

CAS SCIFINDER[®]

常见问题解答

2021 年 12 月



CAS SciFinder®是美国化学文摘社（CAS）出品的新一代的权威科学研究工具，是化学及相关学科智能研究平台，提供全球全面、可靠的化学及相关学科研究信息和分析工具。CAS SciFinder®由国际科学家团队追踪全球科技进展，每日收录汇总、标引、管理着世界上的专利、科技期刊等内容，并通过 CAS SciFinder®平台提供的先进检索技术高效揭示重要的技术信息，确保研究人员及时同步全球重要的研究进展。CAS SciFinder®涵盖了化学及相关领域，如化学、生物、医药、材料、食品、应用化学、化学工程、农学、高分子、物理等多学科、跨学科的科技信息；收录的文献类型包括期刊、专利、会议论文、学位论文、图书、技术报告、评论、预印本和网络资源等。

CAS SciFinder® 独特内容和特色：

- **提升文献检索效率：**业界最先进的检索引擎之一，将文献检索时间缩短一半，获得更精确的结果，提高检索效率。
- **高效设计合成计划：**充分利用全球最大的单步和多步反应数据库之一，全面考量反应条件、产率、催化剂和实验步骤，高效设计出合成计划（可节省一半的时间）。
- **Synthetic Methods 合成方法解决方案：**Synthetic Methods 是CAS SciFinder®中的模块，是世界上最大合成方法合集之一，涵盖顶级期刊及专利中的合成制备信息，提供合成方法的每步详细操作信息，以易于阅读的表格形式展示实验详情，包括实验操作步骤、实验原料、实验条件、实验量级、反应转化类型、合成产物谱图信息、合成产物形态等
- **CAS PatentPak®专利分析解决方案：**CAS PatentPak 是 CAS SciFinder®中的模块，服务于科研人员和知识产权人士。PatentPak 在定位和分析大量专利中的化学结构方面，可以为研究人员节省一半以上的时间。PatentPak 是加速化学专利分析最可靠的工具之一；迄今为止只有 PatentPak 采用人工标引——研究人员可以快速识别专利中难以发现的物质（例如，表格化合物和图形图像内的化合物）。使用 PatentPak 可以访问 CAS REGISTRYSM——世界上最全面的可公开获取的物质信息集合。
- **逆合成路线设计工具Retrosynthesis：**基于全球最大的化学反应数据合集CAS REACTIONS结合先进的算法和人工智能，综合多种因素如原子经济性、收率、绿色、成本等为已被报道分子/未被报道分子提供实验验证或预测的逆合成路线。为合成化学家节省时间并提供新的思路和见解。
- **支撑生物学研究：**生物序列检索工具Biosequences Search 提供超过12亿条可检索生物序列，可进行 FTO 检索、侵权检索。
- **可视化检索结果：**用户友好的可视化工具可以帮助用户快速做出更好的决策，这些工具可以精确定位趋势、模式和异常值，帮助将信息转化为洞察。
- **CAS REGISTRY:**全球最大的物质数据合集，收录自19世纪初至今公开披露的超过1.9亿

个独特的物质（包括合金、配合物、矿物、混合物、聚合物和盐），CAS登记号被誉为化学物质的黄金标准，是向WHO提交INN申请时必须提供的信息，被广泛地应用在科研界及商务流程中。

- **CAS Reactions:** CAS创立的全球最大化学反应合集，收录1840年以来源自专利和非专利文献的1.4亿多条单步和多步反应。CAS的科学家在标引化学反应过程中提供了独特的增值信息，包括：实验安全信息、反应类型、反应条件及详细的实验操作步骤等，节省了用户从全文中总结、归纳相关反应信息所花费的时间。
- **马库什结构:** CAS是全球唯一提供专利马库什结构的机构。从全球64家专利授权机构公开的专利中提取超过130万个可检索及浏览的马库什结构。一个马库什结构可能涵盖数千甚至数万个化合物，提升了用户进行化合物结构新颖性和创造性检索的能力。

账号问题 1

- Q1: 如何登录 CAS SciFinder[®]? 1
- Q2: 我是一名学生。作为新用户, 怎样才能访问 CAS SciFinder[®]? 1
- Q3: 我可以在智能设备上使用 CAS SciFinder[®] 吗? 1
- Q4: 我在上一家单位 (学校) 曾经注册过 CAS SciFinder[®] 账号, 在目前的单位能够继续使用吗? 1
- Q5: 我在校注册的 CAS SciFinder[®] 帐号可以在校外机构使用吗? 1
- Q6: 我毕业之后可以继续使用在学校注册的 CAS SciFinder[®] 账号吗? 1
- Q7: 我可以与他人分享我的 CAS SciFinder[®] 账号吗? 1
- Q8: 忘记登录密码怎么办? 2
- Q9: 为什么显示此 IP 没有授权? 2
- Q10: 我在校注册的 CAS SciFinder[®] 帐号可以在校外机构使用吗? 2
- Q11: CAS SciFinder[®] 有并发用户限制吗? 2
- Q12: 如果 CAS SciFinder[®] 账号无法登陆, 如何联系 CAS 中国大陆地区客服? 2

文献检索 3

- Q1: CAS SciFinder[®] 文献结果集中会出现重复的文献吗? 3
- Q2: 在文献结果集中, 如何使用专利号筛选文献? 3
- Q3: 专利文献结果集中, 如何通过专利国家对结果进行筛选? 3
- Q4: 如何在 CAS ScFinder[®] 中查看专利法律状态? 4
- Q5: 当我选择 References 检索时, 输入物质名称和结构检索有何差别? 4
- Q6: CAS SciFinder[®] 中布尔逻辑算符运算的优先性? 5
- Q7: 如何筛选晶型研究相关的文献? 5
- Q8: 在物质结果集页面筛选出具有潜在生物活性物质后, 如何获得它们的合成工艺专利? 5
- Q9: 如何检索某个年份的 ADC 技术的专利, 尤其是寻找关于如何偶联 (conjugate) 的专利? 6
- Q10: 如何检索某机构关于合成和工艺方面的研究文献? 6
- Q11: 如何检索与 pvdF 修饰相关的文献? 7
- Q12: 如何检索 MOF 材料的电致发光材料的研究文献? 7

Q13: 如何查某一个药物在体内的代谢产物, 次级代谢产物?	7
Q14: 如何获取研究高强、高导铜合金的文献?	7
Q15: 已经知道结构修饰位点, 如何检索一个特定小分子化合物的前药研究专利?	7
Q16: 如何检索某个机构的研究文献?	7
物质检索	9
Q1: 在 CAS PatentPak 中如何搜索 CAS 登记号?	9
Q2: 用结构式检索后, As Drawn、Substructure 和 Similarity 中哪个结果集可以使用 Chemscape 来进行分析?	9
Q3: 如何根据碎片结构检索潜药?	9
Q4: 如何根据折射率来获取物质?.....	9
Q5: 怎样绘制苯并杂环的通式结构?	10
Q6: 在一个含有 N 杂环的物质 Substructure 检索结果集中, 快速筛选出含有 2 个或者 3 个 N 原子数的物质的方法?	10
Q7: 已知分子式及部分结构片段, 如何快速得到目标物质?	10
Q8: 如何通过组分数筛选组合物?	11
Q9: 如何检索同位素标记的化合物	11
Q10: 怎么找到物质的衍生物?	12
Q11: CAS SciFinder [®] 中的结构是否区分构象异构体?	13
Q12: 如何检索无机氧化物, 比如 CaTiO ₃ ?	13
Q13: 如何检索对苯二甲酸和 Zn 组成的 MOF 材料?	14
Q14: 根据手性物质进行结构检索, 为什么结果中呈现的物质数量有时候少于 As Drawn 显示的结果数?	14
Q15: 一个含有酰胺(O=C-NH) 的环系化合物, 如何获取其互变异构形成的-OH?	15
Q16: 如何检索沸点是特定沸点的溶剂, 且这个化合物不包含-COOH 和金属?	16
Q17: 如何获取物质的旋光度?	18
Q18: 如何检索有机盐?	19
Q19: 如何绘制二茂铁类金属有机化合物?	22

反应检索25

- Q1: 如何获取无机盐的反应信息?25
- Q2: 如何获取含有羧基的离子型或配位型化合物的反应信息?25
- Q3: 如何合并来自同一篇文献的反应?25
- Q4: 在反应结果集筛选项中的 Non-Participating Functional Groups 是什么意思?26
- Q5: CAS 会收录权利要求书中用化学通式表示的化学反应吗?26
- Q6: 在 CAS SciFinder[®] 结果集页面点击物质结构时, 在弹出窗口会显示 Reactions, Synthesize 和 Start Retrosynthetic Analysis, 请问这三者的区别是什么?26
- Q7: 在一个硝基苯还原为苯胺的还原反应中, 如果原料和产物中都含有 Boc 取代基, 但在反应前后不发生变化。如何检索这样的反应?27
- Q8: 如何检索酶催化羰基还原反应? 比如苯乙酮还原为苯乙醇反应27
- Q9: 已知起始物料和 API 的 CAS RN, 怎么检索合成路线?28
- Q10: 如何全面准确检索合成丙烯酸的反应, 同时排除由丙烯酸衍生物制备丙烯酸的合成方法?28
- Q11: CAS SciFinder[®] 中, 对于反应结果集而言, 默认的排序规则是什么?28
- Q12: 如何检索某一类催化剂涉及的某类型反应的机理?28
- Q13: 含有手性结构的化合物拆分的反应怎么检索?30
- Q14: 如何获取金属络合物的制备方法?33
- Q15: 如何查找 MOFs 催化的二氧化碳加氢反应?35

序列检索37

- Q1: Biosequences 检索时, 如何获取来自 CAS SciFinder[®] 的相关文献?37
- Q2: CAS SciFinder[®] 中 Biosequences Search 数据的来源?37
- Q3: 如何优先展示生物序列检索结果中 Subject Coverage% 高的结果?37
- Q4: Biosequences Search 中 Query Coverage%, Subject Coverage% 和 Alignment identity% 是如何计算的?38
- Q5: 如何输入序列获取其相关信息?39

CAS Formula43

Q1: CAS Formulus 中, Formulation Designer, Formulation, Ingredient 的区别?.....	43
Q2: 如何通过技术手段检索制剂信息?	43
Q3: 如何通过结构式检索制剂信息?	45
CAS Analytical Methods	46
Q1: 如何通过已知结构, 检索相似结构的分析检测方法?	46
其他.....	48
Q1: 我最近将 KMP alerts 从 CAS SciFinder 转移到了 CAS SciFinder ⁿ 。但是为什么我在 CAS SciFinder ⁿ 中得到的结果比 CAS SciFinder 少呢?	48
Q2: 在哪里可以获得筛选检索结果的选项?	48
Q3: 选择 All 进行检索, 将得到什么信息? 在检索框中需要输入什么类型的信息?	48
Q4: CAS SciFinder ⁿ 支持哪些操作系统和浏览器?	49

账号问题

Q1: 如何登录 CAS SciFinder[®]?

A1: 如果已经有 CAS SciFinder 账号, 请使用 CAS SciFinder 账号和密码登录即可。如果没有 CAS SciFinder 账号, 则请与贵单位 CAS SciFinder 管理人员联系获取账号。CAS SciFinder[®] 的登录网址为: <https://scifinder-n.cas.org>。

Q2: 我是一名学生。作为新用户, 怎样才能访问 CAS SciFinder[®]?

A2: 学校的新用户需要先通过学校的 CAS SciFinder[®] 注册链接注册账号后才能使用 CAS SciFinder[®]。账号的具体注册方法, 请访问所在学校图书馆网页或咨询所在学校图书馆的负责老师。

Q3: 我可以在智能设备上使用 CAS SciFinder[®] 吗?

A3: 请使用授权 IP 范围内的网络登录智能设备, 即可以使用。

Q4: 我在上一家单位 (学校) 曾经注册过 CAS SciFinder[®] 账号, 在目前的单位能够继续使用吗?

A4: 不可以, 到新单位后需要重新申请 (注册) 账号。

Q5: 我在校注册的 CAS SciFinder[®] 帐号可以在校外机构使用吗?

A5: 不可以。只能供自己和研究课题使用, 禁止为他人代查。

Q6: 我毕业之后可以继续使用在学校注册的 CAS SciFinder[®] 账号吗?

A6: 不可以。在学校注册的帐号仅能在学校就读期间使用, 毕业后则不能再使用。

Q7: 我可以与他人分享我的 CAS SciFinder[®] 账号吗?

A7: 不可以, 自己注册的帐号仅能自己使用, 不可与他人分享。

Q8: 忘记登录密码怎么办？

A8: 登录 SciFinder-n.cas.org, 在当前页面点击 Can't log In, 在弹出页面根据要求填写相应信息找回密码即可。如果您无法自己找回密码, 请联系 china@acs-i.org, 由相关客服人员协助您解决密码找回问题。

Q9: 为什么显示此 IP 没有授权？

A9: 用户需要在授权 IP 范围内才能使用 CAS SciFinder[®]。如果您在使用时遇到 IP 未被授权的问题, 请使用网址 <http://web.cas.org/cgi-bin/casip> 查询您的电脑 IP 地址, 并将页面截图及您的 SciFinder 登录账号及注册 SciFinder 时使用的单位域名邮箱发送至 china@acs-i.org, 便于 CAS 客服人员尽快解决您的问题。

Q10: 我在校注册的 CAS SciFinder[®] 帐号可以在校外机构使用吗？

A10: 不可以, 只能在学校授权 IP 范围内使用, 禁止在本校外的任何机构使用。如果您正在某商业机构实习或为某商业机构工作, 也不允许在这些商业机构中使用在学校注册的 CAS SciFinder[®] 帐号。

Q11: CAS SciFinder[®] 有并发用户限制吗？

A11: 没有并发用户数限制。

Q12: 如果 CAS SciFinder[®] 账号无法登陆, 如何联系 CAS 中国大陆地区客服？

A12: CAS SciFinder[®] 账号无法登陆或者其他有关 CAS SciFinder[®] 的问题, 可拨打电话或者发送邮件与 CAS 中国大陆区客服人员联系: 电话: 010-62508026/7, 电子邮箱: china@acs-i.org。

文献检索

Q1: CAS SciFinder® 文献结果集中会出现重复的文献吗？

A1: CAS SciFinder® 涵盖的两个文献数据库 Cplus 和 Medline 有部分重复的文献。但是在展示的结果集中，已经自动进行了去重处理。对于 Cplus 和 Medline 重复收录的文献，在其文献详情页面左侧会看到如下信息：

Reference Detail (1 of 1)

Substances (4) Reactions (0) Citing (97) Citation Map

JOURNAL

Source
Journal of Chromatography B: Biomedical Sciences and Applications
Volume: 745
Issue: 2
Pages: 373-388
Journal: Article
2000
DOI:
[10.1016/S0378-4347\(00\)00300-5](https://doi.org/10.1016/S0378-4347(00)00300-5)

CODEN: JCBEP
ISSN: 1387-2273
ISSN-L: 1387-2273

Database Information
AN: 2000:591027
CAN: 133:317174
PubMed ID: 11043756
Cplus and MEDLINE

Company/Organization
Roche Discovery Welwyn
Welwyn Garden City, Herts AL7 3AY
United Kingdom

Development of a high-performance liquid chromatographic-mass spectrometric assay for the specific and sensitive quantification of Ro 64-0802, an anti-influenza drug, and its pro-drug, oseltamivir, in human and animal plasma and urine

By: Wiltshire, H.; Wiltshire, B.; Citron, A.; Clarke, T.; Serpe, C.; Gray, D.; Herron, W.

Oseltamivir phosphate (Ro 64-0796/002) is a pro-drug of the anti-influenza neuraminidase inhibitor, Ro 64-0802, and as Tamiflu, has been developed for the treatment of both A and B strains of the disease. This paper describes an HPLC-MS-MS assay for both compounds in plasma and urine which fulfils all of the criteria for a good anal. method. It is sensitive with limits of quantification of 1 and 10 ng/mL for the pro-drug and active neuraminidase inhibitor, resp. It is both accurate and precise with typical coefficients of variation from some 5000 quality control samples of approx. ± 3 and $\pm 6\%$, resp. Extensive stability studies have demonstrated the absence of significant problems associated with the decomposition of either compound, although ex vivo hydrolysis of Ro 64-0796 to Ro 64-0802 in rodent plasma has to be prevented by the use of the esterase inhibitor, dichlorvos.

Keywords: neuraminidase inhibitor antiinfluenza pharmacokinetics oseltamivir HPLC assay biol fluid

Full Text

Expand All | Collapse All

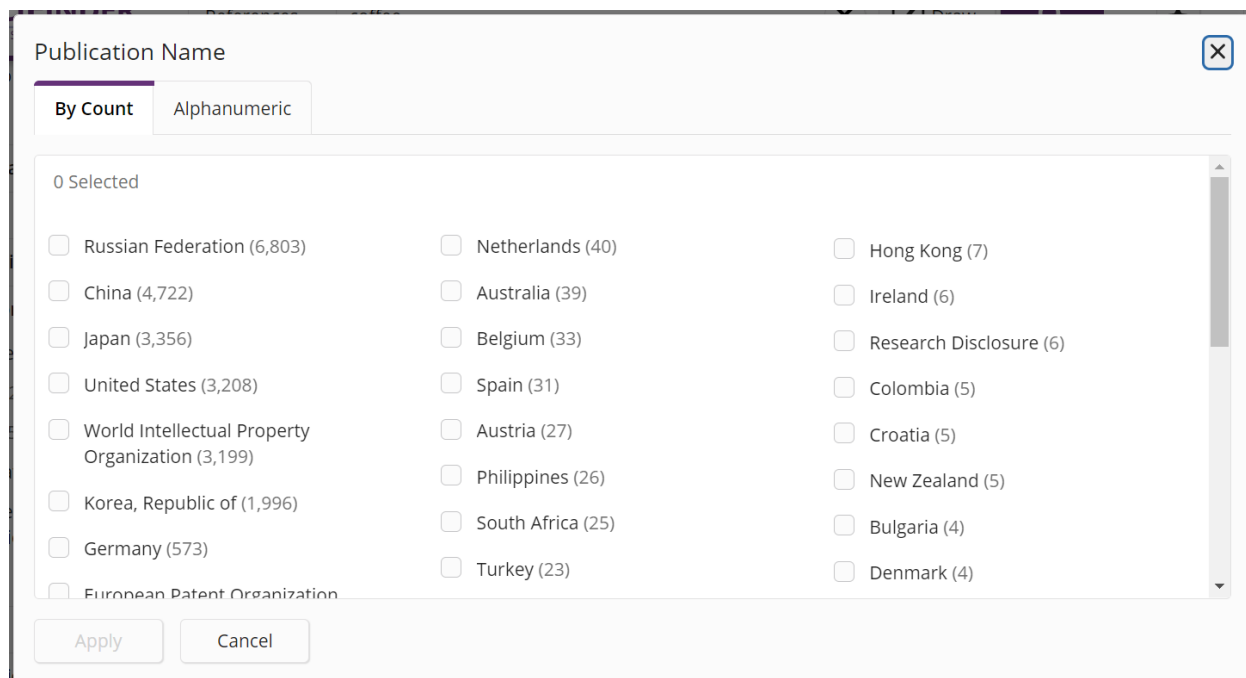
- Concepts
- MEDLINE® Medical Subject Headings
- Supplementary Concepts
- Substances
- Cited Documents

Q2: 在文献结果集中，如何使用专利号筛选文献？

A2: 点击文献结果集页面左下角的 Search Within Results, 在输入框中输入专利号，然后点击 Find, 即完成用专利号筛选文献。

Q3: 专利文献结果集中，如何通过专利国家对结果进行筛选？

A3: 在文献结果集页面左侧选择 Publication Name, 在弹出的页面即可根据国家进行筛选，如下图所示。



Q4: 如何在 CAS ScFinderⁿ 中查看专利法律状态？

A4: 在 CAS SciFinderⁿ 专利文献详情页面，可以查看专利的 Kind Code。

Q5: 当我选择 References 检索时，输入物质名称和结构检索有何差别？

A5: 输入物质名称时，在检索时会进行同义词的扩展（即物质的其他名称），命中的结果中可能是名称完全匹配的结果，也可能是匹配片段名的结果。用名称检索时，检索的范围为标题、摘要、Concepts, Substances、Substance Role 等。

输入结构时，匹配的是文献中 Substances 部分展示的结构，可以通过 As Drawn 或 Substructure 来筛选文献结果。如下如所示：

Q6: CAS SciFinder[®] 中布尔逻辑算符运算的优先性?

A6: 在 SciFinder-n 中支持使用布尔逻辑算符 AND、OR 和 NOT。默认的运算优先顺序为 OR > AND > NOT。在使用逻辑算符时, 可以使用括号 (), 括号里的算符优先运算。如: (A NOT B) AND C, 则会优先运算括号中的 NOT, 然后再运算 AND。

Q7: 如何筛选晶型研究相关的文献?

A7: 在 CAS SciFinder[®] 主页选择 References, 在输入框中输入关键词, 比如 crystal polymorphs, crystal structure, 获取晶型研究的相关文献。可以在文献结果集左侧, 通过 Concept 列表查看和晶型研究相关的概念词, 对文献结果进行精炼。

如果涉及某具体物质的晶型研究, 则可以采用文本与结构联用的方式进行检索。

Q8: 在物质结果集页面筛选出具有潜在生物活性物质后, 如何获得它们的合成工艺专利?

A8: 点击获得具有潜在生物活性物质结果集页面顶端的 References, 获得报道这些物质的文献结果集。然后在文献结果集页面左侧的 Substance Role 选项中勾选 Preparation, Process。最后在文献结果集页面左侧 Document Type 选项中勾选 Patent, 即可得到物质的合成工艺专利。

Q9: 如何检索某个年份的 ADC 技术的专利, 尤其是寻找关于如何偶联 (conjugate) 的专利?

A9: 有 2 种方法实现, 分别按以下步骤进行。

方法一:

1. 在 CAS SciFinder[®] 主页选择 References, 在输入框中输入相关检索式, 如, “antibody drug conjugate” or ADC, 检索后得到文献结果集
2. 点击文献结果集页面左侧的 Filter by, 在 Document Type 选项下勾选 Patent, 将结果限定为专利
3. 点击专利文献结果集页面左侧 Filter by, 再点击 Concept 下的 View All, 在弹出窗口中勾选 crosslinking agents 等相关词语, 以获得更精准的检索结果。
4. 点击专利文献结果集页面左侧 Filter by, 在 Publication Year 下勾选需要的某个年份即可

方法二:

1. 如果确定使用关键词 crosslinking, 则可以按方法一所述第一步的输入框中输入检索式 (“antibody drug conjugate” or ADC) and crosslinking
2. 按照方法一所述的第 2 和第 4 步操作即可。

Q10: 如何检索某机构关于合成和工艺方面的研究文献?

A10: 按以下步骤操作:

1. 在 CAS SciFinder[®] 主页面选择 References, 再点击 Add Advanced Search Field
2. 点击 Select, 在弹出列表中选择 Organization Name, 然后在输入框中输入机构名, 检索后得到该机构的文献
3. 点击文献结果集左侧 Filter by, 在 Search Within Results 下面的输入框中输入 preparation/synthesis/process/catalysis 等类似关键词来筛选合成和工艺方面的研究文献。

如果需要查看具体的反应, 可以点击文献结果页眉下方的 Reactions 获取文献中涉及的重要反应结果。

Q11: 如何检索与 pvdf 修饰相关的文献?

A11: 点击 References, 在输入框中输入主题词进行检索, 例如 modified pvdf。如果对于修饰的方法有明确的限定, 可以利用布尔逻辑算符进一步精准构建检索式, 例如 pvdf and "hydroxyl group", 或 "CF4 plasma" and PVDF 等。

Q12: 如何检索 MOF 材料的电致发光材料的研究文献?

A12: 在 CAS SciFinder® 中, 可通过布尔逻辑符, 结合恰当的关键词, 灵活构建检索式, 比如: (Electrochemiluminescence or ECL) and MOF, 获得目标结果。

Q13: 如何查某一个药物在体内的代谢产物, 次级代谢产物?

A13: 按以下步骤操作:

- (1) 通过药物名或药物结构获取药物的物质信息, 在物质结果集页面点击 References, 获得药物的文献结果集;
- (2) 在获得的文献结果集页面, 点击左侧 Filter by: Concept, 勾选 Drug metabolism 等与代谢有关的词语, 获得药物代谢研究的文献;

Q14: 如何获取研究高强、高导铜合金的文献?

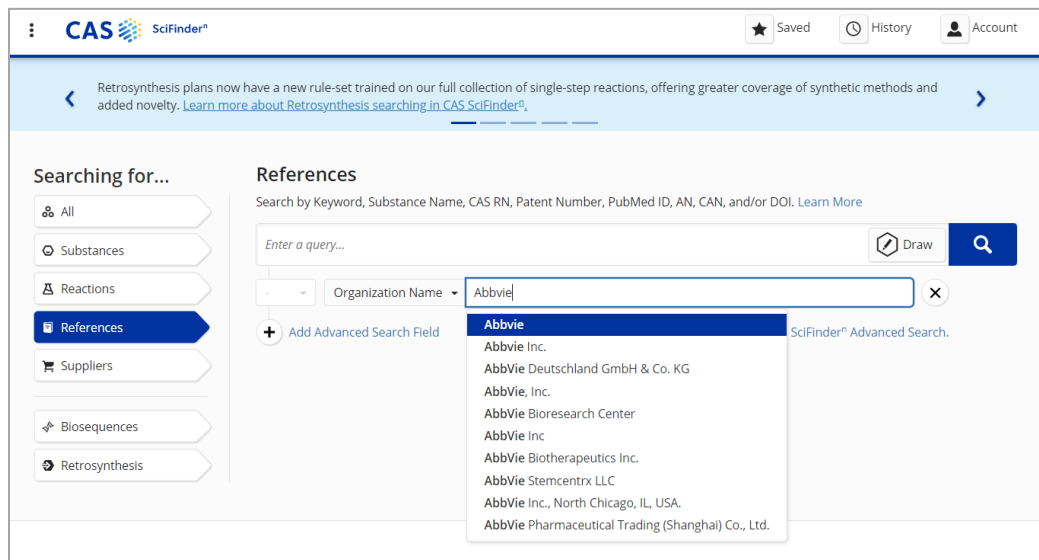
A14: 选择 References, 在输入框中输入检索式, 检索式中可考虑使用恰当的布尔逻辑运算符, 以获取预期结果。如输入: High-strength and high-conductivity and "copper alloy" 或 "High-strength" and "high-conductivity" and "copper alloy" 等。

Q15: 已经知道结构修饰位点, 如何检索一个特定小分子化合物的前药研究专利?

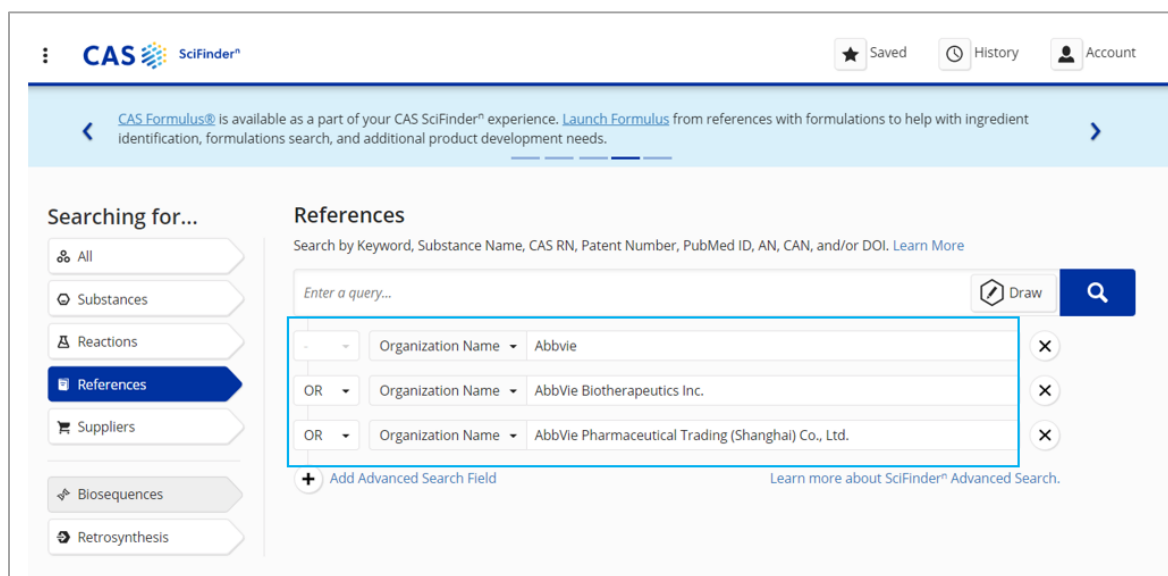
A15: 选择 References。绘制小分子结构式, 同时在输入框中输入关键词 (如, prodrug and doxorubicin), 采用文本+结构联合检索方式得到文献结果集。再在文献结果集页面左侧 Filter By: Document Type 选择 Patents, 即可获得该小分子前药研究专利。

Q16: 如何检索某个机构的研究文献?

A16: 点击 References, 再点击 Add Advance Search Field, 然后点击 Select, 在弹出列表中选择 Organization Name, 输入机构名, 例如 Abbvie。



如果需要考虑其分支机构, 则可参考输入框中提示的分支机构名, 并使用逻辑算符 OR 输入多个名称同时进行检索。



物质检索

Q1: 在 CAS PatentPak 中如何搜索 CAS 登记号？

A1: 使用 Ctrl+F，输入 CAS 登记号，即可快速定位到所关注的物质。

Q2: 用结构式检索后，As Drawn、Substructure 和 Similarity 中哪个结果集可以使用 Chemscape 来进行分析？

A2: As Drawn、Substructure 或 similarity 选项中的物质都可以利用 Chemscape 来进行分析。

Q3: 如何根据碎片结构检索潜药？

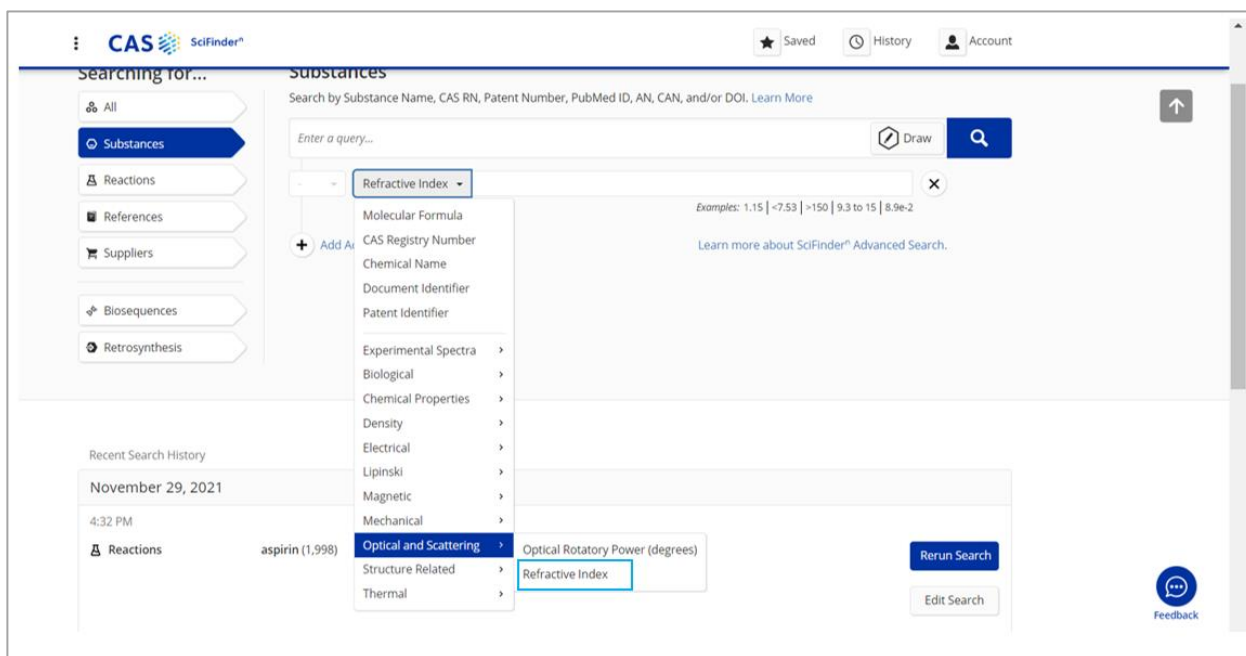
A3:

- 1) 首先在结构编辑器中绘制碎片结构（各个碎片结构之间无需任何连接），结构上传后进行检索。通过物质结果集页面左侧的 Number of Components，确定这些碎片结构呈现在一个（选数字 1）还是多个（除 1 以外的其他数字）化学结构中；
- 2) 再通过物质结果集页面左侧的 Bioactivity Indicator 或 Target Indicator 筛选具有潜在生物活性的物质；
- 3) 最后，点击物质结果集页面的 References 获取潜药的相关文献。

Q4: 如何根据折射率来获取物质？

A4: 先点击 CAS SciFinder[®] 主页左侧的 Substances，再点击 Add Advanced Search Field，然后点击 Select，在出现的列表中选择 Optical and Scattering，再选择 Refractive Index，在输入框中输入希望检索的定值（比如 2）或者区间值（比如 >1, 2 to 3），点击检索，即可获得符

合要求的物质结果集。如下图所示：



Q5：怎样绘制苯并杂环的通式结构？

A5：

- (1) 首先绘制一个苯环，然后在苯环上绘制一个并环，根据需要使用重复键重复原子或片段，获得期望的环。
- (2) 如果有特定的杂原子可选，则可以使用 R 基团，将需要的杂原子定义在 R 基团中，如果对并环是否饱和无特殊要求，则并环中的键可用... (unspecified bond) 来表示。

Q6：在一个含有 N 杂环的物质 Substructure 检索结果集中，快速筛选出含有 2 个或者 3 个 N 原子数的物质的方法？

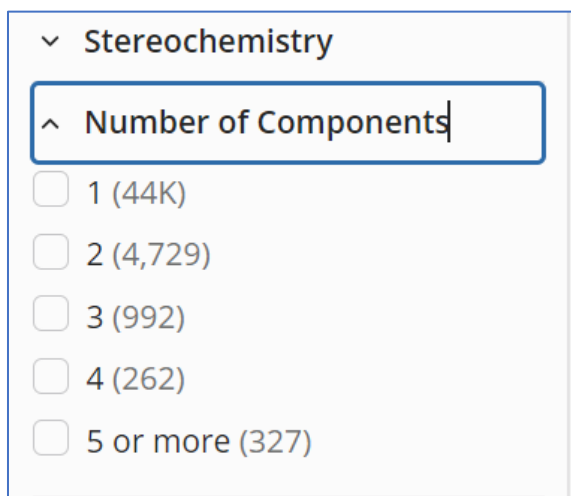
A6：点击结果集页面左下角的 Search Within Results，打开结构编辑器，在结构编辑器中绘制指定的原子，比如要求筛选出含有 2 个 N 原子的物质，则在结构编辑器中绘制 2 个 N 原子，2 个 N 原子之间无需任何连接，单独绘制即可。检索后即可得到指定原子个数的物质。

Q7：已知分子式及部分结构片段，如何快速得到目标物质？

A7: 通过分子式进行检索，在得到的物质结果集页面左下角选择 Search Within Results，在打开的结构编辑中输入结构片段，然后检索，即可快速获得目标物质。

Q8: 如何通过组分数筛选组合物?

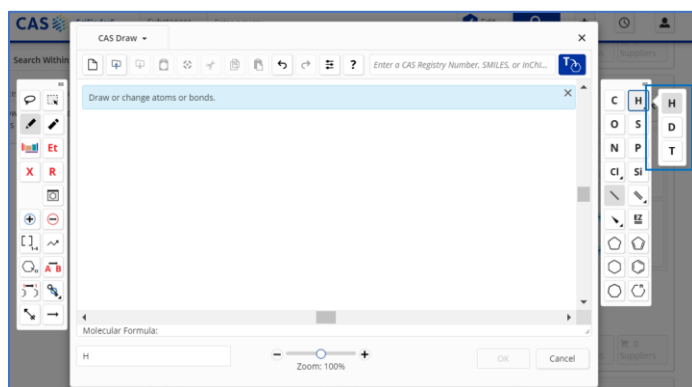
A8: 在物质结果集页面左侧选择 Number of Components，即可通过组分数筛选组合物，如下图所示:



Q9: 如何检索同位素标记的化合物

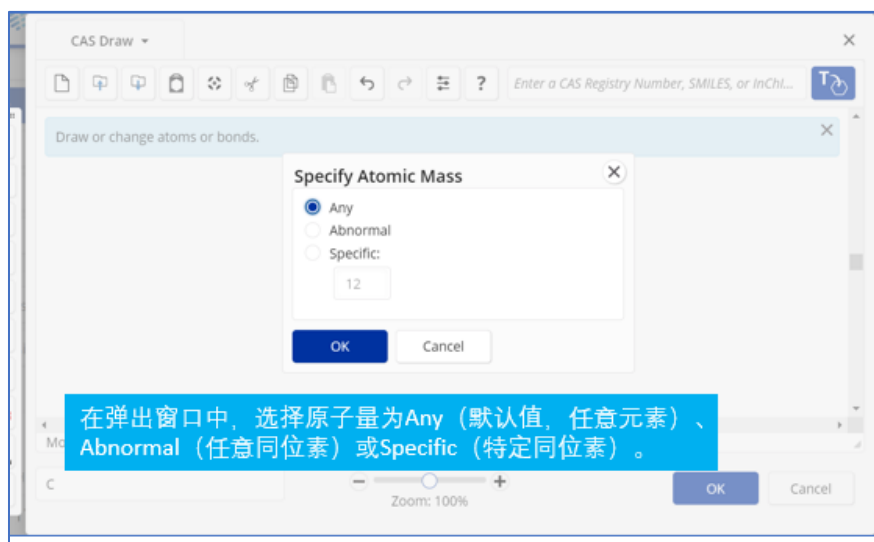
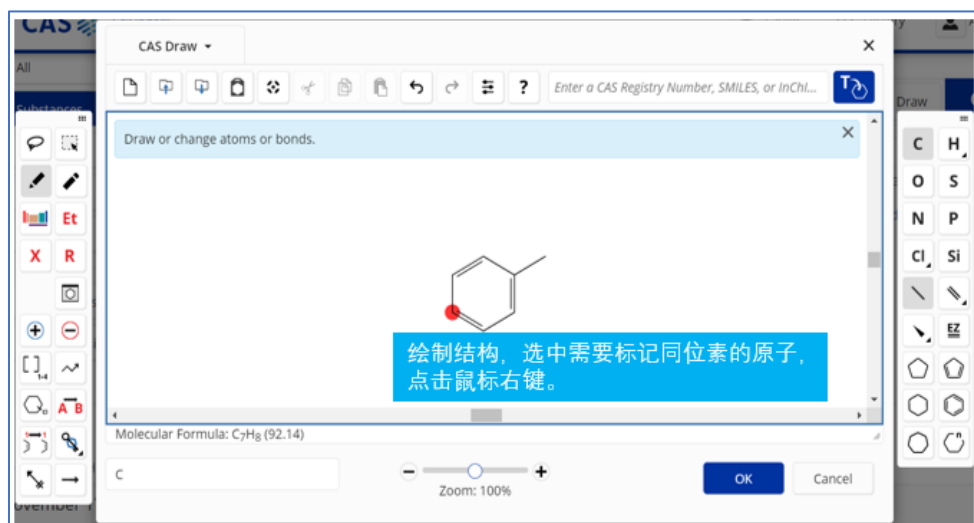
A9: 以下三种方法可以获取到同位素标记的物质:

- 1) 对于含有 H 的同位素物质，可以在结构编辑器面板点击 H，在弹出框中直接选择 D, T 进行结构绘制。如下图所示



- 2) 在绘制结构时不考虑同位素，通过结构检索得到物质结果集页面后，点击物质结果集页面左侧 Filter by: Isotopes，选择 containing isotopes，即可获得各种同位素标记的物质。

3) 绘制任意特定原子的同位素方法如下：



Q10: 怎么找到物质的衍生物?

A10: 按照下述步骤操作:

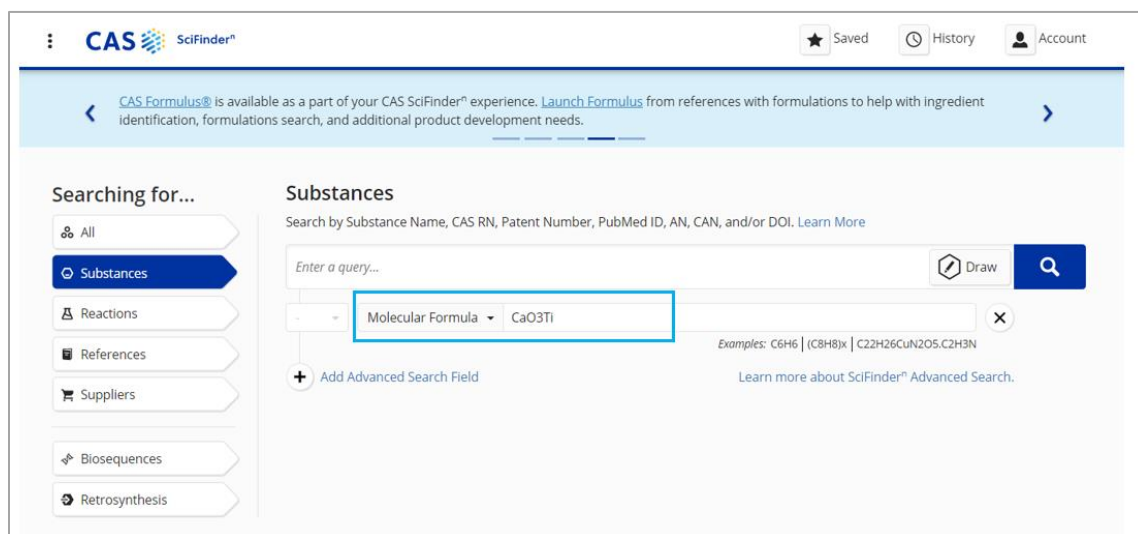
- 点击 Substances, 打开结构编辑器, 绘制结构。上传结构并检索
- 通过结构检索可同时获取 As Drawn, Substructure 和 Similarity 检索结果集, 默认展示 As Drawn 结果集。
- 点击 Substructure, 可获取绘制结构母核不变的衍生物; 点击 Similarity, 参考一定范围的相似度分值, 可以获取绘制结构母核发生一定变化的衍生物。

Q11: CAS SciFinder® 中的结构是否区分构象异构体?

A11: 在 CAS SciFinder® 结构编辑器中绘制结构时, 可使用结构面板的异构体键, 绘制旋光异构体或顺反异构体。在绘制结构和展示物质结果集时, 不区分构象异构或位阻异构等其他异构体, 这些异构可通过文献详情获取。

Q12: 如何检索无机氧化物, 比如 CaTiO₃?

A12: 点击 Substances, 再点击 Add Advanced Search, 点击 Select, 在下拉选项中选择 Molecular Formula。在输入框中输入 CaO₃Ti, 点击 Search 即可获得 CaTiO₃ 的物质信息。如下图:



Substance Detail (1 of 2)

← Prev

Next →

References (8,211)

Reactions (53)

Suppliers (32)

Download

Email

★ Save

CAS Registry Number

12049-50-2

Component	Ratio	CAS RN
O	3	17778-80-2
Ca	1	7440-70-2
Ti	1	7440-32-6

Ca.O.Ti

Components: 3

CaO₃Ti

Calcium titanium oxide (CaTiO₃) (8CI, 9CI, ACl)

Key Physical Properties	Value	Condition
Density (Experimental)	4.02 g/cm ³	Temp: Room temp

Experimental Properties | Spectra

在输入分子式时，需要遵循 Hill 规则：分子式中不含碳原子时，各元素排序根据字母顺序表进行排列；分子式中含碳原子时，“C”排首位，如有氢则紧随其后,其它元素符号按字母顺序排在氢的后面。

Q13: 如何检索对苯二甲酸和 Zn 组成的 MOF 材料?

A13: 按以下步骤操作:

- (1) 选择 Substances, 打开结构编辑器, 绘制对苯二甲酸和 Zn, 进行结构检索。
- (2) 在结果集页面, 可直接查看 As Drawn 结果, 如果需要查看有这类配体衍生物组成的 MOF 材料, 则可查看 Substructure 结果。

在物质结果集页面左侧选择 Filter By : Number of Components 选 1, 即获取配体和金属中心在同一个结构中的物质; 如果需要, 可进一步通过 substance class 选择 coordination compound 或 polymer。

Q14: 根据手性物质进行结构检索, 为什么结果中呈现的物质数量有时候少于 As Drawn 显示的结果数?

A14: As Drawn 涵盖的物质既包含 Absolute Stereo Match, 还包含 Stereo that doesn't Match Query 的物质。在展示结果时, CAS SciFinder[®] 自动勾选了 Absolute Stereo Match, 这样就导致了呈现的物质数量与 As Drawn 展示数量不一致的情况。如果需要 As Drawn 包含的所有物质, 则可在结果集页面左侧勾选 Filter by: Stereochemistry 下所有选项。如下所示:

The screenshot displays the CAS SciFinder interface. On the left, the 'Structure Match' sidebar is visible, showing 'As Drawn (4)' as the selected match type. Under the 'Stereochemistry' filter, both 'Absolute Stereo Match (1)' and 'Stereo that Doesn't Match' are checked. The main results pane shows a single entry for '2492423-29-5', which is Uridine, 4-oxime, 5'-(2-methylpropanoate), (4Z)-. The chemical structure is shown with absolute stereochemistry, and the molecular formula is C₁₃H₁₉N₃O₇. Below the structure, it indicates 96 references, 96 reactions, and 38 suppliers.

Q15: 一个含有酰胺(O=C-NH)的环系化合物, 如何获取其互变异构形成的-OH?

A15: 用结构式进行物质检索。在获得的结果集页面左侧, 点击 Analyze Structure Precision, 选择 Tautomers and Zwitterions 获取互变异构体和两性离子化合物。

Q16: 如何检索沸点是特定沸点的溶剂，且这个化合物不包含-COOH 和金属？

A16: 按如下步骤进行：

- 选择 Substances，点击 Add Advanced Search Field
- 点击 Select，在展示字段中点击 Thermal，然后点击 Boiling Point
- 在输入框中输入沸点范围或者确定的值（输入格式可为：500 to 600，> 500, 或 550 这类格式）；进行检索，得到物质结果集。
- 在物质结果集页面左侧点击 Exclude
- 点击 Metals: containing metals；排除含有金属原子的物质
- 点击 Search within Results，打开结构编辑器，在结构编辑器中输入 CO₂H，上传后进行检索，得到不含-CO₂H 的物质，如下所示：

CAS SciFinder®

★ Saved ⌚ History 👤 Account

← CAS Analytical Methods® is available as part of your CAS SciFinder® experience. Identify and compare the latest published analytical methods, featuring step-by-step instructions, in pharmacology, HPLC, food analysis, natural product isolation analysis, water analysis and more. →

Searching for...

- All
- Substances**
- Reactions
- References
- Suppliers
- Biosequences
- Retrosynthesis

Substances

Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. [Learn More](#)

Enter a query...

Boiling Point (°C) 500 to 600

Include predicted values. Examples: 1.15 | <7.53 | >150 | 9.3 to 15 | 8.9e-2

+ Add Advanced Search Field [Learn more about SciFinder® Advanced Search.](#)

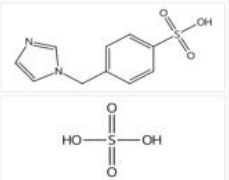
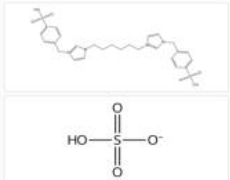
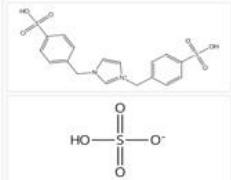
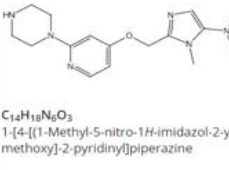
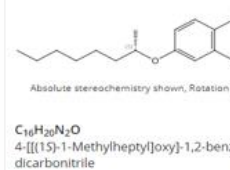
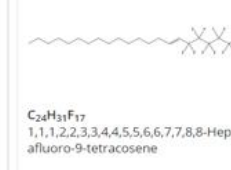
CAS SciFinder®

Substances ▾ Edit Search Enter a query...

Filter by Exclude

- Commercial Availability
- Reaction Role
- Reference Role
- Stereochemistry
- Number of Components
- Substance Class
- Isotopes
- Metals
 - ☒ Containing Metals (14)
 - ☐ Not Containing Metals (425)
- Molecular Weight
- Experimental Property
- Experimental Spectrum
- Regulatory Data by Country
- Regulatory Data by List
- Bioactivity Indicator
- Target Indicator

Excluding: Metals: Containing Metals X Search Within Results: Drawn Structure X Clear All Filters

1 1332456-96-8  <chem>C10H10N2O3S.H2O4S</chem> Components: 2 Benzenesulfonic acid, 4-(1H-imidazol-1-ylmethyl)-, sulfate (1:1) 2 References 6 Reactions 0 Suppliers	2 1328886-83-4  <chem>C20H32N4O6S2.2HO4S</chem> Components: 2 1H-imidazolium, 1,1'-(1,6-hexanediyl)bis[3-[(4-sulfonylphenyl)methyl]-, sulfate (1:1) 2 References 10 Reactions 0 Suppliers	3 1328886-81-2  <chem>C17H17N2O6S2.HO4S</chem> Components: 2 1H-imidazolium, 1,3-bis[(4-sulfonylphenyl)methyl]-, sulfate (1:1) 3 References 10 Reactions 0 Suppliers
4 1270127-82-6  <chem>C14H18N6O3</chem> 1-[4-[(1-Methyl-5-nitro-1H-imidazol-2-yl)methoxy]-2-pyridinyl]piperazine 1 Reference 5 Reactions 1 Supplier	5 1268157-06-7  <chem>C16H20N2O</chem> 4-[[[1(5)-1-Methylheptyloxy]-1,2-benzene dicarbonitrile 1 Reference 3 Reactions 1 Supplier	6 1244062-16-5  <chem>C24H31F17</chem> 1,1,1,2,2,3,3,4,4,5,5,5,6,6,7,7,8,8-Heptafluoro-9-tetracosene 1 Reference 0 Reactions 2 Suppliers
7	8	9

Search Within Results

Search for up to 3 structures within the result set.

Draw

Search

Searching for... Clear All

Remove and Edit X



Q17: 如何获取物质的旋光度?

A17: (1) 若已知物质名称、CAS 登记号或结构式等, 通过物质检索获取到物质信息后, 在物质详情页面 Experimental Properties: Optical and Scattering, 获取 optical rotatory power 旋光度信息。

Substance Detail (1 of 1)

References (7,730)

Reactions (2,949)

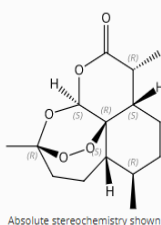
Suppliers (96)



Save

CAS Registry Number

63968-64-9



C₁₅H₂₂O₅

3,12-Epoxy-12H-pyrano[4,3-j]-1,2-benzodioxepin-10(3H)-one, octahydro-3,6,9-trimethyl-, (3R,5aS,6R,8aS,9R,12S,12aR)- (9CI, ACI)

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	282.33	-
Melting Point (Experimental)	156-157 °C	-
Boiling Point (Predicted)	389.9±42.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Experimental)	1.300 g/cm ³	-

Experimental Properties | Spectra

Other Names and Identifiers

Experimental Properties

Biological	Chemical	Density	Flow and Diffusion	Lipinski	Optical and Scattering	Structure Related	Thermal
Property							
Property		Value	Condition			Source	
Optical Rotatory Power		+87.9 deg	Solvent: 1,4-Dioxane; λ: 589.3 nm			(1) CAS	
Optical Rotatory Power		+75-+78 deg	c: 1.0 g/100mL; Solvent: Ethanol; λ: 589.3 nm; Temp: 20 °C			(2) CAS	
Optical Rotatory Power		+68.2 deg	c: 0.97 g/100mL; Solvent: Chloroform; Temp: 25 °C			(3) IC	
Optical Rotatory Power		+67.6 deg	c: 1.75 g/100mL; Solvent: Chloroform; λ: 589.3 nm; Temp: 25 °C			(4) CAS	
Optical Rotatory Power		+66.6 deg	c: 1.57 g/100mL; Solvent: Chloroform; λ: 589.3 nm; Temp: 24 °C			(4) CAS	
Optical Rotatory Power		+66.3 deg	c: 1.64 g/100mL; Solvent: Chloroform; λ: 589.3 nm; Temp: 17 °C			(5) APC	
Optical Rotatory Power		+61 deg	c: 0.2 g/100mL; Solvent: Chloroform; λ: 589.3 nm; Temp: 24 °C; Pathlength: 1 dm			(6) CAS	

Sources

(1) Yadav, J. S.; Tetrahedron Letters, (2003), 44(2), 387-389, CPlus

(2) Lapkin, Alexei A.; Journal of Natural Products, (2006), 69(11), 1653-1664, CPlus

(3) Ye, Bin; Journal of the Chemical Society, Chemical Communications, (1990)(10), 726-7, CPlus

(2) 如果不知道物质结构或名称等信息，可以根据旋光度值来检索物质。点击 Substances: 再点击 Advanced Search Field，选择 Optical and Scattering: Optical Rotatory Power (degrees)，输入旋光度值（定值或者范围值都可以）。

Searching for...

- All
- Substances**
- Reactions
- References
- Suppliers
- Biosequences
- Retrosynthesis

Substances

Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. [Learn More](#)

Enter a query...

Optical Rotatory Power (degrees) 60 to 65

Experimental values only. Examples: 1.15 | <7.53 | >150 | 9.3 to 15 | 8.9e-2

+ Add Advanced Search Field [Learn more about SciFinder® Advanced Search.](#)

(3) 如果物质详情中没有提供旋光度值信息，可通过输入主题词（如：optical rotatory dispersion and methyloxirane），获取特定物质的旋光度研究文献。

CAS SciFinder® References optical rotatory dispersion and methyloxirane

Return to Home

Based on your query, we've returned the most relevant results. Would you like to load the entire result set? [Learn about result relevance.](#) [Load More Results](#)

Filter Behavior

Filter by Exclude

Document Type

- Journal (144)
- Patent (66)
- Review (4)

Substance Role

- Reactant or Reagent (67)
- Preparation (46)
- Uses (42)
- Properties (25)
- Process (10)

[View All](#)

Language

- English (132)
- Japanese (24)
- German (23)
- Chinese (14)

References (210) Sort: Relevance View: Full Abstract

1

Solvent effect on optical rotation: a case study of methyloxirane in water

By: Mukhopadhyay, Parag; Zuber, Gerard; Goldsmith, Michael-Rock; Wipf, Peter; Beratan, David N. *ChemPhysChem* (2006), 7(12), 2483-2486 | Language: English, Database: CAPLUS and MEDLINE

Mol. dynamics simulations and time-dependent d. functional theory (TD-DFT) methods were used to determine the solvent dependence of the ORD spectrum for methyloxirane in water. The off-resonance ORD spectrum was calculated using both explicit and conductor-like screening solvent models (COSMO). TD-DFT ORD calculations at the BP86/aug-cc-pVDZ (or aug-cc-pVTZ) and B3LYP/aug-cc-pVDZ (or aug-cc-pVTZ) levels using explicit water mols. reveal excellent agreement between experiment and theory in both sign and magnitude; the COSMO model alone does not adequately describe the influence of solvent on the ORD spectrum of methyloxirane. The pos. OR at 589 nm, i.e., the [α]_D value, is attributed to the greater number of MD snapshots with water mols. on the side of the methyloxirane ring opposite to the Me group. Including explicit solute-solvent interactions is essential to describe the influence of the solvent on the OR of methyloxirane in water and MD simulations provide a suitable means to analyze and predict chiroptical solvation effects.

Full Text Substances (2) Reactions (0) Citing (77) Citation Map

2

Coupled cluster calculations of optical rotatory dispersion of (S)-methyloxirane

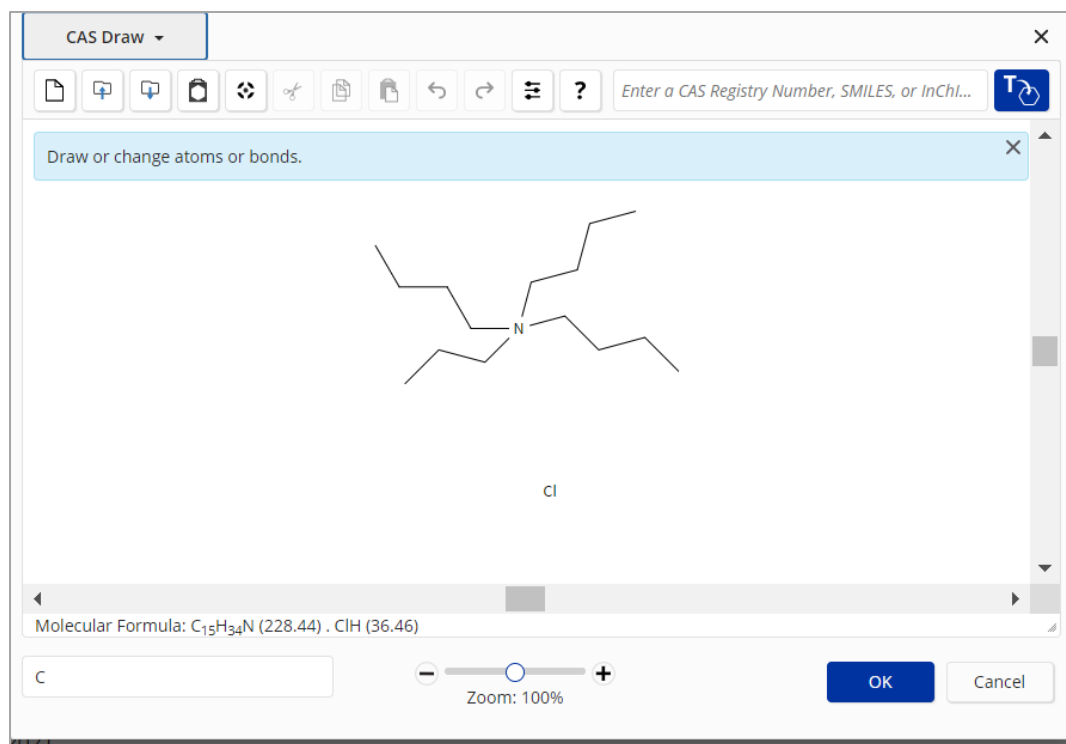
By: Tam, Mary C.; Russ, Nicholas J.; Crawford, T. Daniel *Journal of Chemical Physics* (2004), 121(8), 3550-3557 | Language: English, Database: CAPLUS and MEDLINE

Coupled cluster (CC) and d.-functional theory (DFT) calculations of optical rotation, [α]_D, have been carried out for the difficult case of (S)-methyloxirane for comparison to recently published gas-phase cavity ringdown polarimetry data. Both theor. methods are exquisitely sensitive to the choice of one-electron basis set, and diffuse functions have a particularly large impact on the computed values of [α]_D. Furthermore, both methods show a surprising sensitivity to the choice of optimized geometry, with [α]₃₅₅ values varying by as much as 15 deg dm⁻¹ (g/mL)⁻¹ among mol. structures that differ only negligibly. Although at first glance the DFT/B3LYP values of [α]₃₅₅ appear to be superior to those from CC theory, the success of DFT in this case appears to stem from a significant underestimation of the lowest (Rydberg) excitation energy in methyloxirane, resulting in a shift of the first-order pole in [α]_D (the Cotton effect) towards the exptl. chosen incident radiation lines. This leads to a fortuitous pos. shift in the value of [α]₃₅₅ towards the

Q18: 如何检索有机盐?

A18: 通过以下两种方式获取:

(1) 两个组分同时画出来，不用任何键连接



获得所需结果

CAS SciFinder[®]

Substances Enter a query...

Return to Home

Structure Match

As Drawn (1)

Substructure (6,275)

Similarity (90K)

Analyze Structure Precision

Chemscape Analysis

Visually explore structure similarity with a powerful new tool.

Learn more about Chemscape.

Create Chemscape Analysis

Filter Behavior

Filter by Exclude

Commercial Availability

Not Available (1)

Substances (1)

References Reactions Suppliers

1

1643849-82-4

$C_{15}H_{34}N.Cl$

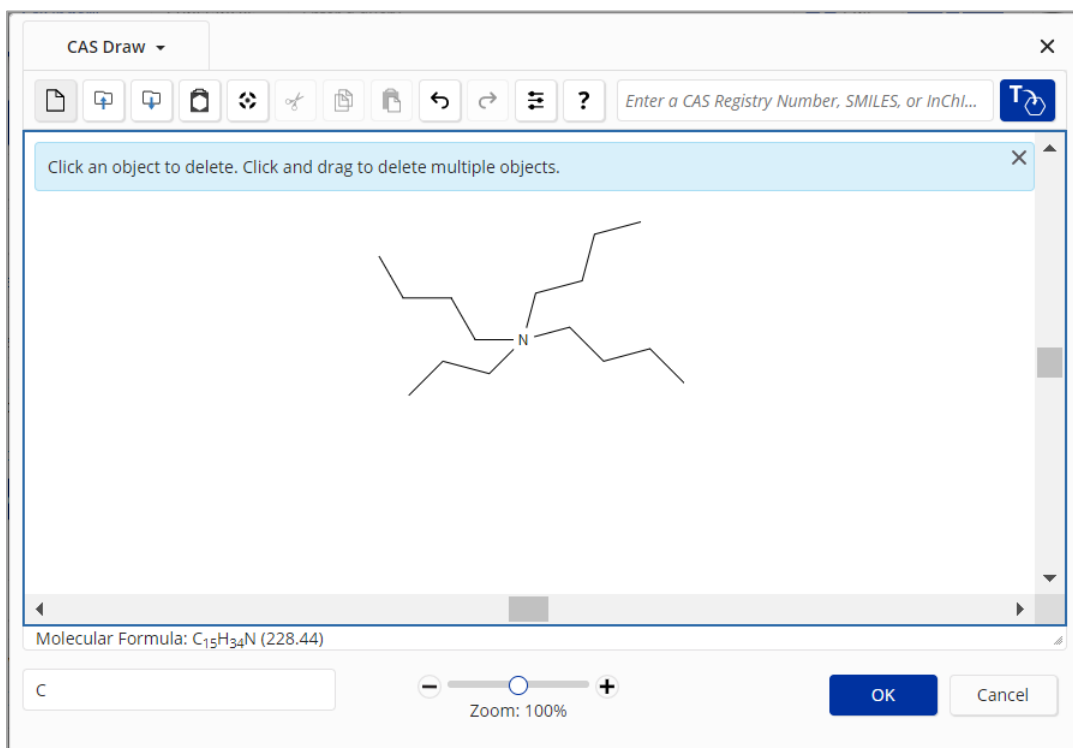
Components: 2

Component RN: 29814-64-0

1-Butanaminium, N,N-dibutyl-N-propyl-, chloride (1:1)

7 References 8 Reactions 0 Suppliers

(2) 绘制其中一个组分的结构



获得结果集

Return to Home

Structure Match

As Drawn (31)

Substructure (38K)

Similarity (159K)

Analyze Structure Precision

Chemscape Analysis

Visually explore structure similarity with a powerful new tool.

Learn more about Chemscape.

Create Chemscape Analysis

Filter Behavior

Filter by Exclude

Commercial Availability

Available (3)

Not Available (28)

Reaction Role

Substances (31)

Sort: CAS RN: Descending View: Partial

References Reactions Suppliers

1 2611535-75-0

C₁₅H₃₄N.HO

Components: 2

Component RN: 29814-64-0

1-Butanaminium, N,N-dibutyl-N-propyl-, hydroxide (1:1)

1 Reference 0 Reactions 0 Suppliers

2 2447025-59-2

C₁₅H₃₄N.C₆H₈N₃O₂

Components: 2

1 Reference 0 Reactions 0 Suppliers

3 2283341-71-7

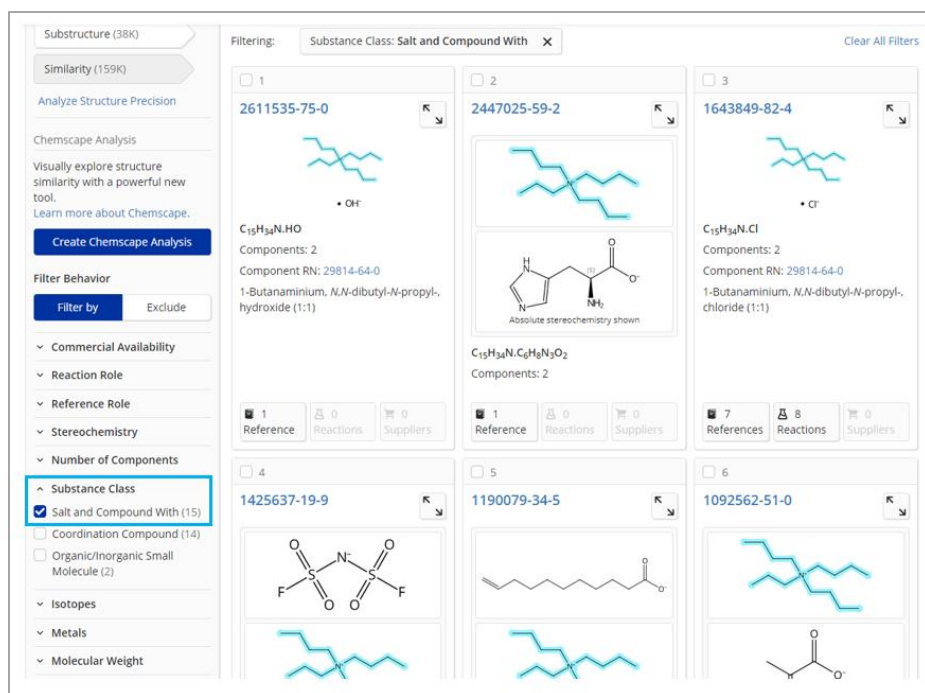
C₁₅H₃₄N.F₆P

Components: 2

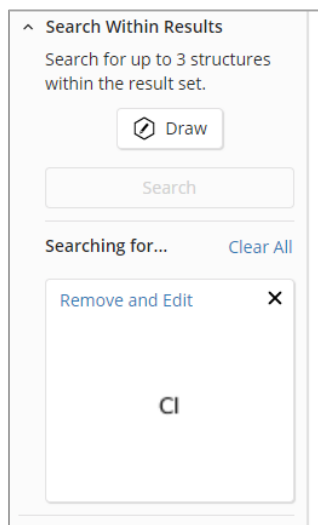
1-Butanaminium, N,N-dibutyl-N-propyl-, hexafluorophosphate(1-) (1:1)

5 References 0 Reactions 0 Suppliers

在结果集中可以用物质类别筛选出盐

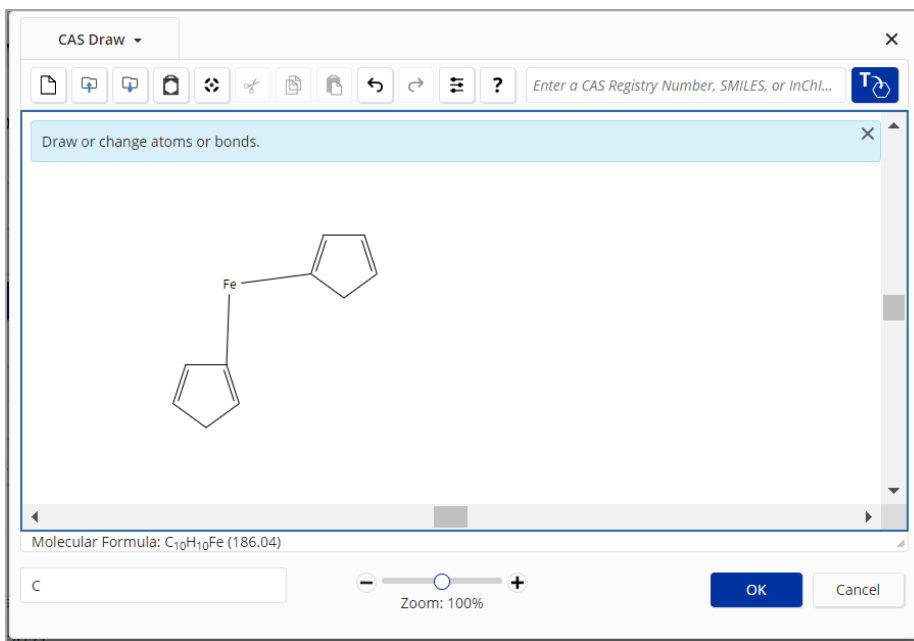


也可以在 search within results 中，通过结构筛选另一组分



Q19: 如何绘制二茂铁类金属有机化合物?

A19: 使用单键，或者不确定键，连接金属原子和配体，点击 OK。



根据需求选择锁环锁原子检索结果 (As Drawn) ;亚结构检索结果 (Substructure) 或者相似结构检索结果 (Similarity) 。

根据组分数，物质类别，是否包含同位素等筛选选项，获得结果。

反应检索

Q1: 如何获取无机盐的反应信息?

A1: 无机盐的反应信息获取策略如下:

- 1) 选择 substances, 是在检索框中输入无机盐的化学名、分子式或通过结构编辑器绘制无机盐的化学结构式 (然后上传结构式), 检索得到无机盐的物质结果集;
- 2) 在无机盐的物质结果集页面点击 Reactions, 即可得到无机盐的反应信息。可以利用反应结果集页面左侧的 Filter 对反应结果集进行筛选。

Q2: 如何获取含有羧基的离子型或配位型化合物的反应信息?

A2:

(1) 离子型化合物的反应信息获取策略: 先点击 Substances, 通过物质检索获得离子型化合物的物质信息 (可以在结构编辑器中绘制离子型化合物的结构式, 如羧基离子型化合物的结构式可绘制为 $\text{O}=\text{C}-\text{O}\cdots\text{M}$), 在获得物质信息后。通过物质结果集页面左侧的 Substance Class 筛选项将结果限定为 salt and compound with (注意区分是否需要带水合物的盐)。如果离子化合物的分子组成明确, 也可直接使用分子式检索, 比如 $\text{CH}_2\text{O}_2\cdot\text{H}_2\text{O}\cdot\text{K}$)。获得离子型化合物的物质信息后, 在物质结果集页面点击 Reactions, 即可获得其反应信息。

(2) 配位型化合物的反应信息获取策略: 可以直接将此配合物绘制在反应式中, 使用 $\cdots$ (unspecified bond) 来绘制羧基配合物, 比如 $\text{O}=\text{C}-\text{O}\cdots\text{Pd}$ 。

Q3: 如何合并来自同一篇文献的反应?

A3: 通过反应结果集页面右侧 Group: by Document 合并来自同一篇文献的反应。如下图

Q4: 在反应结果集筛选项中的 Non-Participating Functional Groups 是什么意思？

A4: Non-Participating Functional Groups 表示该官能团不参与化学反应。

Q5: CAS 会收录权利要求书中用化学通式表示的化学反应吗？

A5: 如果专利中披露的反应其起始物和（或）产物的信息很明确，CAS 就会收录该反应。

另，还可以直接通过 CAS PatentPak 下载专利全文，直接在专利原文中获取相关反应。

Q6: 在 CAS SciFinder[®] 结果集页面点击物质结构时，在弹出窗口会显示 Reactions, Synthesize 和 Start Retrosynthetic Analysis，请问这三者的区别是什么？

A6: Reactions 表示该物质参与的所有反应；Synthesize 表示该物质作为产物的反应；Start Retrosynthetic Analysis 表示生成该物质作为终产物的逆合成路线。

Q7: 在一个硝基苯还原为苯胺的还原反应中，如果原料和产物中都含有 Boc 取代基，但在反应前后不发生变化。如何检索这样的反应？

A7: 这属于片段结构的化学选择性反应检索，可分为分子间和分子内两种情况：

- (1) 如果 Boc 取代基和硝基苯/苯胺可以存在不同的结构中，即分子间选择性反应，那么可以绘制片段结构直接进行反应检索，比如反应物绘制硝基苯和 Boc 两个片段，产物也绘制为苯胺和 Boc 两个片段。
- (2) 如果 Boc 取代基和硝基苯在同一个原料中以及 Boc 和苯胺在同一个产物中（Boc 与硝基苯及苯胺间有其他连接片段），即分子内选择性反应，那么可以通过如下三步实现精准检索：

第一步：绘制硝基苯和 Boc 片段，进行物质检索。查看 Substructure 结果集，并在页面左侧 number of components 筛选项下选择 1，这样即可将硝基苯和 Boc 限定在同一个结构中。

第二步：在第一步物质结果集页面点击 Reactions，得到第一步获得的物质结果集的反应信息，并在页面左侧 Substance Role 筛选项下选择 Reactant。

第三步：点击第二步获得的反应结果集页面左下角的 Search within Results，在弹出的结构编辑器中绘制反应式，原料为硝基苯和 Boc 片段，产物为苯胺和 Boc 片段，同时使用结构编辑器左下角原子标记工具来标注原料中与硝基相连的碳原子，以及产物中与氨基相连的碳原子，同时标记原料和产物中 Boc 的羰基碳原子，从而限定原料和产物中对应的是同一个原子。选择 Substructure，点击 Find 即可获得精准的反应结果。

Q8: 如何检索酶催化羰基还原反应？比如苯乙酰还原为苯乙醇反应

A8: 有两种方法：

- 1) 直接进行反应检索。在 CAS SciFinder® 主页选择 Reactions，打开结构编辑器，绘制苯乙酰还原为苯乙醇的反应式，进行反应检索。在得到的反应结果集页面左侧 Catalyst 筛选项中查看有哪些催化剂，选择酶，将反应结果集限定为酶作为催化剂的反应。
- 2) 采用文本与反应式联用进行文献检索。在 CAS SciFinder® 主页选择 References，在输入框中输入主题词，如，“carbonyl reductase” or SSCR。再打开结构编辑器，绘制

苯乙酰还原为苯乙醇的反应式，上传反应式后，进行检索。在得到的文献结果集中，可选择左侧 As Drawn 查看锁环锁原子反应对应的文献结果集。

Q9: 已知起始物料和 API 的 CAS RN，怎么检索合成路线？

A9: 在 CAS SciFinder[®] 主页选择 Reactions，进行反应检索。打开结构编辑器，分别通过 CAS RN 将起始原料和 API 的结构导入到结构编辑器后，再添加反应箭头，进行反应检索即可获得对应的合成路线。

Q10: 如何全面准确检索合成丙烯酸的反应，同时排除由丙烯酸衍生物制备丙烯酸的合成方法？

A10: 按下述步骤进行：

- 1) 在 CAS SciFinder[®] 主页面选择 Reactions，在输入框中输入丙烯酸的 CAS 登记号 79-10-7，检索后得到丙烯酸参与的化学反应
- 2) 在反应结果集页面左侧 Filter By 筛选项 Substance Role 下勾选 Product，将结果限定为丙烯酸为产物的反应
- 3) 点击反应结果集页面左侧的 Exclude，点击 Search Within Results 下的结构编辑器，绘制丙烯酸的结构并将其限定为 Reactant，上传结构后，选择 Substructure 进行检索，即可排除丙烯酸衍生物作为底物参与的反应。

Q11: CAS SciFinder[®] 中，对于反应结果集而言，默认的排序规则是什么？

A11: 通过反应式检索得到的反应结果集，其默认的排序规则是综合考量相似分（Tanimoto Score）、反应步数、产物结构、产率等多个参数。在 Scheme 下的 Reaction Summary 中，反应按照步数、产率、公开日期和文献标题来排序。

Q12: 如何检索某一类催化剂涉及的某类型反应的机理？

A12: 用以下两种方法来进行检索：

- (1) 如果没有具体的反应式，仅知道反应类型或催化剂的类型，则建议选择 References，输入主题词进行检索。可根据需要灵活构建检索式，如：reaction mechanism and "carbon-carbon" coupling and (trivalent manganese or manganese catalyst)。在得到的

文献结果集页面，点击左侧 Filter by Concept，选择 Reaction mechanism，获取锰催化剂或三价锰催化的 C-C 偶联反应的机理研究文献。

The screenshot displays the CAS SciFinder® interface. At the top, the search bar contains the query "reaction mechanism and 'carbon-carbon' coupling and". The left sidebar, titled "Filter Behavior", shows the "Filter by" tab selected, with "Reaction mechanism" checked under the "Concept" section. The main content area, titled "References (328)", shows a list of search results. The first result is "Mechanism and Selectivity in Nickel-Catalyzed Cross-Electrophile Coupling of Aryl Halides with Alkyl Halides" by Biswas, Soumik; Weix, Daniel J. The second result is "Electrochemical, Manganese-Assisted Carbon-Carbon Bond Formation between β-Keto Esters and Silyl Enol Ethers" by Strehl, Julia; Hilt, Gerhard. The interface includes various filters and sorting options, and a "Full Text" button is visible for the first result.

(2) 如果有具体的反应式，则推荐选择主题词和结构式/反应式联用的方法进行检索。如下图所示：

CAS SciFinder[®] References Reaction mechanism and manganese catalyst

Return to Home

Structure Match

As Drawn (1)

Substructure (4)

Filter Behavior

Filter by Exclude

Document Type

Journal (3)

Review (1)

Conference (1)

References (4)

Substances Reactions Citing

Edit Drawing Remove

View: Full Abstract

1

Manganese-catalyzed synthesis of cis-β-amino acid esters through organometallic C-H activation of ketimines

By: Liu, Weiping; Zell, Daniel; John, Michael; Ackermann, Lutz

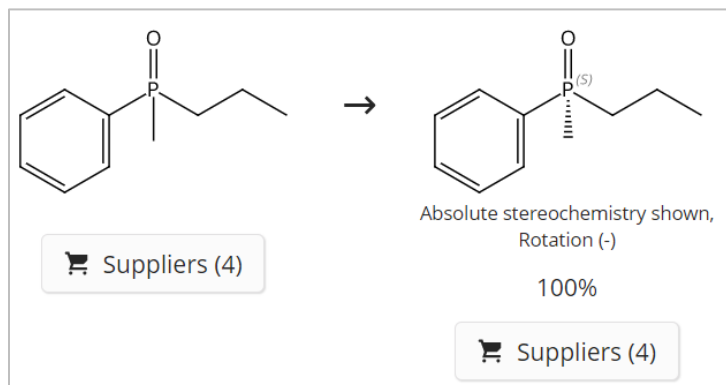
Angewandte Chemie, International Edition (2015), 54(13), 4092-4096 | Language: English, Database: CAlplus and MEDLINE

Synthesis of cis-β-amino acid esters through manganese-catalyzed C-H site- and regioselective alkene annulations of ketimines was reported. The organometallic C-H activation occurred efficiently with high functional group tolerance, delivering densely functionalized β-amino acid derivatives with ample scope.

Full Text Substances (82) Reactions (106) Citing (118) Citation Map

Q13: 含有手性结构的化合物拆分的反应怎么检索？

A13: 手性化合物的拆分反应可以直接绘制反应式进行快速检索，也可以从物质检索出发，在获取到手性结构后，再获取其反应信息。以下面的反应为例：



(a) 直接绘制上述反应式进行检索，可以快速获取各类手性拆分反应。

CAS SciFinder® Reactions Enter a query...

← Return to Home

Structure Match

As Drawn (6)

Substructure (17K)

Similarity (0)

Filter Behavior

Filter by Exclude

Yield

90-100% (1)

70-79% (2)

50-69% (1)

No Yield Available (2)

Number of Steps

1 (6)

Reactions (6)

References

Scheme 1 (2 Reactions) Steps: 1 Yield: 100%

Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)

Suppliers (3)

Suppliers (4)

Reaction Summary

Steps: 1 Yield: 100%

1.1 Reagents: (-)-trans-2,3-Bis(hydroxydiphenylmethyl)-1,4-dioxaspiro[5.4]decane
Solvents: Water; 168 h, 50 °C

Scalable Enantiomeric Separation of Dialkyl-Arylphosphine Oxides Based on Host-Guest Complexation with TADDOL-Derivatives, and their Recovery

By: Varga, Bence; et al
European Journal of Organic Chemistry (2020), 2020(12), 1840-1852

CAS SciFinder® Reactions Enter a query...

▼ Stereochemistry

▼ Reagent

▼ Solvent

▼ Commercial Availability

▼ Reaction Notes

▼ Search Within Results

Source Reference

▼ Document Type

▼ Language

▼ Publication Year

▼ Publication Name

▼ CA Section

Filter Content Report

Download filter data from this result set.

Collapse Scheme

Scheme 2 (1 Reaction) Steps: 1 Yield: 72%

Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)

Suppliers (3)

Suppliers (6)

Reaction Summary

Steps: 1 Yield: 72%

1.1 Reagents: (-)-trans-2,3-Bis(hydroxydiphenylmethyl)-1,4-dioxaspiro[5.4]decane
Solvents: Water; 168 h, 50 °C

Scalable Enantiomeric Separation of Dialkyl-Arylphosphine Oxides Based on Host-Guest Complexation with TADDOL-Derivatives, and their Recovery

By: Varga, Bence; et al
European Journal of Organic Chemistry (2020), 2020(12), 1840-1852

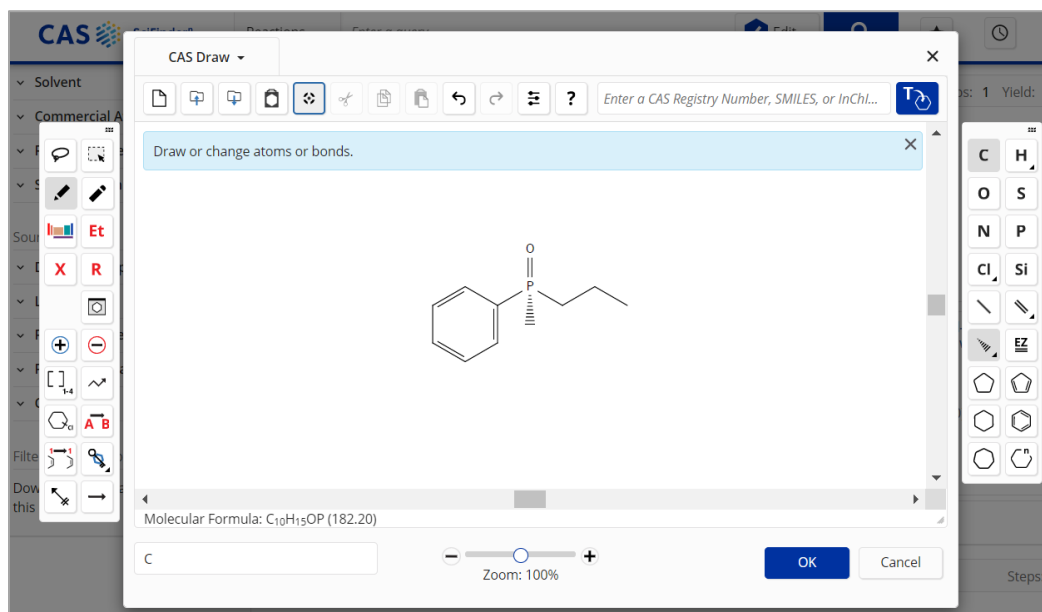
View Reaction Detail

Full Text

Collapse Scheme

(b) 如果希望获取拆分后的产物为特定手性的反应，可先检索精准手性的物质，然后再获取反应。

例如，先使用结构编辑器下方的手性键，绘制 S 构型的拆分产物，并进行物质检索；通过物质结果左侧 Stereochemistry 获取 absolute stereo match 立体构型完全匹配的物质。



CAS SciFinder[®]

Substances Enter a query...

Filtering: Stereochemistry: Absolute Stereo Match

1 2440171-74-2

2 1515-99-7

Chemical structure of (S)-1-phenylpropylphosphine oxide is shown.

$C_{10}H_{15}OP$
(1S)-Methylphenylpropylphosphine oxide

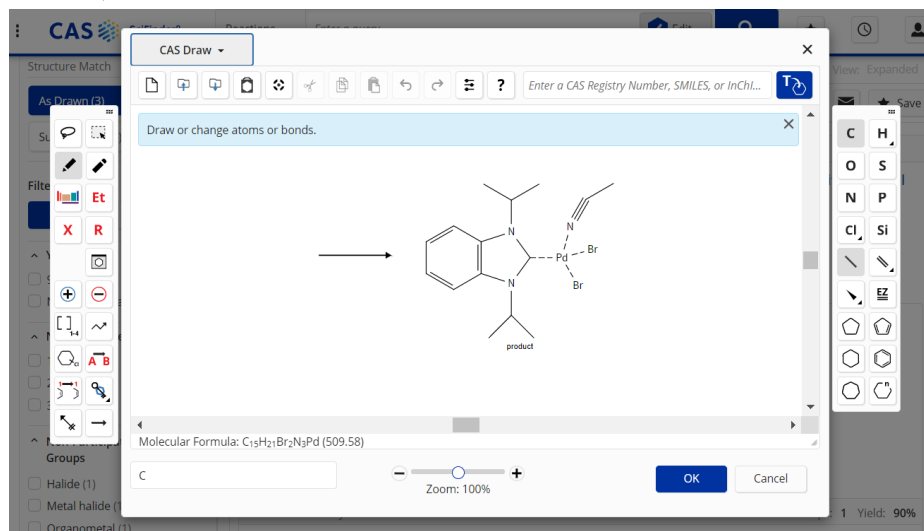
38 References 38 Reactions 4 Suppliers

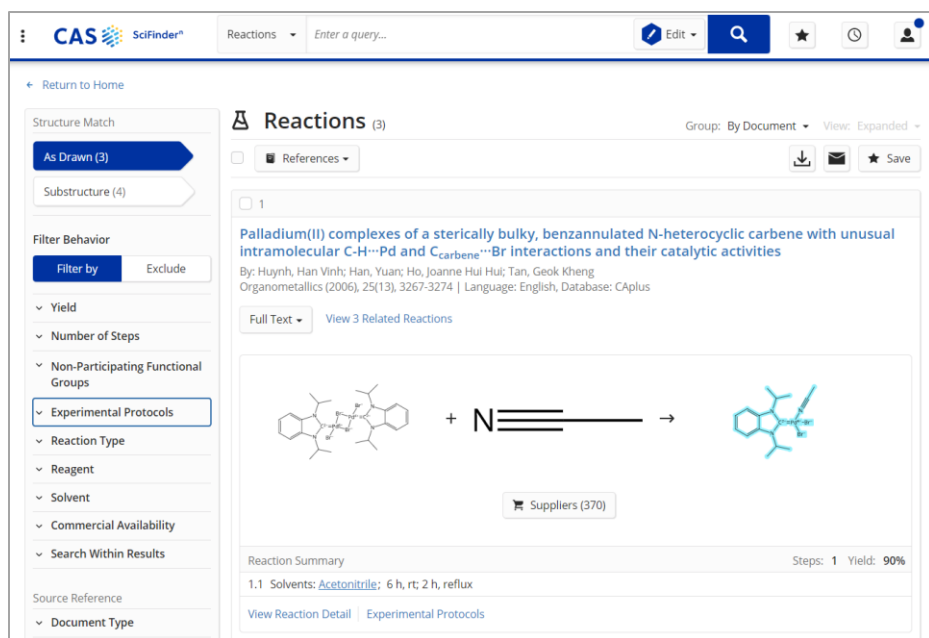
CAS RN 1515-99-7 为立体构型完全匹配的物质，点击其下方的 Reactions，获取其参与的反应。在反应结果集页面左侧 Filter by 限定 Reaction Role 为 Product, 并在 Search Within Results 中输入原料的结构，且使用反应角色标记工具标注其角色为 reactant，进行二次反应结构检索。即可获得手性精准的拆分反应。

Q14: 如何获取金属络合物的制备方法?

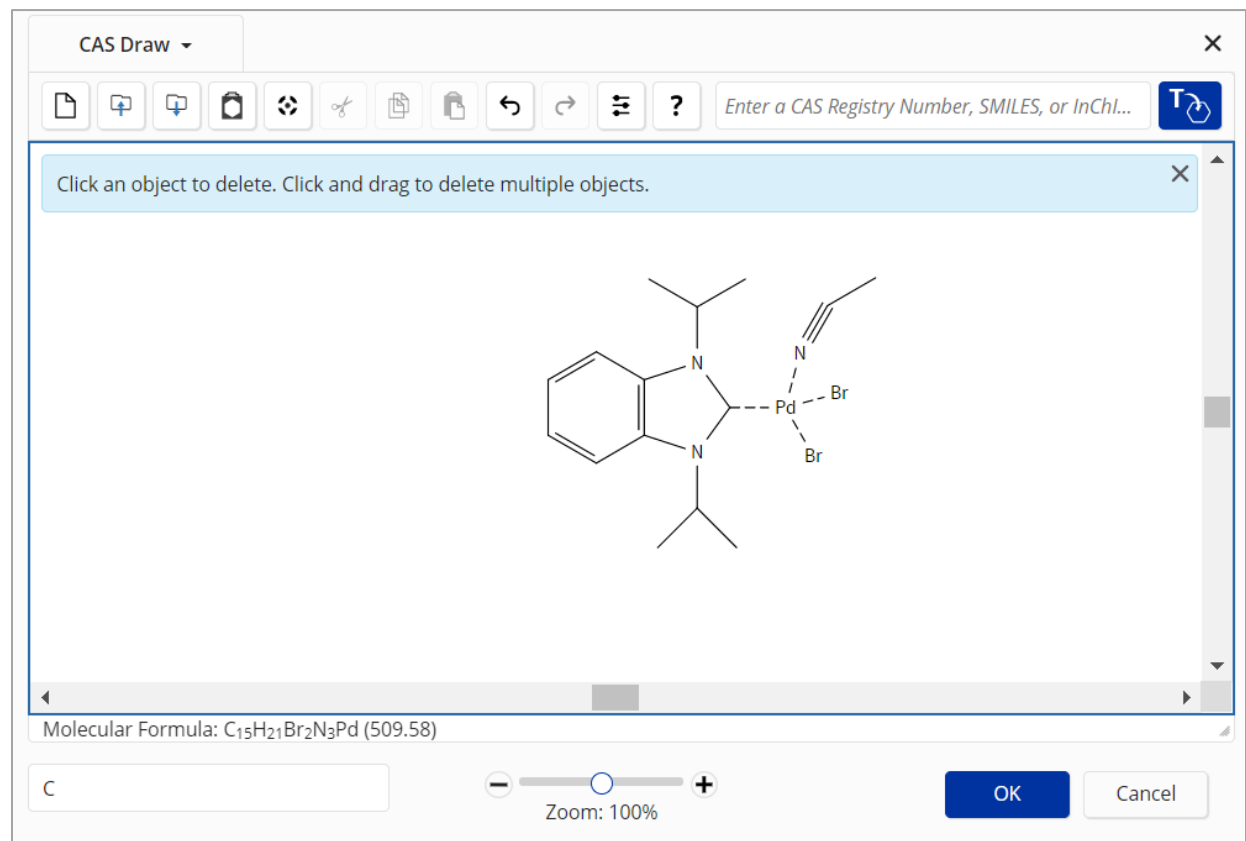
A14: 通过以下两种方式可获取金属络合物的制备方法:

1) 直接绘制反应式，进行反应检索。如下图:





- 2) 也可以通过绘制结构进行物质检索，再从物质获取其反应信息。金属络合物的绘制，可通过配体、中心原子及连接键（虚线键）来绘制即可。结构检索结果有 3 个选项 (As Drawn, Substructure, Similarity)，可根据需要查看感兴趣的物质，并根据物质获取其反应信息。如下所示：



CAS SciFinder® Substances Enter a query...

Filtering: Substance Class: Coordination Compound

Results:

- 1. 2378047-37-9 C18H23Br2N3OPd.CHCl3 Components: 2
- 2. 2378047-32-4 C19H22Br2N4Pd.CH2Cl2 Components: 2
- 3. 2378047-31-3 C18H23Br2N3OPd
- 4. 2378047-04-0
- 5. 2378046-92-3
- 6. 1350615-34-7

Q15: 如何查找 MOFs 催化的二氧化碳加氢反应?

A15: 点击 References, 输入关键词

CAS SciFinder® Saved History Account

CAS Analytical Methods® is available as part of your CAS SciFinder® experience. Identify and compare the latest published analytical methods, featuring step-by-step instructions, in pharmacology, HPLC, food analysis, natural product isolation analysis, water analysis and more.

Searching for...

- All
- Substances
- Reactions
- References
- Suppliers
- Biosequences
- Retrosynthesis

References

Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. Learn More

MOFs and CO2 hydrogenation

AND Author Name Enter last name, first name middle name. Example: Schubert, J A

+ Add Advanced Search Field Learn more about SciFinder® Advanced Search.

在文献结果集页面点击 Substances

CAS SciFinder®

References MOFs and CO₂ hydrogenation

Return to Home

Based on your query, we've returned the most relevant results. Would you like to load the entire result set? [Learn about result relevance.](#)

[Load More Results](#)

Filter Behavior

Filter by Exclude

Document Type

- ☐ Journal (5,838)
- ☐ Patent (713)
- ☐ Review (418)
- ☐ Commentary (7)
- ☐ Conference (33)

[View All](#)

Substance Role

- ☐ Process (3,913)
- ☐ Properties (1,385)
- ☐ Reactant or Reagent (926)
- ☐ Uses (658)
- ☐ Occurrence (583)

[View All](#)

Language

- ☐ English (6,049)

References (6,649)

Sort: Relevance View: Full Abstract

☐ Substances ☐ Reactions ☐ Citing

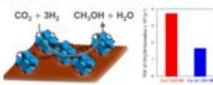
[Download](#) [Email](#) [Save](#)

1

Copper Nanocrystals Encapsulated in Zr-based Metal-Organic Frameworks for Highly Selective CO₂ Hydrogenation to Methanol

By: Rungtaweeworant, Bunyarat; Baek, Jayeon; Araujo, Joyce R.; Archanjo, Braulio S.; Choi, Kyung Min; Yaghi, Omar M.; Somorjai, Gabor A.

Nano Letters (2016), 16(12), 7645-7649 | Language: English, Database: CAlplus and MEDLINE



The activity and selectivity of Cu catalyst can be promoted by a Zr-based metal-organic framework (MOF), Zr₆O₄(OH)₄(BDC)₃ (BDC = 1,4-benzenedicarboxylate). UiO-66, to have a strong interaction with Zr oxide [Zr₆O₄(OH)₄(-CO₂)₁₂] secondary building units (SBUs) of the MOF for CO₂ hydrogenation to methanol. These interesting features are achieved by a catalyst composed of 18 nm single Cu nanocrystal (NC) encapsulated within single crystal UiO-66 (Cu@UiO-66). The performance of this catalyst construct exceeds the benchmark Cu/ZnO/Al₂O₃ catalyst and gives a steady 8-fold enhanced yield and 100% selectivity for methanol. The XPS data obtained on the surface of the catalyst show that Zr 3d binding energy is shifted toward lower oxidation state in the presence of Cu NC, suggesting that there is a strong interaction between Cu NC and Zr oxide SBUs of the MOF to make a highly active Cu catalyst.

[Full Text](#) [Substances \(25\)](#) [Reactions \(4\)](#) [Citing \(211\)](#) [Citation Map](#)

2

Ultrasml Ni nanoparticles embedded in Zr-based MOFs provide high selectivity for CO₂ hydrogenation to methane at low temperatures

By: Zhao, Zhi-Wei; Zhou, Xiao; Liu, Ya-Nan; Shen, Cong-Cong; Yuan, Cheng-Zong; Jiang, Yi-Fan; Zhao, Sheng-Jie; Ma, Liu-Bo; Cheang, Tuck-Yun; Xu, An-Wu

Catalysis Science & Technology (2018), 8(12), 3160-3165 | Language: English, Database: CAlplus

Of great significance from an energy-saving viewpoint is the direct use of CO₂ as a C1 source to mitigate the anthropogenic CO₂ emission into the earth's atm. and to produce methane that can be turned into chems. and fuels. Herein, we report the use of UiO-66 metal-organic frameworks to anchor ultrasml Ni nanoparticles (NPs), thus avoiding the sintering of Ni NPs protected by the frameworks. Transmission electron microscope images and EDX mappings show that Ni NPs with an average size of 2 nm are highly

序列检索

Q1: Biosequences 检索时，如何获取来自 CAS SciFinder[®] 的相关文献？

A1: 点击序列展示页面右边的 References，即可获得来自 SciFinder[®] 的相关文献，如下图所示。

The screenshot displays a sequence alignment interface. At the top, it shows 'Alignment Identity: 100%'. Below this, a 'Query' sequence (1-7) is aligned with a 'Subject' sequence (1-111). The alignment shows a perfect match for the first 7 positions. To the right of the alignment, it states 'Matches: 7' and 'Mismatches: 0'. Below the alignment, there is a 'View Less' link. At the bottom, there are three tabs: 'Alignment', 'Subject', and 'References'. The 'References' tab is highlighted with a red box. Below the tabs, the 'Alignment Data' is shown: 'BLAST Score: 47' and 'E-Value: 98.5942'. The alignment details are as follows:

Q	1	AASNLES	7
S	54	AASNLES	60

Q2: CAS SciFinder[®] 中 Biosequences Search 数据的来源？

A2: CAS SciFinder[®] 中 Biosequences Search 数据来自专利、期刊、NCBI 等。

Q3: 如何优先展示生物序列检索结果中 Subject Coverage%高的结果？

A3: 点击 Biosequences 结果集页面右上侧 Sort 下拉菜单，选择 Subject Coverage，序列结果将按照 Subject Coverage%从高到低排列。如下图：

CAS SciFinder® Substances Enter a query... Draw

Return to Home

Motif Search Details

Sequence Type: Nucleotide
NCBI Included: No
Query Coverage: 90%
E-Value: 10^6

Bioscape Analysis

Visually explore sequence similarity with a new tool.
Learn more about Bioscape.

Create Bioscape Analysis

Filter by

E-Value

0 to 10^6

Query Coverage %

0 to 100

Subject Coverage %

0 to 100

Biosequences (18,208)

Sort: Alignment Identity View: Expanded

References

Query Details > Seq 1: 1 UAUUGUGAGGAAUUUUUGCAA 21 View More

Alignment Identity: 100%

Query 1 21

Subject 1 23

Matches: 21
Mismatches: 0

View Less

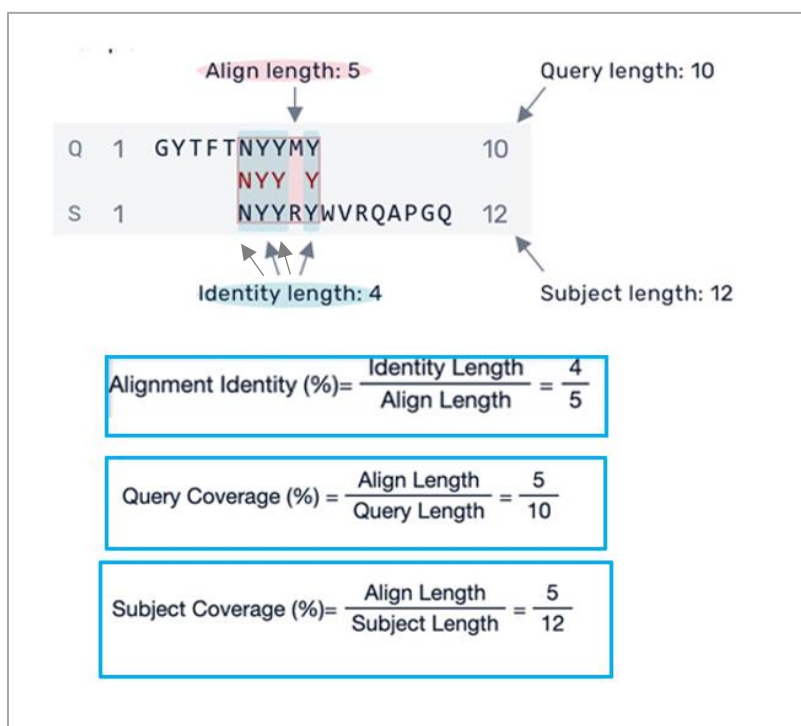
Alignment Subject References

Alignment Data
BLAST Score: 21
E-Value: 0.00319188

Q 1 TATTGTGAGG ATTTTGTCA A 21
S 1 TATTGTGAGG ATTTTGTCA A 21

Q4: Biosequences Search 中 Query Coverage%, Subject Coverage%和 Alignment identity%是如何计算的?

A4: 请参见如下示意图



Q5: 如何输入序列获取其相关信息?

A5: 点击 Biosequences, 根据检索需要, 可选择 BLAST、CDR、Motif 输入序列, 然后进行检索。

The screenshot shows the 'Biosequences' search page in CAS SciFinder. At the top, a banner reads: 'Help shape the future of scientific discovery. [Sign up to share your insights](#) on upcoming CAS SciFinder® enhancements.' Below this, the 'Searching for...' sidebar on the left lists categories: All, Substances, Reactions, References, Suppliers, Biosequences (highlighted with a blue arrow), and Retrosynthesis. The main 'Biosequences' section has a header 'Enter a protein or nucleotide string. [Learn more about Biosequence Search.](#)' and three tabs: BLAST, CDR, and Motif. The 'Motif' tab is active, showing the input sequence 'UAAUUGUGAGGAUUUUUGUCAA' in a text box. To the right of the text box is a 'Clear Search' link. On the far right, there are search options: 'Sequence Type' with buttons for 'Nucleotide' (selected) and 'Protein'; a checked checkbox for 'Include NCBI Sequences'; a 'Limit Total Sequence Results to:' dropdown set to '20000'; and a 'Start Biosequence Search' button. Below the main search area is an 'Advanced Biosequence Search' section with 'Query Coverage %' set to '90' and 'E-Value' set to '10⁶', along with a 'Reset All' link.

如果需要检索的序列长度和输入的序列一致, 可在结果左侧将 Subject Coverage 设置为 100%, 或者通过右上角 Sort: Subject Coverage 按照 Subject Coverage% 从高至低重新排序。点击结果中的 Subject 查看目标序列 (包括修饰和非修饰序列) 及对应的 CAS RN。

CAS SciFinder® Substances Enter a query... Draw Search Star Clock User

Biosequences (31)

Sort: **Subject Coverage** View: Expanded

References

Query Details > Seq 1: 1 UAUUGUGAGGAUUUUUGCAA 21 View More

Alignment Identity: 100%

Query 1 21

Subject 1 21

Matches: 21
Mismatches: 0

View Less

Alignment Subject References

Alignment Data
BLAST Score: 21
E-Value: 0.00319188

Q 1 TATTGTGAGG ATTTTGTCA A 21
|
S 21 TATTGTGAGG ATTTTGTCA A 41

Alignment Identity: 100%

Query 1 21

Filter by

E-Value
0 to 10⁶

Query Coverage %
100 to 100

Subject Coverage %
100 to 100

Alignment Identity %

将下面的 CAS RN 拷贝至 Substances 检索输入框，进行物质检索，可获得修饰序列的物质结果。

CAS SciFinder® Substances Enter a query... Draw Search Star Clock User

Alignment Identity: 100%

Query 1 21

Subject 1 21

Matches: 21
Mismatches: 0

View Less

Alignment Subject References

CAS Registry Numbers: 1929626-77-6, 1931967-48-4, 1931160-43-8, 1932562-64-5, 1931155-94-0, 2248790-61-4, 2249775-78-6

Length: 21 nt

Sequence
1 UUGACAAAAA UCCUCACAAU A

CAS SciFinder®

Substances 1929626-77-6, 1931967-48-4, 1931160-43-8, 1932562-6- X Draw

Return to Home

Filter Behavior

Filter by Exclude

Commercial Availability

Not Available (7)

Reference Role

Biological Study (7)

Properties (7)

Biological Study, Unclassified (5)

Therapeutic Use (5)

Uses (5)

Pharmacological Activity (2)

Substance Class

Isotopes

Metals

Bioactivity Indicator

Target Indicator

Search Within Results

Filter Content Report

Substances (7)

Sort: Relevance View: Partial

References Reactions Suppliers

1 2 3 4 5 6

2249775-78-6

Image Not Available

Unspecified

Nucleic Acid Sequence

Sequence Length: 21

1 Reference 0 Reactions 0 Suppliers

2248790-61-4

Image Not Available

Unspecified

RNA, (U-U-G-A-C-A-A-A-A-U-C-C-U-C-A-C-A-U-A)

Nucleic Acid Sequence

Sequence Length: 21

1 Reference 0 Reactions 0 Suppliers

1932562-64-5

Image Not Available

Unspecified

RNA, ((2'-deoxy-2'-fluoro)U-sP-Um-sP-(2'-deoxy-2'-fluoro)G-Am-(2'-deoxy-2'-fluor...

Nucleic Acid Sequence

Sequence Length: 21

1 Reference 0 Reactions 0 Suppliers

1931967-48-4

Image Not Available

Unspecified

RNA, ((2'-deoxy-2'-fluoro)U-sP-Um-sP-(2'-deoxy-2'-fluoro)G-Am-(2'-deoxy-2'-fluor...

Nucleic Acid Sequence

Sequence Length: 21

1 Reference 0 Reactions 0 Suppliers

1931160-43-8

Image Not Available

Unspecified

RNA, (U-U-G-A-C-A-A-A-A-U-C-C-U-C-A-C-A-U-A)

Nucleic Acid Sequence

Sequence Length: 21

1 Reference 0 Reactions 0 Suppliers

1931155-94-0

Image Not Available

Unspecified

RNA, ((2'-deoxy-2'-fluoro)U-sP-Um-sP-(2'-deoxy-2'-fluoro)G-Am-(2'-deoxy-2'-fluor...

Nucleic Acid Sequence

Sequence Length: 21

1 Reference 0 Reactions 0 Suppliers

点击 CAS RN 查看序列详情。

Substance Detail (1 of 13)

References (93) Reactions (0) Suppliers (0)

Download Email Save

CAS Registry Number

1420706-45-1

Image Not Available

Unspecified

RNA, (A-U-G-G-A-A-Um-A-C-U-C-U-U-G-G-U-Um-A-C-dT-dT), complex with RNA (G-Um-A-A-Cm-Cm-A-A-G-A-G-Um-A-Um-Um-Cm-Cm-A-Um-dT-dT) (1:1) (ACI)

Nucleic Acid Sequence

Sequence Length: 42 (21, 21)

12 a, 7 c, 7 g, 4 t, 12 u

multistranded (2); modified

Related Sequences (5)

Expand All | Collapse All

Other Names and Identifiers

^ Sequence Details

Sequence 1: Length 21; RNA; linear

1 auggauacu cuugguact t - -

Sequence 2: Length 21; RNA; linear

1 guaccaaga guauccaut t - -

Sequence Modifications

Type	Location	Description
modified base	strand 1 uridine-7	um
modified base	strand 1 uridine-17	um
modified base	strand 2 uridine-2	um
modified base	strand 2 cytidine-5	cm
modified base	strand 2 cytidine-6	cm
modified base	strand 2 uridine-12	um
modified base	strand 2 uridine-14	um
modified base	strand 2 uridine-15	um
modified base	strand 2 cytidine-16	cm
modified base	strand 2 cytidine-17	cm
modified base	strand 2 uridine-19	um

✓ Target Indicators

✓ Regulatory Information

✓ Additional Details

CAS Formulus

Q1: CAS Formulus 中, Formulation Designer, Formulation, Ingredient 的区别?

A1:

- Formulation Designer 根据用户选择的应用领域、用途、物理形态和活性/主要成分, 提供配方设计模板。模板中包括建议的成分(活性成分、辅料、润滑剂、分散剂等)、功能、替代的成分, 对应的管控信息链接、组分含量, 以及配方工艺等。用户可以使用模板中建议的成分, 或者手动添加其他感兴趣的成分, 最终可以导出为 Excel 格式的文件, 无缝对接配方设计工作流程。
- Formulation 是根据成分、功能、形态、用途、递送途径等来检索 Formulus 中的制剂/配方信息。
- Ingredient 是根据配方成分的化学名、CAS 号等来检索配方中的物质信息。获得的物质信息包括该物质的 CAS 号、化学名、结构式、理化性质、其常见的配伍成分、管控信息(FDA、ANMAT、DMF、EMA 等)、常见用途、配方详情和供应商信息等。

Q2: 如何通过技术手段检索制剂信息?

A2: 在 CAS SciFinder® 主页面选择 References, 在检索框中输入有关技术手段的关键词, 检索得到文献结果集。在文献结果集页面左侧 CAS Solutions 选项中勾选 CAS Formulus, 获得制剂研究的文献结果集。在文献详情页面点解 View CAS Formulus Detail, 链接至 CAS Formulus 获得制剂实验操作详情。

Formulations

Analgesic Composition: Pharmaceutical, Antiheadache Agent

[View CAS Formulus® Detail](#) 

Location: Claim 9

Purpose: pharmaceutical, antiheadache agent

Target: humans

Component	Function	Amount Reported
▼ Group: Nonnarcotic analgesics	active agent	-
▼ Group: Antiemetics	-	-
▼ Group: Central nervous system stimulants	-	-
Pharmaceutical carriers	carrier	-

Additional Components Reported in Full Text

Analgasic Composition: Pharmaceutical, Antiheadache Agent

[View CAS Formula® Detail](#)

Location: Example 16

Purpose: pharmaceutical, antiheadache agent

Target: humans, animals

CAS

Formulus

Formulations

?

🕒

Dimethyl Sulfoxide

Solvent (Predicted)

-

Mandatory

Polyoxyethylene sorbitan monooleate

auxiliary agents, diluents

10 %

Mandatory

^

Process

the powder of the analgesic activity extract of Bidens pilosa was dissolved in dimethyl sulfoxide, and then Tween-80 was used as a pharmaceutical auxiliary to prepare an analgesic pharmaceutical composition.

^

Effective Dose

Descriptor	Solvent	Details
-	-	20 mg/kg

Experimental Activity

Descriptor	Notes	Details
analgesic rate	analgesic rate of the composition was determined using aspirin group	79.7 %

View More

-	-	4 mg/kg
---	---	---------

Experimental Activity

Descriptor	Notes	Details
analgesic rate	analgesic rate of the composition was determined using chloroform low dose group	62.1 %

Q3: 如何通过结构式检索制剂信息?

A3: 按下述步骤进行:

- 1) 在 CAS SciFinder® 主页面选择 References
- 2) 打开结构编辑器、绘制结构, 检索后得到文献结果集。
- 3) 在文献结果集页面左侧 Filter by 筛选项 CAS Solutions 下勾选 Formulus, 即可获得绘制结构制剂研究的文献。
- 4) 在文献结果集页面, 点击 View CAS Formulus Detail 链接至 CAS Formulus 获取制剂研究其他更多详细信息。

CAS Analytical Methods

Q1: 如何通过已知结构, 检索相似结构的分析检测方法?

A1: 操作步骤如下:

- 1) 在 CAS SciFinderⁿ 主页选择 Substances, 然后 打开结构编辑器绘制结构, 再进行物质检索。
- 2) 在物质结果集页面左侧选择 Similarity, 获得绘制结构的相似结构结果集。点击该结果集页面顶端的 References, 获得报道这些结构的文献结果集。
- 3) 勾选文献结果集页面左侧 Substance Role 选项中的 Analytical Study, 或者 Analyte 获得与分析研究相关的文献结果集。
- 4) 或者勾选 CAS Solutions 选项下的 Analytical Methods。在文献详情页面点击 CAS Method Number 链接至 CAS Analytical Methods 获取分析方法实验操作详情。

The screenshot displays the CAS SciFinder web interface. The top navigation bar includes the CAS SciFinder logo, a search bar with the query '2010:635115', and various utility icons. The left sidebar provides metadata for the selected document, including the source (Analele Universitatii 'Ovidius' Constanta), volume (20), issue (1), and publisher (Ovidius University Press). The main content area shows the abstract of a paper by Koncsag et al. regarding petroleum cracking. Below the abstract, a table lists related CAS Analytical Methods, with the first entry 'Analysis of Decyl butyrate in Gasoline by Gas chromatography-mass spectrometry' highlighted, showing the CAS Method Number 1-135-CAS-32545.

Title	CAS Method Number
Analysis of Decyl butyrate in Gasoline by Gas chromatography-mass spectrometry	1-135-CAS-32545
Analysis of Decyl butyrate in Petroleum fractions by HPLC	1-135-CAS-38904
Analysis of Decyl butyrate in Gasoline by Gas chromatography	1-135-CAS-66100

 Analytical Methods



Gas chromatographic system, GC 6890, Agilent

Mass spectrometer, MS 5973, Agilent

Conditions

Instrument

Column: Agilent HP-5MS, 30 m long, with the inner diameter of 0.25 mm column packed with a non-polar substance, 5%-(phenyl)-methylpolysiloxane; injection volume: 1 - 2 μL /100 mL; split less mode: splitless mode from 20 °C to 300 °C; splitting rate: 10/1; flow rate: 1 mL/min; velocity: 36 cm/sec

Instructions

Preparation of gasoline samples

1. Collect petroleum fractions containing whole fluid catalytic cracking (FCC) gasoline (cut in narrower fractions (cut at 100 °C)) and the middle distillate fractions (boiling points up to 300 °C) from the thermocatalytic cracking processes in an oil refinery the coke unit and the fluid catalytic cracking (FCC).
2. Obtain the petroleum products by processing a naphthenic crude oil (crude oil C).

Gas chromatography - mass spectrometry procedure

1. Perform the analysis using a gas chromatographic system and mass spectrometer with GC 6890 and MS 5973 Agilent.
2. Perform the separation using Agilent HP-5MS, 30 m long, with the inner diameter of 0.25 mm column packed with a non-polar substance, 5%-(phenyl)-methylpolysiloxane.
3. Inject 1 - 2 μL /100 mL of sample concentration prepared in water or in methanol/water solvent (15% vol. methanol).
4. Perform the analysis in splitless mode from 20 °C to 300 °C.
5. Set the heating rate at 20 °C/min (10 minutes).
6. Set CIS mode at 45 °C (1.5 minutes), up to 300 °C, heating by 12 °C/sec (10 minutes).
7. Set the splitting rate of the column at 10/1.
8. Apply initial pressure of 7.04 psi.
9. Set the flow rate at 1 mL/min (constant) and velocity at 36 cm/sec.
10. Program the oven conditions as follows: 40 °C (2 minutes) up to 150 °C, heating rate: 10 °C/min; 6 °C/min up to 300 °C (1 minute).

其他

Q1: 我最近将 KMP alerts 从 CAS SciFinder 转移到了 CAS SciFinderⁿ。但是为什么我在 CAS SciFinderⁿ 中得到的结果比 CAS SciFinder 少呢?

A1: 在 CAS SciFinder 中用于 KMP alerts 的筛选项不会自动全部转移到 CAS SciFinderⁿ。因此您需要在 CAS SciFinderⁿ 中更改 Alert 检索策略。

Q2: 在哪里可以获得筛选检索结果的选项?

A2: 可在 CAS SciFinderⁿ 结果集页面获取所有的筛选选项。

The screenshot displays the CAS SciFinderⁿ search results page. The interface includes a search bar at the top with the text 'Enter a query...' and a 'Substances' dropdown menu. Below the search bar is a 'Filter Behavior' sidebar with various filter categories: 'Filter by', 'Exclude', 'Commercial Availability', 'Reaction Role', 'Reference Role', 'Stereochemistry', 'Number of Components', 'Substance Class', 'Isotopes', 'Metals', 'Molecular Weight', 'Experimental Property', 'Experimental Spectrum', 'Regulatory Data by Country', 'Regulatory Data by List', 'Bioactivity Indicator', and 'Search Within Results'. The main results area shows three columns of search results. Each column displays a chemical structure, a formula, and a list of components. For example, the first column shows a structure with formula (C₂₄H₁₈.C₁₀H₁₀Fe)_x and components: 2. The second column shows a structure with formula C₁₄H₂₀I₂O₂Zn.C₁₀H₁₀Fe and components: 2. The third column shows a structure with formula C₂₀H₁₄.C₁₀H₁₀Fe and components: 2. Each result also includes a 'Reference' button and a 'Reactions' button.

Q3: 选择 All 进行检索，将得到什么信息？在检索框中需要输入什么类型的信息？

A3: 当选择 All 选项时，可以在检索框中输入关键词、CAS 登记号、专利号或文献收录号 (Accession Number) 等，将获得与输入信息相关的物质、文献、反应和供应商等信息。

Q4: CAS SciFinder[®] 支持哪些操作系统和浏览器?

A4: 请参考如下建议, 同时不建议使用 360、Sogo 等浏览器。

- Windows 10: 谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高版本、火狐 52 (ESR)、IE11、Edge 15 或更高版本
- Windows 8.1: 谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高版本、火狐 52 (ESR)、IE11
- Windows 7: 谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高版本、火狐 52 (ESR)、IE11
- Mac OS X 10.13: Safari 11.x、谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高版本、火狐 52 (ESR)
- Mac OS X 10.12: Safari 10.x、谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高版本、火狐 52 (ESR)
- Mac OS X 10.11: Safari 9.3 或更高版本、谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高版本、火狐 52 (ESR)
- iOS 11: Safari 11.x、谷歌 60 或更高版本、火狐 8.0 或更高版本
- iOS 10: Safari 10.x、谷歌 60 或更高版本、火狐 8.0 或更高版本
- iOS 9: Safari 9.3、谷歌 60 或更高版本、火狐 8.0 或更高版本

- Android 7.x: 谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高
- Android 6.x: 谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高
- Android 5.x: 谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高
- Android 4.x: 谷歌 60 或更高版本、火狐 55 或更高

网络连接要求

- SSL (https)通过端口 443 连接 scifinder-n.cas.org;
- https 通过端口 80 连接 chemport.cas.org 用于获取全文链接。

其他建议和要求

- 必须启用 JavaScript 和 cookie;
- 将 https://scifinder-n.cas.org 添加为浏览器信任站点 (Trusted Site) 及非弹出阻止程序 (Pop-up blocker Exceptions lists) ;
- PDF Reader 用于导出和打印 CAS SciFinderⁿ 检索结果及其他信息。Adobe Reader 可用于 Mac 或 Windows 计算机。Mac OS X 提供免费浏览器 Preview。