SciFinder®

Essential content. Proven results.™

SciFinder Web使用介绍

CAS中国代表处
培训专员：祁晶晶

2011.10.13

CAS | SciFinder®

CAS is a division of the American Chemical Society

提纲

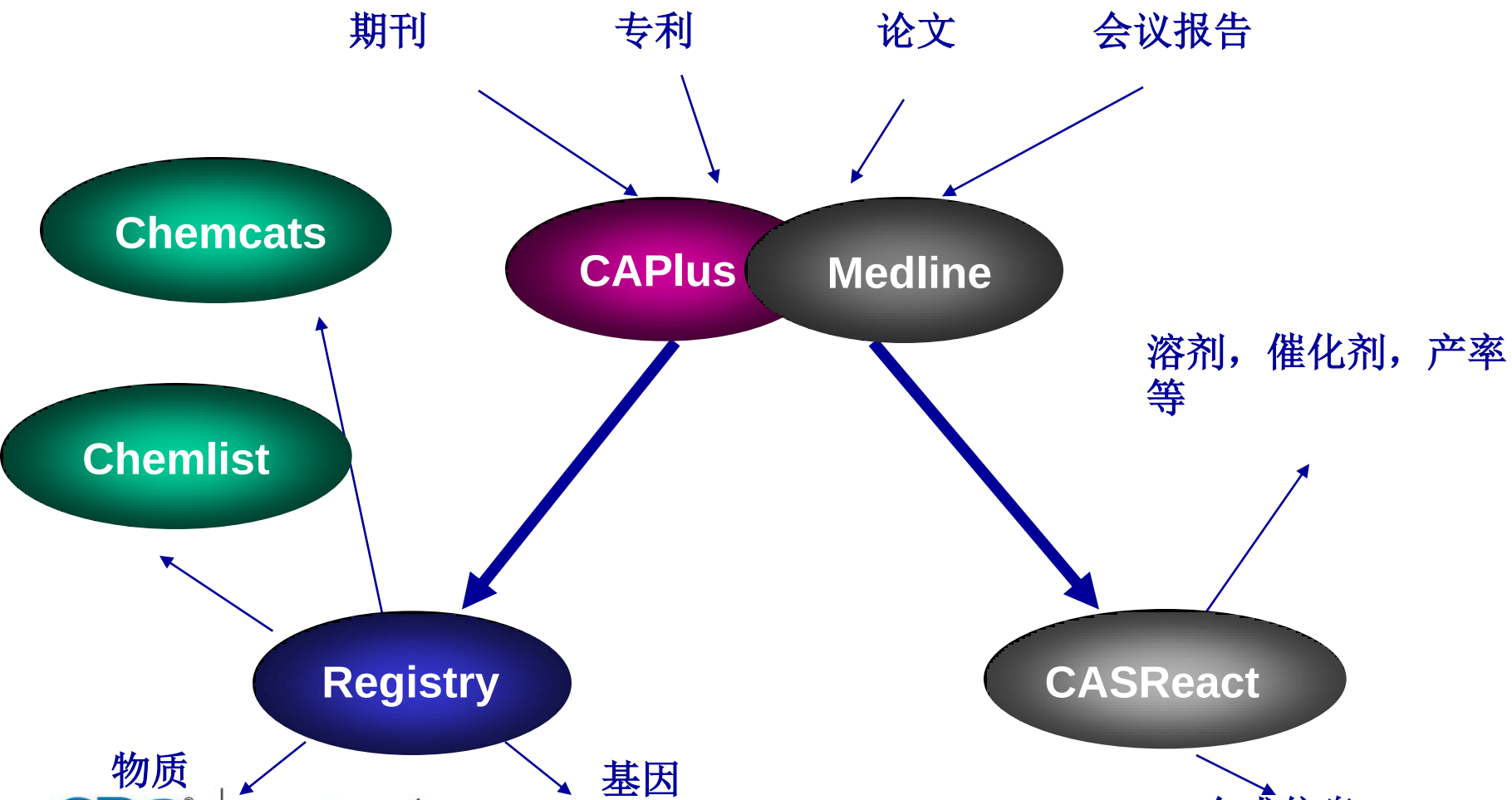
- 介绍
  - SciFinder 中的内容
  - SciFinder 的注册和登陆
- **SciFinder 中的检索和后处理**
  - SciFinder 中的文献检索
  - SciFinder 中的物质检索
  - SciFinder 中的Markush检索
  - SciFinder 中的反应检索
- **SciFinder 特色功能**
- **SciFinder网络资源平台**

美国化学文摘社—Chemical Abstract Service

- 创建于1907年
- ACS的分支机构
- 密切关注，索引和提炼着全球化学相关的文献和专利
- 最早创立了《化学文摘》
- 总部坐落于俄亥俄州的哥伦布市

www.cas.org

SciFinder中的内容



CAS is a division of the American Chemical Society

SciFinder中的内容—文献数据库

- CAPlus（Pre 1907－）

  覆盖化学相关众多学科领域的参考文献。
  3400万条文献信息。
  上万种期刊和61个专利发行机构的专利（含专利族）。
  会议录、技术报告、图书、学位论文、评论、会议摘要
  日更新4500条以上的记录

- Medline

  美国国立医学图书馆出品
  生命科学医学相关
  毒理，病理学报告
  期刊、临床报告

SciFinder中的内容—反应数据库

- CAS React（1840－）

  源自61专利机构和上万种期刊

  包含有机、有机金属、无机、生化反应。

  3650万单步，多步反应。

  1400万制备信息

  每周更新3-5万条单步、多步反应。

SciFinder中的内容—物质数据库

- Registry （Pre 1957－）

  世界上最大的物质数据库
  6300万个物质、序列
  无机物、有机物、聚合物、混合物、合金、核酸蛋白质序列等
  所有具有CAS No 物质
  日更新1.2万个物质

- ChemList

  查询备案/管控化学信息的工具。

- Chemcats

  4000万化学物质提供商的联系信息
  包含价格情况、运送方式、质量等级等信息。

提纲

- 介绍
  - SciFinder 中的内容
  - SciFinder 的注册和登陆
- **SciFinder 中的检索和后处理**
  - SciFinder 中的文献检索
  - SciFinder 中的物质检索
  - SciFinder 中的Markush检索
  - SciFinder 中的反应检索
- **SciFinder 特色功能**
- **SciFinder网络资源平台**

SciFinder的注册和登陆

SciFinder Web的系统要求

Windows用户支持IE 8.x或者FireFox 2.x

Mac 用户支持 Firefox 和 Safari

Java 安装（初次使用结构时自动安装）

在图书馆相关页面上找到SciFinder Web注册用的网址

东南大学SFweb注册地址

东南大學圖書館
SOUTHEAST UNIVERSITY LIBRARIES

繁體版 旧版入口 馆长信箱

首页 | 新闻资讯 | 查找资料 | 电子资源 | 服务指南 | 本馆概况 | 咨询中心 | 网站地图 | Mylibrary

电子资源

- 版权公告
- 电子期刊导航(试用)
- 电子图书
- 数字资源/数据库
- 学术站点推荐
- 试用数据库
- 培训课件
- 本校最新WoS收录
- 教参信息系统
- 校外访问

首页 >> 电子资源 >> 数字资源/数据库 >> SciFinder Scholar（美国《化学文摘》网络版）

数字资源 / 数据库

SciFinder Scholar（美国《化学文摘》网络版）

◆ https://scifinder.cas.org

◆ 客户端安装说明

访问方式 美国《化学文摘》简介 SciFinder Scholar各数据库简介 检索方法 参考文献

访问方式

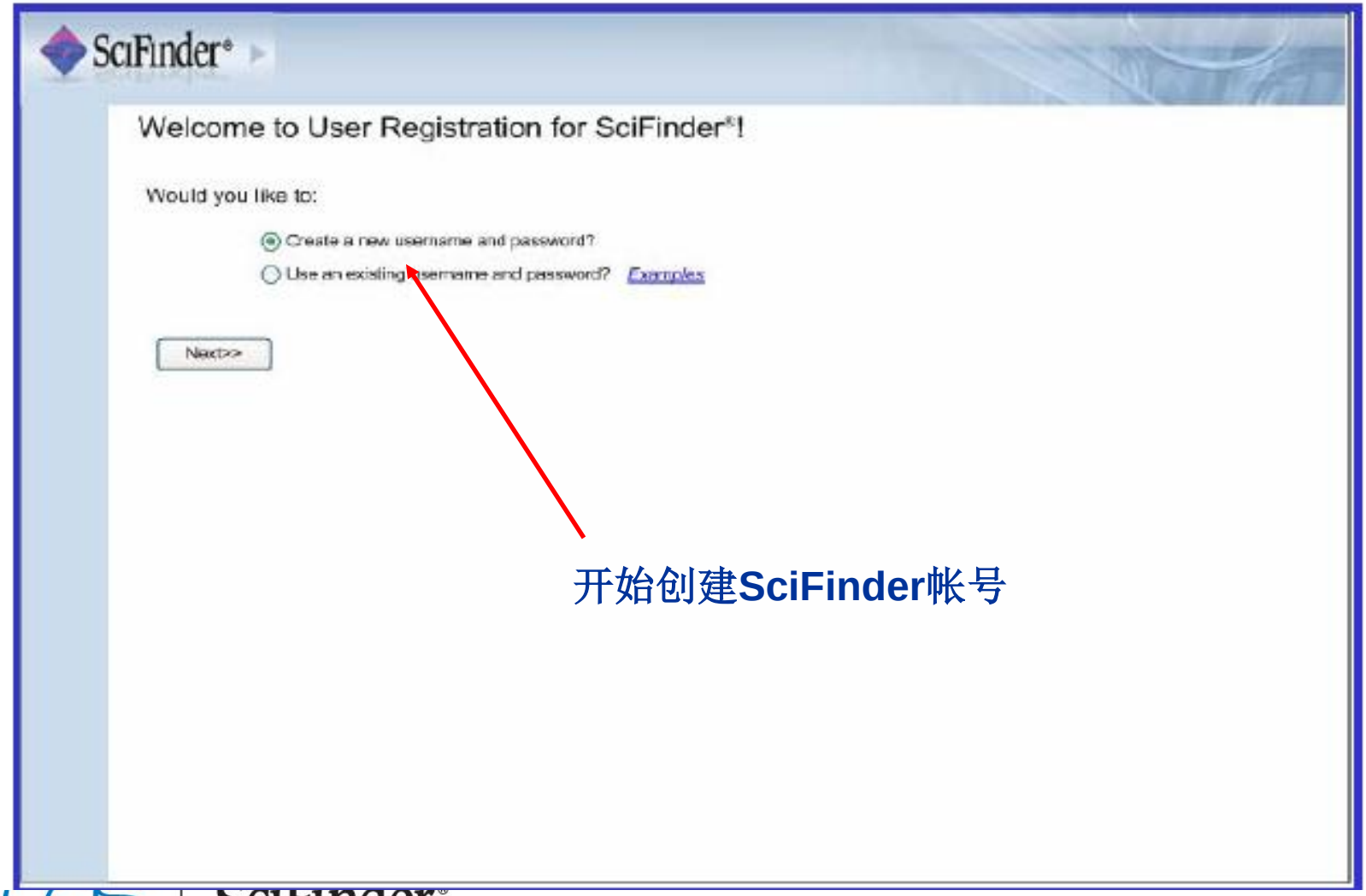
与其他数据库不同，提供两种访问方式：

1、Web访问方式：不用下载客户端软件，直接通过网页形式访问。首次使用时必须以东南大学邮件地址（含有"seu.edu.cn"）注册（注册后您将拥有自己的SciFinder用户名和密码），注册网址为https://scifinder.cas.org/registration/index.html?corpKey=406031ACX86F35055X2E430FB61E6E...，按照提示操作即可，以后直接通过https://scifinder.cas.org，输入用户名、密码访问数据库。

2、客户端访问方式：需要安装客户端软件，通过软件访问数据库。不支持Windows 7操作系统。安装说明请访问http://58.192.117.2/ca。

以上两种版本所检索的数据库内容完全一致，功能上略有差别。SciFinder客户端版本功能不再增加，SciFinder Web版本功能会不断...

点击URL创建SciFinder账号

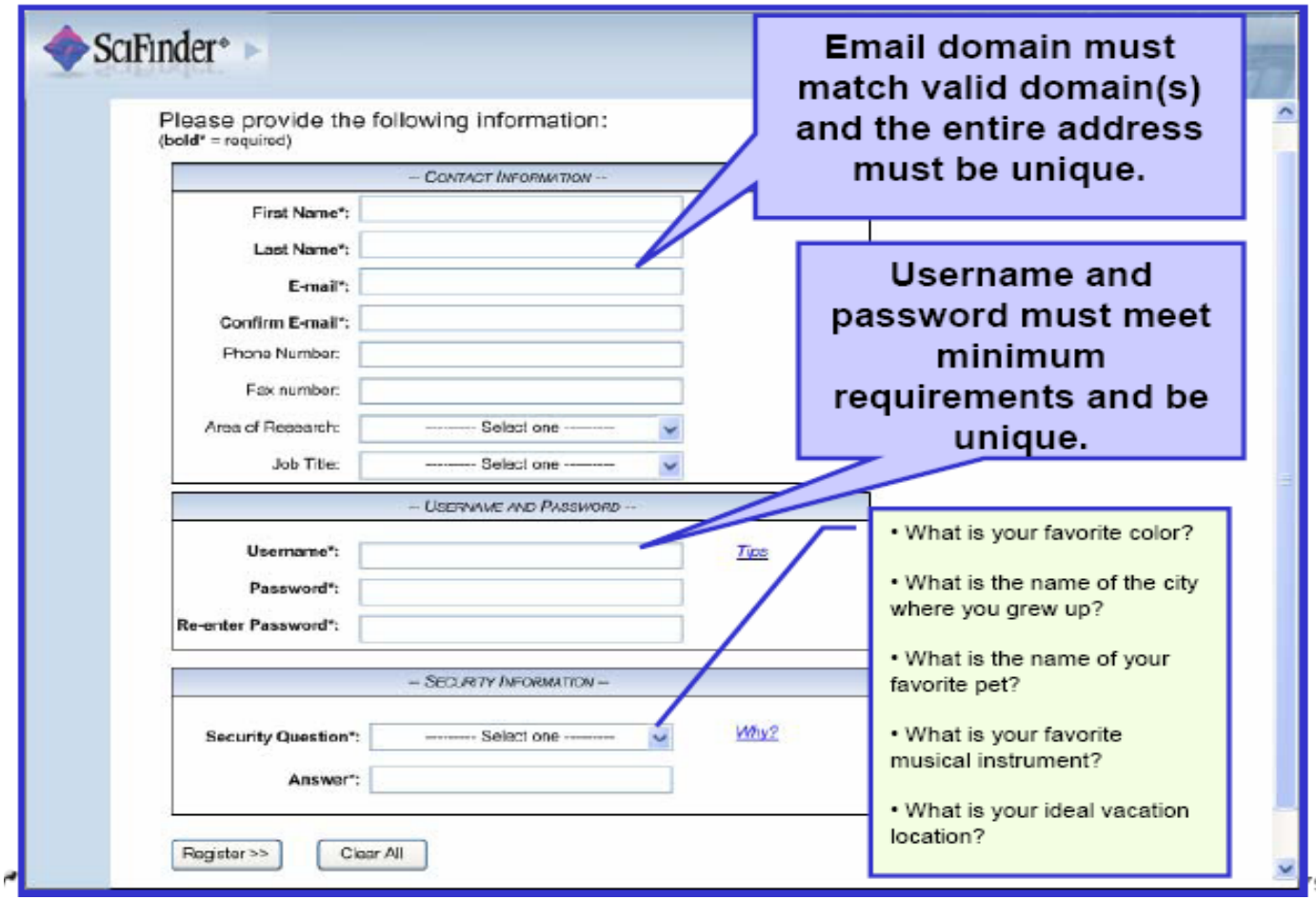


开始创建SciFinder帐号

每个用户必须输入各自信息

用大学后缀名的邮箱注册

seu.edu.cn



设置用户名及密码注意事项

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 @、#、%、&、*）

使用这个链接登陆SciFinder

Http://scifinder.cas.org

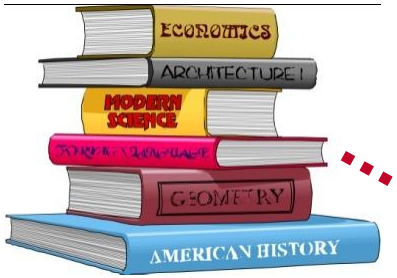
Http://origin-scifinder.cas.org

SciFinder登陆界面

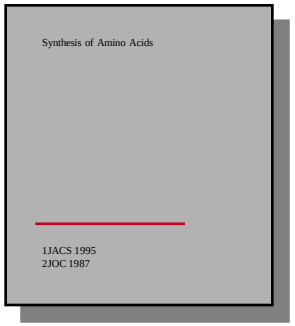
SciFinder登陆后主界面

文献，物质，反应检索入口，默认文献检索入口

课题研究中各个阶段的信息需求



问题？选题：现有的研究条件、背景、能力。。



课题申报、开题论证：国内外研究前景。。

信息检索、分析、精选。。。。

实验：实验方法，活性评价方法。。。。

课题总结：期刊、专利、会议报告。。

CAS | SciFinder®

CAS is a division of the American Chemical Society

www.cas.org

提纲

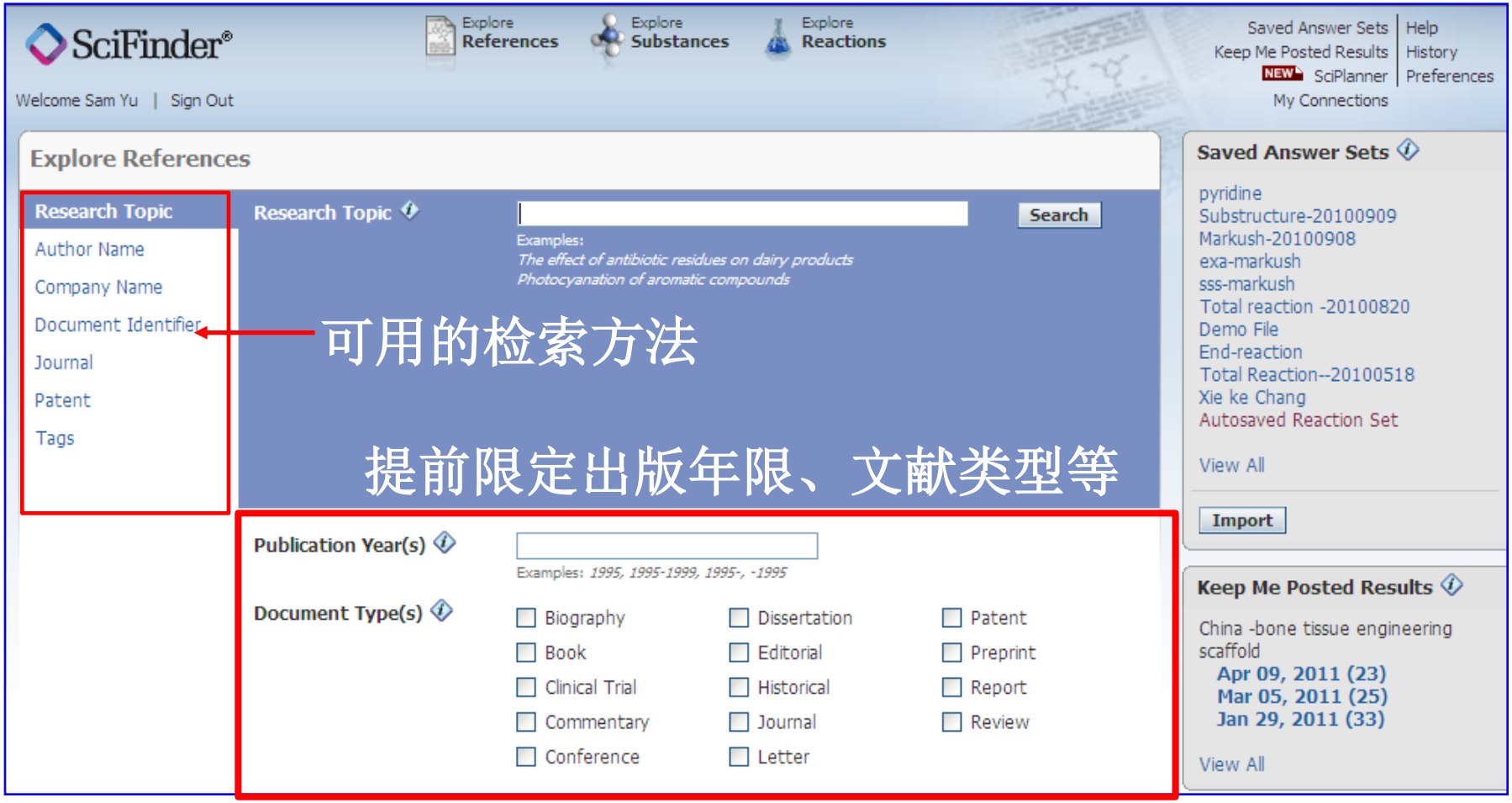
- 介绍
  - SciFinder 中的内容
  - SciFinder 的注册和登陆
- **SciFinder 中的检索和后处理**
  - SciFinder 中的文献检索
  - SciFinder 中的物质检索
  - SciFinder 中的Markush检索
  - SciFinder 中的反应检索
- **SciFinder 特色功能**
- **SciFinder网络资源平台**

选题、课题申报、开题论证。。。。。

- 课题的国际发展现状是什么？（有哪些国家参与？发展趋势是什么？）
- 课题的国内外的研究成果有哪些？（研究方法是什么？存在的问题？）
- 课题在国内的核心研究人员是谁？核心研究机构有哪些？
- 本课题的研究都涉及到哪些交叉学科？（是否有重大研究进展?)
- 课题未来可能的应用领域涉及哪些方面？
- 本课题的研究适合在哪些期刊投稿？

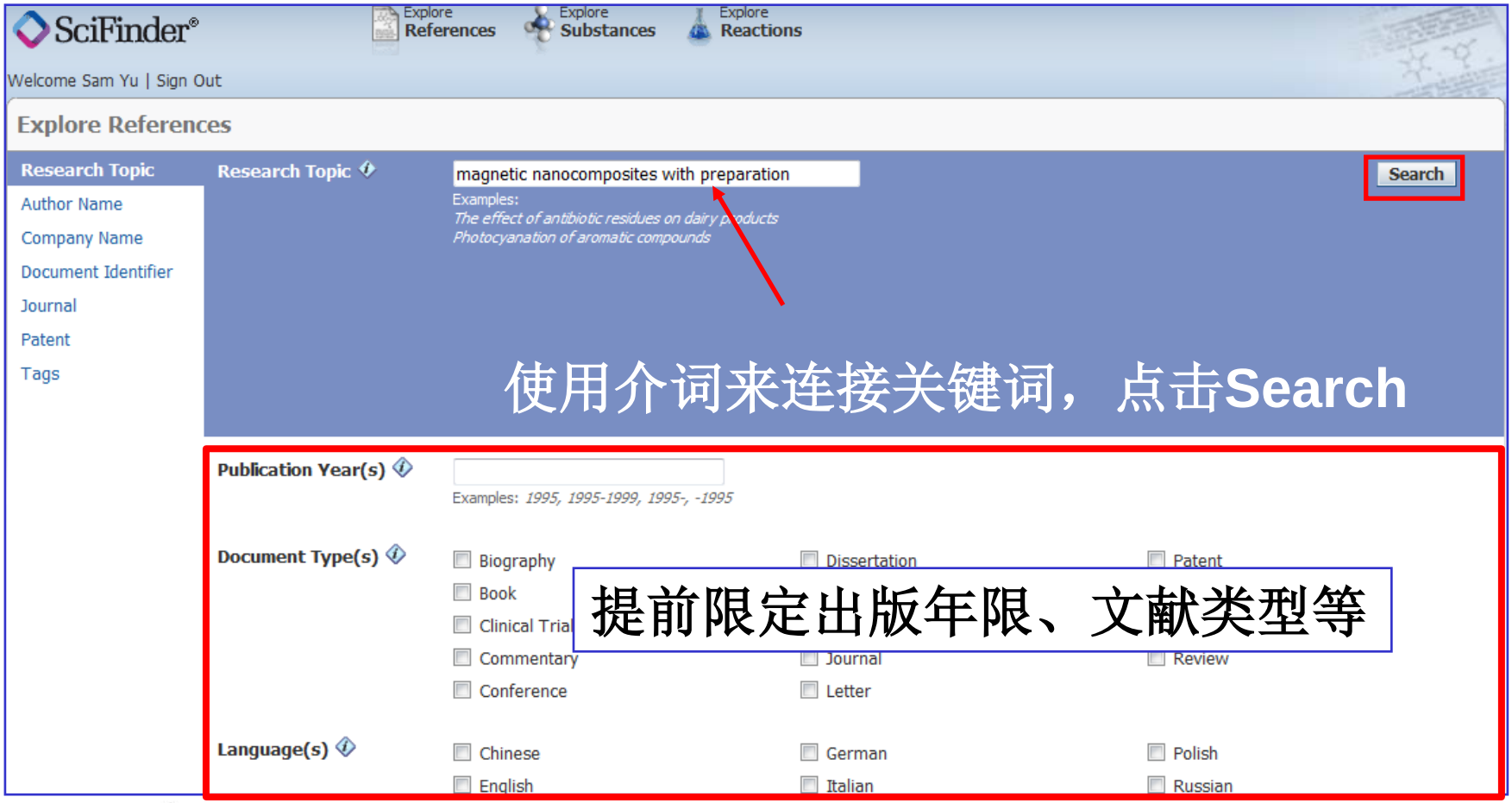
Scifinder中强大的文献检索功能

Explore References 文献检索

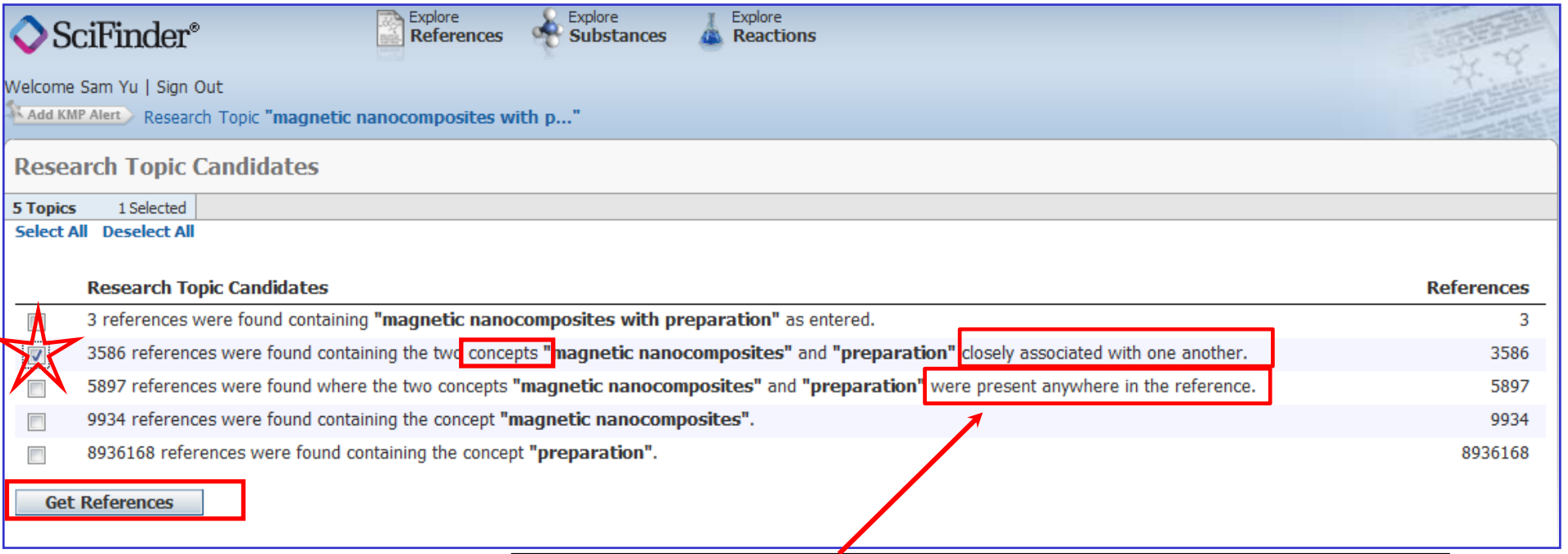


SciFinder中的文献检索

磁性纳米复合材料的制备**magnetic nanocomposites 、 preparation**



主题检索的候选项



“Concept”表示做了同意词的扩展

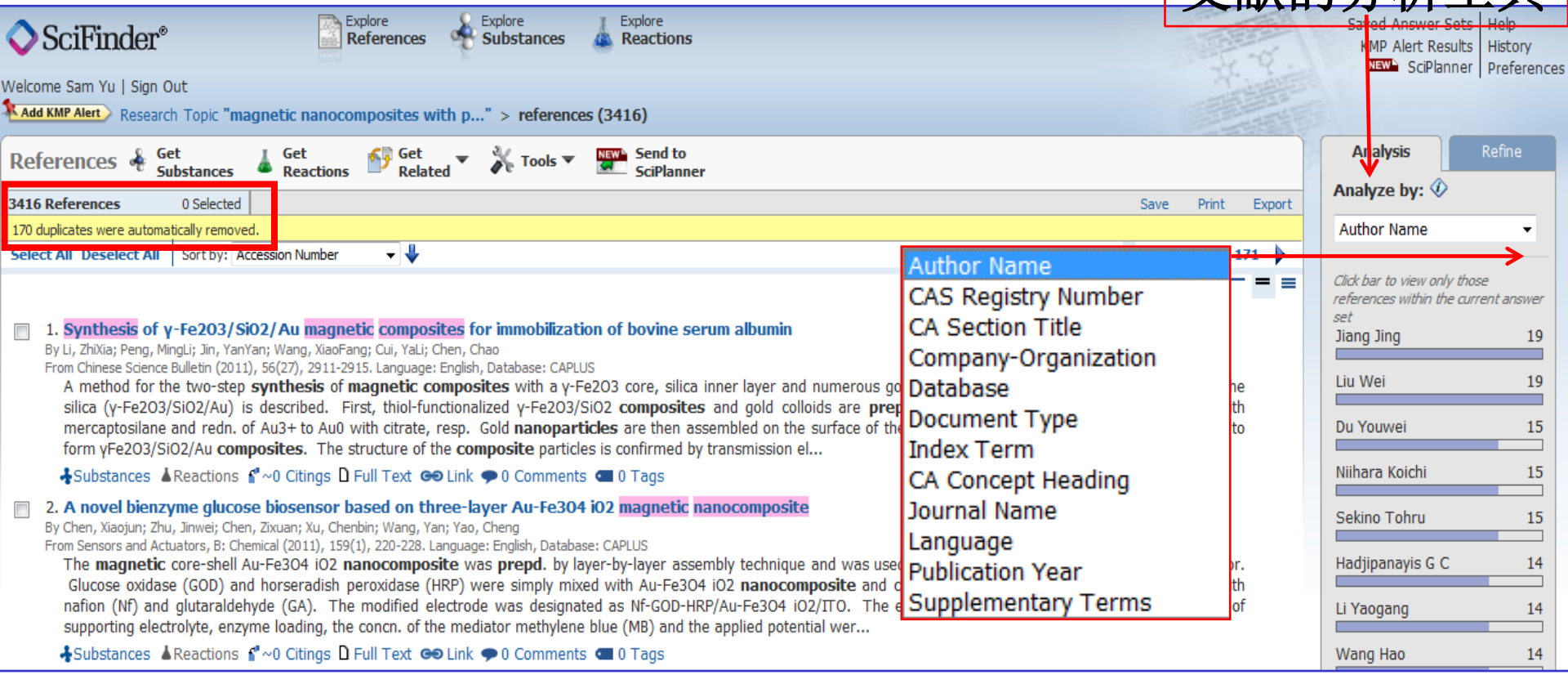
“Closely associated with one another”
表示同时出现在一个句子中

“were present anywhere in the reference”

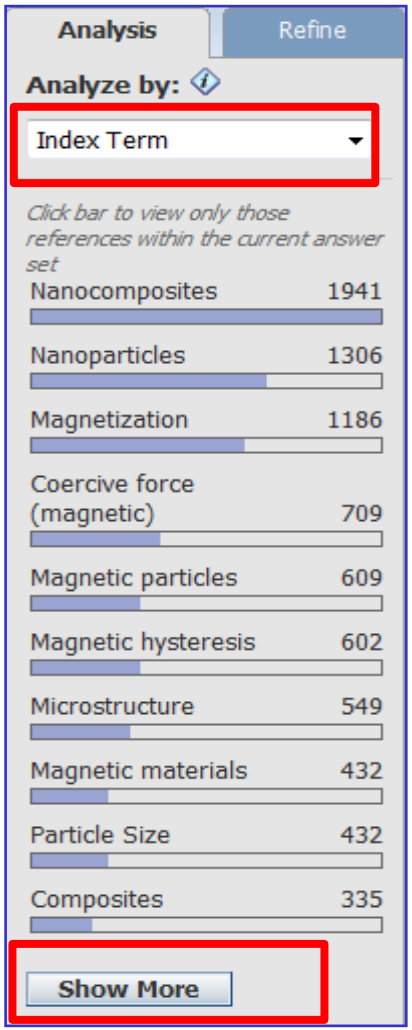
表示同时出现在一段话中

如何在大量文献中发现最关键信息？

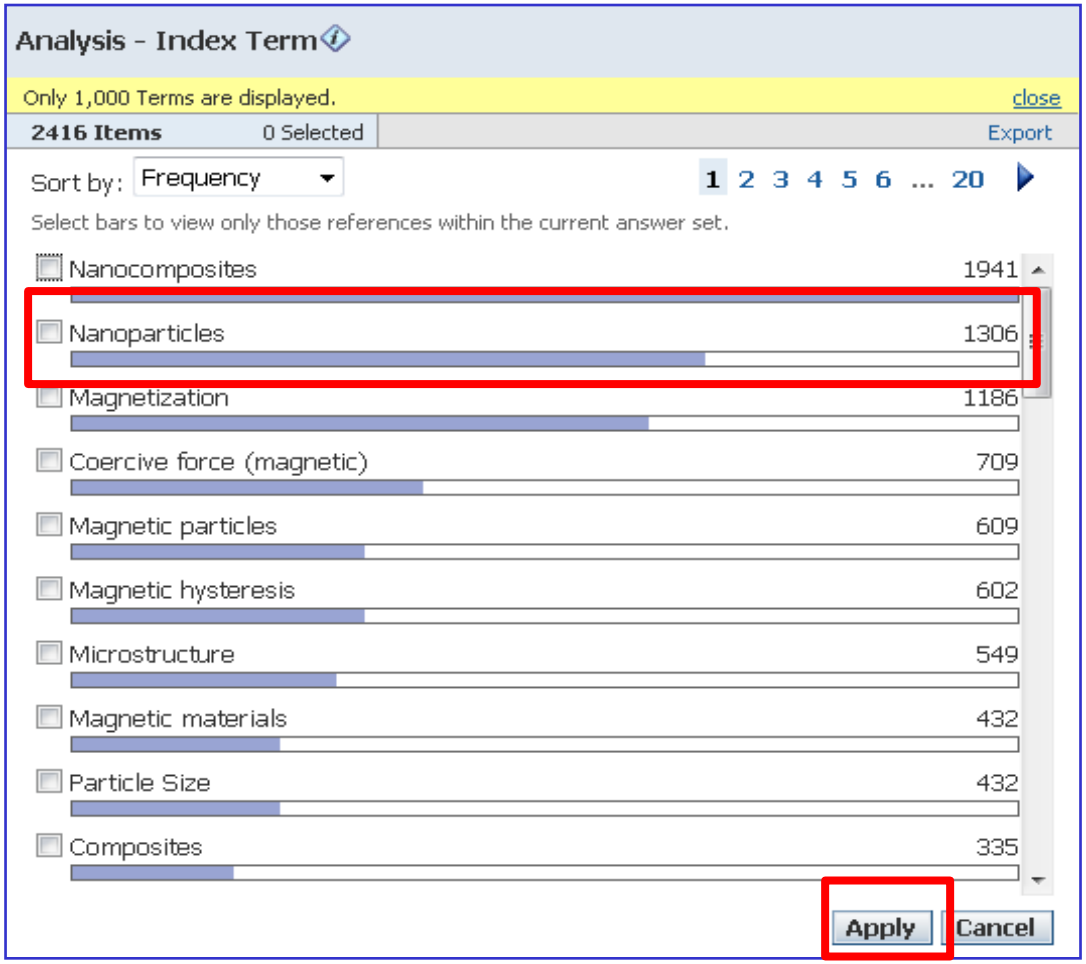
文献的分析工具



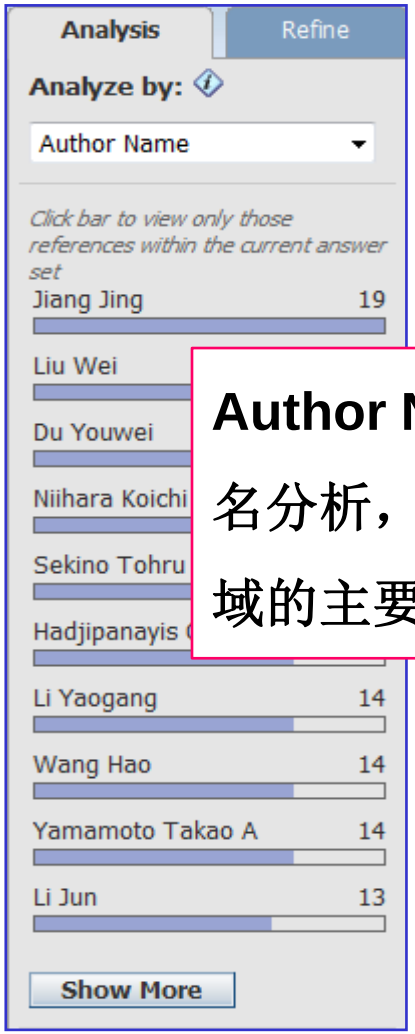
Index Term——索引词分析



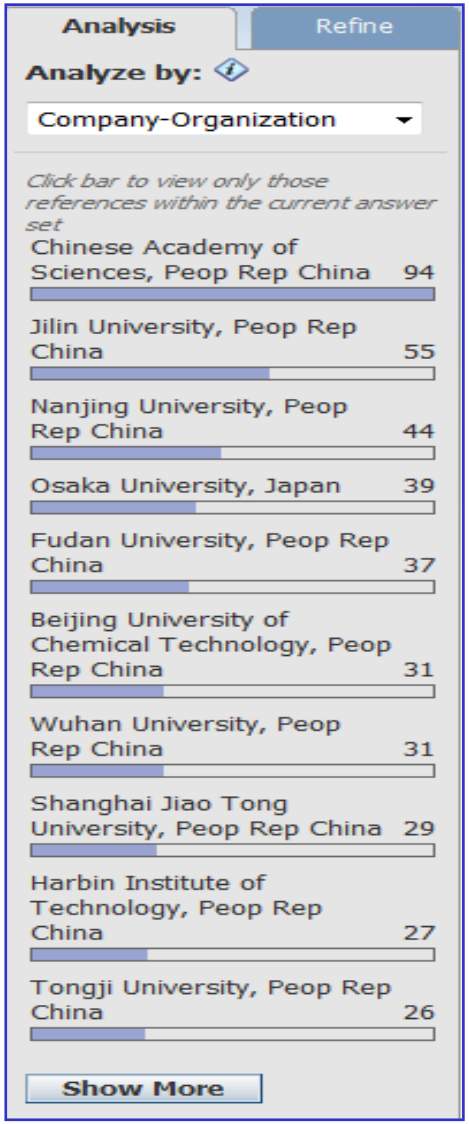
Index Term帮助分析文献中重要的概念



本课题的核心研究人员是谁？核心研究机构有哪些？



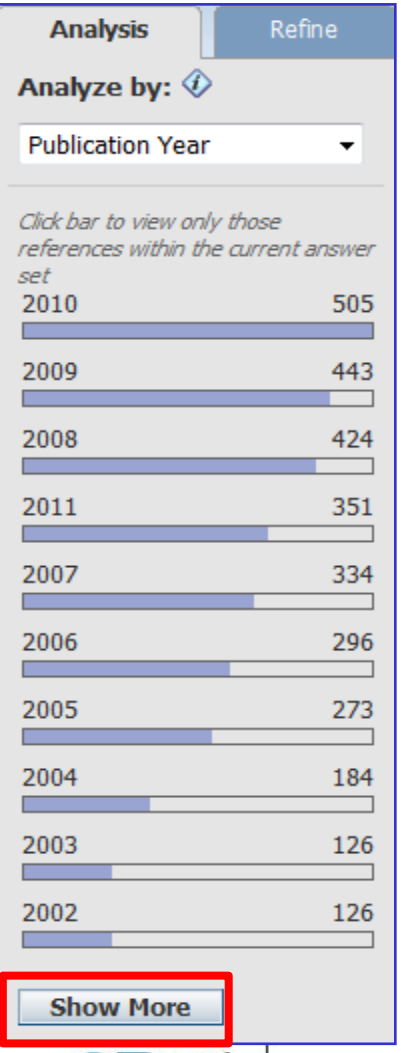
Author Name 作者名分析，了解本领域的主要研究人员



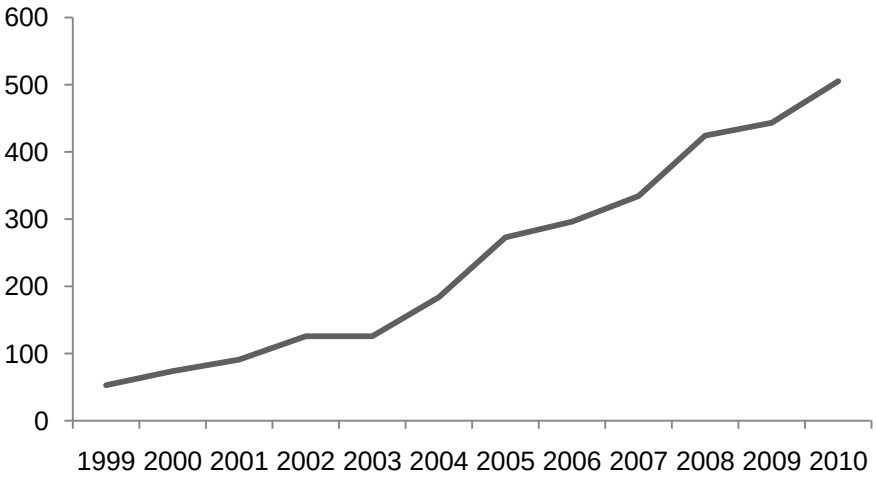
Company-Organization 组织机构分析，了解本领域的核心研究机构，有哪些国际机构参与，寻找国际合作伙伴

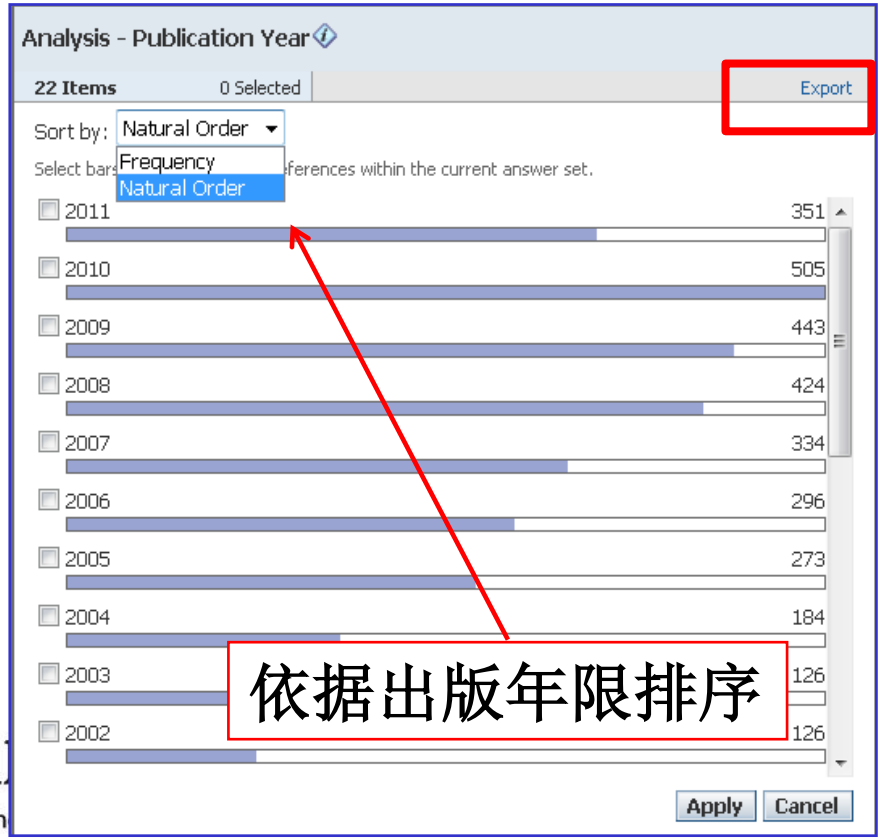
CAS SciFinder®
CAS is a division of the American Chemical Society

课题的发展趋势是什么？



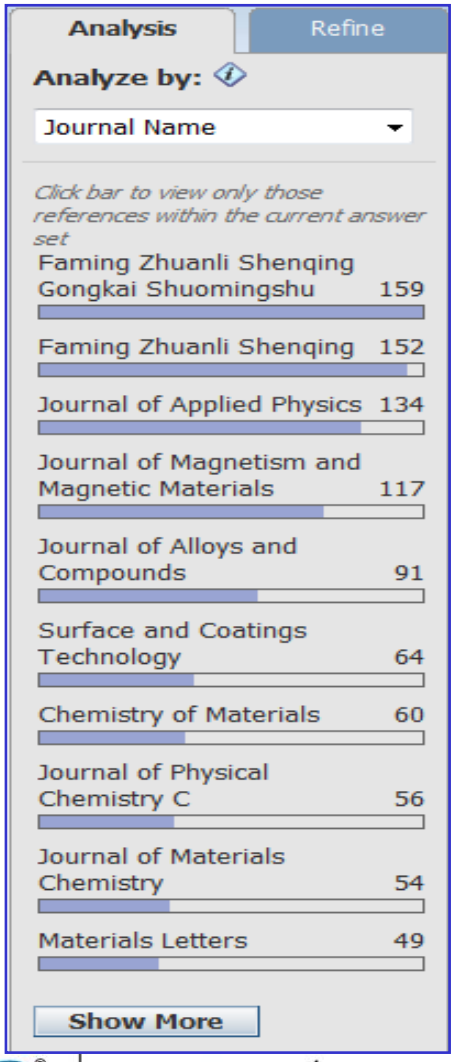
出版年限分析，了解近年来的发展趋势





依据出版年限排序

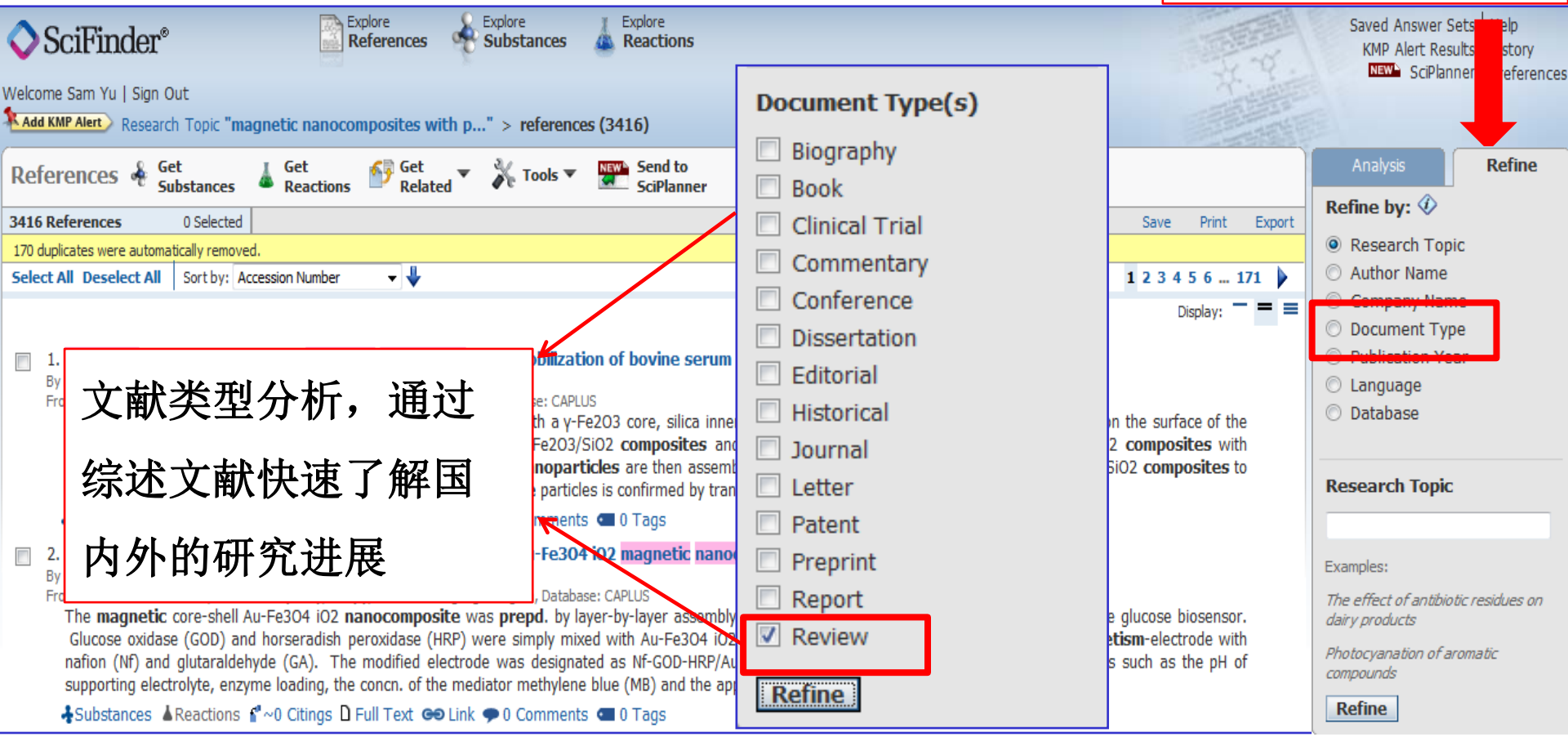
本课题的研究适合在哪些期刊投稿？



Journal Name 期刊名分析，了解本课题研究成果发表在哪些期刊、会议、报告上

如何获得课题相关的综述文献？

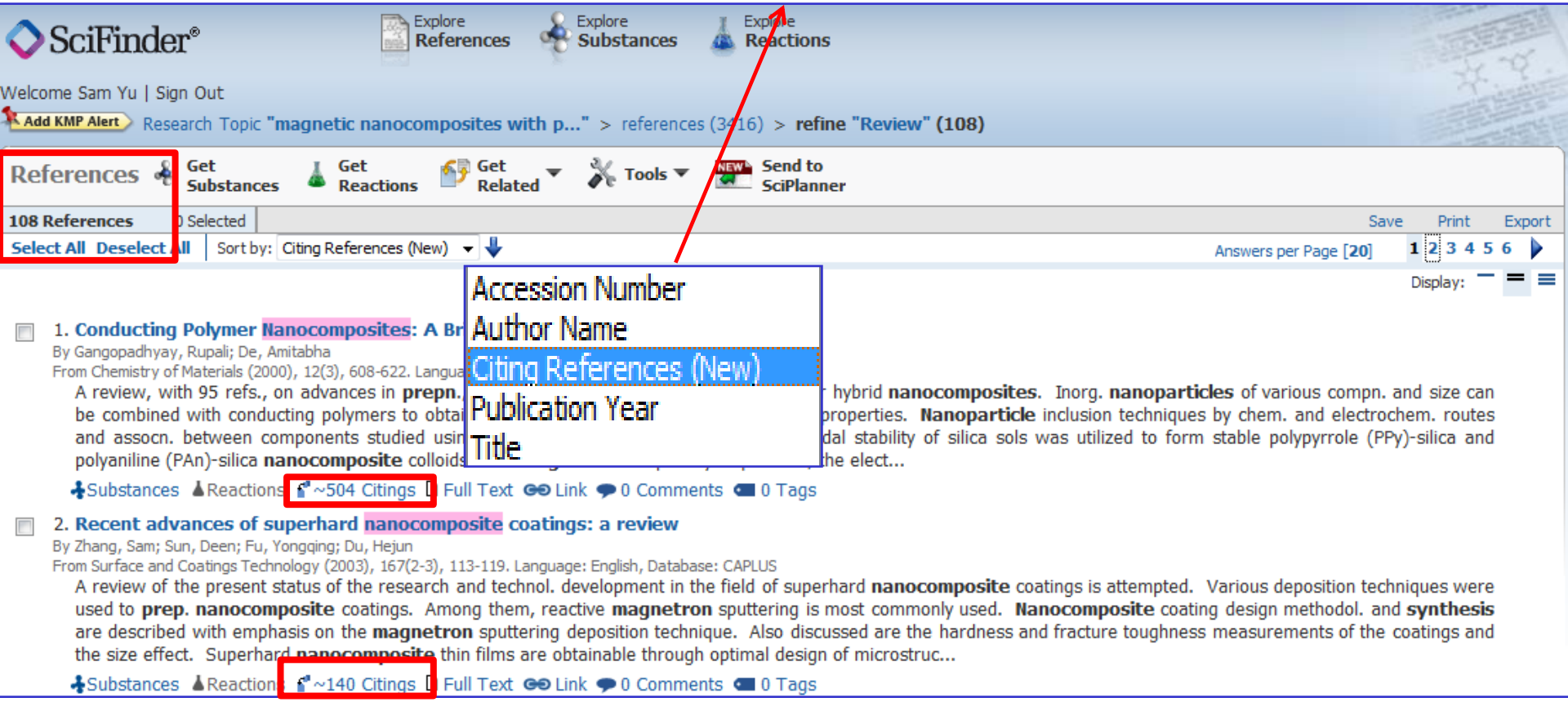
Refine限定工具



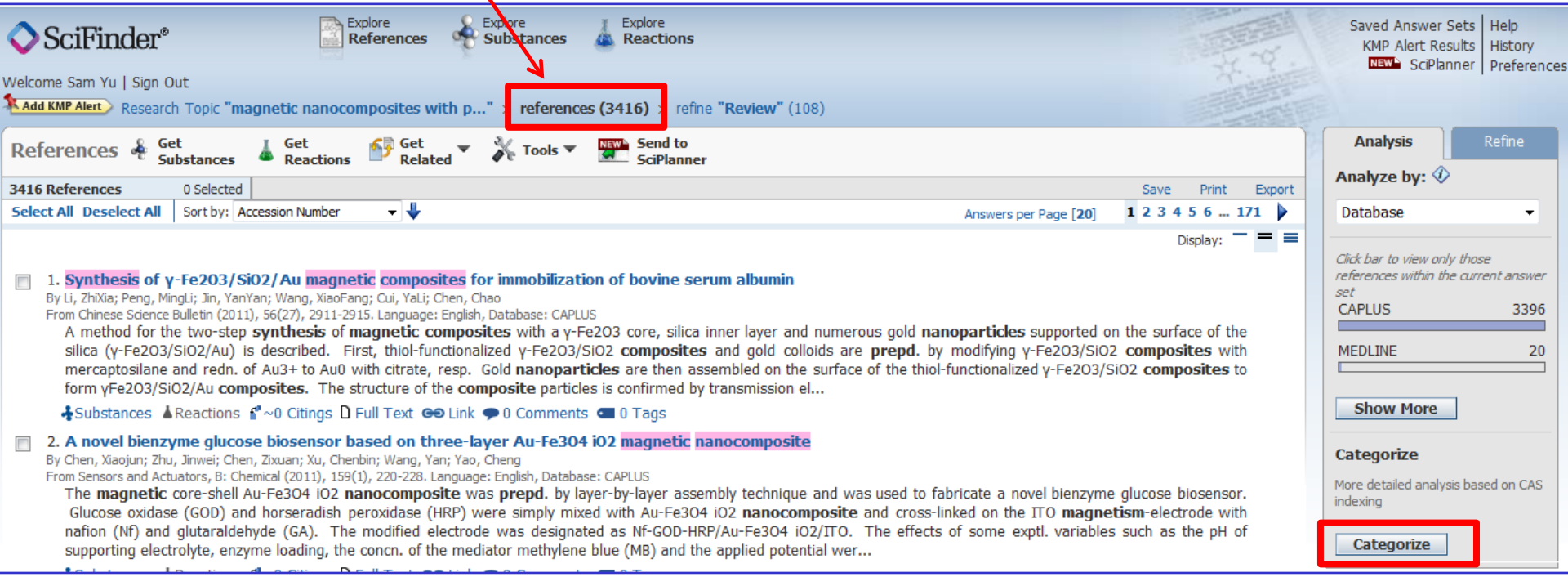
文献类型分析，通过综述文献快速了解国内外的研究进展

综述文献

Citing references 引文索引
获得最有参考价值的文献



历史导航——返回原先的检索界面



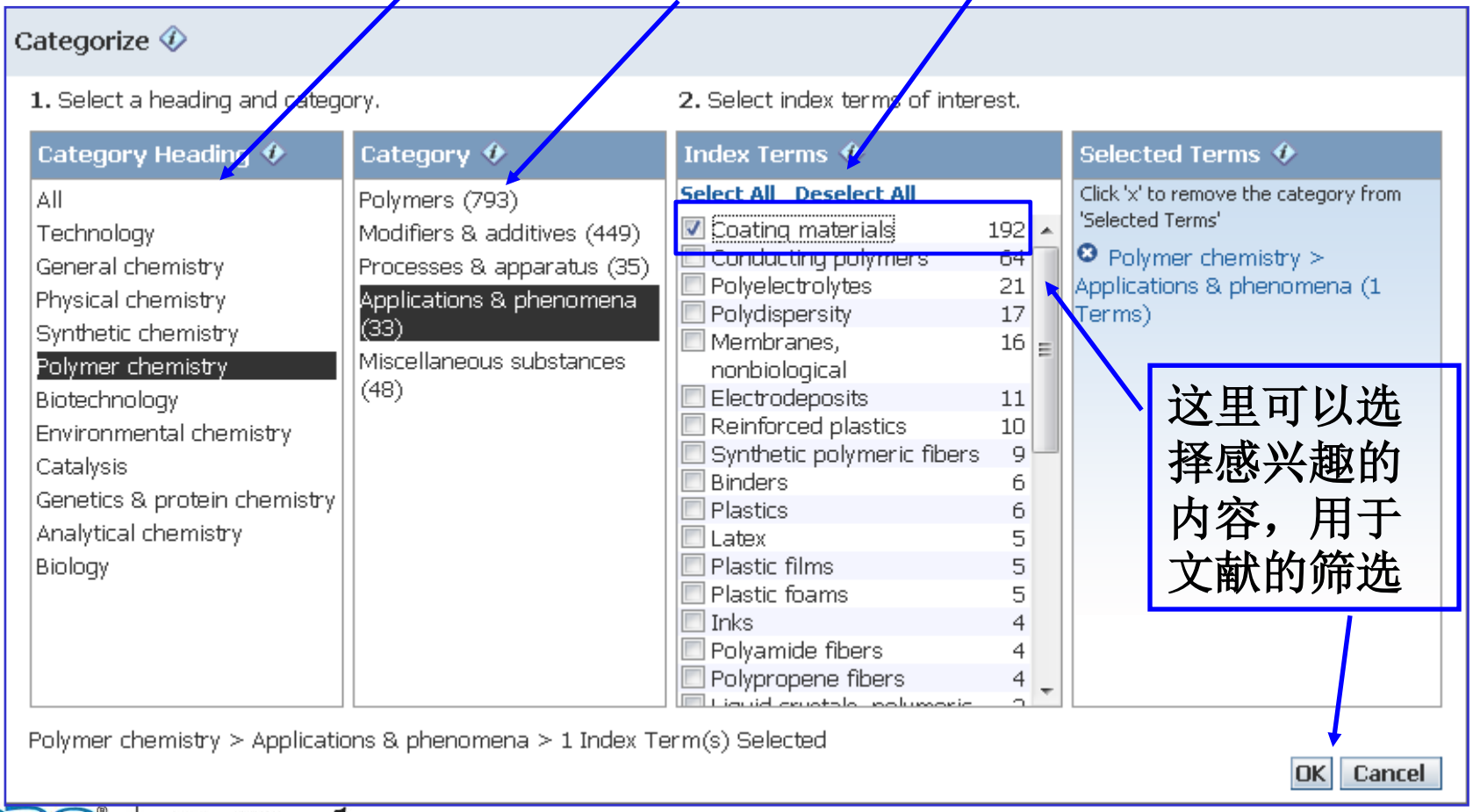
本课题的研究都涉及到哪些交叉学科？

Categorize系统分析工具

一级目录

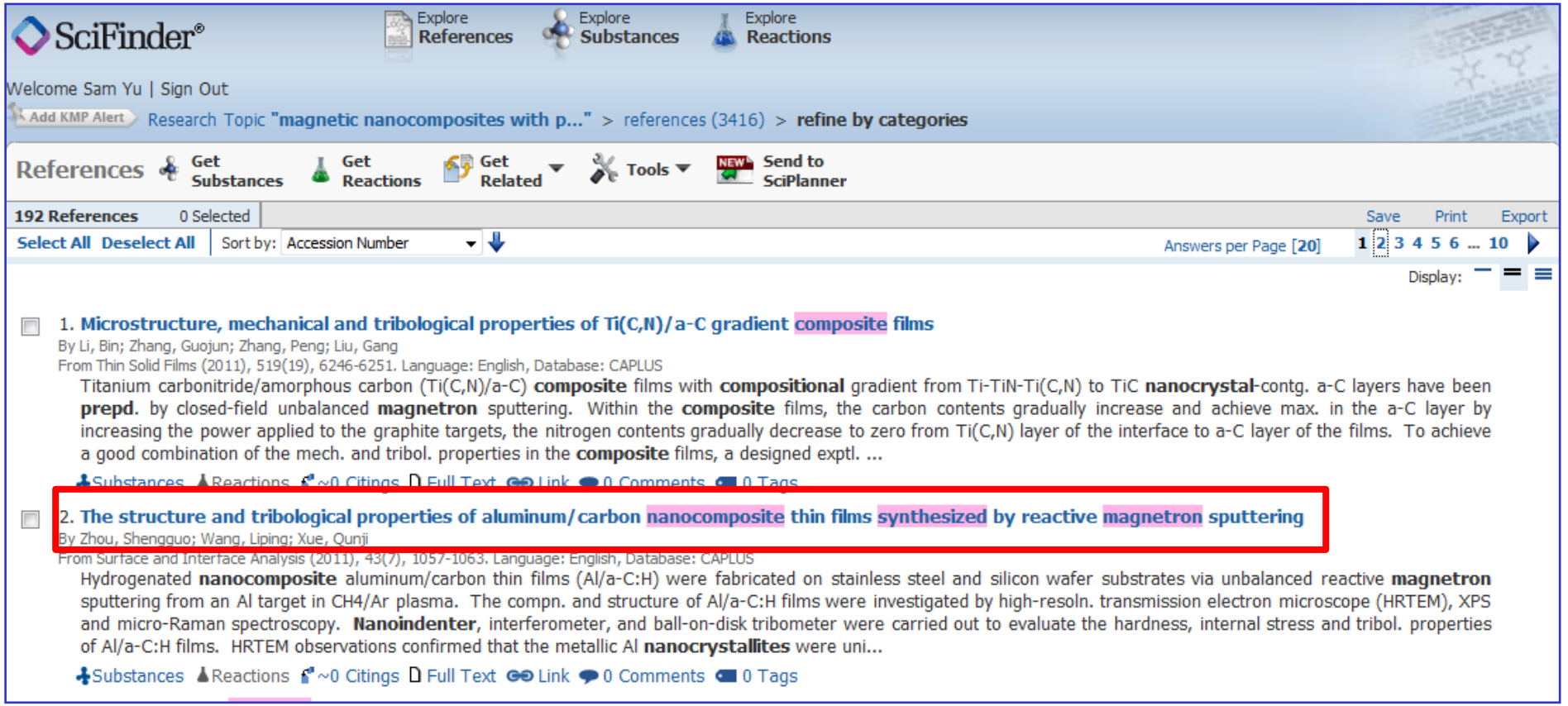
二级目录

和二级目录有关的 **Index Term**



这里可以选择感兴趣的内容，用于文献的筛选

点击文献标题，查看、获取文献更多的详细信息



摘要信息

...tribological properties of aluminum/carbon nanocomposite thin films synthesized by reactive magnetron sputtering

By: Zhou, Shengguo; Wang, Liping; Xue, Qunji

Hydrogenated nanocomposite aluminum/carbon thin films (Al/a-C:H) were fabricated on stainless steel and silicon wafer substrates via unbalanced reactive magnetron sputtering from an Al target in CH4/Ar plasma. The compn. and structure of Al/a-C:H films were investigated by high-resoln. transmission electron microscope (HRTEM), XPS and micro-Raman spectroscopy. Nanoindenter, interferometer, and ball-on-disk tribometer were carried out to evaluate the hardness, internal stress and tribol. properties of Al/a-C:H films. HRTEM observations confirmed that the metallic Al nanocrystallites were uniformly dispersed in the amorphous carbon matrix. XPS and Raman analyses indicated that the sp2 content increased with the increase of Al content in the films. Nanoindenter and interferometer tests exhibited that the uniform incorporation of Al nanocrystallites can diminish drastically the magnitude of internal stress with maintaining the higher hardness of as-deposited films. Esp., the ball-on-disk tribometer measurements revealed that the nanocomposite film with 2.3 at.% Al content exhibited relatively better wear resistance and self-lubrication performance with a friction coeff. of 0.06 and wear rate of 3.1 × 10-16 m3/(N m) under ambient air, which can be attributed to the relatively higher hardness, the formation of continuous graphitized transfer film on counterface, and the reduced reaction of oxygen with carbon.

文献详细著录信息

Source

Surface an...
Volume 43
Issue 7
Pages 105...
Journal
2011
CODEN: SIANDQ
ISSN: 0142-2421
DOI: 10.1002/sia.3691

Company/Organization

State Key Laboratory of Solid Lubrication, Lanzhou Institute of Chemical Physics
Chinese Academy of Sciences
Lanzhou, Peop. Rep. China
730000

Accession Number

2011:709221
CAN 155:102047
CAPLUS

Publisher

John Wiley & Sons Ltd.

Language

English

重要概念索引

Concepts

Coating materials

antifriction; structure and tribol. properties of aluminum/carbon nanocomposite thin films prepd. by reactive magnetron sputtering

Graphitization

on counterface; structure and tribol. properties of aluminum/carbon nanocomposite thin films prepd. by reactive magnetron sputtering

Stress, mechanical

residual; structure and tribol. properties of aluminum/carbon nanocomposite thin films prepd. by reactive magnetron sputtering

Wear

resistance; structure and tribol. properties of aluminum/carbon nanocomposite thin films prepd. by reactive magnetron sputtering

Lubrication

self-lubrication; structure and tribol. properties of aluminum/carbon nanocomposite thin films prepd. by reactive magnetron sputtering

物质链接

Substances

7440-44-0DP Carbon, hydroge...

amorphous; structure and tribo... composite thin films prepd. by reactive magnetron sputtering

Properties; Synthetic preparation; Preparation

7429-90-5 Aluminum, processes

structure and tribol. properties of aluminum/carbon nanocomposite thin films prepd. by reactive magnetron sputtering

Physical, engineering or chemical process; Properties; Process

74-82-8 Methane, processes

structure and tribol. properties of aluminum/carbon nanocomposite thin films prepd. by reactive magnetron sputtering

Physical, engineering or chemical process; Process

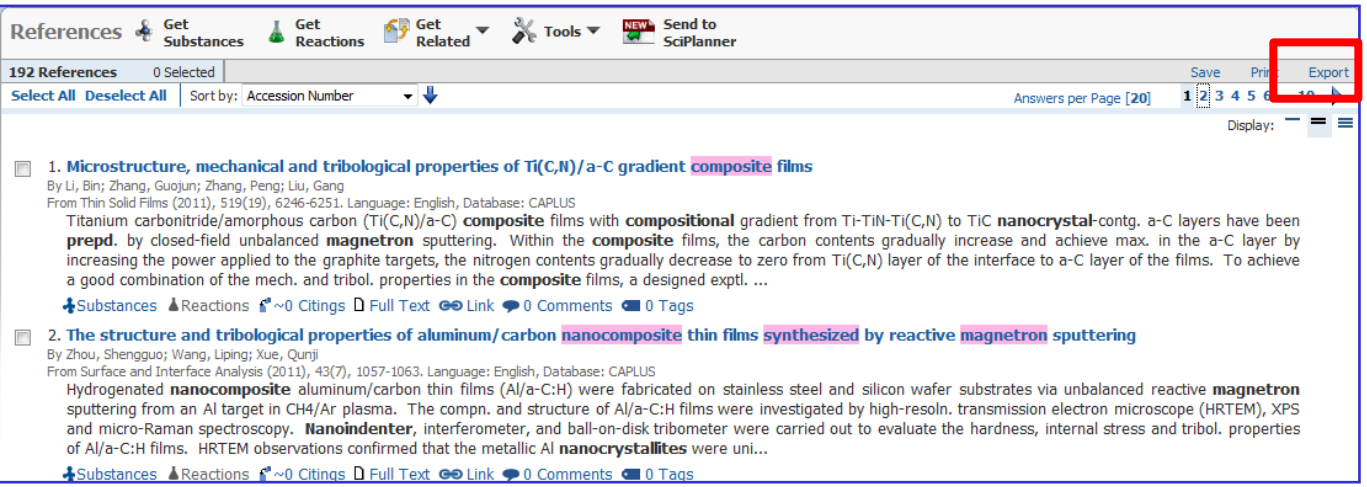
7440-21-3 Silicon, uses
12597-68-1 Stainless steel, uses

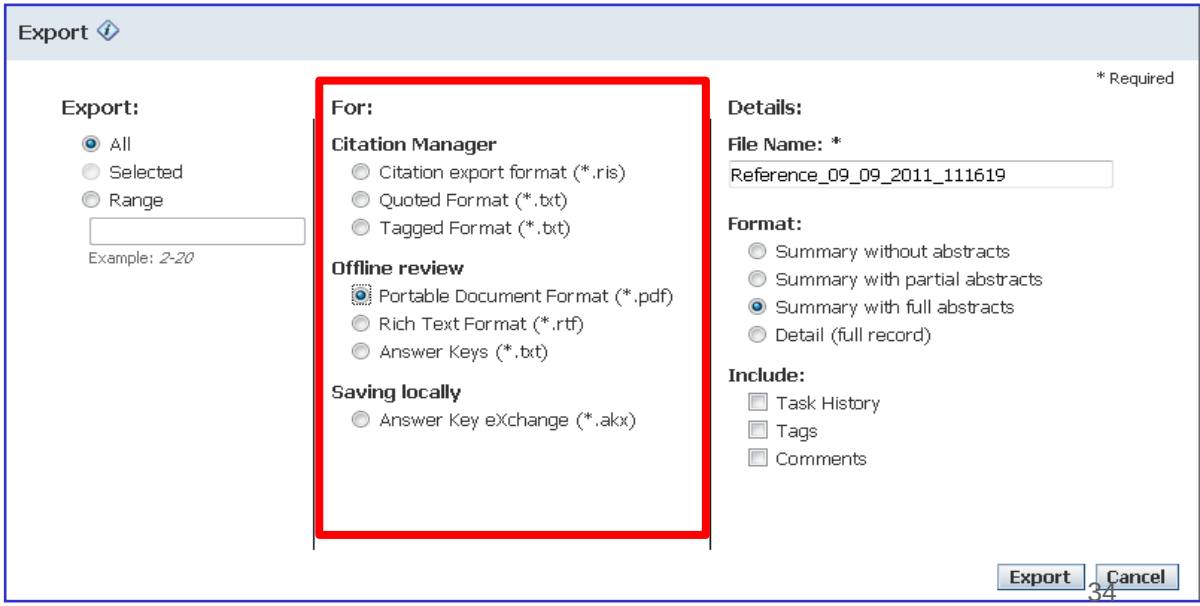
substrate; structure and tribol. properties of aluminum/carbon nanocomposite thin films prepd. by reactive magnetron sputtering

Other use, unclassified; Uses

保存

使用Export将结果输出





Citation manager: 保存成RIS格式，用于导入EndNote等文献管理工具

Offline Review:保存过成PDF，RTF格式，用于脱机浏览

CAS | SciFinder®

CAS is a division of the American Chemical Society

文献检索小结

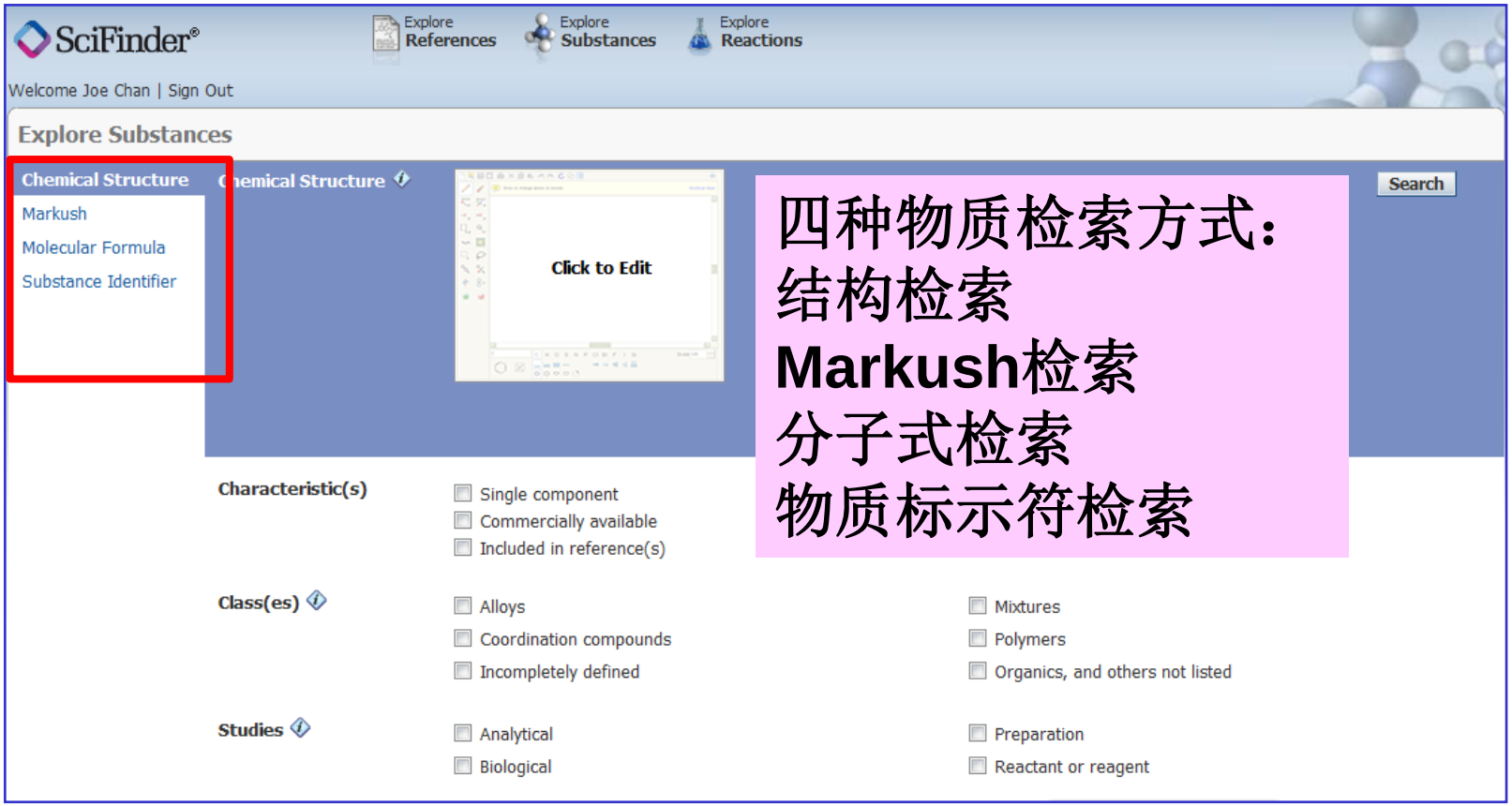
- 主题检索时，使用介词作为连接
- 尽量选择包含**Concepts**和**Closed Associated with**的候选项
- 通过**SciFinder** 的**Analyze/Refine**功能来缩小检索的范围
- 尝试将不同的**Analyze/Refine**功能组合起来用，会有更多的收益
- 使用**Categorize**可以让系统来实现自动分类

- 更多细节化内容，请参考
- **www.igroup.com.cn/cas**

提纲

- 介绍
  - SciFinder 中的内容
  - SciFinder 的注册和登陆
- **SciFinder 中的检索和后处理**
  - SciFinder 中的文献检索
  - SciFinder 中的物质检索
  - SciFinder 中的Markush检索
  - SciFinder 中的反应检索
- **SciFinder 特色功能**
- **SciFinder网络资源平台**

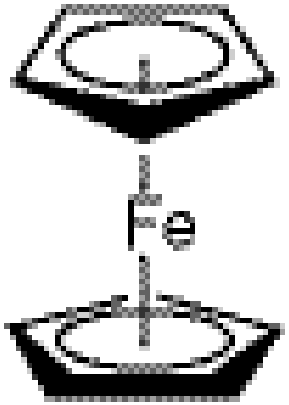
物质检索

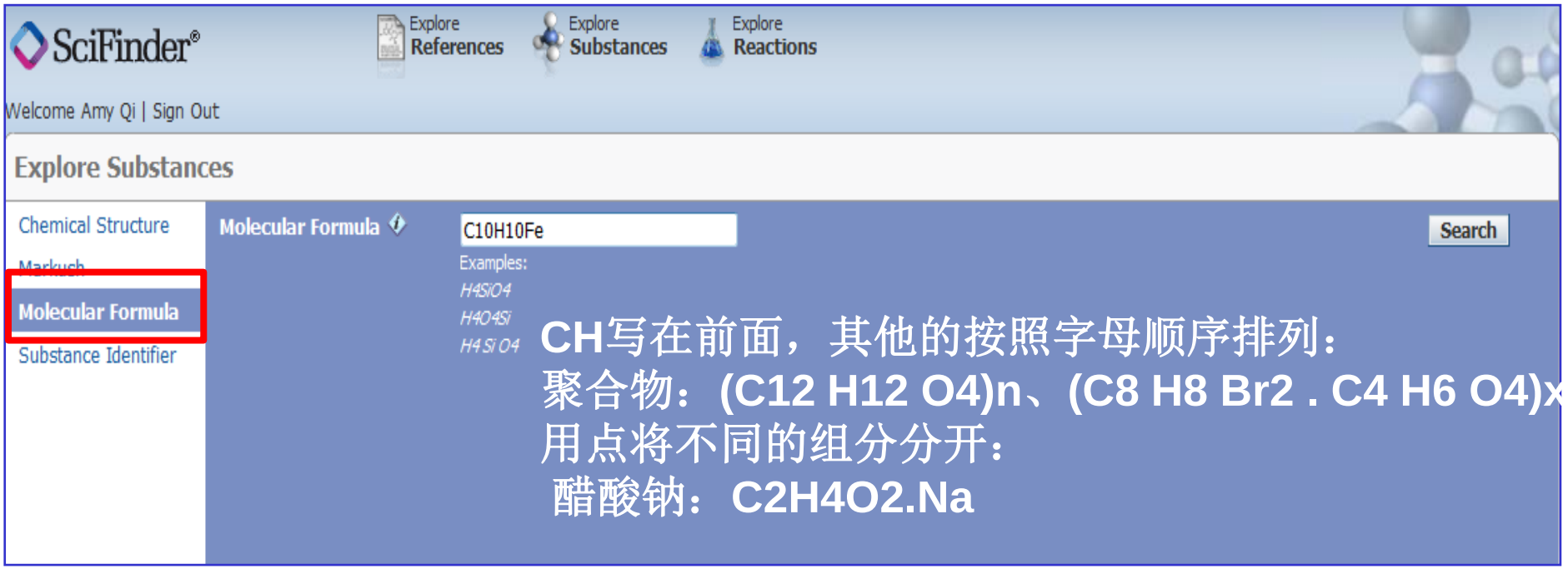


四种物质检索方式：
结构检索
Markush检索
分子式检索
物质标示符检索

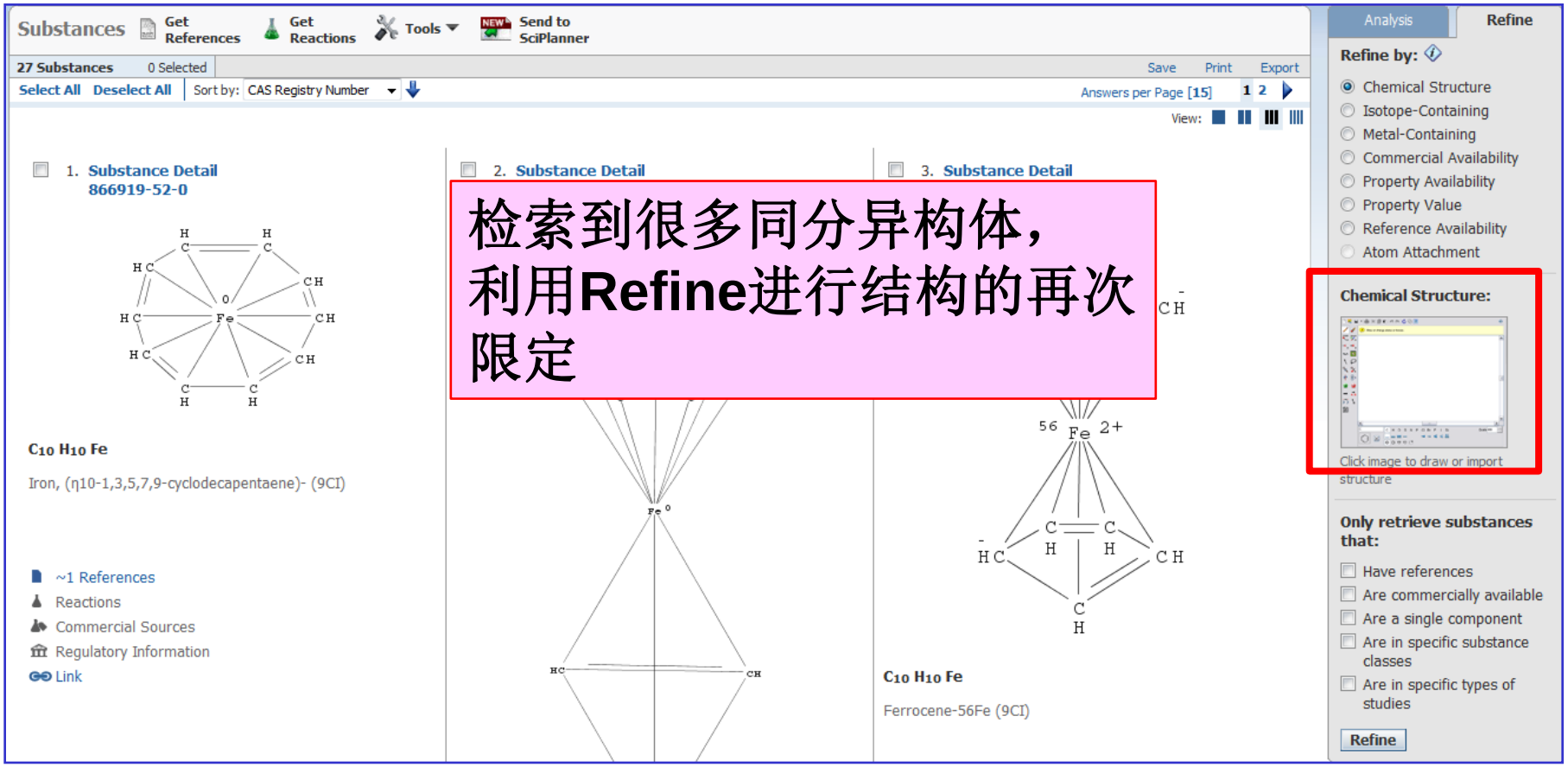
分子式检索

- 检索聚合物、金属配合物
- 举例检索二茂铁（**C10H10Fe**）

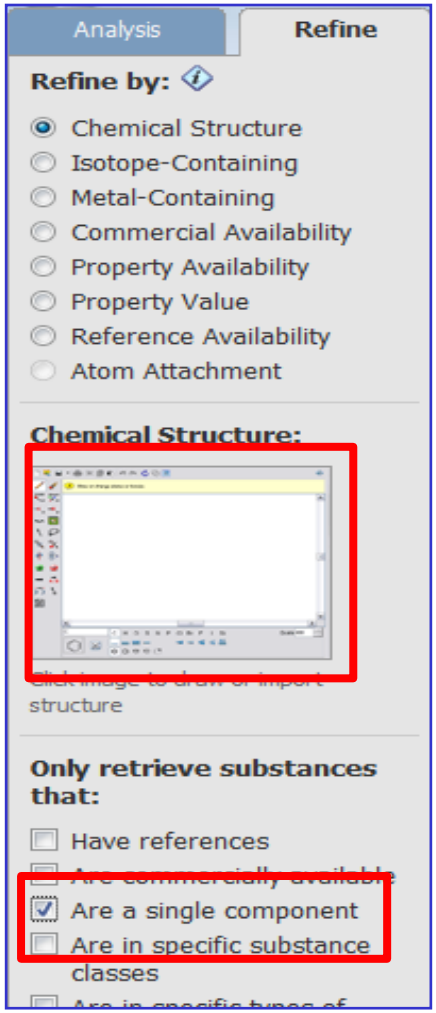




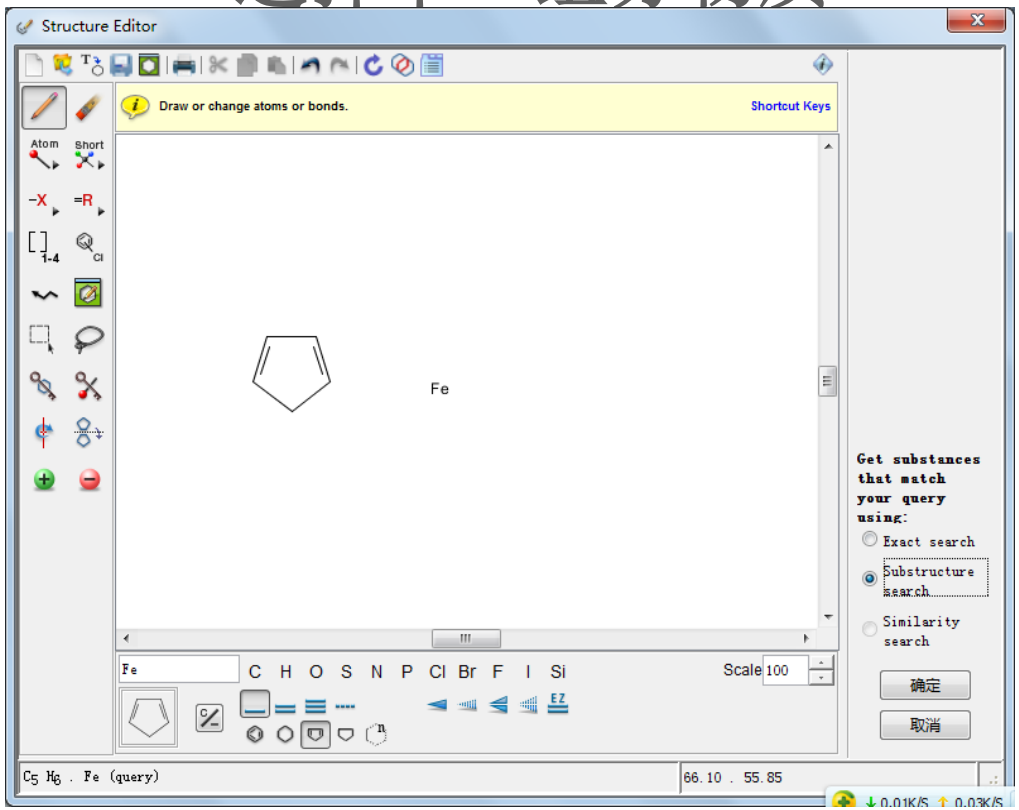
得到27个符合C10H10Fe的物质



金属配合物的分子式检索

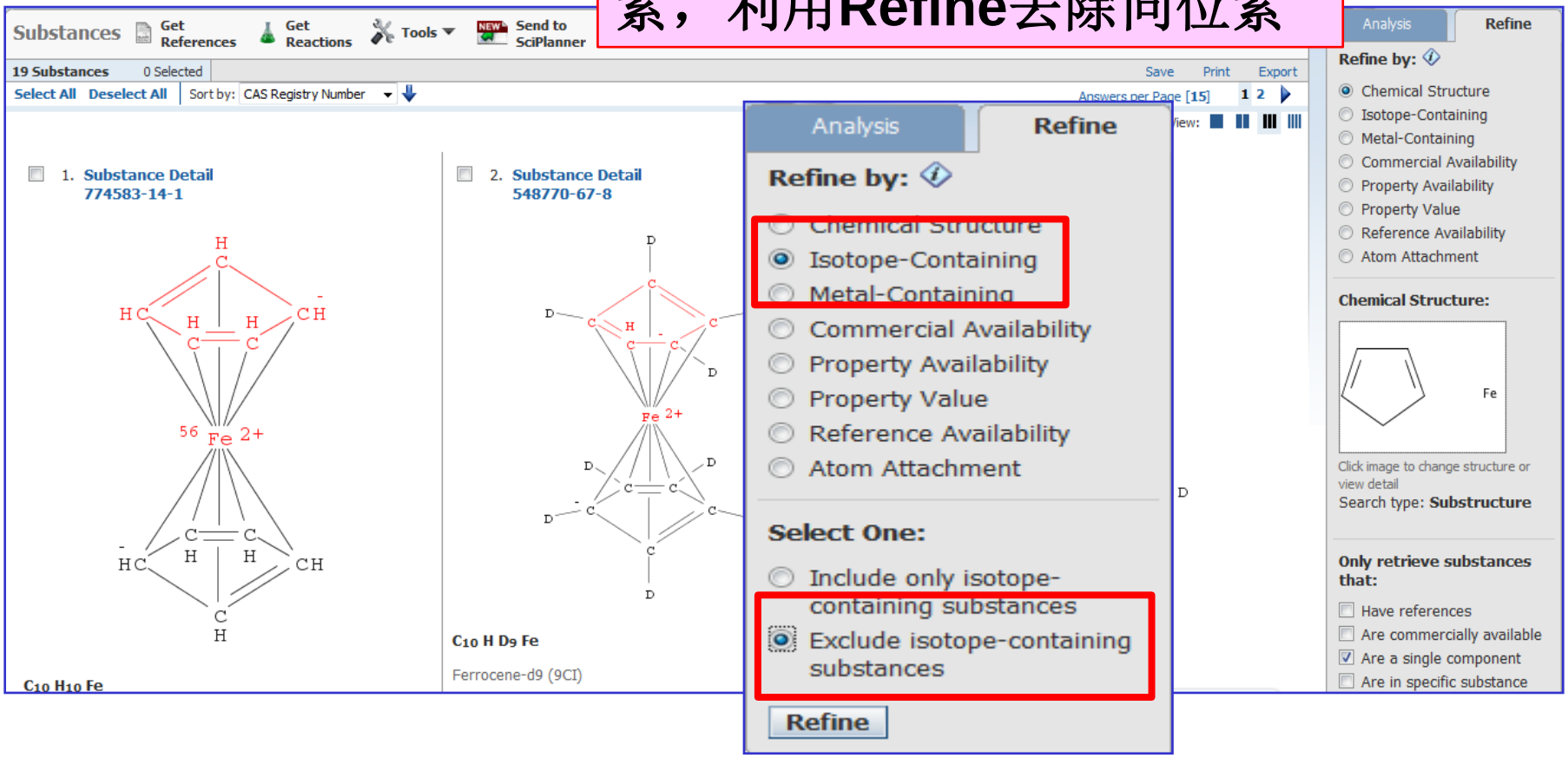


- 利用结构限定
- 选择单一组分物质



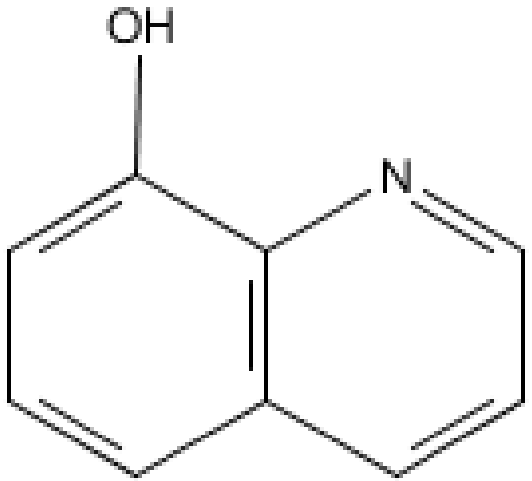
精选到19个物质

检索到二茂铁的很多同位素，利用Refine去除同位素



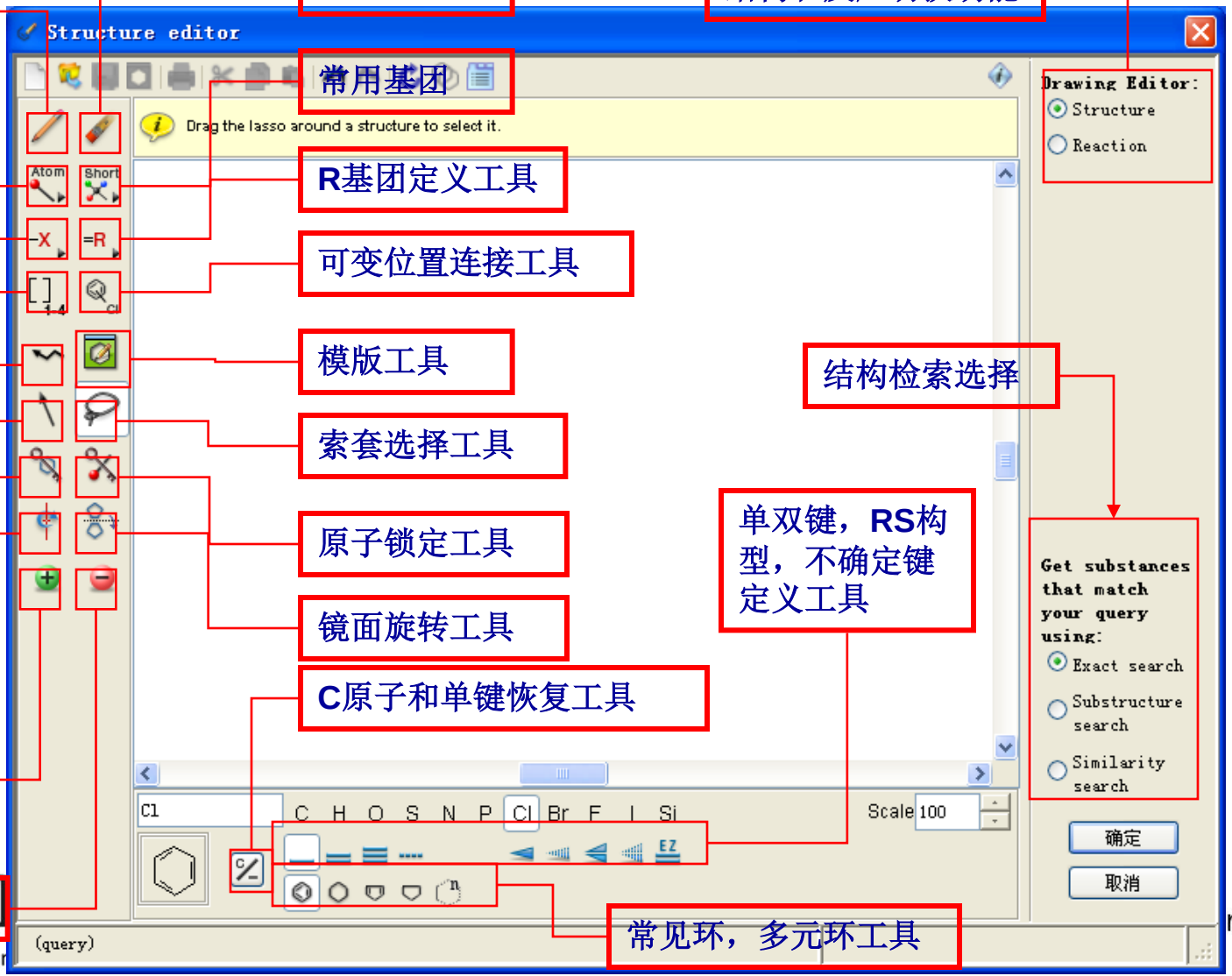
化学结构式检索

查找8-羟基喹啉衍生物为配体的金属化合物

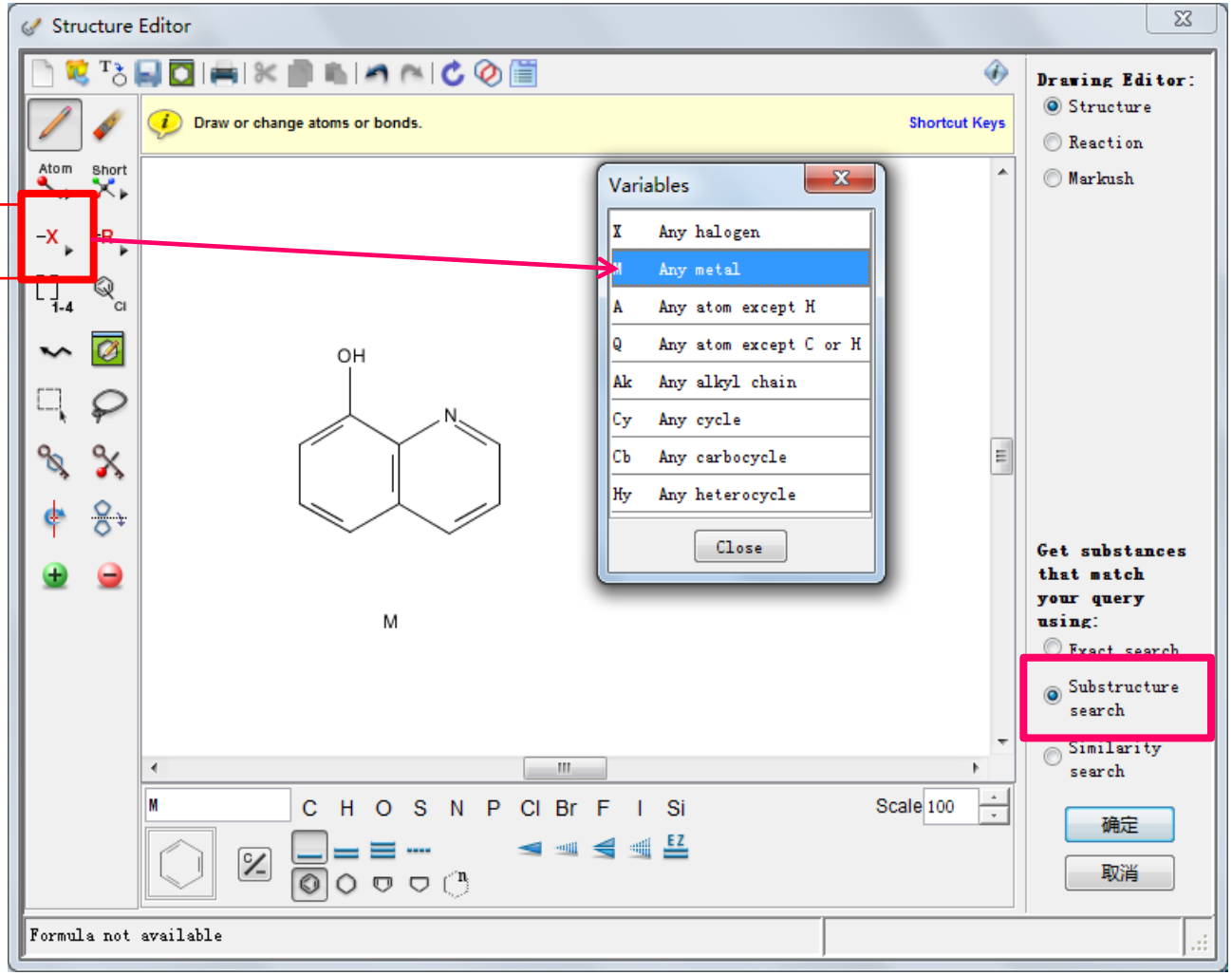


配体

SciFinder结构绘制工具

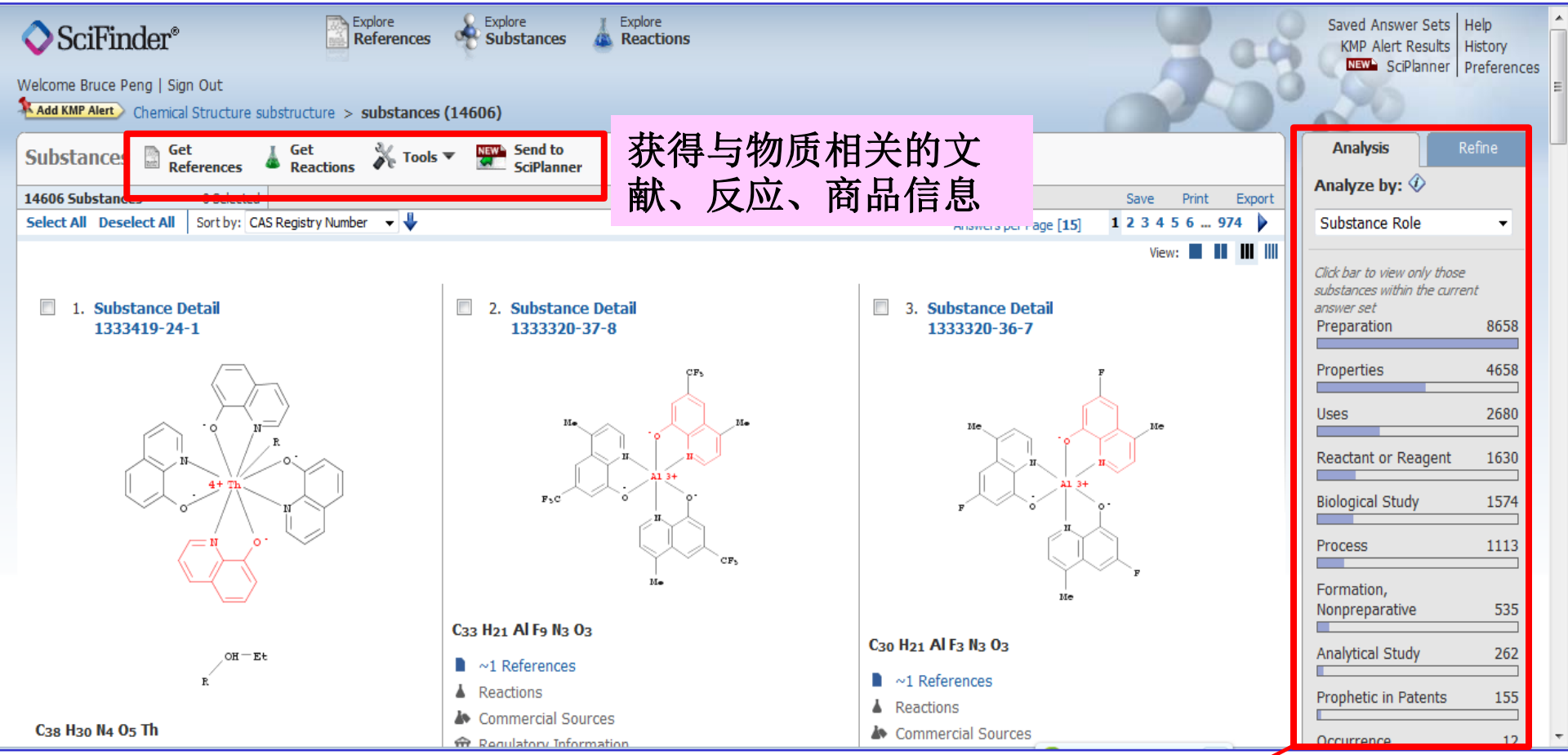


可变基团



亚结构检索，可以查找特定母核结构的一类物质

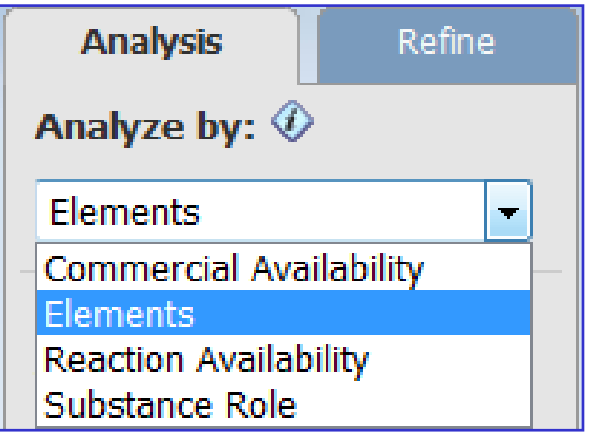
物质检索结果



获得与物质相关的文献、反应、商品信息

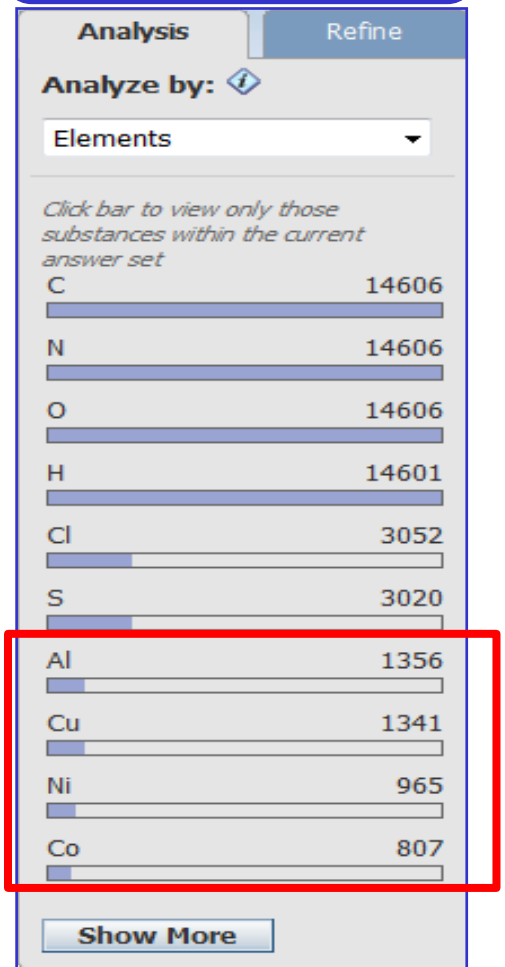
分析和限定工具

物质检索的分析工具

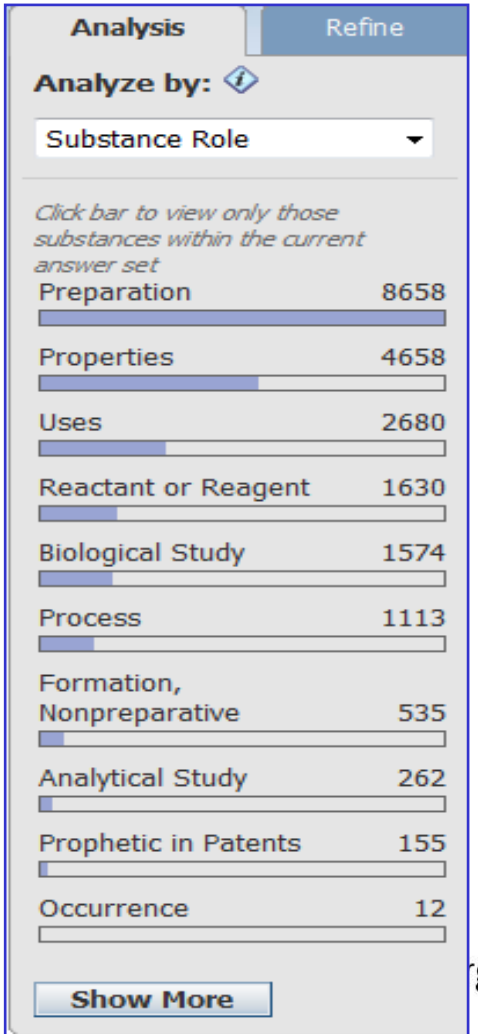


一共4种分析工具：
商业来源分析
元素分析
反应分析
物质角色分析

了解配体与哪些金属螯合

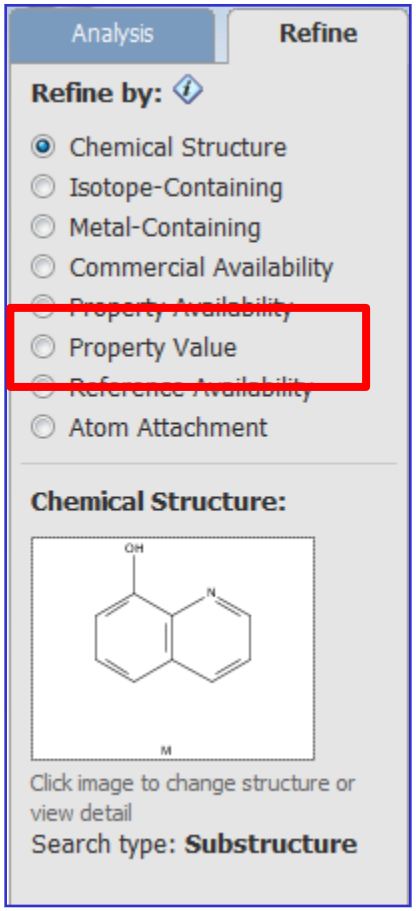


了解物质的应用领域



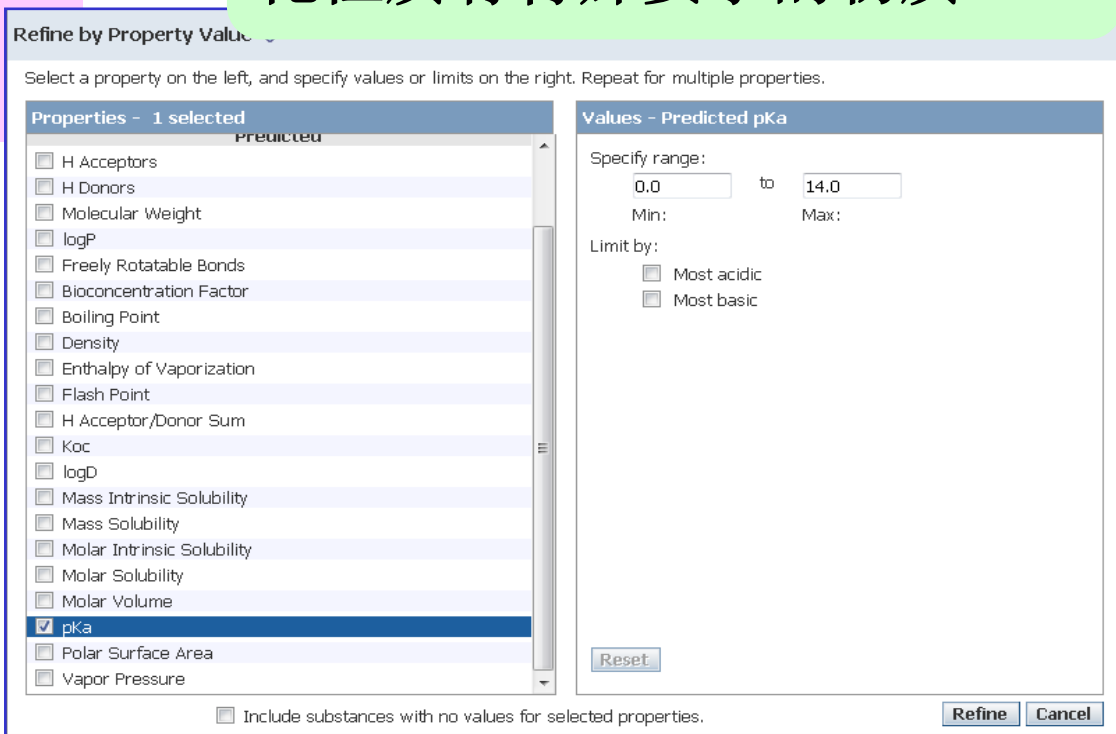
CAS | SciFinder®
CAS is a division of the American Chemical Society

物质检索的限定工具



七种限定功能：
1 结构修饰
2 同位素包含
3 金属包含
4 商业来源
5 理化性质
6 文献来源
7 原子附属性

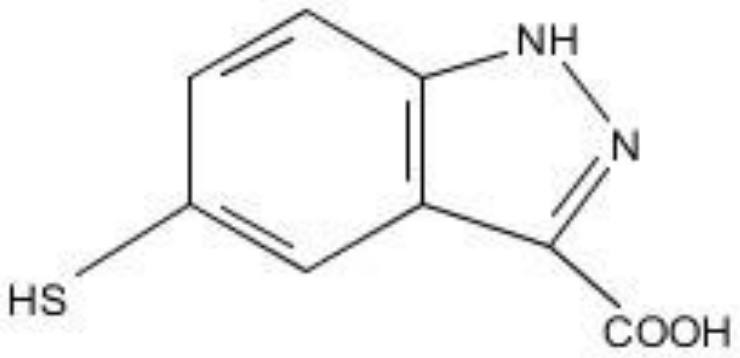
精选对PH、熔点、沸点等理化性质有特殊要求的物质

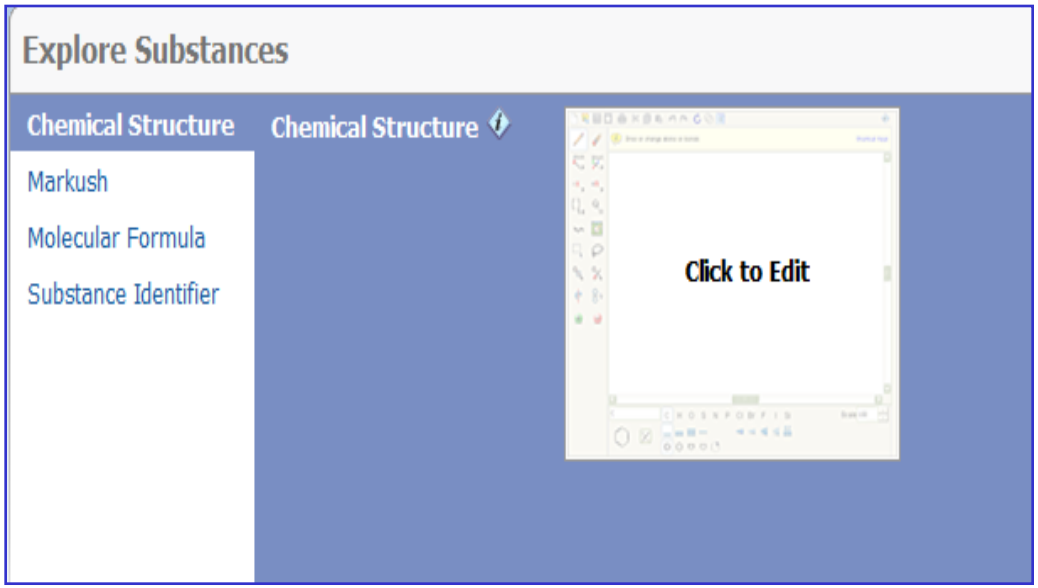


CAS | SciFinder®
CAS is a division of the American Chemical Society

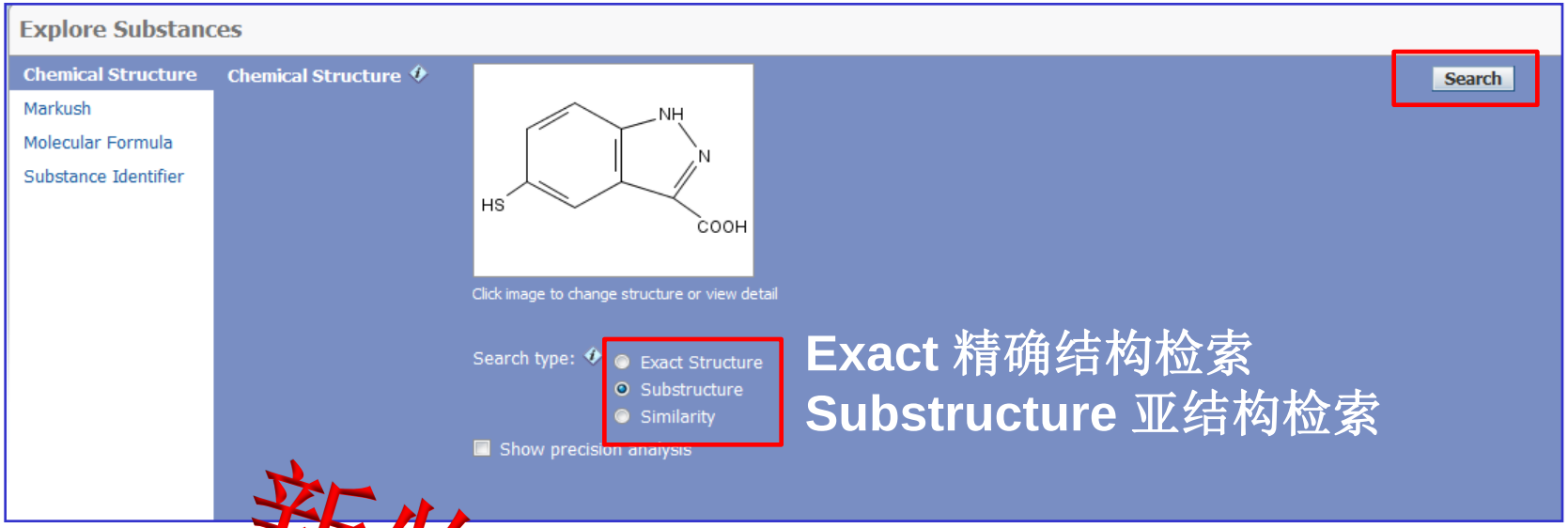
新设计的化合物，如何预测其理化性质？

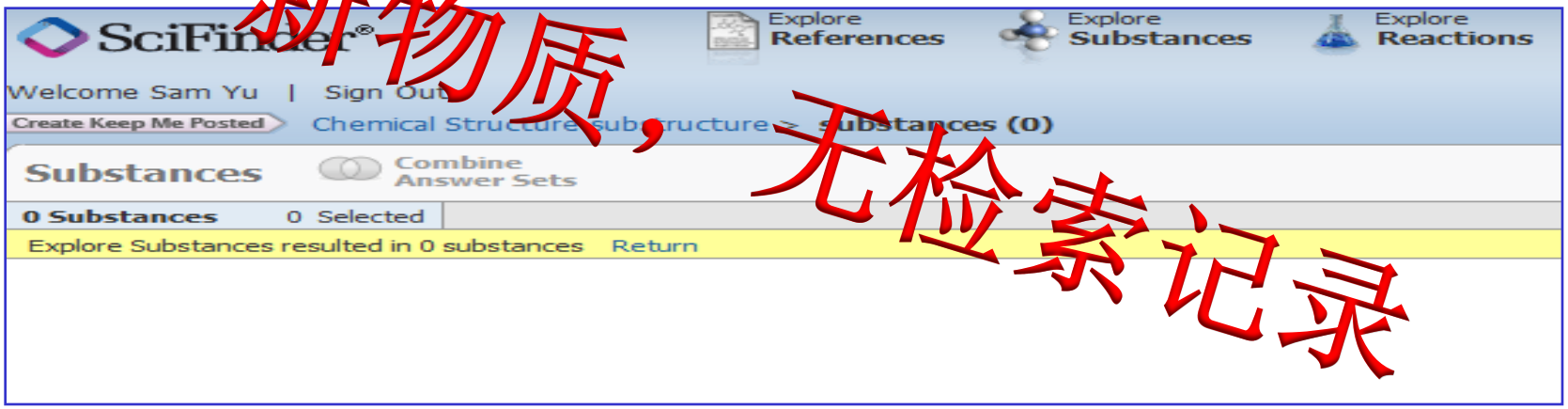
- **Scifinder化学结构检索**





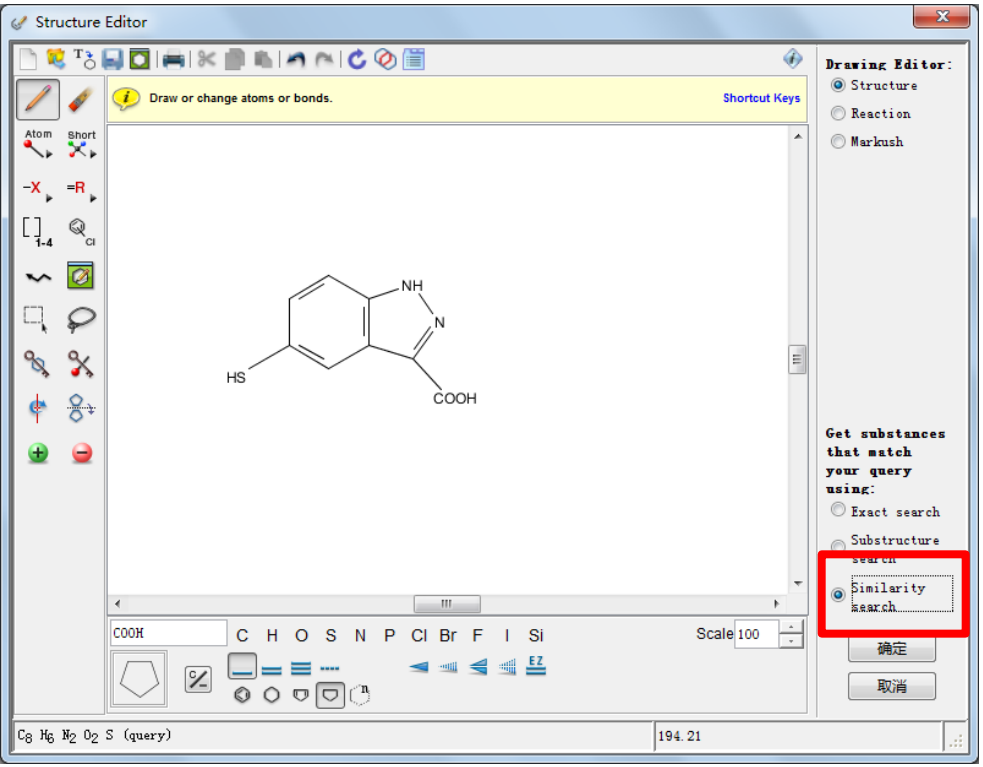
化学结构检索

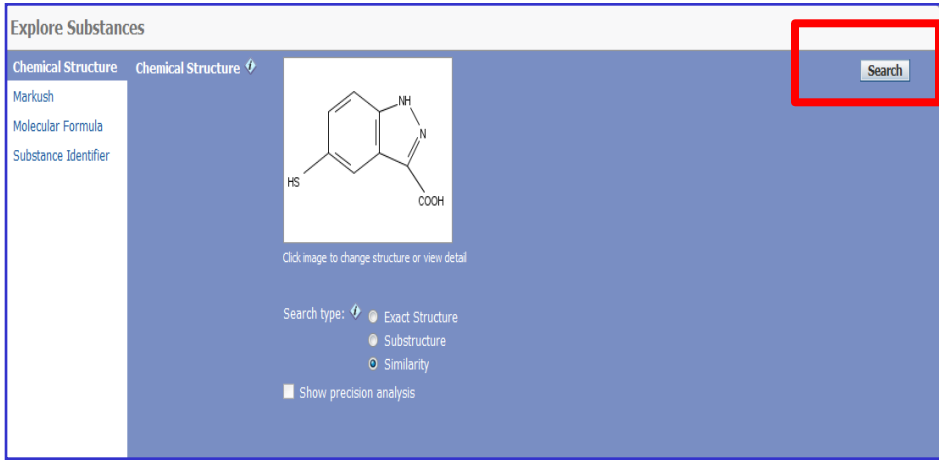




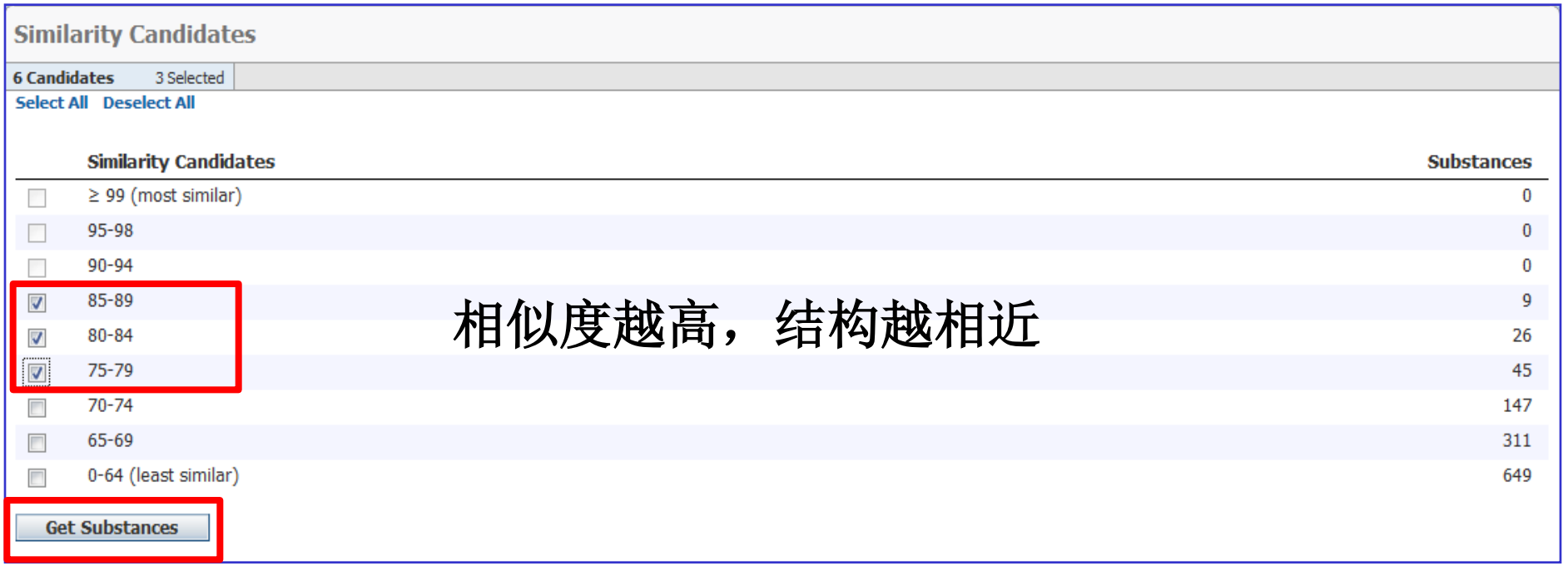
新物质，无检索记录

Similarity 相似结构检索





Similarity 相似结构检索



相似度越高，结构越相近

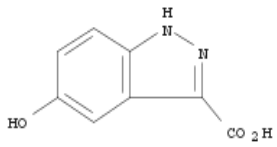
获得相似度75分以上的物质

Substances | Get References | Get Reactions | Tools | Send to SciPlanner

80 Substances | 0 Selected | Save | Print | Export

Select All | Deselect All | Sort by: Similarity Score | Answers per Page [15] | 1 2 3 4 5 6 | View:

1. **Substance Detail** Score: 88
885518-94-5

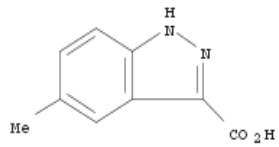


$C_8H_6N_2O_3$

1H-Indazole-3-carboxylic acid, 5-hydroxy-

~1 References
Reactions
Commercial Sources
Regulatory Information
Link

2. **Substance Detail** Score: 87
1201-24-7



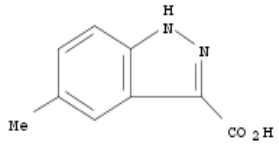
$C_9H_8N_2O_2$

1H-Indazole-3-carboxylic acid, 5-methyl-

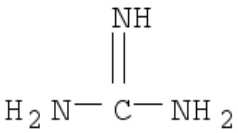
~17 References
Reactions
Commercial Sources
Regulatory Information
Link

3. **Substance Detail** Score: 87
108259-82-1

1201-24-7
$C_9H_8N_2O_2$



113-00-8
CH_5N_3



$C_9H_8N_2O_2 \cdot CH_5N_3$

1H-Indazole-3-carboxylic acid, 5-methyl-, compd. with guanidine (1:1)

Analysis | Refine

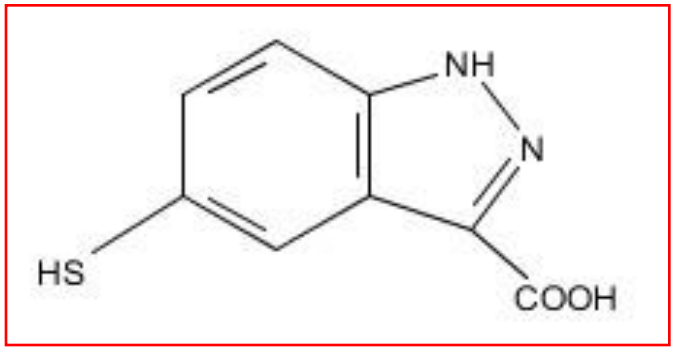
Analyze by: Substance Role

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

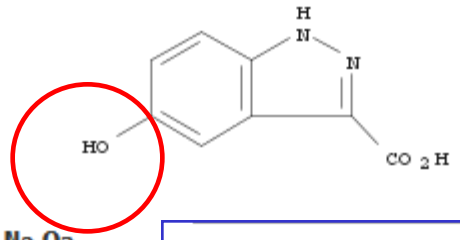
Reactant or Reagent	43
Preparation	38
Uses	8
Process	4
Properties	3
Prophetic in Patents	3
Biological Study	2
Analytical Study	1
Combinatorial Study	1
Formation, Nonpreparative	1

Show More

与原结构存在的区别



1. **Substance Detail**
885518-94-5
Score: 88

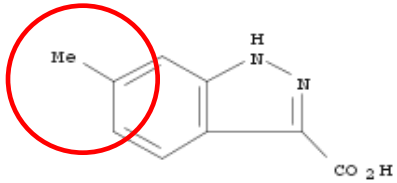


C8 H6 N2 O3

1H-Indazole-3-carbo

取代基不同

4. **Substance Detail**
858227-12-0
Score: 86

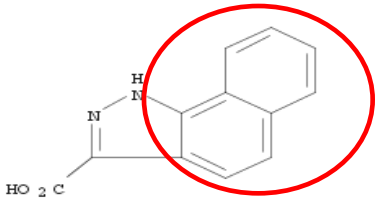


C9 H8 N2 O2

1H-Indazole-3-carboxylic acid, 6-methyl-

取代基位置不同

63. **Substance Detail**
665020-19-9
Score: 76

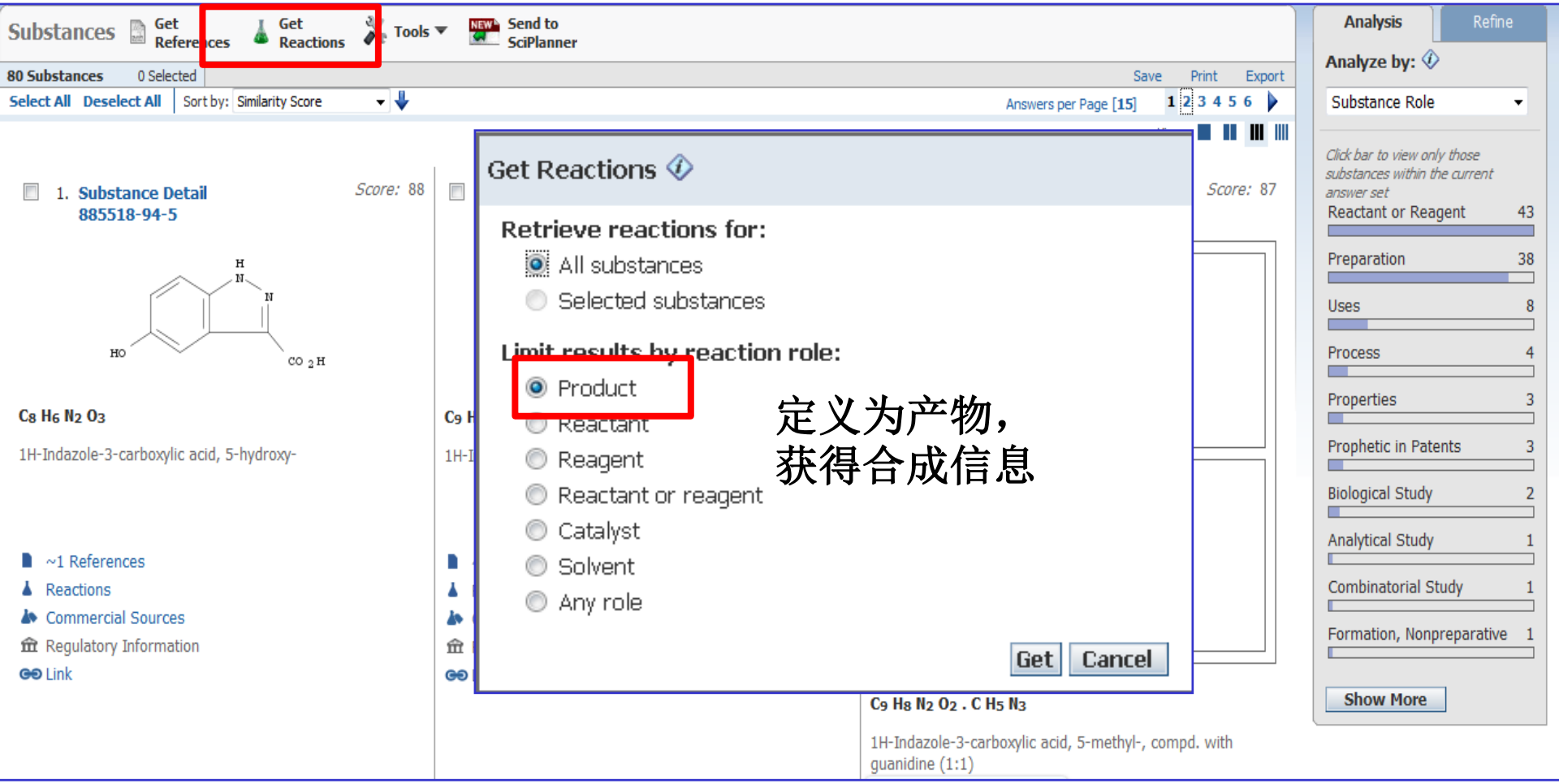


C12 H8 N2 O2

1H-Benz[g]indazole-3-carboxylic acid

母核结构不同

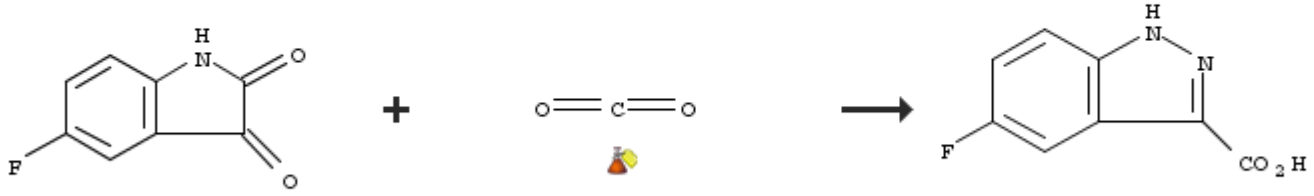
如何获得有参考价值的反应信息？



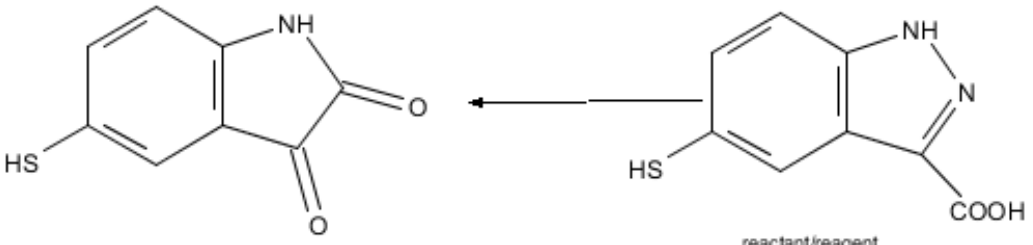
定义为产物，
获得合成信息

获得有帮助的反应信息

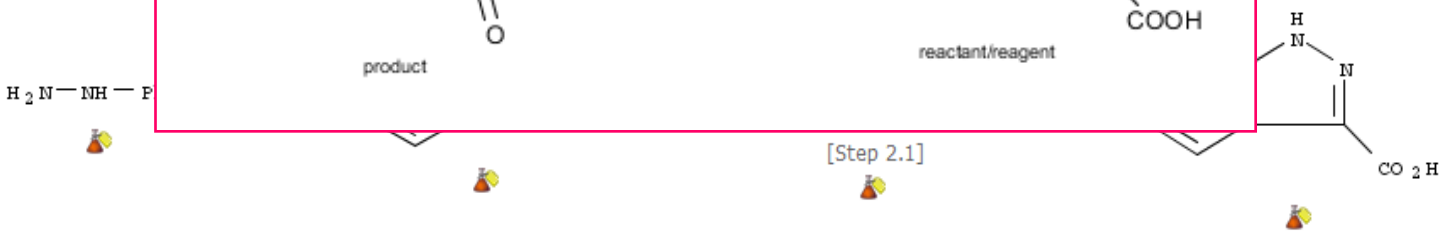
1. View Reaction Detail Link Similar Reactions
Single Step *Hover over any structure for more options.*



逆合成分析



3. View Reaction Det
3 Steps *Hover over ar*



结构检索小结

- 精确结构检索：

  获得物质的盐，聚合物，混合物，配合物等，母体结构不能修改，不能修饰

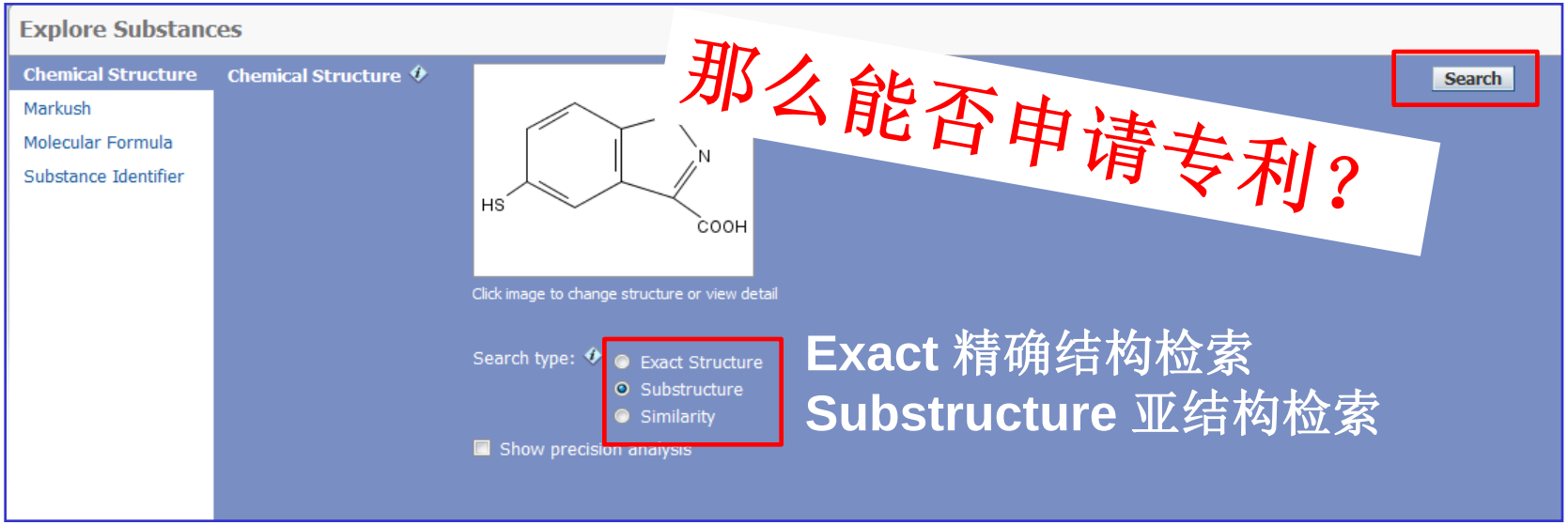
- 亚结构检索：

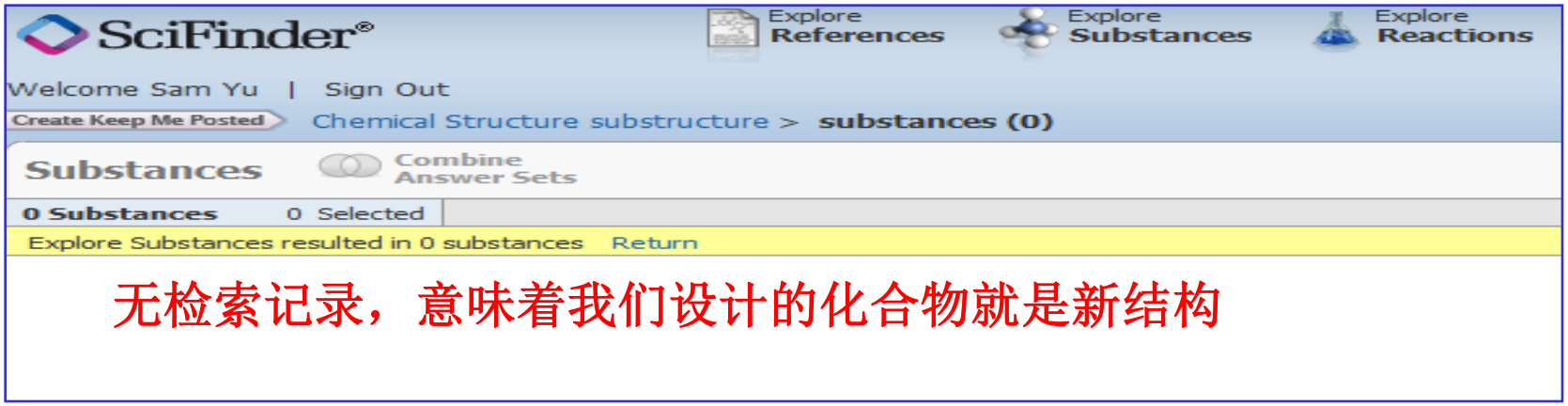
  所画的结构必须存在，母体结构不能修改，但可以被修饰

- 相似结构检索：

  相似度越高结构越相近，母体结构可以修改，也可以被修饰，用相似度来控制获得的结果

化学结构检索

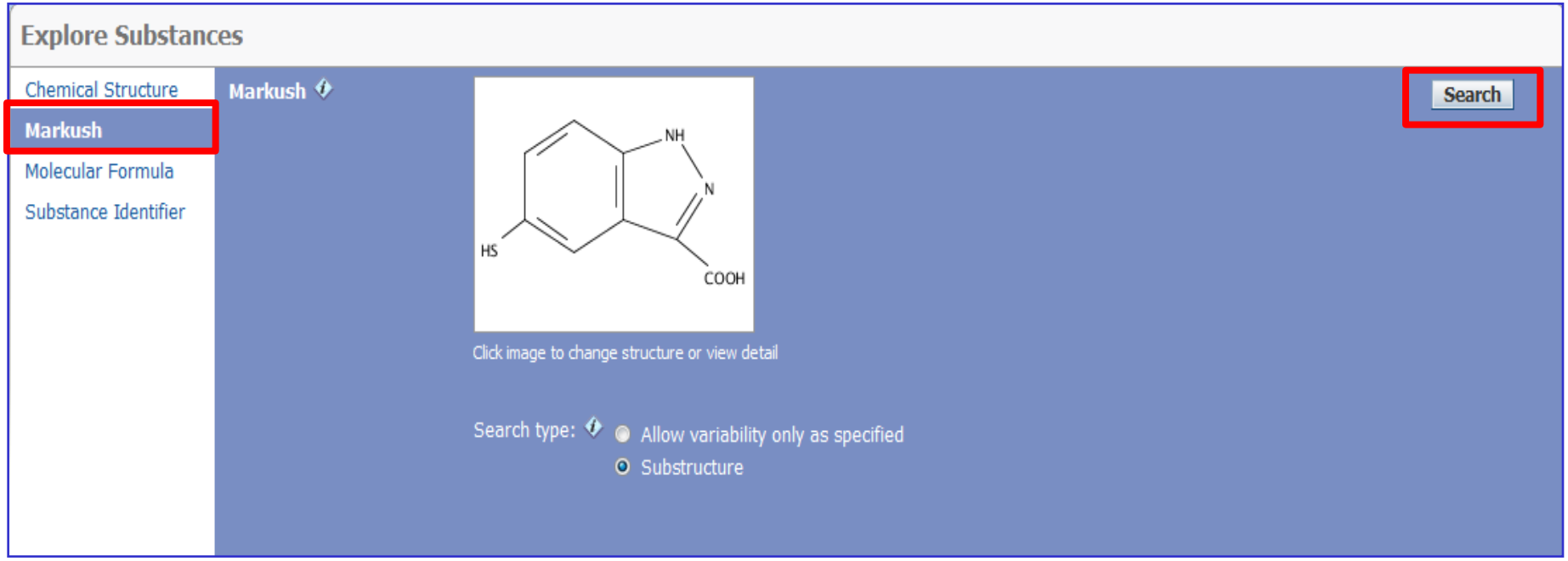

Explore Substances
Chemical Structure
Markush
Molecular Formula
Substance Identifier
Chemical Structure
Search
HS
N
COOH
Click image to change structure or view detail
Search type:
Exact Structure
Substructure
Similarity
Show precision analysis
那么能否申请专利？
Exact 精确结构检索
Substructure 亚结构检索


SciFinder®
Explore References
Explore Substances
Explore Reactions
Welcome Sam Yu | Sign Out
Create Keep Me Posted
Chemical Structure substructure > substances (0)
Substances
Combine Answer Sets
0 Substances 0 Selected
Explore Substances resulted in 0 substances Return
无检索记录，意味着我们设计的化合物就是新结构

提纲

- 介绍
  - SciFinder 中的内容
  - SciFinder 的注册和登陆
- **SciFinder 中的检索和后处理**
  - SciFinder 中的文献检索
  - SciFinder 中的物质检索
  - SciFinder 中的Markush检索
  - SciFinder 中的反应检索
- **SciFinder 特色功能**
- **SciFinder网络资源平台**

Markush检索——初步的专利评估



Markush检索直接返回保护了该结构的专利

查看专利权利要求说明书

Europäisches Patentamt
European Patent Office
Office européen des brevets

Espacenet
Patent search

Deutsch English Français
Contact
Change country

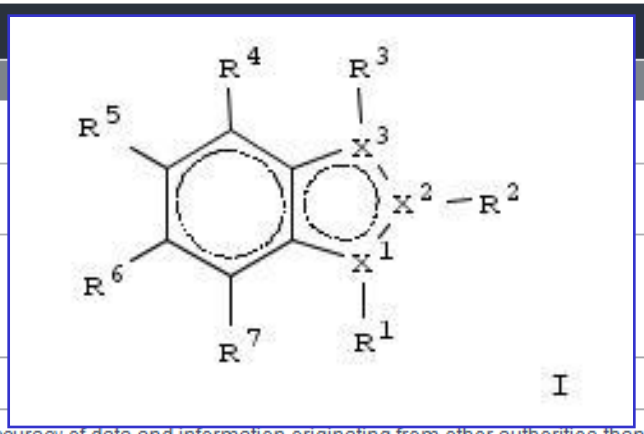
About Espacenet Other EPO online services

Search | Result list | My patents list (0) | Query history | Settings

US 2011082143 (A1)
- Bibliographic data
- Description
- Claims
- Mosaics
- Original document
- INPADOC legal status

Claims: US 2011082143 (A1)

In my patents list | Report data error | Print



I

Bicyclic Heteroaryl Compounds

Claims of US 2011082143 (A1)

Translate this text | Claims tree

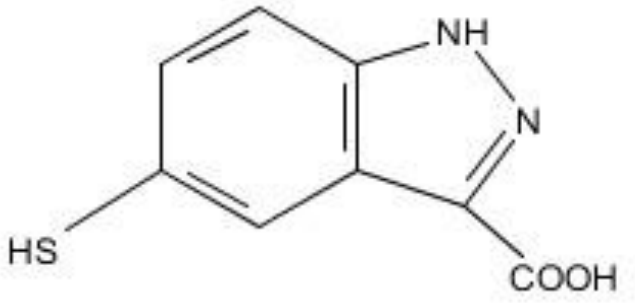
The EPO does not accept any responsibility for the accuracy of data and information originating from other authorities than the EPO; in particular, the EPO does not guarantee that they are complete, up-to-date or fit for specific purposes.

1. What is claimed is: 1. A compound of formula (I):

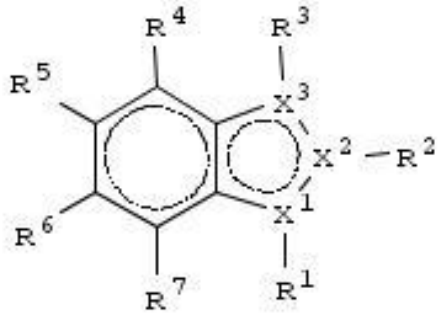
wherein
each of X1, X2, and X3, independently, is C or N, and at least two of X1, X2, and X3 are each N;
each of R1 and R3, independently, is deleted, H, alkyl, alkenyl, alkynyl, cycloalkyl, cycloalkenyl, heterocycloalkyl, heterocycloalkenyl, aryl, heteroaryl, halo, CN, NO2, ORa, COORa, OC(O)Ra, C(O)Ra, C(O)NRaRb, C(O)N(Ra)N(Rb)C(O)Rc, NRaRb, N(Rc)SO2NRaRb, SO2NRaRb, or SRa, in which each of Ra, Rb, and Rc, independently, is H, alkyl, cycloalkyl, heterocycloalkyl, aryl, or heteroaryl, or Ra and Rb together with the nitrogen atom to which they are attached form heterocycloalkyl or heteroaryl;

Quick help

- What happens if I click on "In my patents list"?
- What happens if I click on the "Register" button?
- What happens if I click on the button "Translate this text?"
- How can I view the claim structure?
- Why are the claims sometimes in French or German, or some other language?



设计的目标化合物



I

专利原文中保护的结构

1. What is claimed is: 1. A compound of formula (I):

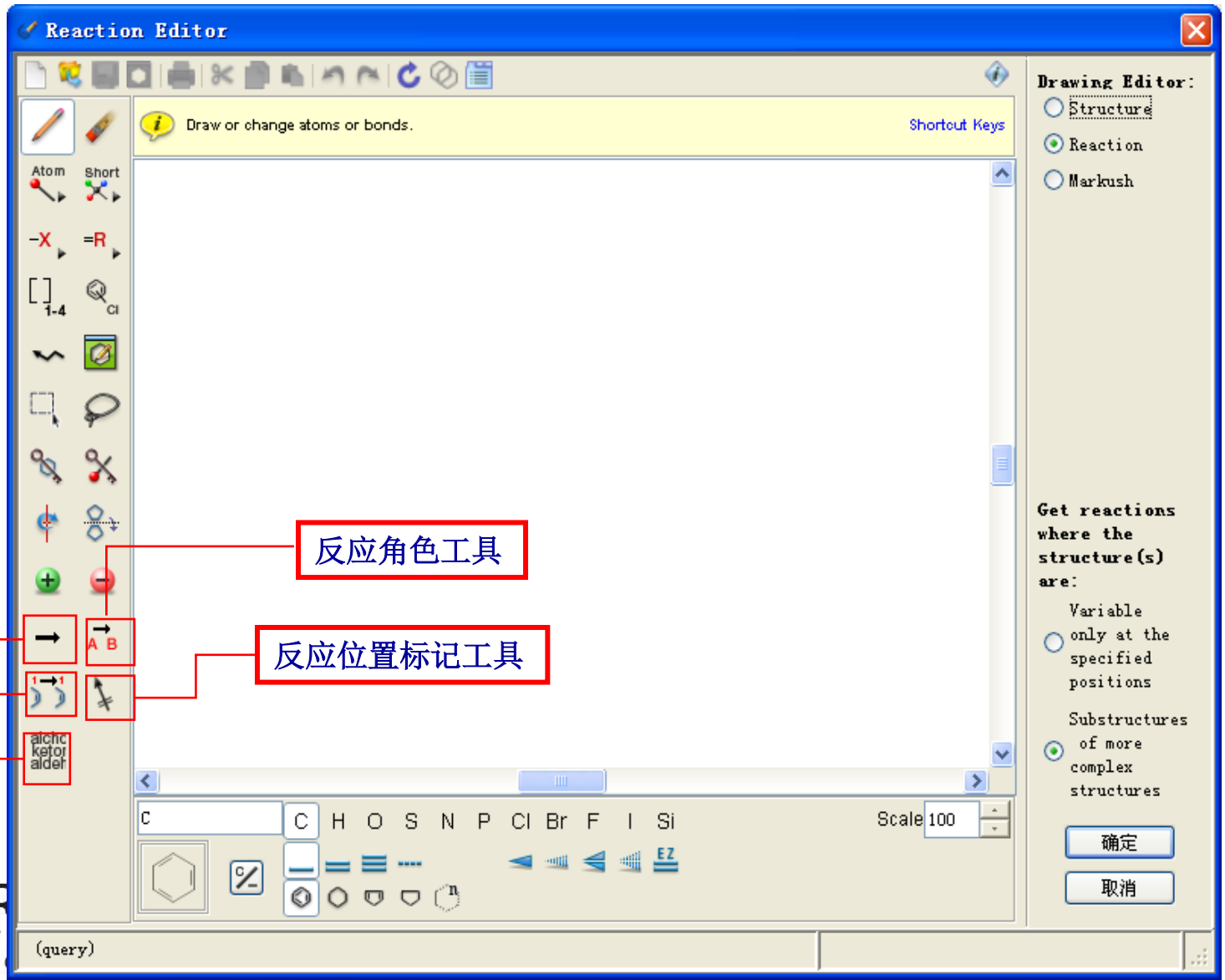
X1，X2，X3为C、N原子，至少有两个是N原子
R1包括COOH基团，R6包括SH基团
保护了我们设计的目标化合物

wherein
each of X1, X2, and X3, independently, is C or N, and at least two of X1, X2, and X3 are each N;
each of R1 and R3, independently, is deleted, H, alkyl, alkenyl, alkynyl, cycloalkyl, cycloalkenyl, heterocycloalkyl, heterocycloalkenyl, aryl, heteroaryl, halo, CN, NO2, ORa, COORa, OC(O)Ra, C(O)Ra, C(O)NRaRb, C(O)N(Ra)N(Rb)C(O)Rc, NRaRb, N(Rc)SO2NRaRb, SO2NRaRb, or SRa, in which each of Ra, Rb, and Rc, independently, is H, alkyl, cycloalkyl, heterocycloalkyl, aryl, or heteroaryl, or Ra and Rb together with the nitrogen atom to which they are attached form heterocycloalkyl or heteroaryl;
R2 is heterocycloalkenyl, aryl, or heteroaryl;
each of R4, R5, R6, and R7, independently, is H, alkyl, alkenyl, alkynyl, cycloalkyl, cycloalkenyl, heterocycloalkyl, heterocycloalkenyl, aryl, heteroaryl, halo, CN, NO2, ORd, COORd, OC(O)Rd, C(O)Rd, C(O)NRdRe, C(O)N(Rd)N(Re)C(O)Rf, NRdRe, N(Rf)SO2NRdRe, SO2NRdRe, or SRd, in which each of Rd, Re, and Rf, independently, is H, alkyl, cycloalkyl, heterocycloalkyl, aryl, or heteroaryl, or Rd and Re together with the nitrogen atom to which they are attached form heterocycloalkyl or heteroaryl.

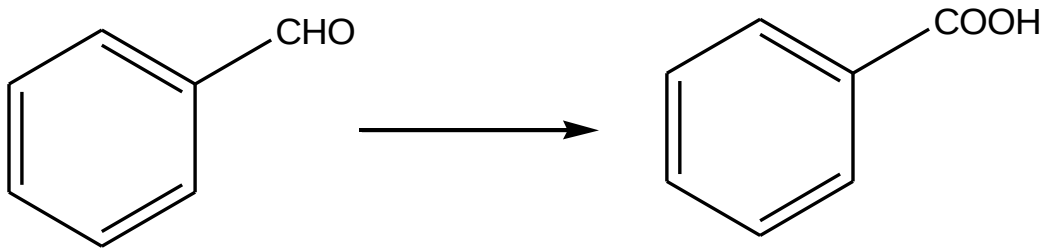
提纲

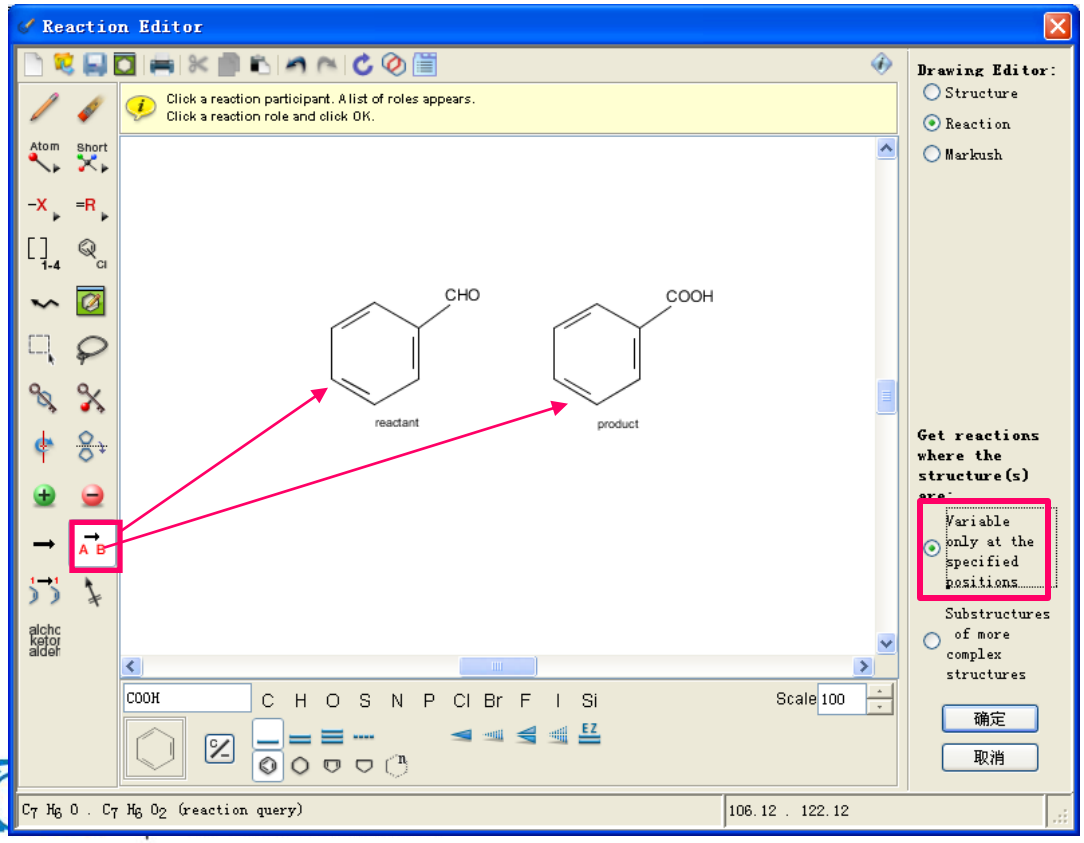
- 介绍
  - SciFinder 中的内容
  - SciFinder 的注册和登陆
- **SciFinder 中的检索和后处理**
  - SciFinder 中的文献检索
  - SciFinder 中的物质检索
  - SciFinder 中的Markush检索
  - SciFinder 中的反应检索
- **SciFinder 特色功能**
- **SciFinder网络资源平台**

SciFinder中的反应定义工具



反应检索—特定物质之间的反应

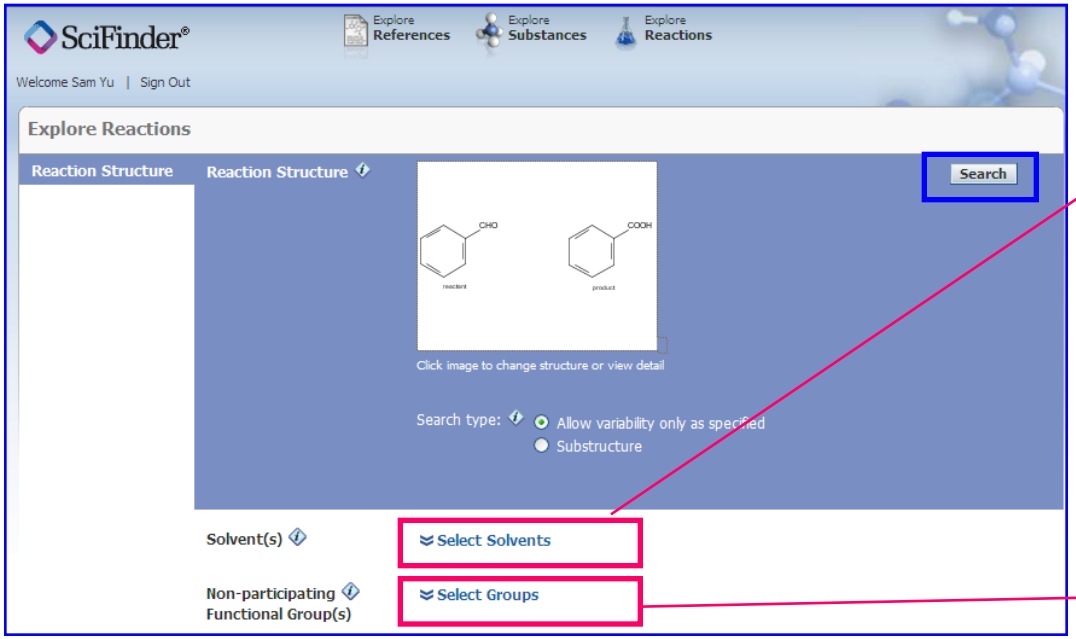


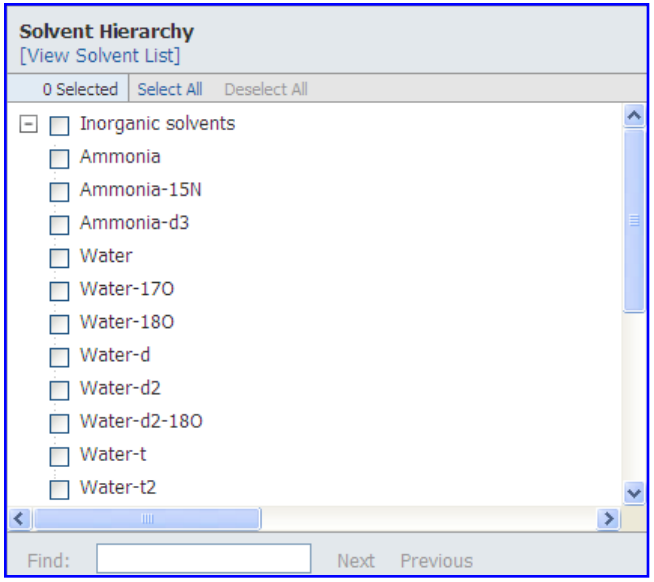


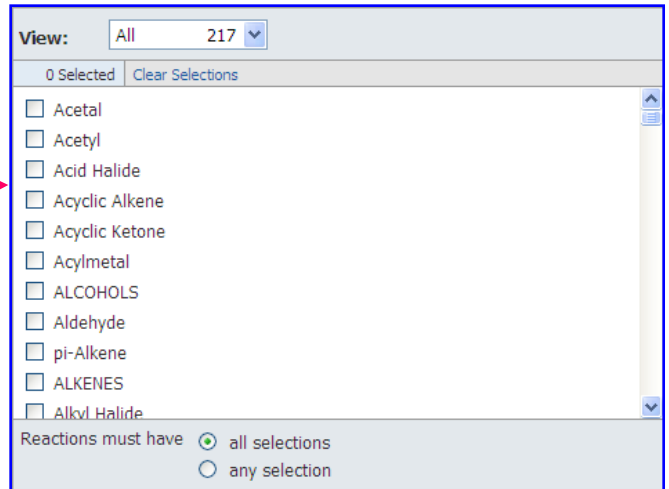
精确反应检索帮助获得特定物质之间的反应，点击确定

可以提前设定反应溶剂和不参与反应的官能团

可以自定义一些反应溶剂以及不参与反应的官能团。





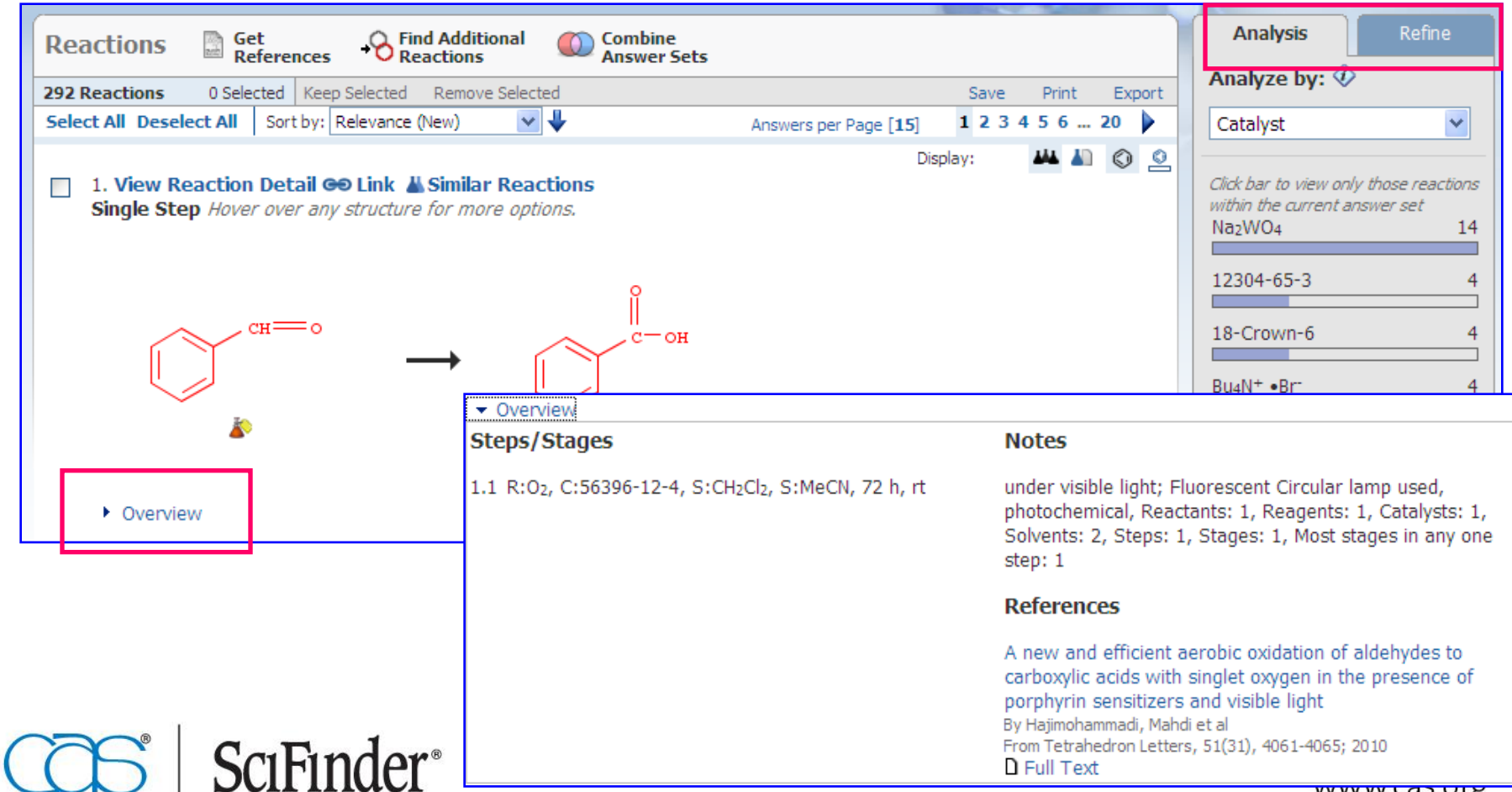


CAS | SciFinder®

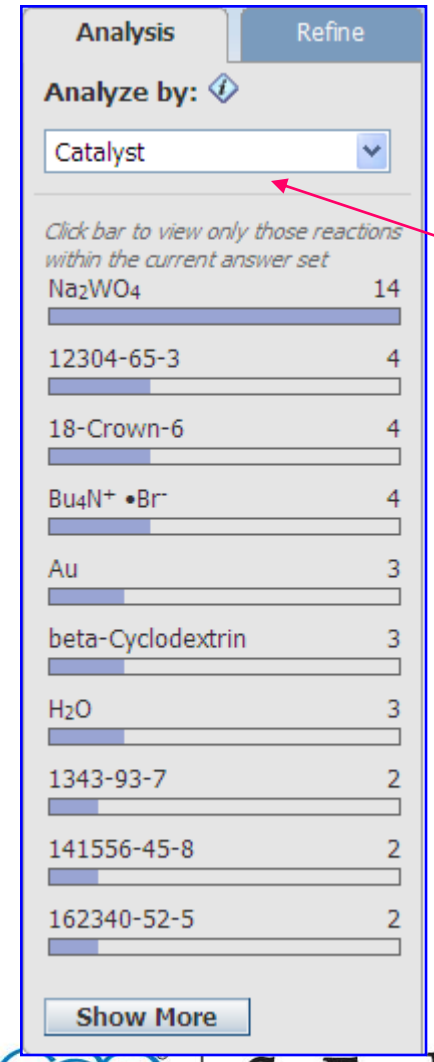
CAS is a division of the American Chemical Society

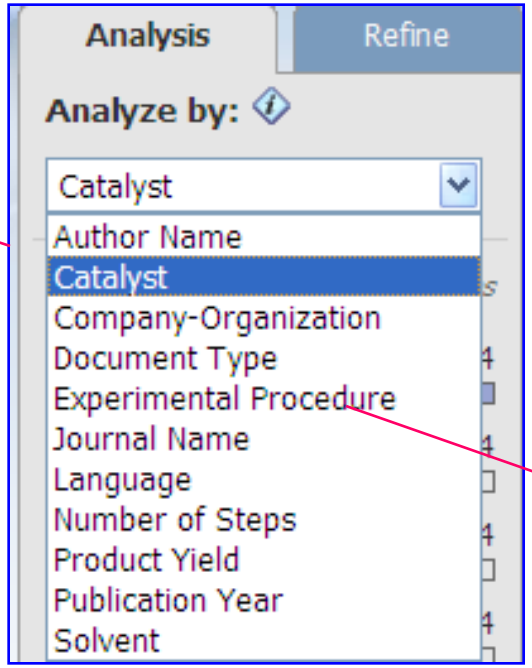
反应检索结果

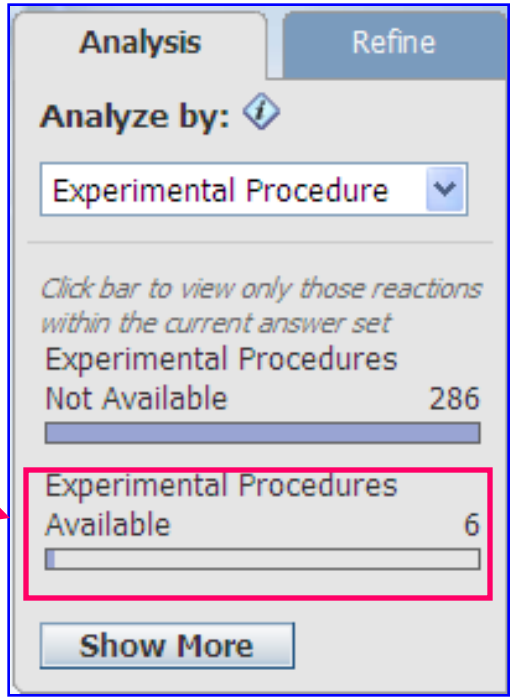
点击**Overview**查看具体信息



反应结果分析



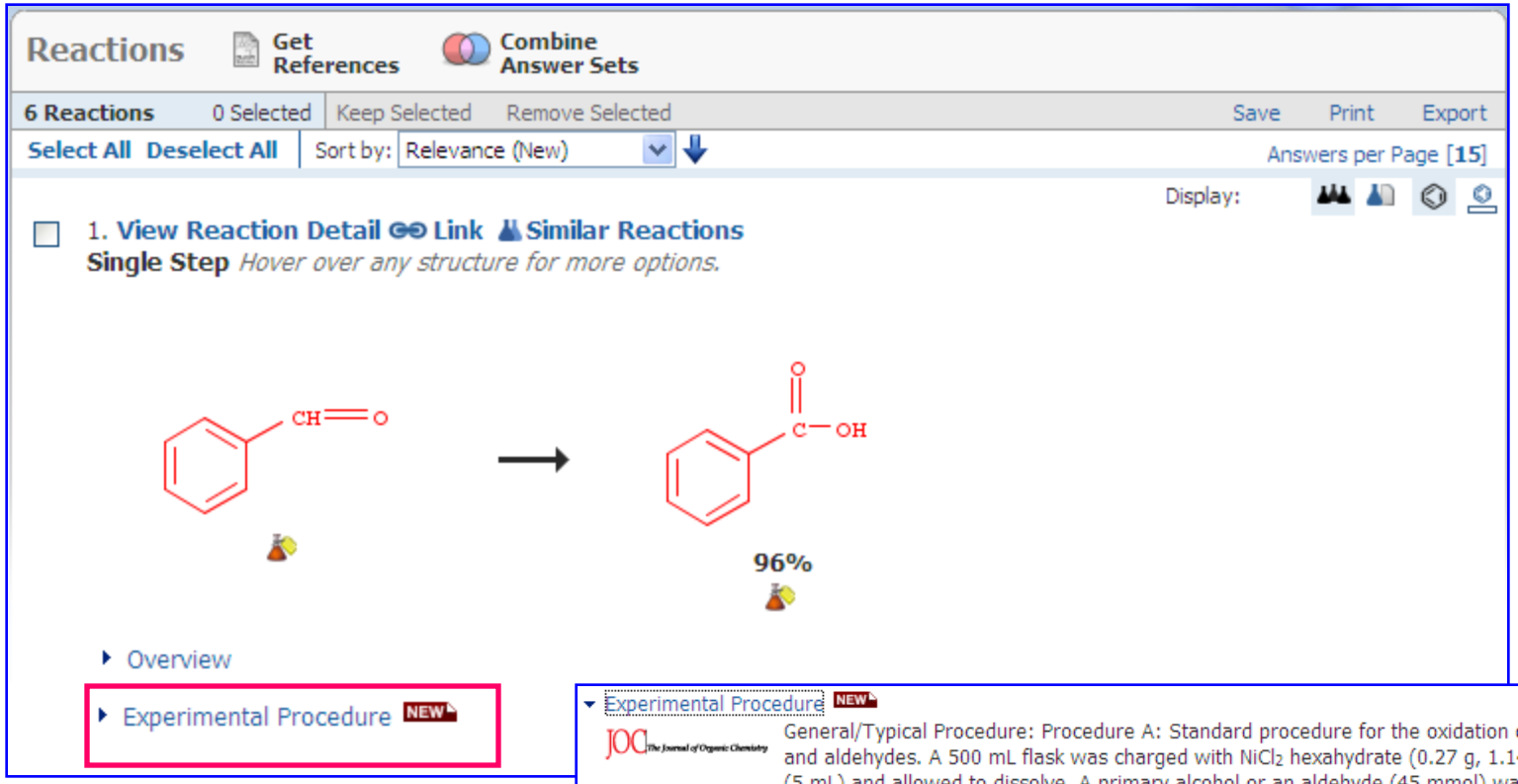


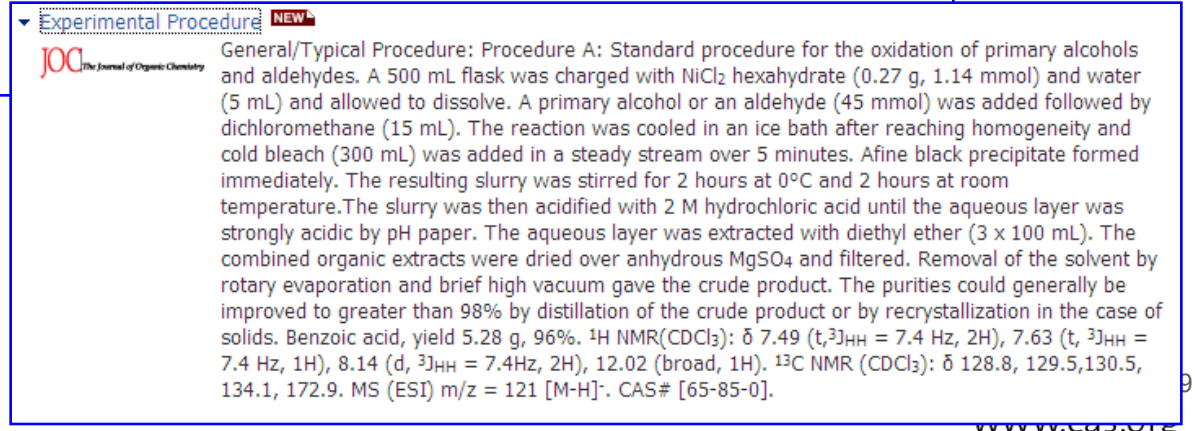


催化剂分析，用于找到经济型催化剂

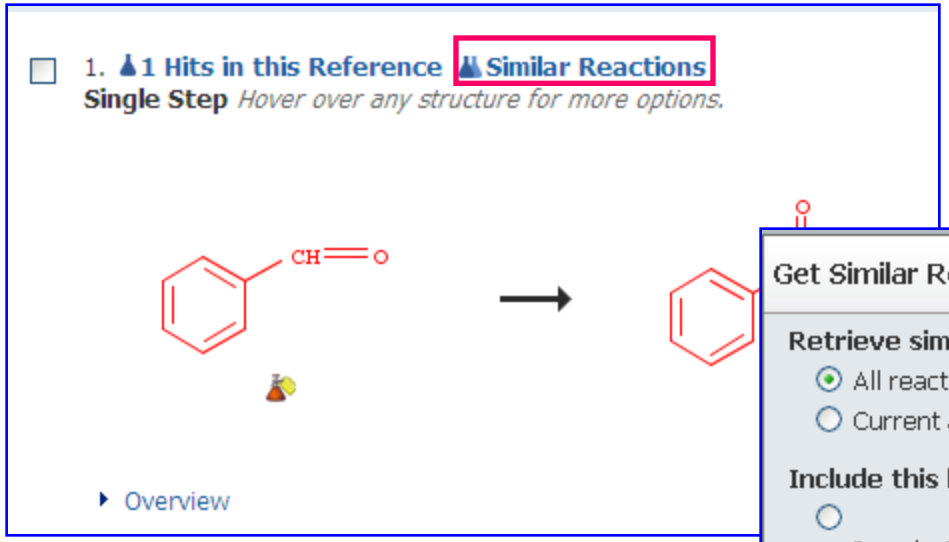
实验过程分析，用于找到有实验过程描述的反应

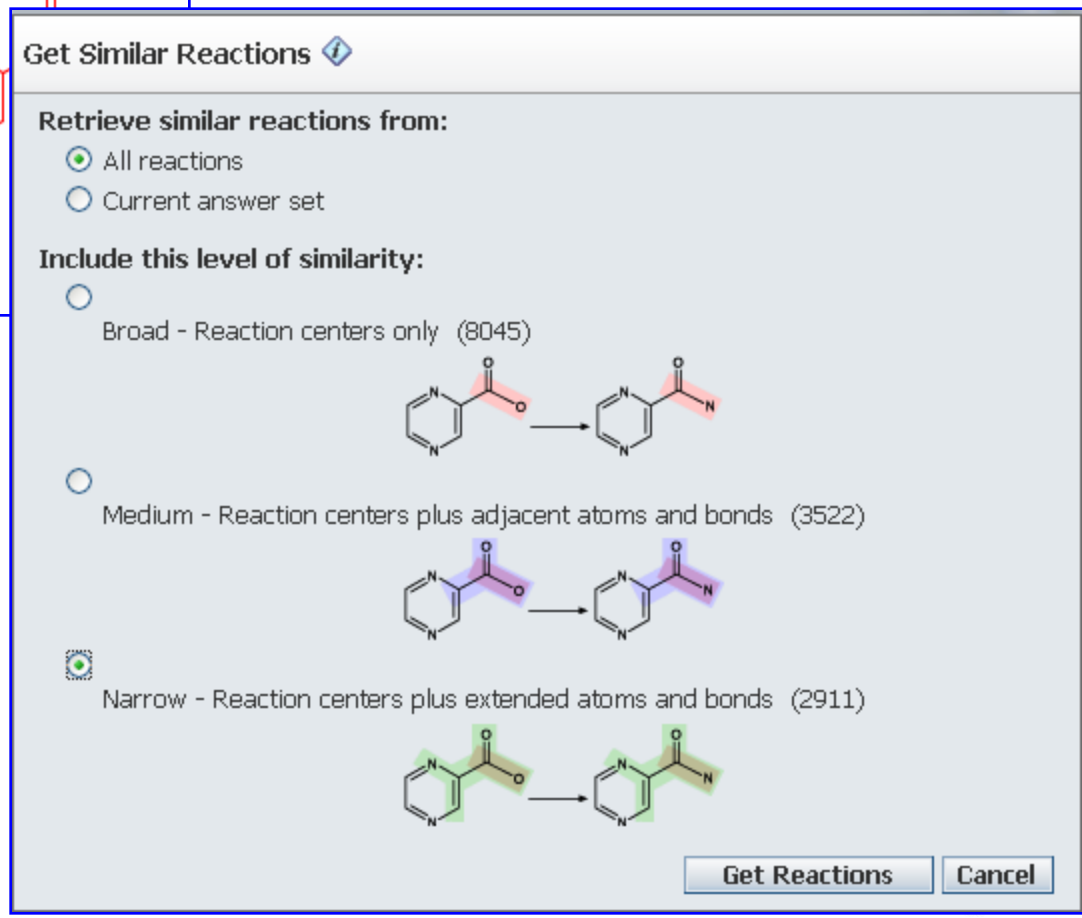
查看实验过程


Reactions
Get References
Combine Answer Sets
6 Reactions
0 Selected
Keep Selected
Remove Selected
Save
Print
Export
Select All
Deselect All
Sort by:
Relevance (New)
Answers per Page [15]
Display:
1. View Reaction Detail
Link
Similar Reactions
Single Step
Hover over any structure for more options.
CH=O
C—OH
96%
Overview
Experimental Procedure
NEW


Experimental Procedure
NEW
JOC
The Journal of Organic Chemistry
General/Typical Procedure: Procedure A: Standard procedure for the oxidation of primary alcohols and aldehydes. A 500 mL flask was charged with NiCl2 hexahydrate (0.27 g, 1.14 mmol) and water (5 mL) and allowed to dissolve. A primary alcohol or an aldehyde (45 mmol) was added followed by dichloromethane (15 mL). The reaction was cooled in an ice bath after reaching homogeneity and cold bleach (300 mL) was added in a steady stream over 5 minutes. Afine black precipitate formed immediately. The resulting slurry was stirred for 2 hours at 0°C and 2 hours at room temperature.The slurry was then acidified with 2 M hydrochloric acid until the aqueous layer was strongly acidic by pH paper. The aqueous layer was extracted with diethyl ether (3 x 100 mL). The combined organic extracts were dried over anhydrous MgSO4 and filtered. Removal of the solvent by rotary evaporation and brief high vacuum gave the crude product. The purities could generally be improved to greater than 98% by distillation of the crude product or by recrystallization in the case of solids. Benzoic acid, yield 5.28 g, 96%. 1H NMR(CDCl3): δ 7.49 (t, 3JHH = 7.4 Hz, 2H), 7.63 (t, 3JHH = 7.4 Hz, 1H), 8.14 (d, 3JHH = 7.4Hz, 2H), 12.02 (broad, 1H). 13C NMR (CDCl3): δ 128.8, 129.5,130.5, 134.1, 172.9. MS (ESI) m/z = 121 [M-H]-. CAS# [65-85-0].

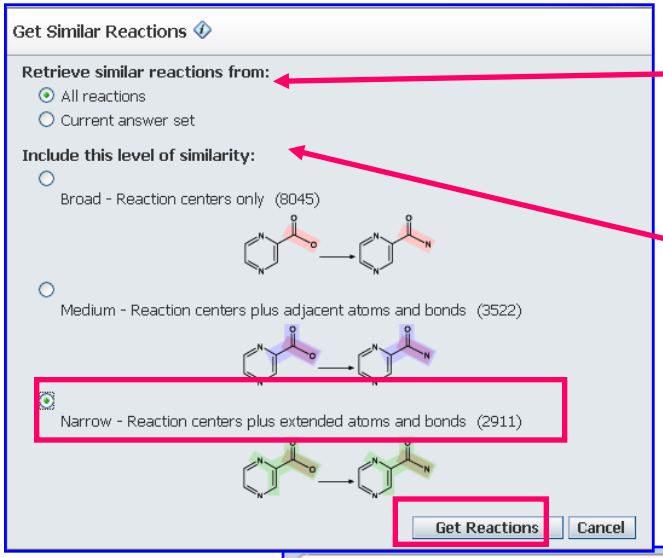
获得反应中心相似的反应





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。

选择相似级别



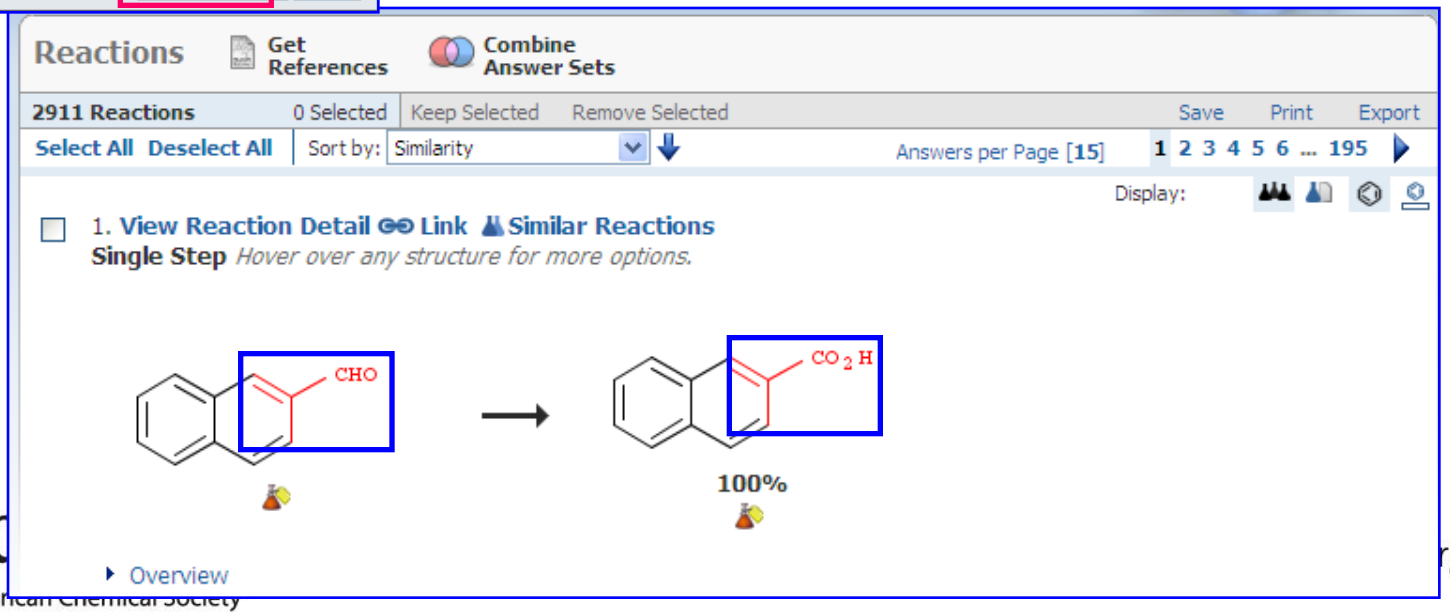
对于选择是全部反应中检索相似反应，还是在当前结果集中检索相似反应

选择相似反应的相似限制

Broad：仅反应中心相似

Miedum：反应中心及附属原子和健

Narrow：反应中心及扩展的原子和健



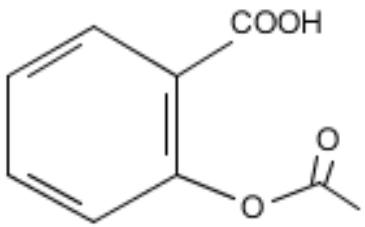
如何加工整合得到一份完整的合成路线报告？

合成路线

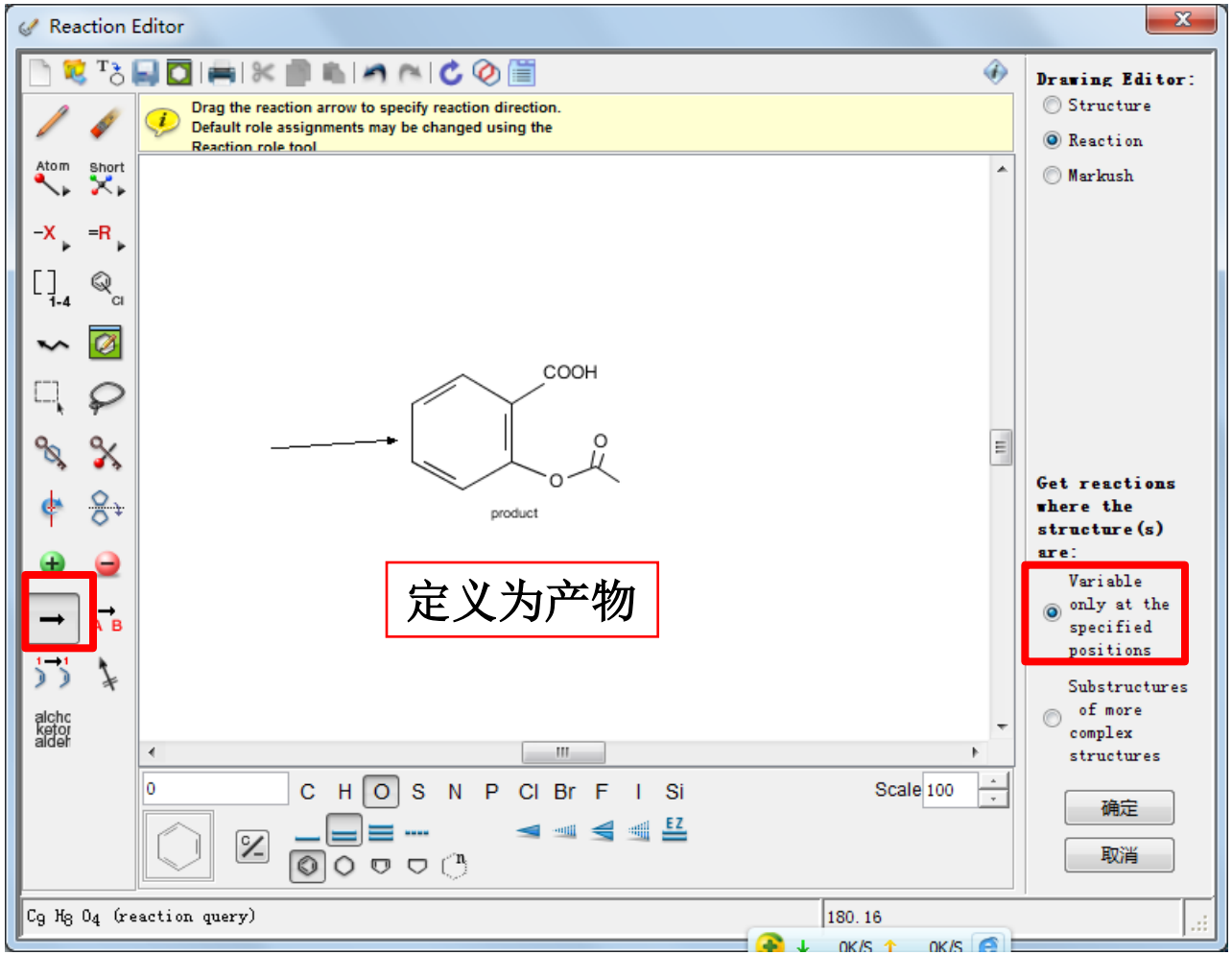
Sciplanner

中间体物质信息

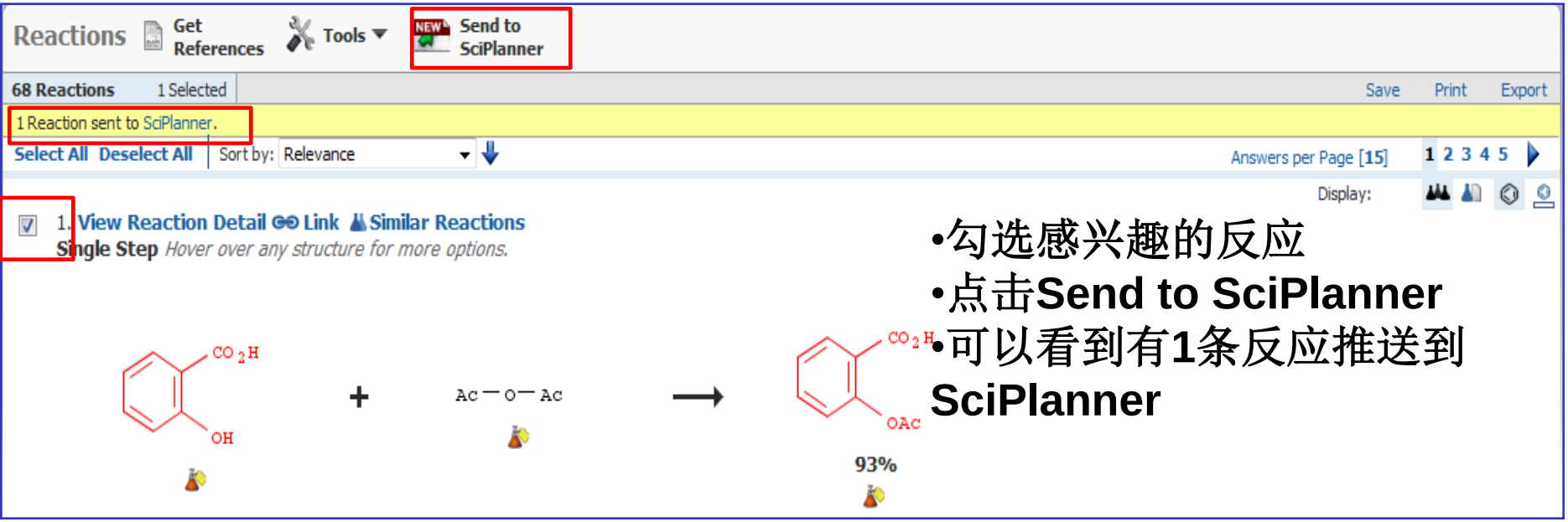
阿司匹林的合成路线报告



阿司匹林

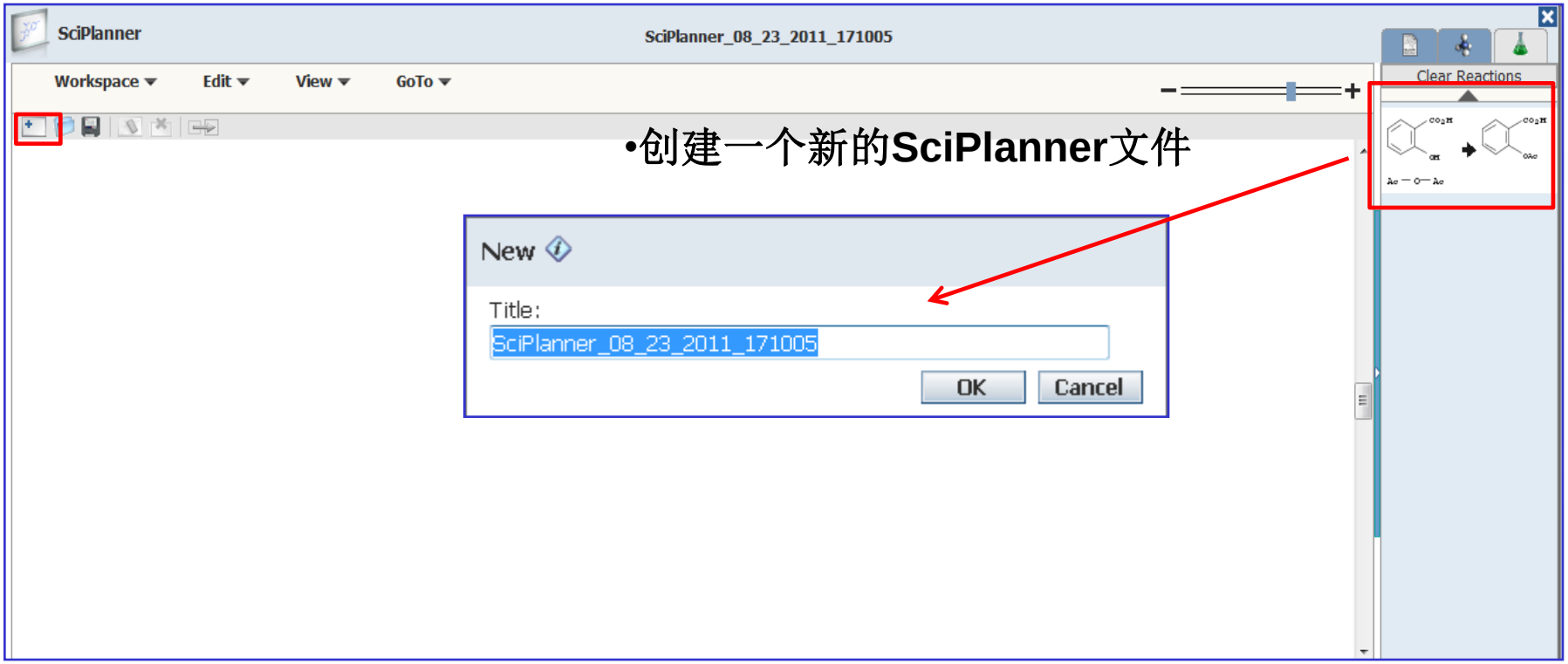


SciPlanner—检索结果的智能编辑器

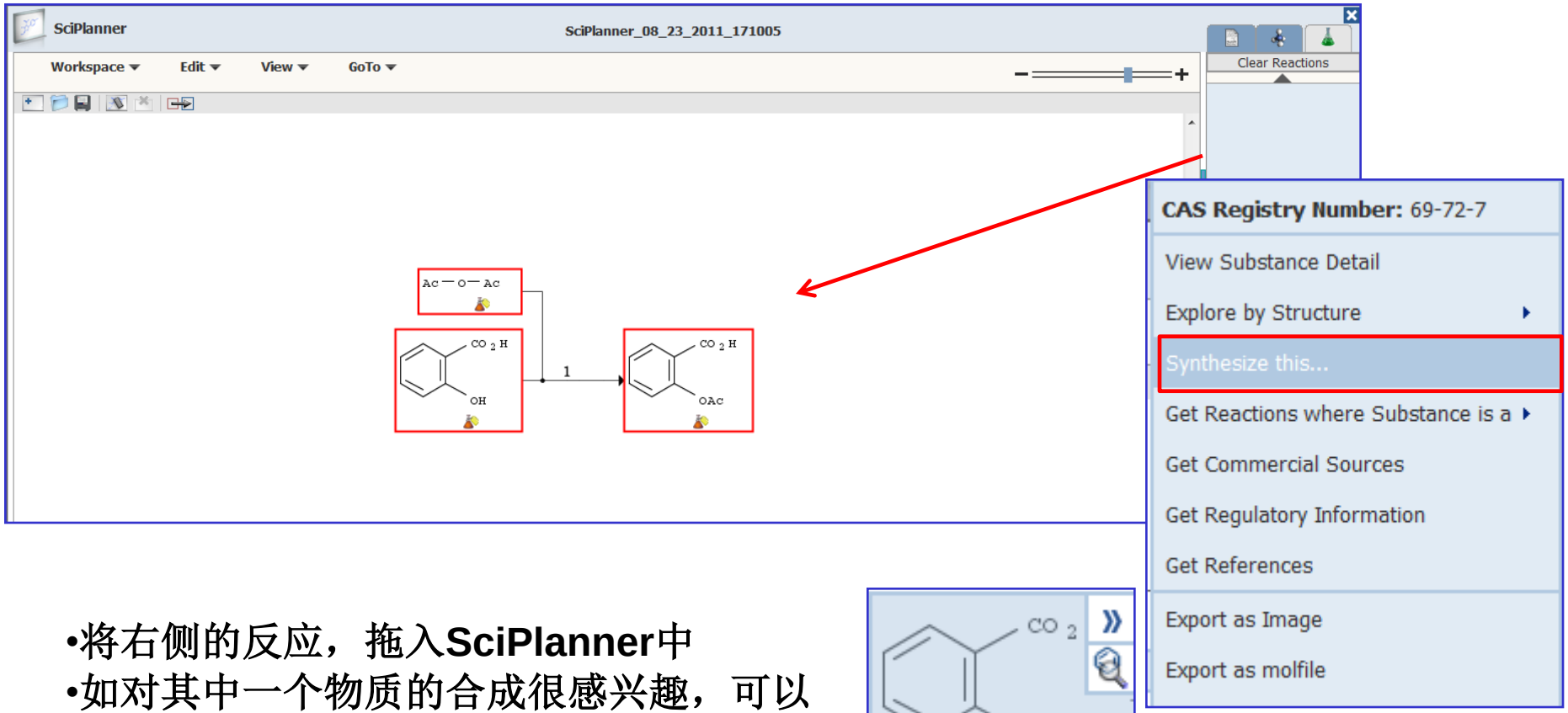


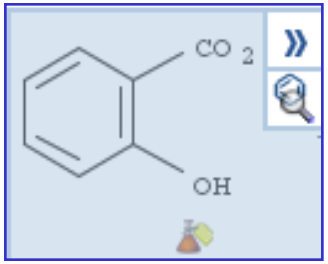
- 勾选感兴趣的反应
- 点击**Send to SciPlanner**
- 可以看到有**1**条反应推送到**SciPlanner**

SciPlanner—主面板



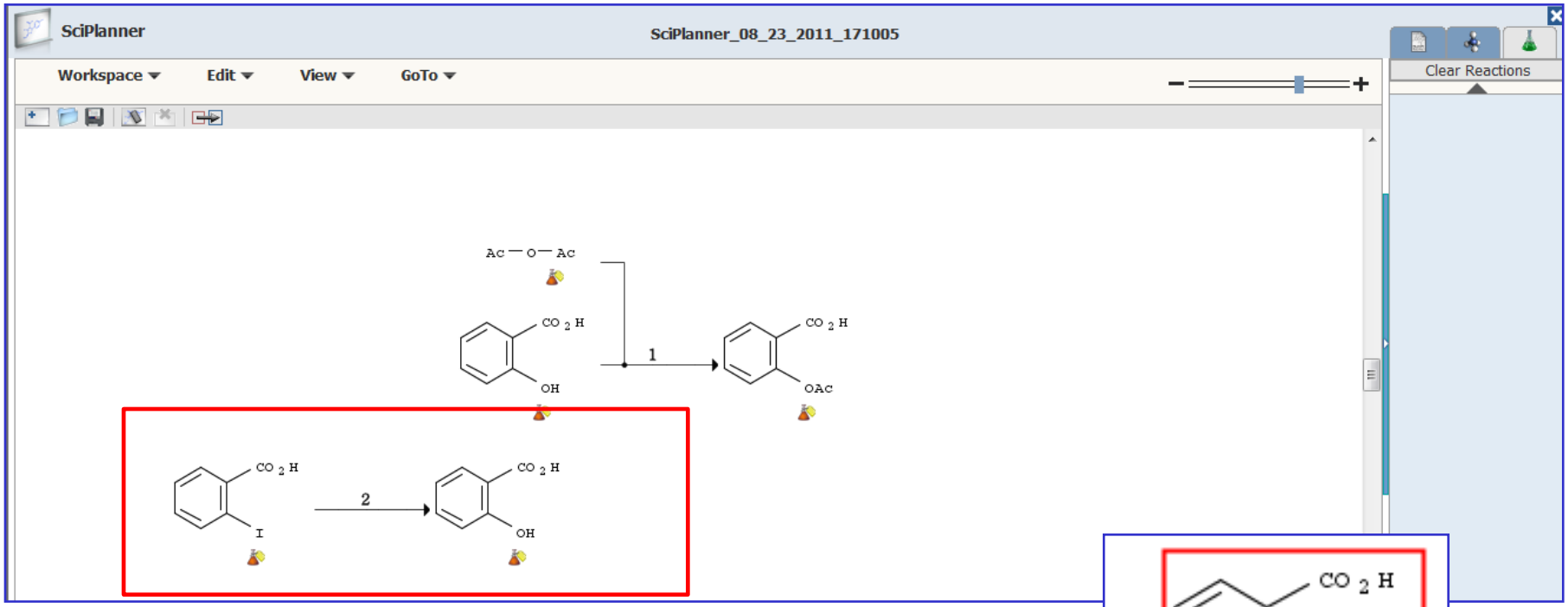
SciPlanner—拖入反应，并尝试中间体的合成检索

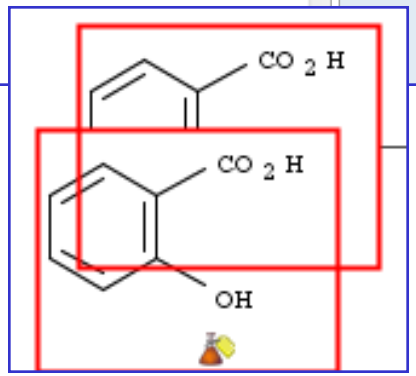




- 将右侧的反应，拖入**SciPlanner**中
- 如对其中一个物质的合成很感兴趣，可以直接点击，使用物质标准菜单，获得它的合成方法

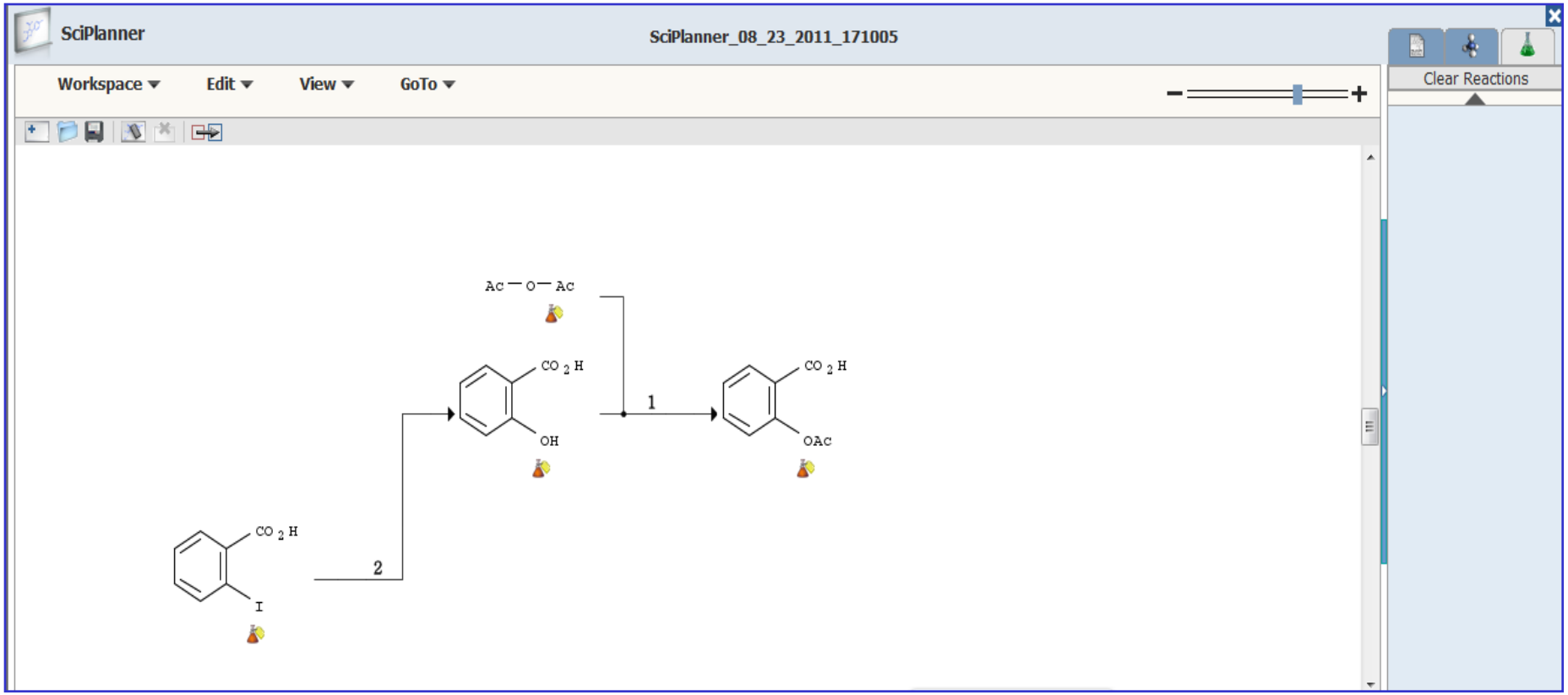
SciPlanner—将中间体的合成路线添加至SciPlanner



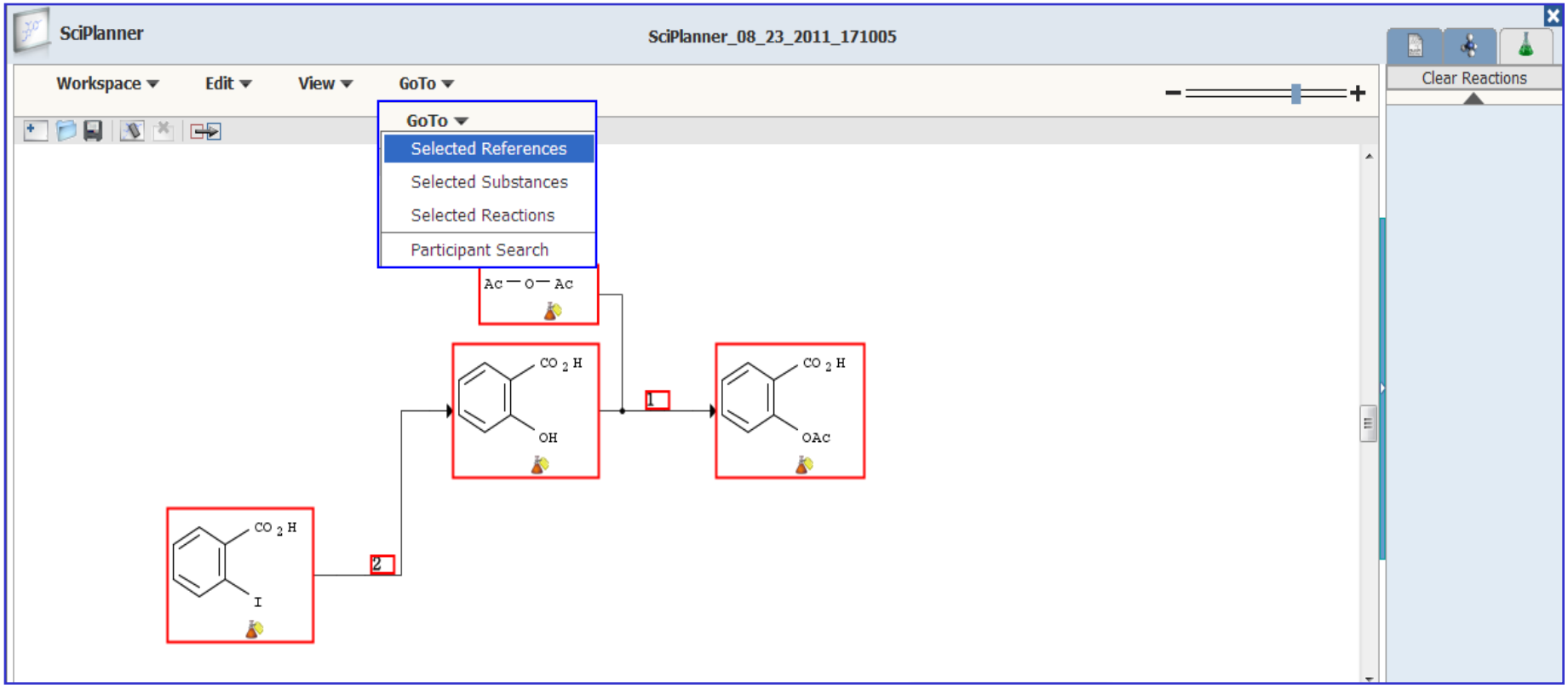


- 类似上述的步骤，将中间体的反应拖至**SciPlanner**中
- 可以看到这两条反应的产物和反应物是同样的
- 用鼠标将这两个结构拖至重贴状态

编辑为完整的反应路线


SciPlanner
SciPlanner_08_23_2011_171005
Workspace
Edit
View
GoTo
Clear Reactions
Ac—O—Ac
CO2H
OH
1
CO2H
OAc
CO2H
I
2

SciPlanner—获得反应对应的文献

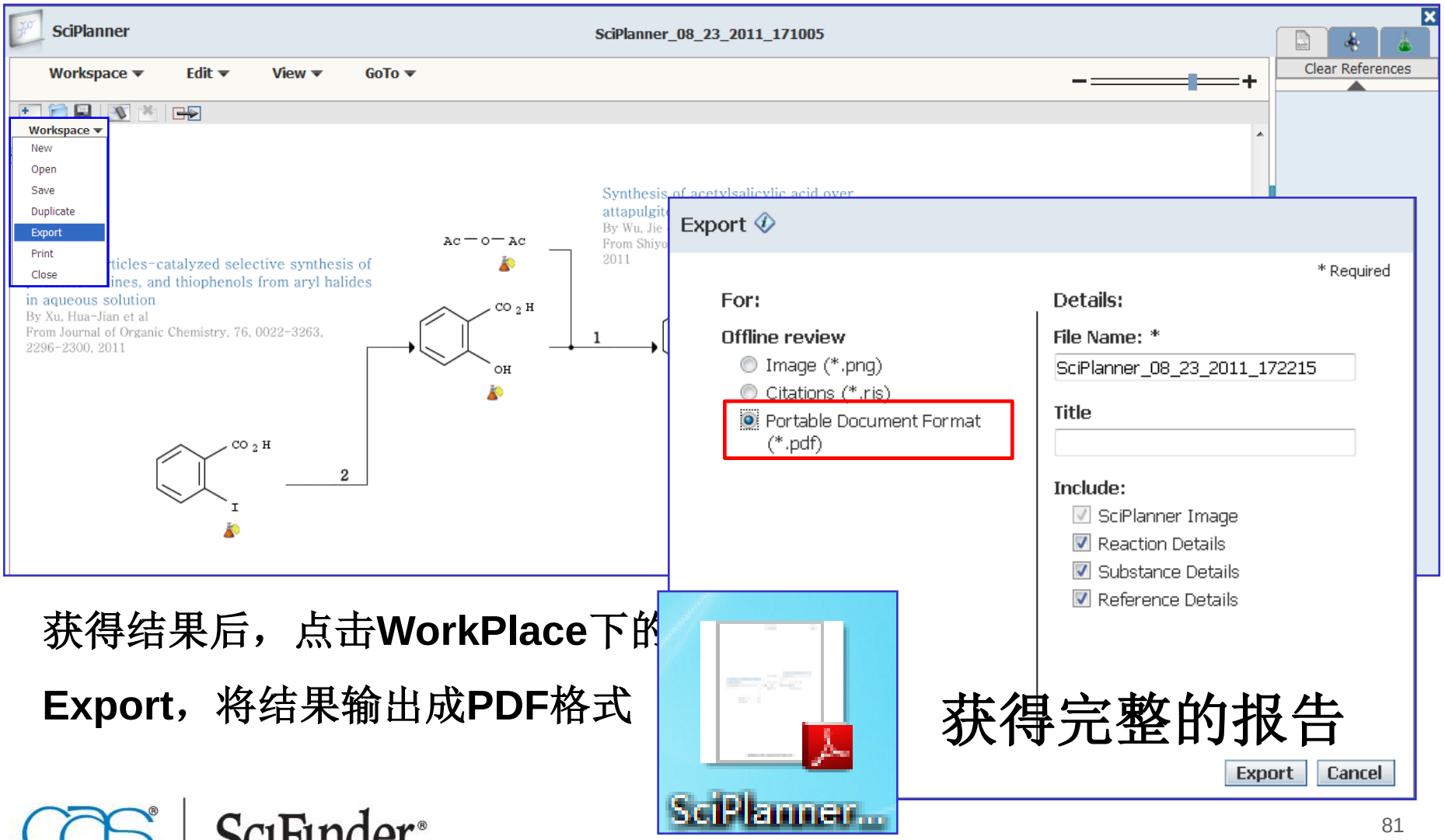


- 框选所有的反应，所有的结构都显示为红色
- 点击上面的**Goto**，选择**Selected References**

SciPlanner—反应对应的文献

- 勾选文献
- **Send to SciPlanner**
- **2篇文献推送到SciPlanner中**

SciPlanner—自由组合文献和反应的排列



获得结果后，点击**WorkPlace**下的

Export，将结果输出成**PDF**格式

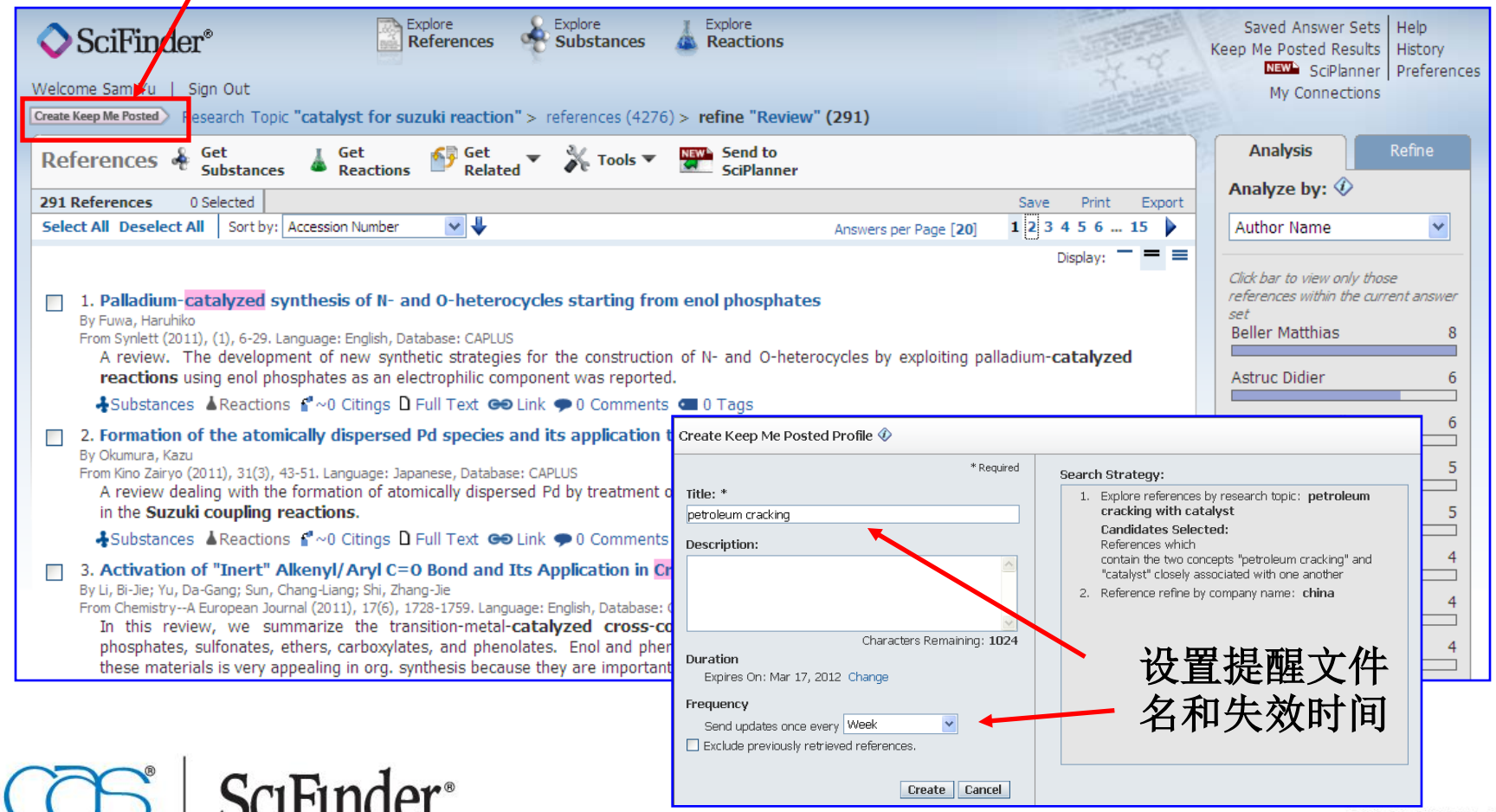
获得完整的报告

提纲

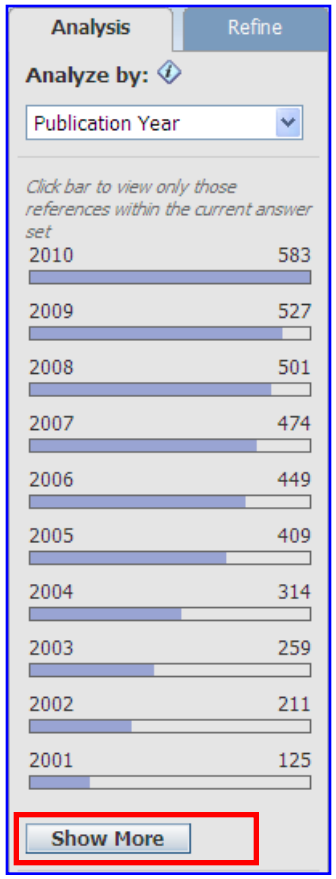
- 介绍
  - SciFinder 中的内容
  - SciFinder 的注册和登陆
- **SciFinder 中的检索和后处理**
  - SciFinder 中的文献检索
  - SciFinder 中的物质检索
  - SciFinder 中的Markush检索
  - SciFinder 中的反应检索
- **SciFinder 特色功能**
- **SciFinder网络资源平台**

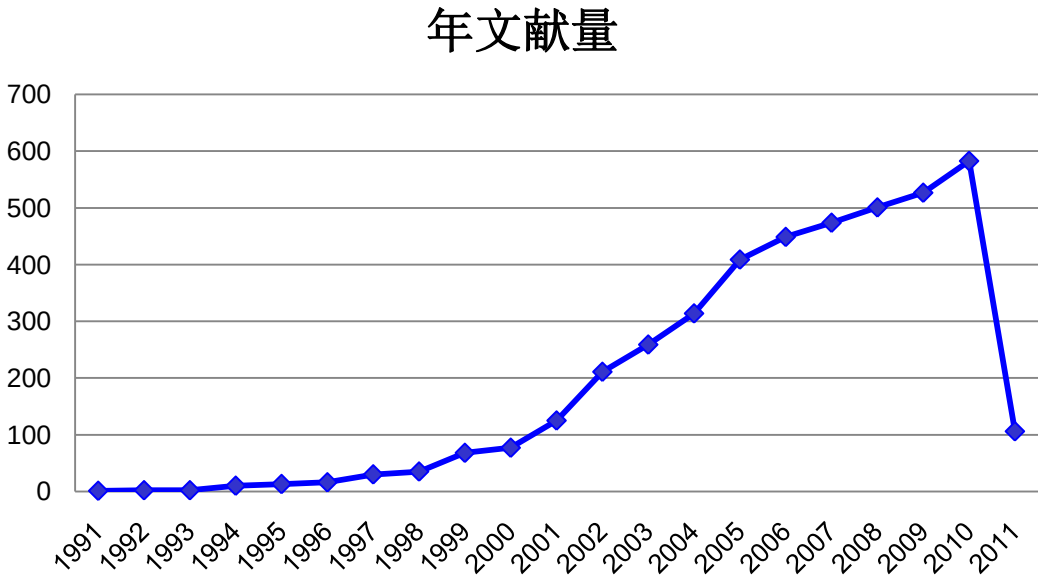
SciFinder特色功能—KMP定题查询

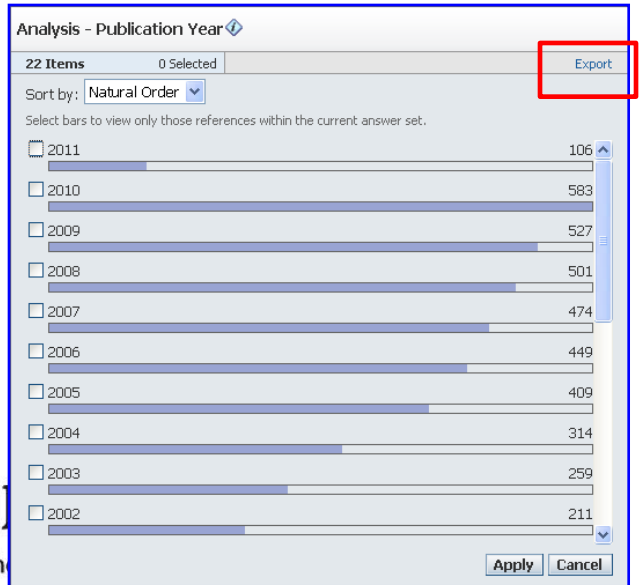
设定**Email**提醒，一旦有新的记录，会发邮件通知



SciFinder特色功能—分析结果的导出





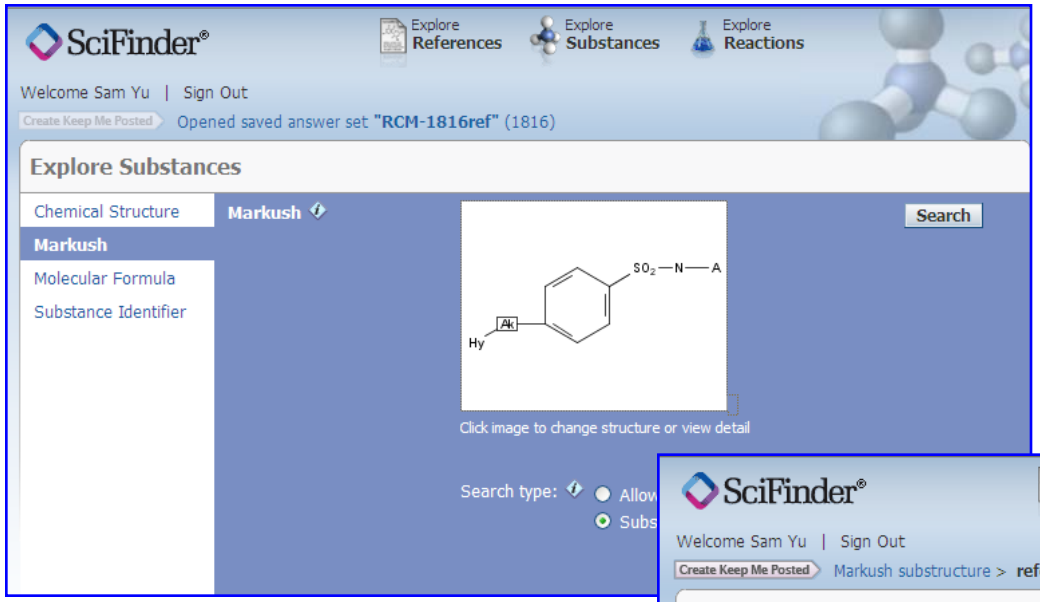


年文献量趋势图，帮助了解课题在全球范围内的研究状态。

SciFinder特色功能—物质标准菜单

在SciFinder中，鼠标滑过物质，可以打开物质的标准菜单，通过标准菜单，可以获得和物质有关的所有内容

SciFinder特色功能---Markush检索

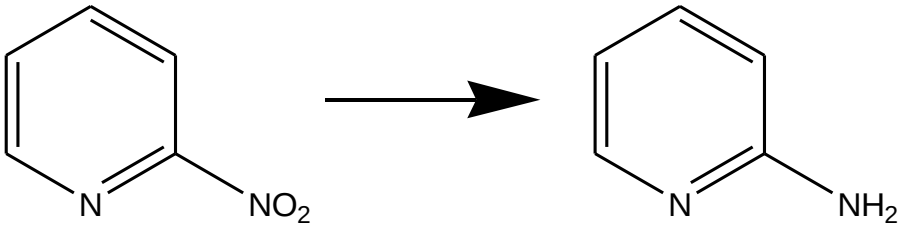


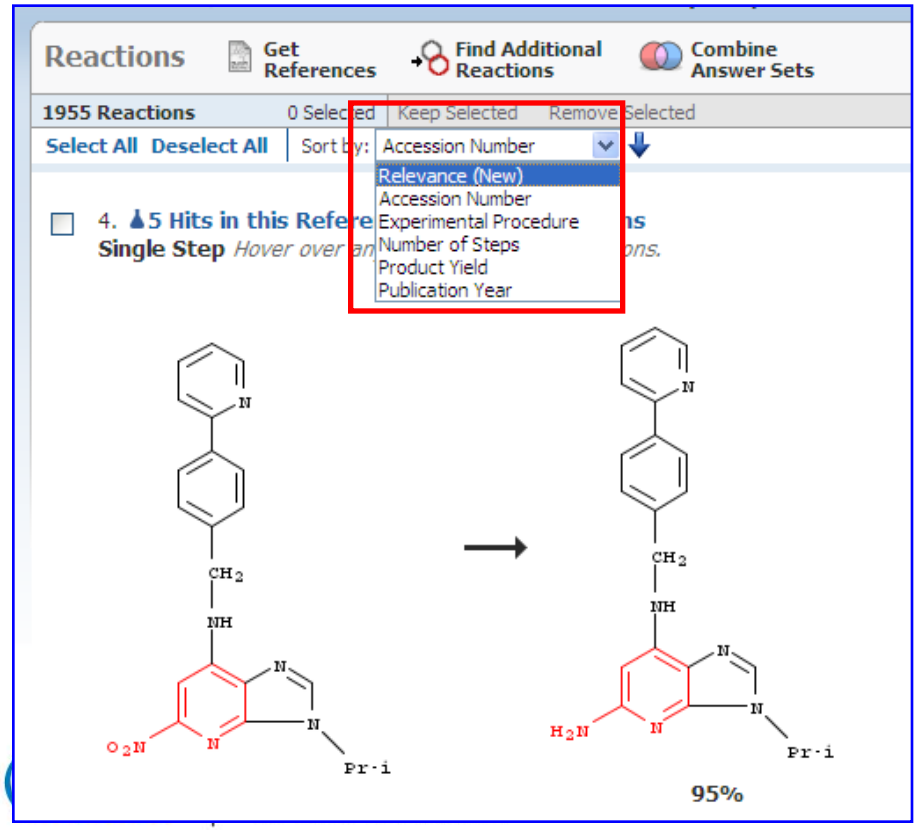
直接检索和结构有关的专利，用于做初步的专利评估

CAS | SciFinder®

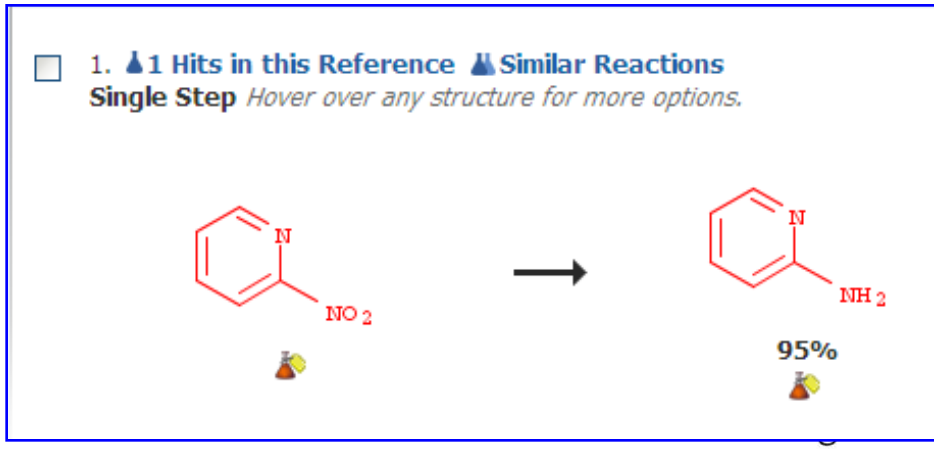
CAS is a division of the American Chemical Society

SciFinder特色功能—反应关联度排序

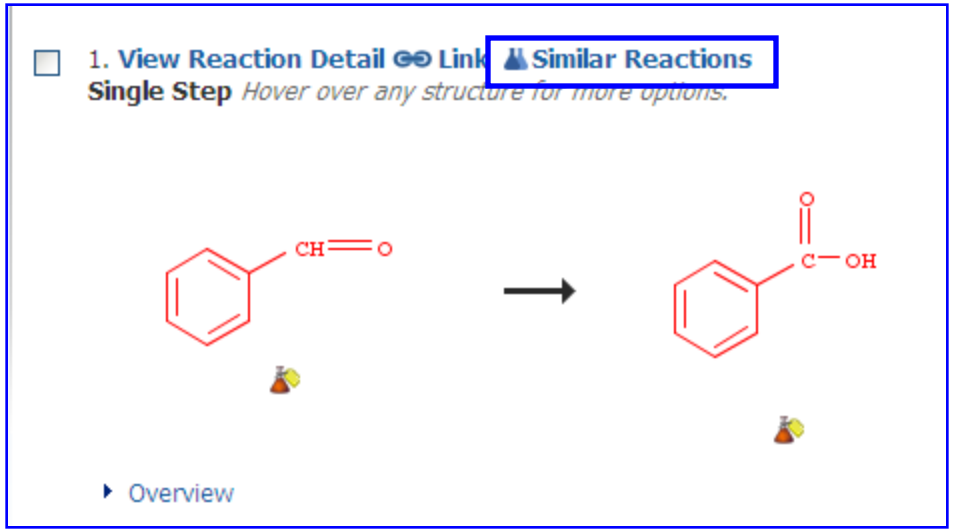




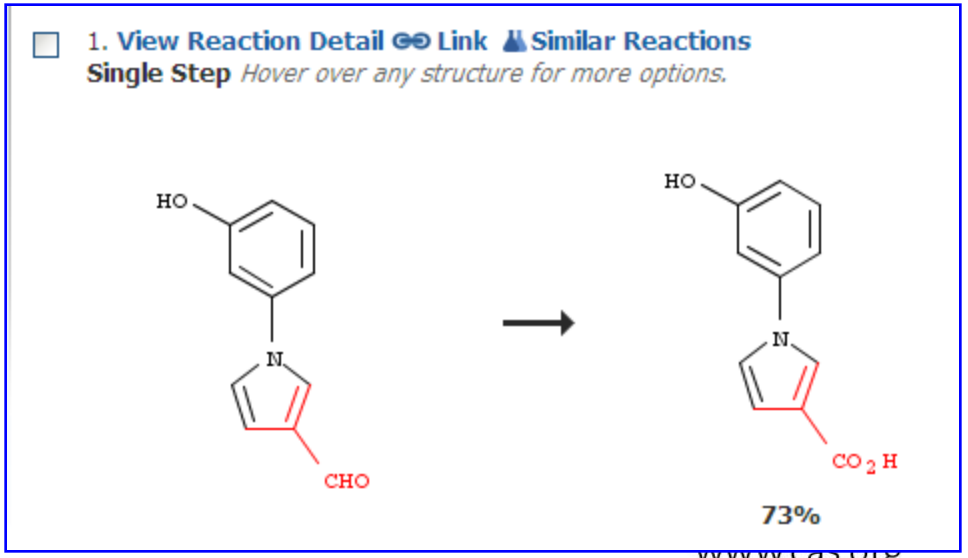
提供按照关联度排序，在亚结构检索反应时，可以将和所画结构最相近的反应，排在前面



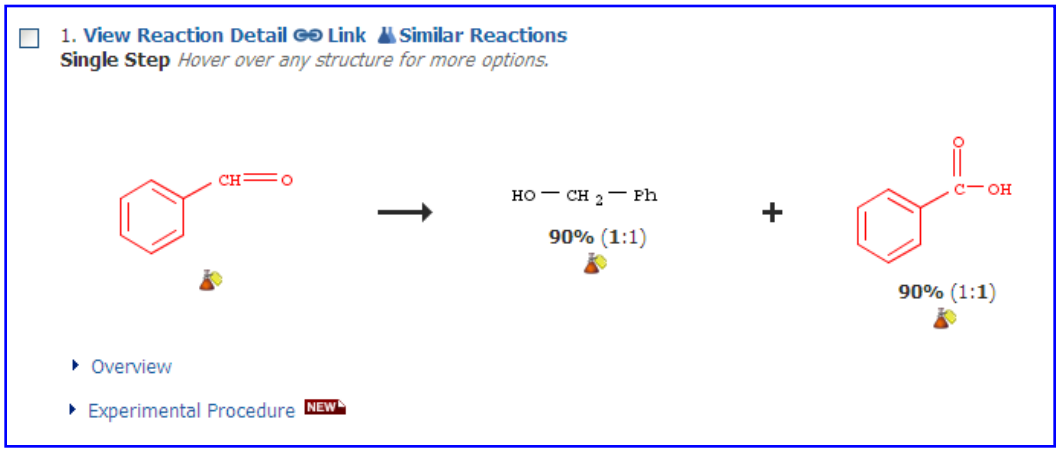
SciFinder特色功能—相似反应检索



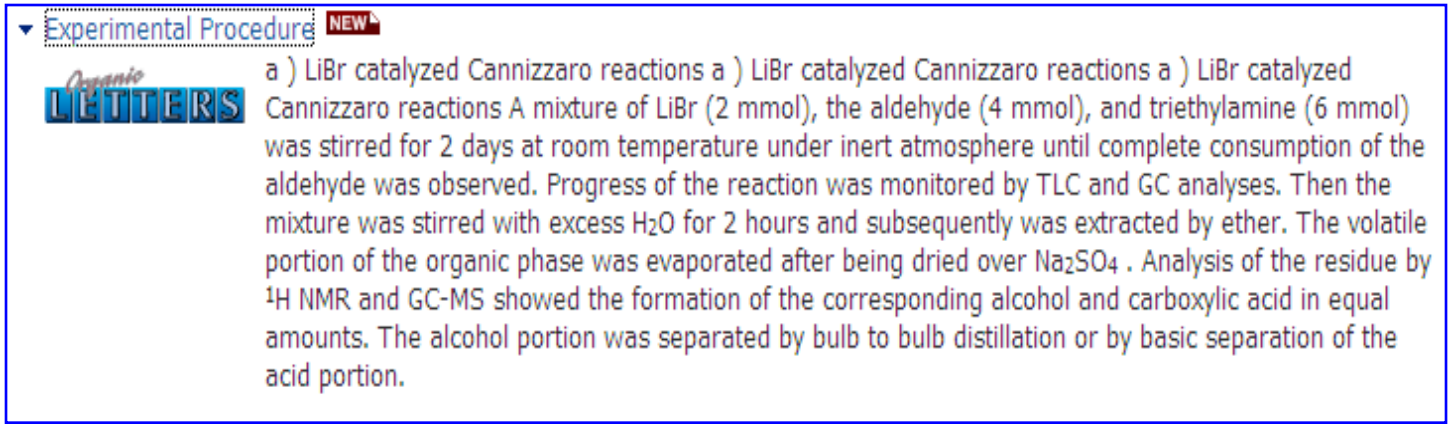
相似反应检索，依据相似级别的设定，帮助获取反应中心相同的反应



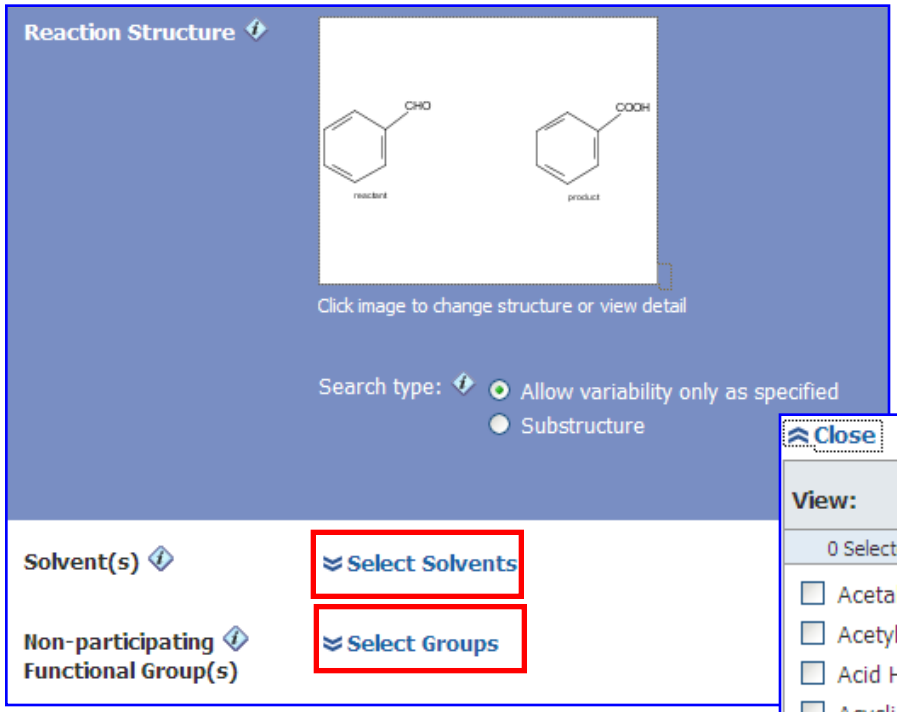
SciFinder特色功能—反应过程的获取

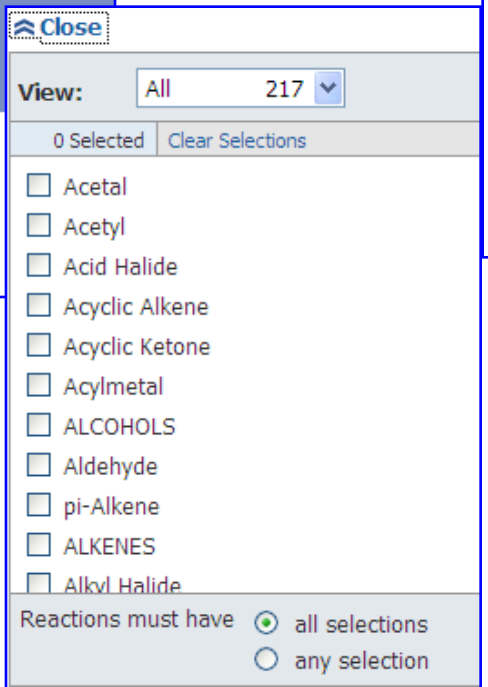


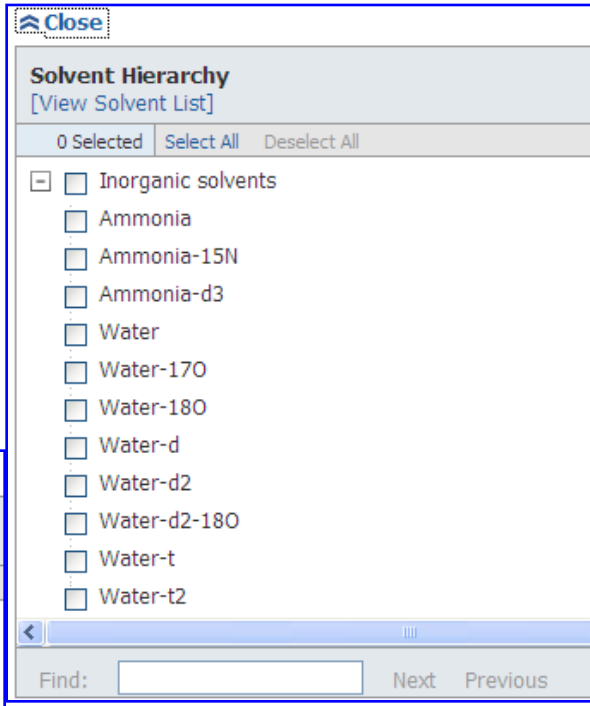
SciFinder中的部分源自期刊和专利中的反应，提供了反应过程信息，使得科研工作者不需要阅读原文，就可以获得对应的反应历程。



SciFinder特色功能—反应溶剂，不反应官能团设定



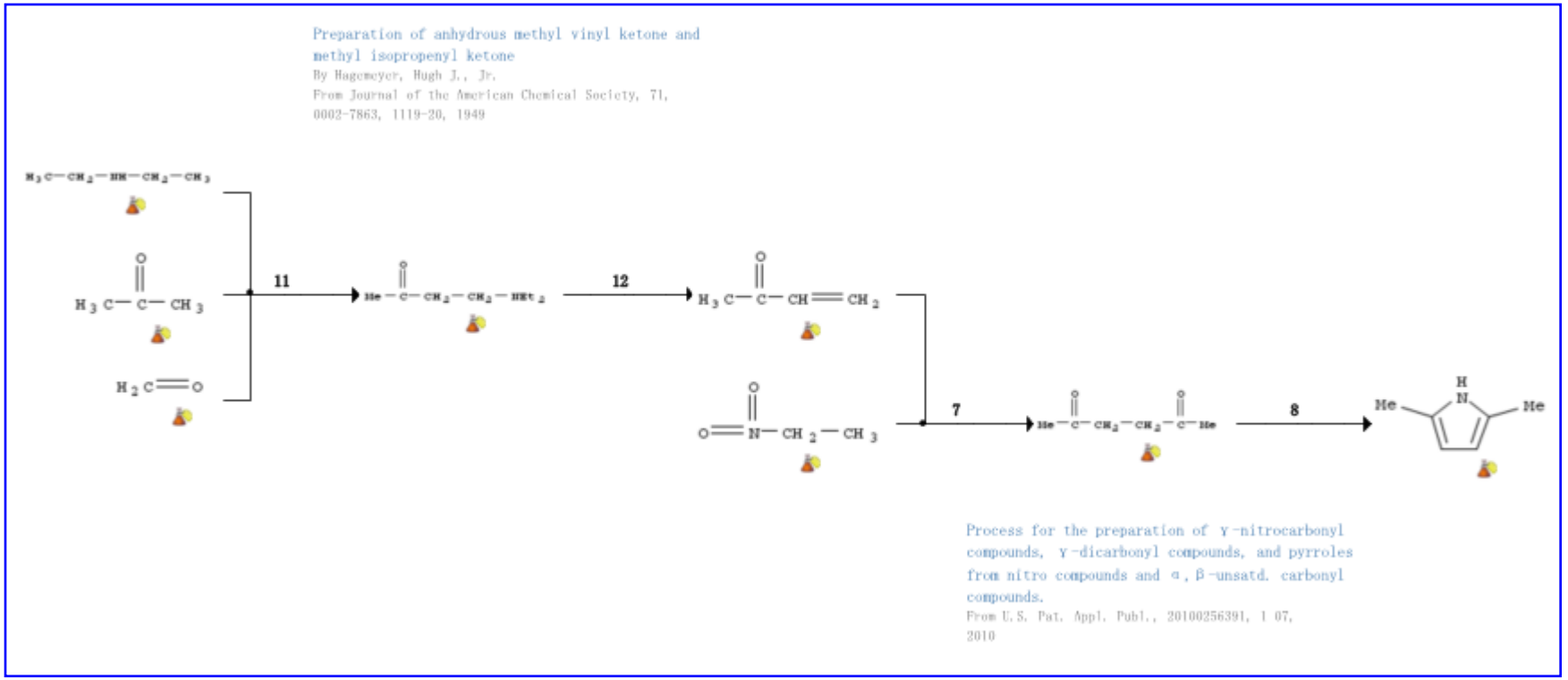




定义反应中的溶剂
定义反应中不参与反应的官能团

CAS | SciFinder®
CAS is a division of the American Chemical Society

SciFinder特色功能—SciPlanner



提纲

- 介绍
  - SciFinder 中的内容
  - SciFinder 的注册和登陆
- **SciFinder 中的检索和后处理**
  - SciFinder 中的文献检索
  - SciFinder 中的物质检索
  - SciFinder 中的Markush检索
  - SciFinder 中的反应检索
- **SciFinder 特色功能**
- **SciFinder网络资源平台**

网络在线资源平台

www.igroup.com.cn/cas

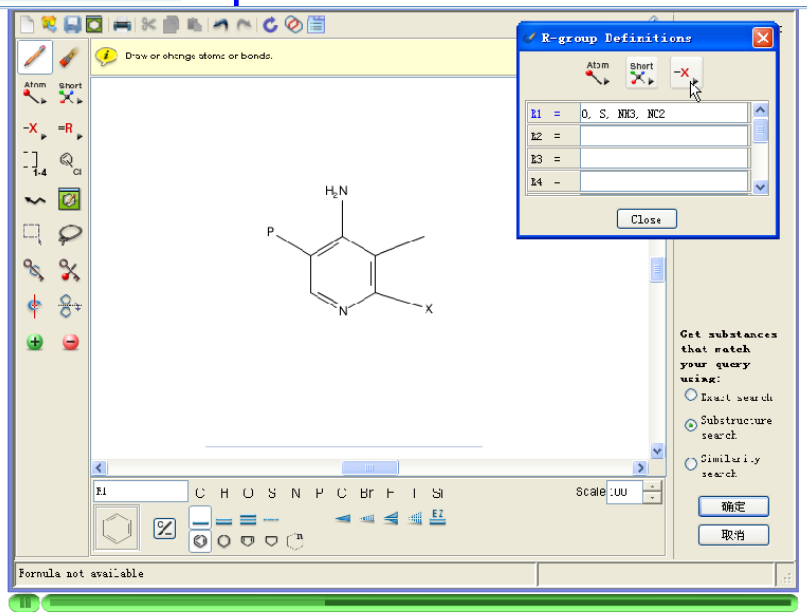
资源下载：**PDF文件**

在线演示：**Flash演示**

网络培训：不定期的网络专题培训

Flash演示

在线演示，录制了不同检索类型下的检索步骤，帮助了解更加细节的内容.



CAS | SciFinder®

CAS is a division of the American Chemical Society

SciFinder®

Essential content. Proven results.™

谢谢！

有任何问题请发至以下邮箱

Amy@igroup.com.cn