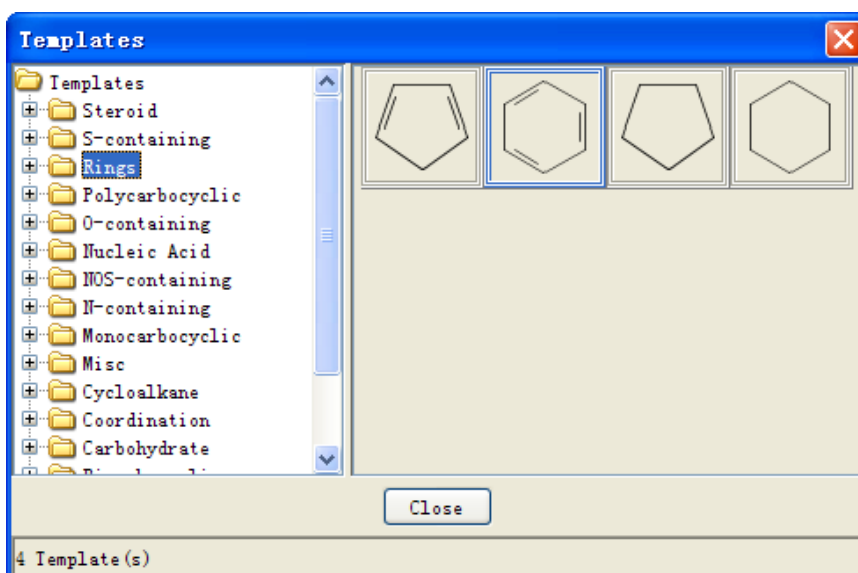
- 4) 当链的长度符合需要时，松开鼠标按钮。链绘制成功。

结构模板工具 (Template Tool)

结构模板工具用于绘制预定义或自定义的模板结构。

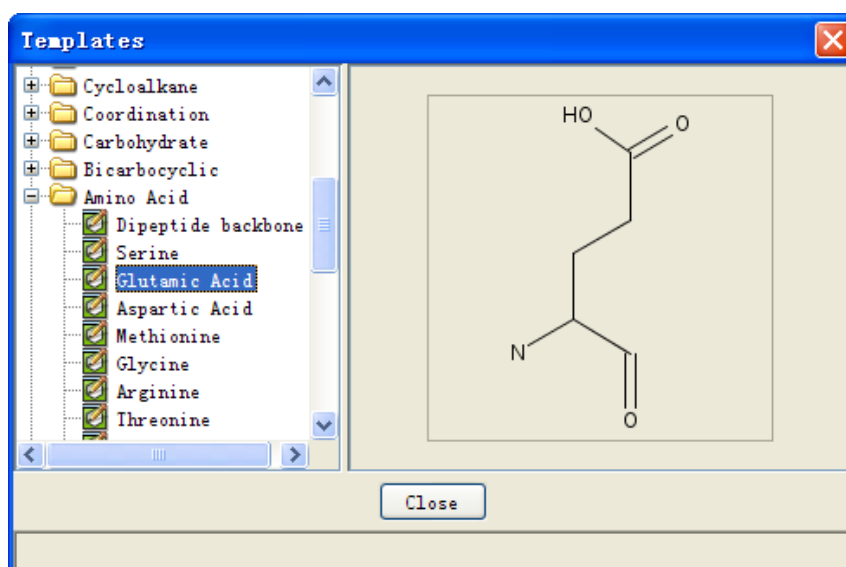
使用方法：

- 1) 在垂直工具面板上，点击 ，显示出模板窗口，以及所有模板文件夹。



2) 点击模板文件夹，选择所需模板结构。

举例：Amino Acid, Glutamic Acid



模板结构显示于当前结构框中并成为新的默认。模板工具被自动选择。

3) 在绘图区域单击，模板结构绘制成功。

注意：

模板结构不能加到已有节点或键上，但可以将节点和键加到模板结构上。



标题	含义
Steroid...	类固醇结构
S-containing...	含硫(S)结构
Rings	环结构
Polycarbocyclic...	多元碳环结构
O-containing...	含氧(O)结构
Nucleic Acid...	核酸结构


NOS-containing...	含氮(N)、氧(O)和硫(S)的结构
N-containing...	含氮(N)结构
Monocarbocyclic...	碳单环结构
Misc...	其它各种各样的结构
Cycloalkane	环烃结构
Coordination...	配位化合物结构
Carbohydrate...	碳水化合物结构
Bicarboyclic...	双元碳环结构
Amino Acid...	氨基酸结构
Alkaloid	生物碱结构
User Defined	用户自定义结构

选择工具 (Selection Tool)

选择工具用于选择单个原子、键、结构片段或整个结构。

所选中的项可以被移动、复制或删除。

目的	操作
选择单个对象	<ol style="list-style-type: none"> 在垂直工具面板上点击 。 点击一个节点或键、或者双击选择整个结构，选中的部分会高亮显示。
选择多个对象或整个结构	点击绘制结构中的个别键或节点的同时按住 <Ctrl> or <Shift>键。 - 或者 - 点击、按住、并拖拽鼠标按钮将对象框在一个框内，选中的对象会高亮显示。
移动一个所选对象	<ol style="list-style-type: none"> 将光标放在所选对象的任意位置上。 点击、按住、并拖拽鼠标按钮将对象移动至新的位置。
移动一个所选对象	在结构编辑器工具栏，点击  。 所选对象保留的同时被复制到粘贴板中。
移动一个所选对象	按<Delete> 键 - 或 -

	<p>在结构编辑器工具栏点击 </p> <p>注意：使用剪切（Cut）工具，对象会被至于粘贴板中。</p>
取消选择	点击结构绘制窗口的其他空白区域。

套索工具（Lasso Tool）

套索工具用于选择结构，所选中的结构可以被移动、复制或删除。

目的	操作
选择一个单独的节点	<ol style="list-style-type: none"> 1. 在垂直工具面板上点击  2. 光标变为套索的样子。 3. 将套索的尾部至于节点上并点击，该节点会高亮显示。
选择一个结构或结构片段	<ol style="list-style-type: none"> 1. 在垂直工具面板上点击 ，光标变为套索的样子。 2. 点击、按住并在结构或结构片段周围拖拽套索光标，当对象被封住后松开鼠标。选中部分会高亮显示。
移动一个选中的对象	<ol style="list-style-type: none"> 1. 将光标置于套索选中的区域。 2. 点击，按住并拖拽结构，移动至新的位置时松开鼠标，该片段被移动至新的位置。
复制一个选中的对象	<ol style="list-style-type: none"> 1. 在垂直工具面板上点击 ，光标变为套索的样子。 2. 点击、按住并在对象周围拖拽套索光标，当对象被封住后松开鼠标。选中部分会高亮显示。 3. 在结构编辑器工具栏上点击  <p>该结构被保留的同时复制到粘贴板中。</p>
删除一个选中的对象	<ol style="list-style-type: none"> 1. 在垂直工具面板上点击 ，光标变为套索的样子。 2. 点击、按住并在对象周围拖拽套索光标，当对象被封住后松开鼠标。选中部分会高亮显示。 3. 按住<Delete> 键。 <p>- 或 -</p> <p>在结构编辑器工具栏点击 </p> <p>注意：使用剪切（Cut）工具，对象会被置于粘贴板中。</p>

取消选择


点击结构编辑窗口的其他空白区域。

旋转工具 (Rotation Tool)

旋转工具用于以顺时针或逆时针方向旋转结构或独立的结构片段。

旋转结构或独立片断的方法：




- 1) 在垂直工具面板上，点击。
- 2) 将光标置于某个作为旋转中心的节点上。
- 3) 点击并按住鼠标按钮以顺时针或逆时针方向旋转。
- 4) 当转到合适方向是松开鼠标按钮。

翻转结构工具 (Flip Structure Tool)

翻转结构工具用于水平或垂直颠倒或翻转结构。

翻转结构的方法：




- 1) 在水平工具面板上点击，
- 2) 将光标置某个作为反转点的节点上，点击。使用 <Ctrl>+单击选择其它节点
- 3) Macintosh®: 使用 <Shift>+单击
- 4) 键入
 - a) H 水平翻转结构
 - b) V 水平翻转结构

正电荷工具 (Positive Charge Tool)

正电荷工具用于在原子上添加一个正电荷。

在原子上添加正电荷或减少一个负电荷的方法：




- 1) 在垂直工具面板上点击。
- 2) 将光标置于一个原子上单击。该原子会高亮显示，并且正电荷被加到原子上。
- 3) 再次单击鼠标，会在增加一个正电荷
- 4) 一个正电荷显示为+，一个以上正电荷显示为 n+ 电荷数大于 10+，则显示为>符号。
- 5) 撤销一个电荷：如果电荷数太多，使用负电荷工具来减少电荷。

负电荷工具 (Negative Charge)

负电荷工具用于在原子上添加一个负电荷。

在原子上添加负电荷或减少一个正电荷的方法：

- 1) 在垂直工具面板上点击 。
- 2) 将光标置于一个原子上单击。该原子会高亮显示，并且负电荷被加到原子上。
- 3) 再次单击鼠标，会在减少一个电荷
一个负电荷显示为-，一个以上负电荷显示为 n- 电荷数小于-10，则显示为<符号。
要撤销电荷减少：如果电荷数太少，使用正电荷工具来增加电荷。

可变基团 (X 菜单) 工具 (Variables (X Menu) Tool)

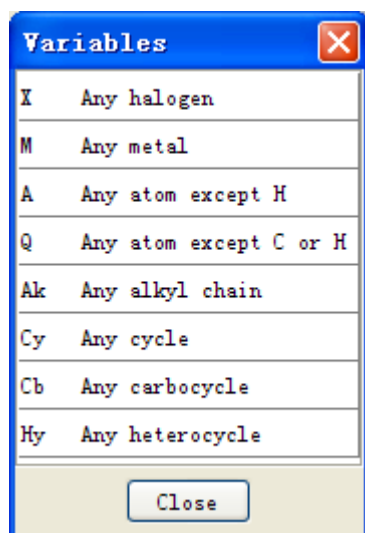
可变基团 (X 菜单) 工具用于绘制可变基团。

限制：

- 可变基团 (X 菜单) 工具仅在亚结构检索或反应检索中可用。
- 通式基团 (Ak, Cb, Cy, Hy) 不可用于环中或环中的 R-基团中。

可变基团绘制方法：

- 1) 点击 ，会显示以下可变基团列表：



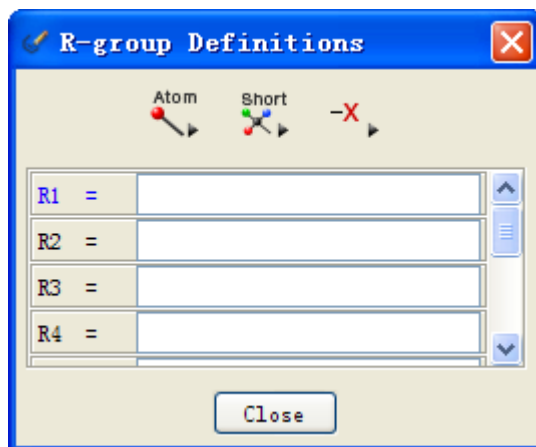
可变基团	解释说明
A	除氢以外的任何原子。
Ak	任意烷基链。 Ak 代表任意碳链，包括但不限于烷基。 注意： Ak 默认为锁定。

	Ak 不可以附加到另一个 Ak 基团（包括 R-基团或重复基团内的 Ak） 一个 Ak 基团不能有 3 个或 3 个以上的连接结构，并且至少有一个连接是 C 原子。
Cb	任意碳环。Cb 是 Cy 的子集并且仅包括碳原子。 注意：Cb 和 Hy 自动互相排斥。
Cy	任意环。 Cy 代表任意环体系，不限大小、组分、耦合或非耦合。Cy 包含 Cb 和 Hy。
Hy	任意杂环。Hy 是 Cy 的子集并且至少包含一个非碳原子。 注意：Hy 和 Cb 自动互相排斥。
M	任意金属。
Q	任意杂原子，即除碳或氢之外的任意原子。
X	任意卤素 (F, Cl, Br, I, At)。

- 2) 点击所需可变基团。该基团显示于当前原子框中并成为默认。铅笔被自动选择。
- 3) 将光标置于结构编辑窗口或已有节点上（高亮显示），并点击。可变基团绘制成功。

R-基团工具 (R-group Tool)


R-基团定义对话框



限制:

- R-基团仅在亚结构检索或反应检索中有效。
- 通式基团 (Ak, Cb, Cy, Hy) 不可用于环中或环中的 R-基团中。

使用方法:

目的	操作方法
创建 R-基团	1. 在垂直工具面板上点击  , 显示 R-基团定义对话框。

绘制 R-基团	<p>2. 在 R1= 文本框内键入所需基团 - 或者 - 或者在对话框内使用 Atom, Short, 或 Variables (X Menu) 图标进行选择。最多可包含 20 个原子、快捷基团或可变基团。 新指定的 R-基团 (例如 R1) 会显示在当前原子框中并成为默认。</p> <p>3. 根据需要创建其他 R-基团。</p> <p>1. 从 R-基团定义对话框内选择合适的 R-基团。</p> <p>2. 将光标置于绘制区域或者置于已有节点上 (高亮显示), 点击。R-集团绘制完成。 每个结构中最多可有 10 个 R-基团。</p>
---------	---

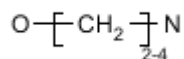
重复基团工具 (Repeating Group Tool)

重复基团用于指定结构中将被重复的一个节点或一组节点。重复基团工具使得查询结构可以绘制得更加紧凑。重复的节点可以是环或链。

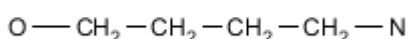
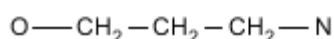
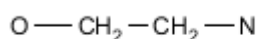
绘制重复基团的方法:

为了绘制方便以及绘制一个更紧凑的结构, 可以绘制一个片断并设定一个该片段的重复数值。对于亚结构检索和反应检索, 可以将重复度设置为一个可变数字。重复基团可用于检索、限定或预览。


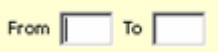
举例: 查询下面结构:



检索答案将包括以下任意结构:



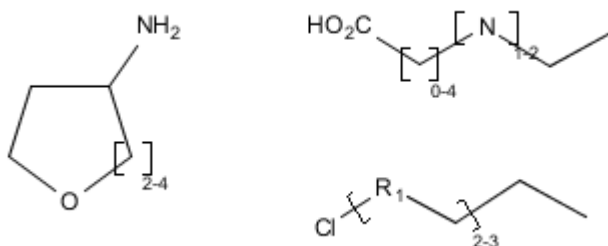
步骤:

- 1) 绘制一个包含将被重复的基团的结构。这个结构在该基团之外的每一端带有连接到节点的一个键。
- 2) 点击 , 光标随之改变, 并且在绘制区域的上方显示对话框 , 在框中输入重复单元的数目。
- 3) 点击绘制区域并且拖拽 (或使用其他选择方法), 将结构中想要重复的部分包括起来。一个矩形包括了该区域, 并且会高亮显示。
- 4) 在 From: 和 To: 处 键入重复数值, 点击 OK.

输入确切数值: 在 From: 和 To: 框内各键入一个整数

检索类型:	有效重复数值:
精确结构检索和相似结构检索	<p>一个整数。允许的范围仅限于指定为一个单个整数。有效值: 0 - 20</p> <p>举例: 2 - 2 是有效的重复数值; 2 - 3 则不是。</p> <p>分子量: 当结构绘制完时, 分子式和分子量自动计算并显示在状态条里。</p>
亚结构检索和反应检索	<p>单个数值或数值范围。</p> <p>有效数值:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 单个值: 0 - 20 2. 范围: <ul style="list-style-type: none"> ▪ 从 From: 0 - 20 ▪ 到 To: 1 - 20, 大于 From: 中的值。 <p>当重复数值表达为一个范围时, 分子式和分子量不显示。</p>

举例:







- 5) 重复基团显示在括号中, 并且重复数值被指定:
- 6) (可选择的) 指定其他的重复基团。 相邻基团: 重复基团可以立刻连接。(通过键连接)。
- 7) 绘制完成结构并且进行结构检索或反应检索。

检索键: 包括在重复基团内的键(即连接重复基团和相邻位置的键)被执行以下检索。

如果重复集团中的键为:	重复集团间的键被执行以下搜索:
单键 Single	单键 Single
双键 Double	双键 Double
三键 Triple	三键 Triple
组合键 A combination	任意键 Unspecified
任意键 Unspecified	任意键 Unspecified

修改或去除重复基团

目的	操作

改变重复数值	 <ol style="list-style-type: none"> 1. 点击 。 2. 将鼠标悬停在重复集团括号或结构上，点击。重复基团结构高亮显示，括号被除去，并且当前重复数值会显示。 3. 修改重复数值，点击 OK。 - 或者 - 点击绘制区域空白处或使用其他工具恢复前一步的定义。
取消重复基团	<ol style="list-style-type: none"> 1. 点击 。 2. 点击重复基团括号或重复数值。重复基团被取消，节点被保留。 - 或者 - 1. 点击 。 2. 点击重复基团括号或重复数值。重复基团高亮显示。 3. 按下<Delete> 键。 重复基团被取消。节点被保留。
保存带有重复基团的结构	<p>点击另存为 (Save As) 保存为：</p> <ul style="list-style-type: none"> • . cxf - 保留所绘制的重复基团。 • . mol - 有限制的保留重复基团。

可变连接位置工具 (Variable Attachment Position Tool)

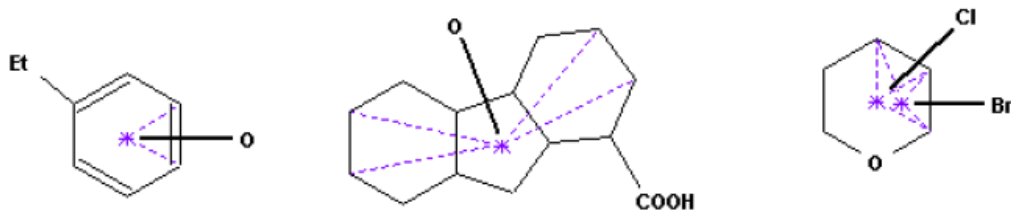
可变连接位置工具用于：

- 1) 指定一个节点或片断。
- 2) 将指定好的节点或片断连接到一个环体系的几个任意位置上。
- 3) 一个或多个取代基可以被不定位置的连接到该环体系的相同节点上。

限制：

- 连接到环体系上的可变取代基最多不超过 20 个。
- 可变连接位置工具只可用于亚结构检索和反应检索，或者亚结构检索、反应检索的限定工具下。


举例：



绘制在指定位置带有可变连接位置结构的方法：

- 1) 绘制取代节点或片断和将要连接的环体系。



2) 在垂直工具面板上点击 ，光标随之改变。

3) 点击取代基并且将其拖拽至一个连接点上，此时会显示一条连接线。这条线是彩色虚线（颜色可通过参数设置进行调整）。

绘制可变连接位置：以下对于取代基、其连接位置和相关的键有效：

以下项	具有以下特性
取代节点	<ul style="list-style-type: none"> • 可以是单个节点或更大的片段中的节点。 • 可以是（或包括） <ul style="list-style-type: none"> a) 元素 b) 可变基团 c) 快捷键 d) R-基团（带有附加连接） e) 重复基团 • 可以被锁定或进一步取代 • 允许使用反映原子对应工具 <p>限制：</p> <ul style="list-style-type: none"> • 取代节点不能是重复基团的一部分。 • 取代基或一个可变连接位置不能包含用于单独可变连接位置的环连接位置。 • 取代基不能有多于环体系的可变连接位置。
可变连接节点	<p>可以是（或包括）：</p> <ul style="list-style-type: none"> • 一个非金属元素或可变基团 X, Q 或 A。 • 可以被锁定 (Can be locked to further substitution)。 <p>限制</p> <ul style="list-style-type: none"> • 不能是快捷键；可变基团中的 Ak, Cb, Hy 或 Cy；一个金属原子；或者 M。 • 一个重复基团不能包括选择用于可变连接位置的节点。 • 一个可变连接位置的取代基不能包括环连接位置或一个单独的连接位置。
可变连接位置的键（这里的键指的是连接取代基到环上的键）	<ul style="list-style-type: none"> • 是一个链键，不能被修改。 <p>取代基键：如果取代基是链的一部分，这条链键不受连接键类型的影响。</p> <ul style="list-style-type: none"> • 可以有多个键型：单键、双键、三键或任意键。 • 是最初设置为定键所选键的键型。要改变键型： <ul style="list-style-type: none"> ▪ 在选择可变位置连接工具之前点击键型 - 或者 - ▪ 在取代基被连接后，点击高亮键并选择一个新的键

	型。 <ul style="list-style-type: none"> • 可以是反映位点。 • 可以是立体键。
--	---

4) (可选的) 重复至每一个连接点。最小限制, 取代基至少被连接至两个位置上。

5) 完成结构绘制并且进行结构或反应检索。

修改或取消可变连接位置工具

目的:	操作:
取消一个可变连接位置	<ol style="list-style-type: none"> 1. 点击 。 2. 将鼠标悬停于可变连接位置键连线上或星号上。可变连接位置会高亮显示 (包括键连线、星号和虚线)。 3. 点击取消所有高亮项。 <p>要取消多个可变连接位置: 将光标悬停在可变连接位置的虚线上, 点击。仅虚线被取消。</p> <p>- 或者 -</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 点击 。 2. 点击可变连接位置的一部分, 高亮显示。 3. 按下 <Delete> 键。 <p>高亮部分被删除。</p>
改变可变连接位置基团	<ol style="list-style-type: none"> 1. 点击 。 2. 将鼠标悬停于可变连接位置的任意部分 (键连线、星号或虚线), 所有部分将高亮显示。 3. 点击高亮部分改变当前所选键为: 单键、双键、三键或任意键。
将可变连接位置键标记为发生反应的键	<ol style="list-style-type: none"> 1. 点击 。 2. 点击所绘制的可变连接位置的任意部分 (键连线、星号或虚线) <p>键被标记为发生反应的键。</p>
移动可变连接位置星号	<ol style="list-style-type: none"> 1. 点击 。 2. 点击并将中心星号拖拽到环内更多的可变位置上。

环锁定工具 (Lock Rings Tool)

环锁定工具用于控制环体系中和链体系中环的形成。


使用环锁定工具可以排除以下检索结果：

- 所绘制的片段成为环的一部分。
- 其他环稠合到现有环体系上。

用于以下结构上：	带有下列特点的结构不会被检索到：
环	在现有环体系上发生并环或螺环
链	链中的键成为其他环的一部分

注意：环结构仅在亚结构检索或反应检索中可以被锁定。

环锁定工具使用方法：


目的	操作
锁定一个环体系或链体系，以阻止稠合或环的形成。	<ol style="list-style-type: none">1. 在结构编辑器窗口点击环锁定工具 。2. 将光标置于环体系或链上的任意部位。点击。该环体系或链会加粗显示，表明已被锁定，环不能稠合或链不能形成环。
解锁	将光标置于锁定的环体系或链上，单击。该体系被解锁。表示环允许发生稠合，链允许形成环。

原子锁定工具 (Lock Atoms Tool)

原子锁定工具用于阻止节点上发生取代。

限制：结点取代基的锁定仅在亚结构检索或反应检索中可用。

阻止节点发生取代：

- 1) 在垂直工具面板上点击原子锁定工具 。光标随即变为原子锁定图标的样子。
- 2) 将光标小尖儿放到节点上（高亮显示）。并单击。该节点周围会出现一个小框。表明该节点被禁止发生取代。

注意：可以锁定结构内的任意数量的节点。终端快捷键（shortcuts）默认为锁定。

解锁：将光标置于锁定的节点上单击。节点周围的小框消失，表明次节点上允许发生取代。

3.4 结构检索

3.4.1 概览

如果您的订购方案带有 SciFinder® Substructure Module (SSM) 模块。则结构检索包括以下三种方式：

- 1) 精确结构 (Exact Structure)
- 2) 亚结构 (Substructure)
- 3) 相似结构 (Similarity)

注意：若未购买 SMM 模块时，物质结构检索默认为精确结构检索方式。

以上三种检索方式只针对物质检索可用。

3.4.2 精确结构检索 (Exact research)

3.4.2.1 概览

精确结构检索结果包括：

- ◆ 与已绘画结构完全相同的结构
- ◆ 互变异构体 (包括酮-烯醇互变异构)
- ◆ 两性离子
- ◆ 配位化合物
- ◆ 离子化合物
- ◆ 自由基和自由基离子
- ◆ 同位素
- ◆ 所检索结构作为单体的聚合物

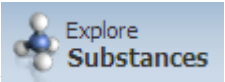
化合物族 (例如，聚合物、混合物、盐等) 被自动检索包括在检索结果中。

精确结构检索结果不包括除已绘制出的取代基之外的附加的取代基。精确结构检索不能指定开放节点，也不能设定诸如可变位点、R-基团等。所检索结构的被认为是闭合的，也就是说在结构中不需要画出氢原子。

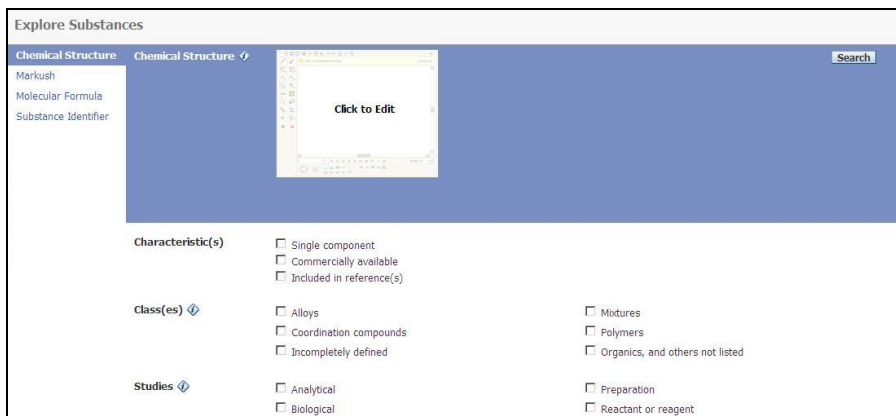
SciFinder 的检索所得出的结果，是以智能检索 (Smart search) 为基础。智能检索是一个由 CAS 建立的检索方法，通常将 “完全相同化学结构检索” 的结果数目扩至最大，令用户得到最全面的检索结果，减少遗漏。例如，酮-烯醇互变异构、同位素、和单体组成的聚合物也被包括在检索结果中。用户可按着个人的研究方向和兴趣改变过滤选项 Filters 的设定，便可缩小结果范围至理想结果。有关智能检索 Smart search 的详细资料，请参考附录 A。

3.4.2.2 检索方法举例

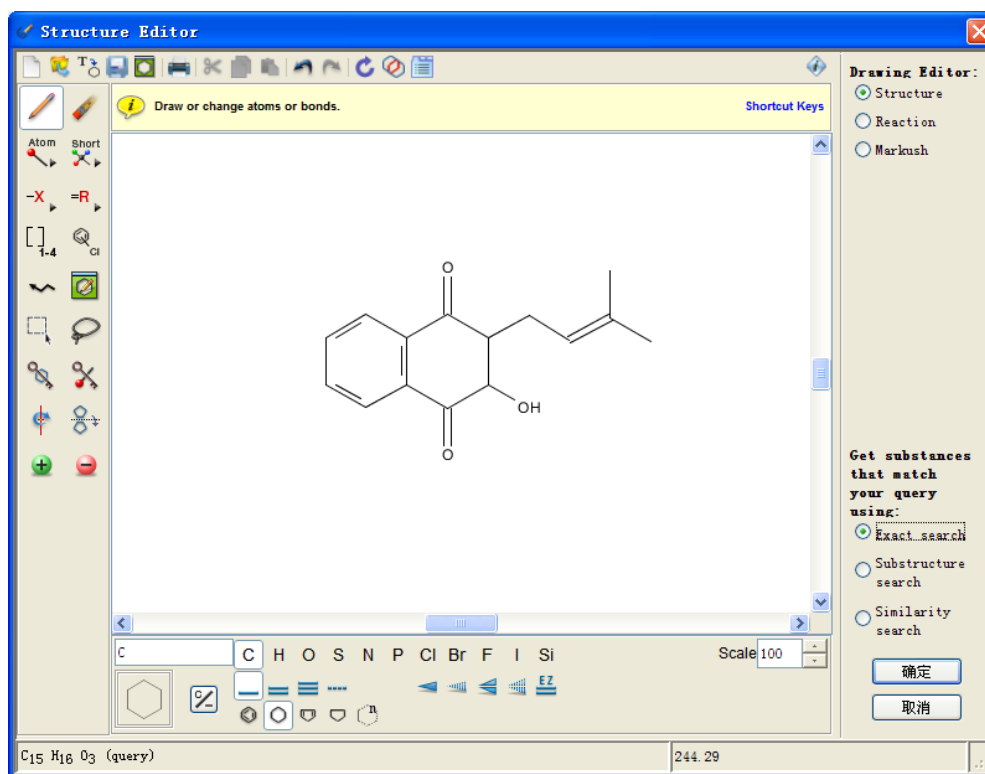
SciFinder 精确结构检索步骤如下:

1) 点击 。

2) 选择 Chemical Structure 检索。



3) 打开结构编辑器绘制结构。



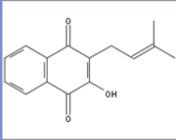
结构绘制完成后，在结构编辑器右下角检索方式选择区域，选择 Exact search。点击确定。

4) 检索页面内显示出缩略图。

Explore Substances

Chemical Structure Chemical Structure Search

Markush
Molecular Formula
Substance Identifier



Click image to change structure or view detail

Search type: Exact Structure
 Substructure
 Similarity

Show precision analysis

Characteristic(s)

Single component
 Commercially available
 Included in reference(s)

Class(es)

Alloys
 Coordination compounds
 Incompletely defined

Studies

Analytical
 Biological

Mixtures
 Polymers
 Organics, and others not listed

Preparation
 Reactant or reagent

Characteristic(s): 物质类型

Classes: 物质分类

Studies: 有关研究

若要缩小检索范围至特定类型，可通过 Characteristic(s), Classes, Studies 等过滤选项设定。点击 Search 继续检索，找出相同物质。得出的结果会包含以下各类型的化合物。

与已绘制的结构完全相同的物质

- ◆ 同位素化合物
- ◆ 配位化合物
- ◆ 单体组成的聚合物
- ◆ 离子化合物
- ◆ 原子基和离子基
- ◆ 异构体
- ◆ 互变异构体(包括酮-烯醇)

5) 显示检索答案集。

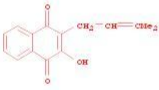
Substances

14 Substances 0 Selected Save Print Export

Select All Deselect All | Sort by: Relevance (New) Answers per Page [50]

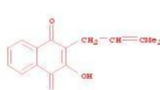
View:

1. Substance Detail
84-79-7



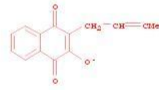
C₁₅ H₁₄ O₃
1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-buten-1-yl)-

2. Substance Detail
332083-20-2
(Component: 84-79-7)



C₁₅ H₁₄ O₃ · K
1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-buten-1-yl)-, potassium salt (1:1)

3. Substance Detail
122188-07-2



C₁₅ H₁₃ O₃
1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-buten-1-yl)-, ion(1-)

3.4.2.3 检索结果后处理

保留物质 (Keep Selected)

可在次工具栏中的 Tool 下使用 Keep Selected 选项，选择留下有兴趣的物质，作进一步的查阅或检

索。点击位于在 Substance Detail 左侧选框。然后，从主界面中点击 Keep Selected，保留的物质便会出现在窗口中。

The top screenshot shows the 'Substances' interface with 14 substances. Three substance detail cards are visible: 1. Substance Detail 84-79-7 (1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-buten-1-yl)-), 2. Substance Detail 332083-20-2 (Component: 84-79-7) (1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-buten-1-yl)-, potassium salt (1:1)), and 3. Substance Detail 122188-07-2 (1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-buten-1-yl)-, ion(1-)). A 'Tools' dropdown menu is open, showing options: Commercial Sources, Combine Answer Sets, Remove Selected, and Keep Selected (highlighted). The bottom screenshot shows the same interface with 2 substances selected. The 'Tools' menu is closed.

查看物质的商业信息 (Commercial Sources)


点击物质记录右侧的  图标，便能看到物质供货商信息，规格包装以及质量等级。

The screenshot shows the 'Commercial Sources' interface for 40 commercial sources. The list includes:

- 1. **2Daybiochem Product List**
Supplier Name: 2Daybiochem Co., Ltd., Catalog Publication Date: 1 Jan 2012
Order Number: DAYB30981, Quantity: N/A
84-79-7 2-Hydroxy-3-prenylnaphthoquinone
- 2. **ABCR Product List**
Supplier Name: ABCR GmbH KG, Catalog Publication Date: 8 Nov 2011
Order Number: AB166420, Quantity: 10 mg
84-79-7 Lapachol
- 3. **ACC Corp. Catalog**
Supplier Name: American Custom Chemicals Corp., Catalog Publication Date: 3 Jan 2012
Order Number: APJ0003125, Quantity: 10MG
84-79-7 LAPACHOL, ≥95%
- 4. **Advanced Technology & Industrial - International Laboratory Catalog**
Supplier Name: Advanced Technology & Industrial Co., Ltd., Catalog Publication Date: 13 Jun 2011
Order Number: CRM010577, Quantity: N/A
84-79-7 LAPACHOL(RG)

可以 Print, Export 进行不同形式的输出。


查看物质的管制信息 (Viewed Regulatory Information)

点击物质记录右侧的  图标，用户可以参考不同国家的物质管制和注册数据，如日本、美国、欧盟各国、加拿大、韩国、澳洲、瑞士、菲律宾、以色列之法规资料。但是，这些数据只限于那些有 CAS 注册

号之化学物质。

<p>CAS Registry Number: 84-79-7</p> <p>2-hydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)-1,4-naphthoquinone (REACH, EINECS)</p> <p>2-hydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)-1,4-naphtoquinone (French) (EINECS)</p> <p>2-Hydroxy-3-(3-methylbut-2-enyl)-1,4-naphthochinon (German) (EINECS)</p> <p>2-hidroxi-3-(3-metilbut-2-enil)-1,4-naftoquinona (Spanish) (EINECS)</p> <p>1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-buten-1-yl)-</p> <p>1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-</p> <p>1,4-Naphthoquinone, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-</p> <p>2-Hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-1,4-naphthalenedione</p> <p>2-Hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-1,4-naphthoquinone</p> <p>Bethabarra Wood</p> <p>C.I. 75490</p> <p>C.I. Natural Yellow 16</p> <p>Greenhartin</p> <p>Ipe-tobacco Wood</p> <p>Lapachol</p> <p>Lapachol Wood</p> <p>NSC 11905</p> <p>NSC 629756</p> <p>Surinam Greenheart Wood</p> <p>Taigu Wood</p> <p>Taiguic acid</p> <p>Tecomin</p>	
File Segment	
EEC: EINECS	
EU: REACH	
Confidentiality Status	
Public	

获得物质相关文献 (Get References)

选择了一个或多个的物质后，点击在此工具栏的 Get References 键，取得相关文献。另外，点击物质记录右侧的图标 ，Get References 对话框便会出现，用户可选取所有文献，或只是限定某一类研究课题。

① —

② .

③ {

Get References ⓘ

Retrieve references for:

All substances

Selected substances

Limit results to:

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

For each sequence, retrieve:

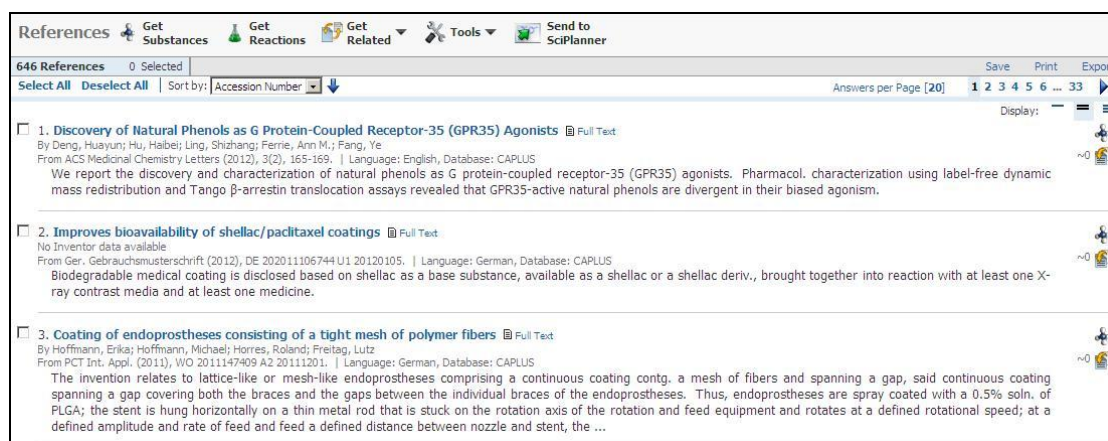
Additional related references, e.g., activity studies, disease studies.

③

Adverse Effect, including Toxicity	副作用, 包括毒性
------------------------------------	-----------

Analytical Study	分析学研究
Biological Study	生物学研究
Combinatorial Study	组合研究
Crystal Structure	晶体结构
Formation, nonpreparative	形成
Miscellaneous	其它
Occurrence	发生
Prophetics in Patents	专利中的预测
Preparation	制备
Process	过程
Reactant or Reagent	反应物或试剂
Spectral Properties	光谱
Uses	应用

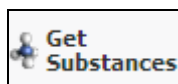
在①，选择取得所有物质 All substances 的文献资料或只选取已选物质 Selected substances 的文献资料。在②，当点击 References associated with: 键，指定文献数据的课题范围（如：制备 Preparation）。最后，点击 OK。



检索到文献后，可以 Save, Print, Export 进行不同形式的输出。

检索更多的相关信息 (Get...)

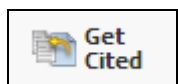
用户可以检索更多的相关数据，点击上面的 Get Substance, Get Reactions, Get Cited, Get Citing 获得更多的相关的信息。



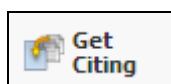
获得文献中收录的物质



获得文献中收录的反应




获得引用文献



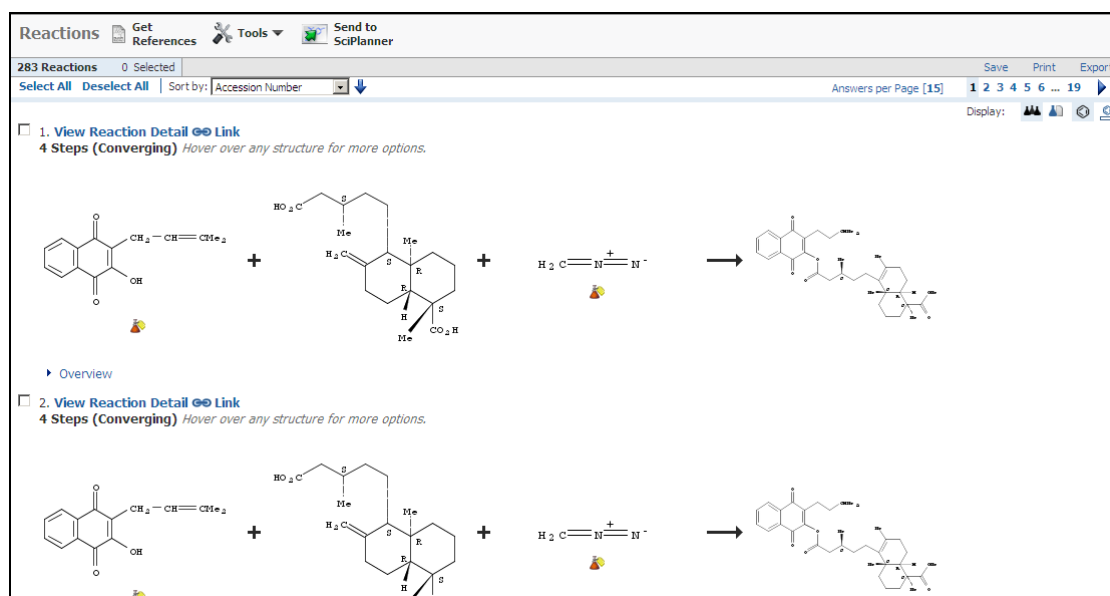
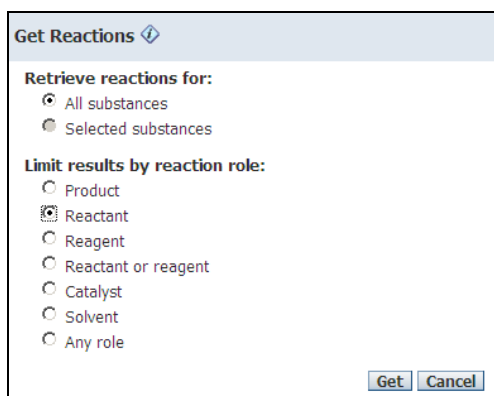
获得被引文献

获得物质相关反应 (Get Reactions)

若要显示一个或多个物质的相关反应，点击 Get Reactions 键。也可点击在任何一个物质记录下方的图标 。

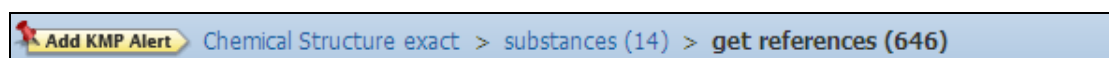
当反应角色 Reaction Roles 对话框出现后，从 Retrieve reaction for: 选择取得所有物质 All substances 的反应数据，或只选择已选的物质 Selected substances 的反应数据。然后，从 Select a reaction role 选择反应之角色。

在此选择 Reactant 并点击 OK。反应式便会显示出来。



返回历史检索界面 (Back To The History Interface)

在检索界面的最上方，可以通过历史导航条，返回曾经检索的任意界面，点击上面的任何一步，都可以获得当时的检索界面。



3.4.3 亚结构检索 (Substructure Search)

3.4.3.1 概览

帐号需要带有亚结构模块 (SciFinder® Substructure Module (SSM))。

亚结构检索检索得到的答案包括精确结构检索的答案，加上附加取代的答案。所有的节点被假定为“开放的”，并且环体系被假定为“未锁定的”。

目的	操作
再查询结构中添加可变性	<ul style="list-style-type: none">▶ 使用下列可变工具之一：<ul style="list-style-type: none">可变基团 (X 菜单) 工具—指定一个可变基团。R-基团工具—定义 R-基团 (即, 在某个位置允许的基团)重复基团工具—指定查询结构中的被重复的节点, 便于更容易、更紧凑的表示结构。可变连接位置工具—将一个节点或片断连接到查询结构中一个环体系中的几个位置上。
控制查询结构中的取代	<ul style="list-style-type: none">▶ 使用锁定工具：<ul style="list-style-type: none">环锁定工具—控制环体系和连体系中环的形成。原子锁定工具—锁定/取消锁定从取代基中选择的节点。
控制查询结构中的可变性和取代	<ul style="list-style-type: none">▶ 选择 (今物质检索可用) 亚结构检索方式或 (仅反应检索可用) 反应检索类型。
缩小一个过于宽泛的查询	<ul style="list-style-type: none">▶ 点击“Structure/Reaction is too general”检索页面提示信息中的“lock out rings and chains”：<ul style="list-style-type: none">Structure too general. Change search type, select limiter(s) below,draw additional atoms and bonds, or lock out rings and chains.如果你使用了环锁定工具的话, SciFinder 会开启结构编辑器, 并且孤立的查询结构中的环或链。

结构图像的默认设定

SciFinder 会按照以下的设定检索亚结构。

结构	可检索的结果
环	<ul style="list-style-type: none">含有取代基的结构与检索环相同结构与检索环有稠合的结构
链	<ul style="list-style-type: none">含有取代基的结构

	是结构链或环的其中一部份
快捷方式结尾	除了烷基 (Alkyl group) 外, 所有取代都被禁止

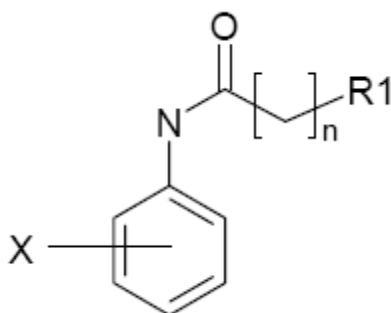
变更结构图像的默认设定

可以使用绘制工具去变更结构图像的默认设定。

结构	变更目的	变更方法
环	与其它环隔离或禁止稠合	用锁定环取代工具 Lock Out Rings 工具去锁定环
链	禁止链变成环	用锁定环取代工具 Lock Out Rings 工具去锁定链
原子	禁止取代基	用锁定原子取代工具 Lock Out Atom 工具去锁定链原子

3.4.3.2 检索方法举例

用亚结构检索查询下列结构。



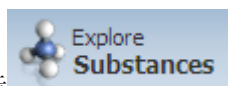
R1 基团= S, P, NH₂

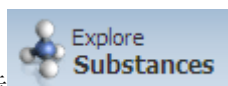
重复单元 n = 2-5

氮原子 (N) 不能被取代

只有一个卤原子 (X) 连在苯环

结构不能再作稠合



1) 点击 。

2) 选择 Chemical Structure 检索。

3) 打开结构编辑器。绘制结构


绘制方法:

a) 用苯环工具绘制苯环。

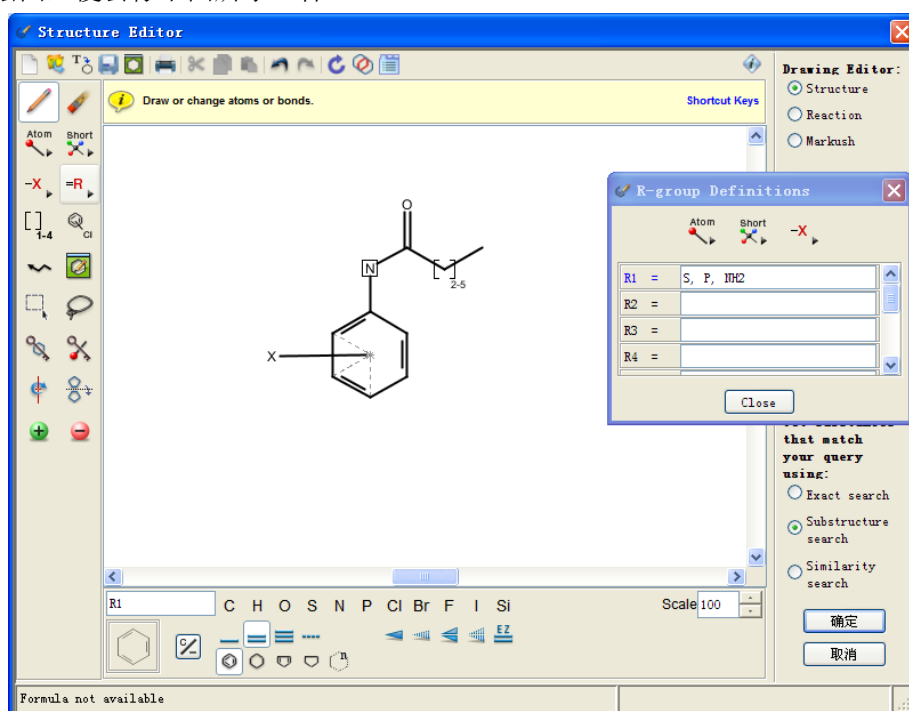
b) 在苯环外围绘制 X (卤素原子) 后, 选取可变连接位置工具。在点击 X 后, 拖曳鼠标至可变连接位置。

c) 在水平工具板上点击 N (氮原子) 图像, 拖曳至苯环。

d) 使用链工具从 N 开始加上三个碳的链。

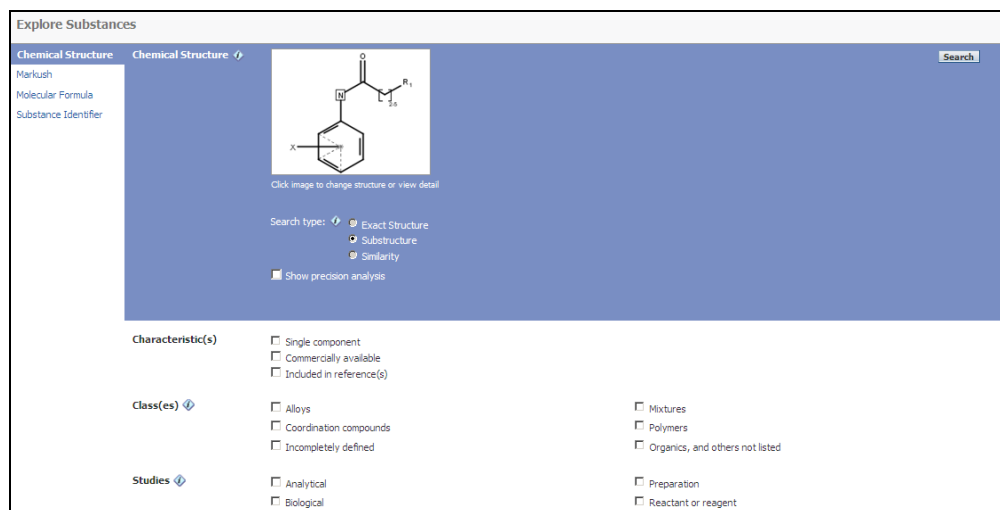
- e) 点击 R 基团工具，定义 R1 基团为 S, P, NH₂后，并把 R1 加置于碳链的最末端。
- f) 点击在原子绘制板中的 O (氧原子) 图像和双键图标。将铅笔工具移至碳链的结点，并拖移一个长度单位。便绘出氧的双键。
- g) 在选取重复单元工具后，选取你想要重复的单元。选取的部分会显示为红色。在结构图像窗口上的文字框  输入重复单元的数目，并且点击 OK。
- h) 选取 Lock Out Substitution 工具后点击 N。N 的取代将会被禁止。
- i) 选取 Lock Out Rings 工具后点击苯环。环的耦合将会被禁止。
- j) 点击碳链，键便会只限于链。

当你完成绘图，便会像下图所示一样。



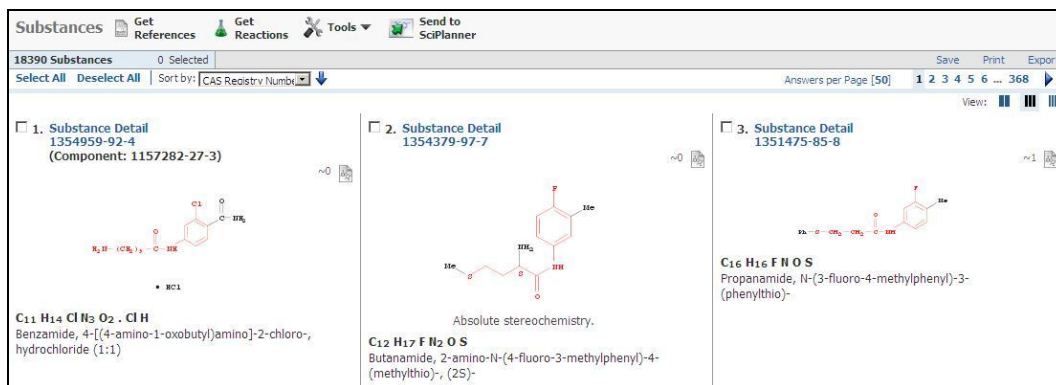
选择 Substructure search, 点击确定。

- 4) 检索页面显示如下：



若要缩小检索范围至特定类型，可通过 Characteristic(s), Classes, Studies 等过滤选项设定，限制检索结果至指定类型。点击 Search，便能看到亚结构的检索结果，包括物质的结构、CAS 的注册号。

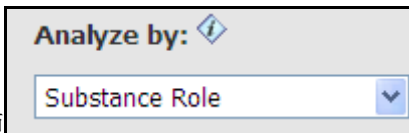
5) 检索结果页面显示如下

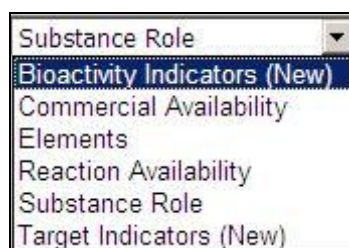


与结构编辑器内相同的结构部分会被突出显示成红色，要查阅物质的详细资料，点击 Substance Detail。你也可以使用 Get References 去查询有关物质的文献资料。详情请参阅精确结构检索。

3. 4. 3. 3 物质答案集的分析

要分析结果，点击页面右侧的  图像，默认停留在 Analysis 上，当

点选 Analysis 后，可使用下拉菜单的选项  来进行结果分析，所有的候选项如下图所示：



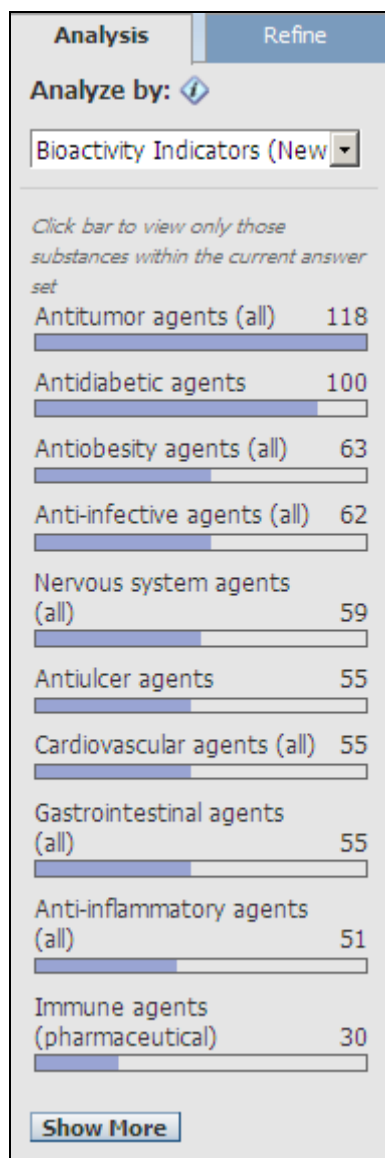
以下便是每一个选项的作用。

选项	作用
Bioactivity Indicators	分析物质的生物活性标记物
Commercial Availability	分析是否有商业来源
Elements	分析物质的原子组成
Reaction Availability	分析是否可用于反应

Substance Role	分析物质的研究角色
Target Indicators	分析物质的靶点标记物

用户可以分析所有结果或部分答案。若只分析某一部分物质，要在检索结果的窗口，点击想要分析的物质旁的方框。然后选择上面的 Keep Selected 选择需要分析的物质，再进行分析即可。

分析结果中物质的生物活性标记物



选择感兴趣的选项，这里选择 **Antiulcer agents**，点击直方条或者其对应的英文来选择。

Analysis Refine

Analyze by:

Bioactivity Indicators (New)

Click bar to view only those substances within the current answer set

Antitumor agents (all)	118
Antidiabetic agents	100
Antiobesity agents (all)	63
Anti-infective agents (all)	62
Nervous system agents (all)	59
Antiulcer agents	55
Cardiovascular agents (all)	55
Gastrointestinal agents (all)	55
Anti-inflammatory agents (all)	51
Immune agents (pharmaceutical)	30

Show More

点选后发现，感兴趣的内容已经用黄色所显现出来，并且物质检索界面也出现相应变化。如下图所示：

Analysis - Bioactivity Indicators (New)

27 Items 0 Selected Export

Sort by: Frequency

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

<input type="checkbox"/> Antitumor agents (all)	118
<input type="checkbox"/> Antidiabetic agents	100
<input type="checkbox"/> Antiobesity agents (all)	63
<input type="checkbox"/> Anti-infective agents (all)	62
<input type="checkbox"/> Nervous system agents (all)	59
<input type="checkbox"/> Antiulcer agents	55
<input type="checkbox"/> Cardiovascular agents (all)	55
<input type="checkbox"/> Gastrointestinal agents (all)	55
<input type="checkbox"/> Anti-inflammatory agents (all)	51
<input type="checkbox"/> Immune agents (pharmaceutical)	30

Apply Cancel

在物质记录数下方出现了黄色的状态栏，表示目前选择了何种分析结果，可以点击 Keep Analysis 来保留当前分析结果，也可以通过点击 Clear Analysis 来清除当前的选择。

Substances

18390 Substances 0 Selected Save Print Export

55 substances with the Bioactivity Indicators **Antiulcer agents** are displayed Keep Analysis Clear Analysis

Select All Deselect All Sort by: CAS Registry Number

Answers per Page [50] 1 2

View:

279. Substance Detail
1336934-30-5
(Component: 1220125-16-5)

Absolute stereochemistry.

C₁₂ H₁₅ Cl N₂ O₆ S · Na
L-Glutamine, N-(3-chloro-4-methyl-5-sulphophenyl)-, sodium salt (1:1)

280. Substance Detail
1336934-28-1
(Component: 1220125-05-2)

Absolute stereochemistry.

C₁₁ H₁₃ Cl N₂ O₇ S · Na
L-Glutamine, N-(5-chloro-2-hydroxy-3-sulphophenyl)-, sodium salt (1:1)

281. Substance Detail
1336933-36-8

Absolute stereochemistry.

C₁₄ H₁₉ Cl N₂ O₇ S
L-Glutamine, N-(5-chloro-2-hydroxy-3-sulphophenyl)-, 1-(1-methylethyl) ester

分析物质的商业来源

分析结果中物质是否有商业来源，选取 Analysis 中的 Commercial Availability 选项，分析结果就会用柱状图显示在下方。



选择感兴趣的选项，这里选择 **Commercially Available**，点击直方条或者其对应的英文来选择。



点选后发现，感兴趣的内容已经用黄色所显现出来，并且物质检索界面也出现相应变化。如下图所示：

在物质记录数下方出现了黄色的状态栏，表示目前选择了何种分析结果，可以点击 Keep Analysis 来保留当前分析结果，也可以通过点击 Clear Analysis 来清除当前的选择。

Substances Get References Get Reactions Tools Send to SciPlanner

18390 Substances 0 Selected Save Print Export

14,778 substances with the Commercial Availability Commercially Available are displayed Keep Analysis Clear Analysis

Select All Deselect All Sort by: CAS Registry Number Answers per Page [50] 1 2 3 4 5 6 ... 296 View: [] [] [] []

53. Substance Detail
1344885-37-5

C₁₀ H₁₂ F N₃ O₂
Propanamide, N-(4-fluoro-3-methylphenyl)-3-(hydroxyamino)-3-imino-

54. Substance Detail
1344854-53-0

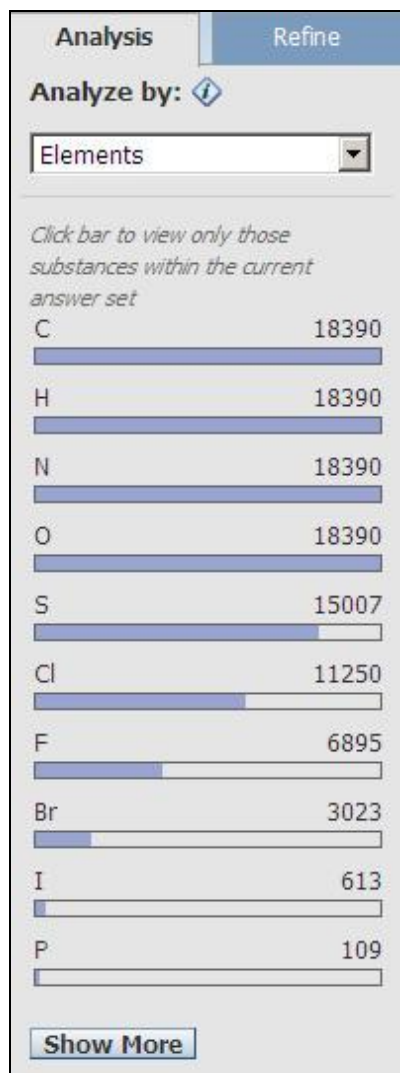
C₁₀ H₁₂ Br N₃ O₂
Propanamide, N-(3-bromo-4-methylphenyl)-3-(hydroxyamino)-3-imino-

55. Substance Detail
1344348-62-4

C₁₂ H₁₇ F N₂ O
Pentanamide, 4-amino-N-(4-fluoro-3-methylphenyl)-

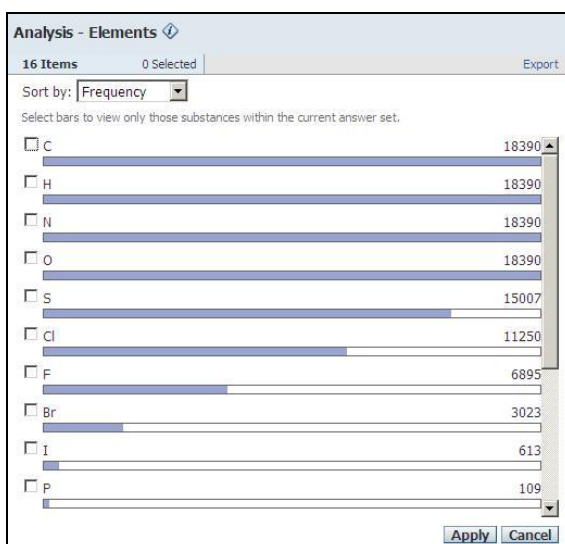
分析结果中物质的元素组成

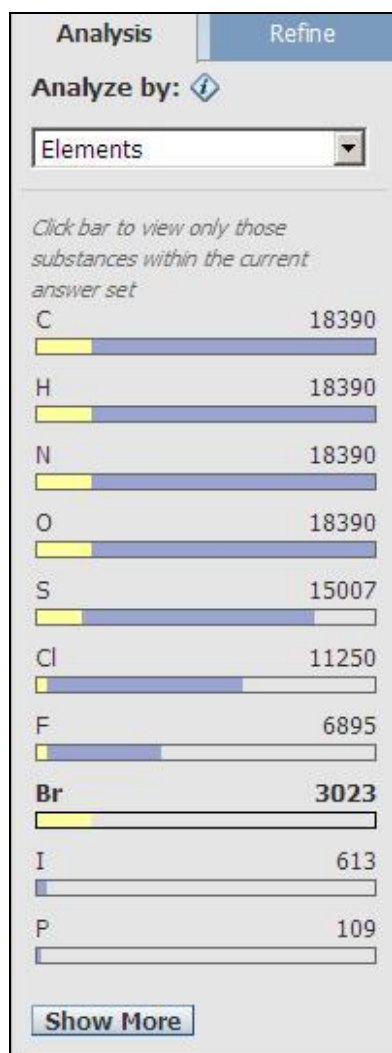
分析结果中物质的元素组成, 选取 Analysis 中的 Elements 选项, 分析结果就会用柱状图显示在下方。



可以查看到物质中包含不同元素物质的数量, 选择感兴趣的元素, 这里选择包含 Br 元素的物质, 点击直方条或者其对应的元素英文来选择。

也可以点击 **Show More** 来查看所有的元素的分布, 如下图, 这里可以多选元素, 勾选后点击 **Apply**。





选择感兴趣的元素后，感兴趣的内容已经用黄色所显现出来，同时也显现出同时包含两种不同元素的物质的信息，可以继续点击感兴趣的内容查看。

同时物质界面也出现相应的变化，如下图。

在物质记录数下方出现了黄色的状态栏，表示目前选择了何种分析结果，可以点击 Keep Analysis 来保存当前分析结果，也可以通过点击 Clear Analysis 来清除当前的选择。

Substances Get References Get Reactions Tools Send to SciPlanner

18390 Substances 0 Selected Save Print Export

3,023 substances with the Elements Br are displayed Keep Analysis Clear Analysis

Select All Deselect All Sort by: CAS Registry Number Answers per Page [50] 1 2 3 4 5 6 ... 61 View: [] [] []

36. Substance Detail
1348143-85-0

Absolute stereochemistry.

C₁₈ H₂₀ Br N₇ O₅
Pentanediamide, 2-[(2-amino-5-cyano-6-ethoxy-4-pyrimidinyl)amino]-N1-(3-bromophenyl)-, (2S)-

54. Substance Detail
1344854-53-0

C₁₀ H₁₂ Br N₃ O₂
Propanamide, N-(3-bromo-4-methylphenyl)-3-(hydroxyamino)-3-imino-

56. Substance Detail
1344334-82-2

C₁₁ H₁₄ Br₂ N₂ O
Butanamide, 3-amino-N-(2,5-dibromophenyl)-3-methyl-

分析物质的反应可获得性

分析答案集中的物质是否有参与的反应，选取 Analysis 中的 Reaction Availability 选项，分析结果就会用柱状图显示在下方。

Analysis Refine

Analyze by:

Reaction Availability

Click bar to view only those substances within the current answer set

Not Referenced in a Reaction 18000

Referenced in a Reaction 390

Show More

选择感兴趣的选项, 这里选择 **Reference in a Reaction**, 点击直方条或者其对应的英文来选择。

Analysis Refine

Analyze by:

Reaction Availability

Click bar to view only those substances within the current answer set

Not Referenced in a Reaction 18000

Referenced in a Reaction 390

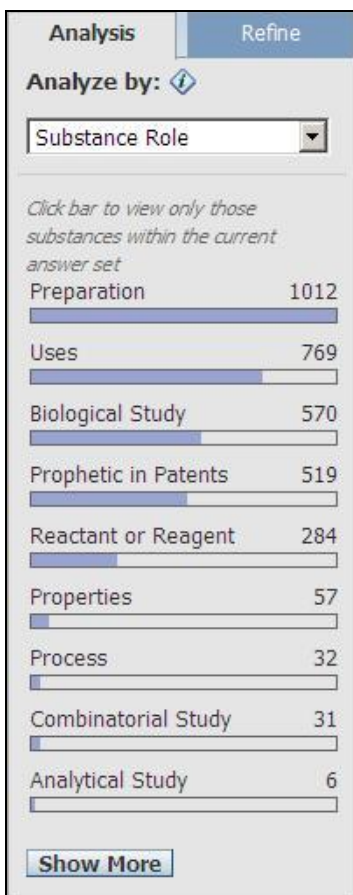
Show More

点选后发现, 感兴趣的内容已经用黄色所显现出来, 并且物质检索界面也出现相应变化。如下图所示:

在物质记录数下方出现了黄色的状态栏, 表示目前选择了何种分析结果, 可以点击 Keep Analysis 来保存当前分析结果, 也可以通过点击 Clear Analysis 来清除当前的选择。

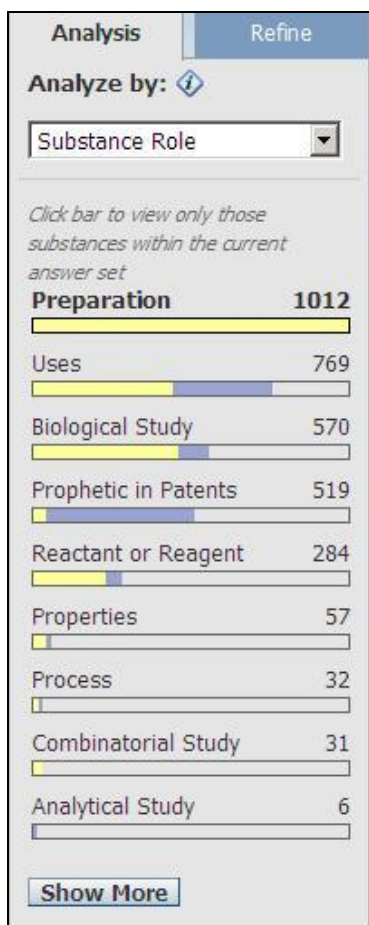
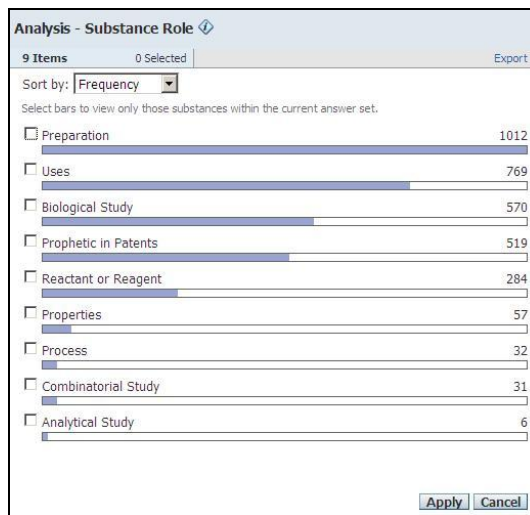
分析物质的研究角色

分析结果中物质的研究角色, 选取 Analysis 中的 Substance Role 选项, 分析结果就会用柱状图显示在下方。



可以查看到物质的研究角色，选择感兴趣的研究方向，这里选择包含 Preparation 点击直方条或者其对应的原子英文来选择。

也可以点击 Show More 来查看所有的研究方向，如下图，这里可以多选，勾选后点击 Apply。



1. 选择感兴趣的研究后，感兴趣的内容已经用黄色所显现出来，同时也显现出同时包含其他不同研究的物质信息，可以继续点选感兴趣的内容查看。

同时物质界面也出现相应的变化，如下图。

在物质记录数下方出现了黄色的状态栏，表示目前选择了何种分析结果，可以点击 Keep Analysis 来保存前分析结果，也可以通过点击 Clear Analysis 来清除当前的选择。

The screenshot shows the SciPlanner interface with a list of substances. The top bar indicates '18390 Substances' and '0 Selected'. A yellow status bar at the top says '1,012 substances with the Substance Roles Preparation are displayed'. Below this, there are three substance detail panels:

- 279. Substance Detail**: 1336934-30-5 (Component: 1220125-16-5). Chemical structure of L-Glutamine, N-(3-chloro-4-methyl-5-sulphophenyl)-, sodium salt (1:1). Formula: $C_{12}H_{15}ClN_2O_6S \cdot Na$.
- 280. Substance Detail**: 1336934-28-1 (Component: 1220125-05-2). Chemical structure of L-Glutamine, N-(5-chloro-2-hydroxy-3-sulphophenyl)-, sodium salt (1:1). Formula: $C_{11}H_{13}ClN_2O_7S \cdot Na$.
- 281. Substance Detail**: 1336933-36-8. Chemical structure of L-Glutamine, N-(5-chloro-2-hydroxy-3-sulphophenyl)-, 1-(1-methylethyl) ester. Formula: $C_{14}H_{19}ClN_2O_7S$.

分析靶点标记物

分析结果中物质的靶点标记物

The 'Analysis' panel shows a list of target indicators with their respective counts and progress bars:

Target Indicator	Count
Enzymes (all)	193
Receptors (all)	118
Cholecystokinin	52
Glucagon-like peptide (all)	52
DNA-binding proteins (all)	33
RNA formation factors (all)	33
Transport proteins (all)	26
Pancreatic hormones (all)	10
Angiotensin (all)	8
Leptin	8

A 'Show More' button is located at the bottom of the list.

选择感兴趣的选项，这里选择 Enzymes(all)，点击直方条或者其对应的英文来选择。也可以点击 Show More 来查看所有的靶点标记物，如下图，这里可以多选，勾选后点击 Apply。

The 'Analysis - Target Indicators (New)' panel shows a list of target indicators with checkboxes for selection:

Target Indicator	Count
<input type="checkbox"/> Enzymes (all)	193
<input type="checkbox"/> Receptors (all)	118
<input type="checkbox"/> Cholecystokinin	52
<input type="checkbox"/> Glucagon-like peptide (all)	52
<input type="checkbox"/> DNA-binding proteins (all)	33
<input type="checkbox"/> RNA formation factors (all)	33
<input type="checkbox"/> Transport proteins (all)	26
<input type="checkbox"/> Pancreatic hormones (all)	10
<input type="checkbox"/> Angiotensin (all)	8
<input type="checkbox"/> Leptin	8

Buttons for 'Apply' and 'Cancel' are at the bottom right.

Analysis Refine

Analyze by:

Target Indicators (New)

Click bar to view only those substances within the current answer set

Enzymes (all)	193
Receptors (all)	118
Cholecystokinin	52
Glucagon-like peptide (all)	52
DNA-binding proteins (all)	33
RNA formation factors (all)	33
Transport proteins (all)	26
Pancreatic hormones (all)	10
Angiotensin (all)	8
Leptin	8

Show More

点选后发现，感兴趣的内容已经用黄色所显现出来，并且物质检索界面也出现相应变化。如下图所示：

在物质记录数下方出现了黄色的状态栏，表示目前选择了何种分析结果，可以点击 Keep Analysis 来保留当前分析结果，也可以通过点击 Clear Analysis 来清除当前的选择。

Substances

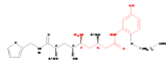
18390 Substances 0 Selected Save Print Export

193 substances with the Target Indicators **Enzymes (all)** are displayed Keep Analysis Clear Analysis

Select All Deselect All Sort by: CAS Registry Number Answers per Page [50] 1 2 3 4

View:

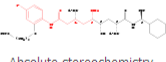
2475. Substance Detail
1307843-92-0



Absolute stereochemistry.

C₃₀ H₄₆ Br N₃ O₆
Nonanediamide, 5-amino-N9-[5-bromo-2-(3-methoxypropoxy)phenyl]-N1-(2-furanylmethyl)-4-hydroxy-2,7-bis(1-methylethyl)-, (2S,4S,5S,7R)-

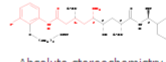
2476. Substance Detail
1307843-91-9



Absolute stereochemistry.

C₃₃ H₅₆ F N₃ O₅
Nonanediamide, 5-amino-N1-[(1S)-1-cyclohexylethyl]-N9-[4-fluoro-2-(3-methoxypropoxy)phenyl]-4-hydroxy-2,7-bis(1-methylethyl)-, (2S,4S,5S,7R)-

2477. Substance Detail
1307843-90-8

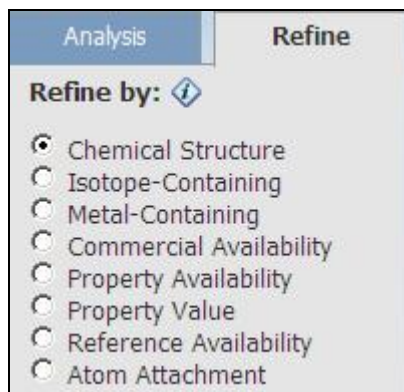


Absolute stereochemistry.

C₃₃ H₅₆ F N₃ O₅
Nonanediamide, 5-amino-N1-[(1S)-1-cyclohexylethyl]-N9-[3-fluoro-2-(3-methoxypropoxy)phenyl]-4-hydroxy-2,7-bis(1-methylethyl)-, (2S,4S,5S,7R)-

3.4.3.4 限定答案集

要限定结果，点击页面右侧的  图像，默认停留在 Analysis 上，当你点击 Refine 后，会自动切换到限定工具，可采用下列方式进行结果的限定。



以下便是每一个选项的作用。

选项	作用
Chemical Structure	限定化学结构
Isotope-Containing	限定是否包含同位素
Metal-Containing	限定是否包含金属
Commercial Availability	限定是否提供商业来源
Property Availability	限定是否提供理化性质
Property Value	限定理化性质
Reference Availability	限定是否有文献报道
Atom Attachment	限定原子附属

用户可以限定所有结果或部分答案。若只限定某一部分物质，要在检索结果的窗口，点击想要限定的物质旁的方框。然后选择上面的 Keep Selected 选择需要限定的物质，再进行限定即可。

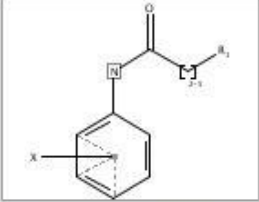
限定化学结构

Analysis **Refine**

Refine by:

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability
- Property Value
- Reference Availability
- Atom Attachment

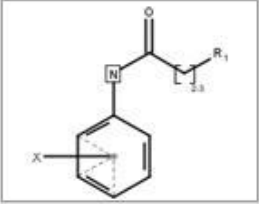
Chemical Structure:



Click image to change structure or view detail
Search type: **Substructure**

默认状态是停留在 **Chemical Structure** 上, 可以点击下面的结构绘制工具, 进行结构修改, 具体结构绘制方法可以参考结构编辑器。这里将支链上的 **C** 原子重复修改为 **2** 到 **3**。然后点击确定, 可以看到在绘图工具中出现修改好的结构。如下图所示:

Chemical Structure:



Click image to change structure or view detail
Search type: **Substructure**

Only retrieve substances that:

- Have references
- Are commercially available
- Are a single component
- Are in specific substance classes
- Are in specific types of studies

Refine

可以继续通过下面的限定工具进行限定, 帮你获得一定要求的物质。

- 1: 有文献报道
- 2: 有商业来源
- 3: 单一组分
- 4: 特殊物质类型 (合金, 配位化合物等)
- 5: 存在某些方面的研究 (分析学, 生物学等)

点击 **Refine** 来限定

限定是否包含同位素

Analysis Refine

Refine by: ⓘ

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability
- Property Value
- Reference Availability
- Atom Attachment

Select One:

- Include only isotope-containing substances
- Exclude isotope-containing substances

Refine

1. 在 Refine By 下点选 Isotope-Containing 进行同位素是否包含的限定。
2. 在 Select One 下选择包含还是不包含同位素选项。
3. 点击 Refine 进行限定。

限定是否包含金属

Analysis Refine

Refine by: ⓘ

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability
- Property Value
- Reference Availability
- Atom Attachment

Select One:

- Include only metal-containing substances
- Exclude metal-containing substances

Refine

1. 在 Refine By 下点选 Metal-Containing 进行金属是否包含的限定。
2. 在 Select One 下选择包含还是不包含金属选项。
3. 点击 Refine 进行限定。

限定是否有商业来源

Analysis Refine

Refine by: ⓘ

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability
- Property Value
- Reference Availability
- Atom Attachment

Select One:

- Commercially available
- Not commercially available

Refine

1. 在 Refine By 下点选 Commercial Availability 进行是否提供商业来源的限定。
2. 在 Select One 下选择是否提供商业来源。
3. 点击 Refine 进行限定。

限定是否提供理化性质

Analysis Refine

Refine by: ⓘ

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability
- Property Value
- Reference Availability
- Atom Attachment

Retrieve substances with:

- Any property
- Any predicted property
- Any experimental property
- Any selected experimental property

Refine

1. 在 Refine By 下点选 Property Availability 进行是否提供理化性质的限定。
2. 在 Retrieve Substance With 下选择所需要的选项，可以就是否提供实验性质，计算性质，或者某些特定的实验性质进行限定。
3. 点击 Refine 进行限定。

限定理化性质

Analysis Refine

Refine by: ⓘ

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability
- Property Value
- Reference Availability
- Atom Attachment

Select Properties

1. 在 Refine By 下点选 Property Value 进行理化性质的限定。
2. 点击 Select Properties, 选择需要限定的理化性质, 并输入相应的数值。
3. 点击 Refine 进行限定。

Refine by Property Value ⓘ

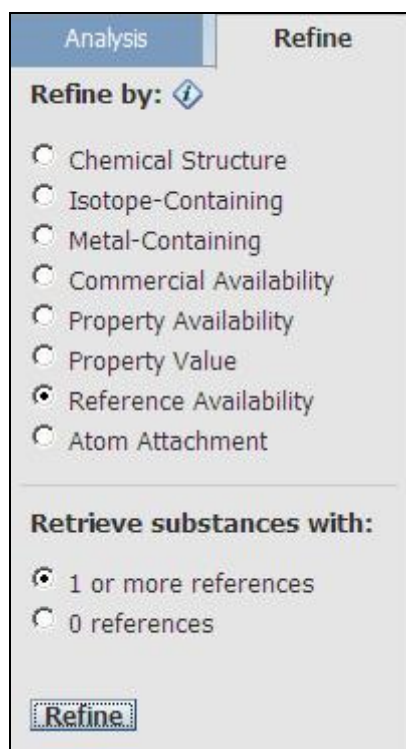
Select a property on the left, and specify values or limits on the right. Repeat for multiple properties.

Properties - 1 selected	Values - Experimental Boiling Point
Experimental	Specify range (°C): 70 to 150 Min: -273.0 Max:
<input checked="" type="checkbox"/> Boiling Point	Pressure (Torr): to Min: 0.0 Max:
<input type="checkbox"/> Melting Point	
Predicted	
<input type="checkbox"/> H Acceptors	
<input type="checkbox"/> H Donors	
<input type="checkbox"/> Molecular Weight	
<input type="checkbox"/> logP	
<input type="checkbox"/> Freely Rotatable Bonds	
<input type="checkbox"/> Bioconcentration Factor	
<input type="checkbox"/> Boiling Point	
<input type="checkbox"/> Density	
<input type="checkbox"/> Enthalpy of Vaporization	
<input type="checkbox"/> Flash Point	
<input type="checkbox"/> H Acceptor/Donor Sum	
<input type="checkbox"/> Koc	
<input type="checkbox"/> logD	
<input type="checkbox"/> Mass Intrinsic Solubility	
<input type="checkbox"/> Mass Solubility	
<input type="checkbox"/> Molar Intrinsic Solubility	
<input type="checkbox"/> Molar Solubility	

Include substances with no values for selected properties.

Reset Refine Cancel

限定是否有文献报道



Analysis Refine

Refine by: ⓘ

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability
- Property Value
- Reference Availability
- Atom Attachment

Retrieve substances with:

- 1 or more references
- 0 references

Refine

1. 在 Refine By 下点选 Reference Availability 进行是否有文献报道的限定。
2. 点击 Retrieve Substances with, 选择不包含文献获得至少包含 1 篇文献报道的选项
3. 点击 Refine 进行限定。

限定原子附属



Analysis Refine

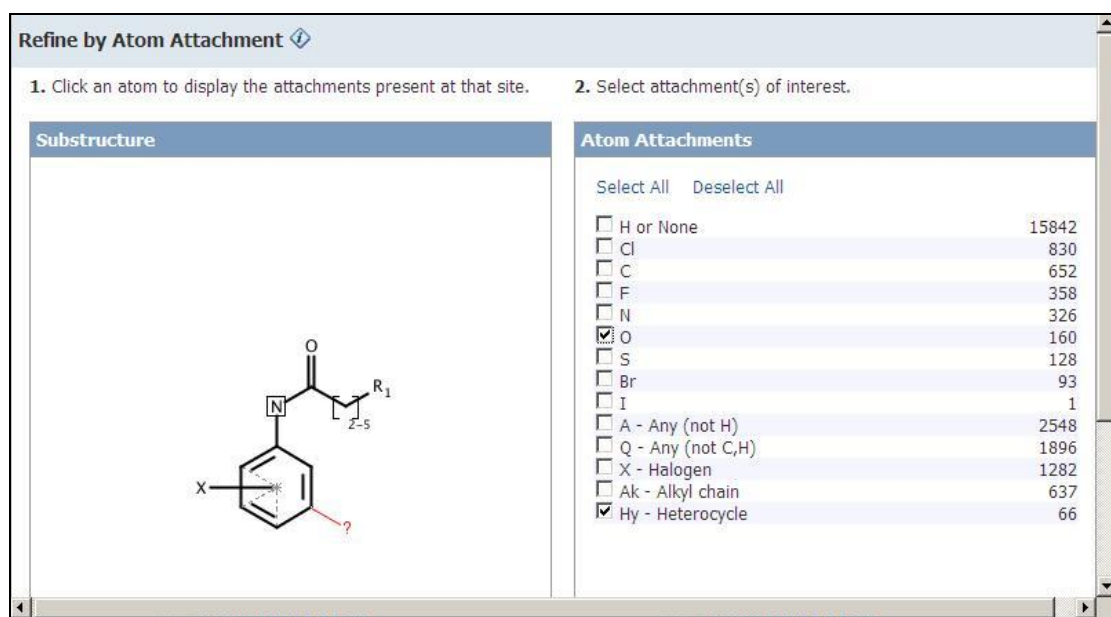
Refine by: ⓘ

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability
- Property Value
- Reference Availability
- Atom Attachment

Select Attachments

1. 在 Refine By 下点选 Atom Attachment 进行原子附属的限定。
2. 点击 Select Attachments。
3. 点击需要限定取代原子, 此原子将会被突出显示, 在它旁边会有? 出现。在对话框内的 Atom Attachments 部分, 便会看到在这位置的取代原子, 会以黑色显示出来。

如下图所示



勾选需要限定的原子，也可以通过 Select All 和 Deselect All 来选择全部或者去除已经选择的选项，点击 Refine 进行限定。

3.4.3.5 返回历史检索界面 (Back To The History Interface)

在检索界面的最上方，可以通过历史导航条，返回曾经检索的任意界面，点击上面的任何一步，都可以获得当时的检索界面。并且当鼠标放在上面时，可以直接看到当时所限定的结构。

3.4.4 相似结构检索

3.4.4.1 概览

若用户的账号带有 SciFinder Substructure Module (SSM) 功能，就可使用相似结构检索。

检索结果包括以下结构：

- 1) 与已绘画的结构完全相同（跟第二章的完全相同结构检索相同）
- 2) 包含检索结构的多元物质，例如：聚合物，配合物等
- 3) 结构相似的物质，但元素成分、取代基和其位置有所不同
- 4) 结构相似的物质，但只有少部分与检索结构互相符合
- 5) 与检索结构相似，但有不同大小的环结构
- 6) 在相似结构的检索中，SciFinder 会用 Tanimoto 程序来进行检索与查询物质相似的结构，并给予相似评分。

相似结构评分：

相似结构检索能找出与查询结构最为相似的结构，其 2-D 小分子的相似度会以 Tanimoto 程序来计算。

以下是 Tanimoto 的计算公式，评分是以 CAS 的结构描述子为基本：

$$\text{Tanimoto Score} = \frac{100 \times C}{(QS + FS) - C}$$

C = 代表检索结构和结果结构相同的描述子数目

QS = 代表在检索结构中的描述子数目

FS = 代表在结果结构中的描述子数目

相似性的计算中并不考虑以下因素

- 1) 立体结构
- 2) 同位素标识
- 3) 氢原子的数目（除带电荷氢原子之外）
- 4) 离子

所以仅有此类结构特征区别的物质相似分值一致。

多元物质的处理

- 1) 每一个多元物质的成份，都会被给予相似评分(Tanimoto score)。最高评分的成份物质，将会在分析相似的结果中显示。
- 2) 用户检索单一物质时，点击 Get Substance 后，按下点击 Filter 中的 Structure components 即可。

注意事项

- 1) 相似检索并不适用于 R 基团、可变的原子、重复单元和可变的取代位置工具。
- 2) 分析不适用于相似结构检索。
- 3) 在限定结果时，相似评分将不会显示。
- 4) 相似评分不能保存（只适用于 SciFinder）。

相似评分的显示

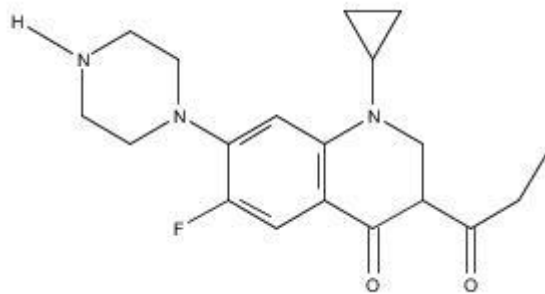
以整数显示，不设小数点。

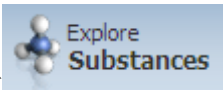
系统限制

- 1) 只会显示 60 分以上的相似结构结果。
- 2) 最多只能显示 20,000 个相似结构。

3.4.4.2 相似结构检索举例

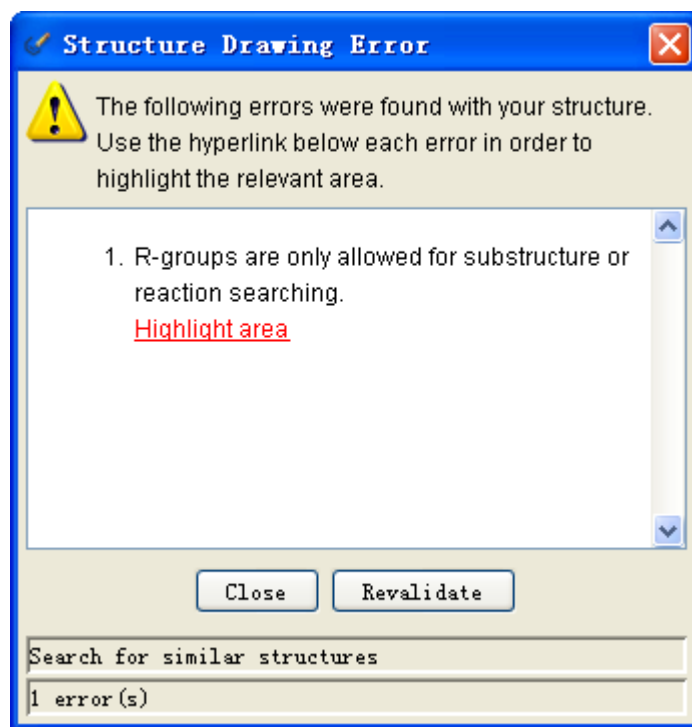
检索以下的相似结构



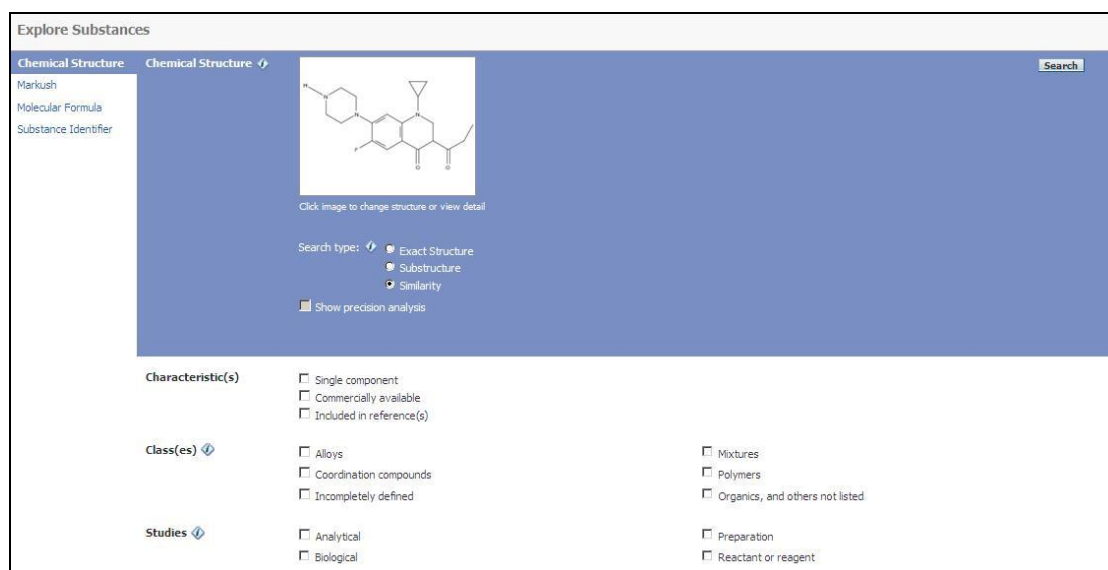
- 1) 点击 。
- 2) 选择 Chemical Structure 检索。
- 3) 打开结构编辑器，绘制结构。

在绘制结构后，选择 Similarity Search，然后点击确定，将结构导入检索界面。

若绘制的结构含有 R 基团或可变原子 (X, Ak)，按下确定后，便会出现以下的结构绘图错误窗口。



4) 继续修改后才能导入，导入成功后如下图所示：



若要缩小检索范围至特定类型，可通过 Characteristic(s), Classes, Studies 等过滤选项设定，限制检索结果至指定类型，点击 Search。

5) Tanimoto 的相似评分会以统计图表来显示。

Similarity Candidates	
6 Candidates	1 Selected
Similarity answer limit exceeded; answers truncated.	
Select All Deselect All	
Similarity Candidates	Substances
<input type="checkbox"/> ≥ 99 (most similar)	0
<input type="checkbox"/> 95-98	0
<input type="checkbox"/> 90-94	0
<input type="checkbox"/> 85-89	9
<input type="checkbox"/> 80-84	7
<input checked="" type="checkbox"/> 75-79	409
<input type="checkbox"/> 70-74	1408
<input type="checkbox"/> 65-69	4591
<input type="checkbox"/> 0-64 (least similar)	4646
<input type="button" value="Get Substances"/>	

选择合适的评分， 然后点击 Get Substances 查看相似之结构。

6) 相似评分会于 CAS 注册号右侧显示。

用户可以使用 Analysis/Refine 功能，对结构进行分析和限定。

注意： 注意 Refine 下的 Atom Attachment 功能不能直接使用。

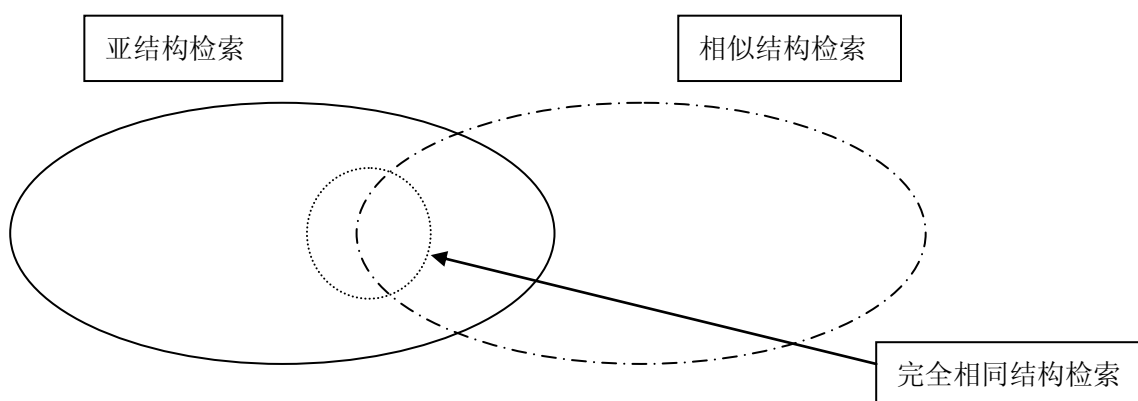
比较：完全相同结构检索、亚结构检索和相似结构检索

不同类型的检索、会得到不同的结果

检索类型	能检索得到的结果	不能检索得到的结果
Exact Search 完全相同结构检索 (精确结构检索?)	与检索的结构完全相同，以及其 多元物质 (盐、聚合物、化合物) 互变异构体 (Tautomers)	含取代基的物质
Substructure Search 亚结构检索	与检索的结构完全相同，以及其 多元物质 (盐、聚合物、化合物) 互变异构体 (Tautomers) 含取代基的物质	结构相似， 但并不是其亚结构， 如乙烷基 (甲基的结果便不会出现)
Similarity Search 相似结构检索	与检索的结构完全相同，以及其 多元物质 (盐、聚合物、化合物) 有相似结构的物质， 但其元素成	结构有较大的取代基 (相似程度 低)

	<p>份、取代基和其位置与检索的结构不同</p> <p>两者的结构相似，但并不是其亚结构，如乙烷基（甲基的结果便不会出现）</p> <p>物质含有的环数目和检索的结构不同（输入 6 - 5 环时，有可能获得 6 - 6 环的结果）</p>	
--	---	--

三种检索的相互关系



具体例子： 利用不同的检索方法来查询华法林（Warfarin）的结构

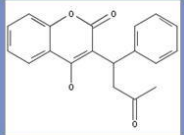
Explore Substances

Chemical Structure

Markush

Molecular Formula

Substance Identifier



Click image to change structure or view detail

Search type: Exact Structure
 Substructure
 Similarity

Show precision analysis

Search

Characteristic(s)

Single component

Commercially available

Included in reference(s)

Class(es)

Alloys

Coordination compounds

Incompletely defined

Mixtures

Polymers

Organics, and others not listed

Studies

Analytical

Biological

Preparation

Reactant or reagent

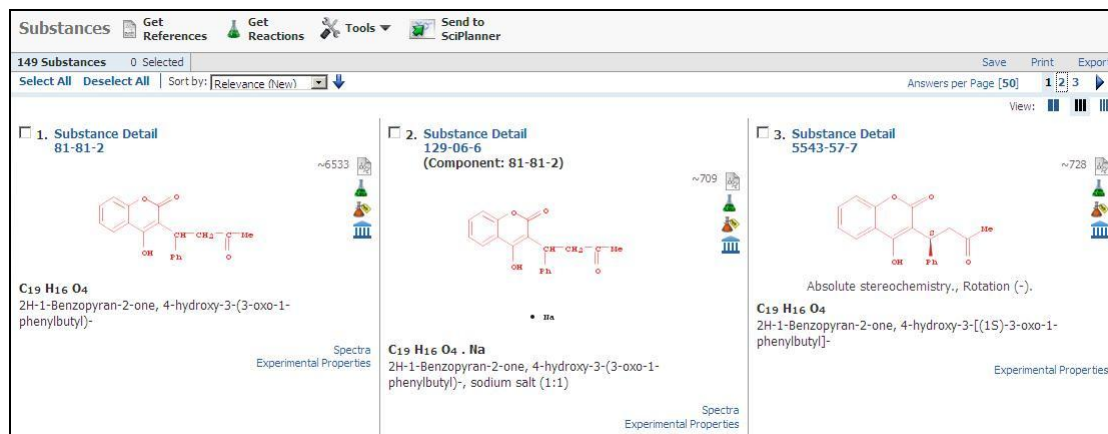
选择不同的检索方式进行检索：

- a) Exact Structure
- b) Substructure

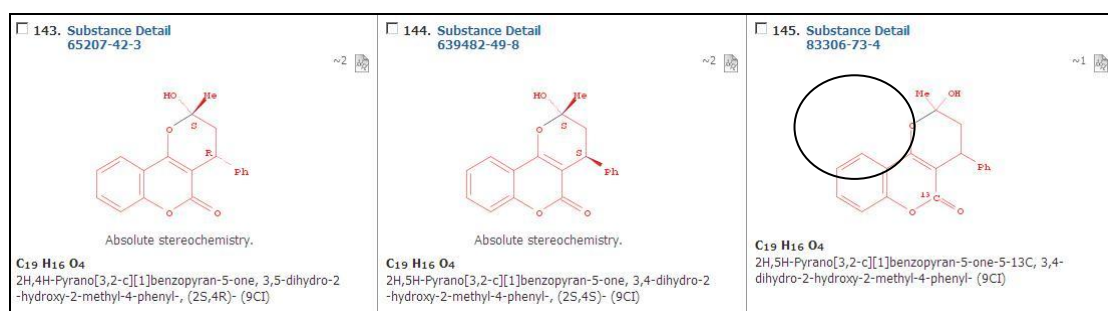
c) Similarity

完全相同结构检索 (Exact Structure) (149 个)

可检索得到的结果: 华法林和其盐、离子、立体异构体、互变异构体、含氘标识的化合物

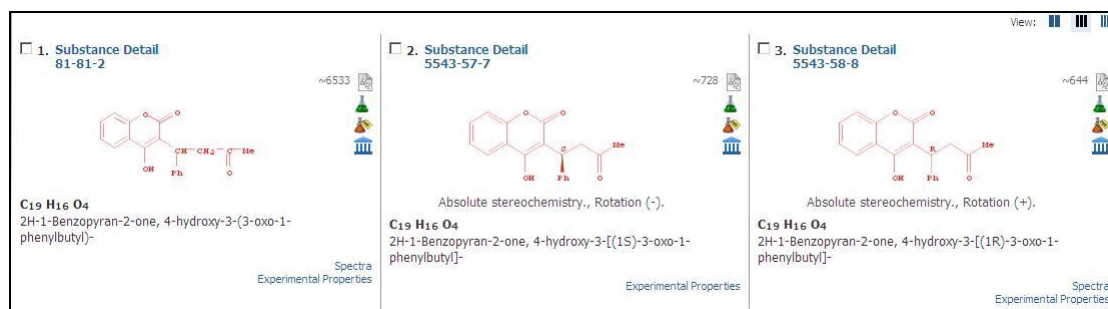


以上环形结构亦会被检索出来



亚结构检索 (3552 项)

可检索得到的结果: 包括结构相同物质, 以华法林为取代基的物质, 以及其多元物质(盐、化合物、附加物)



相似结构检索

可检索得到的结果: 包括结构相同物质, 以及用 Tanimoto 方法计算相似评分分值超过 60 相似度分布:

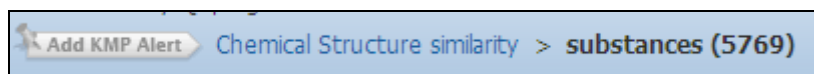
Similarity Candidates	
9 Candidates	0 Selected
Similarity answer limit exceeded; answers truncated.	
Select All Deselect All	
Similarity Candidates	Substances
<input type="checkbox"/> ≥ 99 (most similar)	120
<input type="checkbox"/> 95-98	20
<input type="checkbox"/> 90-94	179
<input type="checkbox"/> 85-89	268
<input type="checkbox"/> 80-84	383
<input type="checkbox"/> 75-79	561
<input type="checkbox"/> 70-74	1070
<input type="checkbox"/> 65-69	2980
<input type="checkbox"/> 0-64 (least similar)	5769
Get Substances	

只有用相似结构检索才能取得的结果（请注意圆圈部分！）

<p>4. Substance Detail 3764-82-7</p> <p>Score: 64</p> <p>C₂₀ H₁₂ O₇ 2H-1-Benzopyran-3-acetic acid, 4-hydroxy-2-oxo-α-(4-oxo-4H-1-benzopyran-3-yl)-</p> <p>Experimental Properties</p>	<p>5. Substance Detail 4139-69-9</p> <p>Score: 64</p> <p>C₁₉ H₁₂ O₄ 2H-1-Benzopyran-2-one, 3,3'-methylenebis-</p> <p>Experimental Properties</p>	<p>6. Substance Detail 4139-71-3</p> <p>Score: 64</p> <p>C₂₉ H₂₄ O₇ Coumarin, 3,3'-(m-hydroxybenzylidene)bis[4-ethoxy-(7C1,8C1)]</p>
--	---	---

返回历史检索界面（Back To The History Interface）

在检索界面的最上方，可以通过历史导航条，返回曾经检索的任意界面，点击上面的任何一步，都可以获得当时的检索界面。



3.5 Markush 检索

3.5.1 概览

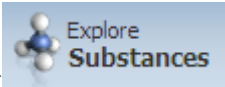
Markush 检索用于查找包含 Markush 通式结构的专利文献。

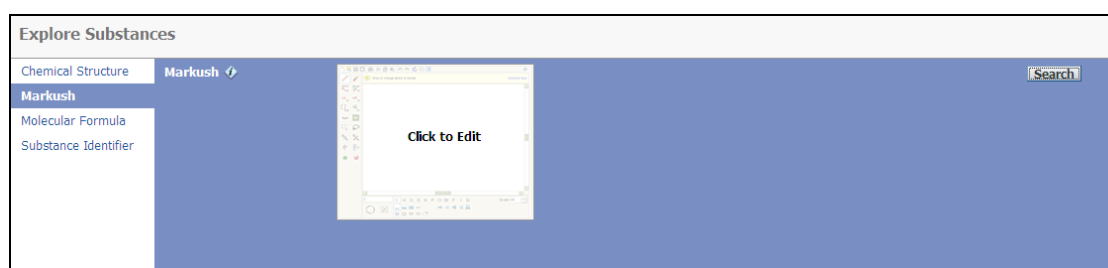
Markush 检索中有以下方式可以选择：

检索方式	检索范围
仅在特定位点发生变化 Allow variability only as specified	可以使用可变 X 基团) 或 R 基团工具。 自动禁止其他所有开放节点发生取代。
亚结构检索（默认） Substructure	可以使用可变 X 基团或 R 基团工具。 除取代锁定工具和环锁定工具所定的位置之外的所有节点允许取代。

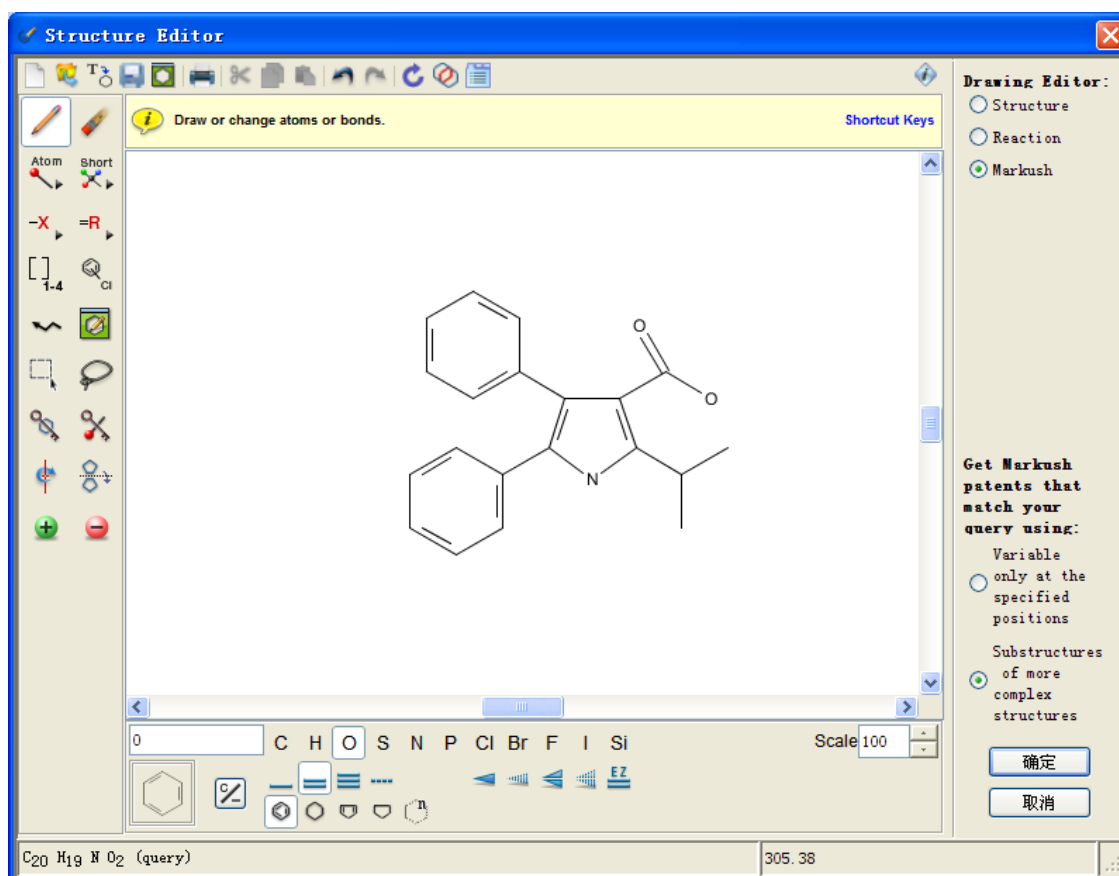
你可以在设定查询时随时指定或改变 Markush 物质检索方式：
在结构编辑器内完成结构绘制时，
导入结构后的检索页面，
完成查询后在检索页面的结构编辑器上。

3.5.2 检索方法举例

- 1) 点击 。
- 2) 选择 Markush 检索。



- 3) 点击结构编辑器。绘制结构。查询切换区处于 Markush 选项。



根据需要选择查询方式，此案例中选择了 Substructures of more complex structure。点击确定后。

- 4) 检索结构显示于检索框内。点击 Search。

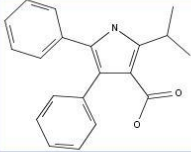
Explore Substances

Chemical Structure Markush ↕ Search

Markush

Molecular Formula

Substance Identifier



Click image to change structure or view detail

Search type: ↕ Allow variability only as specified Substructure

5) 检索结构为专利文献答案集。

References Get Substances Get Reactions Get Related Tools Send to SciPlanner

106 References 0 Selected Save Print Export

Select All Deselect All Sort by: Accession Number ↓ Answers per Page [20] 1 2 3 4 5 6 Display:

1. Preparation of substituted pyrroles and imidazoles as estrogen receptor ligands Full Text
 By Wennerstaal, Mattias; Loeffstedt, Joakim; Wu, Xiongyu; Krueger, Lars; Hagberg, Lars
 From PCT Int. Appl. (2011), WO 2011042477 A1 20110414. | Language: English, Database: CAPLUS
 The title compds. I [G = pyrrole or imidazole moiety; R4-R7 = H, halo, CN, NO2, etc.], useful in the treatment or prophylaxis of a condition assocd. with a disease or disorder assocd. with estrogen receptor activity, were prepd. E.g., a multi-step synthesis of II, starting from 4-methoxybenzoyl chloride and 3,5-dimethylisoxazol-4-amine, was given. Exemplified compds. I were tested in estrogen binding assay and in transactivation assays 1 and 2 (data provided). Pharmaceutical compn. comprising the compd. I is also disclosed.

2. 1,2,4-Triazolo[1,5-a]pyrimidine derivatives as pesticide and their preparation and use Full Text
 By Kimura, Hirohiko; Ueki, Toshihiko; Kiriya, Kazuhisa; Okamoto, Tomohiro
 From PCT Int. Appl. (2010), WO 2010087294 A1 20100805. | Language: English, Database: CAPLUS
 The invention relates to 1,2,4-triazolo[1,5-a]pyrimidine derivs. of formula I, which are used as pesticides. Compds. of formula I wherein R1 is (un)substituted alkyl; Het is substituted heterocycle group; and salts thereof, are claimed. Example compd. II was prepd. by condensation of 2-acetyl-4-trifluoromethylpyrimidine with N,N-dimethylacetamide dimethylacetal; the resulting (E)-3-dimethylamino-1-(4-trifluoromethylpyrimidin-2-yl)-2-buten-1-one underwent cyclocondensation with 3-amino-1H-1,2,4-triazole to give compd. II. All the invention compds. were evaluated for their pesticidal activity...

3. Method for reducing blood pressure using inhibitors of plasma kallikrein Full Text
 By Feener, Edvard P.; Clement, Allen
 From PCT Int. Appl. (2010), WO 2010065656 A1 20100610. | Language: English, Database: CAPLUS
 The present invention relates to methods of reducing blood pressure in a subject by administering a plasma kallikrein inhibitor.

3.6 分子式检索 (Molecular Formula)

SciFinder® 中可以使用分子式检索化学物质。

注意：分子式检索内不能设置 KMP 提醒功能。

3.6.1 分子式输入规则：

分子式由元素符号和元素数组成（例如：C10 H8，如 naphthalene）。

在进行分子式查询时，遵循以下规则：

- 原子数为 1 时可以不输入数字 1 而用使用空格。（例如，C O2）。
- 分子式有时会引起歧义（例如，“CLI”代表“C LI”还是“CL I”？），为避免歧义所以要：
 - 单个字母的元素符号大写；多个字母的元素符号首字母要大写，其他字母小写（例如，Ca，Fe）。
 - 元素符号/数字和下一个元素符号/数字之间要包括一个空格。尽管在许多情况下这个空格并不是必需的。（例如，C21 H26 N2 S2 和 C21H26N2S2 都是可以接受的硫醚嗪的表达形式）
- 多组物质的分子式：
 - 自空格后用点将组分分隔开。

举例	C16 H32 C18 . O2. H3N
----	-----------------------

- 使用括号将组分分子式括起来。

举例	$(C_{15}H_{10}N_2O_2 \cdot C_6H_{14}O_3 \cdot 3(C_3H_6O \cdot C_2H_4O)_x)_x$
----	--

- 使用括号将表示结构重复单元的部分括起来，括号外面加一个重复度数值“n”。

举例	$(C_2H_3)_n C_{14}H_{13}N_4O_2$
----	---------------------------------

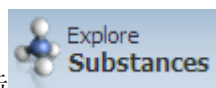
- 每个组分分子式前面可以放置一个整数或分数的系数。（例如，1/2），或未知系数“x”。

举例	$C_2H_4O_2 \cdot \frac{1}{2} C_3CA$ $(C_8H_8O_3S)_x \cdot (C_8H_8O_3S)_x \cdot x H_3N \cdot x K$
----	---

- 基于单体的聚合物分子式是一个单组分均聚物或者包括在括号内的多组分分子式，括号外面是重复度数值或“x”。

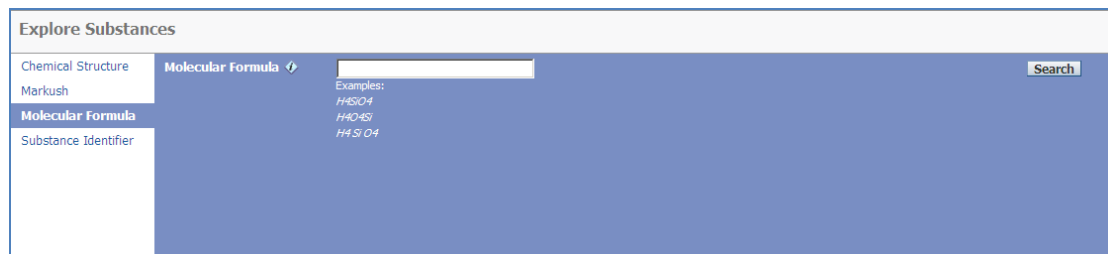
举例	$(C_2H_3)_x$ $(C_2H_4 \cdot CBrF_3)_x$
----	---

3.6.2 分子式检索举例

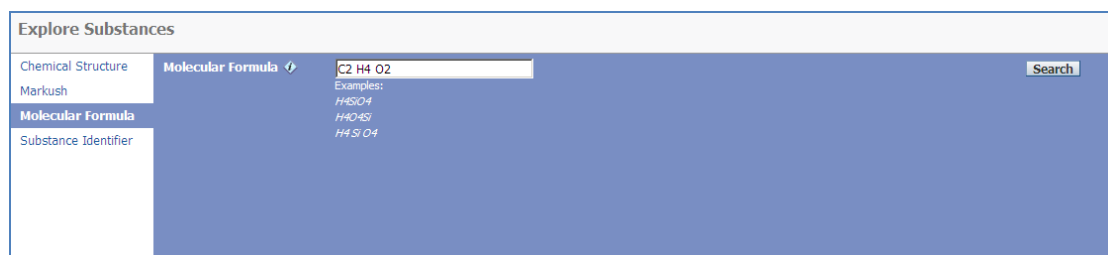


- 1) 在主工具栏点击 。检索物质的页面显示。

- 2) 在物质检索页面上选择分子式检索 **Molecular Formula**。



- 3) 在分子式 **Molecular Formula** 输入框内，键入分子式。参见分子式输入规则。



- 4) 点击 Search 进行检索。

- 显示答案列表。

The screenshot shows a search interface with three results:

- 1. Substance Detail 1333502-33-2: CC(=O)O (Acetic-2-d acid, labeled with deuterium)
- 2. Substance Detail 1310356-88-7: CC=O (Acetaldehyde, 2-hydroxy-, labeled with carbon-13)
- 3. Substance Detail 1308294-81-6: COC=O (Formic acid, methyl ester, labeled with carbon-11)

- 没有符合检索条件的答案。
- 出错：

出错信息	操作
A molecular formula is required.	▶ 在分子式文本框内输入一个分子式。
Formula is ambiguous. Add spaces between elements and/or adjust capitalization.	▶ 更正分子式。
Only 200 characters can be used.	▶ 减少分子式中的字符数。字符数最多不能超过200。
Only letters, numbers, spaces, slashes (/), parentheses, and periods can be used.	▶ 仅使用有效字符用于检索。

5) 如果检索结果：

- 不包括感兴趣答案，点击导航条（breadcrumb trail）返回检索页面，修改检索条件。
- 包含感兴趣答案，则继续使用其他可用操作。

第四章 化学反应检索

4.1 概述

在 SciFinder 中, 用户可用化学结构图标来检索化学反应, 并设定物质在反应式中的角色(反应物、试剂、产物或任何角色)。用户也可以用反应位置工具和原子绘图工具作精确的反应检索。

这个章节会说明怎么检索化学反应:

化学结构

- 只指定反应物或产物
- 不指定反应物和产物

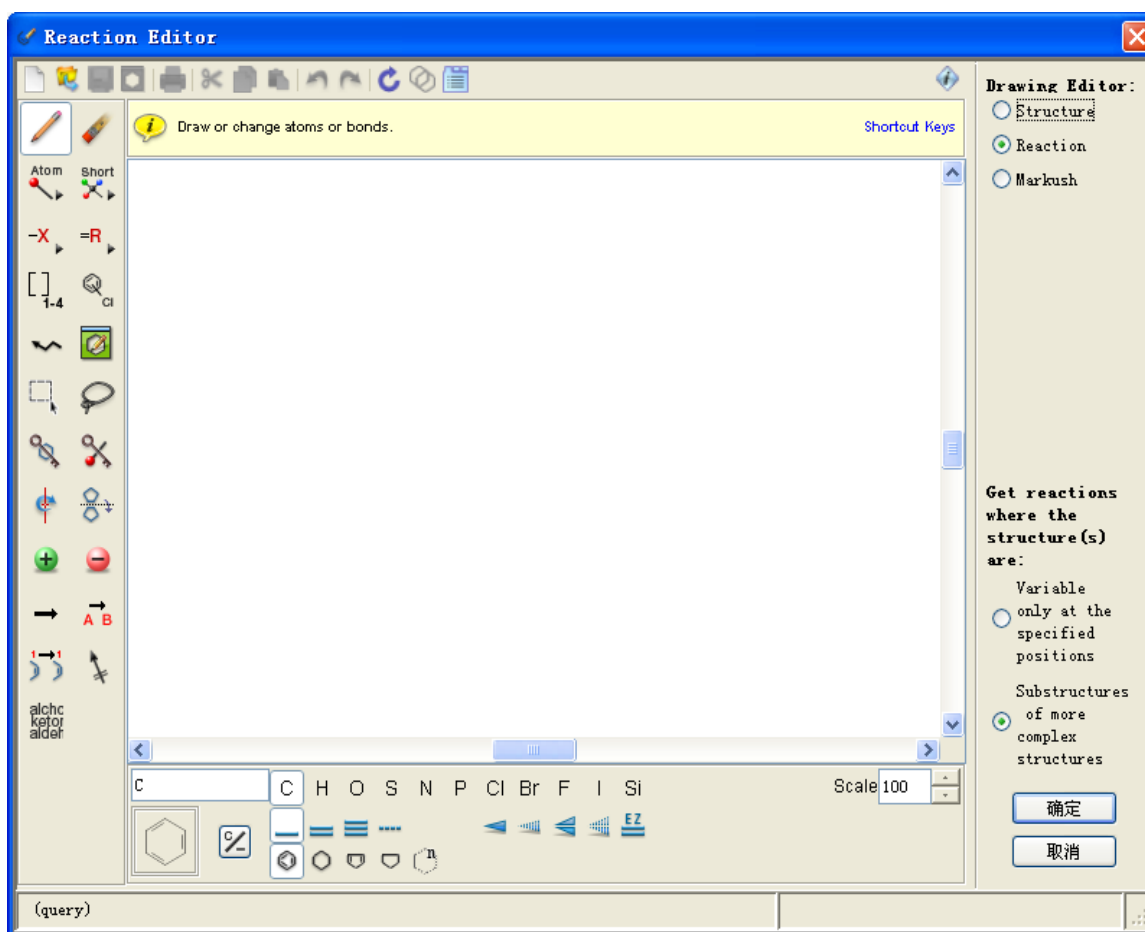
官能团

- 只用官能团作检索
- 以官能团和结构一起作检索

在检索化学反应的结果中, 用户可以得到以下数据:

- 含有绘画结构和官能团的化学反应式
- 怎样做合成物质物质的合成方法
- 供货商的资料
- 管制化学品目录及其法规
- 文摘、目录数据等和反应式相关的数据

4.2 反应结构编辑器



反应箭头工具 (Reaction Arrow Tool)

反应箭头工具用于指定反应参与者的反应角色。

可以指定的角色为

- 反应物/试剂 (Reactant/reagent)
- 产物 (Product)

自动定义所有反应参与者的反应角色的方法：

1) 在垂直工具面板上，点击反应箭头



2) 将光标置于反应物或试剂附近的位置。

3) 顺着反应的方向点击并拖拽光标。

反应角色被自动分配至没有进行过手动设置反应角色的反应参与者，所分配的角色根据其于箭头的位置关系决定。


可以使用反应角色工具改变自动分配的角色。例如：将“Reactant/reagent”改为“Reactant,”
“Reagent,” 或 “Non-reacting.”

反应角色工具 (Reaction Role Tool)

反应角色工具用于分配或替换反应参与者（结构或官能团）在反应中承担的角色。

分配或改变反应角色的方法：




- 1) 在垂直工具栏面板，点击 。
- 2) 将光标置于反应参与者之上（或者已有角色标记，若有的话），然后点击。反应角色对话框弹出。
- 3) 选择反应角色：
 - a) Product 产物
 - b) Reactant 反应物
 - c) Reagent 试剂
 - d) Reactant or Reagent 反应物或试剂
 - e) Any role (anywhere in the reaction) 任意角色
 - f) Non-reacting (functional groups only) 不参加反应（仅官能团可用）角色标记显示在反应参与者的下方。
- 4) 点击 ok。

原子对应工具 (Atom Mapping Tool)

原子对应工具用于定义反应物/产物或试剂/产物的原子对应。

指定原子对应的方法：



- 1) 在垂直工具面板上，点击 。
- 2) 光标变为图标的样子。
- 3) 将光标置于合适的反应物或试剂节点上（会高亮显示），然后点击该节点。
- 4) 将光标置于合适的产物节点上（会高亮显示），然后点击该节点。

所选节点的附近会出现相同的数字。


可以在反应式中标记多组对应原子，这可缩小答案数量，作做更准确的检索。

反应位置标记工具 (Reaction Site Marking)

反应位置标记工具用于控制反应中键的形成、断裂或改变（如单键变为双键等）

可以在反应式中标记多个键。标记键会使查询更具体，并且会缩小答案量数量。

反应中标记键的方法：

1) 在垂直工具面板上，点击 。


2) 光标变为反应标记工具的样子。

将光标置于反应参与者的某个键上，点击，键会被画上垂直的双重线以作标记。

官能团工具 (Functional Group Tool)

官能团工具用于绘制时插入官能团。

插入官能团的方法：

1) 在垂直工具面板上，点击 ，会显示出官能团对话框。

2) 从窗口底部的 Terms displayed 区域选择一个选项。

3) 选择一个官能团或一类官能团。

4) 左侧窗口或高亮显示所选项，选择并点击。

5) 在文本框中键入几个字母，直到下方高亮显示出官能团。

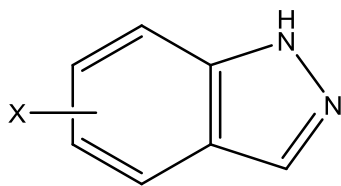
6) 官能团（或列表中最匹配的官能团）会高亮显示在左方，并且名称或结构显示在右边窗口。

点击编辑窗口中的结构，官能团即被插入。

注意：除了 在结构编辑器中使用外，不参加反应的官能团 (Non-participating functional groups) 可在反应检索中用检索设置项或限定标准。

4.3 从结构去检索反应 (Search from One Side of Reaction)

检索例子



检索左面结构的相关反应

- 产物
- 有一个卤原子连接苯环

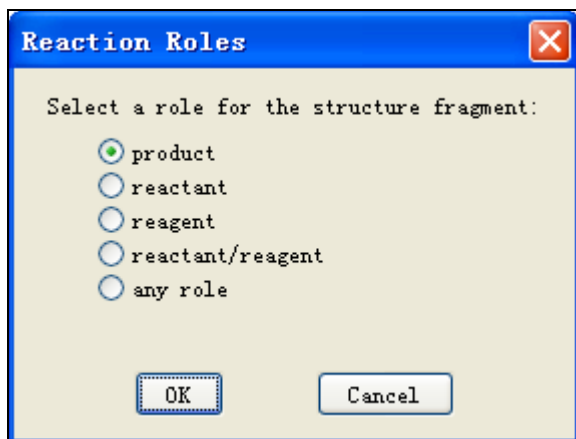
请参考第三章的说明，有关怎样绘制结构和绘制结构工具的功能。

绘图方法：

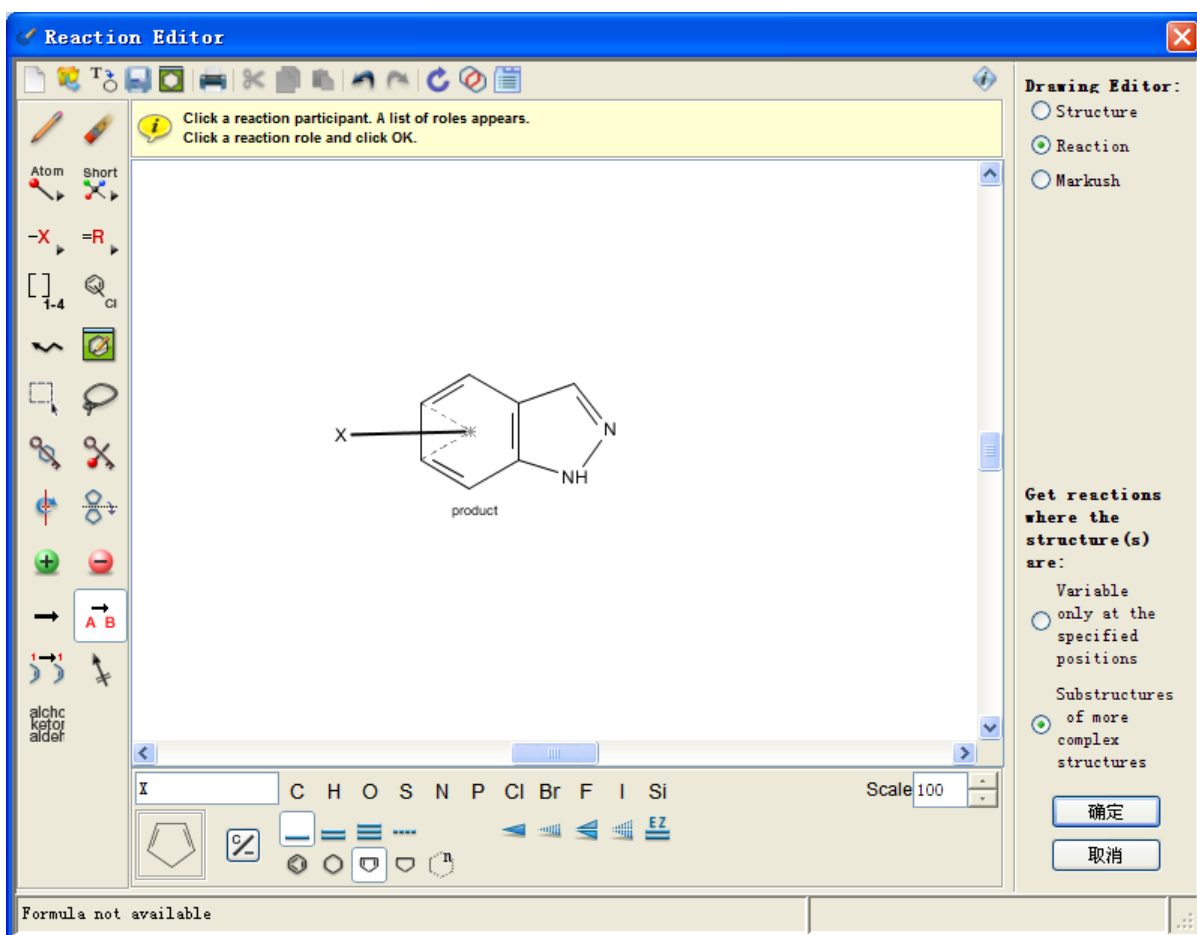
- 用苯环工具绘制苯环。
- 点击环戊烷环工具，将鼠标移至已绘制的苯环的右边并加以点击，将苯环和环戊烷连合。
- 点击 X 菜单工具 (选择 X: Any halogen 任何卤原子)，在环结构以外的地方点击。
- 点击可变的取代位置工具。
- 点击及拖曳 X 取代基至取代位置。取代基将和其位置将显示为红色。在取代基和取代位置之间会出现一条虚线。

- 点击 short，在环戊烷上绘制 NH，点击 N 原子绘制环戊烷上的 N。
- 在绘制结构之后，点击反应角色工具和要设定的结构，反应角色对话框将会出现，请设定物质在反应式中的角色。

产物
 反应物
 试剂
 反应物或试剂
 任何角色



- 选取产物，点击 OK，绘制好的反应如下图所示



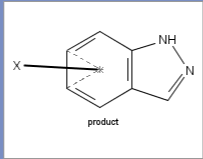
在绘图面板的右下方请选择任何一个检索方法：

- (1) 变化只适用于指定的结构的位置 (Variable only at the specified positions)
- (2) 为复杂结构中的亚结构 (Substructures of more complex structures)

在这个例子中选择 (2) substructures of more complex structures，点击确定，将结构导入检索界面。

Explore Reactions

Reaction Structure Reaction Structure Search



Click image to change structure or view detail

Search type: Allow variability only as specified
 Substructure

Solvent(s) Select Solvents

Non-participating Functional Group(s) Select Groups

Number of Steps
 Examples: 1, 1-3, 1, -3

Classification(s)

<input type="checkbox"/> Biotransformation	<input type="checkbox"/> Electrochemical	<input type="checkbox"/> Radiochemical
<input type="checkbox"/> Catalyzed	<input type="checkbox"/> Gas-phase	<input type="checkbox"/> Regioselective
<input type="checkbox"/> Chemoselective	<input type="checkbox"/> Non-catalyzed	<input type="checkbox"/> Stereoselective
<input type="checkbox"/> Combinatorial	<input type="checkbox"/> Photochemical	

Source(s)

Any source
 Patents only
 Sources other than patents

Publication Year(s)

如想限制检索范围，可以通过提供的过滤选项进行设定：

- **Solvents:** 溶剂限定，参考第一章
- **Non-participating Functional Group(s):** 不参与反应的官能团
- **Number of Steps:** 限制反应步骤
- **Classifications:** 限制反应类型

Biotransformation 生物转化

Electrochemical 电气化学

Radiochemical 放射化学

Catalyzed 催化

Gas-phase 气相

Regioselective 区域选择

Chemoselective 化学选择

Non-catalyzed 无催化

Stereoselective 立体选择


Combinatorial 组合


Photochemical 光化学


- **Sources:** 限制来源
- **Publication Years:** 限制出版年份

全部选择好后，点击 Search 进行反应检索：

- 检索结果便会出现，用户可以通过下图中的  选项来选择显示反应检索的结果。

 显示所有反应记录；

 即一篇文献只出现一条反应，除去部分重复的反应；

 仅显示反应式；

 显示反应式和 Overview（反应条件和反应步骤）；

- 检索的亚结构部份显示为红色，方便查看。检索结果是按收藏号顺序来排列(最新文献开始)，用户可在下图中的 **Sort by: Accession Number** 修改排列方式。分别可以按照 Accession number (收录号)、Experimental procedure (包含实验过程)、Number of steps (反应步骤)、Product Yield (收率)、Publication Year (出版年限) 来排序。

- 用户可以从结果中看到反应式，以鼠标左键点击反应式中的任何物质，便可轻易打开该物质的标准菜单。除此之外，用户可以点击 overview 查看详细的反应条件、反应来源。

- 使用 Experimental procedure 排序后，用户可以点击“experimental procedure”查看详细的反应过程。

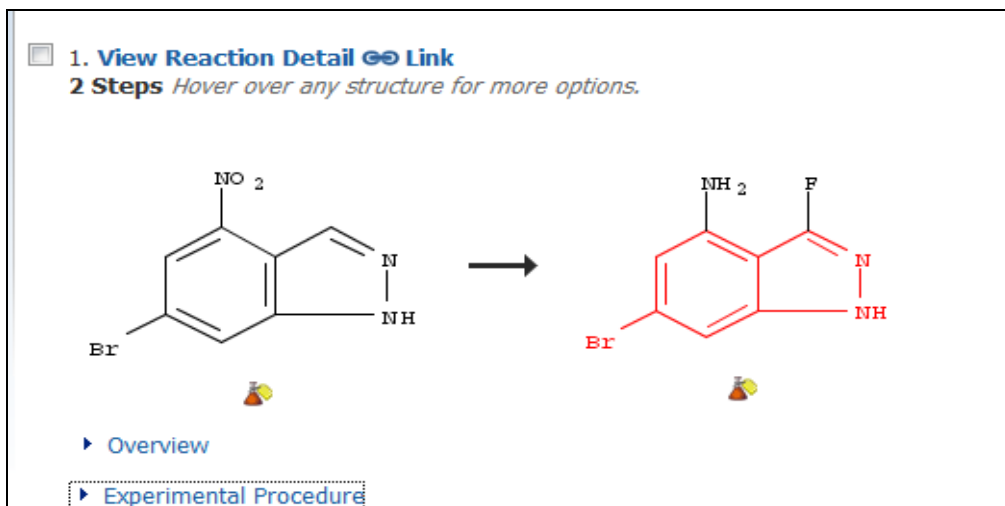
Step 1
Intermediate 26. 6-Bromo-3-fluoro-4-nitro-1H-indazole. To a solution of 6-bromo-4-nitro-1H-indazole (5 g) in acetonitrile (50 ml) and acetic acid (10 ml) was added Selectfluor (9.39 g). The resulting mixture was heated to 100 °C and stirred for two days. The reaction mixture was concentrated under vacuum. The residue was dissolved in DCM and then filtered off. The sample was absorbed onto silica powder then solid loaded onto the companion where it was purified on a 0-100 ethyl acetate:cyclohexane gradient. The appropriate fractions were combined and concentrated to yield the title compound as an orange solid, 2 g. LCMS (Method B): $R_f = 1$ min, $MH^+ = 258$.

Step 2
Intermediate 28. 6-Bromo-3-fluoro-1H-indazol-4-amine. 6-Bromo-3-fluoro-4-nitro-1H-indazole (1 g) was dissolved in methanol (20 ml) and acetic acid (5 ml). A small amount of solid remained that was removed by filtration. The resulting solution was pumped at 1.0 ml/min through an Omnit column, which had been packed with iron granules (30 g). The column was heated to 100°C via a Vapourtec R4 unit. Roughly 40 ml of solution was collected and evaporated to dryness to form a black residue. The residue was dissolved in dilute HCl - some of the solid did not dissolve and was filtered off. The solution was basified and extracted with ethyl acetate. Both layers were filtered through celite. The two layers were then separated and the aqueous phase extracted again with ethyl acetate. The combined organics were washed with brine, dried over $MgSO_4$, filtered and concentrated. The solid produced was then dissolved in DCM (10 ml) then loaded onto a 100 g silica column and purified on a 0-100% ethyl acetate:cyclohexane gradient. The relevant fractions were combined and concentrated to yield the title compound as a yellow solid, 250 mg. LCMS (Method B) $R_f = 0.86$ min, $MH^+ = 230$.

- 可以使用 Save, Print, Export 来选择结果输出的格式。

4.3.1 多步反应显示 (View Reaction Detail)

点击 view reaction detail, 便可看到多步反应式。




下图显示的为第一步至第二步, 点击 Return 可返回。

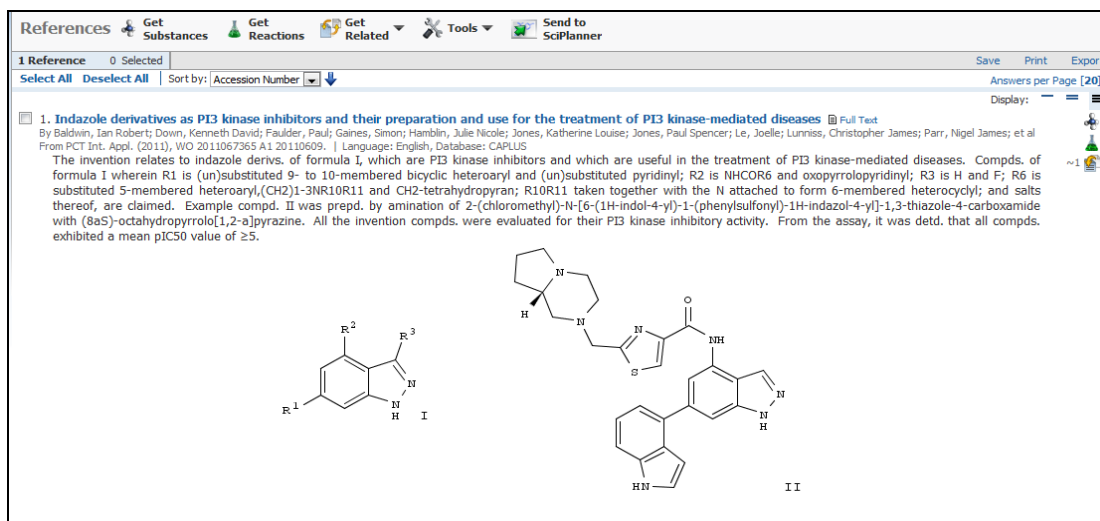
Steps	Stages	Notes	Yield
1	1.1 R:Selectfluor, S:MeCN, S:AcOH, rt → 100°C; 2 d, 100°C	regioselective, Reactants: 1, Reagents: 1, Solvents: 2, Steps: 1, Stages: 1	
2	2.1 R:Fe, S:MeOH, S:AcOH, rt → 100°C	Reactants: 1, Reagents: 2, Solvents: 3, Steps: 1, Stages: 1	

4.3.2 有关化学反应的文献 (Get References)

可以通过 Get References 来获得全部文献或者选择反应的文献

相关的文献结果便会显示出来，点击文献题目阅读文摘或点击标题右边的“full text”链接全文，

也可点击最右边的列表获得被引文献。




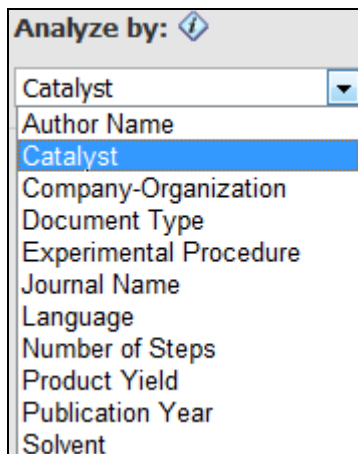
1. Indazole derivatives as PI3 kinase inhibitors and their preparation and use for the treatment of PI3 kinase-mediated diseases [Full Text](#)
 By Baldwin, Ian Robert; Down, Kenneth David; Faulder, Paul; Games, Simon; Hamblin, Julie Nicole; Jones, Katherine Louise; Jones, Paul Spencer; Le, Joelle; Luniss, Christopher James; Parr, Nigel James; et al
 From PCT Int. Appl. (2011), WO 2011057365 A1 20110509. | Language: English, Database: CAPLUS

The invention relates to indazole derivs. of formula I, which are PI3 kinase inhibitors and which are useful in the treatment of PI3 kinase-mediated diseases. Comps. of formula I wherein R1 is (un)substituted 9- to 10-membered bicyclic heteroaryl and (un)substituted pyridinyl; R2 is NHCOR6 and oxopyrrolopyridinyl; R3 is H and F; R6 is substituted 5-membered heteroaryl, (CH2)1-3NR10R11 and CH2-tetrahydropyran; R10R11 taken together with the N attached to form 6-membered heterocyclyl; and salts thereof, are claimed. Example compd. II was prepd. by amination of 2-(chloromethyl)-N-[6-(1H-indol-4-yl)-1-(phenylsulfonyl)-1H-indazol-4-yl]-1,3-thiazole-4-carboxamide with (8aS)-octahydropyrrolo[1,2-a]pyrazine. All the invention comds. were evaluated for their PI3 kinase inhibitory activity. From the assay, it was detd. that all comds. exhibited a mean pIC50 value of ≥ 5 .

4.4 分析反应结果 (Analyze Reaction Result)

要分析结果，点击页面右侧的  图像，默认停留在 Analysis 上，当

点击 Analysis 后，可使用下拉菜单的选项  来进行结果分析，所有的候选项如下图所示：



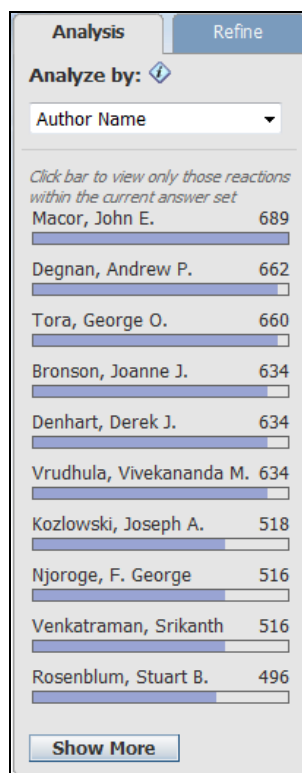
选择	定义
Author Name	以文摘作者姓名作分析
Catalyst	以催化剂作分析
Company/Organization	以公司/团体名称作分析
Document Type	以文献类型作分析
Experimental Procedure	以是否包含反应过程作分析
Journal Name	以期刊名称作分析
Language	以原文的语言作分析
Number of Steps	以反应步骤数目作分析
Product Yield	以产率作分析
Publication Year	以文摘出版年份作分析
Solvent	以溶剂作分析

右边表格列出是每一个选项的作用。

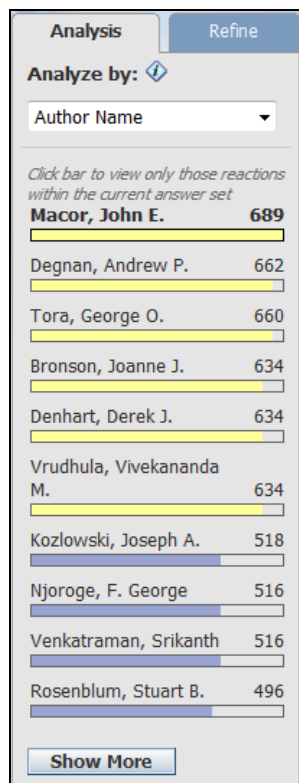
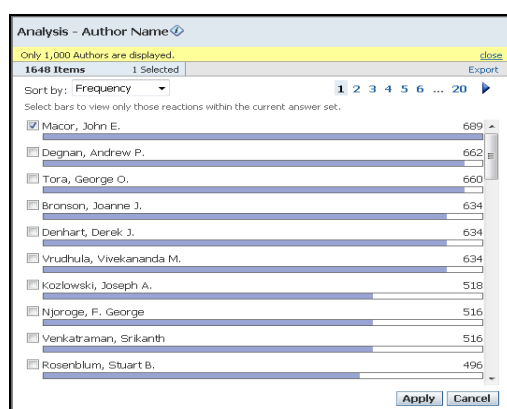
用户可以分析所有结果或部分答案。若只分析某一部分反应，要在检索结果的窗口，点击想要分析的反应旁的方框，然后选择 Tools 工具下的 Keep Selected，再进行分析即可。

4. 4. 1 作者名分析 (Author Name)

分析反应的作者，选取 Analysis 中的 Author Name 选项，分析结果就会用柱状图显示在下方。



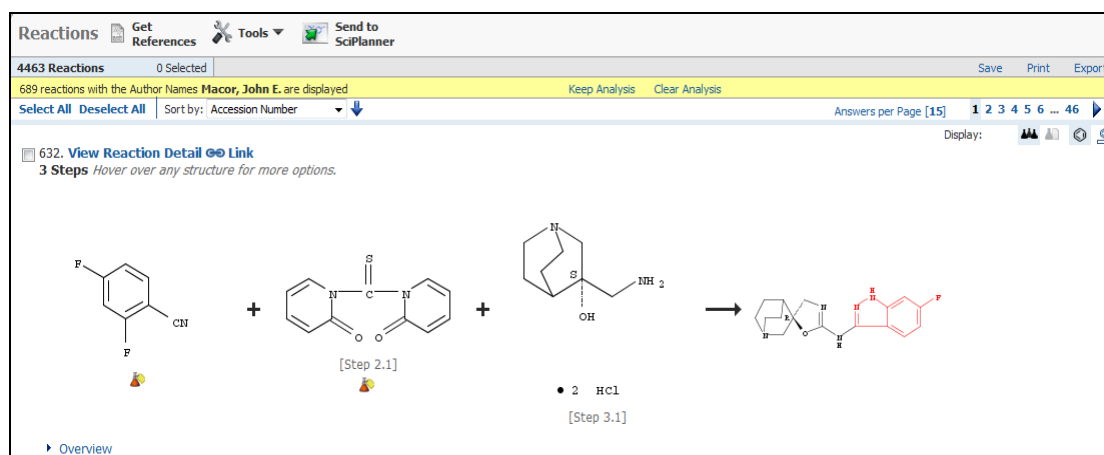
可以查看到这些反应的作者，选择感兴趣的人物，这里选择 Macor, John E. 点击直方条或者其对应的作者的人名来选择。也可以点击 **Show More** 来查看所有的作者，如下图，这里可以多选，勾选后点击 **Apply**。



选择感兴趣的作者后(Macor, John E.), 感兴趣的内容已经用黄色所显现出来，同时也显现出同时包含多个不同作者的信息，可以继续点击感兴趣的内容查看。

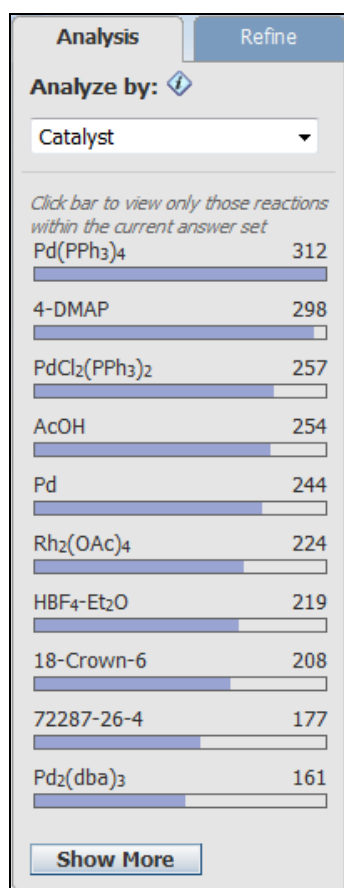
同时反应界面也出现相应的变化，如下图。

在反应记录数下方出现了黄色的状态栏，表示目前选择了何种分析结果，可以点击 Keep Analysis 来获取当前分析结果，也可以通过点击 Clear Analysis 来清除当前的选择。

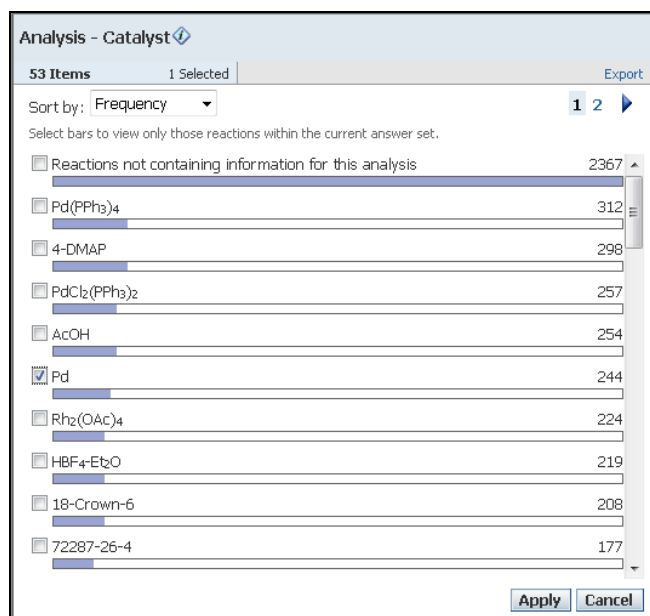


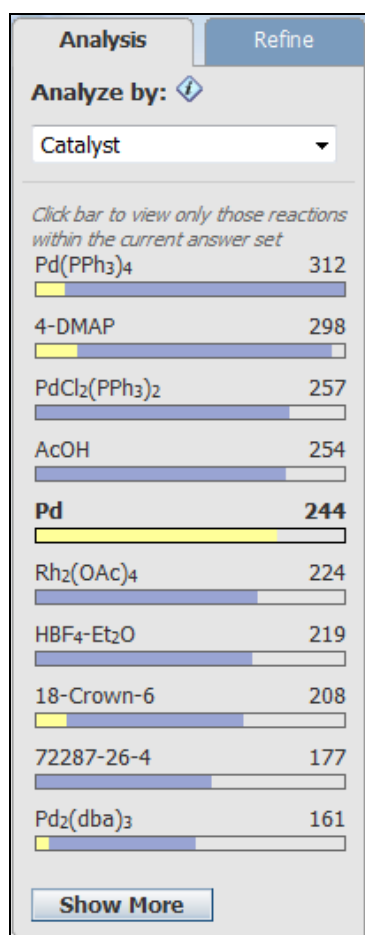
4.4.2 催化剂分析 (Catalyst)

分析反应中的催化剂，选取 Analysis 中的 Catalyst 选项，分析结果就会以柱状图显示在下方。



可以查看到这些反应中所用的催化剂，选择感兴趣的催化剂，这里选择 Pd 点击直方条或者其对应的催化剂名来选择。也可以点击 **Show More** 来查看所有的催化剂，如下图，这里可以多选，勾选后点击 **Apply**。

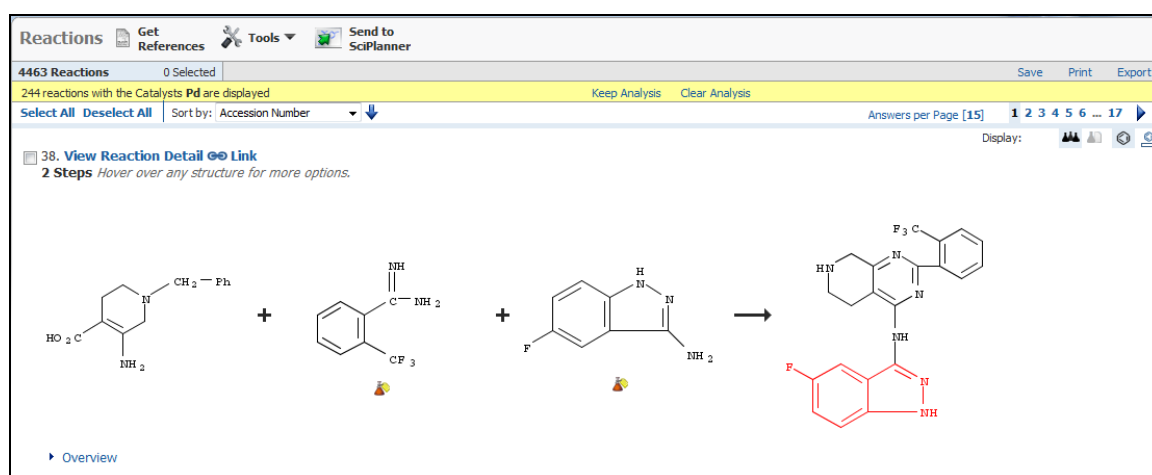




选择感兴趣的催化剂后，感兴趣的内容已经用黄色所显现出来，同时也显现出同时包含两个不同催化剂的信息，可以继续点击感兴趣的内容查看。

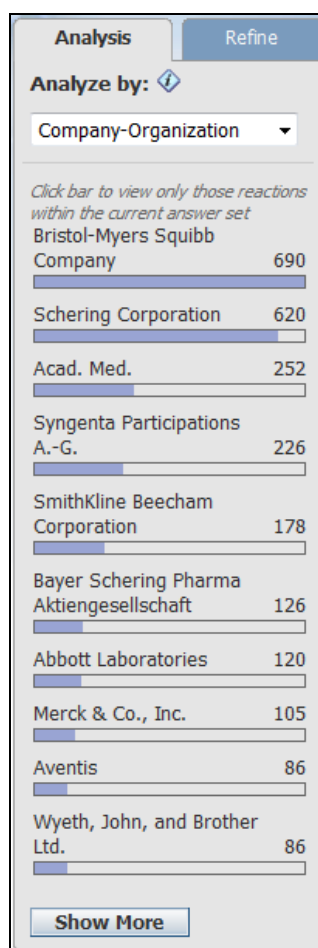
同时反应界面也出现相应的变化，如下图。

在反应记录数下方出现了黄色的状态栏，表示目前选择了何种分析结果，可以点击 Keep Analysis 来保留当前分析结果，也可以通过点击 Clear Analysis 来清除当前的选择。

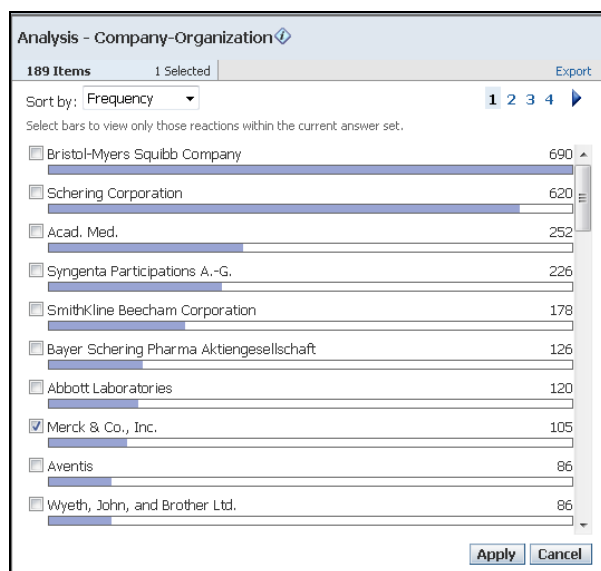


4.4.3 公司和组织机构名分析 (Company/Organization)

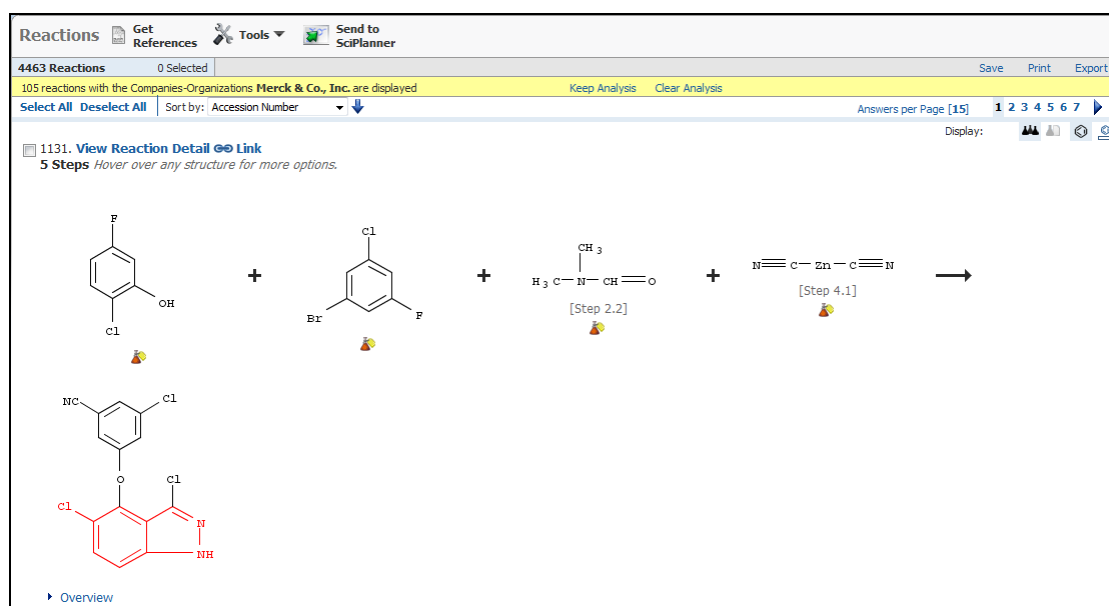
分析反应的公司和组织机构名，选取 Analysis 中的 Company/Organization 选项，分析结果就会以柱状图显示在下方。



可以查看到这些反应都源自哪些机构，选择感兴趣的机构，这里选择 Merck & Co., Inc 点击直方条或者其对应的机构名来选择。也可以点击 **Show More** 来查看所有的机构名，如下图，这里可以多选，勾选后点击 **Apply**。

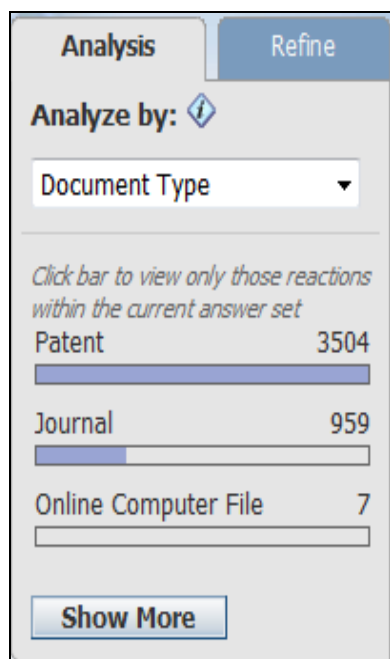


在反应记录数下方出现黄色的状态栏，表示目前选择了何种分析结果，可以点击 **Keep Analysis** 来保留当前分析结果，也可以通过点击 **Clear Analysis** 来清除当前的选择。



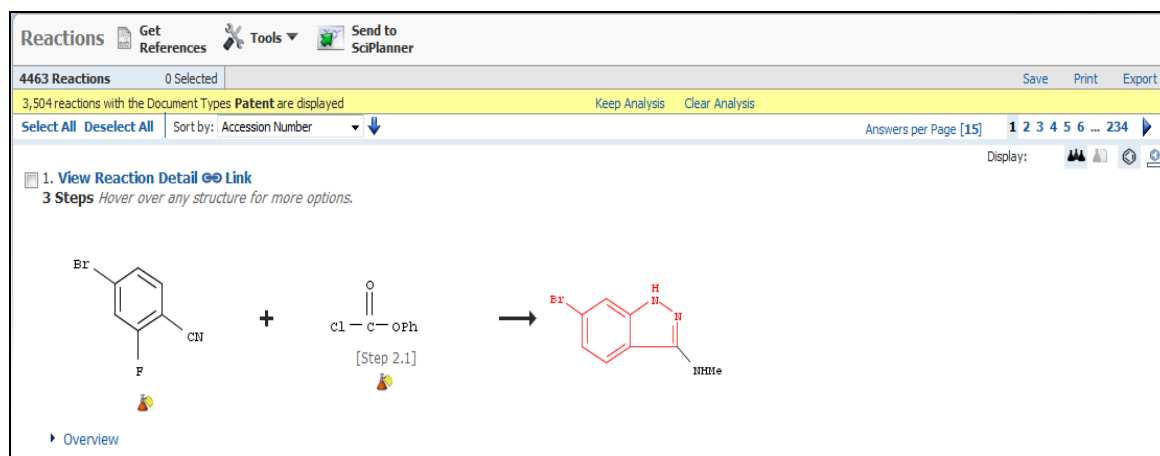
4.4.4 反应文献类型分析 (Document Type)

分析反应的来源，选取 Analysis 中的 Document Type 选项，分析结果就会以柱状图显示在下方。



可以查看到这些反应都源自何种文献类型，选择感兴趣的类型，这里选择 Patent，点击直方条或者其对应的英文来选择。也可以点击 **Show More** 来查看所有的类型，可以使用多选，勾选后点击 **Apply**。选择 Patent 后，反应界面也出现相应的变化，如下图。

在反应记录数下方出现了黄色的状态栏，表示目前选择了何种分析结果，可以点击 Keep Analysis 来保留当前分析结果，也可以通过点击 Clear Analysis 来清除当前的选择。



4.4.5 反应过程分析 (Experimental Procedure)

分析反应过程，选取 Analysis 中的 Experimental Procedure 选项，分析结果就会以柱状图显示在下方。

Analysis Refine

Analyze by:

Experimental Procedure

Click bar to view only those reactions within the current answer set

Experimental Procedures Available 3270

Experimental Procedures Not Available 1193

Show More

可以查看到这些反应记录哪些包含反应过程，可以优先选择包含反应过程的记录，这里选择 **Experimental Procedures Available**, 点击直方条或者其对应的名称来选择。

在反应记录数下方出现了黄色的状态栏，表示目前选择了何种分析结果，可以点击 Keep Analysis 来保留当前分析结果，也可以通过点击 Clear Analysis 来清除当前的选择。

Reactions Get References Tools Send to SciPlanner

4463 Reactions 0 Selected Save Print Export

3,270 reactions with the Experimental Procedure Experimental Procedures Available are displayed Keep Analysis Clear Analysis

Select All Deselect All Sort by: Accession Number

Answers per Page [15] 1 2 3 4 5 6 ... 218

Display:

52. View Reaction Detail Link

2 Steps Hover over any structure for more options.

Overview

Experimental Procedure

Analysis Refine

Analyze by:

Experimental Procedure

Click bar to view only those reactions within the current answer set

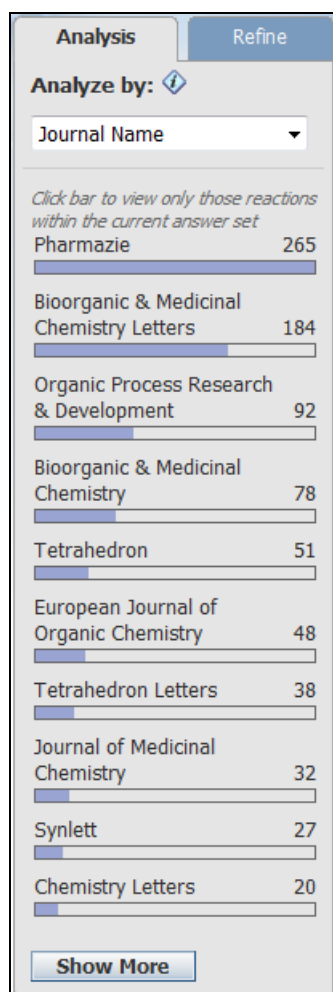
Experimental Procedures Available 3270

Experimental Procedures Not Available 1193

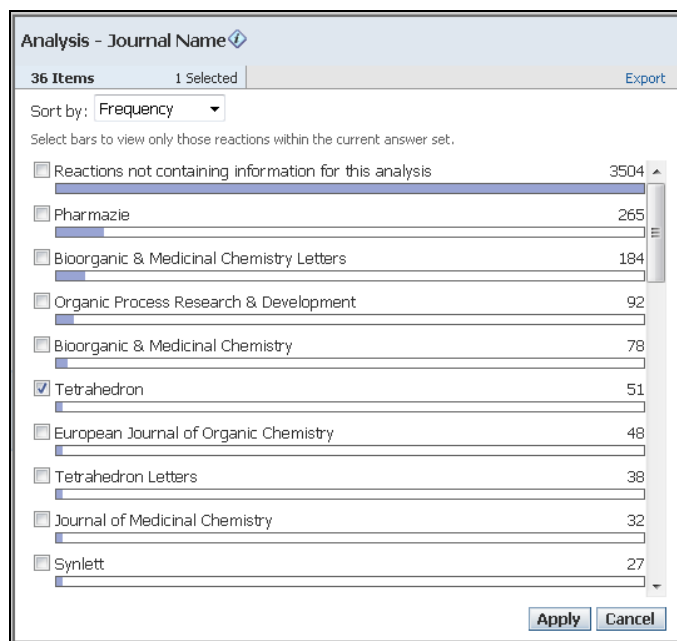
Show More

4.4.6 期刊名分析 (Journal Name)

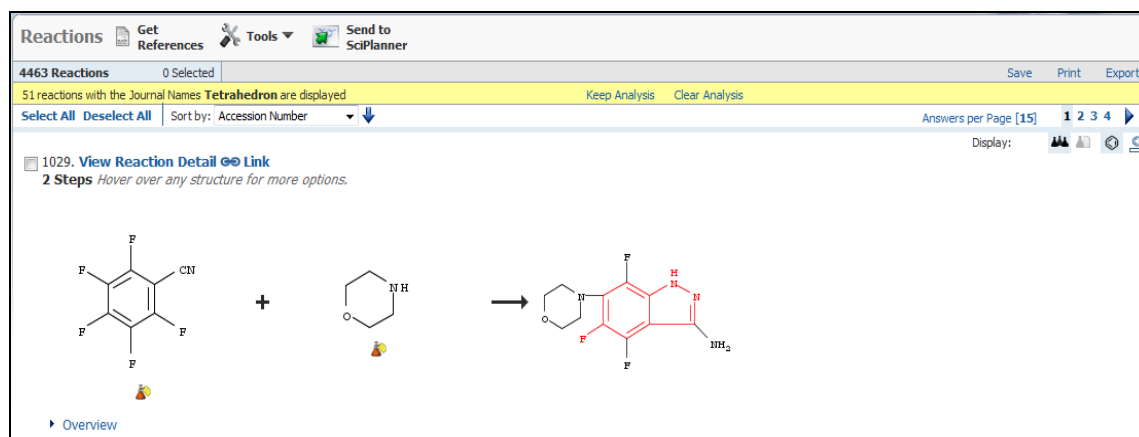
分析反应，选取 Analysis 中的 Journal Name 选项，分析结果就会用柱状图显示在下方。



可以查看到这些反应都源自哪些期刊，选择感兴趣的期刊，这里选择 **Tetrahedron**，点击直方条或者其对应的期刊名来选择。也可以点击 **Show More** 来查看所有的期刊，如下图，这里可以多选，勾选后点击 **Apply**。

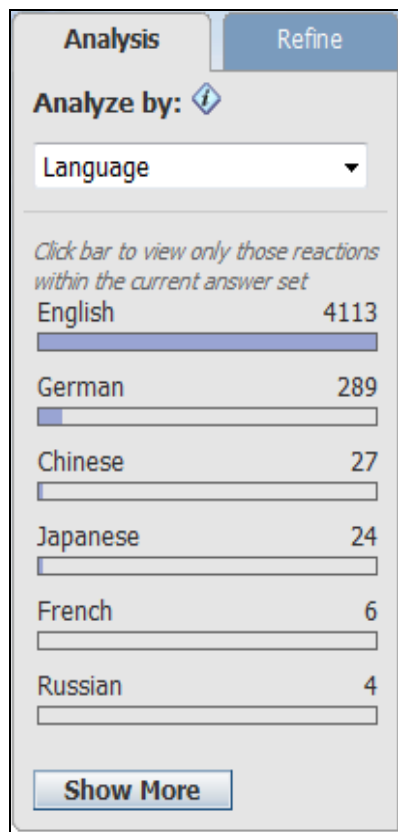


在反应记录数下方出现了黄色的状态栏，表示目前选择了何种分析结果，可以点击 **Keep Analysis** 来保留当前分析结果，也可以通过点击 **Clear Analysis** 来清除当前的选择。

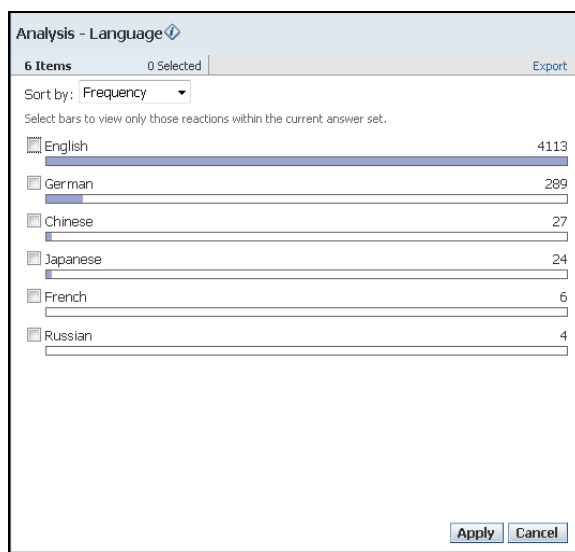


4.4.7 语种分析 (Language)

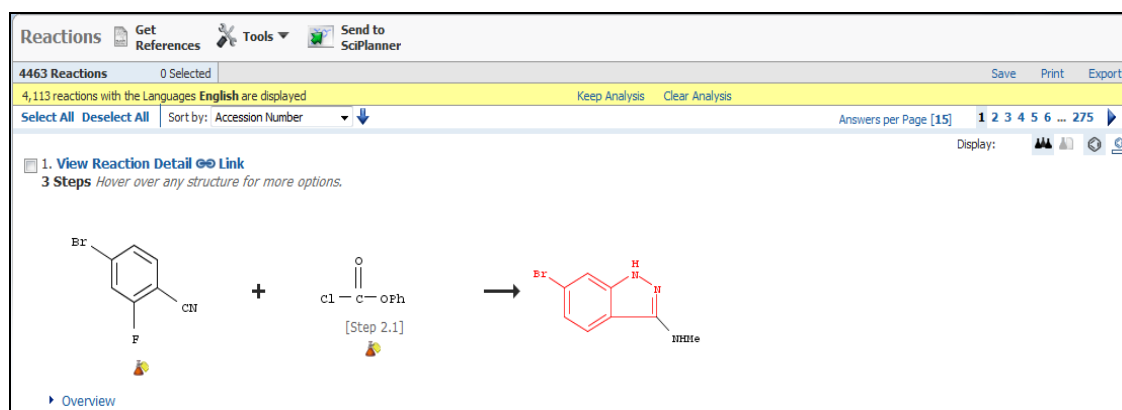
分析反应来源文献的语种，选取 Analysis 中的 Language 选项，分析结果就会用柱状图显示在下方。



可以查看到这些反应都源自文献的语种，选择感兴趣的语种，这里选择 English, 点击直方条或者其对应的语种来选择。也可以点击 **Show More** 来查看所有的语言，如下图，这里可以多选，勾选后点击 **Apply**。

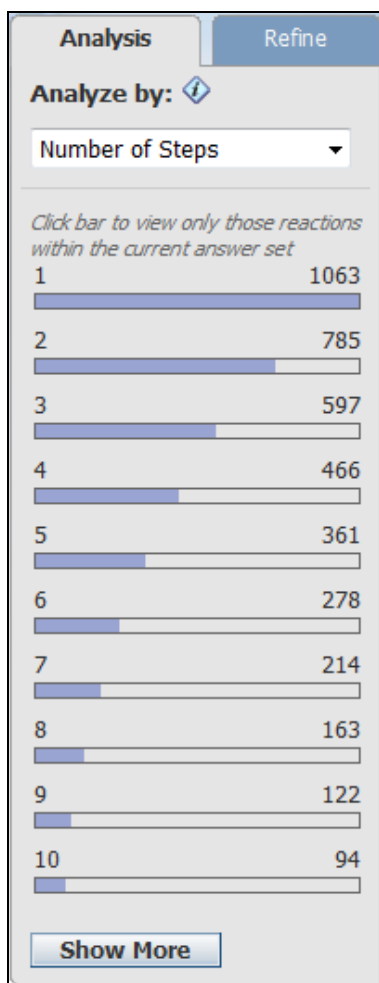


在反应记录数下方出现了黄色的状态栏，表示目前选择了何种分析结果，可以点击 Keep Analysis 来保留当前分析结果，也可以通过点击 Clear Analysis 来清除当前的选择。



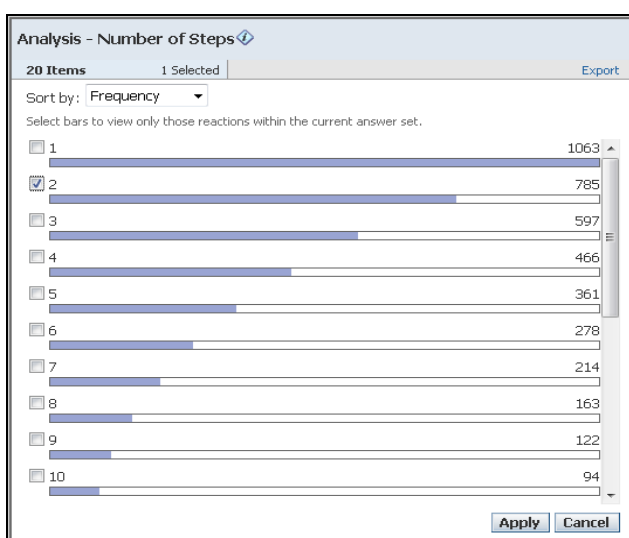
4.4.8 反应步骤分析 (Number of Steps)

分析反应步数，选取 Analysis 中的 Number of Steps 选项，分析结果就会用柱状图显示在下方。

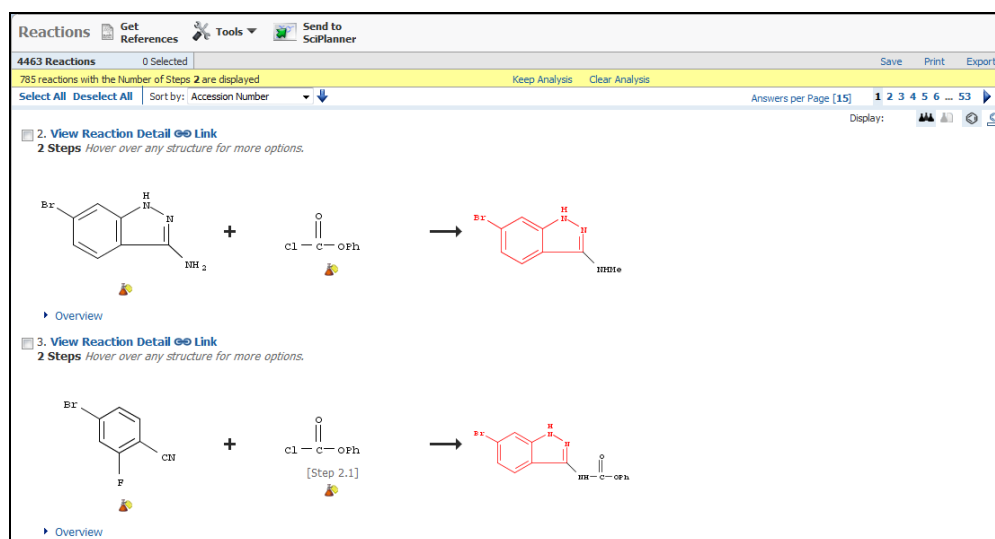


可以查看到这些反应的反应步数，选择确定的步数，这里选择两步反应，点击直方条或者其对应的数值来选择。

也可以点击 **Show More** 来查看不同反应步骤的期刊，如下图，这里可以多选，勾选后点击 **Apply**。

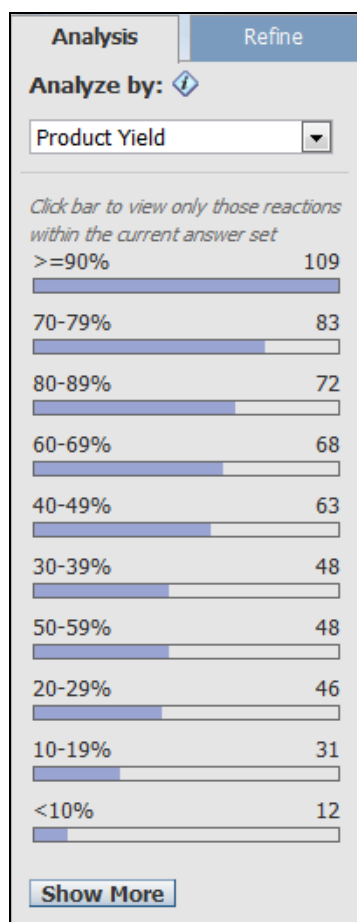


在反应记录数下方出现了黄色的状态栏，表示目前选择了何种分析结果，可以点击 Keep Analysis 来保留当前分析结果，也可以通过点击 Clear Analysis 来清除当前的选择。



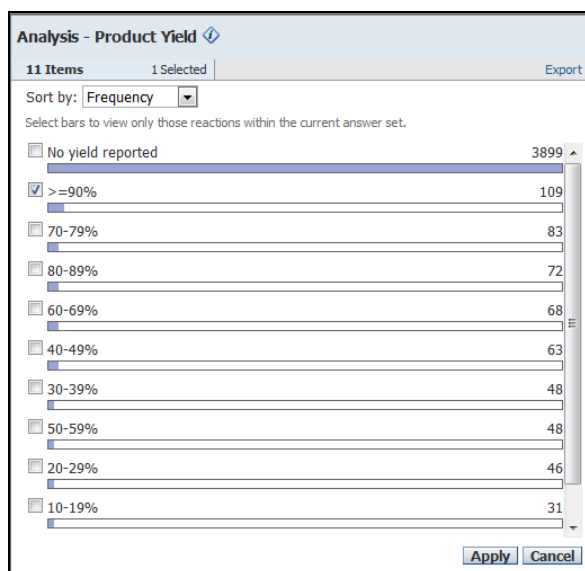
4.4.9 反应产率分析 (Product Yield)

分析反应产率, 选取 Analysis 中的 Product Yield 选项, 分析结果就会用柱状图显示在下方。

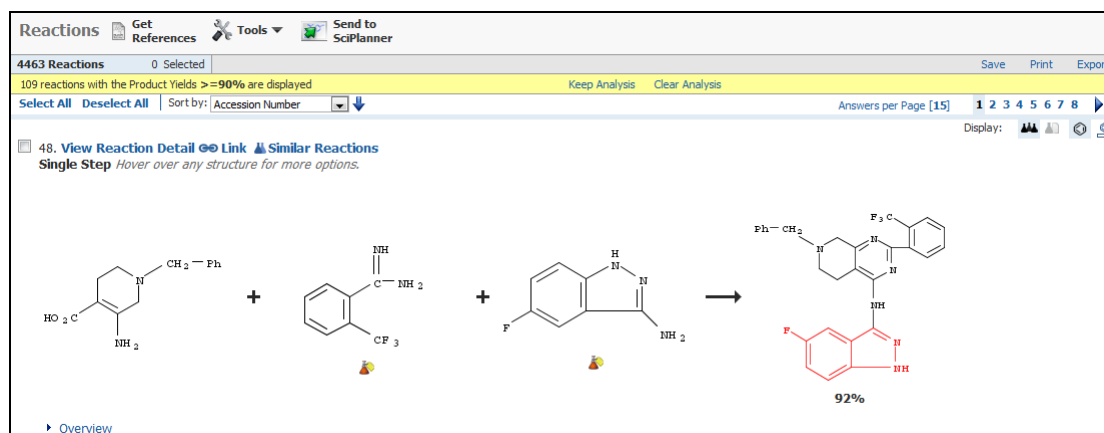


可以查看到这些反应的反应产率, 选择想要的产率范围, 这里选择 >=90% 的区域, 点击直方条或者其对应的数值来选择。

也可以点击 **Show More** 来查看各区间反应收率的期刊, 如下图, 这里可以多选, 勾选后点击 **Apply**。

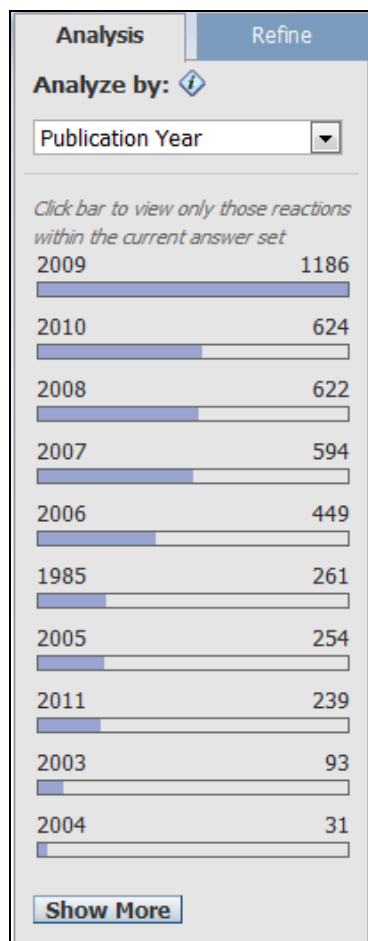


在反应记录数下方出现了黄色的状态栏, 表示目前选择了何种分析结果, 可以点击 Keep Analysis 来保留当前分析结果, 也可以通过点击 Clear Analysis 来清除当前的选择。

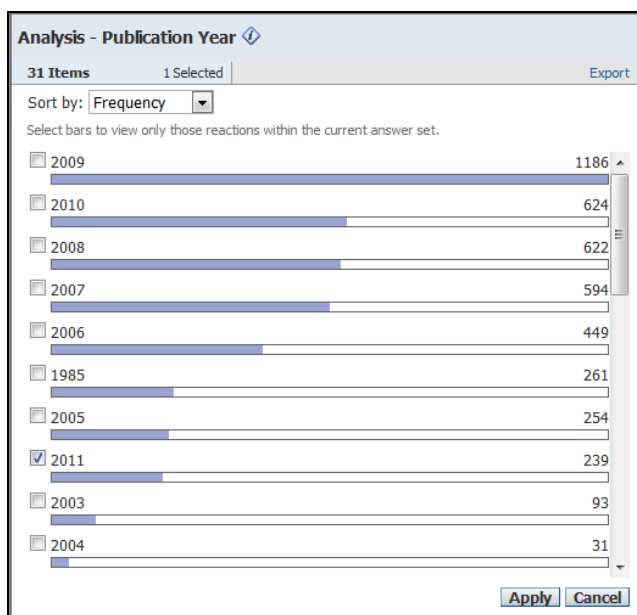


4.4.10 出版年限分析 (Publication Year)

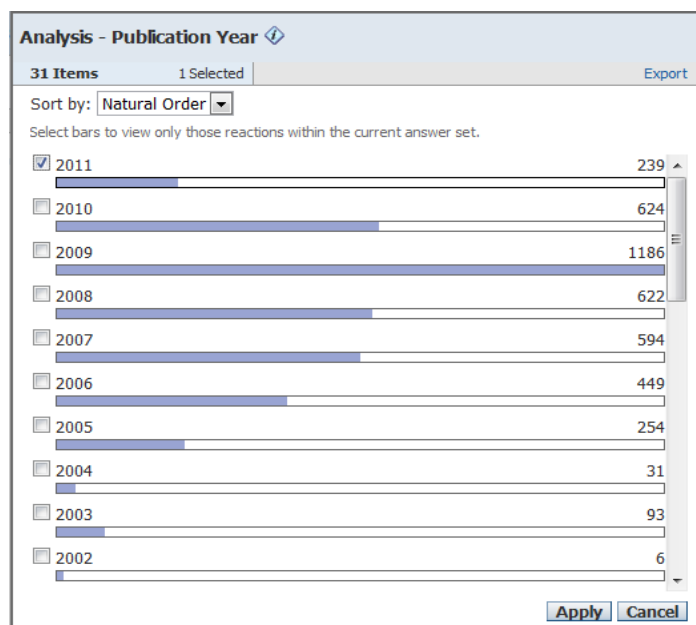
分析出版年限，选取 Analysis 中的 Publication Year 选项，分析结果就会用柱状图显示在下方。



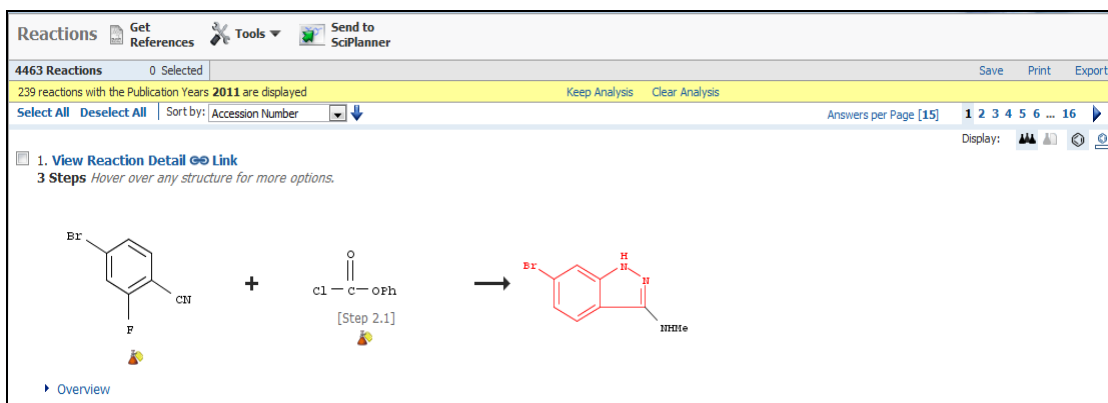
可以查看到这些反应的出版年限，选择想要的年份，这里选择 2011 年，点击直方条或者其对应的年份来选择。
也可以点击 **Show More** 来查看各个年份的期刊，如下图，这里可以多选，勾选后点击 **Apply**。



也可以点击“sort by”下的“natural order”按出版年限顺序排序，勾选后点击 Apply。

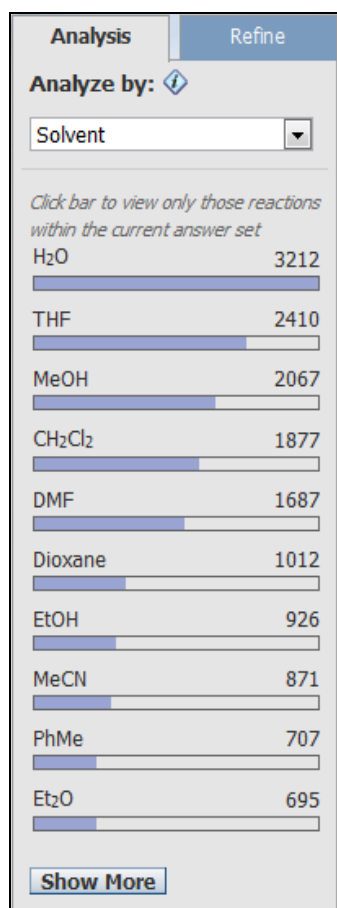


在反应记录数下方出现了黄色的状态栏，表示目前选择了何种分析结果，可以点击 Keep Analysis 来保留当前分析结果，也可以通过点击 Clear Analysis 来清除当前的选择。



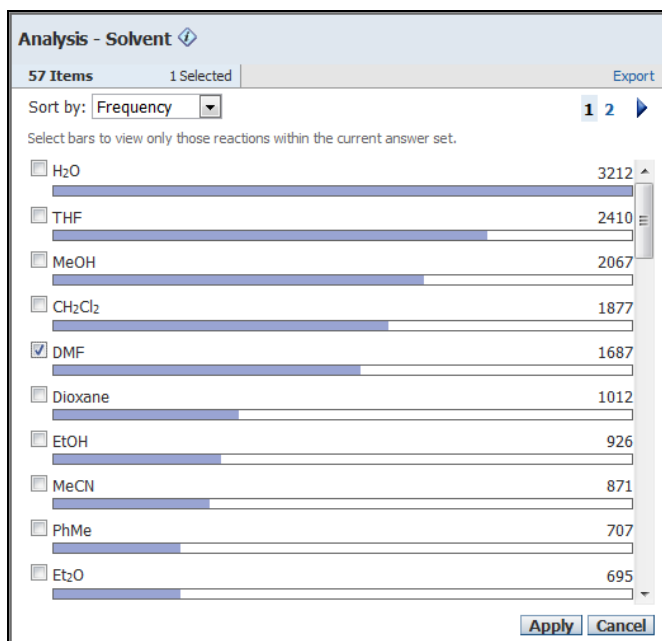
4.4.11 溶剂分析 (Solvent)

分析反应中的溶剂，选取 Analysis 中的 Solvent 选项，分析结果就会用柱状图显示在下方。



可以查看到这些反应中的溶剂，选择想要的溶剂，这里选择 DMF，点击直方条或者其对应的溶剂来选择。

也可以点击 **Show More** 来查看所有的溶剂，如下图，这里可以多选，勾选后点击 **Apply**。



Analysis Refine

Analyze by:

Solvent

Click bar to view only those reactions within the current answer set

H ₂ O	3212
THF	2410
MeOH	2067
CH ₂ Cl ₂	1877
DMF	1687
Dioxane	1012
EtOH	926
MeCN	871
PhMe	707
Et ₂ O	695

Show More

选择感兴趣的溶剂后，感兴趣的内容已经用黄色所显现出来，同时也显现出同时包含两个不同溶剂的信息，可以继续点选感兴趣的内容查看。

同时反应界面也出现相应的变化，如下图。

在反应记录数下方出现了黄色的状态栏，表示目前选择了何种分析结果，可以点击 Keep Analysis 来保留当前分析结果，也可以通过点击 Clear Analysis 来清除当前的选择。

Reactions

4463 Reactions 0 Selected Save Print Export

1,687 reactions with the Solvents DMF are displayed Keep Analysis Clear Analysis

Select All Deselect All Sort by: Accession Number Answers per Page [15] 1 2 3 4 5 6 ... 113

Display:

4. View Reaction Detail Link

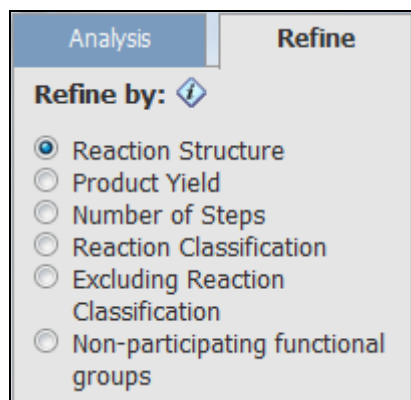
2 Steps Hover over any structure for more options.

Overview

4.5 反应结果限定 (Refine)



要限定结果，点击页面右侧的  图像，默认停留在 Analysis 上，当点击 Refine 后，会自动切换到限定工具，可采用下列方式进行结果的限定。




下表是每一个选项的作用。

选项	作用
Reaction Structure	限定反应化学结构
Product Yield	限定反应产率
Number of Steps	限定反应步数
Reaction Classification	限定反应类型
Excluding Reaction Classification	排除反应类型
Non-participating functional groups	排除不参与反应的官能团

用户可以限定所有结果或部分答案，若只限定某一部分反应，要在检索结果的窗口，点击想要限定的反应旁的方框，然后选择上面的 Keep Selected 选择需要限定的物质(具体可以参加本章的保留反应部分)，再进行限定即可。

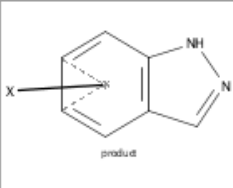
4.5.1 限定反应化学结构 (Refine Reaction Structure)

Analysis **Refine**

Refine by: 

- Reaction Structure
- Product Yield
- Number of Steps
- Reaction Classification
- Excluding Reaction Classification
- Non-participating functional groups

Reaction Structure:




Click image to change structure or view detail
Search type: **Substructure**

Refine

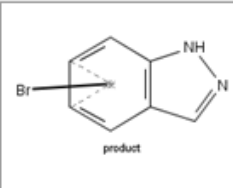
默认状态是停留在 Reaction Structure 上，可以点击 Reaction Structure 进行结构修改，如想在限制卤 (X) 只是溴 (Br)，可点击原子菜单工具中的溴。再将鼠标点击到结构图标窗口的卤 (X) 上，卤 (X) 即转变为溴 (Br)，具体结构绘制方法可以参考第三章。然后点击确定，可以看到在绘图工具中出现修改好的结构。如下图所示：

Analysis **Refine**

Refine by: 

- Reaction Structure
- Product Yield
- Number of Steps
- Reaction Classification
- Excluding Reaction Classification
- Non-participating functional groups

Reaction Structure:



Click image to change structure or view detail
Search type: **Substructure**

Refine

可以看到修改好的结构，点击 Refine 进行限定

4.5.2 限定反应产率 (Product Yield)

Analysis Refine

Refine by: ⓘ

Reaction Structure

Product Yield

Number of Steps

Reaction Classification

Excluding Reaction Classification

Non-participating functional groups

Product Yield:

%
Upper Limit
Example: 80

%
Lower Limit
Example: 20

Include answers that have no product yield

Refine

1. 在 Refine By 下点选 Product Yield 可以进行反应产率的限定。
2. Product Yield 的两个选项中输入最高和最低的产率范围。
3. 因有些反应没有产率资料提供，用户可点选 Include reactions that do not have yield data，将有关的反应包括在结果内。再按下 Refine 取得结果。

4.5.3 限定反应步骤 (Number of steps)

Analysis Refine

Refine by: ⓘ

Reaction Structure

Product Yield

Number of Steps

Reaction Classification

Excluding Reaction Classification

Non-participating functional groups

Number of Steps:

Examples: 1, 1-3, 1-3

Refine

1. 在 Refine By 下点选 Number of Steps 可以进行反应步骤的限定。
2. 输入想限制的步骤数目或范围，点击 Refine，结果将会显示。

4.5.4 限定反应类型 (Reaction of Classification)

Analysis Refine

Refine by:

- Reaction Structure
- Product Yield
- Number of Steps
- Reaction Classification
- Excluding Reaction Classification
- Non-participating functional groups

Reaction Classification(s):

- Biotransformation
- Catalyzed
- Chemoselective
- Combinatorial
- Electrochemical
- Gas-phase
- Non-catalyzed
- Photochemical
- Radiochemical
- Regioselective
- Stereoselective

Refine

1. 在 Refine By 下点选 Reaction Classification 可以进行反应类型的限定。
2. SciFinder 能让用户简便地将反应分类，只选出相关的反应查看。反应分类有：生物转化、催化、化学选择、组合、电气化学、气相、立体化学等。可选择一个或以上的分类。
3. 点击 Refine，得到结果。

4.5.5 排除反应类型 (Excluding Reaction Classification)

Analysis Refine

Refine by:

- Reaction Structure
- Product Yield
- Number of Steps
- Reaction Classification
- Excluding Reaction Classification
- Non-participating functional groups

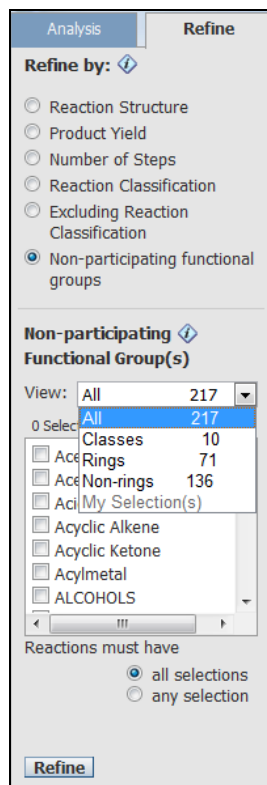
Excluding Reaction Classification(s):

- Biotransformation
- Catalyzed
- Chemoselective
- Combinatorial
- Electrochemical
- Gas-phase
- Non-catalyzed
- Photochemical
- Radiochemical
- Regioselective
- Stereoselective

Refine

1. 在 Refine By 下点选 Excluding Reaction Classification 可以进行排除反应类型的限定。
2. SciFinder 能让用户简便地将反应分类，排除相关的反应查看。反应分类有：生物转化、催化、组合、电气化学、气相、立体化学等。可选择一个或以上的分类。
3. 点击 Refine，得到结果。

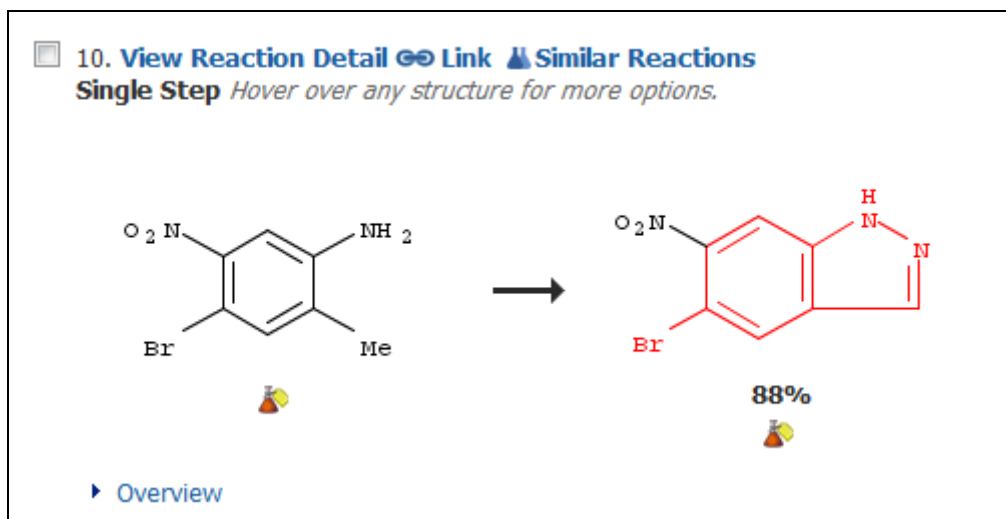
4.5.6 排除不参与反应的官能团 (Non-participation functional groups)




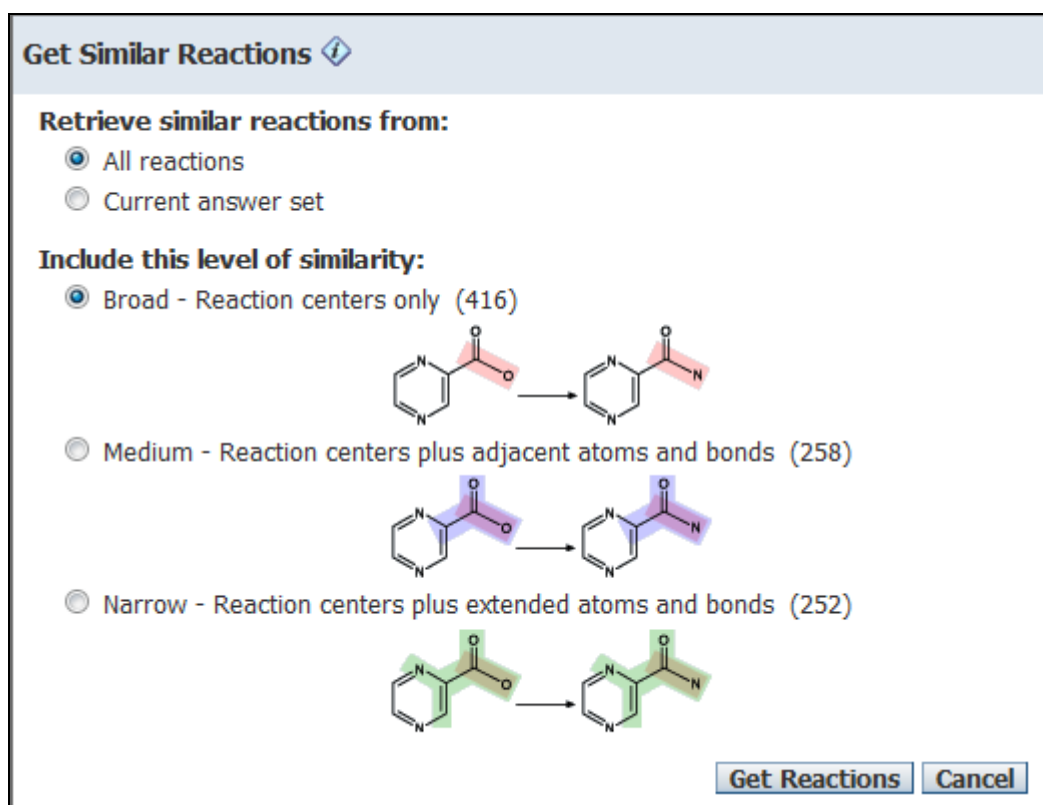
1. 在 Refine By 下点选 Non-participating functional groups 可以排出不参与反应的官能团的限定。
2. SciFinder 能让用户简便地将不参与反应的官能团排除在外，例如乙酰基、酰卤、醛等，也可以点击“view”的下拉菜单，按照“classes、Rings、no-rings”来选择要排除的官能团类型。
3. 点击 Refine，得到结果。

4.6 相似反应检索 (similar Reactions)

相似反应检索，依据和反应中心的相似程度，查询反应中心彼此相似的反应。



对于上图中这样的单步反应，可以点击反应记录最右边的  图标，获取更多的类似的反应。



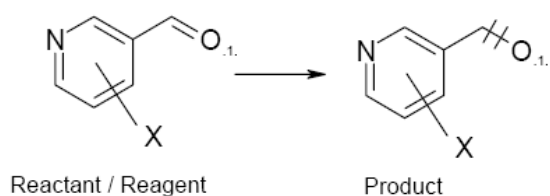
注意可以在 Retrieve similar reactions from 下选择是全部反应中检索相似反应，还是在当前结果集中检索相似反应。

其中 Broad: 仅反应中心相似; Medium: 反应中心及附属原子和键; Narrow: 反应中心及扩展的原子和键, 可以依据需求选择。

4.7 指定反应物/试剂和产物的化学反应 (Define the Reactant/Reagent and Product)

检索举例:

反应位置以双重线显示

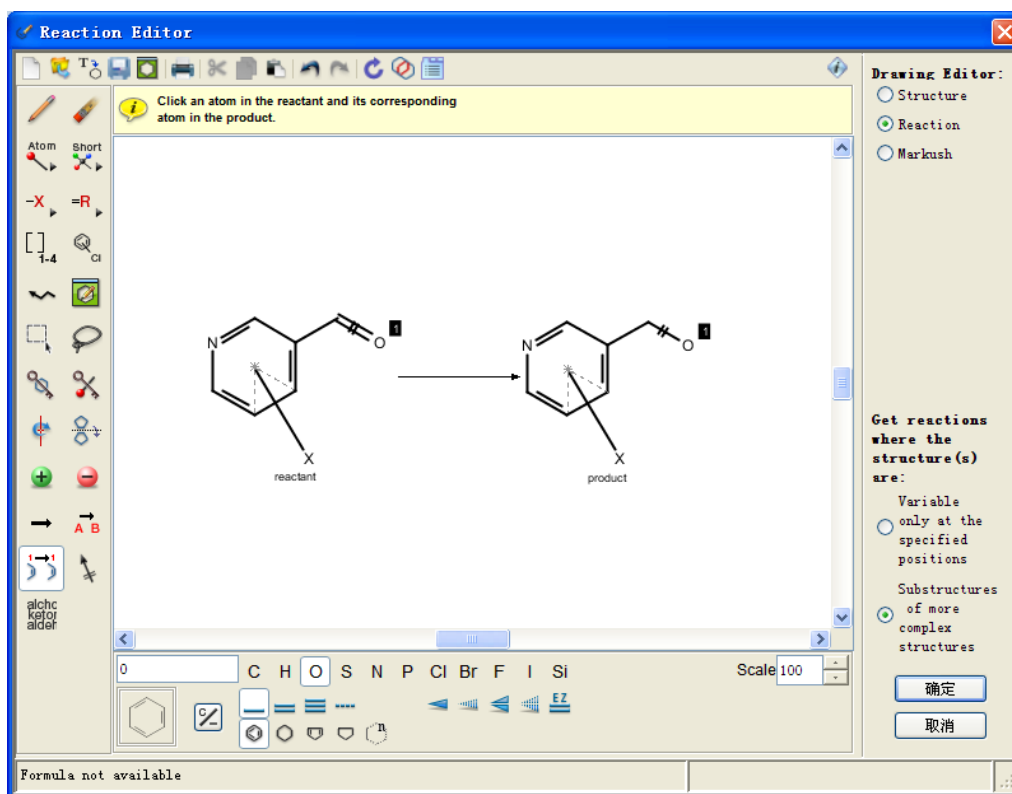


- 氮原子不能有取代
- 苯环至少连一个卤原子
- 不能有环取代
- C-O 键是反应位置
- 在反应物和产物的氧原子必需配对

绘制方法:

- 使用苯环工具绘制苯环
- 在原子工具板中选择氮原子, 点击要取代的位点, 碳原子将被氮取代。
- 点击 X 菜单工具 (选择 X: Any halogen 任何卤原子), 在环结构以外的地方点击。
- 点击可变的取代位置工具, 点击及拖曳 X 取代基至取代位置。

- 用链工具在苯环画上两个碳原子的链。在末端加上双键。
- 在原子工具板中选择氧原子，点击链的末端位点，碳原子将被氧取代。
- 用原子锁定工具禁止氮原子取代。
- 用环锁定工具，锁定苯环和链的环取代。
- 点击箭头工具图标来绘制反应箭头。在加上箭头的位置后，反应角色会自动地被指定。
- 点击反应原子标记工具的图标，将鼠标尖端先点击在反应物的氧原子，然后，点击在产物的氧原子，便能指定配对位置为 数 1。
- 最后，选择反应位置标记工具图标，点击 C-O 键反应位置。




在绘制结构之后，选择 Substructure of more complex structure (检索为复杂结构中的亚结构)，点击确定。

SciFinder 的检索结果如下。查看反应式、文摘、使用 Analysis/Refine 的方法和之前介绍的一样。用户也可以使用 Save, Export, Print 的方式输出结果。

The screenshot displays the SciFinder Reactions interface. The main window shows a reaction scheme with several starting materials and reagents, including a substituted furan, benzyl chloride, aniline, and a substituted benzyl chloride. The reaction proceeds through several steps, with the final product being a substituted benzene ring. The interface includes a toolbar with options like 'Get References', 'Tools', and 'Send to SciPlanner'. A sidebar on the right, titled 'Analysis/Refine', provides a list of catalysts and their corresponding counts, such as Pd(PPh₃)₄ (84), Pd (29), 4-DMAP (19), CuI (19), 72287-26-4 (9), H₂O (8), 18-Crown-6 (7), Pd(OH)₂ (7), DMF (5), and (Ph₃P)₂-ferrocene (2). A 'Show More' button is located at the bottom of the sidebar.

4.8 官能团检索反应 (Search by functional group)

SciFinder 可让用户使用官能团检索反应。用户可用官能团检索去查询相关官能团的反应的催化剂及反应条件，也可用来限制反应结果，详情可参考 Analysis/Refine 部份部分。

点击  官能团工具图标时，官能团的对话框将会出现。

The screenshot shows the 'Functional Groups' dialog box. It contains a list of functional groups on the left, including Alcohols, Aldehydes, Ketones, and others. The 'ALCOHOLS' group is currently selected. On the right, a description of the 'ALCOHOLS' class is displayed, listing various sub-classes such as Allyl Alcohol, Cyanohydrin, and Phenol. At the bottom, there are radio buttons for 'Terms displayed', with 'All' selected. A 'Close' button is located at the bottom center of the dialog box.

有四种不同显示形式可供选择：

- 1) 默认设定是显示所有官能团 (All), 所有官能团分类和官能团都会以英文字母顺序排列。
- 2) 主要官能团分类 (Class terms) 显示官能团的大分类。用户可点选官能团分类的名称 (如图示选择酒精), 便可选择其下的小分类。
- 3) 检索有环的官能团, 请点击 Rings。选择了有环的官能团后, 其结构便会在右边显示。如 1,2 C₄NS 官能团, 可用在以官能团检索反应中。
- 4) 检索没有环的官能团, 请点击 Non-Rings。选好之后, 其结构便会在右边显示。

用户可直接点选官能团名称或输入名称, 官能团的结构便会在右边显示。选好官能团后, 点击 Close 回到绘制结构图标窗口。用鼠标点击窗口, 加入已选的官能团名称。

	化学分类	包括在内的官能团
醇	ALCOHOLS	Allyl Alcohol, Cyanohydrin, Cyclic Alcohol, Enol, Glycol, Halohydrin, Hemiacetal, Hydroxylamine, Phenol, Primary Alcohol, Secondary Alcohol, Tertiary Alcohol
烯	ALKENES	Acyclic Alkene, Allene, Allyl Alcohol, Allyl Halide, Cyclic Alkene, Diene, Enamine, Ketene, Ketenimine, Vinyl Halide
炔	ALKYNES	pi-Alkyne, Alkyne, Enyne
胺	AMINES	Amine Oxide, Aziridine, Chloramine, Cyanamide, Enamine, Hydroxylamine, Imine, Primary Amine, Secondary Amine, Tertiary Amine
碳酸酯	CARBONATE DERIVATIVES	Carbamate, Carbonate, Guanidine, Haloformate, Thiourea, Urea
羧基	CARBOXY DERIVATIVES	Acid Halide, Amide, Amidine, Anhydride, Carboxylate Ester, Carboxylic Acid, Haloformate, Imide, Lactam, Lactone, Peroxy Acid, Peroxy Ester, Thioamide, Thiocarboxy, Unsaturated Acid, Unsaturated Ester
卤化物	HALIDES	Acid Halide, Alkyl Halide, Allyl Halide, Aryl Halide, Chloramine, gem-Dihalide, vic-Dihalide, Haloformate, Halohydrin, Metal Halide, Sulfenyl Halide, Sufinyl Halide, Sulfonyl Halide, Trihalide, Vinyl Halide
杂环	HETEROCYCLES	Aziridine, Cephem, Episulfide, Epoxide, Penam, Purine, 1,2-C ₃ N ₂ , 1,2-C ₃ NO, 1,2-C ₃ NS, 1,2-C ₃ O ₂ , 1,2-C ₃ OS, 1,2-C ₃ S ₂ , 1,2-C ₄ N ₂ , 1,2-C ₄ NO, 1,2-C ₄ NS, 1,2-C ₄ O ₂ , 1,2-C ₄ OS, 1,2-C ₄ S ₂ , 1,3-C ₃ N ₂ , 1,3-C ₃ NO, 1,3-C ₃ NS, 1,3-C ₃ O ₂ , 1,3-C ₃ OS, 1,3-C ₃ S ₂ , 1,3-C ₄ N ₂ , 1,3-C ₄ NO, 1,3-C ₄ NS, 1,3-C ₄ O ₂ , 1,3-C ₄ OS, 1,3-C ₄ S ₂ , 1,4-C ₄ N ₂ , 1,4-C ₄ NO, 1,4-C ₄ NS, 1,4-C ₄ O ₂ , 1,4-C ₄ OS, 1,4-C ₄ S ₂ , 1,4-C ₅ N ₂ , C ₂ S, C ₃ N, C ₃ O, C ₃ S, C ₄ N, C ₄ O, C ₄ S, C ₅ N, C ₅ O, C ₅ S, C ₆ N, C ₆ O, C ₆ S
酮	KETONES	Acyclic Ketone, Cyclic Ketone, <i>o</i> -Quinone, <i>p</i> -Quinone, Unsaturated Ketone
有机金属	ORGANOMETALLICS	Acylmetal, pi-Alkene, pi-Alkyne, pi-Allyl, mu-Carbonyl, Metal Arene, Metal Carbene, Metal Carbonyl, Metal Cyclopentadienyl, Metal Halide, Metal Hydride, Metal-metal Bond, Metal Nitrogen, Metal Nitrosyl, Metal Phosphine, Metal Sulfur, Metallocarbycycle, Organometal

用绘制的官能团检索反应

在结构图标窗口中绘制好官能团后(可多于一个), 必须指定其在反应式中的角色。可用反应角色工具

用来指示角色。

用户可以用官能团和化学结构一起作检索（在以后部分说明）。

检索例子： 还原仲醇至酮，但伯醇在反应中没有被转化。

绘制方法：

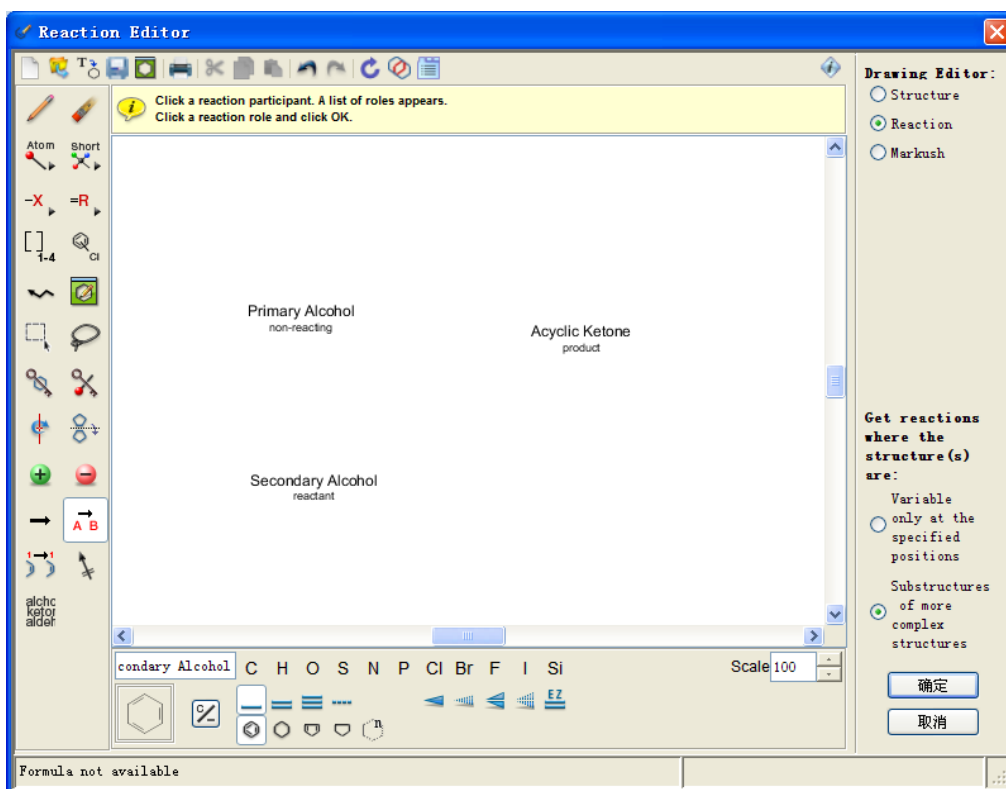
- 1) 点击官能团工具，官能团的对话框将会出现。
- 2) 拉下菜单，点击仲醇，仲醇的名字将会出现在右边。用鼠标点击窗口，加入仲醇。
- 3) 绘制酮和伯醇，都是用同一的方法。将酮画在仲醇的右方，伯醇画在仲醇的上方。
- 4) 点击箭头工具图标来绘制反应箭头，从仲醇至酮，反应角色会自动地被指定。
- 5) 点击反应角色工具图标，指定伯醇的角色为 Non-reacting 没有不参与反应。
- 6) 反应角色工具的可选角色：

Product	产物
Reactant	反应物
Reagent	试剂
Reactant or Reagent	反应物或试剂
Any role	任何角色
Non-reacting	不参与反应

以下是以官能团检索的一些限制

- 结构不能结合官能团
- 不能指定官能团中的离子
- 不能指定原子对应位置和反应位置
- 官能团不能旋转
- 最多只可绘制 253 个结点

绘制好后，如下图所示：



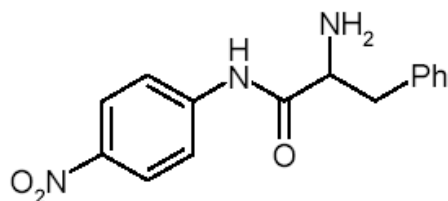
选择 Substructure of more complex structure (检索为复杂结构中的亚结构)，点击确定，如想限制检索范围，可以通过提供的过滤选项进行设定。

4.9 组和官能团和结构检索 (Search by combination of functional group and structure)

用户可组合官能团和结构一起作检索，只需在结构图标窗口上绘制功能基和化学结构，并指定其角色便可。

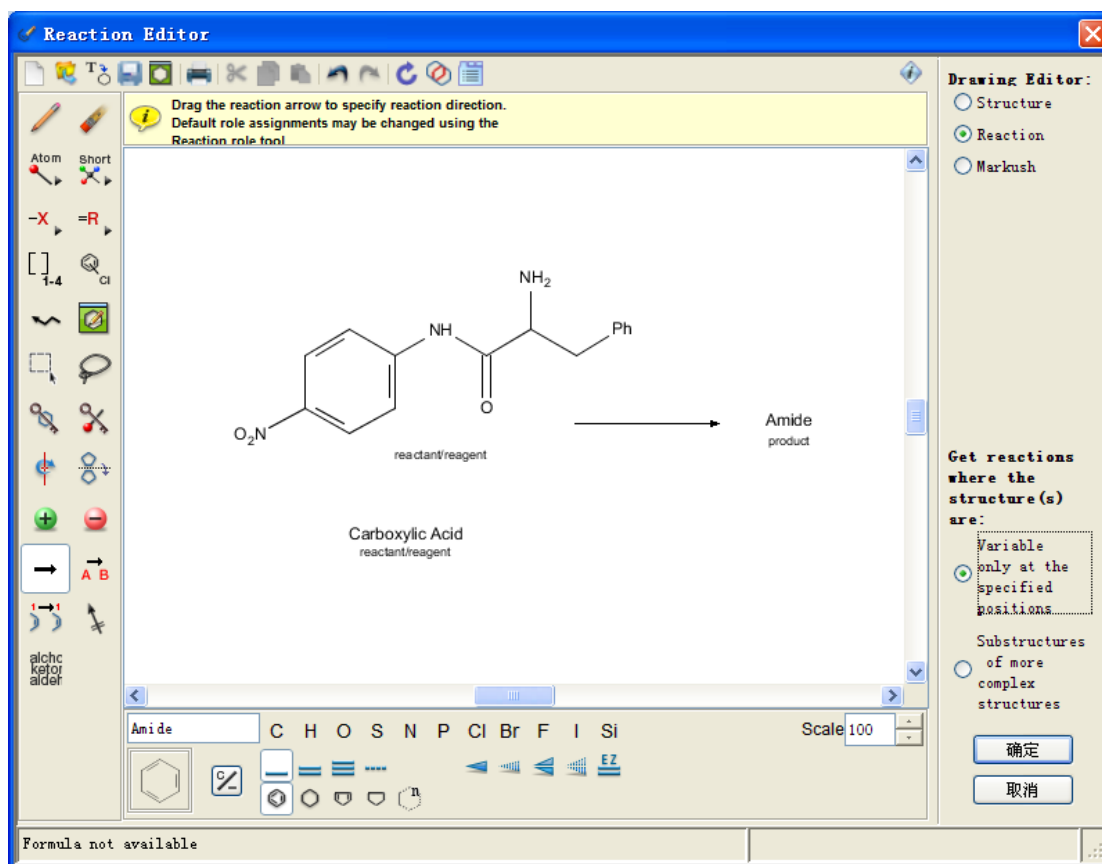
检索例子：

找出由以下物质和羧酸 (Carboxylic acid) 所合成的氨基化合物 (Amide)。



绘制方法：

- 1) 在绘制框里，绘制上述结构。
- 2) 点击官能团工具，选择羧酸，并加到结构图标窗口上的左下方。点击官能团工具，选择氨基化合物，并加到窗口上的右方。
- 3) 点击反应箭头工具，拖曳鼠标从羧酸到氨基化合物。反应角色将会被指定。如下图：



选择 Variable only at the specified position (只变化指定位置)，然后按下确定。

如想限制检索范围，可以通过提供的过滤选项进行设定，点击 Search。

General/Typical Procedure: General Procedure A (Amide Coupling) To a mixture of acid (1.05 equiv.), amine (1.00 equiv.), and HOBT (1.05 equiv.) in anhydrous CH₂Cl₂ (20 mL) was added Et₃N (1.5 equiv.), EDCl (1.05 equiv.) was added and stirred under nitrogen at rt overnight (16 h). Then water (15 mL) was added and stirred at rt for 5 min. The layers were separated and the aq. layer was extracted with CH₂Cl₂ (2x15 mL). The combined organic layers were washed successively with water (15 mL), brine (15 mL) and dried (Na₂SO₄). After filtration the solvent was removed in a rotary evaporator and dried in vacuo to obtain the expected product.

Analysis	
Refine	
Analyze by: Catalyst	
Catalyst	
Click bar to view only those reactions within the current answer set	
Pd(OAc) ₂	36
CuI	20
PdCl ₂	20
Subtilisin	13
Pd	4
Me(CH ₂) ₁₁ OSO ₃ ⁻ Na ⁺	2
Cu(CF ₃ SO ₂) ₂	1
Show More	

如有太多的结果，可用 Analyze/Refine 的功能分析和细化来缩小结果数目。

可以点击每条反应记录下的 Overview 和 Experimental Procedure 查看详细的反应条件和实验过程。

4.10 SciPlanner

- SciPlanner 是 SciFinder web 中推出的一项特色功能；
- 是一个便捷的记录本，可以随时记录 SciFinder 检索过程中感兴趣的文献、物质、反应；
- 可以辅助进行物质的逆合成分析，创建出能共享的反应路线报告。

举例：氟康唑合成路线设计

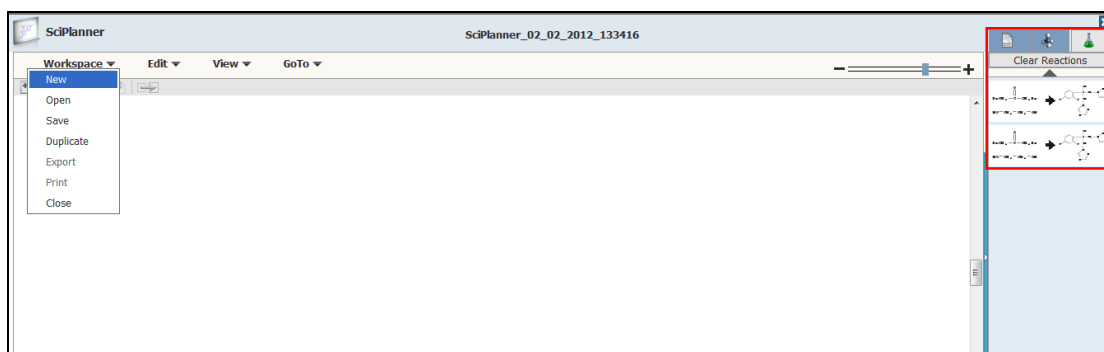
将氟康唑定义为产物，利用精确反应检索，获得如下图的检索结果。

1 Reaction sent to SciPlanner.

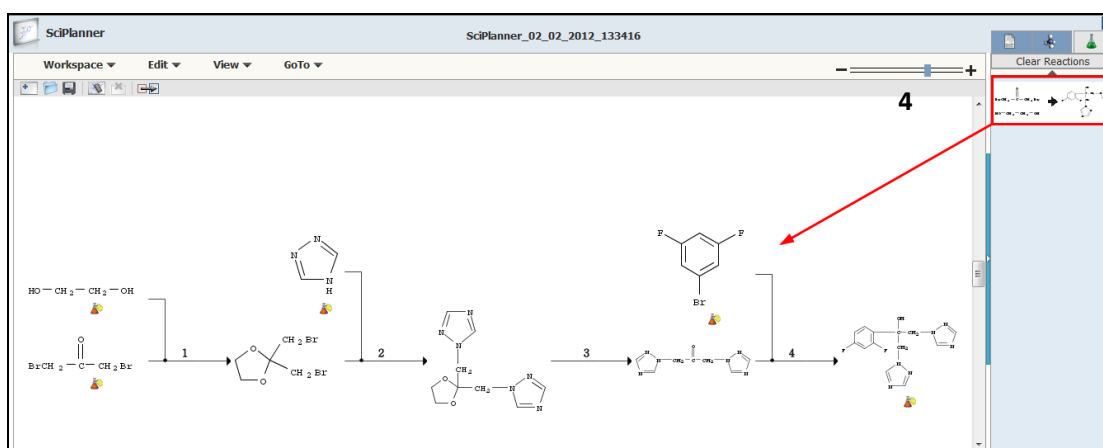
1. View Reaction Detail [Link](#)
4 Steps *Hover over any structure for more options.*

Overview

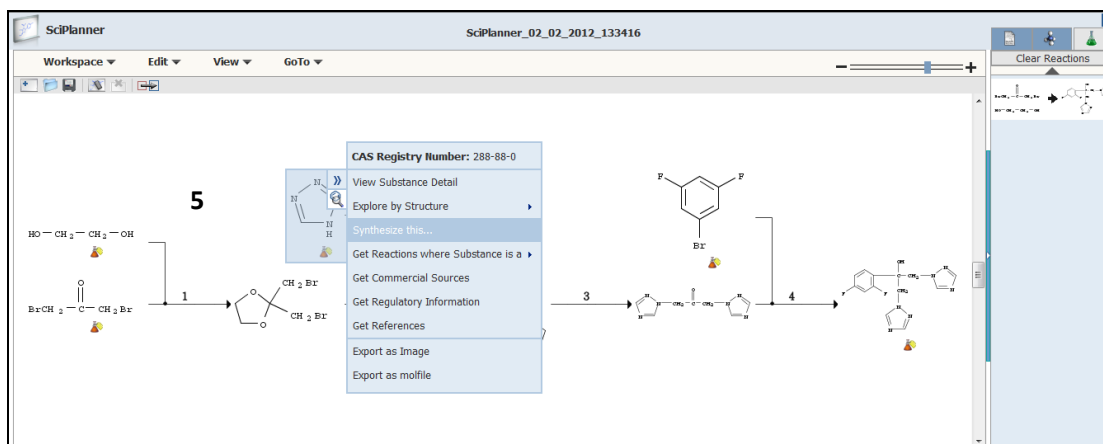
- 1) 选择感兴趣的反应路线、物质等检索结果。
- 2) 点击“Send to SciPlanner”。
- 3) 点击“SciPlanner”进入编辑面板。



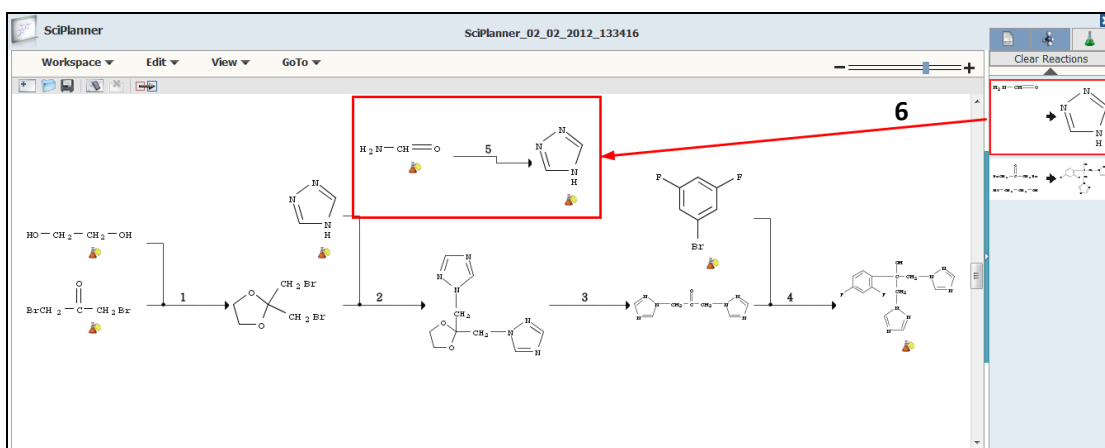
注意：每次使用 sciplanner 编辑时，点击左边“workspace”创建新的编辑文本。右边显示的是我们选择的物质、反应、文献记录。



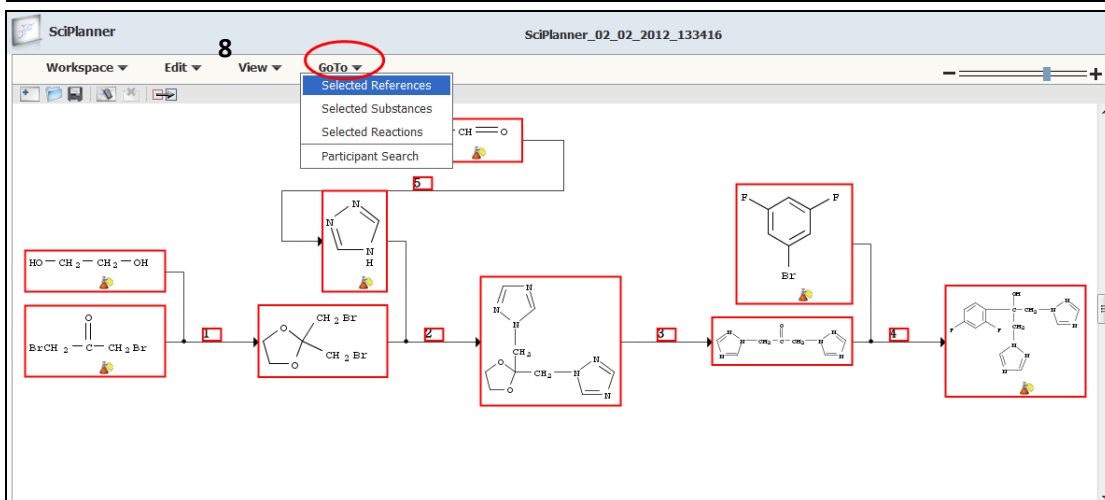
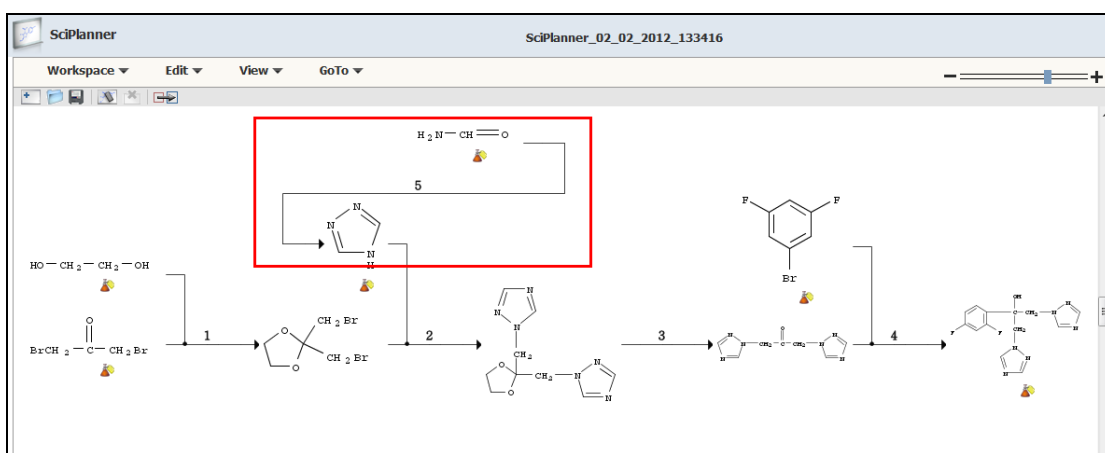
- 4) 鼠标单击将右侧反应检索拖动到 SciPlanner 的编辑面板中；
或 Ctrl+单击将右侧反应拖动到 SciPlanner 的编辑面板中，右侧仍旧保存着检索记录，便于再次编辑。



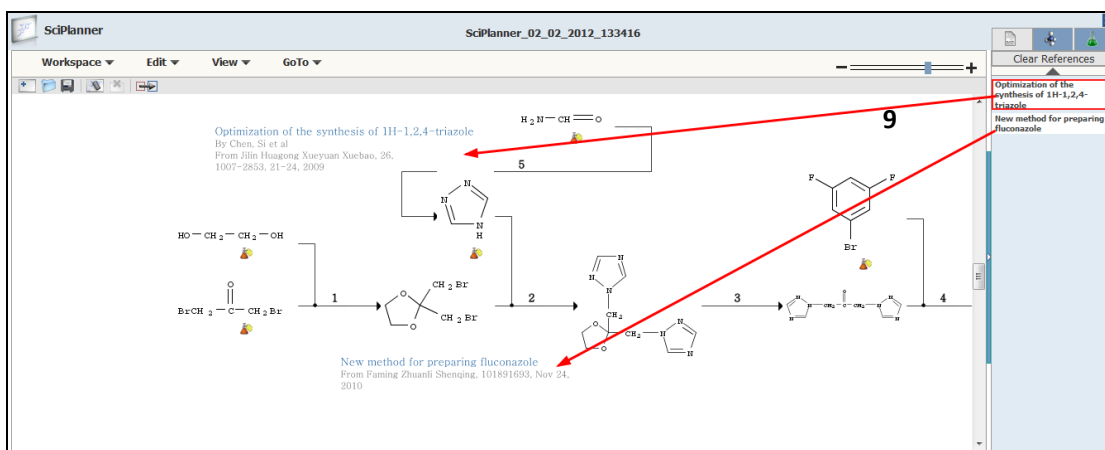
- 5) 鼠标滑过感兴趣的中间体物质，点击“”，获得与物质有关的标准菜单，点击“Synthesize this...”获得该物质的反应检索记录。采用 1、2、3 同样的步骤，将中间体的合成路线推送到 sciplanner 中，如下图。



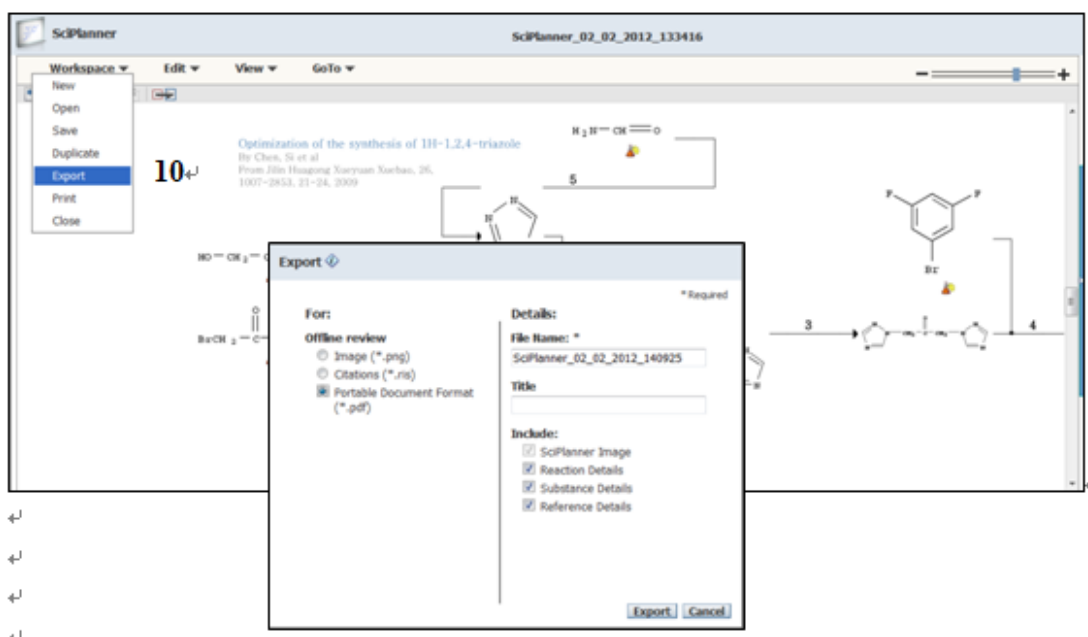
- 6) 利用 4 中的操作方法，将中间体的合成路线拖动到编辑器中，显示有 2 条反应。对于 2 条反应记录中相同的结构，鼠标拖动使相同的结构重叠，合并为一条完整的反应路线，如下图。



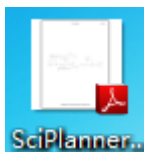
- 7) 鼠标框选所有的反应，所有结构都显示为红色
- 8) 点击界面最上方“GoTo”，在下拉菜单中选择“Selected References”，获得反应所对应的参考文献。选择这两条反应的参考文献，同样的操作推送到 sciplanner 中，如下图。



9) 将右边的文献拖动到 SciPlanner 中，自由的组合文献和反应，图形化的呈现氟康唑的设计路线和参考文献。

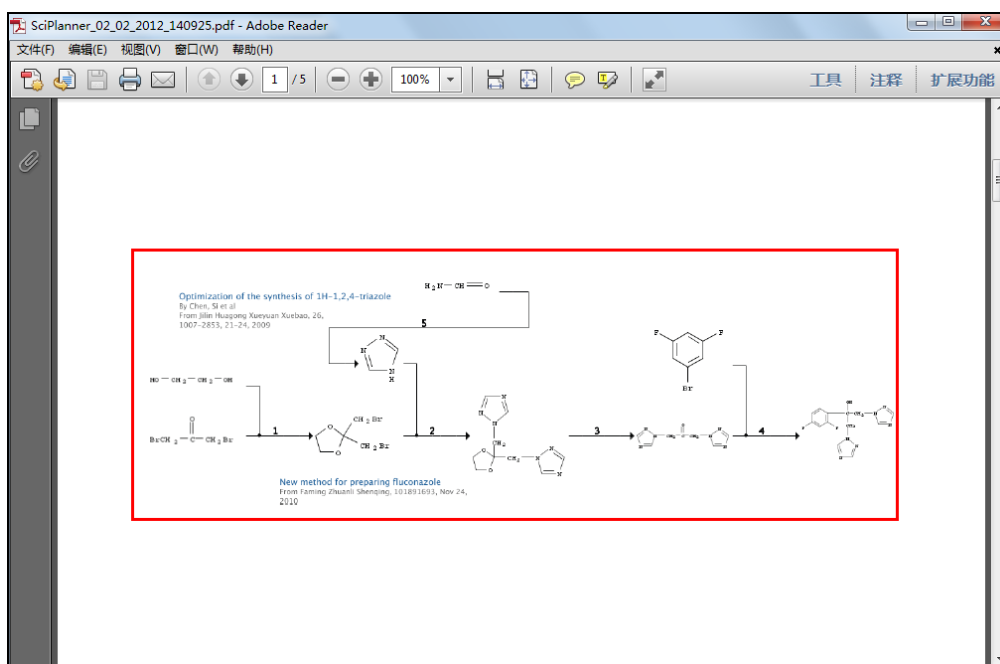


10) 点击“Workspace”下拉菜单中的“Export”，将 SciPlanner 中编辑的结果输出，选择 PDF 格式。



注意：PDF 中包括所设计化合物的反应路线、每步反应的条件、反应所对应的参考文献、参与反应的各物质的具体信息。如下图：

反应路线信息:



反应条件信息:

Reaction	Stages	Notes	Yield
1	1.1 C ₆ H ₄ (Cl) ₂ CHO, S: PhMe, rt → 100°C; 6 h, 100°C; 100°C → rt	optimization study, optimized on stoichiometry of reactants, solvent, catalyst, Reactants: 2, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1	92%
References			
New method for preparing fluconazole By Song, Miaogen and Wang, Jinyin From Faming Zhuanli Shenqing, 101891693, 24 Nov 2010			
CASREACT © Copyright © 2012 American Chemical Society. All Rights Reserved. CASREACT contains reactions from CAS and from ZICA/INITI database (1974-1999) provided by InfoChem, INPI data prior to 1986, Biotransformations database compiled under the direction of Professor Dr. Klaus Kieslich, organic reactions, portions copyright 1998-2006 John Wiley & Sons, Ltd., John Wiley and Sons, Inc., Organic Reactions Inc., and Organic Synthesis Inc. Reproduced under license. All Rights Reserved.			
Reaction	Stages	Notes	Yield
2	1.1 R: Disodium carbonate, C: 412009-61-1, S: CH ₂ Cl ₂ , 1 h, rt 1.2 rt; rt → 35°C; 20 h, 35°C; 35°C → rt	ionic liquid used (catalyst), optimization study, optimized on reaction time, Reactants: 2, Reagents: 1, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 2	88%
References			
New method for preparing fluconazole By Song, Miaogen and Wang, Jinyin From Faming Zhuanli Shenqing, 101891693, 24 Nov 2010			

参与反应的中间体信息:

SciFinder® Substance Information Page 4

<p>107-21-1 <chem>C2H4O2</chem> 1,2-Ethanediol Related Info: ~ 71830 References Reactions Commercial Sources Regulatory Information</p>	<p>144333-84-6 <chem>C9H12N6O2</chem> 1<i>H</i>-1,2,4-Triazole, 1,1'-(1,3-dioxolan-2-ylidenebis(methylene))bis- (9CI) Related Info: ~ 2 References Reactions Regulatory Information</p>	<p>20599-01-3 <chem>C5H8Br2O2</chem> 1,3-Dioxolane, 2,2-bis(bromomethyl)- Related Info: ~ 15 References Reactions</p>
<p>288-88-0 <chem>C2H3N3</chem> 1<i>H</i>-1,2,4-Triazole</p>	<p>461-96-1 <chem>C6H3BrF2</chem> Benzene, 1-bromo-3,5-difluoro- Related Info: ~ 482 References Reactions Commercial Sources</p>	<p>75-12-7 <chem>CH3NO</chem> Formamide Related Info: ~ 12449 References Reactions Commercial Sources Regulatory Information</p>

反应的参考文献:

SciFinder® References Page 5

New method for preparing fluconazole
 By Song, Miaogen; Wang, Jinyin
 From *Faming Zhuanli Shenqing* (2010), CN 101891693 A 20101124, Language: Chinese, Database: CAPLUS

The method comprises (A) reacting 1,3-dibromoacetone with ethylene glycol in the presence of *p*-methylbenzenesulfonic acid as catalyst in toluene to obtain 2,2-bis(bromomethyl)-1,3-dioxolane, (B) reacting with 1*H*-1,2,4-triazole in the presence of ion liq. and sodium carbonate (or potassium carbonate) to obtain 1,1'-(2,2-dimethylene-bis-1*H*-1,2,4-triazolyl)-1,3-dioxolane; (C) reacting with HCl soln. at 100°C for 24-36 h, isolating to obtain 1,3-bis(1*H*-1,2,4-triazole-1-yl)acetone; (D) reacting 3,5-difluoro bromobenzene with magnesium in THF in the presence of iodine to obtain Grignard reagent, dropping the Grignard reagent into 1,3-bis(1*H*-1,2,4-triazole-1-yl)acetone in THF, reacting and isolating to obtain the fungicide fluconazole. The method has advantages of simple process and operation and low cost.

~0 Citings
 0 Tags
 0 Comments
 Copyright © 2012 American Chemical Society (ACS). All Rights Reserved.

Optimization of the synthesis of 1*H*-1,2,4-triazole
 By Chen, Si; Yu, Li-ying; Yang, Ying-jie; Zhang, Jian
 From *Jilin Huagong Xueyuan Xuebao* (2009), 26(3), 21-24, Language: Chinese, Database: CAPLUS

1*H*-1,2,4-triazole was synthesized from formamide and hydrazine hydrate. The effects of reactant ratio, reaction temp., reaction time and the choice of solvent in purifi. were studied in detail. The optimal reaction condition was as follows: the product was prepd. from formamide and hydrazine hydrate (1/3 na:nb = 1:1.5, that was reactant ratio = 2:1) at 185° for 1.5 h. After washing with Et acetate for purifi. of crude product, the total yield was 82.35%, and m. p. was accordant with the value referred in literatures. The structure of 1*H*-1,2,4-triazole had been confirmed by IR spectrum and elemental anal.

~0 Citings

4.11 返回历史检索界面 (Back to the history interface)

在检索界面的最上方, 可以通过历史导航条, 返回曾经检索的任意界面, 点击上面的任何一步, 都可以获得当时的检索界面。

