

#### SciFinder Web使用介绍

刘衍兰

SciFinder培训专员

2014.3

#### 提纲



- 介绍
  - SciFinder Web中的内容
- SciFinder Web中的检索和后处理
  - SciFinder Web中的文献记录及主题检索
  - SciFinder Web中的物质结果及物质检索方法
  - SciFinder Web中的反应记录及反应检索
- SciFinder Web的注册和常见问题



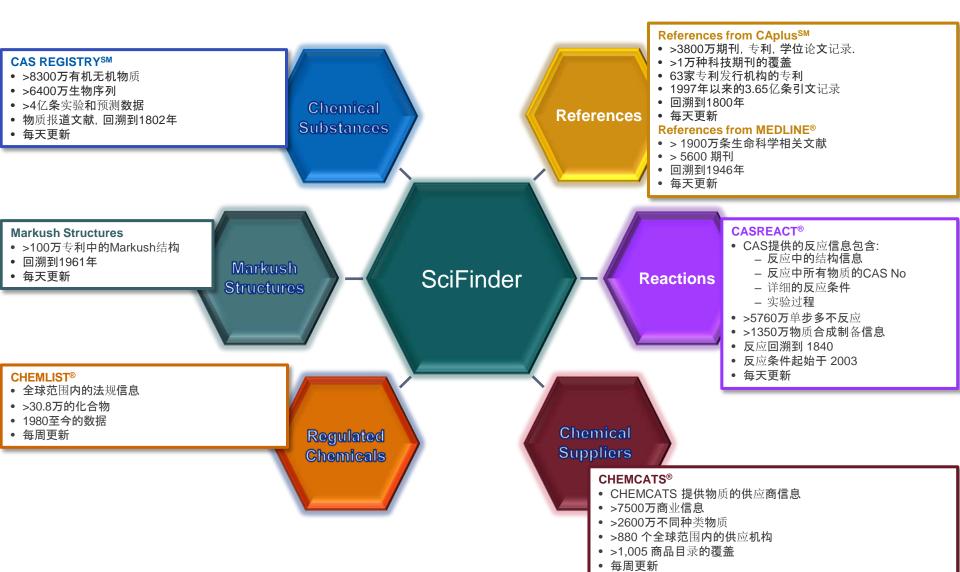
#### 美国化学文摘社—Chemical Abstract Service

- •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



#### SciFinder的覆盖内容

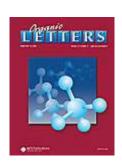


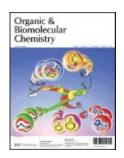




### CAplus<sup>SM</sup> 涵盖上万种期刊及63个专利发行机构专利

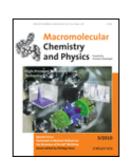


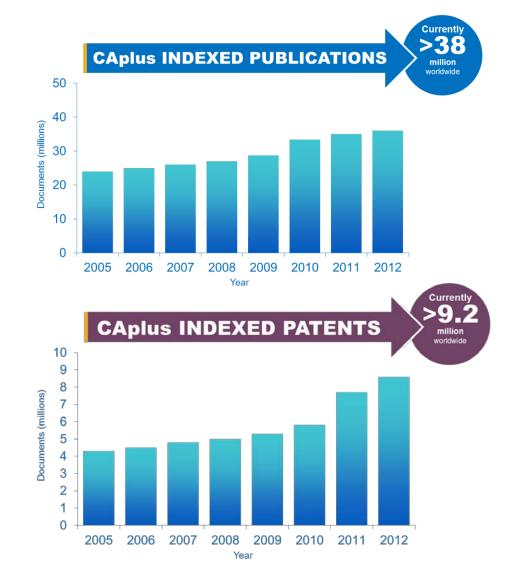






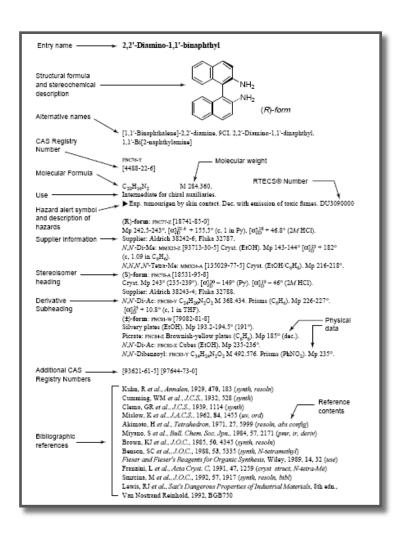


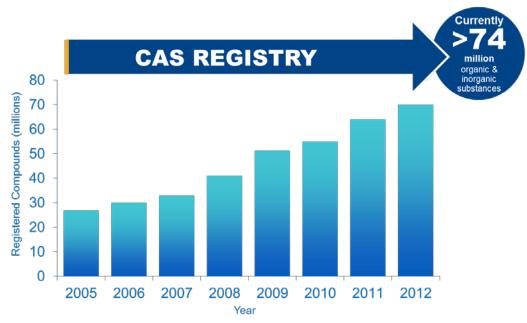






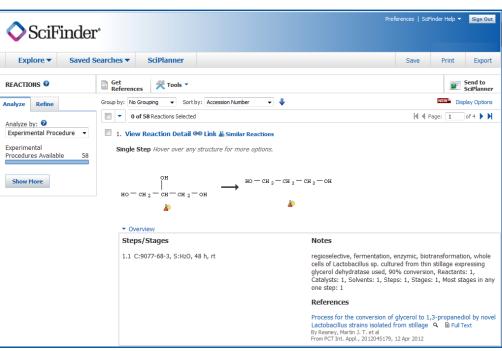
### CAS REGISTRYSM 是化学物质信息的"黄金标准"



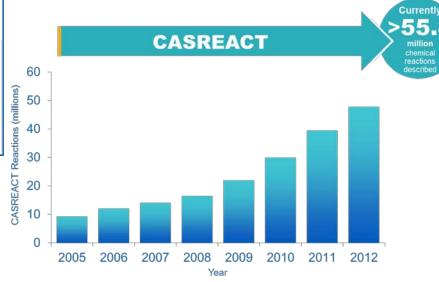




#### CASREACT® 是检索化学反应最权威的来源



CASREACT是世界上最大的, 更新速度最快的反应数据库



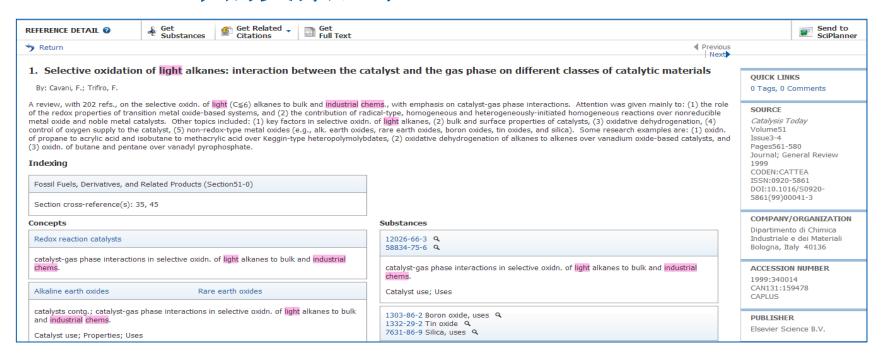
#### 提纲



- 介绍
  - SciFinder Web中的内容
- SciFinder Web中的检索和后处理
  - SciFinder Web中的文献记录及主题检索
  - SciFinder Web中的物质结果及物质检索方法
  - SciFinder Web中的反应记录及反应检索
- SciFinder Web的注册和常见问题

#### SciFinder中的文献记录





#### Citations Bielanski, A; Oxygen in Catalysis 1991 Haber, J; ACS Symp Series 1996, 638, 20 Q Oyama, S; ACS Symp Series 1996, 638, 2 Q Lee, J; Catal Rev-Sci Eng 1988, 30, 249 Q Kung, H; Adv Catal 1994, 40, 1 Q Vedrine, J; Catal Today 1997, 33, 3 Q Vedrine, J; Catal Today 1996, 32, 115 Q Busca, G; Catal Today 1996, 32, 133 Q Cavani, F; Catalysis 1994, 11, 246 Q Albonetti, S; Catal Rev-Sci Eng 1996, 38, 413 Q Sokolovskii, V; Catal Rev-Sci Eng 1990, 32, 1 Q Delmon, B; Catalysts in Petroleum Refining and Petrochemical Industries 1995 1996 Burch, R; J Mol Catal A 1995, 100, 13 Q Schmidt, L; Chem Eng Sci 1994, 49, 3981 Q Kung, H; ACS Symp Series 1993, 523, 387 Trifiro, F; Selective Partial Oxidation of Hydrocarbons and Related Oxidations 1994 Trifiro, F: Oxidative dehydrogenation and alternative dehydrogenation processes 1993 Cavani, F; Catal Today 1995, 24, 307 Q

#### 一篇完整的文献界面包括:

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





#### • 功能方面

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

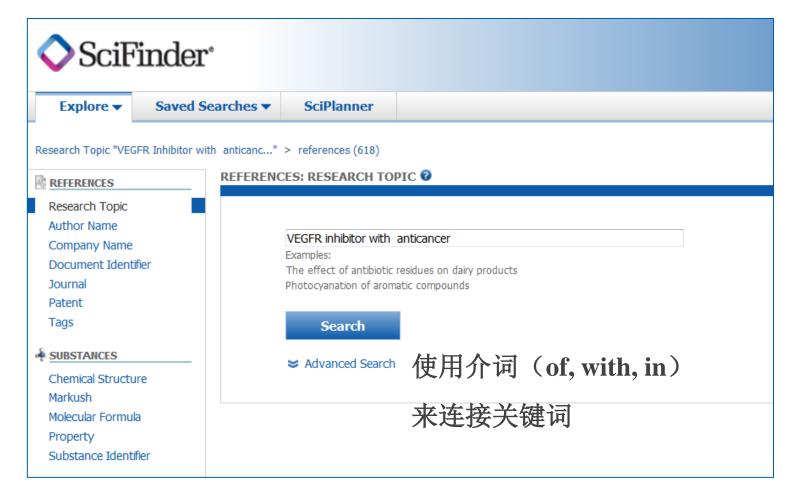
#### • 检索方法推荐

- 关注某特定领域的文献---主题检索
- 关注某科研人员的文献---作者名检索



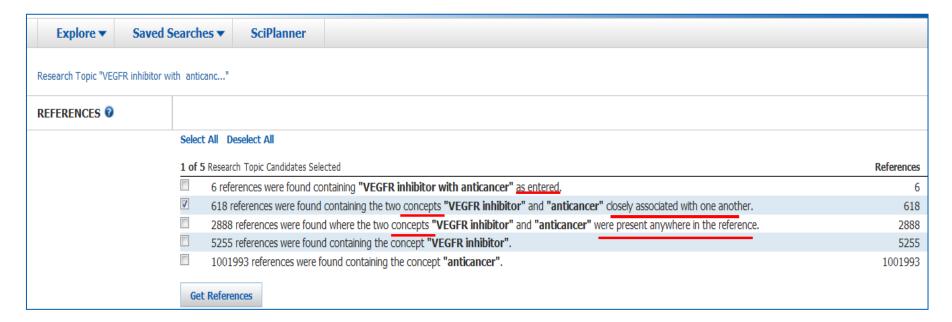
#### SciFinder Web中的主题检索

**主题:** VEGFR inhibitor with anticancer(VEGFR抑制剂在抗肿瘤方面的研究进展)







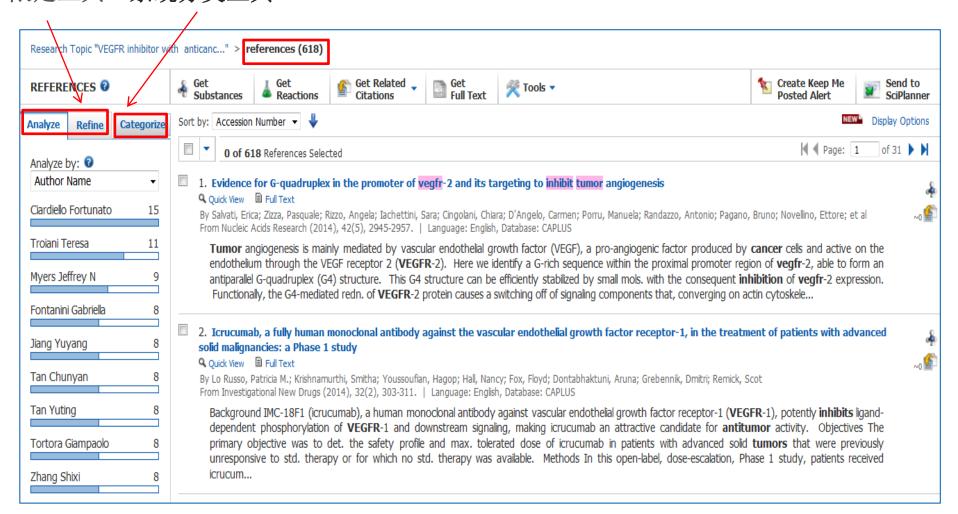


- ◆ "as entered"表示完全匹配
- ◆"concept"表示做了同意词的扩展
- ◆ "closely associated with one another"表示同时出现在一个句子中
- ◆ "present anywhere in the reference" 表示同时出现在一段话中



#### SciFinder 中的文献检索结果及后处理

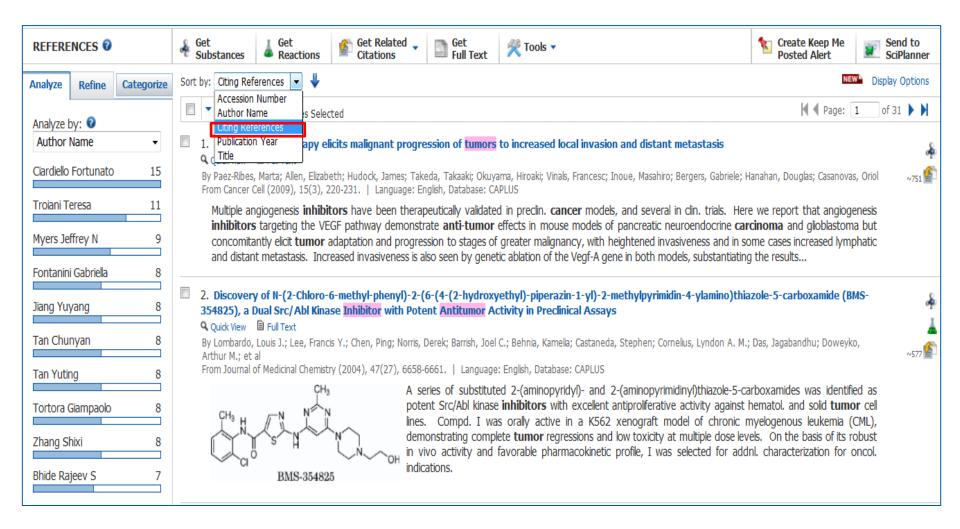
文献分析、 限定工具 系统分类工具



SciFinder提供强大的文献处理工具,帮助处理文献



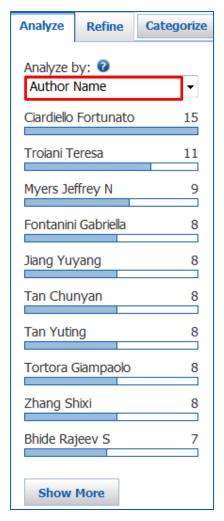
### SciFinder提供的引文排序— Citing Reference



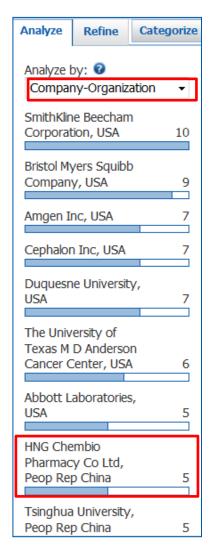




## 领域内主要研 究人员,专家



# 主要研究机构,合作伙伴,竞争对手

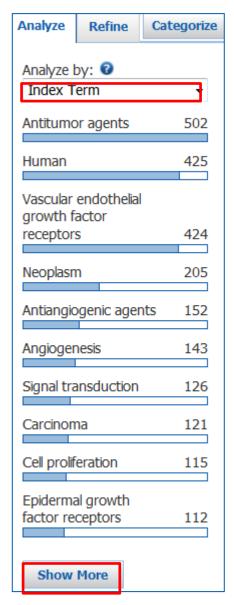


## 主要出版杂志,机构,潜在投稿期刊

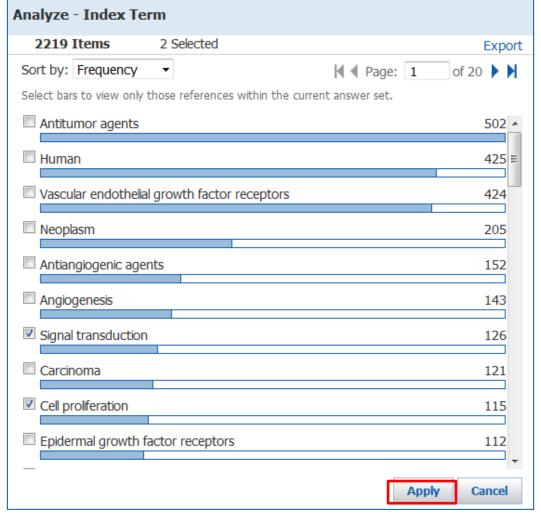




#### SciFinder中的Analyze- Index Term



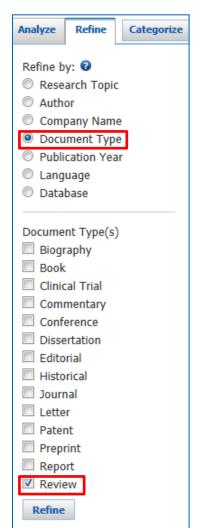
## 索引词(Index Term):可以帮助我们对文献的内容进行大致的了解

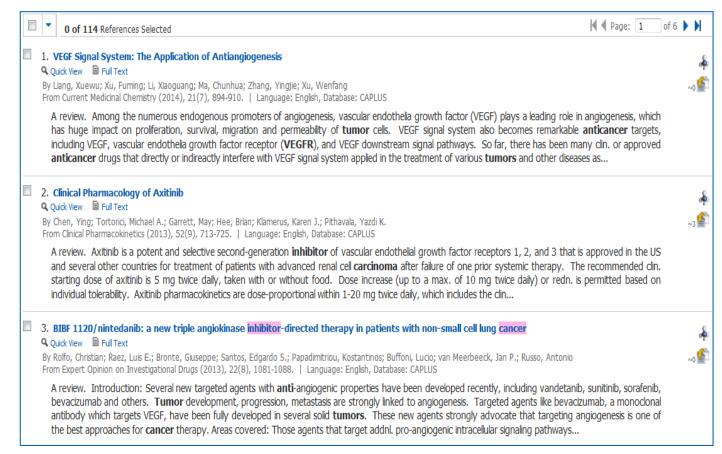




#### SciFinder中的Refine

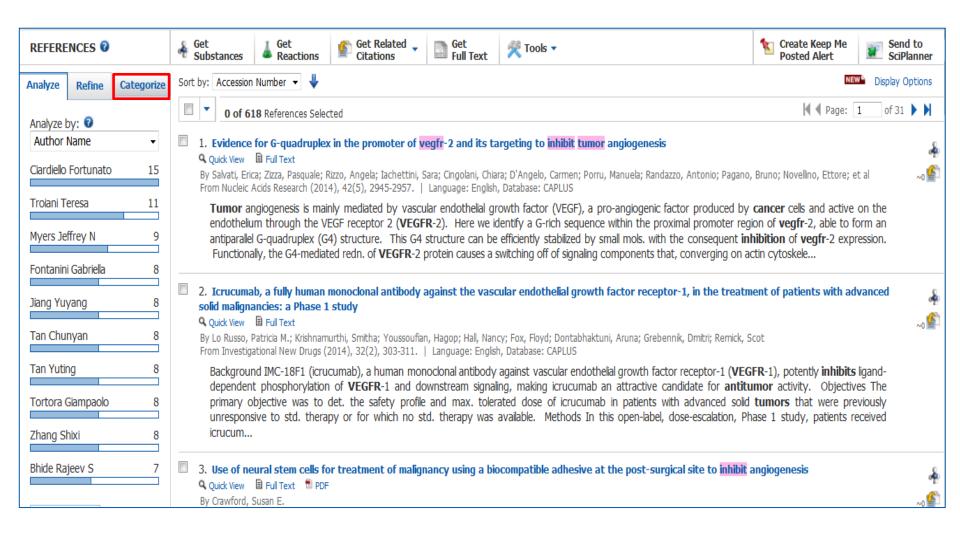
#### 文献类型限定: 获得最新综述类文献







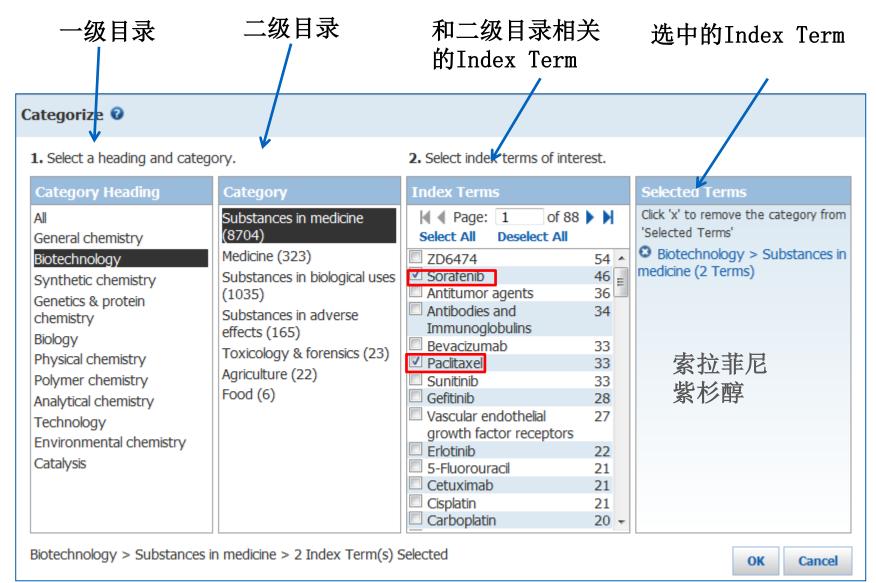




Categorize系统分类功能,基于Index Term,对文献依学科方向进行分类



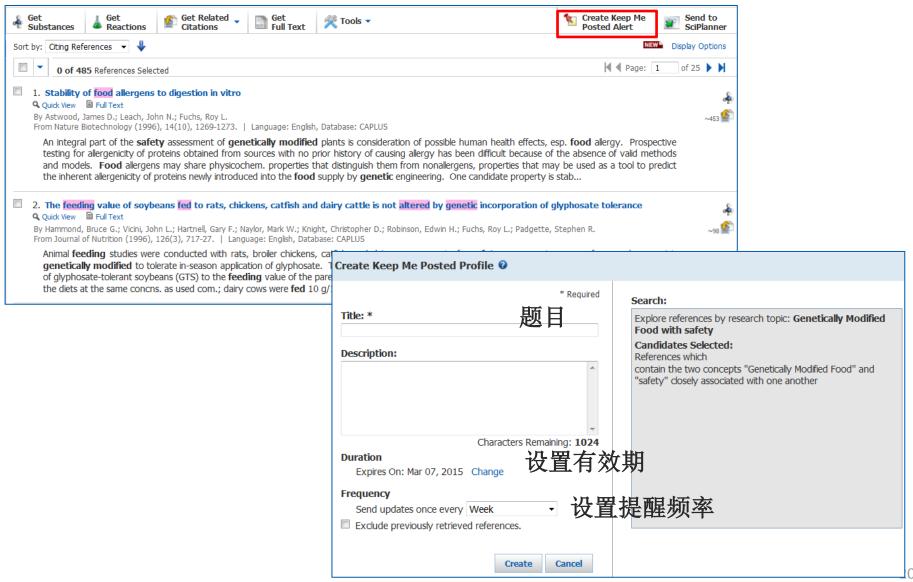
### SciFinder中的Categorize



#### SciFinder中的KMP

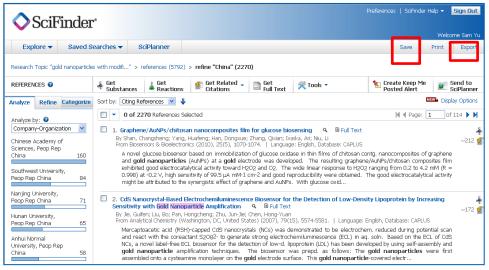


#### 随时跟踪科研最新进展



#### 结果集的保存





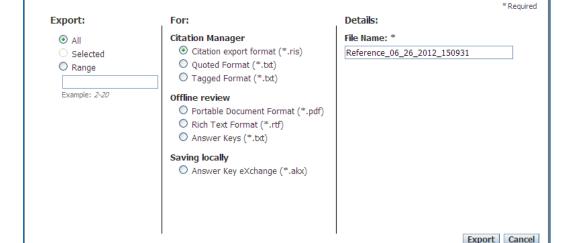
Export

#### **Export:**

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

	* Require
Save:	
All answers	
Only selected answers	
Title: *	
Description:	
	^
	~



#### Save:

保存在服务器上,可登陆后查看

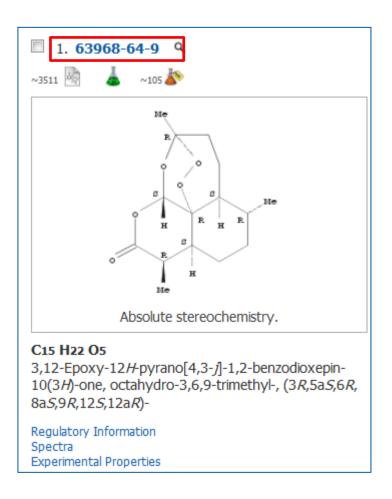
#### 提纲



- 介绍
  - SciFinder Web中的内容
- SciFinder Web中的检索和后处理
  - SciFinder Web中的文献记录及主题检索
  - SciFinder Web中的物质结果及物质检索方法
  - SciFinder Web中的反应记录及反应检索
- SciFinder Web的注册和常见问题

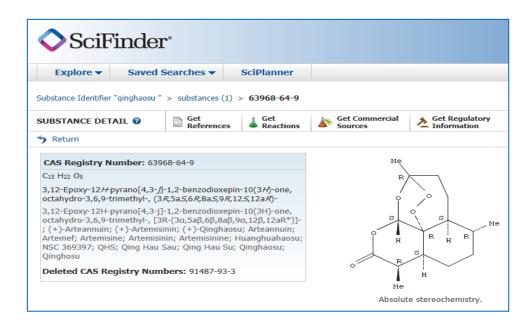


#### SciFinder中的物质结果界面



- 一个完整的物质结果 界面包含:
- •物质详情连接
- •文献连接
- •反应连接
- •商品信息连接
- •管制品信息连接
- •谱图连接
- •实验性质连接





物质的的CAS号、分子式、结构式、化学名、别名

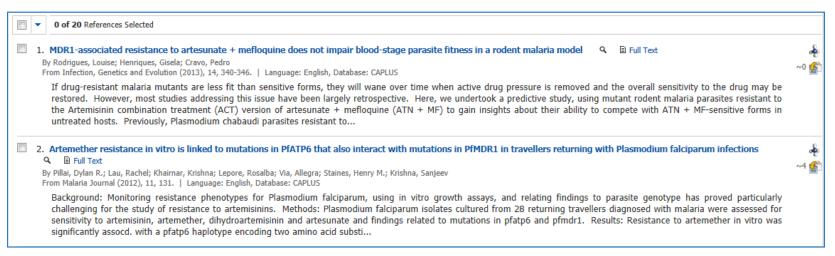
按照CAS Role分类的 专利、非专利文献列 表。对某类文献感兴 趣,仅需点击交叉处 的 即可方便快捷地 获取。

CAS Role	Patents	Nonpatents	Nonspecific Derivatives from Patents	Nonspecific Derivatives from Nonpatents
Analytical Study	✓	✓	✓	✓
Biological Study	✓	✓	✓	✓
Formation, Nonpreparative		1	✓	✓
Miscellaneous	✓	1		
Occurrence	✓	1		✓
Preparation	✓	1	✓	✓
Process	✓	1	✓	✓
Properties	✓	1	✓	✓
Prophetic in Patents	✓			
Reactant or Reagent	✓	1	✓	✓
Uses	1	1	✓	✓



Bioactivity Indicators		▼ Target Indicators	
	References		Reference
nti-infective agents (all) >>> Antimalarials	939	Cytokines (all) >> Interleukin 6	10
nti-infective agents (all) >> Parasiticides	56	Cytokines (all) >> Interleukin 6	10
titumor agents (all) > Antitumor agents	200	Cytokines (all) >> Interleukin 6	10
tural products MD pharmaceutical	132	Cytokines (all) >> Tumor necrosis factor a	16
		Cytokines (all) >> Tumor necrosis factor a	16
		Enzymes (all) >>> Adenosine triphosphatase	18
		Enzymes (all) >>>>> Caspase-3	12
		Enzymes (all) >>> Dihydrofolate reductase	10
		Enzymes (all) >>> Proteasome	17
		Enzymes (all) >>>>> Src kinase	13
		Glycoproteins (all) >> P-glycoproteins	20
		Hemoproteins (all) >>>> Cytochrome P450 CYP3A4	13
		Interferons (all) > Interleukin 6	10
		Interleukins (all) > Interleukin 6	10
		Phosphoproteins (all) >> P-glycoproteins	20
		Proteins	21
		Receptors (all) > Toll-like receptors	13
		RNA formation factors (all) >>> Transcription factor NF-κΒ	24
		Transport proteins (all) >>>> Cytochrome P450 CYP3A4	13
		Transport proteins (all) >> P-glycoproteins	20
		Transport proteins (all) >>> Sarcoplasmic-endoplasmic reticulum calcium pumps	12

物质的生物活性和靶点信息,直接点击,获得相关文献





Biological Properties	Value	Condition	Note To
Bioconcentration Factor	31.2	pH 1 Temp: 25 °C	(26)
Bioconcentration Factor	31.2	pH 2 Temp: 25 °C	(26)
Bioconcentration Factor	31.2	pH 3 Temp: 25 °C	(26)
Bioconcentration Factor	31.2	pH 4 Temp: 25 °C	(26)
Bioconcentration Factor	31.2	pH 5 Temp: 25 °C	(26)
Bioconcentration Factor	31.2	pH 6 Temp: 25 °C	(26)
Bioconcentration Factor	31.2	pH 7 Temp: 25 °C	(26)
Bioconcentration Factor	31.2	pH 8 Temp: 25 °C	(26)
Bioconcentration Factor	31.2	pH 9 Temp: 25 °C	(26)
Bioconcentration Factor	31.2	pH 10 Temp: 25 °C	(26)

Lipinski and Related Properties	Value	Condition	Note	Тор
Freely Rotatable Bonds	0		(26)	
H Acceptors	5		(26)	
H Donors	0		(26)	
H Donor/Acceptor Sum	5		(26)	
logP	2.269±0.680	Temp: 25 °C	(26)	
Molecular Weight	282.33		(26)	
Spectra Properties	Value	Condition	Note	Тор
Carbon-13 NMR Spectrum	See spectrum		(27)	
Proton NMR Spectrum	See spectrum		(27)	



### Experimental Properties: Biological Chemical Density Flow and Diffusion Lipinski and Related Optical and Scattering Spectra Structure-related Thermal

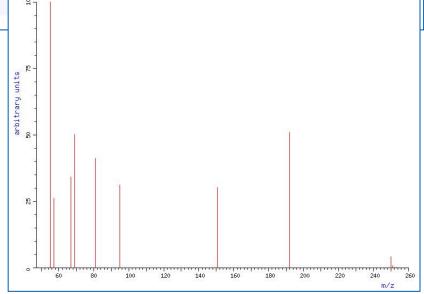
Biological Properties	Value	Condition	Note Top
ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion)	See full text		(1)CAS
Half-Life (Biological)	See full text	1 of 2	(9)CAS
Median Lethal Dose(LD50)	5576 mg/kg	Organism: rat Route: oral	(14)APC
Median Lethal Dose(LD50)	5105 mg/kg	Organism: mouse Route: oral	(14)APC
Median Lethal Dose(LD50)	2800 mg/kg	Organism: mouse Route: intramuscular	(14)APC
Median Lethal Dose(LD50)	2571 mg/kg	Organism: rat Route: intramuscular	(14)APC
Median Lethal Dose(LD50)	1558 mg/kg	Organism: mouse Route: intraperitoneal	(14)APC
Minimum Inhibitory Concentration	See full text	1 of 2	(18)CAS

Lipinski and Related Properties	Value	Condition	Note	Тор
logP	See full text	1 of 2	(12)CAS	
Optical and Scattering Properties	Value	Condition	Note	Тор
Optical Rotatory Power	+87.9 °	Solv: 1,4-dioxane (123-91-1); Wavlen: 589.3 nm	(20)CAS	
Optical Rotatory Power	+75-+78 °	Conc: 1.0 g/100mL; Solv: ethanol (64-17-5); Wavlen: 589.3 nm; Temp: 20 °C	(12)CAS	
Optical Rotatory Power	+68.2 °	Conc: 0.97 g/100mL; Solv: chloroform (67-66-3); Temp: 25 °C	(16)IC	



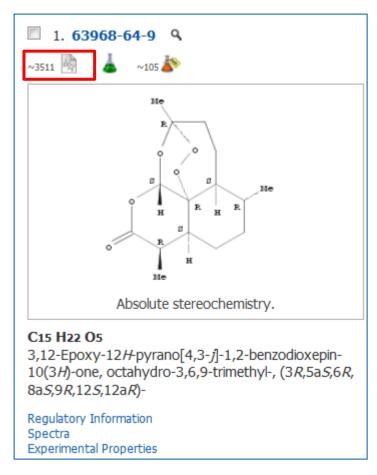
Spectra Properties	Value	Condition	Note Top
Carbon-13 NMR Spectrum	See full text	1 of 8	(3)CAS
Circular Dichroism Spectrum	See full text	1 of 2	(4)IC
IR Absorption Spectrum	See full text	1 of 11	(11)CAS
Mass Spectrum	See spectrum		(13)WSS
Mass Spectrum	See spectrum		(13)WSS
Mass Spectrum	See full text	1 of 10	(1)CAS
Proton NMR Spectrum	See full text	1 of 10	(15)CAS
Raman Spectrum	See full text	1 of 2	(5)CAS
Two-Dimensional NMR Spectrum	See full text	1 of 2	(24)CAS
UV and Visible Absorption Spectrum	See full text		(22)CAS
UV and Visible Emission/Luminescence Spectrum	See full text	ğ <sub>7</sub>	f==\ -

#### 物质的实验谱图





#### 物质有关的文献信息

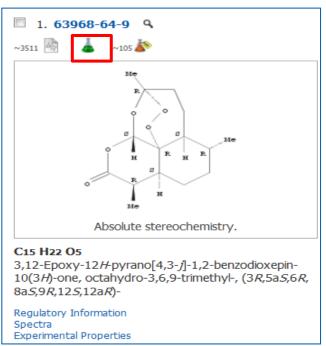


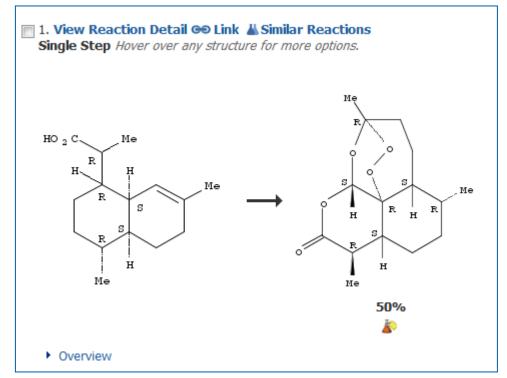
一键获得文献,可以获得全部,也可以勾选特别感兴趣的内容,不勾选,默认获得全部

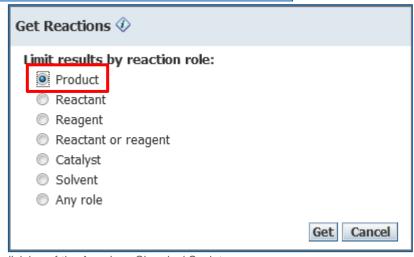
Get References 🏵		
Limit results to:		
Adverse Effect, including toxicity	Prophetics in Patents	
Analytical Study	Preparation	
Biological Study	Process	
Combinatorial Study	Properties	
Crystal Structure	Reactant or Reagent	
Formation, nonpreparative	Spectral Properties	
Miscellaneous	Uses	
Occurrence		
For each sequence, retrieve:  Additional related references, e.g., activity studies, disease studies.  Get   Cancel		



#### 物质有关的反应











#### • 功能方面

- 物质名称,CAS No
- 分子式
- 结构式
- 理化性质

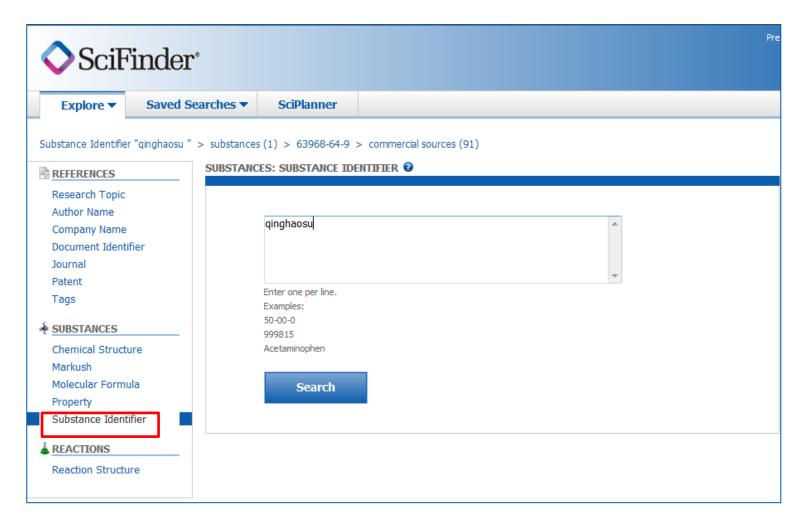
#### • 推荐的物质检索功能

- 有机物,天然产物及衍生物 ---结构比较方便
- 无机物

- ---分子式比较方便
- 高分子化合物
- ---首先分子式, 其次结构



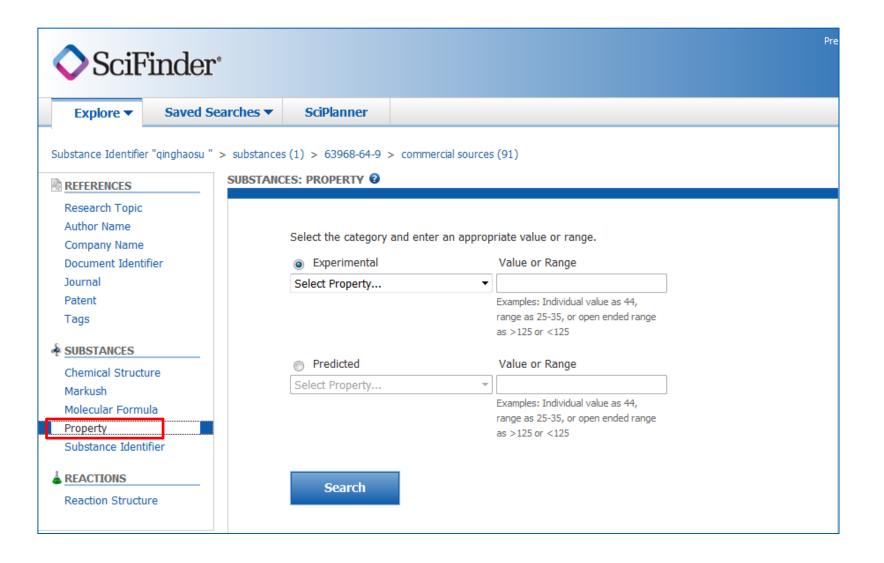




直接输入物质的名称,CAS No,俗名,都能检索,一次最多检索25个物质,用换行换开

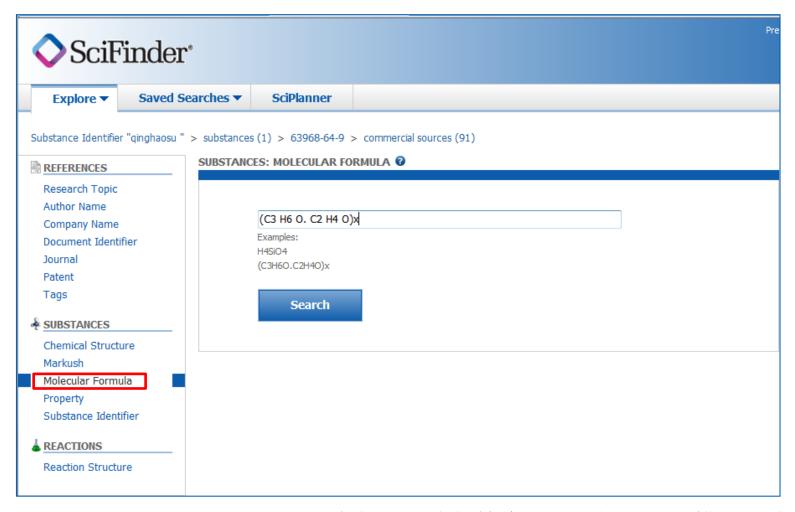








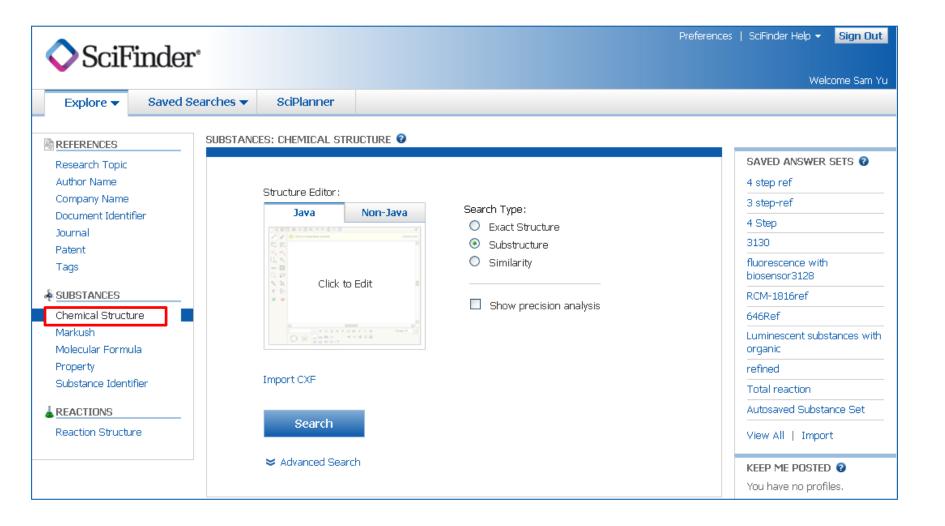




SciFinder中的分子式的检索,需要按照HILL排序方式输入,简单来说,CH写前面,其他的按照字母顺序写

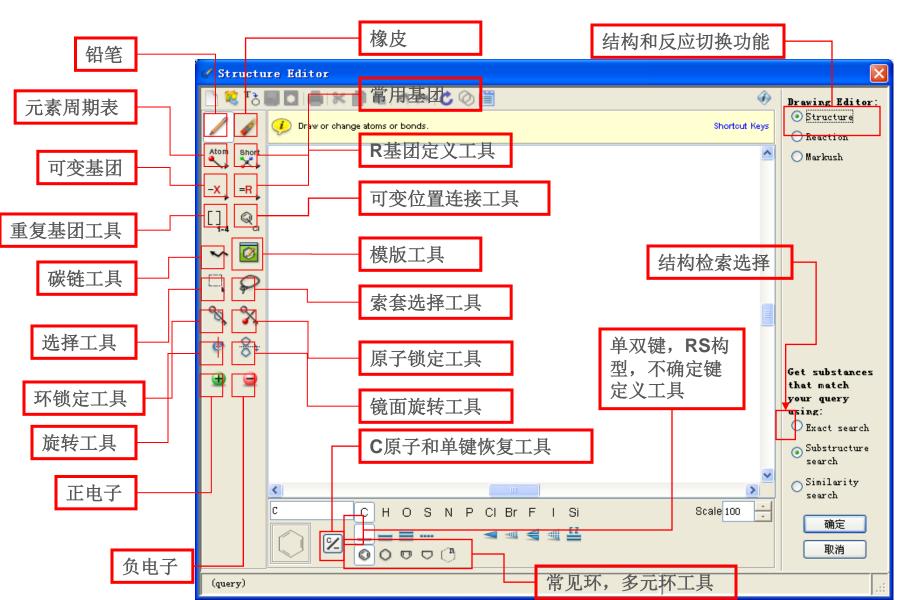
#### 结构式检索







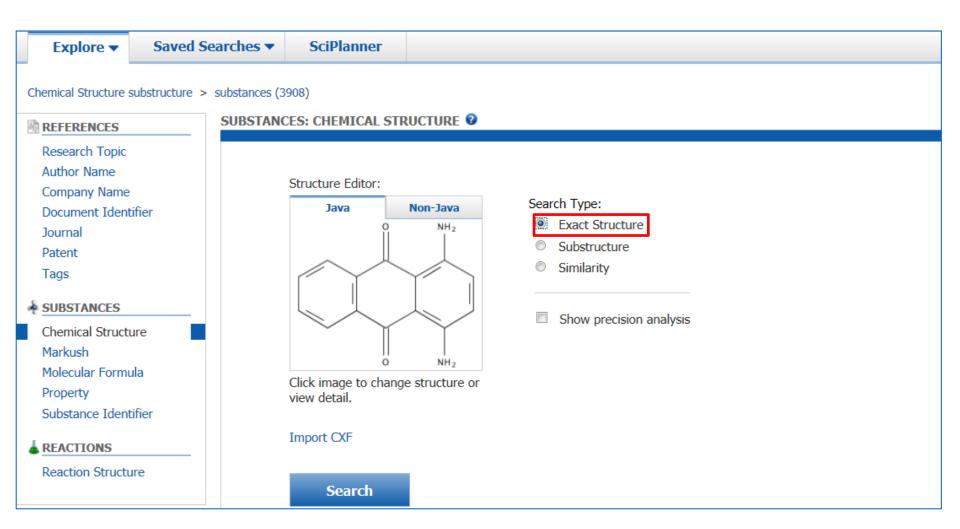
#### SciFinder结构绘制工具



36

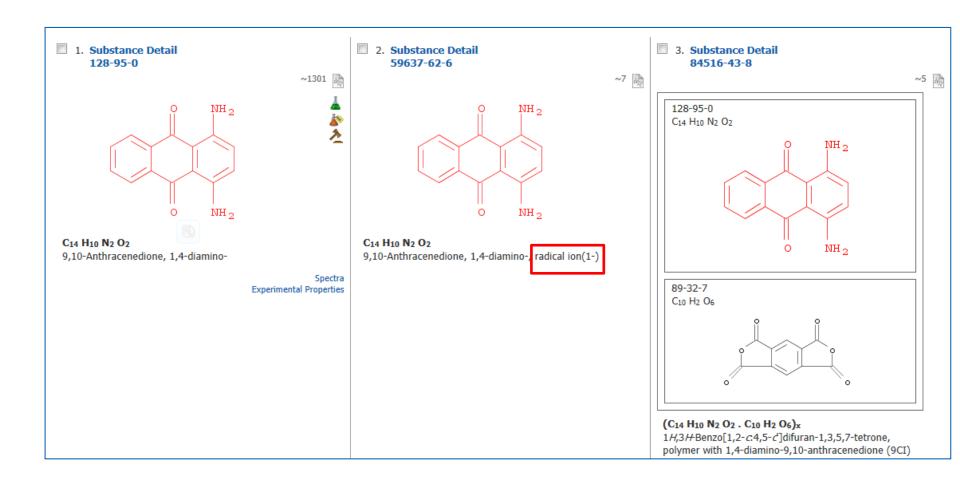


## 精确结构检索

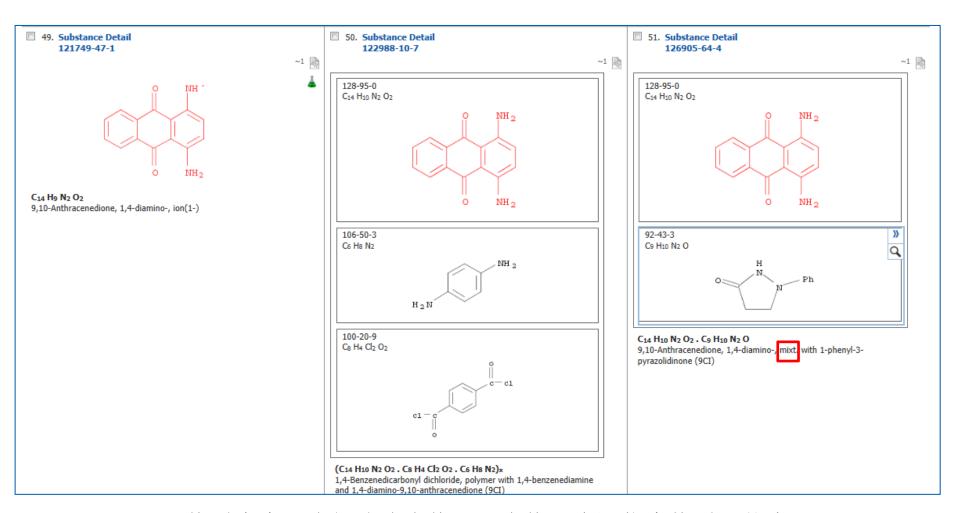




## 检索结果



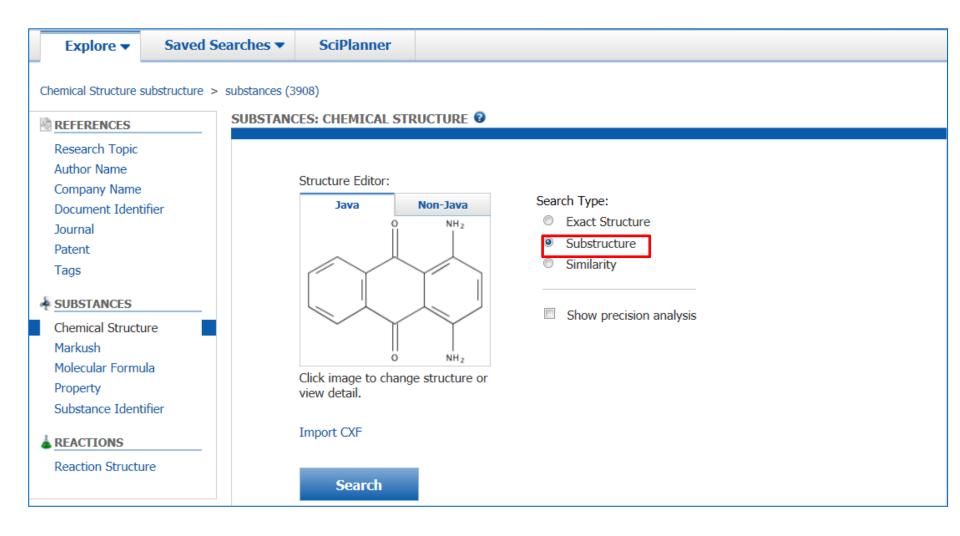




物质本身、多组分聚合物、混合物、含同位素物质、盐类和自由基等。

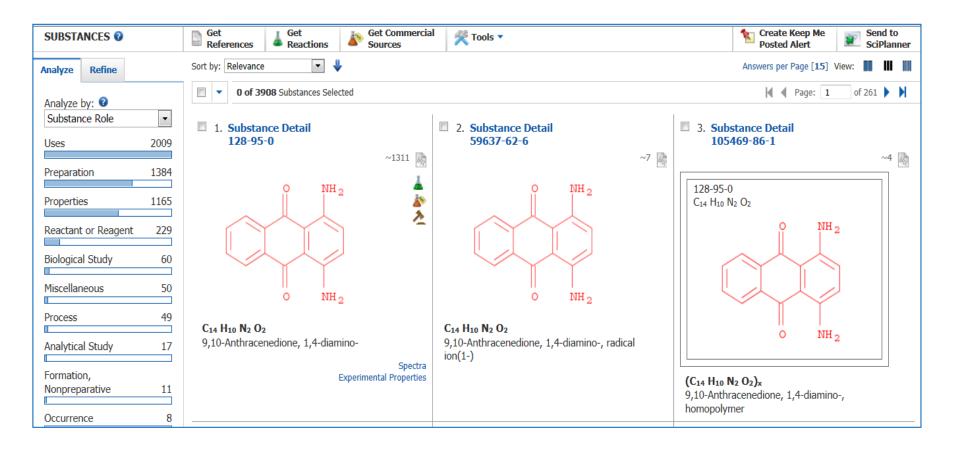


## 亚结构检索





## 亚结构检索结果

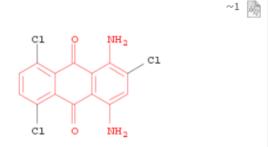




~1

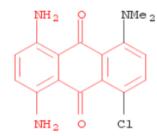
## 亚结构检索的结果





#### C<sub>14</sub> H<sub>7</sub> Cl<sub>3</sub> N<sub>2</sub> O<sub>2</sub> 9,10-Anthracenedione, 1,4-diamino-2,5,8-trichloro-

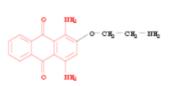
#### 218. Substance Detail 14509-07-0



C<sub>16</sub> H<sub>14</sub> Cl N<sub>3</sub> O<sub>2</sub> 9,10-Anthracenedione, 1,4-diamino-5-chloro-8 -(dimethylamino)-

#### 219. Substance Detail 54901-16-5

~1



C<sub>16</sub> H<sub>15</sub> N<sub>3</sub> O<sub>3</sub> 9,10-Anthracenedione, 1,4-diamino-2-(2-aminoethoxy)-

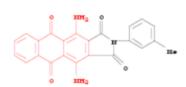
#### 1486. Substance Detail 103359-31-5



#### C<sub>19</sub> H<sub>14</sub> N<sub>4</sub> O<sub>3</sub> S

1/-Naphth[2,3-f]isoindole-1,5,10-trione, 4,9,11-triamino-2,3-dihydro-2-(2-propen-1-yl)-3-thioxo-

#### 1487. Substance Detail 109374-90-5



#### C23 H15 N3 O4

1*H*-Naphth[2,3-*f*]isoindole-1,3,5,10(2*H*)-tetrone, 4,11-diamino-2-(3-methylphenyl)-

#### 1488. Substance Detail 112259-11-7



#### C20 H17 N3 O7

Anthra[2,3-*e*][1,3,2]dioxazepine-1,5,7,12 -tetrone, 6,13-diamino-3-(3-methoxypropyl)-

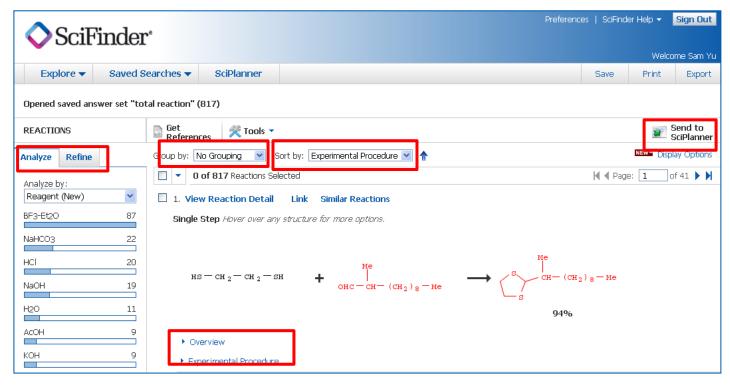
## 提纲



- 介绍
  - SciFinder Web中的内容
- SciFinder Web中的检索和后处理
  - SciFinder Web中的文献记录及主题检索
  - SciFinder Web中的物质结果及物质检索方法
  - SciFinder Web中的反应记录及反应检索
- SciFinder Web的注册和常见问题



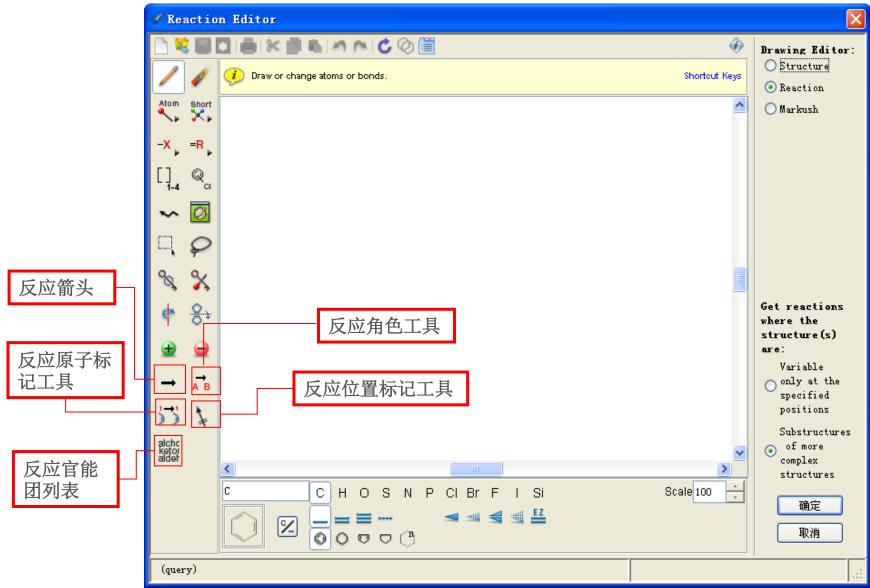
### SciFinder Web中的反应记录



- 1. 反应分组功能
- 2. 反应排序功能
- 3. 反应后处理功能
- 4. 反应全景及实验过程
- 5. SciPlanner

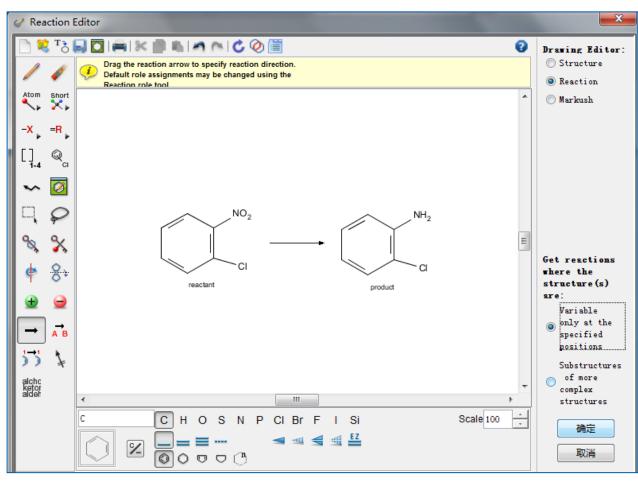


# SciFinder中的反应定义工具



## SciFinder反应检索



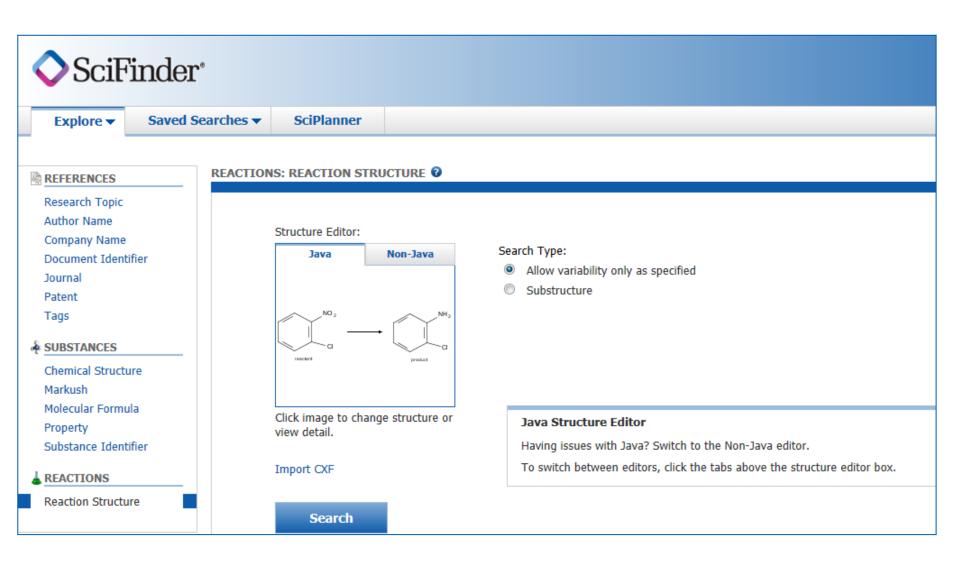


Allow variability only as specified: 仅在特定位点发生变化

Substructure:亚结构检索, 允许有更多取代情况

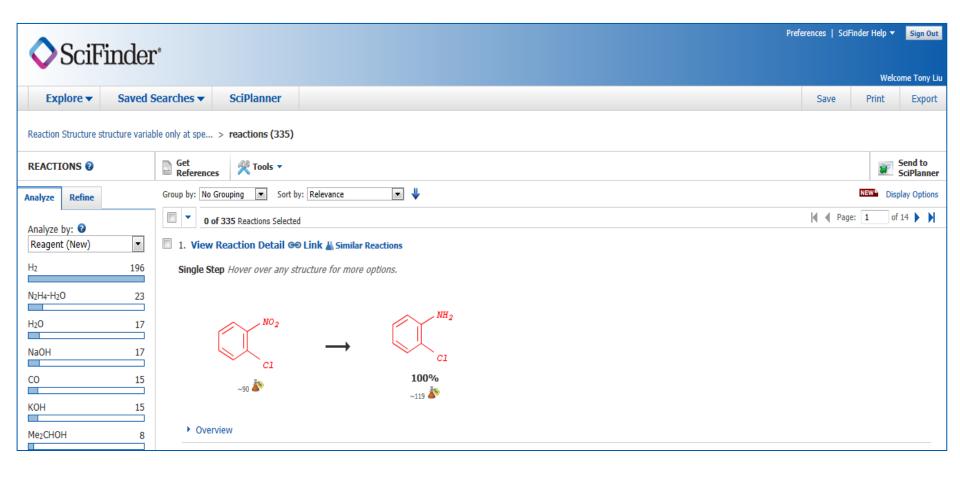
## 反应检索界面





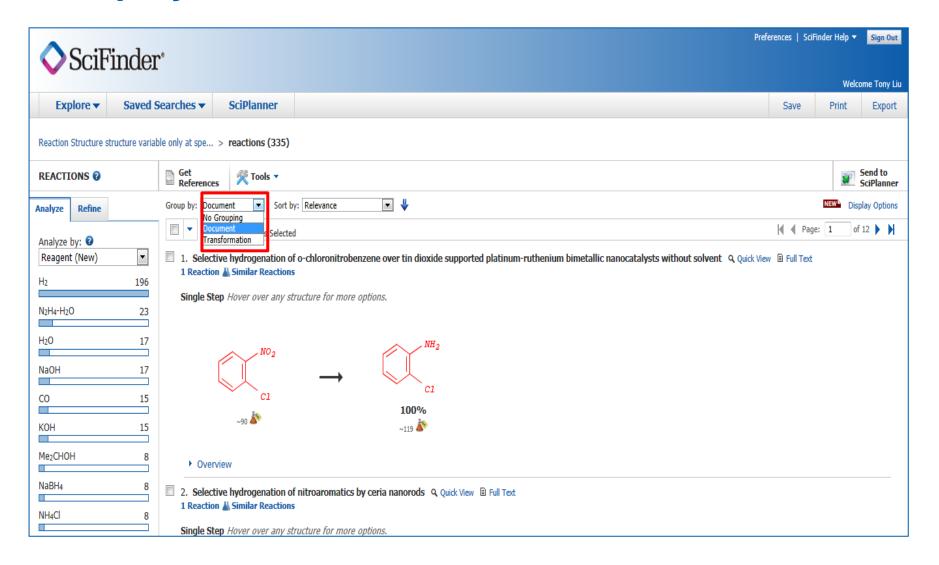








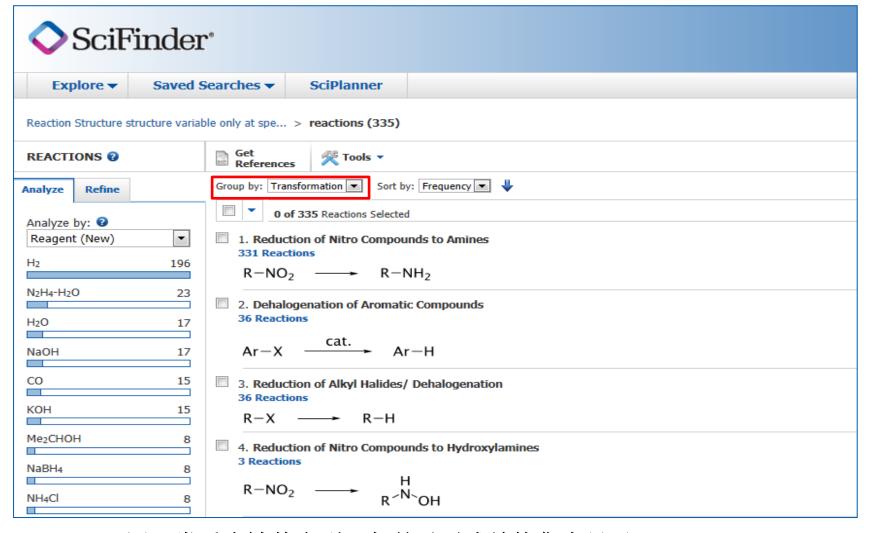
# Group by Document 按照出处文献分类显示



来自同一篇文献的反应都被整合到一起并集中显示



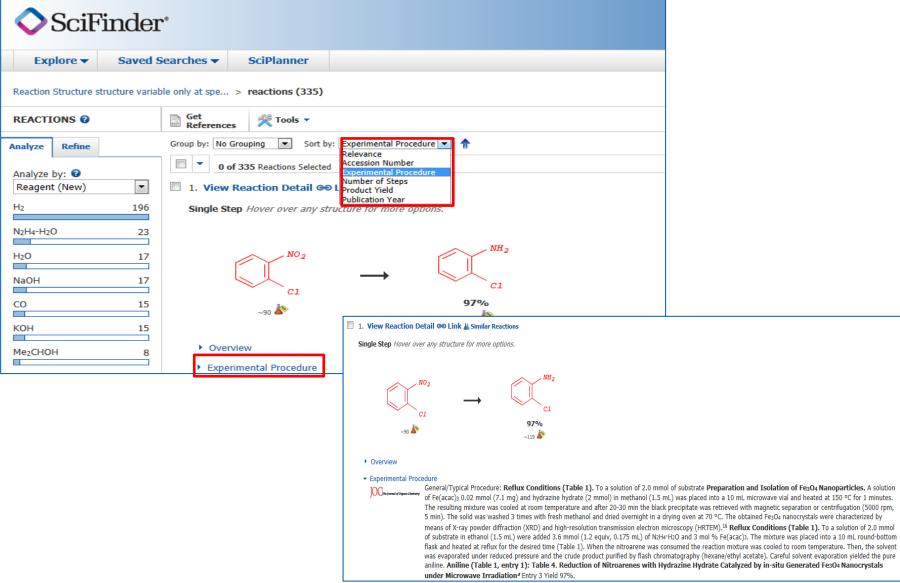
# Group by Transformation 按照反应类型分类显示



同一类反应被整合到一起并以通式结构集中显示; 仅适用于单步反应,未被分类的反应显示在结果集最后

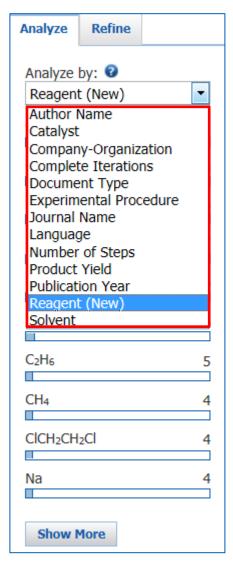


## 获得有实验步骤的反应结果集



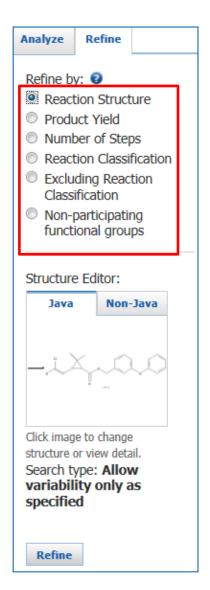


## 反应结果集的分析限定工具



反应分析类型:

> 反应的限定功能: 反应式 产率 反应步数 反应类型 排除的反应类型 非除与反应的基团



### 提纲



- 介绍
  - SciFinder Web中的内容
- SciFinder Web中的检索和后处理
  - SciFinder Web中的文献记录及主题检索
  - SciFinder Web中的物质结果及物质检索方法
  - SciFinder Web中的反应记录及反应检索
- SciFinder Web的注册和常见问题





SciFinder Web的系统要求

Windows用户支持IE 9. 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,建议安装Java 7)

在图书馆相关页面上找到SciFinder Web注册用的网址

### 登陆图书馆主页







Oxford University Press	牛津大学出版社电子期刊	说明
PAO - Periodicals Archive Online	典藏学术期刊全文数据库	说明
PNAS	美国国家科学院院刊	说明
ProQuest - Health & Medical Complete	ProQuest保健、医学与药学数据库	说明
ProQuest博硕士论文数据库	国外高校学位论文全文数据库	说明
ProQuest检索平台	ProQuest检索平台(包含ABI/PHMC/美国报纸全文库等)	说明
PubMed	美国国立医学图书馆国家生物技术信息中心开发研制的基于Web 的网上医学文献检索系统	说明
RSC - Royal Society of Chemistry	英国皇家化学学会RSC电子期刊	说明
SAE	美国汽车工程师协会电子期刊	说明
SAGE 过刊全文数据库	SAGE出版的381种学术期刊回溯全文,收录期刊的第1卷第1期至 1998年	说明
Science Online	科学在线	说明
SciFinder Scholar	CA化学文摘	说明
SIAM	美国工业和应用数学学会电子期刊 - Locus过刊全文数据库	说明
SpecialSciDBS国道外文专题数据库	外文国外专题数据库(全文、综合性数据库)	说明
Springer-Link	Springer 出版社电子期刊	说明
Taylor & Francis	Taylor & Francis 电子期刊	说明

### 图书管的介绍页面



#### SciFinder Scholar

**引进状态:** 已引进 **更新日期:** 2013-3-5 **年限范围:** 

**文献类型:** 全文数据库 **学科分类:** 数学/物理/化学

#### 访问入口

1、新用户账号注册入口:

SciFinder网络版入口 (适用于WIN7,7个并发用户,注册方法 SciFinder Web新功能)

2、已有账号用户访问入口:

http://scifinder.cas.org

https://origin-scifinder.cas.org

附: SciFinder离线结构编辑器使用说明. doc SciFinder离线结构编辑器下载

客户端版SciFinder目前已经停止服务!

请使用客户端版的读者按说明改用网络版。

**简要介绍:** SciFinder是关于化学及相关学科(包括生物医学、工程、材料、农业等)研究的重要信息来源。用户通过 SciFinder 可以 同时检索美国化学文摘社(CAS)的多个数据库和MEDLINE数据库。SciFinder 提供多种检索途径和有效分析工具。

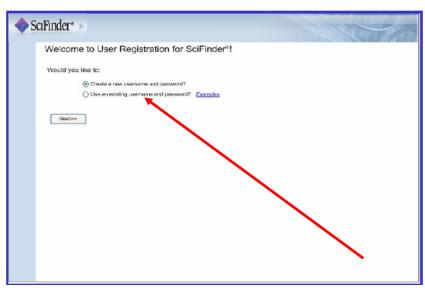
SciFinder Scholar可检索数据库介绍:

1. CAPLUS

目前有化学及相关学科的文献记录2千7百多万条,包括1907年以来的源自1万多种期刊论文(以及4万多篇1907年之前的回溯论文)、

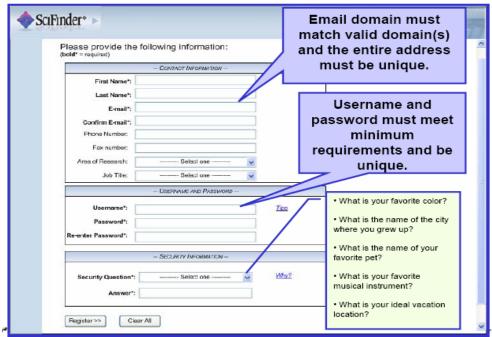
### 点击URL创建SciFinder Web账号





开始创建SciFinder Web帐号

#### 请用邮箱注册,一人只能注册一个账号







#### 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 @、#、%、&、\*)

#### 密码设置小技巧:

- 1: 不要和账号中有重复的字符
- 2: 密码格式最好是abc@123

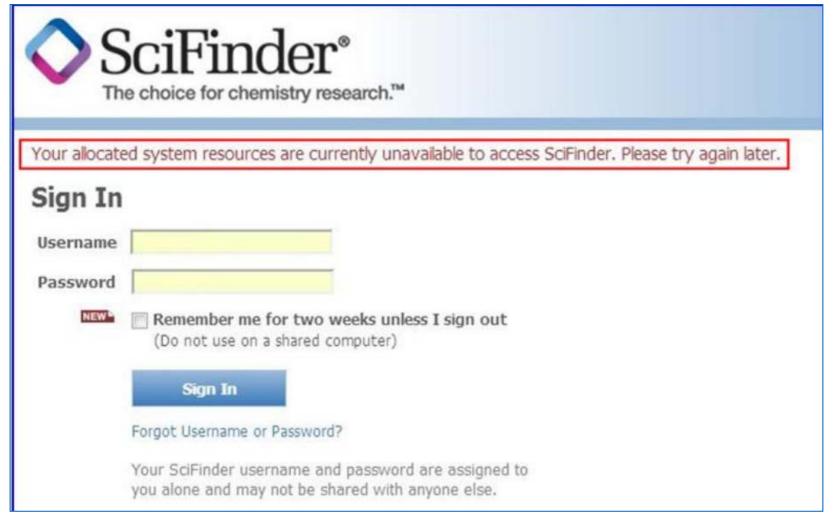








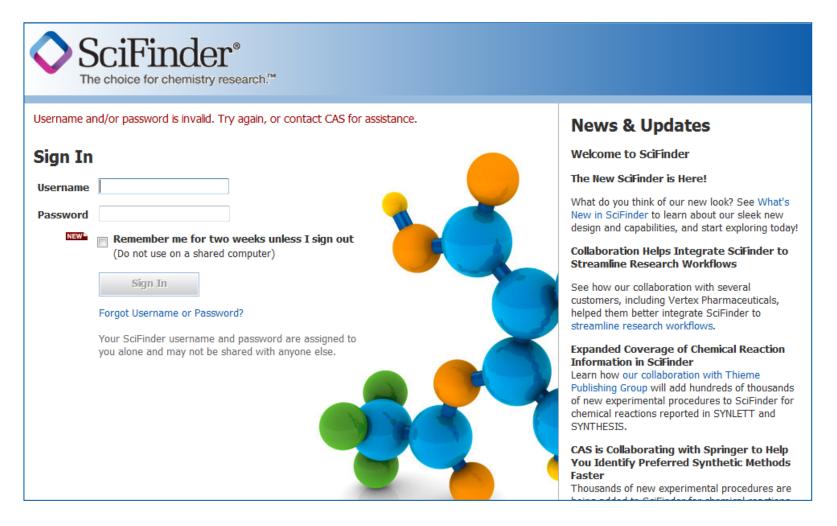
### SciFinder Web 常见问题



并发用户数已满, 请稍后再试







账号或密码错误,请在username处填写,截图,并与图书馆联系





#### 任何需要反馈给图书馆的问题,都请点击测试IP地址的链接

http://www.cas.org/cgi-bin/casip



Your IP address comes across to CAS as: 210.32.9.45

将页面截图下来,一并发给图书馆



### SciFinder Web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



# **Comprehensive Content**

Sophisticated Analysis

Unprecedented Results



#### Thank You

刘衍兰

SciFinder 培训专员

Mail: tony@igroup.com.cn

QQ答疑群: 275247551