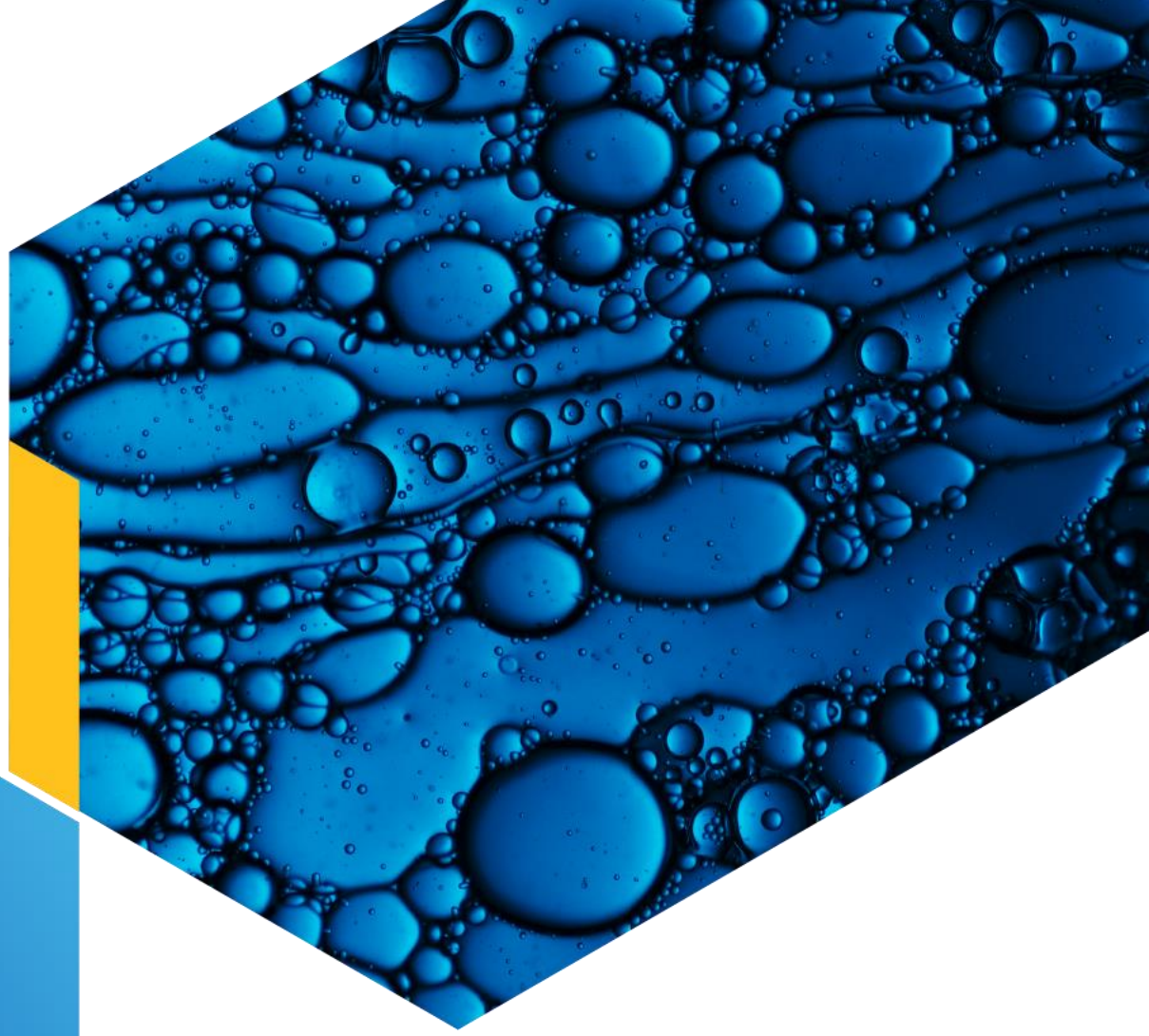


利用CAS SciFinder^{n}获取科技信息

朱传娴 hzhu@acs-i.org

2022.4

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

大纲

- CAS及CAS SciFinder^{n}简介
- 常见检索方式
  - 文献检索
  - 物质检索（CAS Markush检索）
  - 生物序列检索
  - 反应检索
  - 逆合成反应路线设计（CAS Retrosynthesis Tool）
  - 检索信息的管理
  - 分析方法的获取（ Analytical Methods ）
- 常见问题及解决

CAS致力于提高创新效率

CAS的数据和服务是基于对以往知识经验的回顾，对当代前沿研究的洞察，以及对未来发展趋势的前瞻

HINDSIGHT

Connecting past discoveries
to build a better future

连接前人的发现，建设更美好的未来

INSIGHT

Revealing unseen relationships that spark ideas and speed discovery

揭示能激发想法和加速发现的，未预见的联系

FORESIGHT

Identifying trends and emerging opportunities to accelerate growth

确定加速增长的趋势和新机遇

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

CAS具有最全面的学科连接内容合集

Over **50K** scientific journals and documents

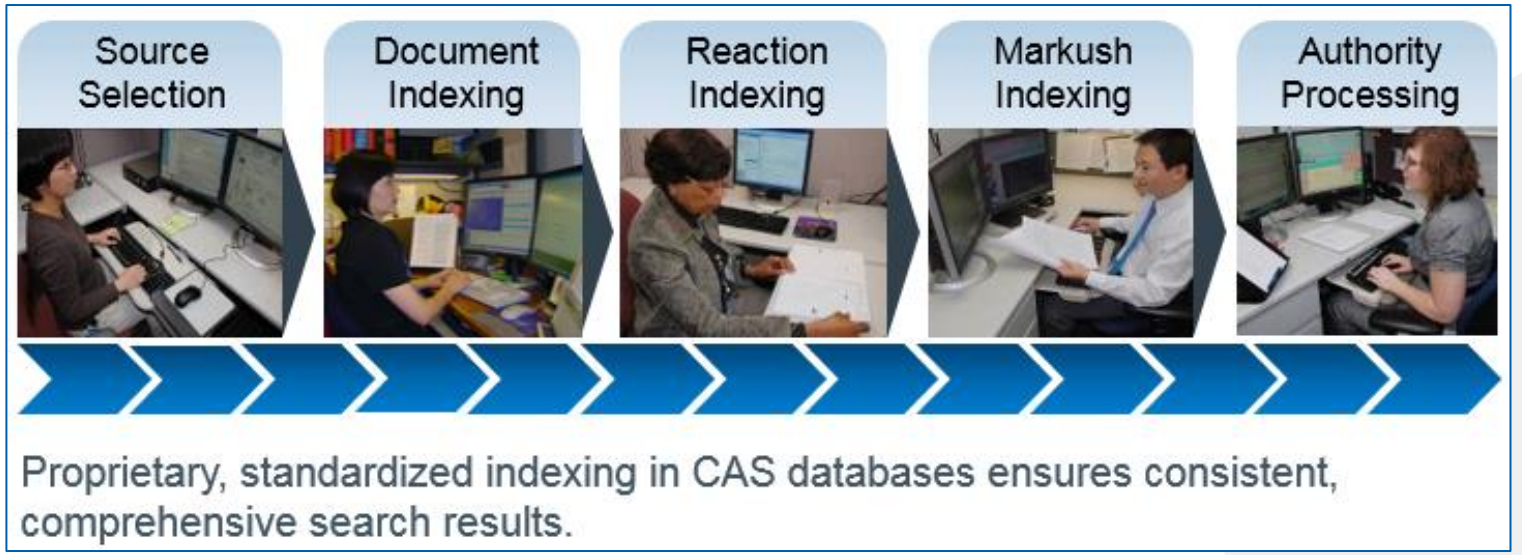
Over **250** million substances

Over **50** languages translated

64 patent offices worldwide

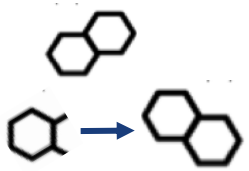
ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

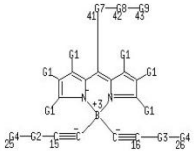
CAS科学家的智力标引



Data pre-repository

1990
Smith, M.
anthracene





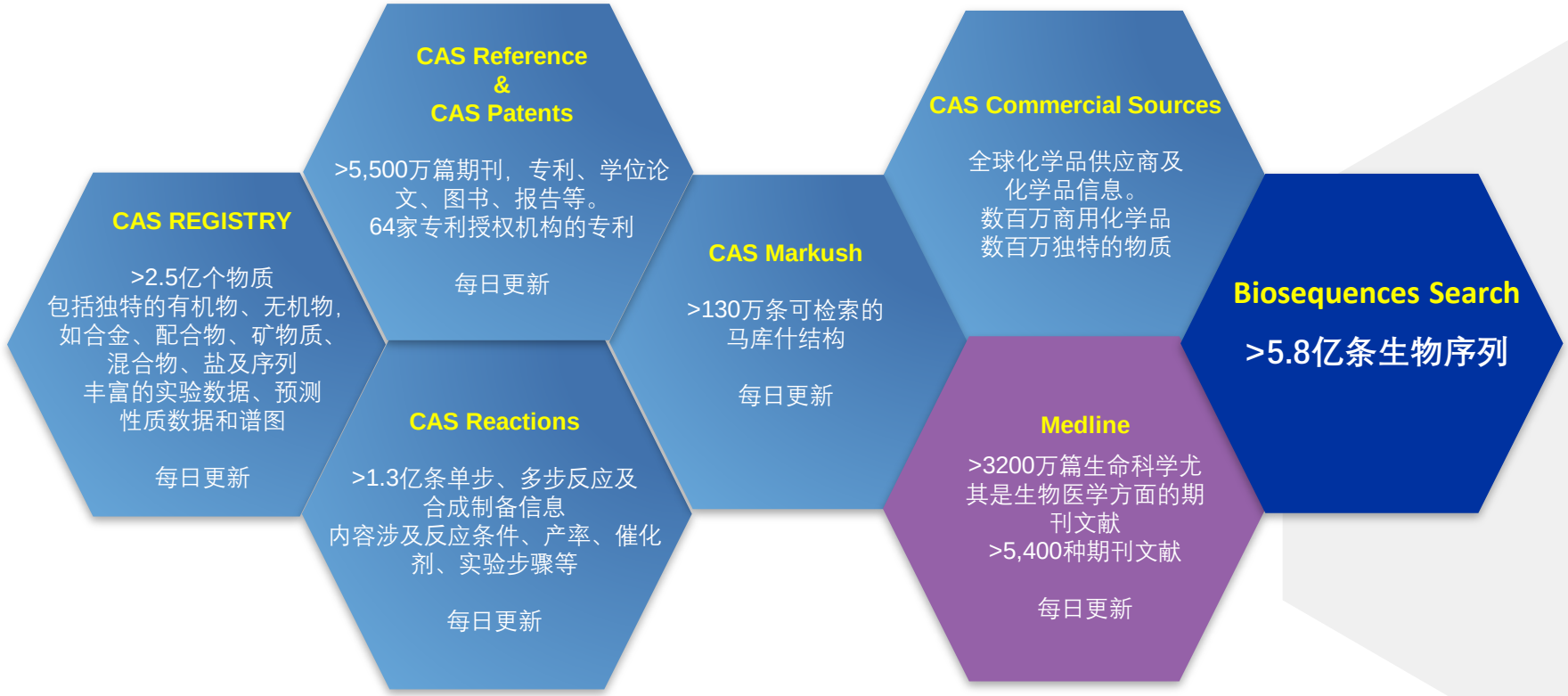
Androst-4-en-3-one, 17-hydroxy-17-methyl-, (17β)-

CAS科学家利用人类智慧对公开内容进行揭示，使相关信息更容易被挖掘

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

CAS内容合集--CAS SciFinder^{n}



CAS SciFinder是提供经CAS科学家人工标引内容的工具型解决方案。

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

CAS解决方案与服务

DISCOVERY

CAS SciFinder Discovery Platform™

Get discoveries to market faster and optimize margins by giving researchers the information they need

INTELLECTUAL PROPERTY

STN IP Protection Suite™

Ensure that your intellectual property is protected and find opportunities to extend into new markets

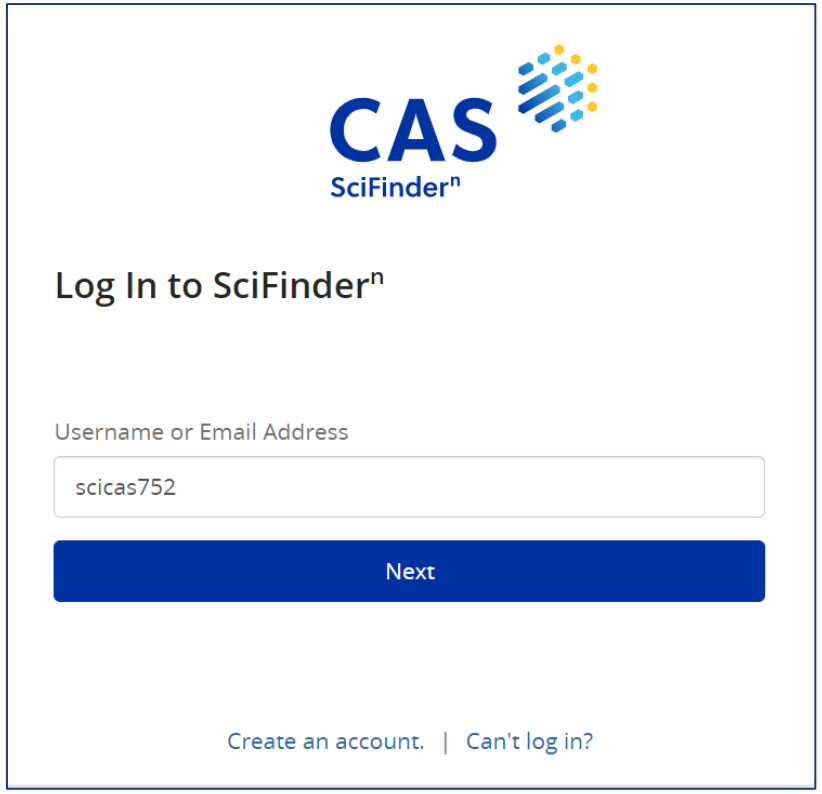
CUSTOM SOLUTIONS

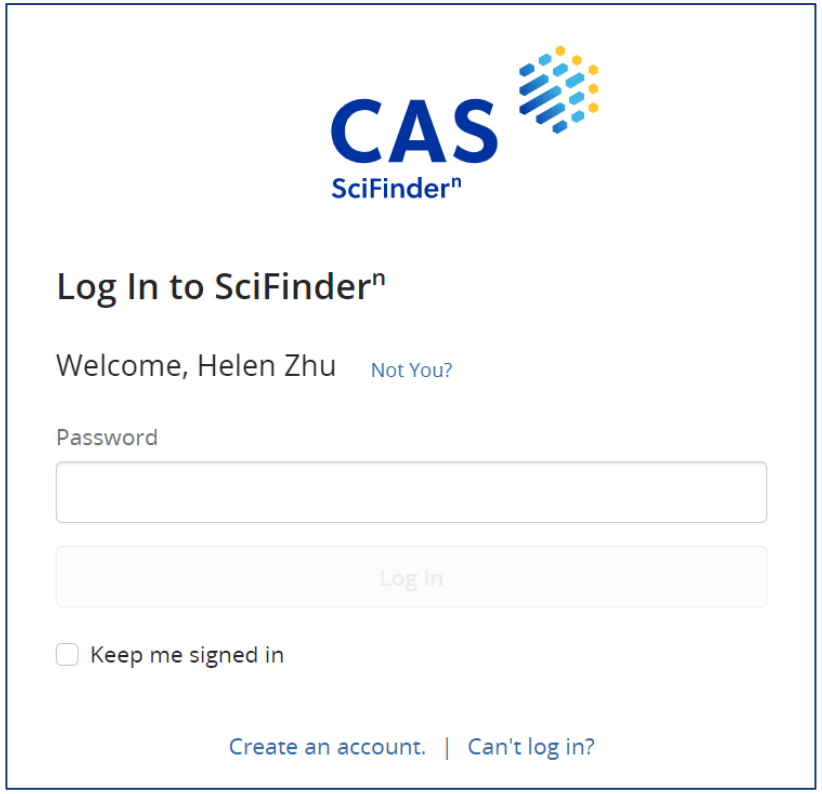
CAS Custom Services℠

Customized data, analytics and insights to maximize the value of information assets and fuel digitalization success

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

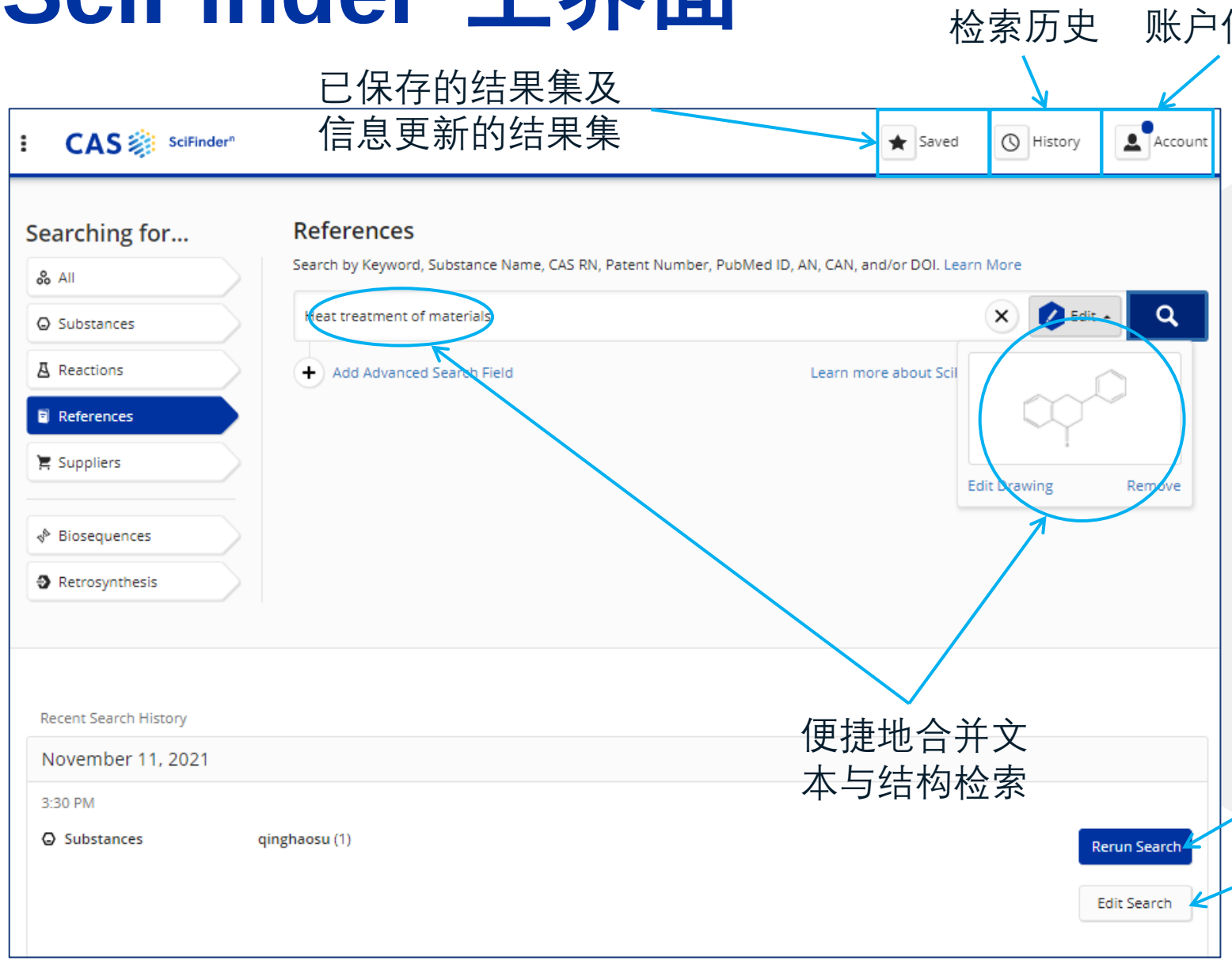
CAS SciFinder^{n}登录网址: https://SciFinder-n.cas.org





使用CAS SciFinder账号登录

CAS SciFinder^{n}主界面



灵活的
检索选项

近期检
索历史

便捷地合并文
本与结构检索

重新运行检索

修改检索式

大纲

- CAS及CAS SciFinder^{n}简介
- 常见检索方式
  - 文献检索
  - 物质检索（CAS Markush检索）
  - 生物序列检索
  - 反应检索
  - 逆合成反应路线设计（CAS Retrosynthesis Tool）
  - 检索信息的管理
  - 分析方法的获取（ Analytical Methods ）
- 常见问题及解决

大纲

- CAS SciFinder^{n}中的文献检索
  - 主题词检索及布尔逻辑算符的运用
  - 文献检索结果集的筛选
  - 通过引文地图发现相关研究方向
  - 文献结果集的导出和检索历史管理
  - 快速锁定专利原文中披露的重要信息

视频链接：
https://american-chemical-society.zoom.us/rec/share/9PrTtd4gKFB245SuJax26so0a4WAHC9MsgB74Bt3mPRK9TgcwZI753ROg4eHHseL.I_K0dQtNjGzGJK5y

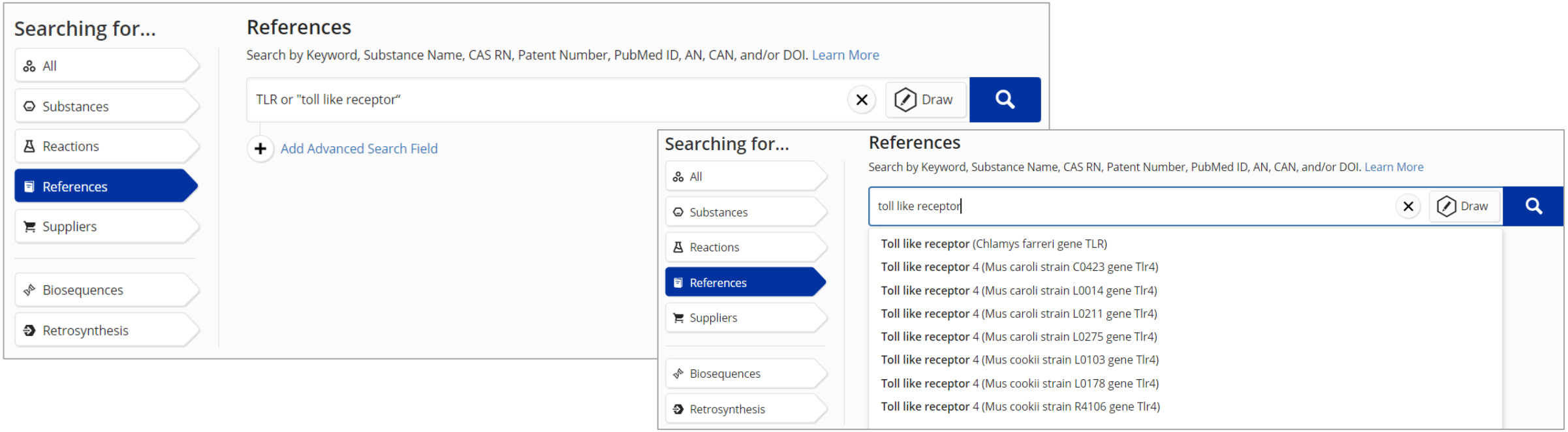
文献检索

- 文献检索方法
  - 主题词、物质名称、CAS登记号、专利号、PubMed ID、文献号、DOI
  - 各种字段：作者名、期刊名、机构名、题目、摘要、概念词、物质标识符、出版商
  - 从物质、反应获得文献
- 检索策略推荐
  - 关注某特定领域的文献：主题检索
  - 关注物质有关的文献：先获得物质，再获得文献或文本+结构联合检索
  - 关注某科研人员的文献：作者名检索
  - 关注某机构科研进展：机构名检索

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

文献检索--主题词检索

主题词检索：TLR or “toll like receptor” 或 (TLR or “toll like receptor”) and agonist



基于科学家创建的叙词表，充分利用自动提示检索词，启发检索思路

支持布尔逻辑运算符(and, or, not)，默认运算顺序or > and > not

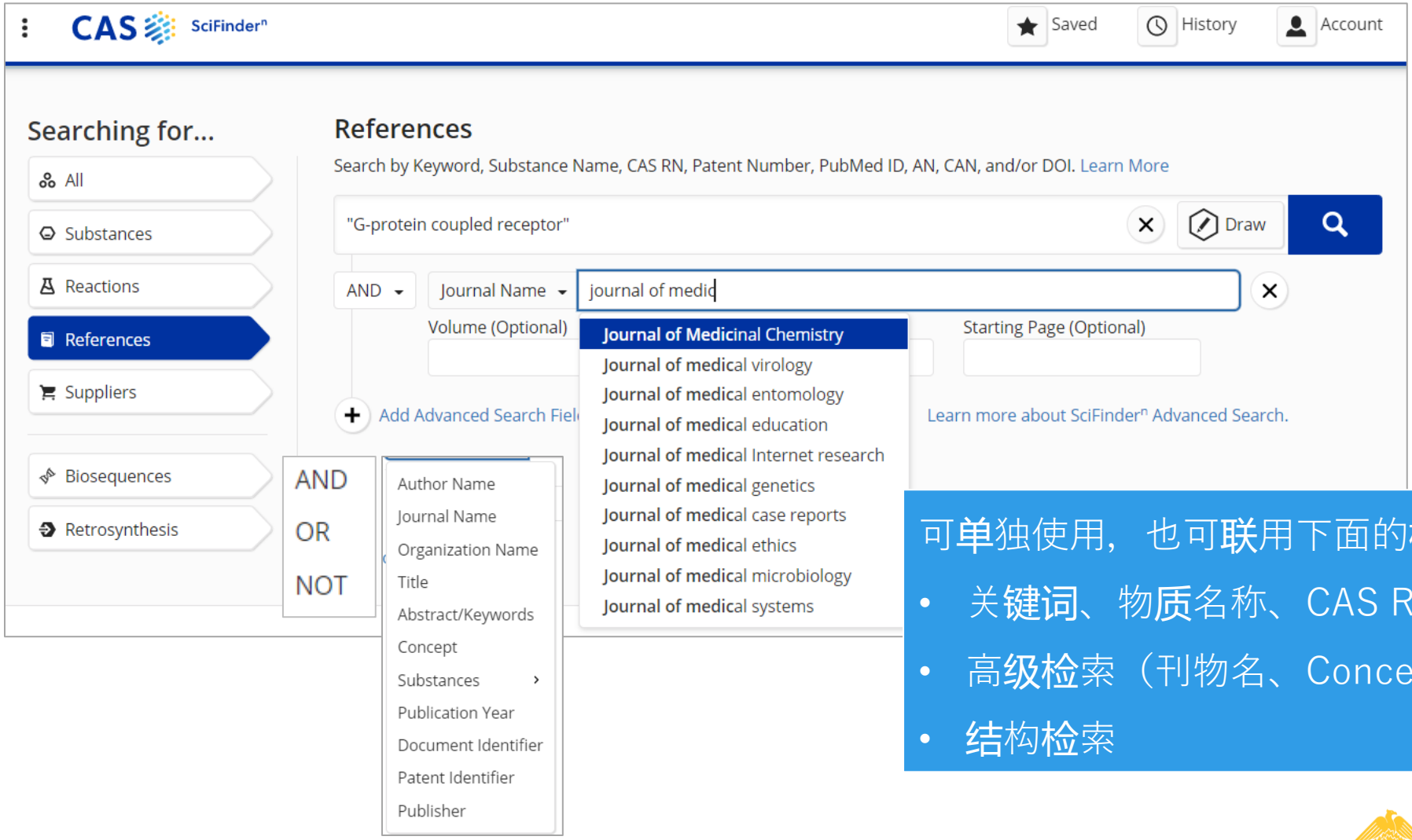
( ) 优先运算

“ ”不允许词形变化，但可出现单数或复数

支持通配符*或？（*代表0或多个字符；？代表0或1个字符）

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

高级检索--高效实现多项自定义组合检索



可单独使用，也可联用下面的检索方法：

- 关键词、物质名称、CAS RN、文献号；
- 高级检索（刊物名、Concepts、物质等）；
- 结构检索

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

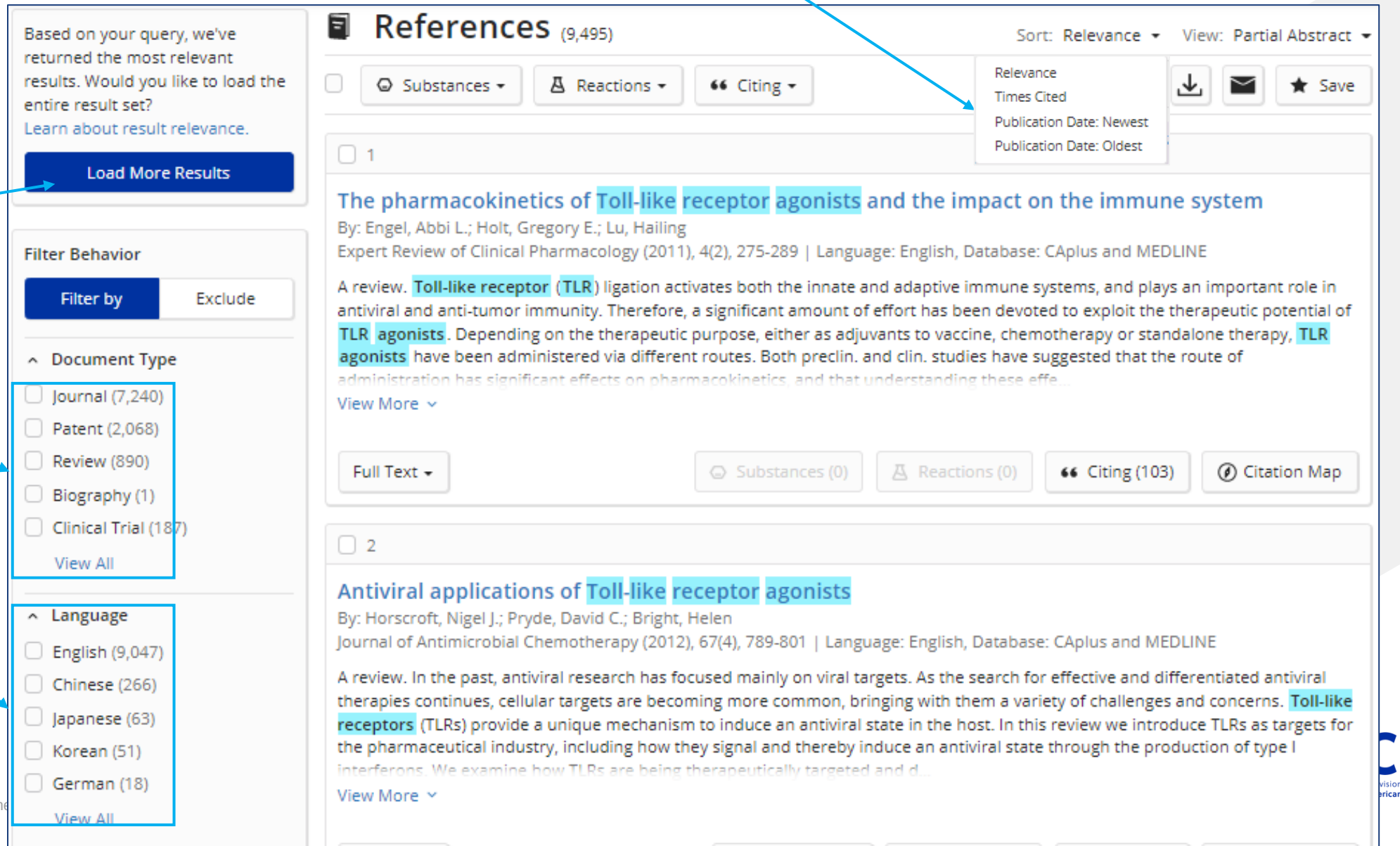
文献结果集

排序：
更快查找相关信息

获得更多文献

文献类型

文献语言



文献结果集

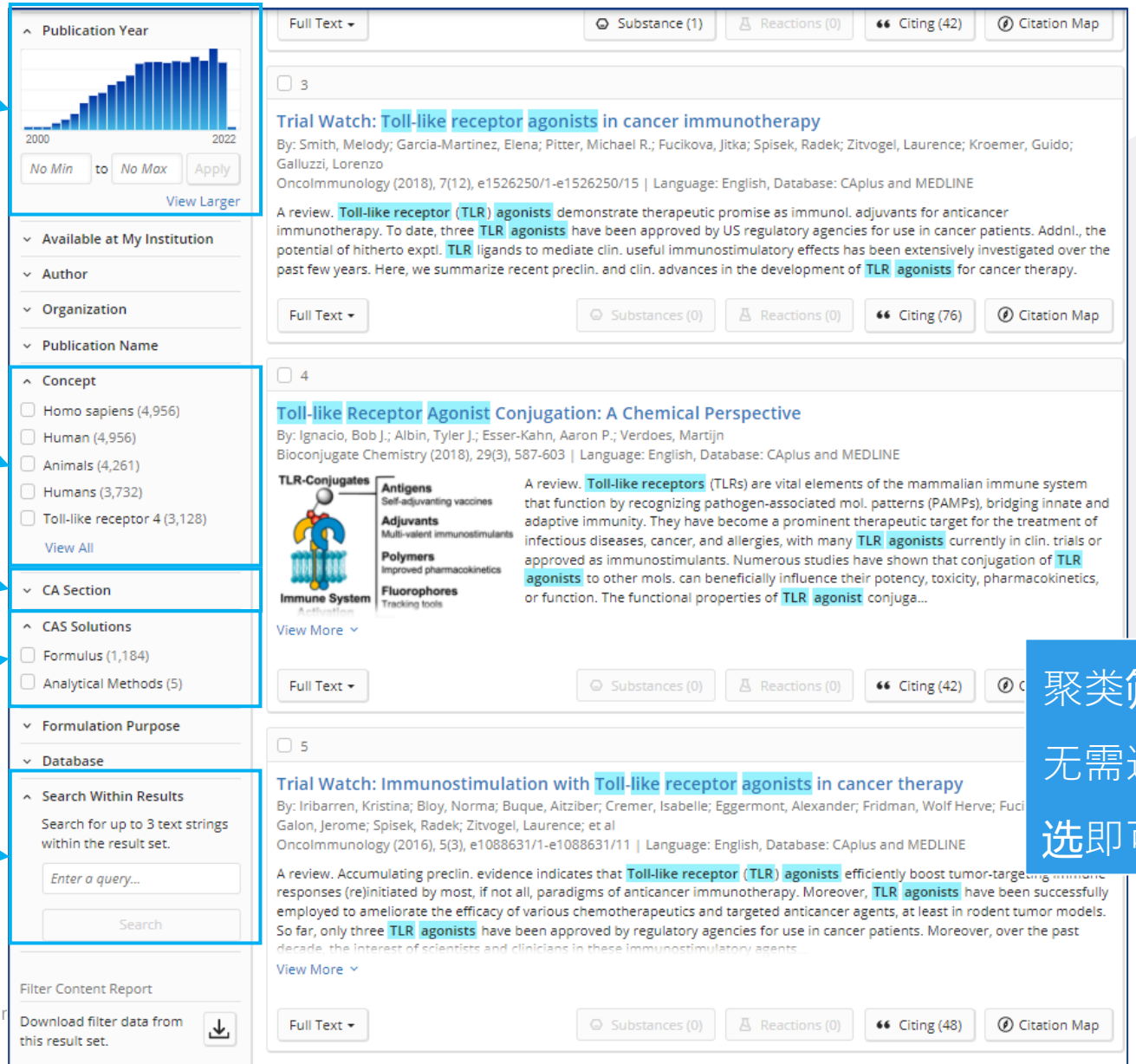
研究发展趋势

CAS标引的技术术语

CAS学科研究方向

制剂/分析方法信息

二次检索



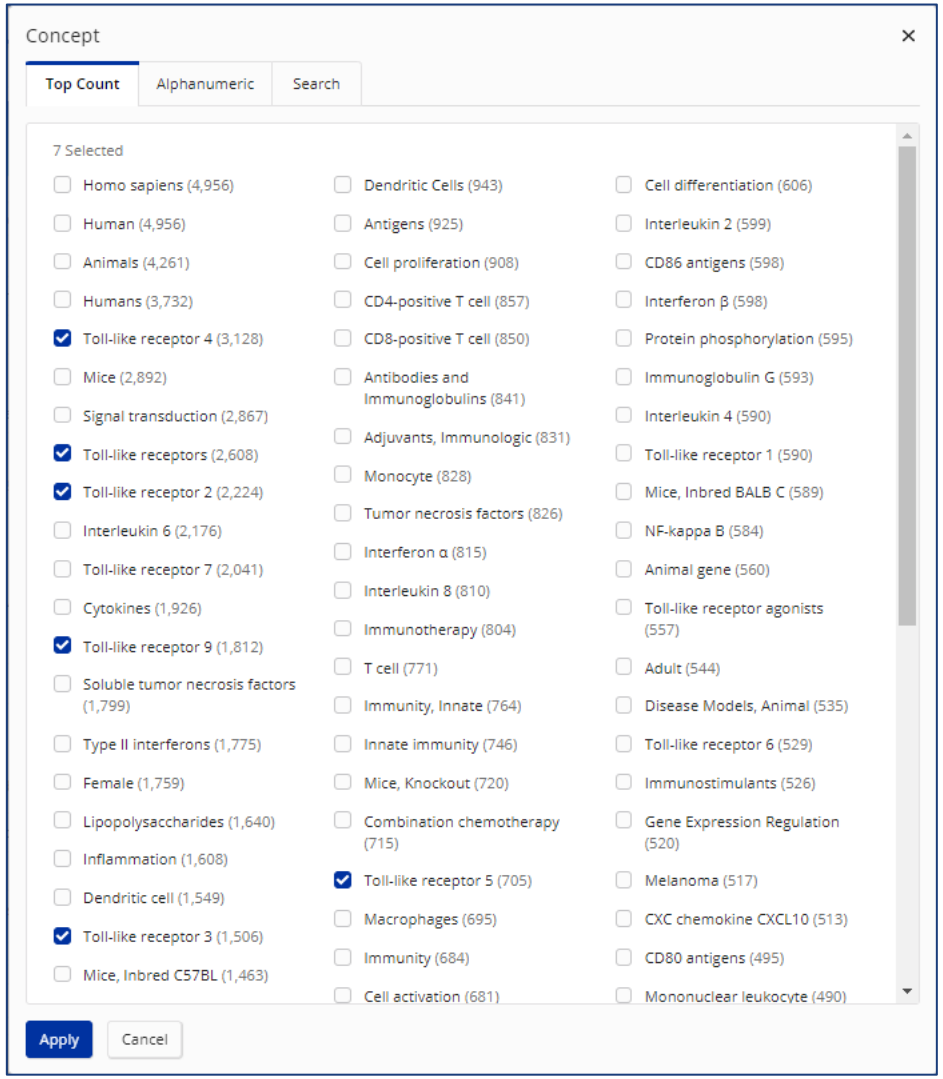
聚类筛选项节省时间，一目了然。

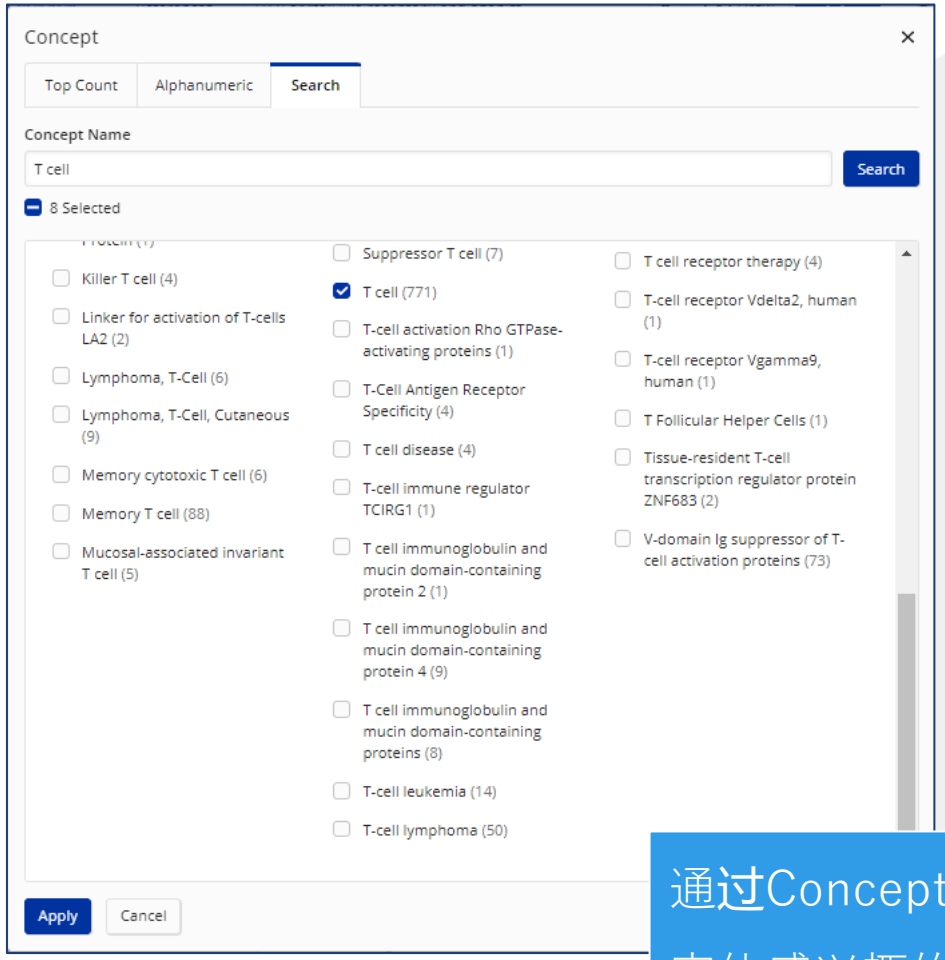
无需逐步二次检索和限定，直接勾选即可定位所需信息

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

文献结果集--聚类筛选Concept

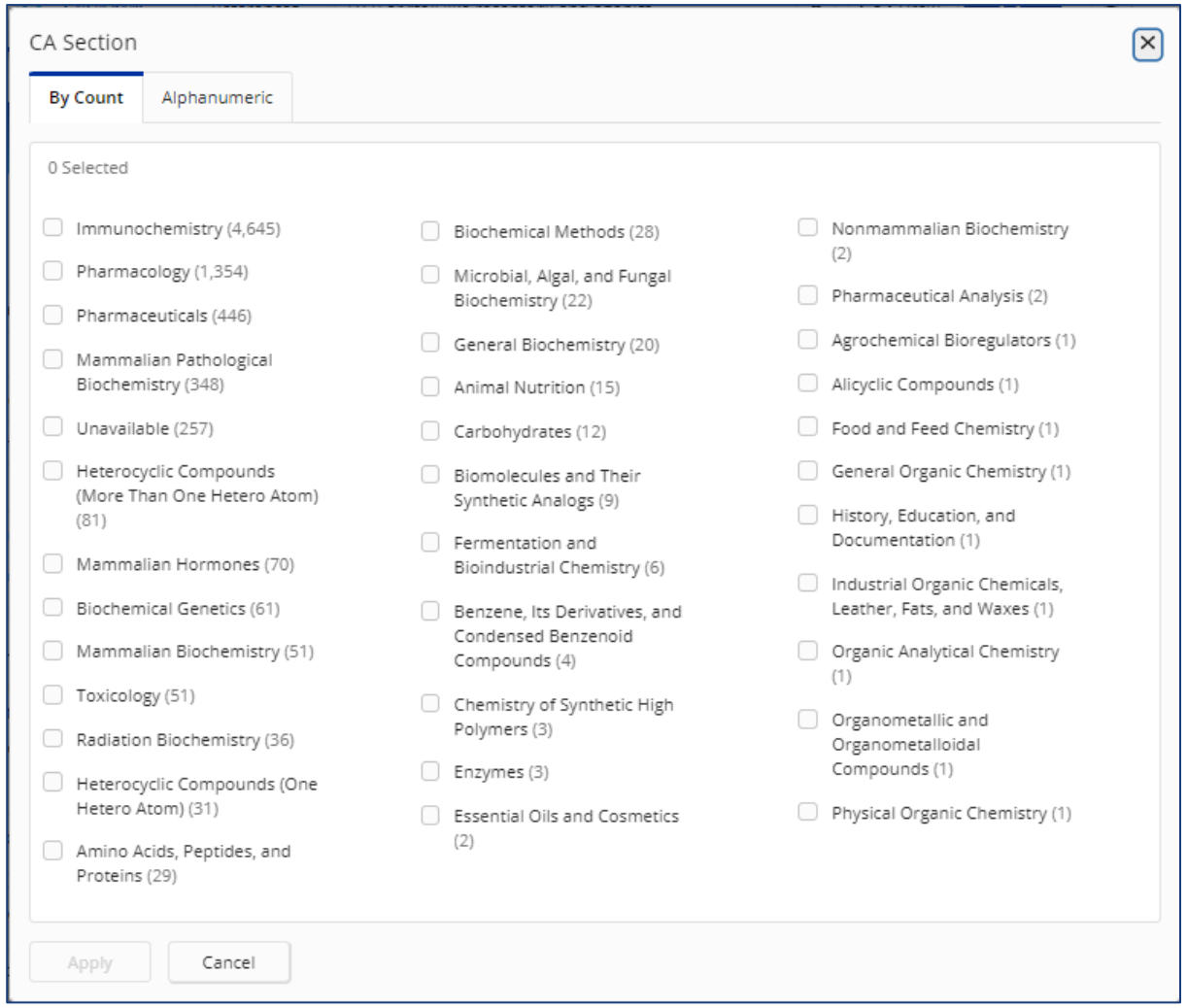




通过Concept纵览并精准定位感兴趣的核心研究点

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

文献结果集--聚类筛选CA Section



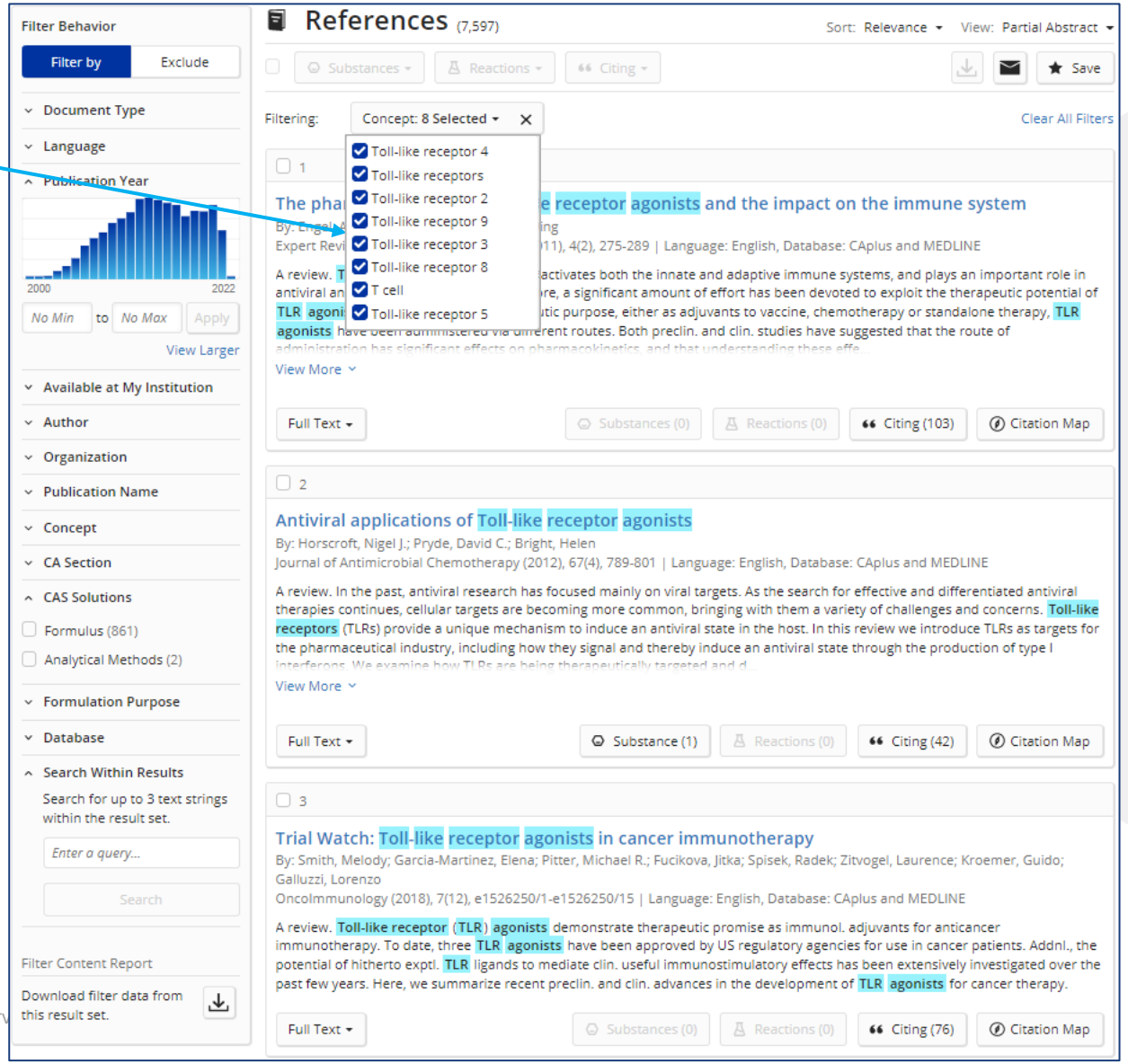
通过CA Section快速锁定学科研究方向

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

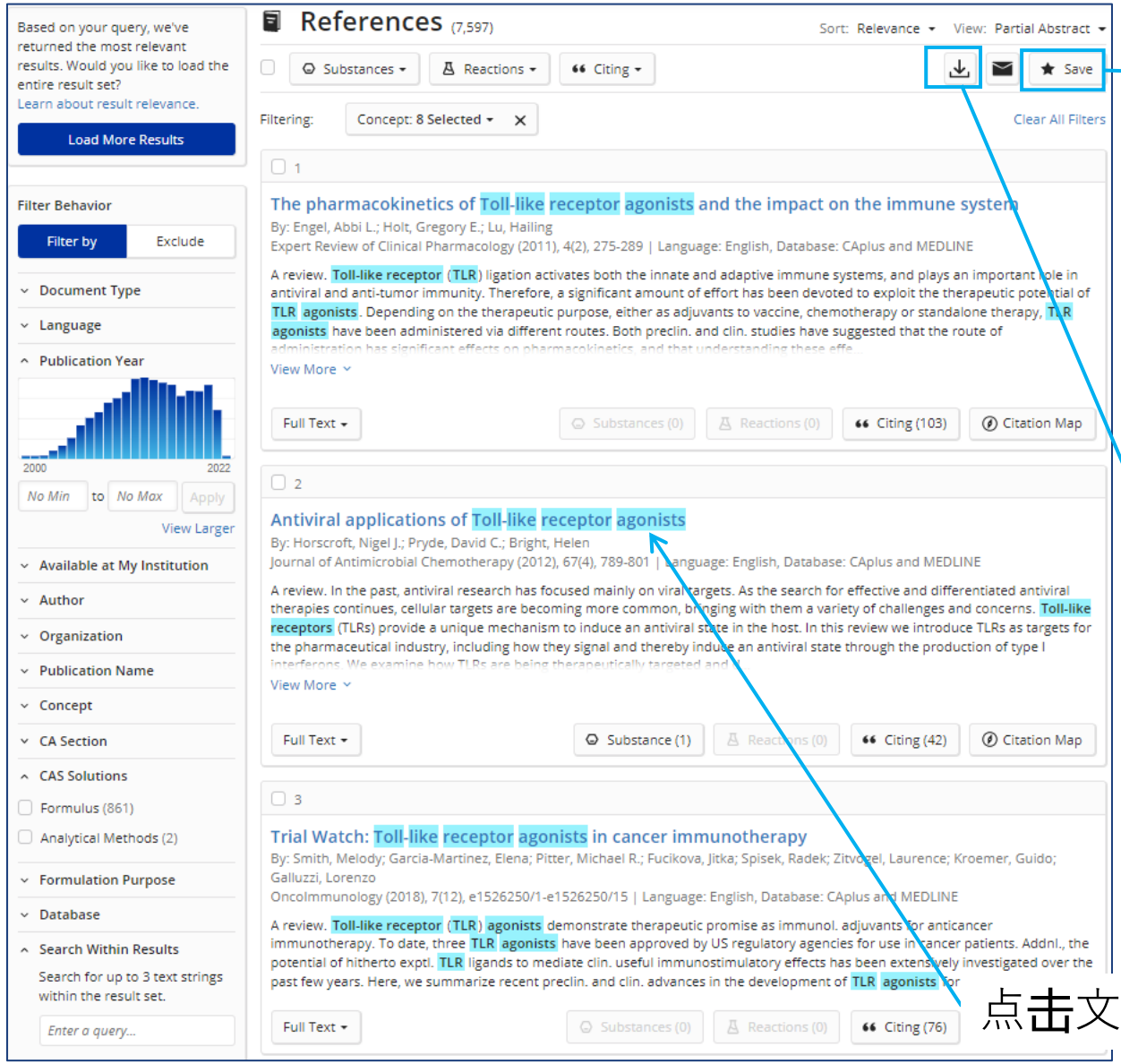
文献结果集--聚类筛选CAS Solutions

查看勾选的
Concept



ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

文献结果集--保存及查看详情



Save：保存成**结**果集，并可同**时设**置定**题**提醒或添加**标签**（包括文献，物**质**，反**应结**果集）

Download：可保存成ris、PDF、rtf、Excel格式

点**击**文献**标题查**看文献**详**情

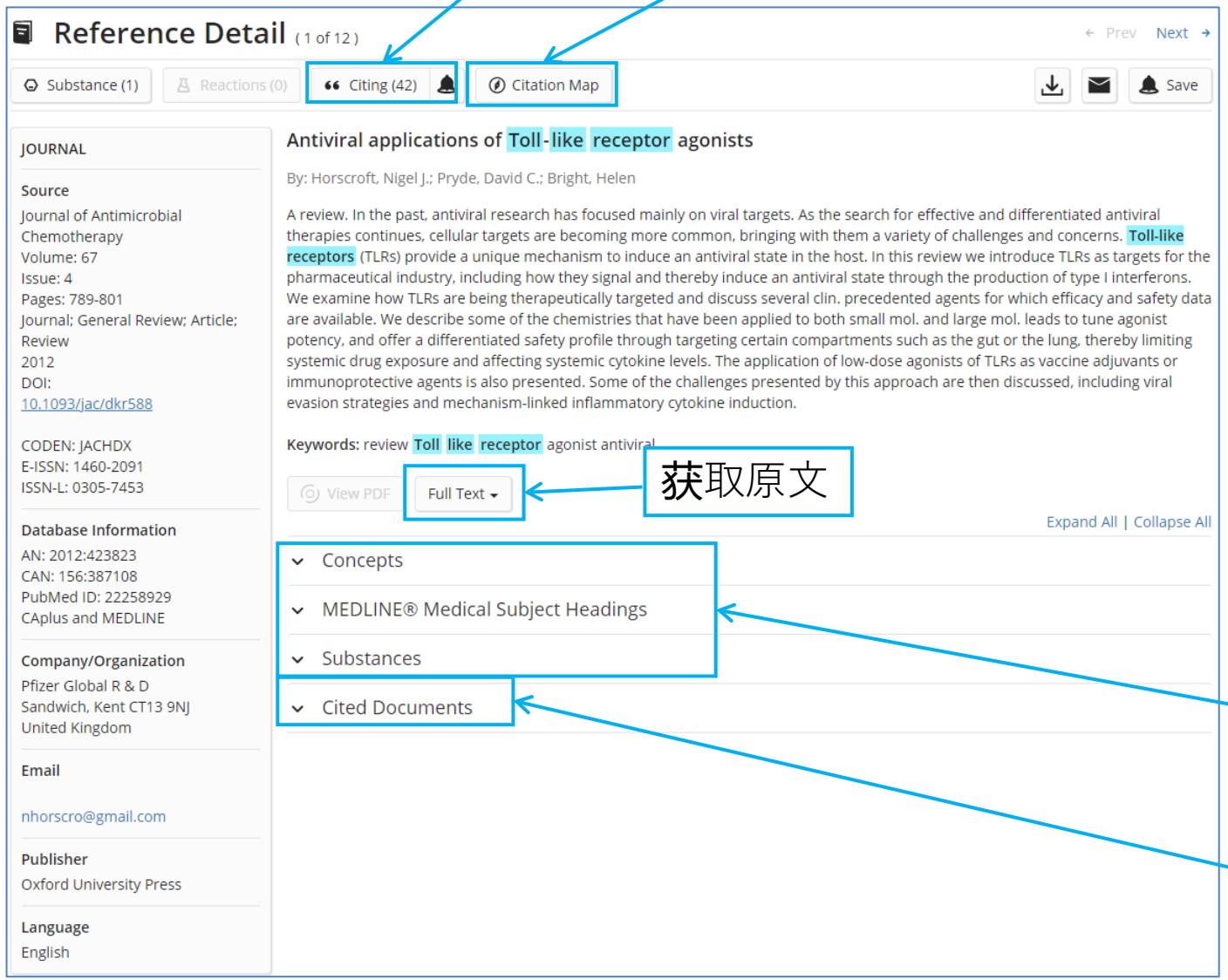
ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

文献详情

被引文献

引文地图



获取原文

文献详情界面包括：

- 标题
- 摘要
- 文献中重要的技术术语（含Caplus、Medline的关键词）
- 文献中重要的物质
- 书目信息
- 获得文献中的物质、反应
- 参考文献
- 链接原文
- 引文地图

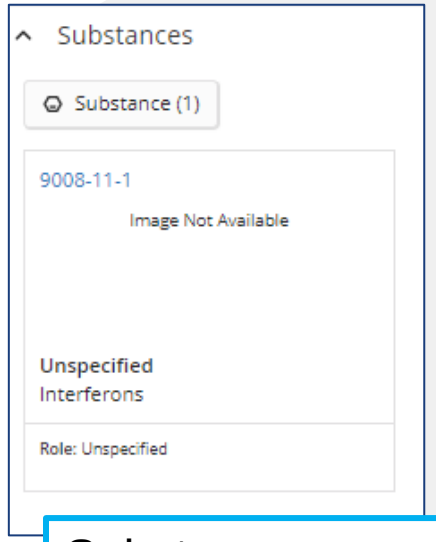
CAS科学家增值标引的信息

参考文献

文献详情

Concepts：
CAS科学家提供的**标准技术术语**，能更全面、更精准地**检**索。

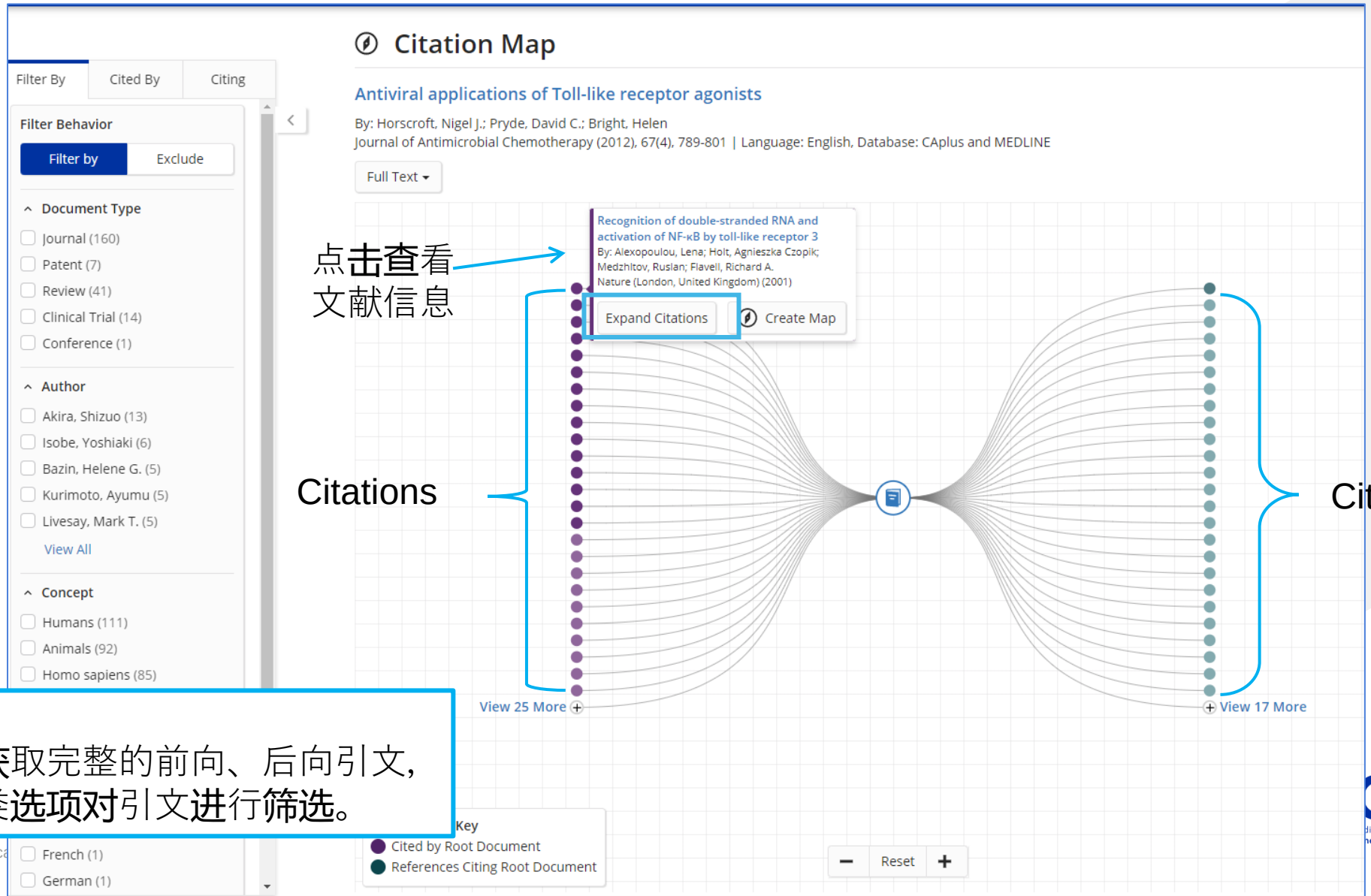
Medline Subject Headings：
从不同的**专业**角度将文献研究核心点**标**出，更全面了解文献



Substances：
对原文中重点研究的物**质**信息一目了然；
由Role了解文献**对**物**质**研究的学科方向

引文地图

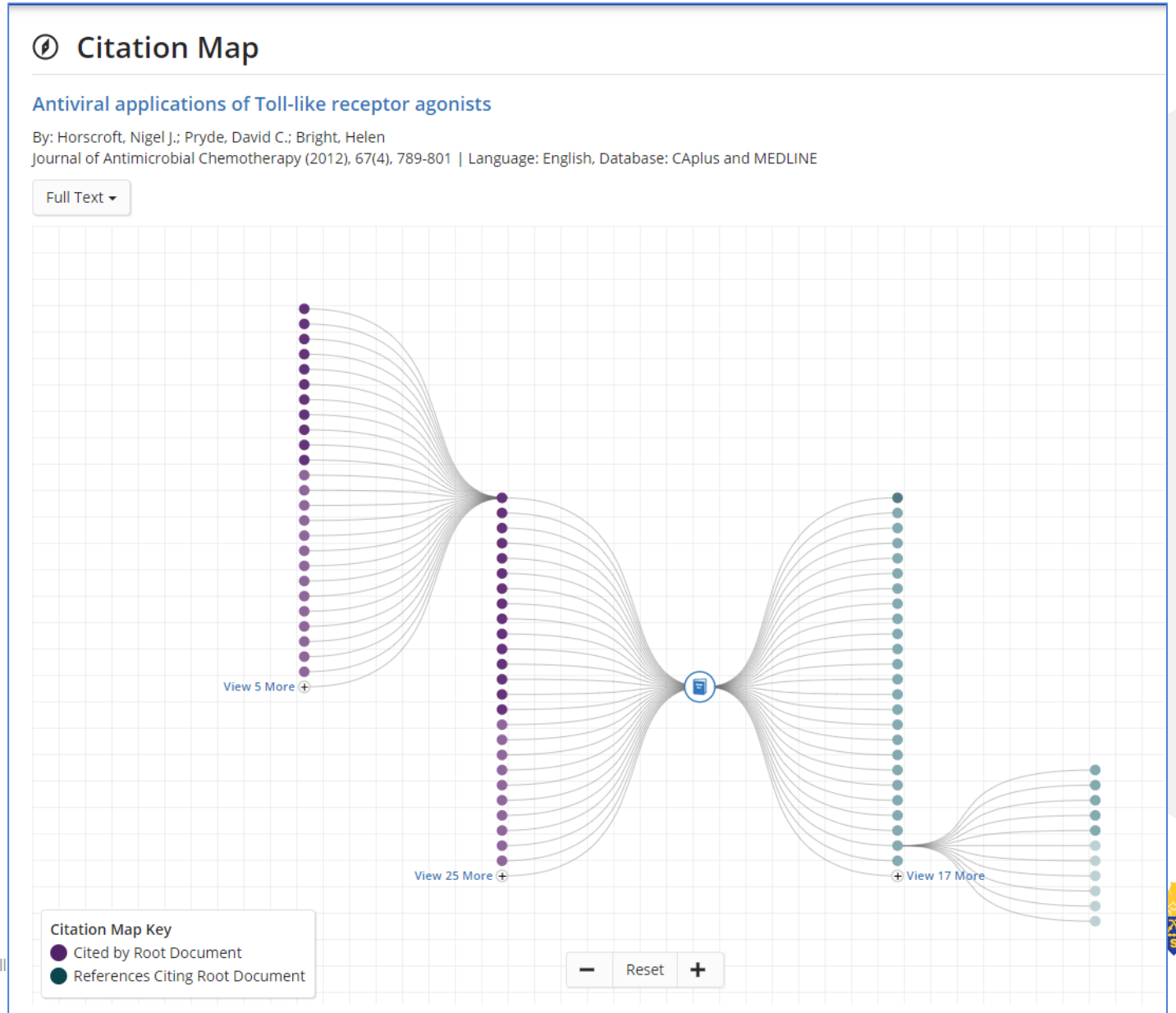
对引文
做筛选



引文地图：
在一个页面获取完整的前向、后向引文，
并有多个聚类选项对引文进行筛选。

CAS
division of the
American Chemical Society

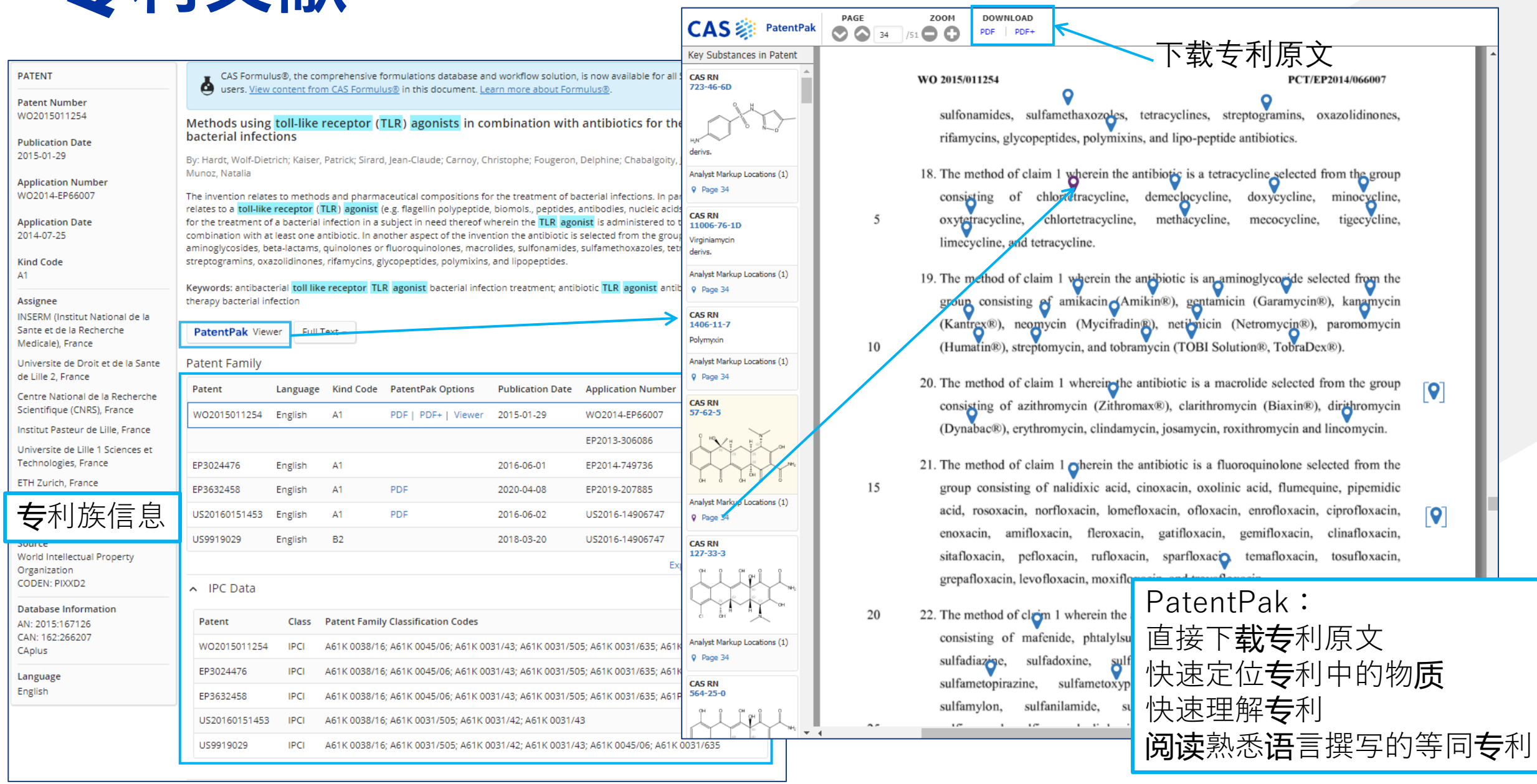
引文地图



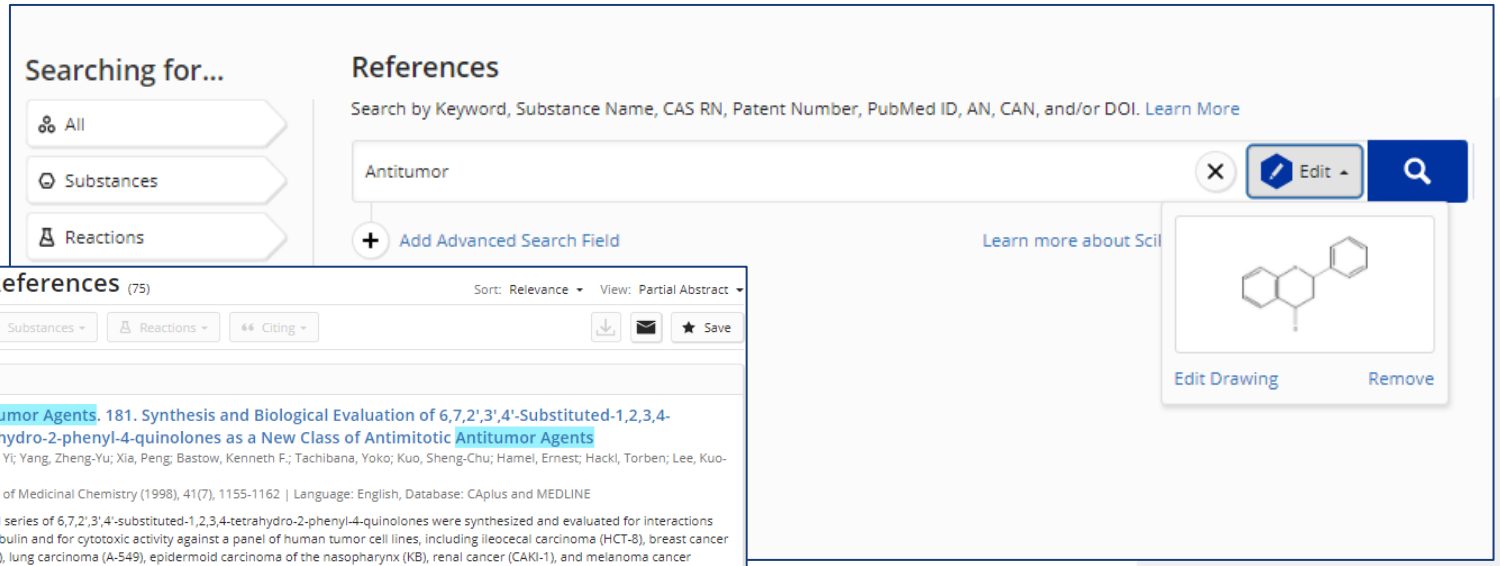
ACS International

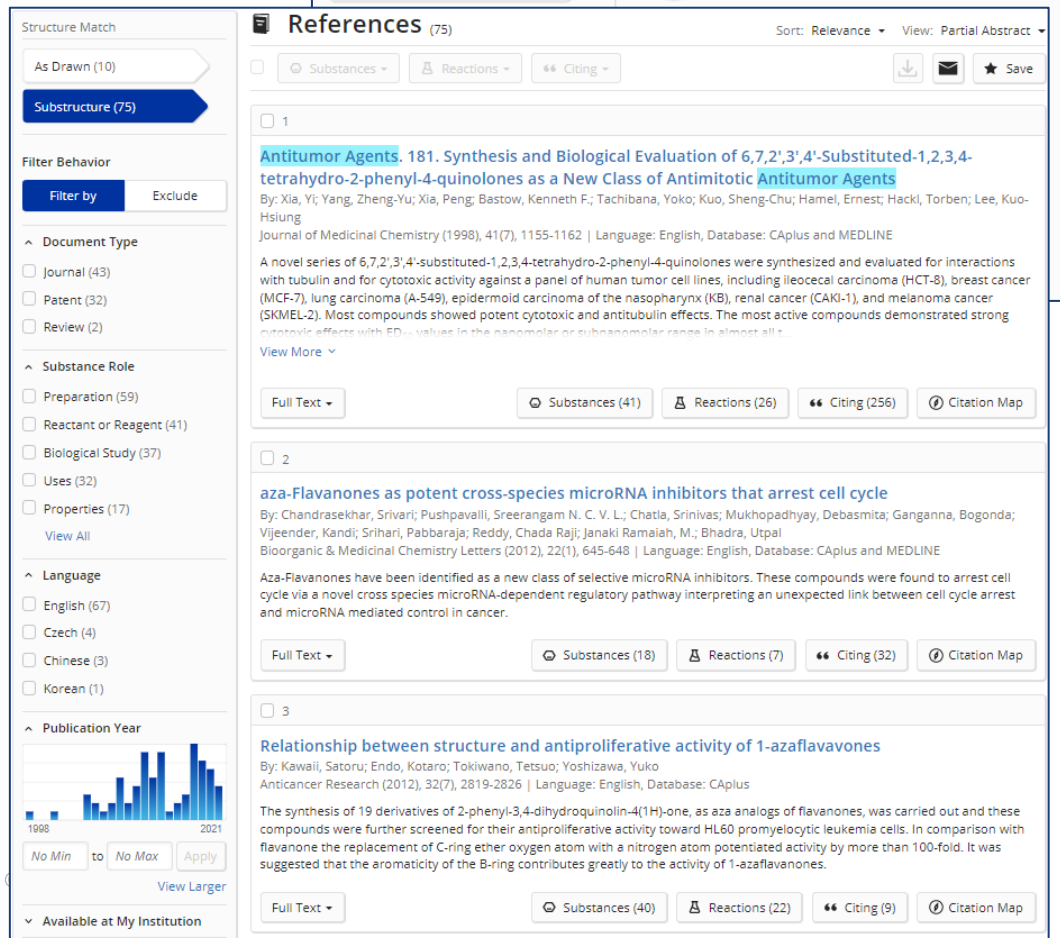
CAS
A division of the American Chemical Society

专利文献


PATENT
Patent Number
WO2015011254
Publication Date
2015-01-29
Application Number
WO2014-EP66007
Application Date
2014-07-25
Kind Code
A1
Assignee
INSERM (Institut National de la Sante et de la Recherche Medicale), France
Universite de Droit et de la Sante de Lille 2, France
Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), France
Institut Pasteur de Lille, France
Universite de Lille 1 Sciences et Technologies, France
ETH Zurich, France
Source
World Intellectual Property Organization
CODEN: PIXXD2
Database Information
AN: 2015:167126
CAN: 162:266207
CAplus
Language
English
CAS Formulus®, the comprehensive formulations database and workflow solution, is now available for all
users. View content from CAS Formulus® in this document. Learn more about Formulus®.
Methods using toll-like receptor (TLR) agonists in combination with antibiotics for the
bacterial infections
By: Hardt, Wolf-Dietrich; Kaiser, Patrick; Sirard, Jean-Claude; Carnoy, Christophe; Fougeron, Delphine; Chabalgoity,
Munoz, Natalia
The invention relates to methods and pharmaceutical compositions for the treatment of bacterial infections. In par
relates to a toll-like receptor (TLR) agonist (e.g. flagellin polypeptide, biomols., peptides, antibodies, nucleic acids
for the treatment of a bacterial infection in a subject in need thereof wherein the TLR agonist is administered to t
combination with at least one antibiotic. In another aspect of the invention the antibiotic is selected from the group
aminoglycosides, beta-lactams, quinolones or fluoroquinolones, macrolides, sulfonamides, sulfamethoxazoles, tet
streptogramins, oxazolidinones, rifamycins, glycopeptides, polymixins, and lipopeptides.
Keywords: antibacterial toll like receptor TLR agonist bacterial infection treatment; antibiotic TLR agonist antib
therapy bacterial infection
PatentPak Viewer
Full Text
Patent Family
Patent | Language | Kind Code | PatentPak Options | Publication Date | Application Number
WO2015011254 | English | A1 | PDF | PDF+ | Viewer | 2015-01-29 | WO2014-EP66007
EP2013-306086
EP3024476 | English | A1 | 2016-06-01 | EP2014-749736
EP3632458 | English | A1 | PDF | 2020-04-08 | EP2019-207885
US20160151453 | English | A1 | PDF | 2016-06-02 | US2016-14906747
US9919029 | English | B2 | 2018-03-20 | US2016-14906747
IPC Data
Patent | Class | Patent Family Classification Codes
WO2015011254 | IPCI | A61K 0038/16; A61K 0045/06; A61K 0031/43; A61K 0031/505; A61K 0031/635; A61K
EP3024476 | IPCI | A61K 0038/16; A61K 0045/06; A61K 0031/43; A61K 0031/505; A61K 0031/635; A61K
EP3632458 | IPCI | A61K 0038/16; A61K 0045/06; A61K 0031/43; A61K 0031/505; A61K 0031/635; A61P
US20160151453 | IPCI | A61K 0038/16; A61K 0031/505; A61K 0031/42; A61K 0031/43
US9919029 | IPCI | A61K 0038/16; A61K 0031/505; A61K 0031/42; A61K 0031/43; A61K 0045/06; A61K 0031/635
专利族信息
CAS PatentPak
PAGE
34
/51
ZOOM
DOWNLOAD
PDF | PDF+
下载专利原文
Key Substances in Patent
CAS RN 723-46-6D
derivs.
Analyst Markup Locations (1)
Page 34
CAS RN 11006-76-1D
Virginiamycin
derivs.
Analyst Markup Locations (1)
Page 34
CAS RN 1406-11-7
Polymyxin
Analyst Markup Locations (1)
Page 34
CAS RN 57-62-5
Analyst Markup Locations (1)
Page 34
CAS RN 127-33-3
Analyst Markup Locations (1)
Page 34
CAS RN 564-25-0
WO 2015/011254
PCT/EP2014/066007
sulfonamides, sulfamethaxozoles, tetracyclines, streptogramins, oxazolidinones, rifamycins, glycopeptides, polymixins, and lipo-peptide antibiotics.
18. The method of claim 1 wherein the antibiotic is a tetracycline selected from the group consisting of chlortetracycline, demeclocycline, doxycycline, minocycline, oxytetracycline, chlortetracycline, methacycline, mecocycline, tigecycline, limecycline, and tetracycline.
19. The method of claim 1 wherein the antibiotic is an aminoglycoside selected from the group consisting of amikacin (Amikin®), gentamicin (Garamycin®), kanamycin (Kantrex®), neomycin (Mycifradin®), netilmicin (Netromycin®), paromomycin (Humatin®), streptomycin, and tobramycin (TOBI Solution®, TobraDex®).
20. The method of claim 1 wherein the antibiotic is a macrolide selected from the group consisting of azithromycin (Zithromax®), clarithromycin (Biaxin®), dirithromycin (Dynabac®), erythromycin, clindamycin, josamycin, roxithromycin and lincomycin.
21. The method of claim 1 wherein the antibiotic is a fluoroquinolone selected from the group consisting of nalidixic acid, cinoxacin, oxolinic acid, flumequine, pipemidic acid, rosoxacin, norfloxacin, lomefloxacin, ofloxacin, enrofloxacin, ciprofloxacin, enoxacin, amifloxacin, fleroxacin, gatifloxacin, gemifloxacin, clinafloxacin, sitafloxacin, pefloxacin, rufloxacin, sparfloxacin, temafloxacin, tosufloxacin, grepafloxacin, levofloxacin, moxifl
22. The method of cl 1 wherein the
consisting of mafenide, phtalylsu
sulfadiazine, sulfadoxine, sulf
sulfametopirazine, sulfametoxyp
sulfamylon, sulfanilamide, su
PatentPak：
直接下载专利原文
快速定位专利中的物质
快速理解专利
阅读熟悉语言撰写的等同专利

文献检索--主题词+结构联合检索





主题词+结构联合检索

大大提高检索的效率

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

文献检索小结

1. 使用布尔逻辑算符and、or、not连接主题词
2. 通过聚类筛选工具快速获得目标文献
3. 用CAS Solutions选项快速获取信息
4. 从引文地图拓展检索，获得更多灵感
5. 用PatentPak提高专利阅读效率
6. 主题词+结构联合检索快速获得文献

大纲

- CAS SciFinder^{n}中的物质检索
  - 检索物质的常用方法
  - 物质详情的解读
  - 结构绘图板的应用
  - 物质结果集的分析及筛选
  - 物质结果集的可视化分析

视频链接：
https://american-chemical-society.zoom.us/rec/share/C8gGlyhcc1N22z3JdJ3yrRdFXdEfb9qMXz9vo2tjyiGLdd-6Qke9taq5Y1LL5SM.daLElpuwQKEepf-S?startTime=1646733603000

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

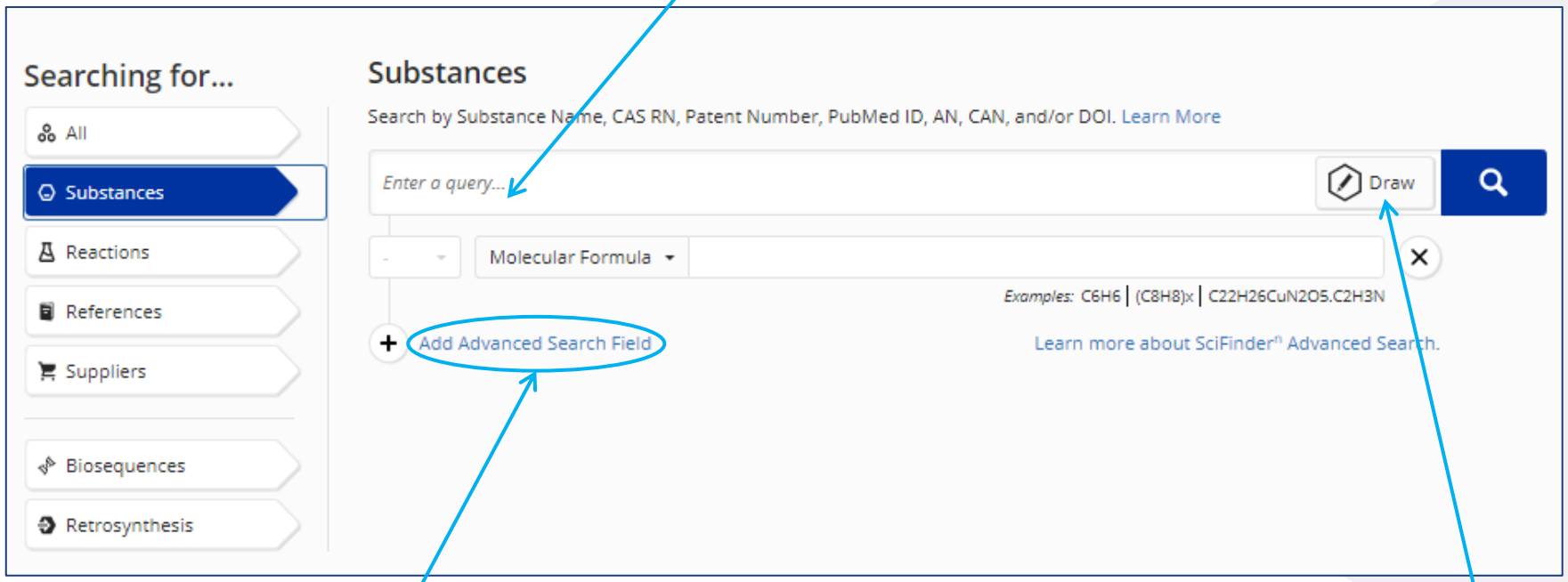
物质检索

- 物质检索方法
  - 物质标识符：化学名称，CAS RN
  - 文献标识符：专利号、文献号、PubMed ID、DOI
  - 分子式
  - 物性参数
  - 谱图数据
  - 结构式
- 物质检索策略推荐
  - 有机化合物，金属配合物，天然产物：结构检索
  - 无机物，合金：分子式检索
  - 高分子化合物：分子式检索和结构检索

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

物质检索

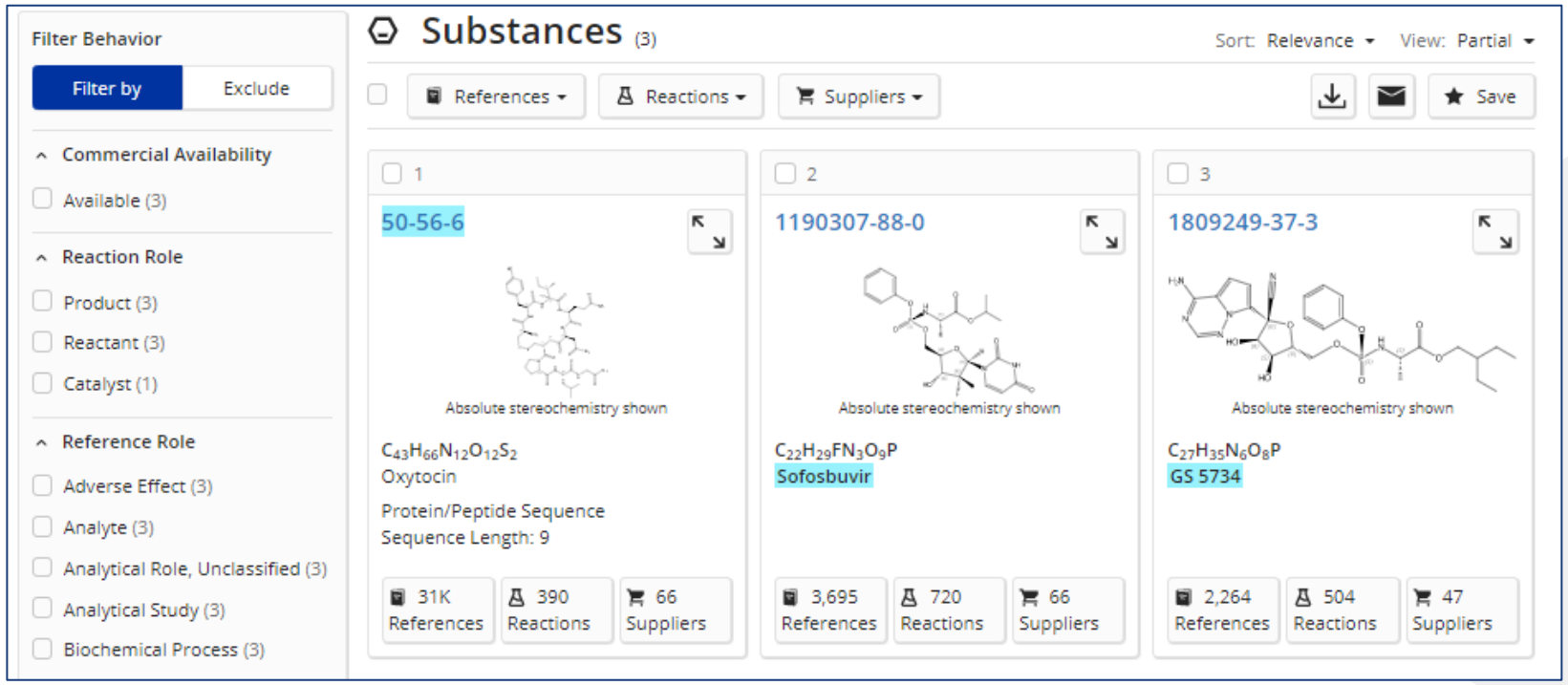
通过物质名称、CAS RN，文献标识符检索物质



通过分子式、物性参数、谱图数据检索物质

打开结构绘制面板进行结构检索

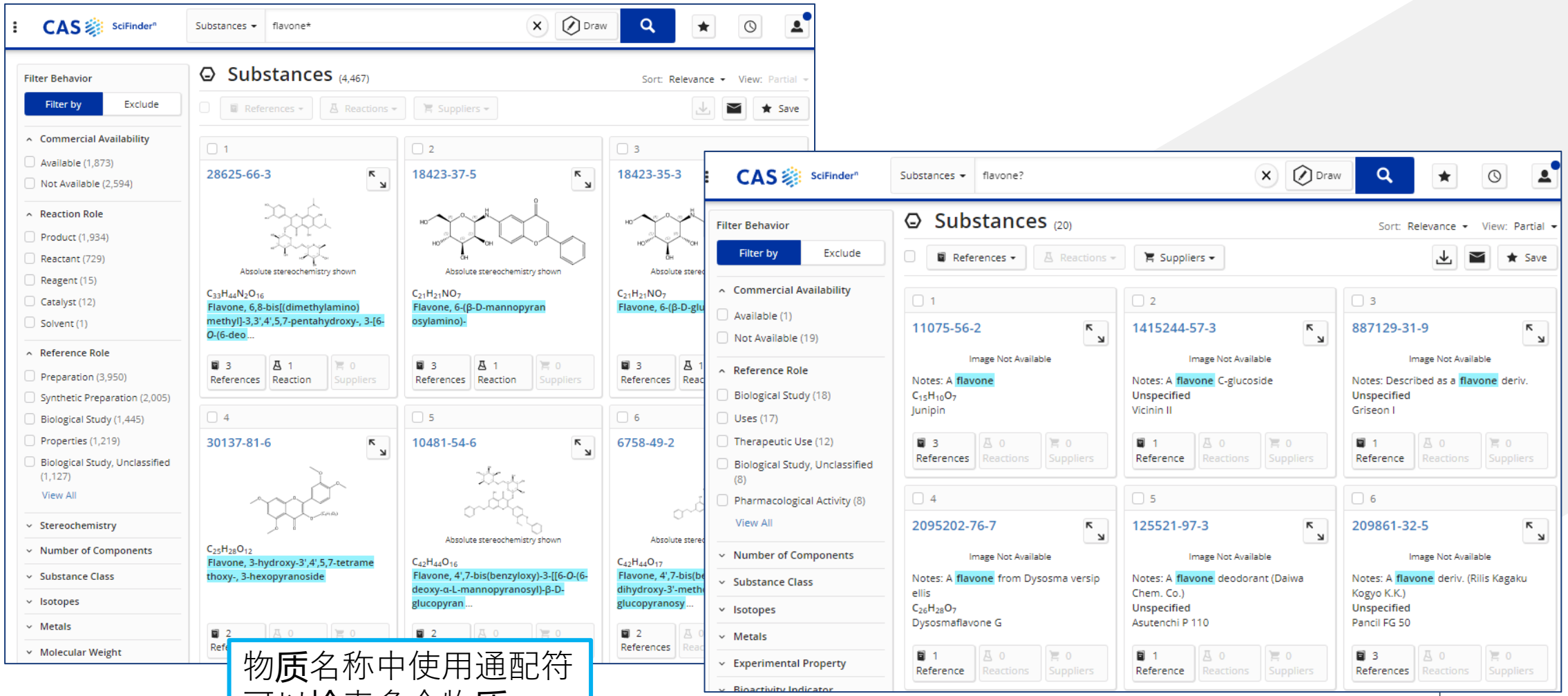
物质检索--物质名称、CAS RN、代码



sofosbuvir
50-56-6
"GS 5734"

多个物质同时检索，
中间用空格隔开

物质检索--物质名称中间或词尾使用通配符*或？

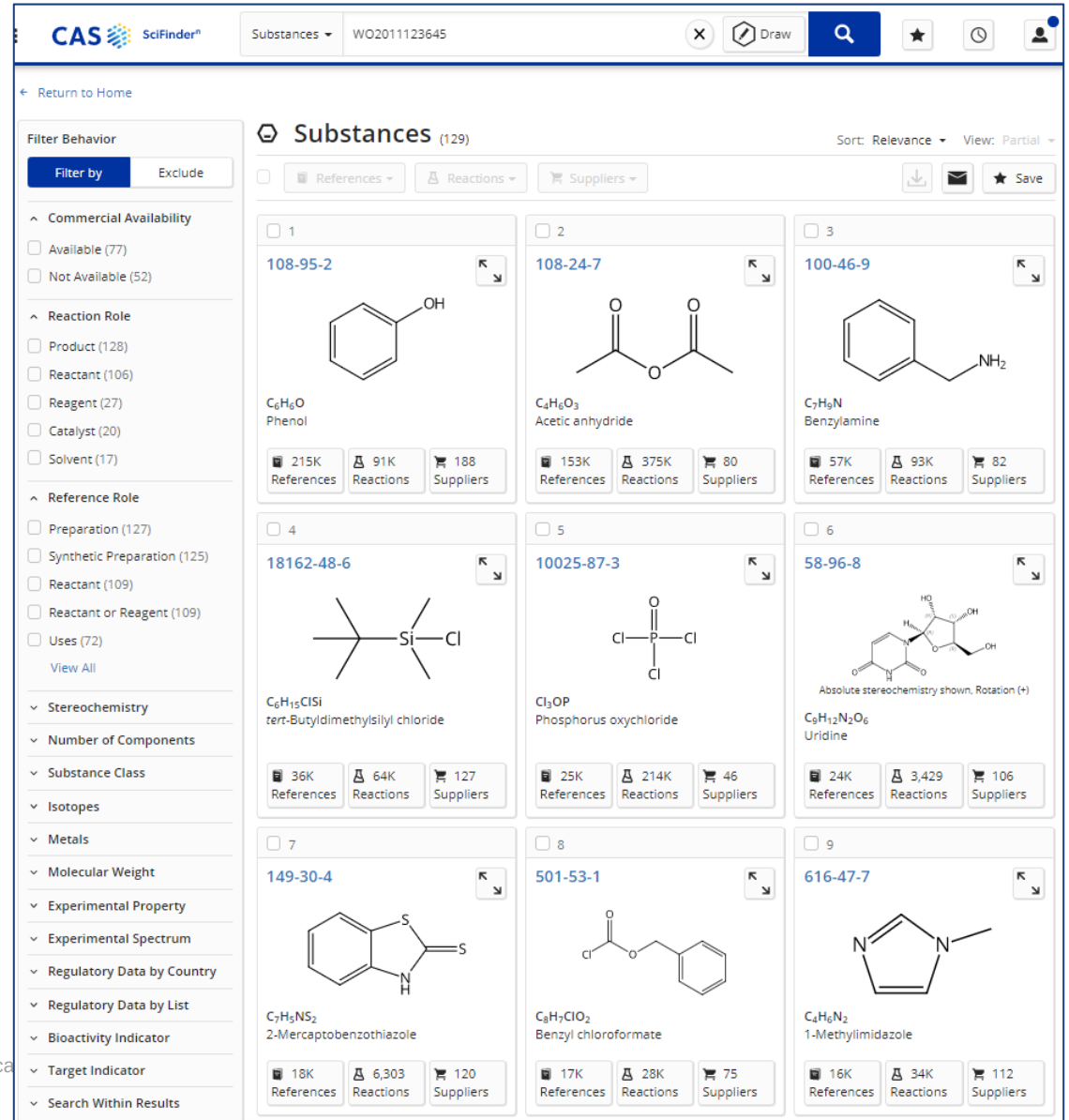


物质名称中使用通配符
可以检索多个物质

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

物质检索--文献标识符



专利号
WO2011123645

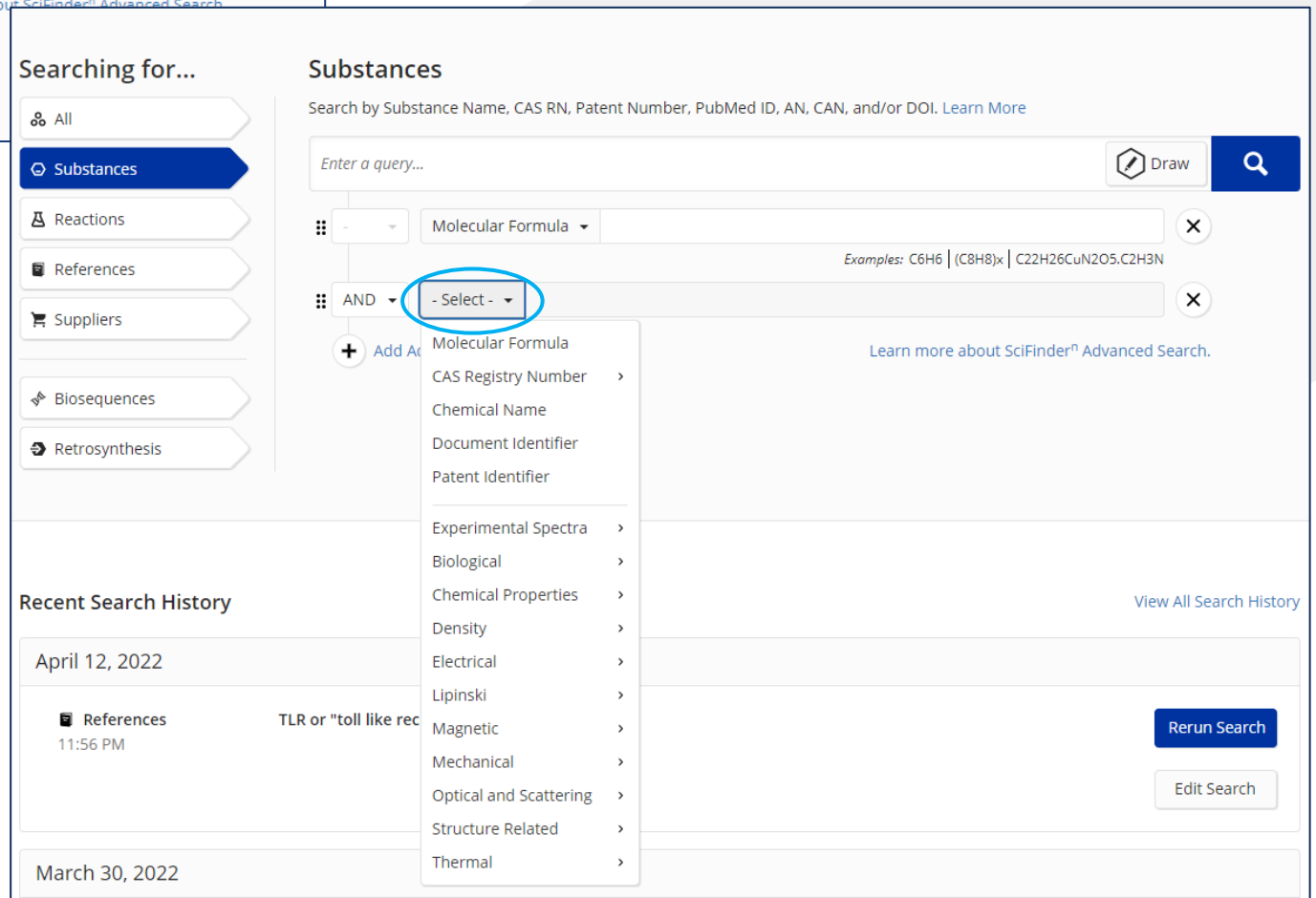
帮助用户迅速获得关注文献中的所有物质

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

物质检索--Advanced Search

通过分子式、物性参数、谱图数据等进行检索



高级检索字段：

CAS RN（物质、组份）、物质名、分子式、文献号、专利号

实验谱图（1H, 13C, 15N, 19F, 31P NMR）

生物（生物富集因子、LD50）

化学（Koc, LogD, LogP、 溶解度、分子量、pKa、蒸汽压）

密度属性（密度、摩尔体积）

电学（电导/电导率、电阻/电阻率）

Lipinski（自由旋转键、H受体/供体）

磁（磁力矩）

机械属性（拉伸强度）

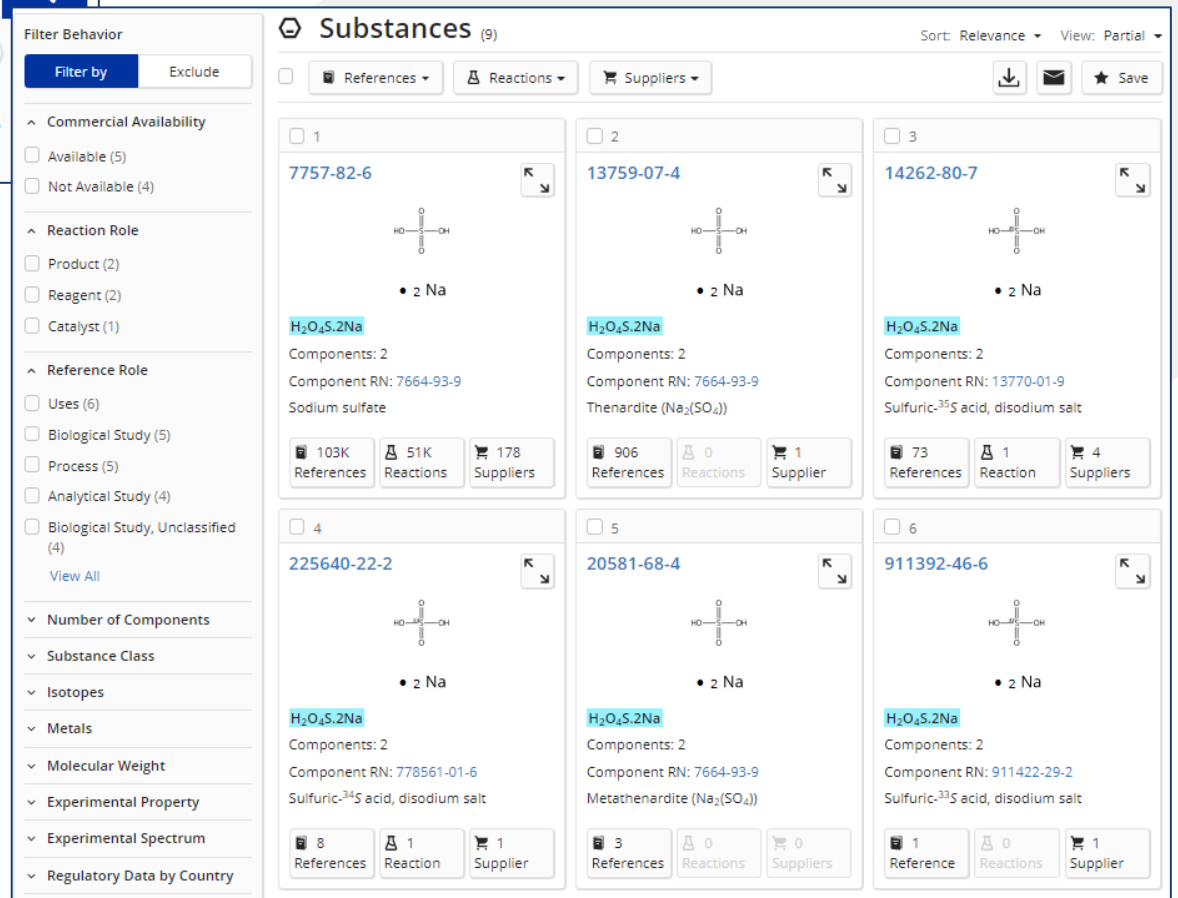
光散射（旋光性、折射率）

结构（极性表面积）

热学（熔点、沸点、闪电、玻璃转化温度、蒸发焓）

物质检索--分子式

Na2SO4： H2O4S.2Na

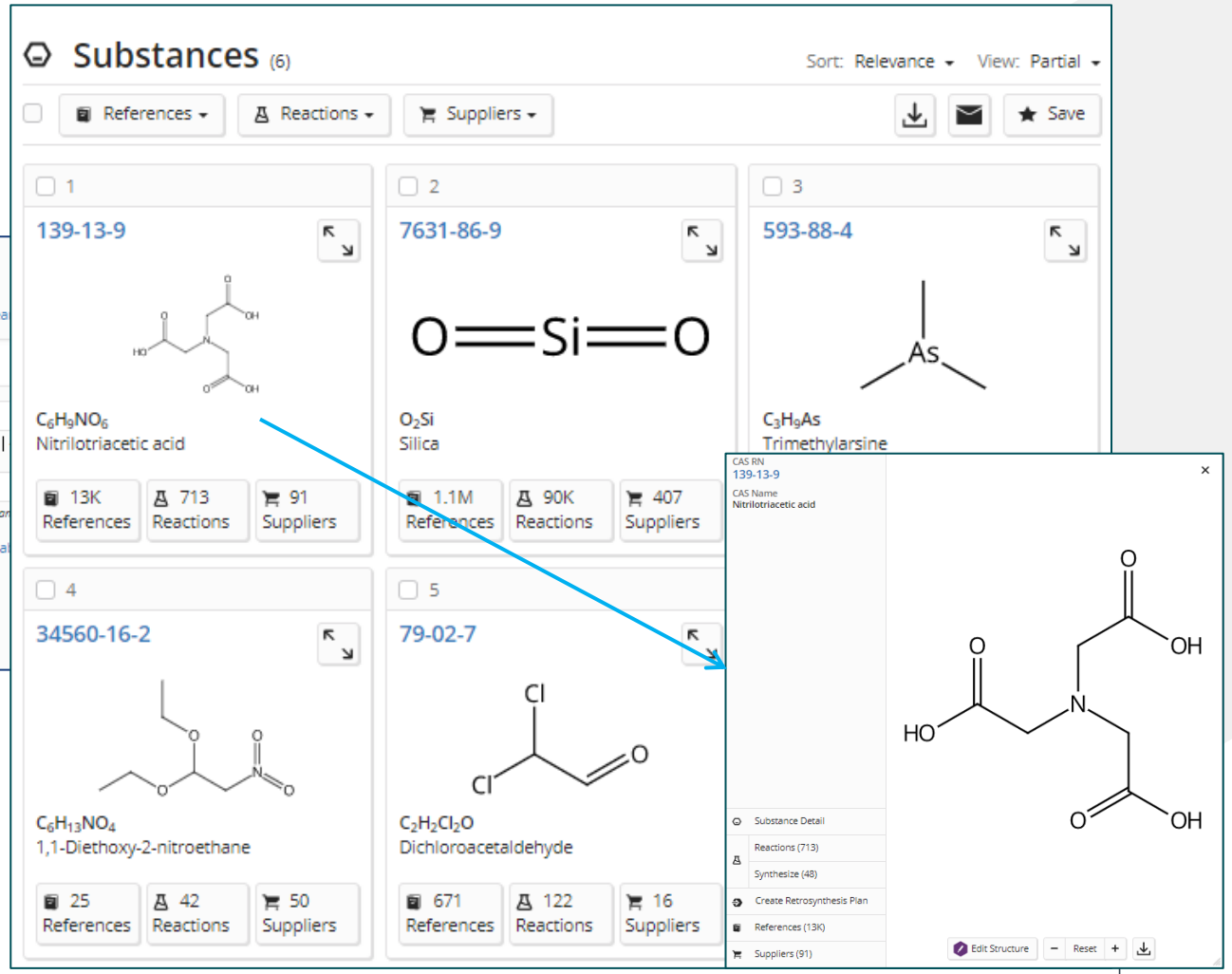


金属盐：金属离子和阴离子间用点（.）分开

不同组份之间用点（.）分开

物质检索--物性参数

密度>150g/cm^3
分子量<200



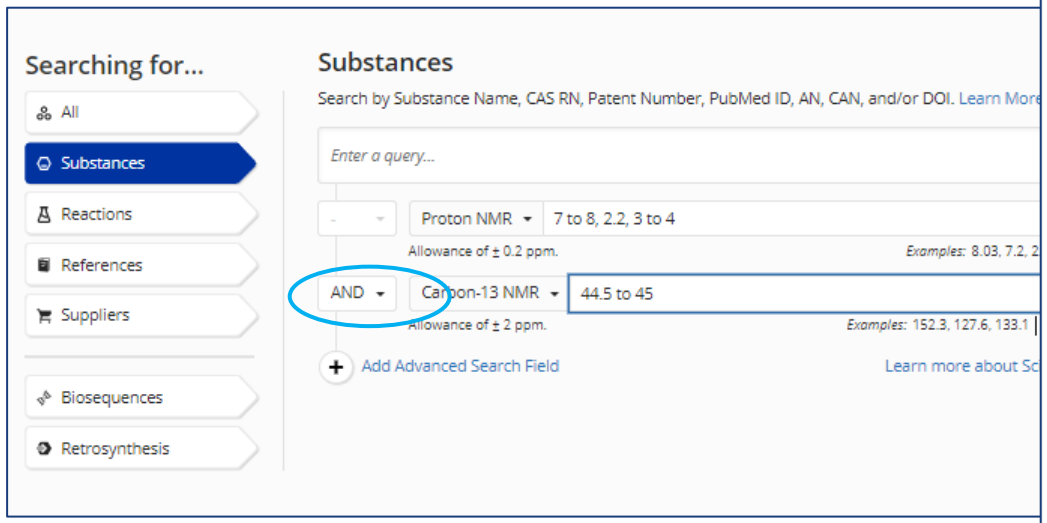
多参数检索，提高检索效率

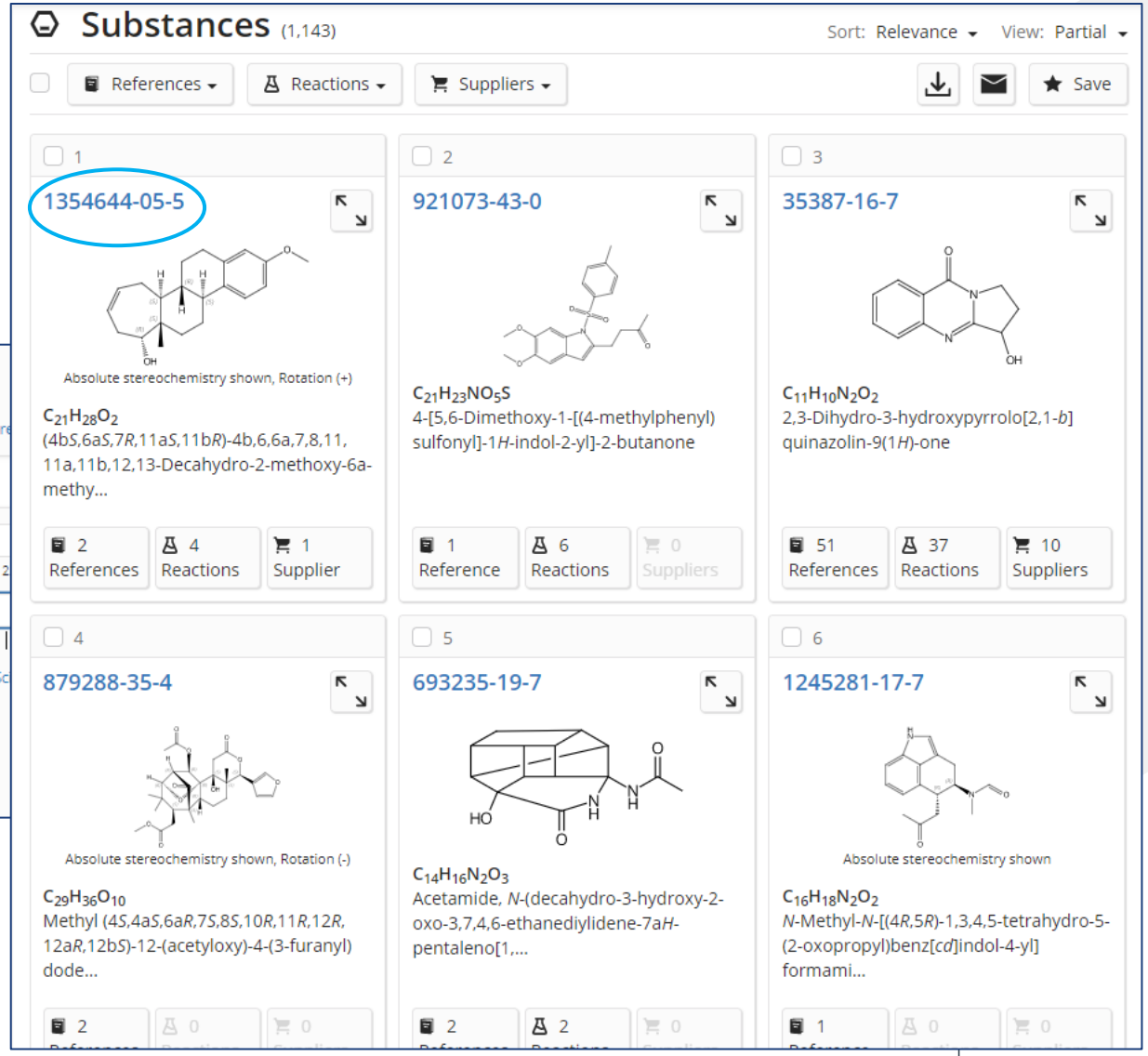
单击结构打开物质菜单链接至物质相关信息

物质检索--谱图数据

H谱特征峰保留时间： 7 to 8, 2.2, 3 to 4

C谱特征峰保留时间： 44.5 to 45





通过谱图数据进行检索

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

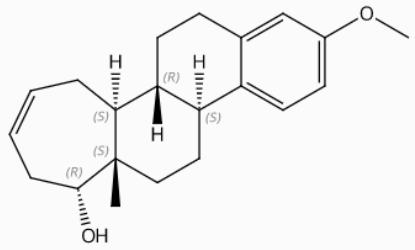
物质详情

Substance Detail (1 of 1,143)

← Prev Next →

References (2) | Reactions (4) | Supplier (1) | Save

CAS Registry Number
1354644-05-5



Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)

$C_{21}H_{28}O_2$

5*H*-Cyclohepta[*a*]phenanthren-7-ol, 4b,6,6a,7,8,11,11a,11b,12,13-decahydro-2-methoxy-6a-methyl-, (4b*S*,6a*S*,7*R*,11a*S*,11b*R*)- (ACI)

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	312.45	-
Boiling Point (Predicted)	458.5±45.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.088±0.06 g/cm^3	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
pKa (Predicted)	14.81±0.40	Most Acidic Temp: 25 °C

Spectra

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

折叠菜单显示物质各类信息

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

物质详情

Other Names and Identifiers

Experimental Spectra

^{1}H NMR | ^{13}C NMR

	Source
View Carbon-13 NMR Spectrum	(1) ACD

Sources

(1) Saloranta, Tiina; Steroids, (2012), 77(1-2), 110-117, CAplus

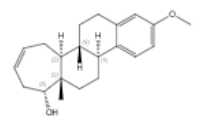
Predicted Properties

Predicted Spectra

Bioactivity Indicators

Carbon-13 NMR Spectrum Detail (1 of 1)

1354644-05-5



Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)

$C_{21}H_{28}O_2$

CAS Name
(4b*S*,6a*S*,7*R*,11a*S*,11b*R*)-4b,6,6a,7,8,11,11a,11b,12,13-Decahydro-2-methoxy-6a-methyl-5*H*-cyclohepta[*a*]phenanthren-7-ol

Conditions

Working Frequency
150 MHz

Solvent
Chloroform-*d* (865-49-6)

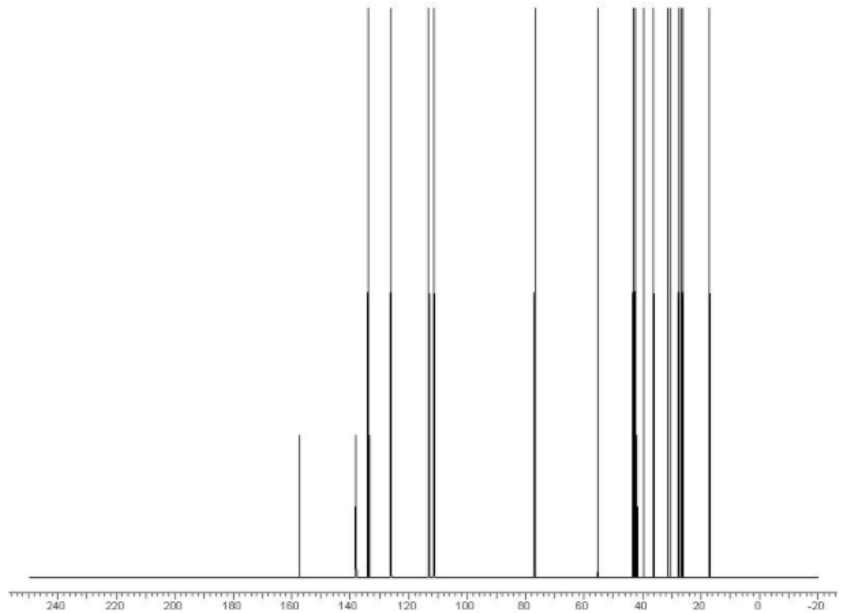
Temperature
25 °C

Spectrum Summary

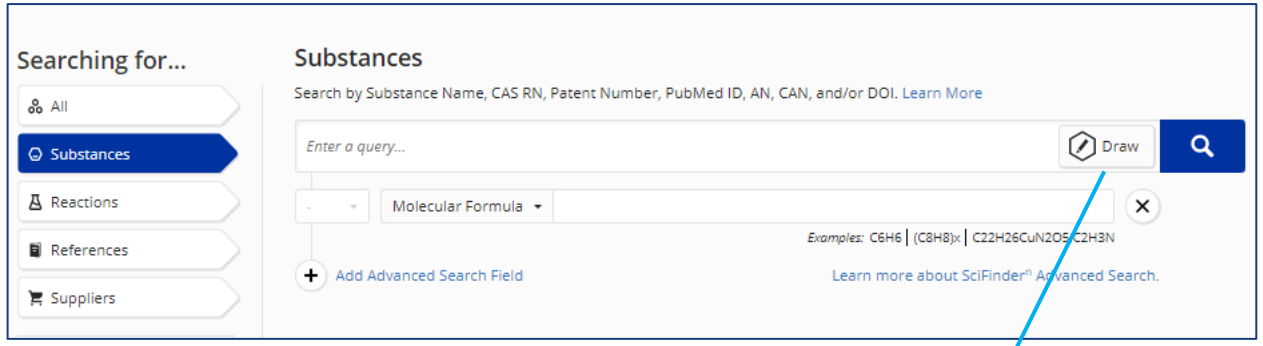
Spectrum ID
04phy12n1_131.C

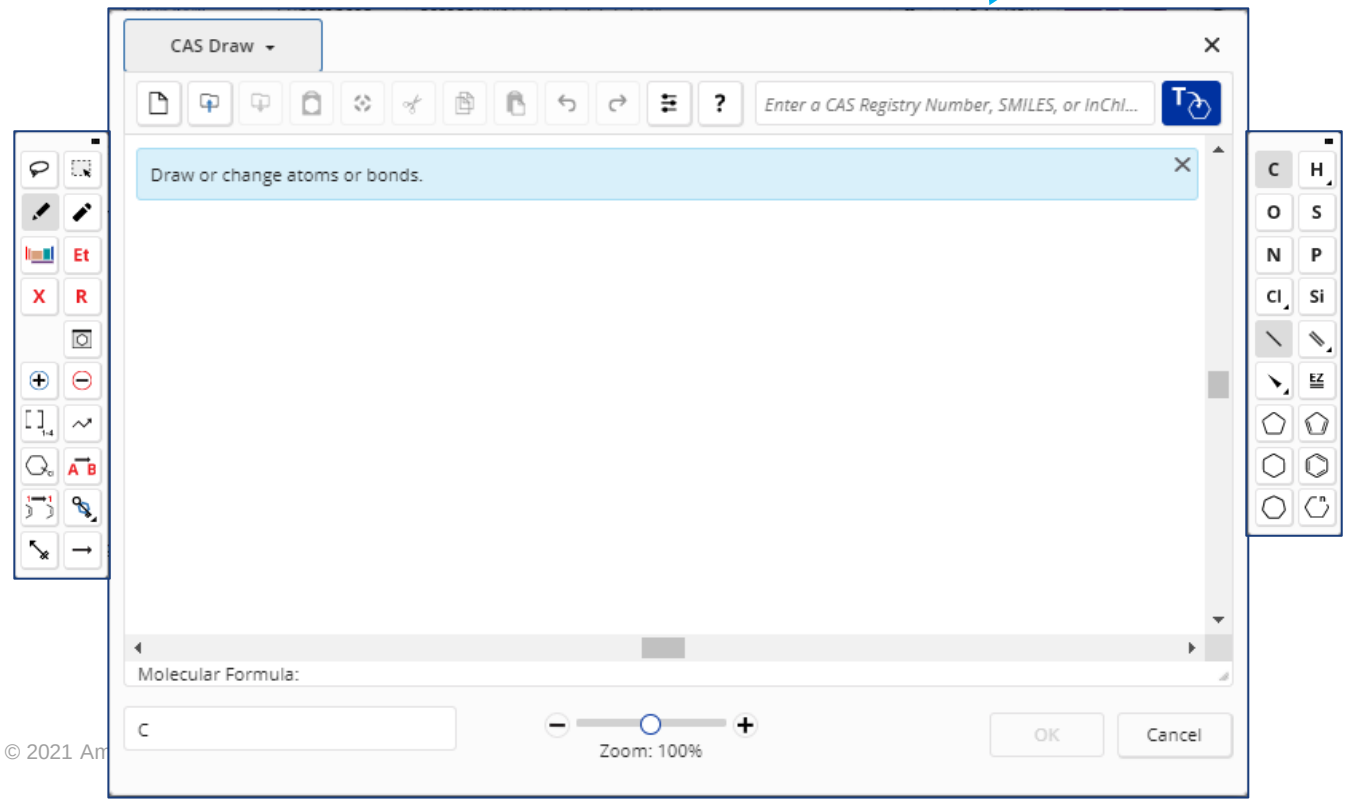
Peak Data
157.5, 138.1, 133.9, 133.4, 126.1, 126.0, 113.2, 111.4, 76.9, 55.2, 43.2, 42.5, 41.9, 39.5, 36.2, 31.4, 30.3, 27.6, 26.6, 26.2, 17.1 ppm

Source
Spectral data were obtained from Advanced Chemistry Development, Inc.



物质检索--结构检索





选择可变基团

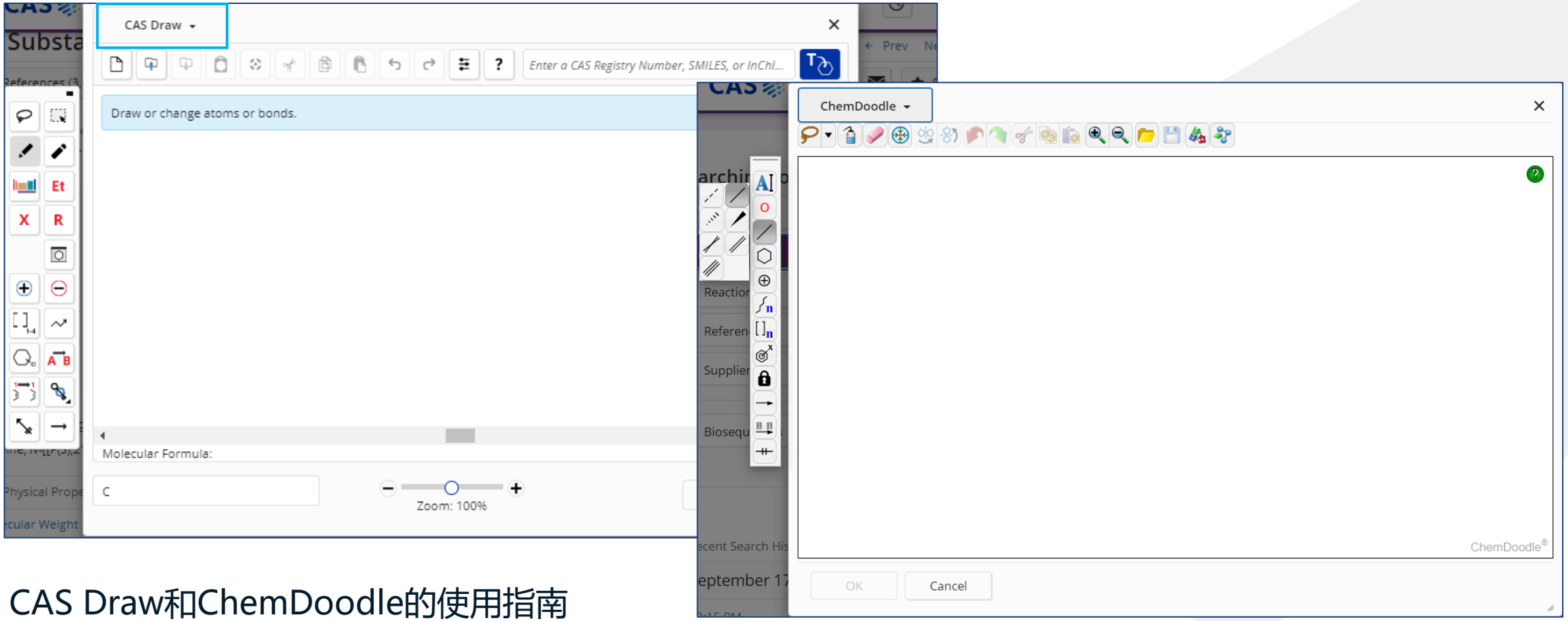
自定义R基团

重复片段工具

取代位点可变

锁工具

物质检索--结构绘图板



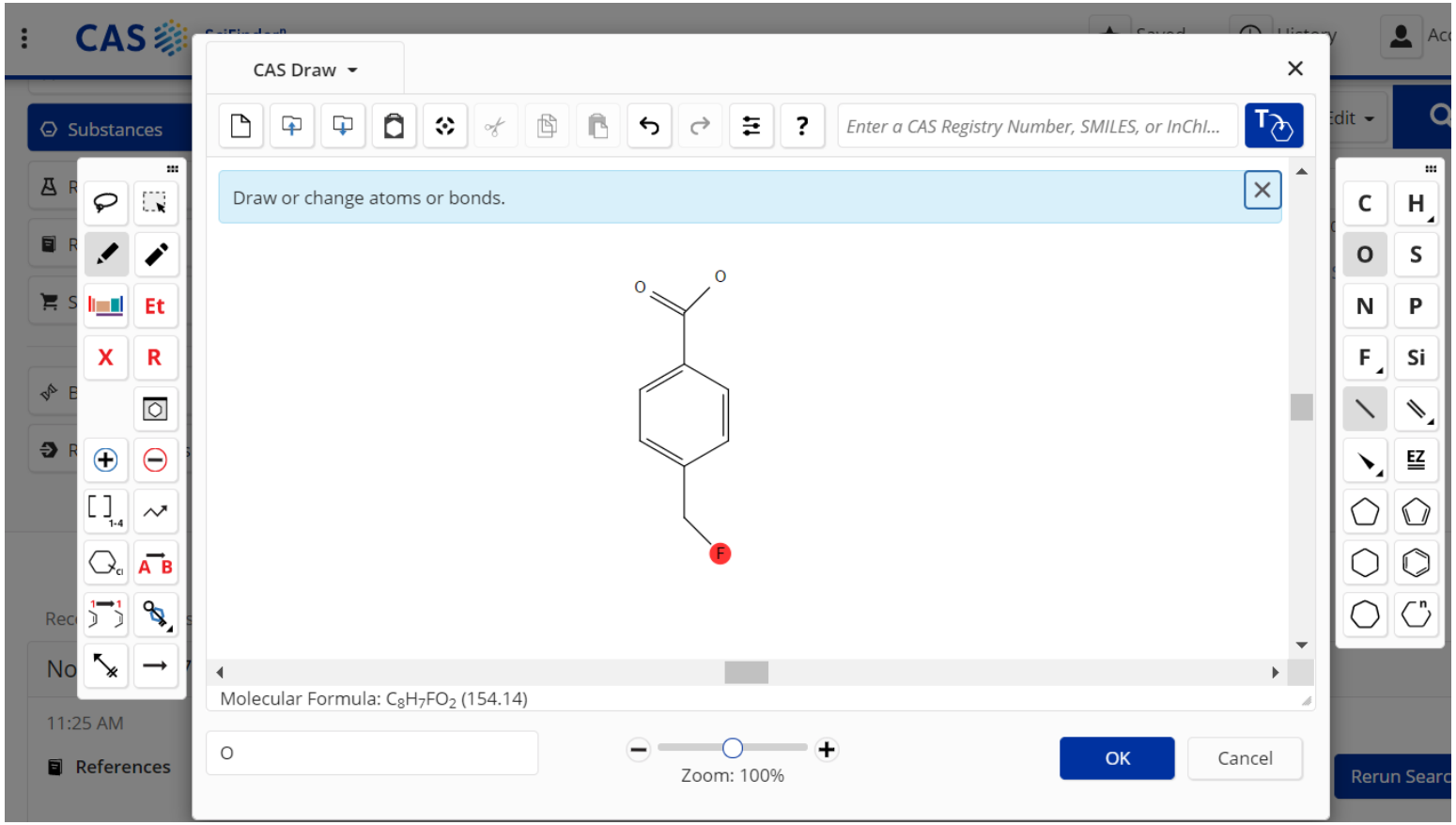
CAS Draw和ChemDoodle的使用指南

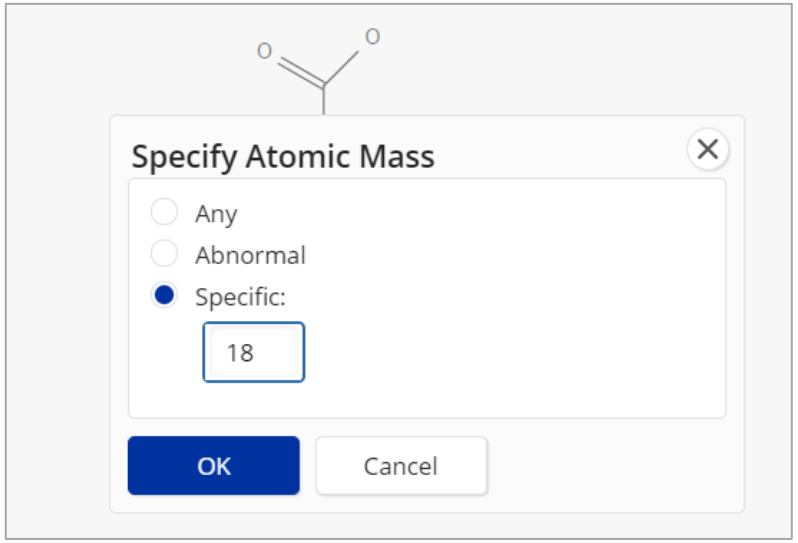
https://scifinder-n.cas.org/help/#t=Drawing_Search_Queries%2FDrawing_Structure_Queries.htm

https://www.cas.org/support/training/scifinder-n/structure-search

https://www.cas.org/support/training/scifinder-n/chemdoodle-structure-search

结构绘图工具的使用--同位素原子的绘制

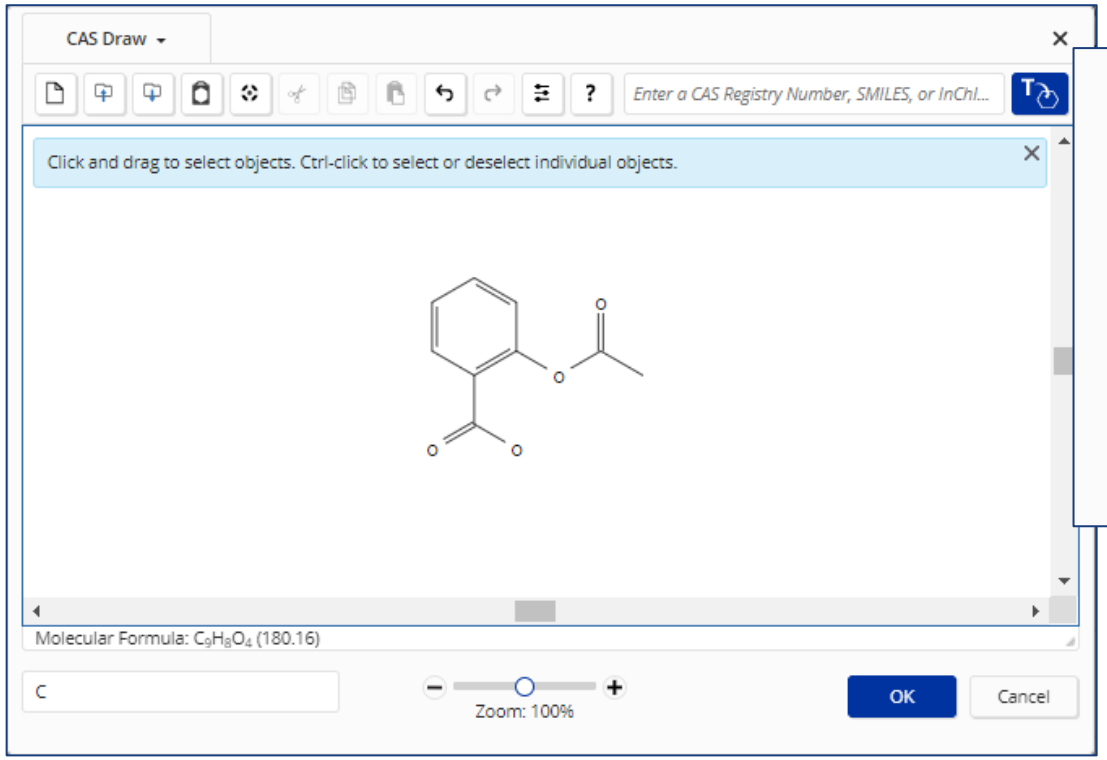


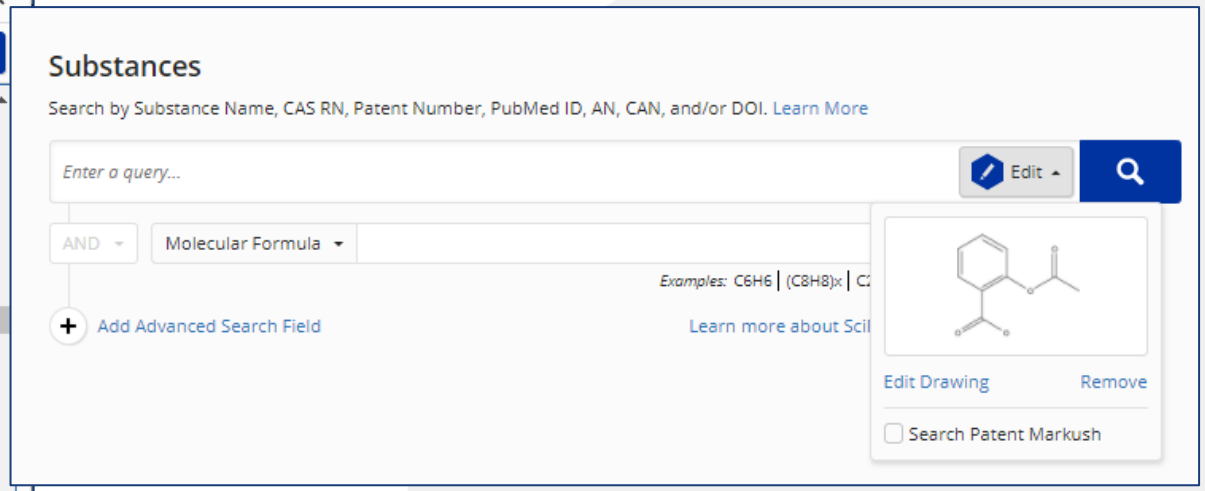


鼠标右键点击某原子，选中Abnormal获取其各种同位素的化合物，选择Specific可以精准输入具体的同位素

物质检索--结构检索

CAS RN： 50-78-2





结构检索时，无需分步进行，一次检索即可得到As Drawn, Substructure和Similarity结果

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

物质检索--检索结果集排序

利用物质排序快速查找目标物质:

相关度

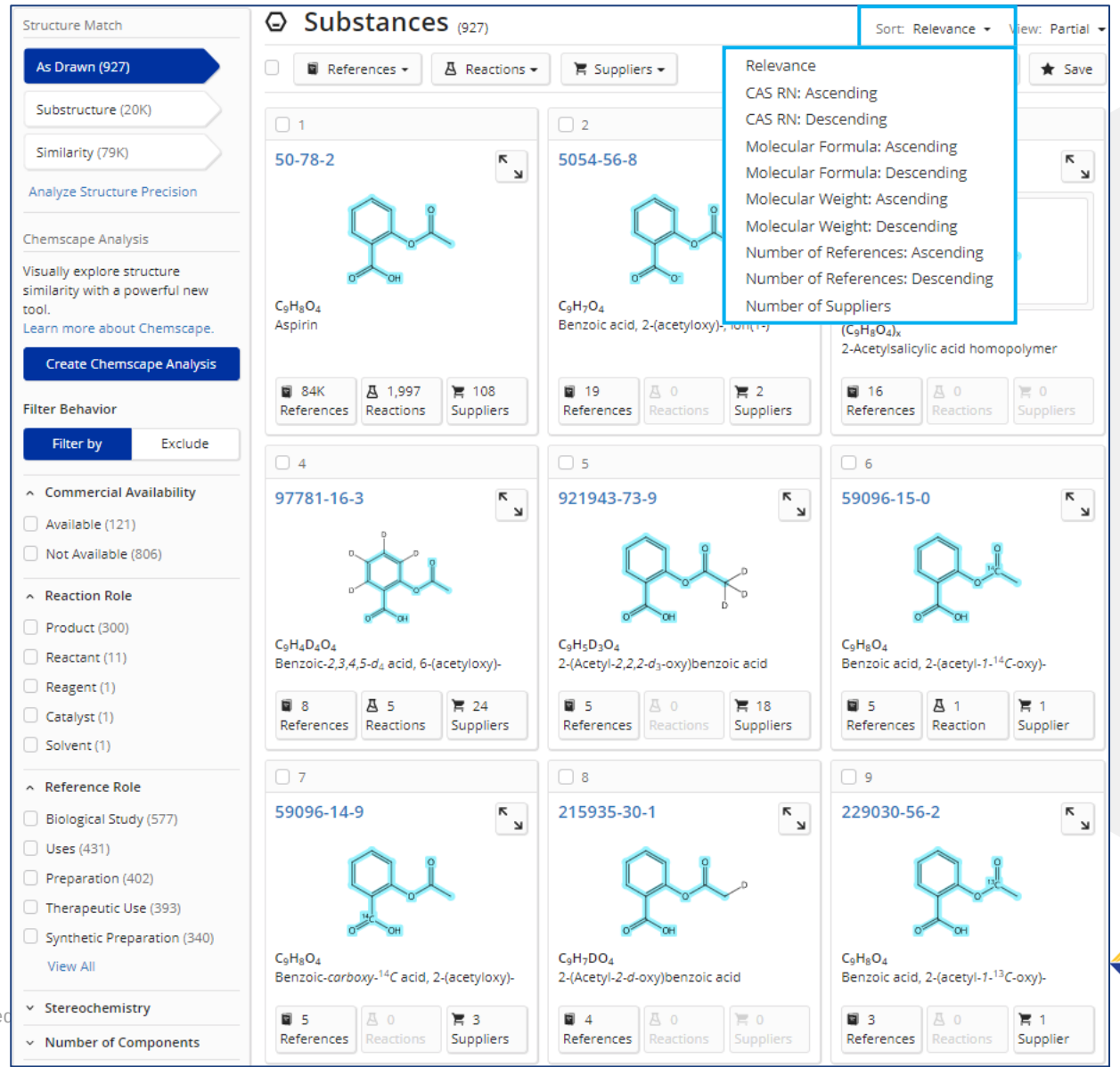
CAS RN

分子式

分子量

文献量

供应商数量



ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

物质检索--结构检索

结构检索类别:

As Drawn

亚结构

相似结构

结构精准度筛选

Chemscape分析

物质筛选类别:

反应角色

文献角色

立体化学

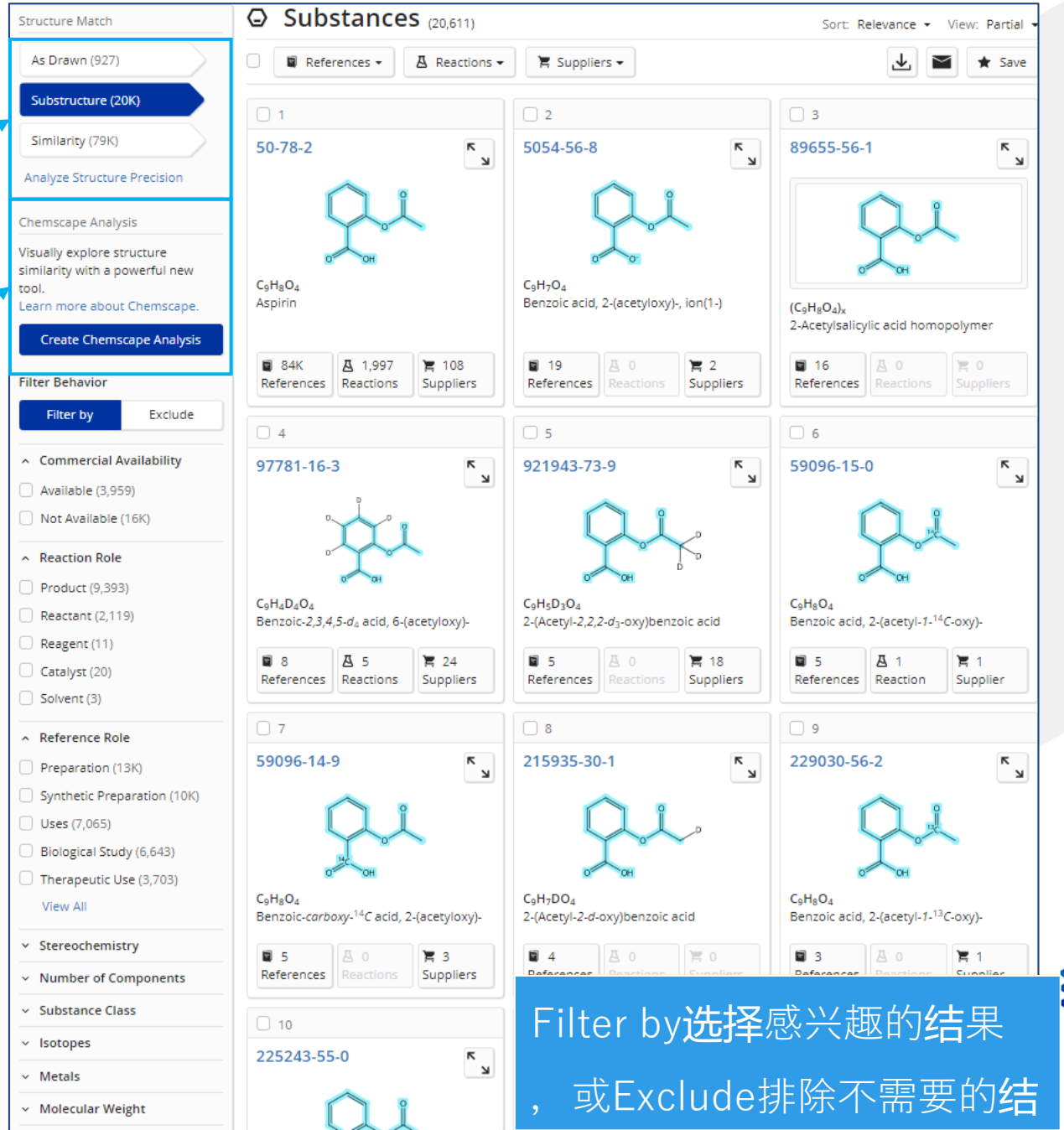
物质类别

同位素

金属包含

实验物性数据

二次检索……



Filter by选择感兴趣的结果，或Exclude排除不需要的结

物质检索--结构检索

结构检索类别：

- As Drawn

  可用可变基团X或R基团等可变工具定义，其他位点默认为原子锁定，环系默认为环锁定

- 亚结构

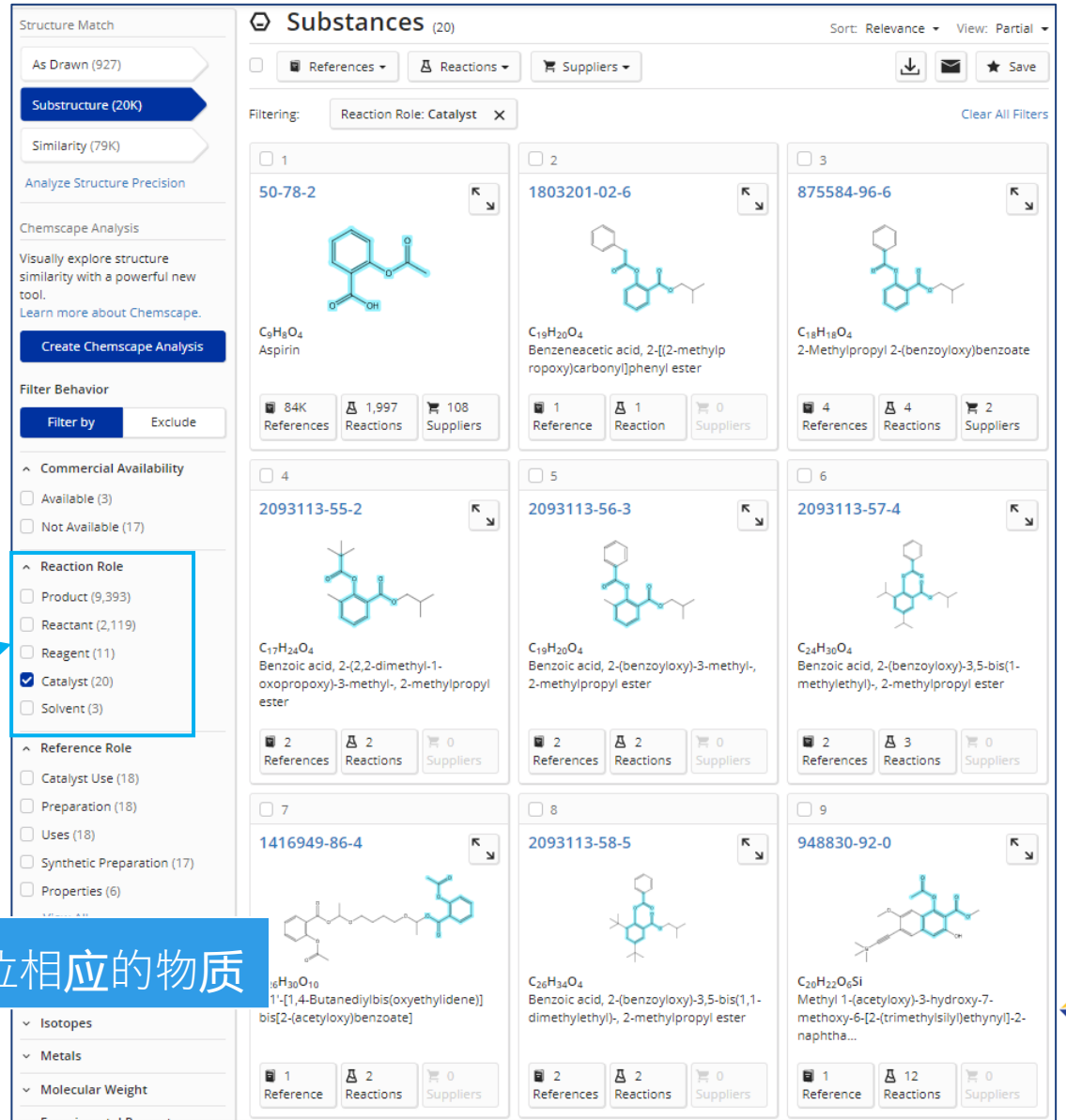
  包括As Drawn检索结果，及被检索结构的修饰结构。位点默认为开放，环系未被环锁定

- 相似结构

  获得片段或整体结构与被检索结构相似的结果，母体结构可以被取代，也可以被改变

  注：如果关注相似结构检索结果，请不要绘制通式结构

物质检索--检索结果集筛选：Reaction Role

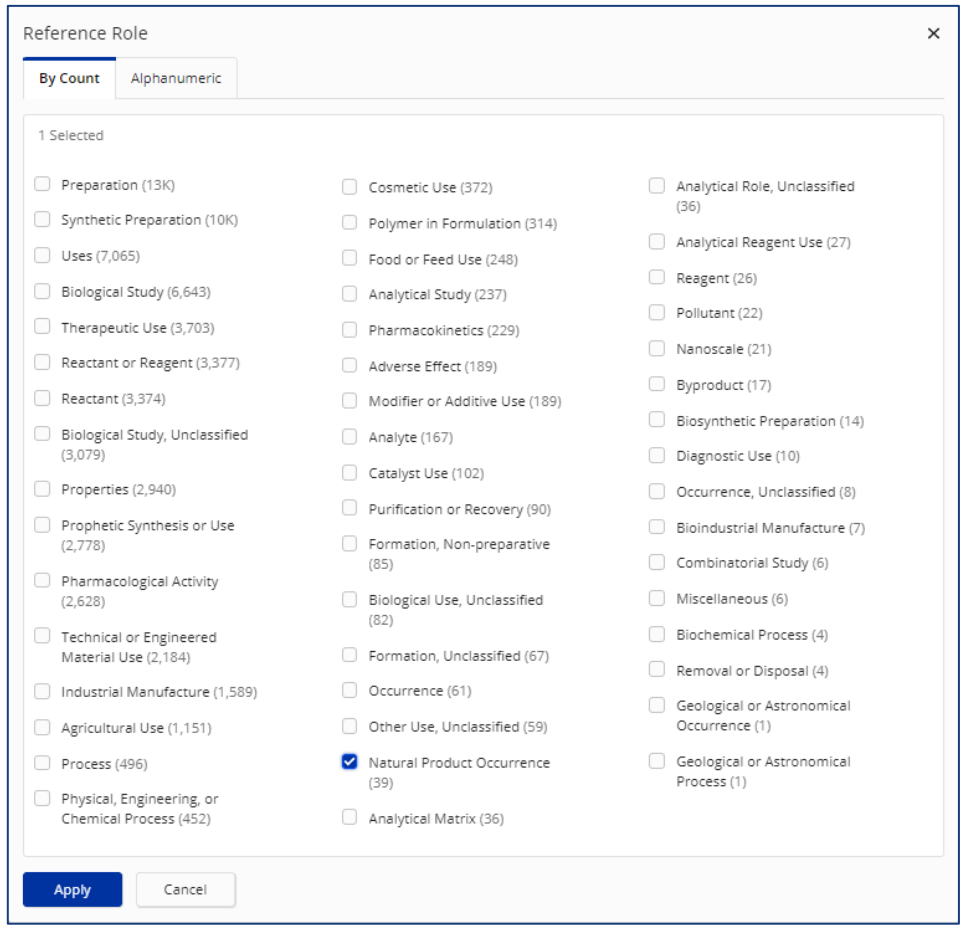


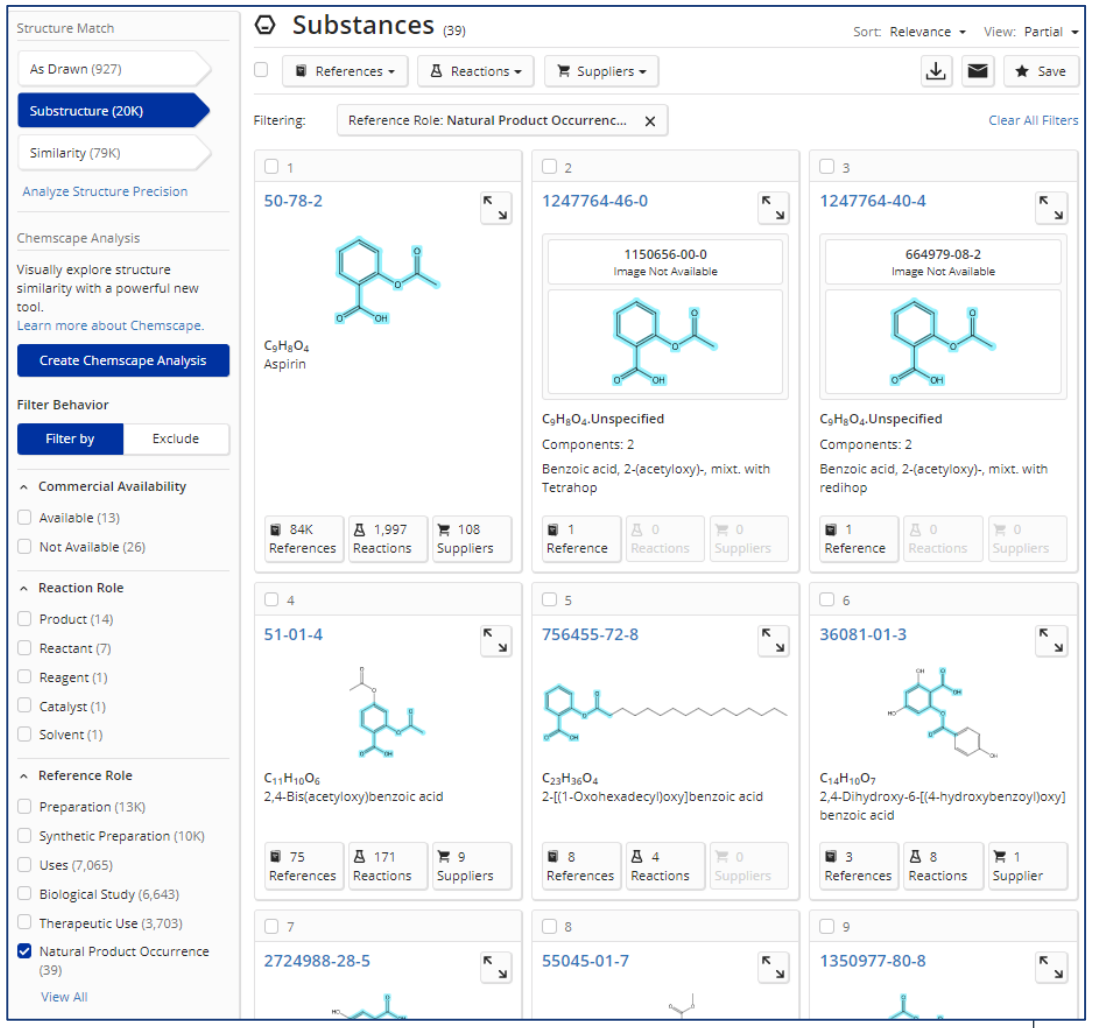
利用物质反应角色筛选物质

利用物质在反应中的角色精准定位相应的物质

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

物质检索--检索结果集筛选：Reference Role



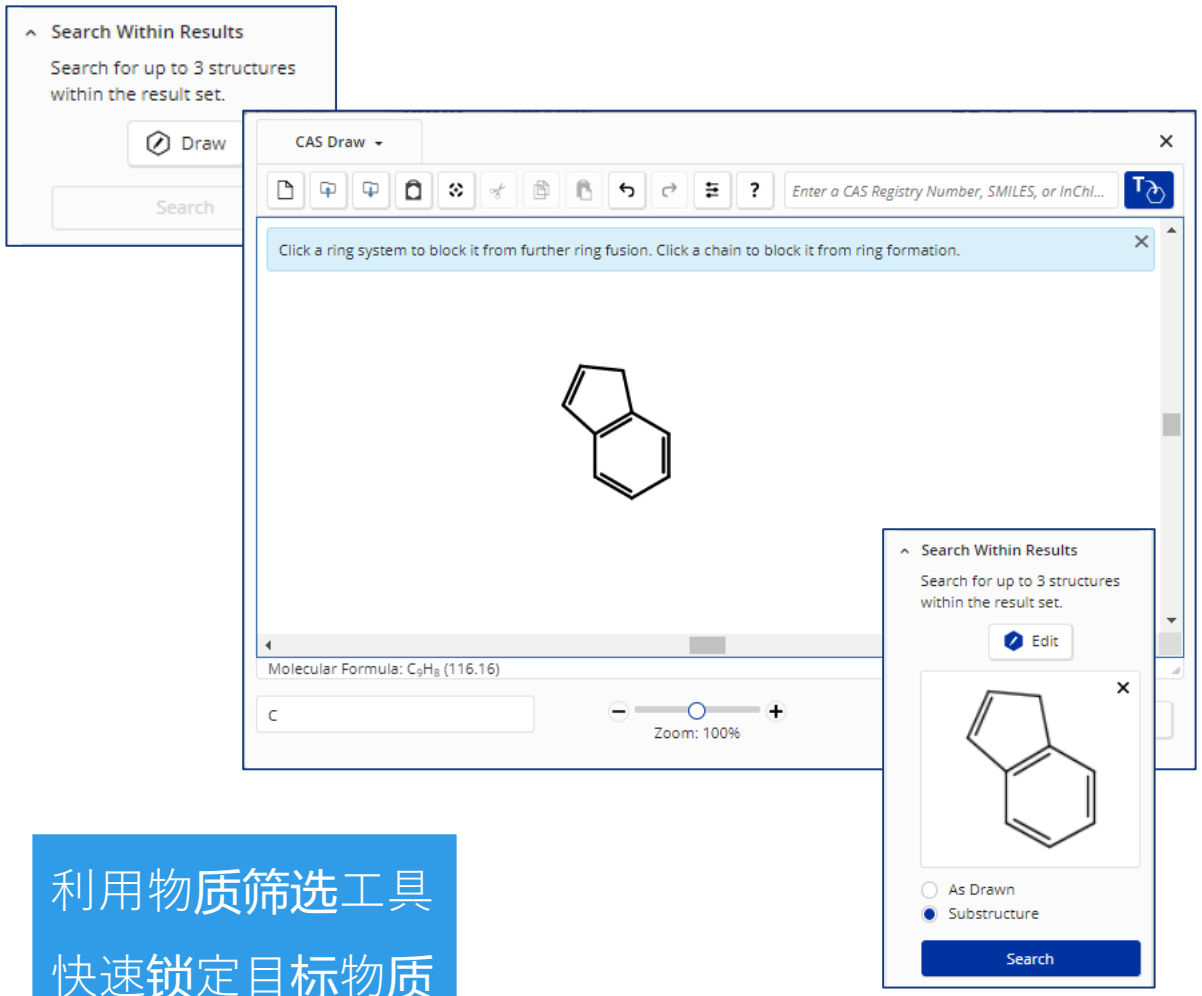


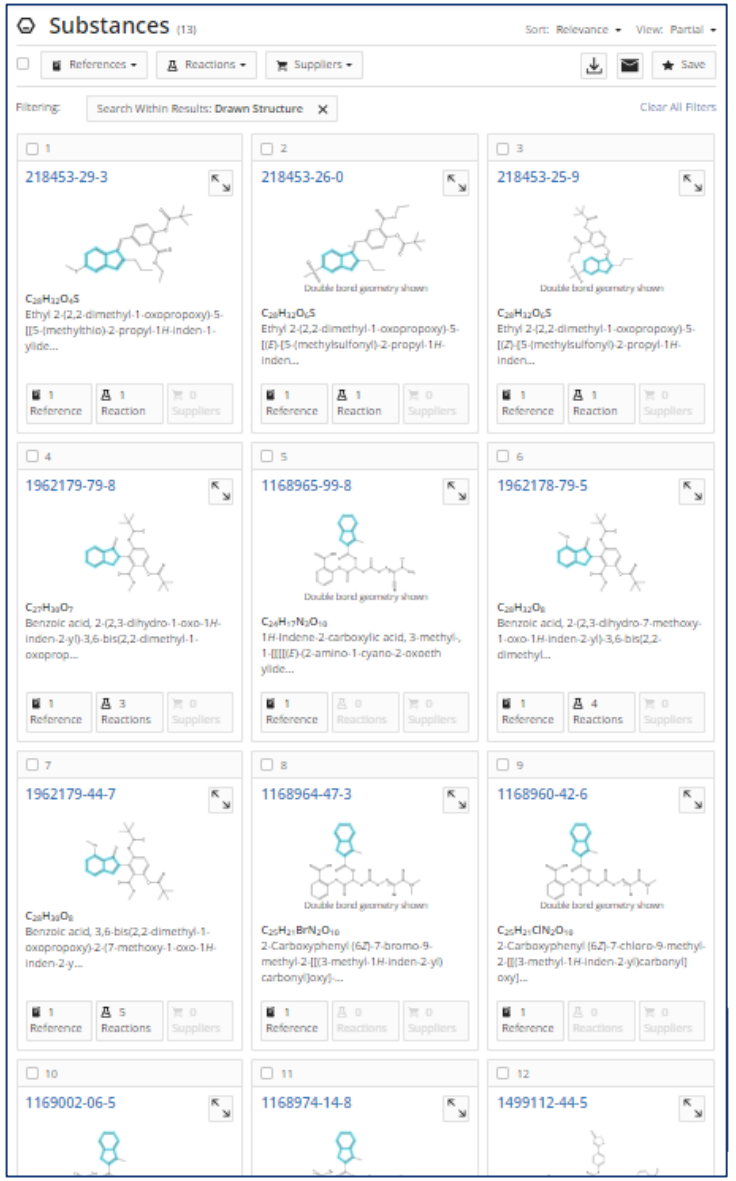
利用Reference Role（物质的研究方向）精准定位相应的物质

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

物质检索--检索结果集筛选：结构

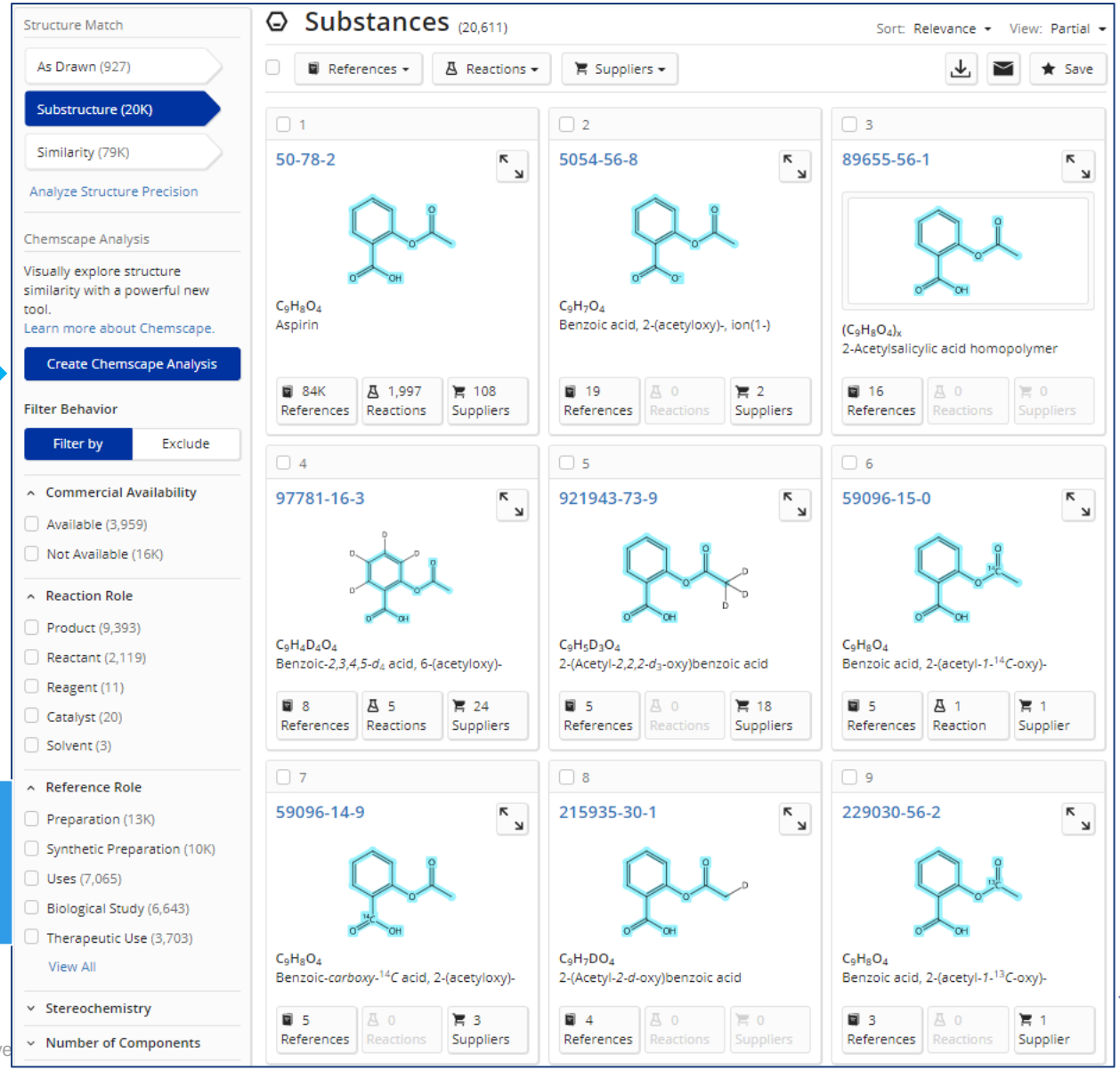




利用物质筛选工具
快速锁定目标物质

CAS
A division of the American Chemical Society

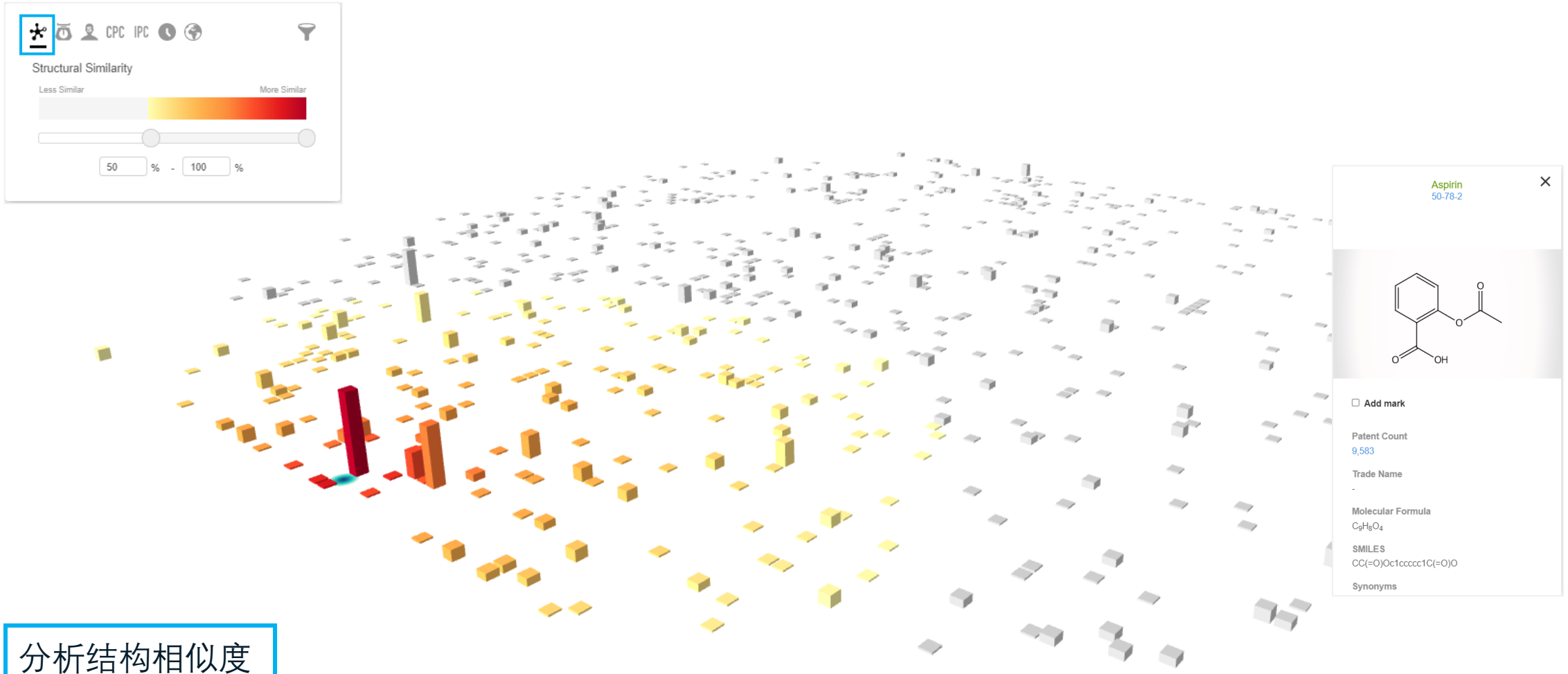
物质检索--检索结果集可视化分析：ChemScape Analysis



通过ChemScape Analysis了解物质的专利

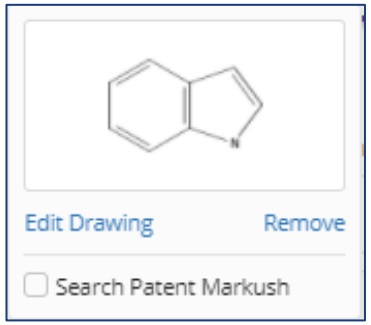
ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

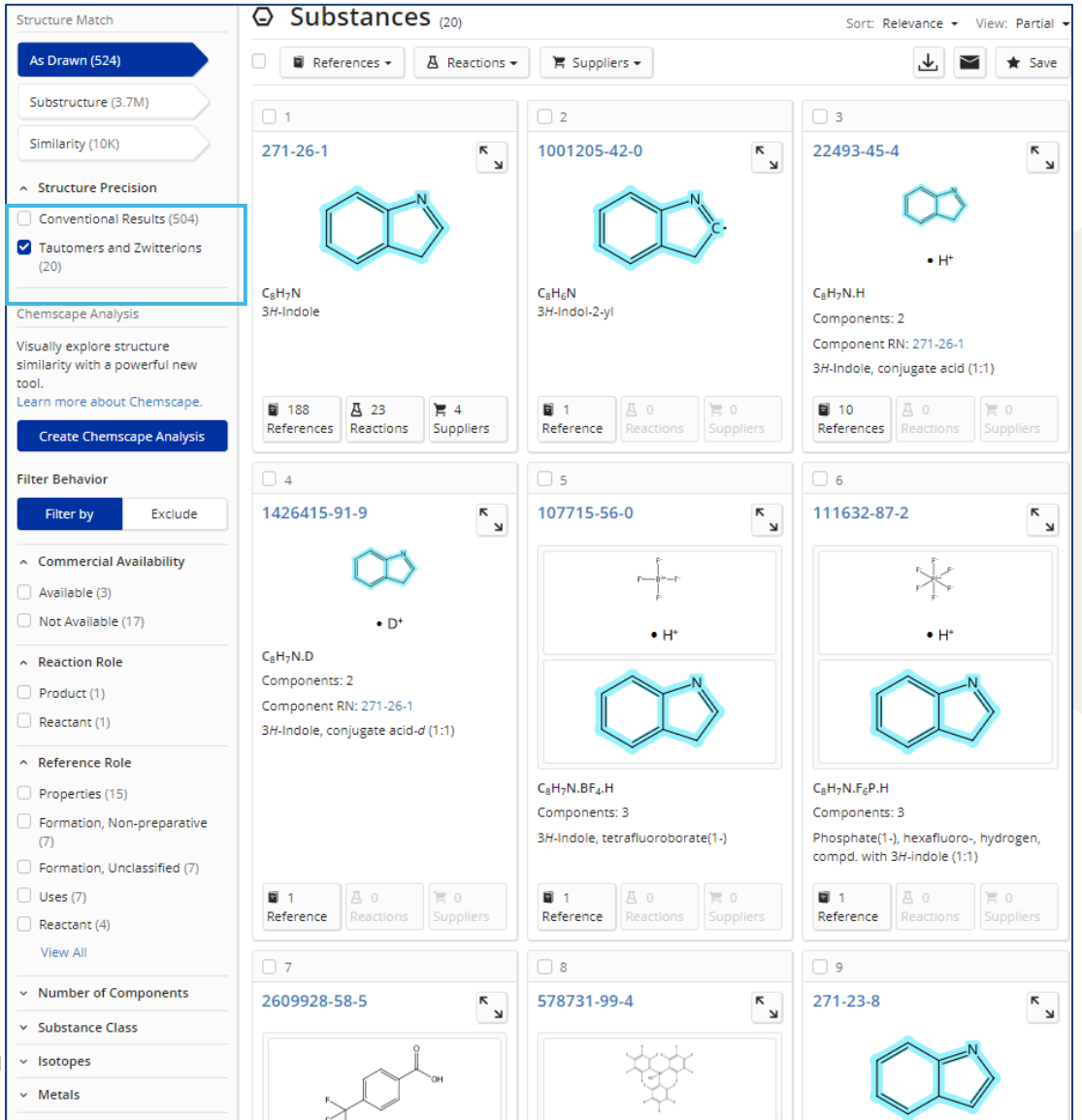
物质检索--检索结果集可视化分析：ChemScape Analysis



分析结构相似度

物质检索--Structure Precision





Structure Precision

筛选互变异构体/内盐

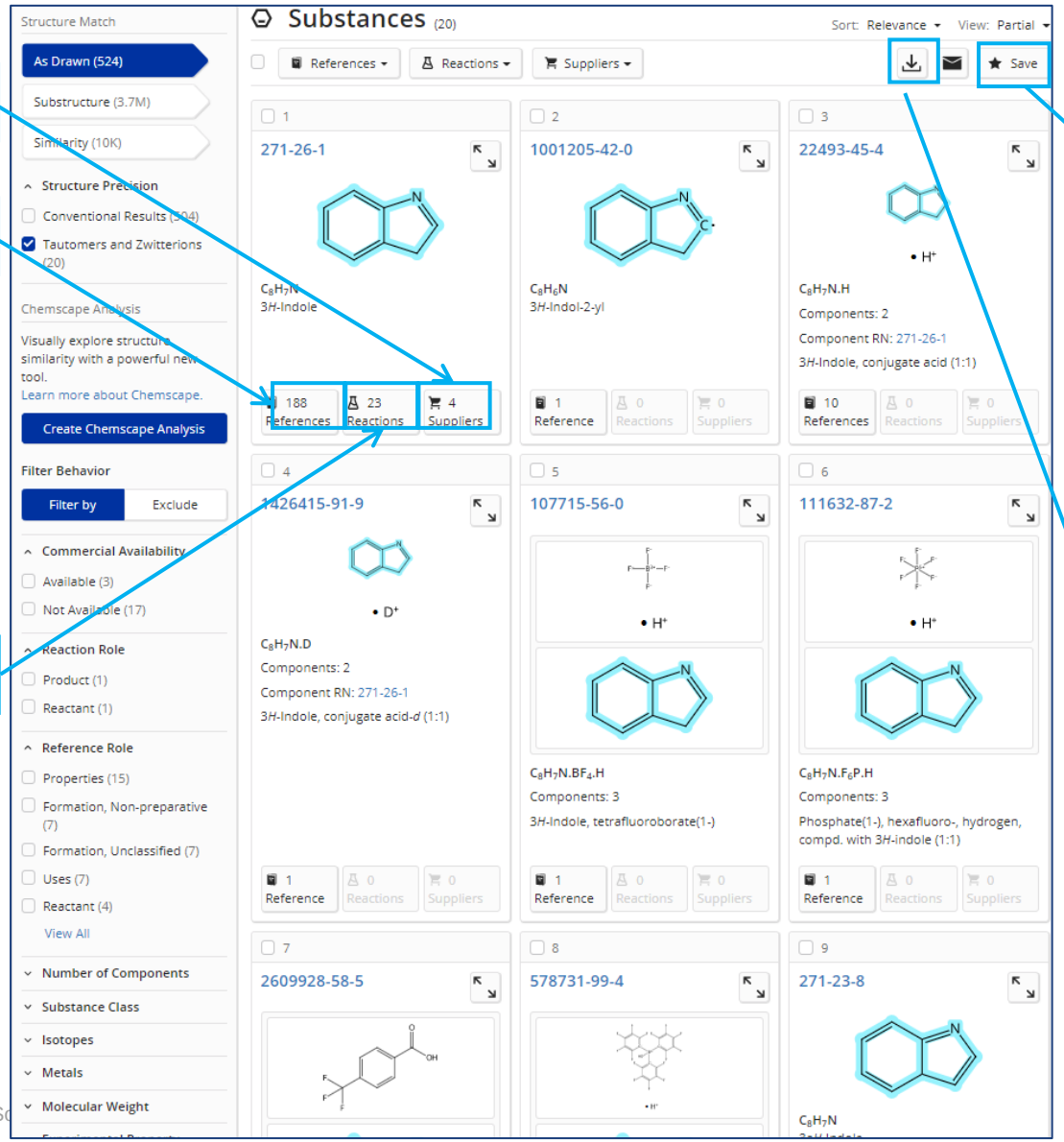
ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

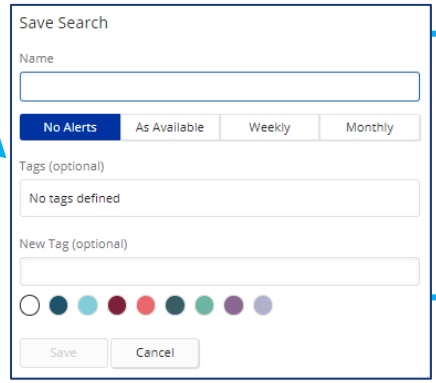
物质检索--检索结果集的保存及获得其他信息

获得商品信息

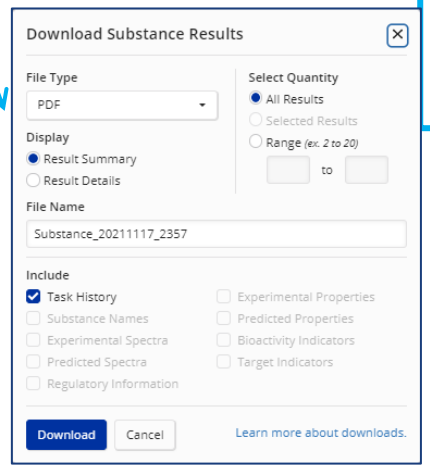
获得相关文献

获得相关反应





Save：保存成结果集，并可同时设置定题提醒或添加标签（包括文献，物质，反应结果集）

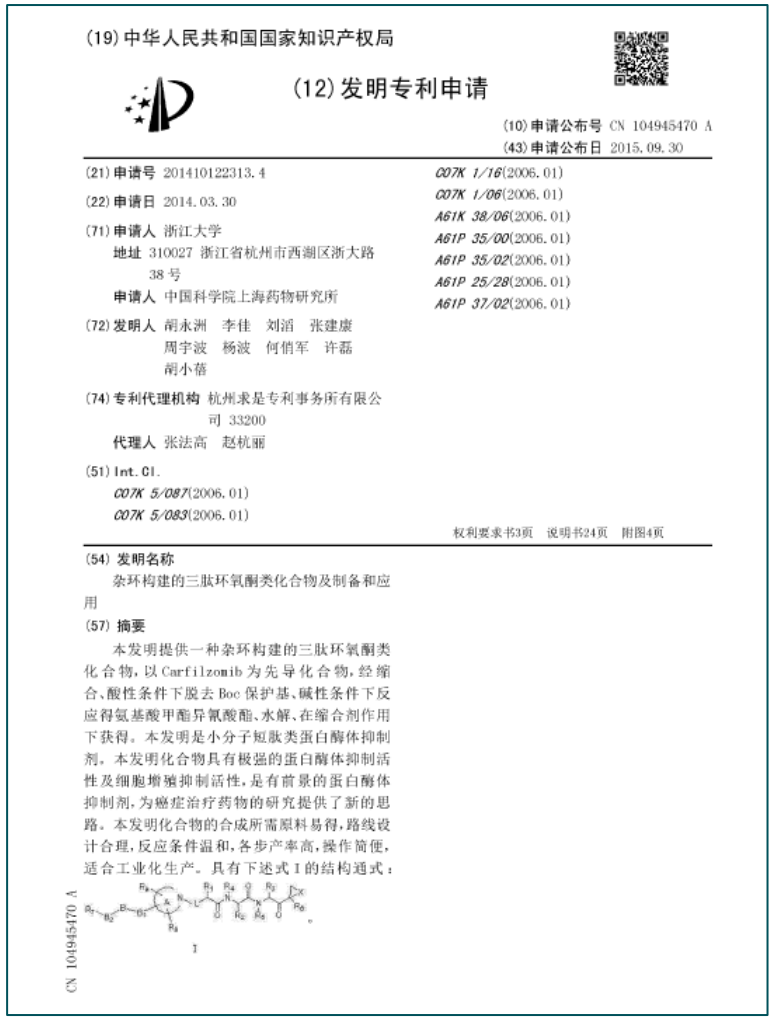


Download：可存成PDF、rtf、Excel格式

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

CAS Markush检索



(19)中华人民共和国国家知识产权局

(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 104945470 A
(43)申请公布日 2015.09.30

(21)申请号 201410122313.4
(22)申请日 2014.03.30
(71)申请人 浙江大学
地址 310027 浙江省杭州市西湖区浙大路38号
申请人 中国科学院上海药物研究所
(72)发明人 胡永洲 李佳 刘滔 张建康 周宇波 杨波 何俏军 许磊 胡小蓓
(74)专利代理机构 杭州求是专利事务所有限公司 33200
代理人 张法高 赵杭丽
(51)Int.Cl.
C07K 5/087(2006.01)
C07K 5/083(2006.01)
C07K 1/16(2006.01)
C07K 1/06(2006.01)
A61K 38/06(2006.01)
A61P 35/00(2006.01)
A61P 35/02(2006.01)
A61P 25/28(2006.01)
A61P 37/02(2006.01)

权利要求书3页 说明书24页 附图4页

(54)发明名称

杂环构建的三肽环氧酮类化合物及制备和应用

(57)摘要

本发明提供一种杂环构建的三肽环氧酮类化合物，以Carfilzomib为先导化合物，经缩合、酸性条件下脱去Boc保护基、碱性条件下反应得氨基酸甲酯异氰酸酯、水解、在缩合剂作用下获得。本发明是小分子短肽类蛋白酶体抑制剂。本发明化合物具有极强的蛋白酶体抑制活性及细胞增殖抑制活性，是有前景的蛋白酶体抑制剂，为癌症治疗药物的研究提供了新的思路。本发明化合物的合成所需原料易得，路线设计合理，反应条件温和，各步产率高，操作简便，适合工业化生产。具有下述式I的结构通式：

I

CN 104945470 A

具体实施方式

[0026] 本发明结合附图和实施例作进一步的说明，以下实施例仅是说明本发明，而不是以任何方式限制本发明。

[0027] 制备实施例1、4-(吡嗪-2-基氨甲酰基)哌啶-1-甲酸叔丁酯(1a，1b)

将1-(叔丁氧羰基)哌啶-4-甲酸(2.75g，12mmol)置于50mL三颈瓶中，N_2保护下加入25mL无水CH_2Cl_2，然后缓缓滴入吡啶(2.5mL，30mmol)和二氯亚砜(1.1mL，14mmol)，该反应液置于室温反应半小时。随后，2-氨基吡嗪(0.95g，10mmol)和三乙胺(5.7mL，40mmol)溶于15mL CH_2Cl_2后缓缓滴入上述反应液，室温反应6小时。反应液加30mL饱和食盐水稀释，分出有机层，水层CH_2Cl_2提取(15mL×3)，合并有机层，无水硫酸钠干燥后减压除去溶剂，柱层析分离得白色固体2.3g，收率74%。m.p.：134-136℃；^1H NMR (500MHz, $CDCl_3$)：δ = 9.55 (s, 1H, pyrazine-H), 8.35 (d, 1H, J=2.0Hz, pyrazine-H), 8.23 (s, 1H, pyrazine-H), 7.97 (s, 1H, NH), 4.20 (m, 2H, CH_2), 2.81 (m, 2H, CH_2), 2.48 (m, 1H, CH), 1.93 (d, 2H, J=12.5Hz, CH_2), 1.76 (m, 2H, CH_2), 1.47 (s, 9H, CH_3) ppm; ESI-MS: m/z = 307$[M+H]^+$。

[0028] 制备实施例2、4-(吡嗪-2-酰基)哌嗪-1-甲酸叔丁酯(1c，1d)

吡嗪-2-羧酸(1.5g，12mmol)置于50ml反应瓶中，加入35mL无水CH_2Cl_2溶解，随即加入1-羟基苯并三氮唑(1.6g，12mmol)和N-(3-二甲氨基丙基)-N'-乙基碳二亚胺盐酸盐(3.5g，18mmol)，室温反应半小时。随后，哌嗪-1-甲酸叔丁酯(1.9g，10mmol)加入反应液中，室温反应3小时。反应液加入30mL饱和碳酸氢钠水溶液稀释，分出有机层，饱和食盐

具体物质[Specific Substance]：

以具体化学结构陈述的特定物质，会被分配CAS RN

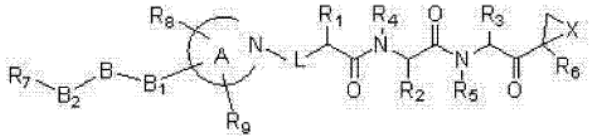
ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

CAS Markush检索

预测性物质[Prophetic Substance]:

- 使用Markush结构陈述的预测物质，一个Markush可以陈述上百或上千个化学物质
- 被Markush结构包含，但未被实施或呈现在表格、权利要求书或说明书中的结构，不会被CAS分配CAS Registry Number
- Markush检索，能检索到通过结构检索检不到的专利

1. 一种杂环构建的三肽环氧酮类化合物，具有下述结构通式 I：



I

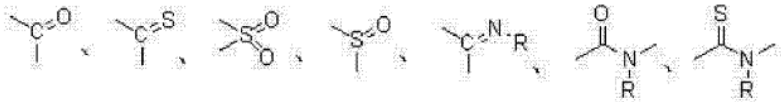
其中：

R_1，R_2，R_3 各自独立选自 H、C_{1-6} 烷基 -D、卤代的 C_{1-6} 烷基 -D、C_{1-6} 羟基烷基、C_{1-6} 巯基烷基、C_{1-6} 烷氧基烷基、芳基、芳烷基、杂芳基或杂芳烷基；其中：D 为 $N(R_a)(R_b)$ 或缺失，R_a，R_b 各自独立选自 H、OH、C_{1-6} 烷基、卤代的 C_{1-6} 烷基或 N 末端保护基；

R_4，R_5 各自独立选自 H、OH、C_{1-6} 烷基、卤代的 C_{1-6} 烷基或芳烷基；

R_6 选自 H，C_{1-6} 烷基，卤代的 C_{1-6} 烷基，C_{1-6} 羟基烷基，C_{1-6} 烷氧基，卤代的 C_{1-6} 烷氧基，$C(O)O-C_{1-6}$ 烷基，$C(O)NH-C_{1-6}$ 烷基，芳烷基；

X 为 O、S、NH、$N-C_{1-6}$ 烷基或 N- 卤代的 C_{1-6} 烷基；

L 为  或者缺失，

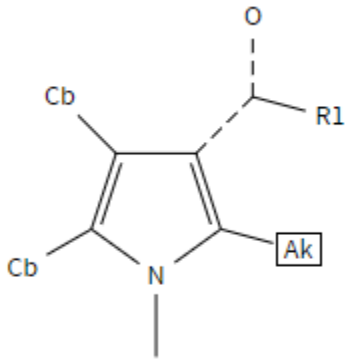
其中 R 选自 H、C_{1-6} 烷基或卤代的 C_{1-6} 烷基；

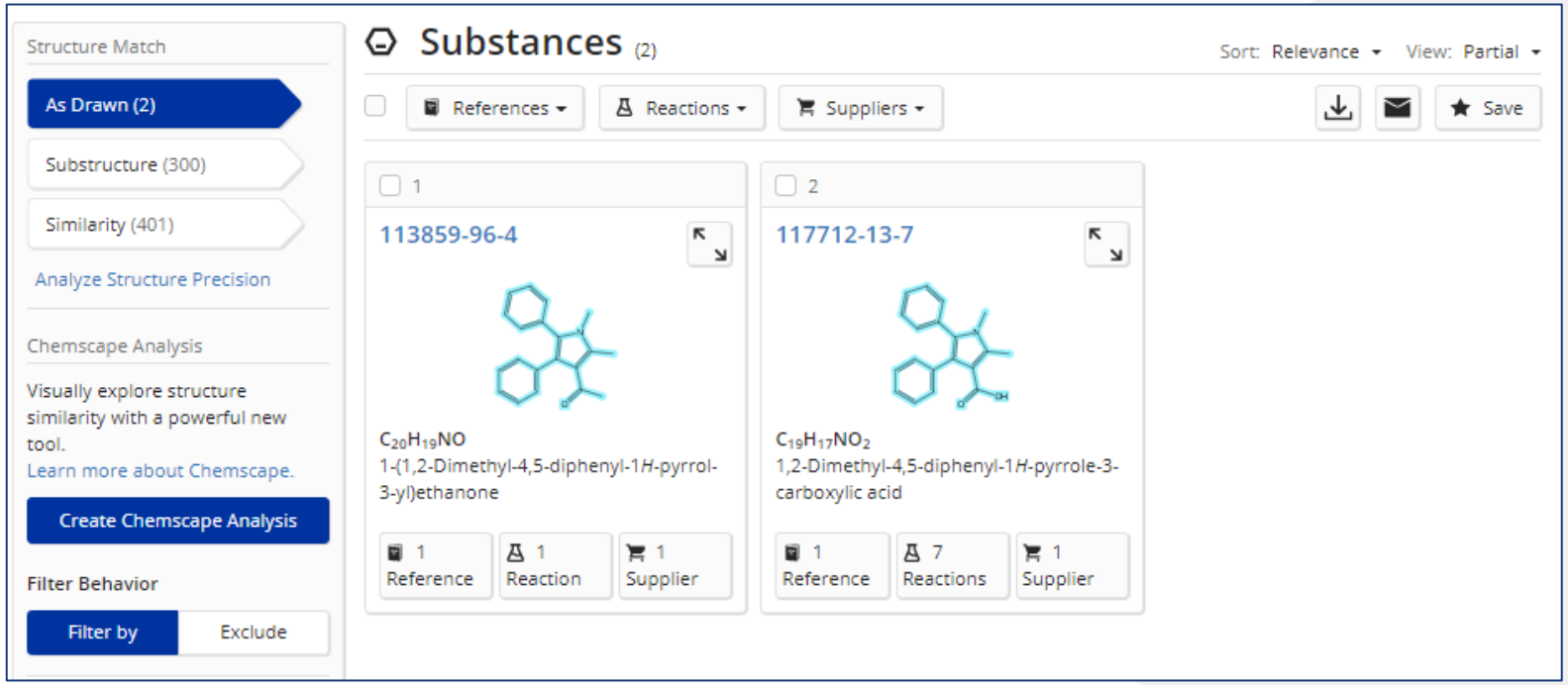
环 A 选自 5 ～ 7 元的饱和脂肪杂环、不饱和杂环、或者有取代的 5 ～ 7 元的饱和脂肪杂环、不饱和杂环，所述的杂环包含 0 ～ 3 个选自 O 、N 和 S 的杂原子并任选地被 R_8、R_9 和 B_1 基团取代；

R_8，R_9 分别独立选自 H、OH，C_{1-6} 烷基，C_{1-6} 烷氧基，C_{1-6} 羟基烷基，C_{1-6} 巯基烷基，C_{1-6} 烷基 -D，芳基，杂环芳基，环烷基和杂环基，这些基团可以被卤素、硝基、氨基、CN、C_{1-6} 烷基、卤代的 C_{1-6} 烷基，C_{1-6} 烷氧基或卤代的 C_{1-6} 烷氧基取代，每个基团可与一个或多个芳基或杂环

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

CAS Markush检索

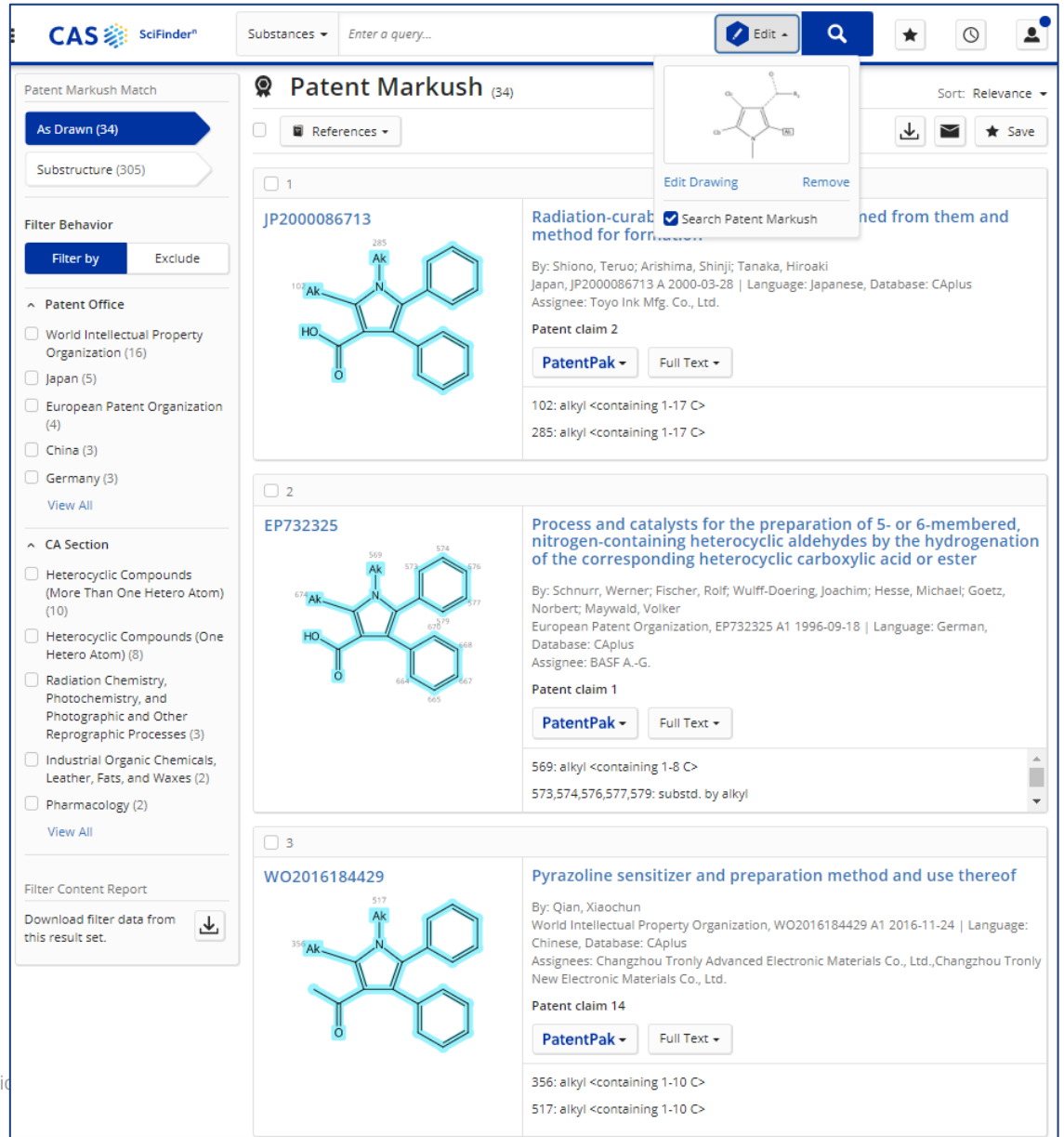




为了尽可能全面地获得公开的结构信息，需要同时进行Substance和Markush结构检索

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

CAS Markush检索



直观呈现检索结构与专利原文中Markush匹配部分的结构

标引其在专利中出现的位置

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

物质检索小结

1. 利用结构绘制工具合理扩大结构检索范围：R基团、可变基团、可变位置取代等
2. 利用结构绘制工具适当限定检索结构：环锁工具、原子锁工具、EZ构型限定等
3. 正确理解As Drawn、Substructure、Similarity检索结果集的意义和范围
4. 充分利用物质筛选项准确定位目标物质：Reaction Role、Reference Role等
5. 利用Structure Precision快速查找互变异构体/内盐
6. ChemScape Analysis帮助了解物质的专利布局
7. 利用CAS Markush检索尽可能全面的获得结构的公开信息

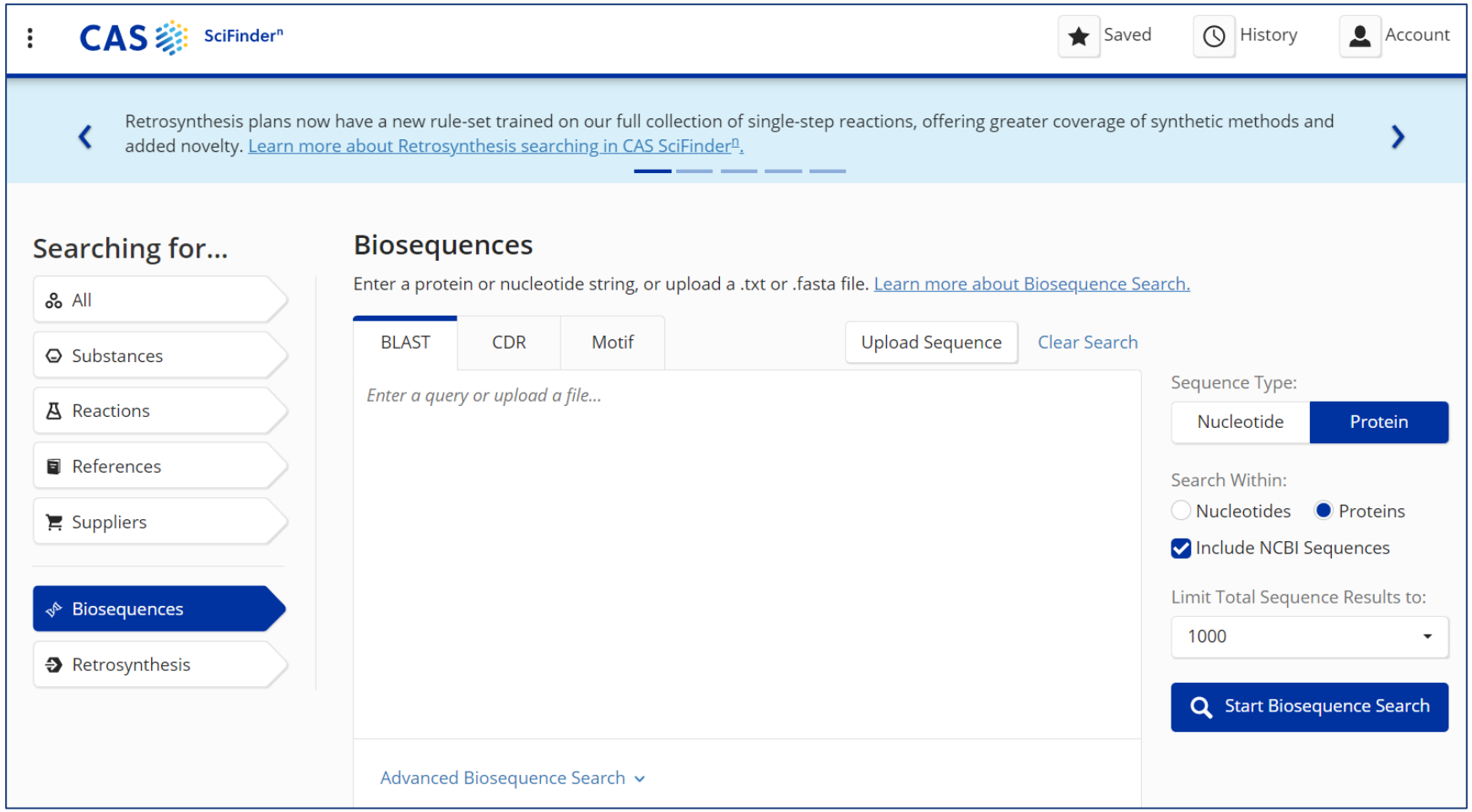
ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

大纲

- CAS SciFinder^{n}中的生物序列检索
  - BLAST
  - CDR
  - Motif

视频链接:
https://american-chemical-society.zoom.us/rec/share/JPoebb74K7-dbzGw2Aj8vRqqeddGB5zzBnQTV8MYcW2E2QQqq2rkYWoBtkHy_tt2.ag1fUmL880MKBne3?startTime=1647943207000

Biosequences Search™--Blast检索



四种检索选择:

Protein-Protein

Protein-Nucleotides

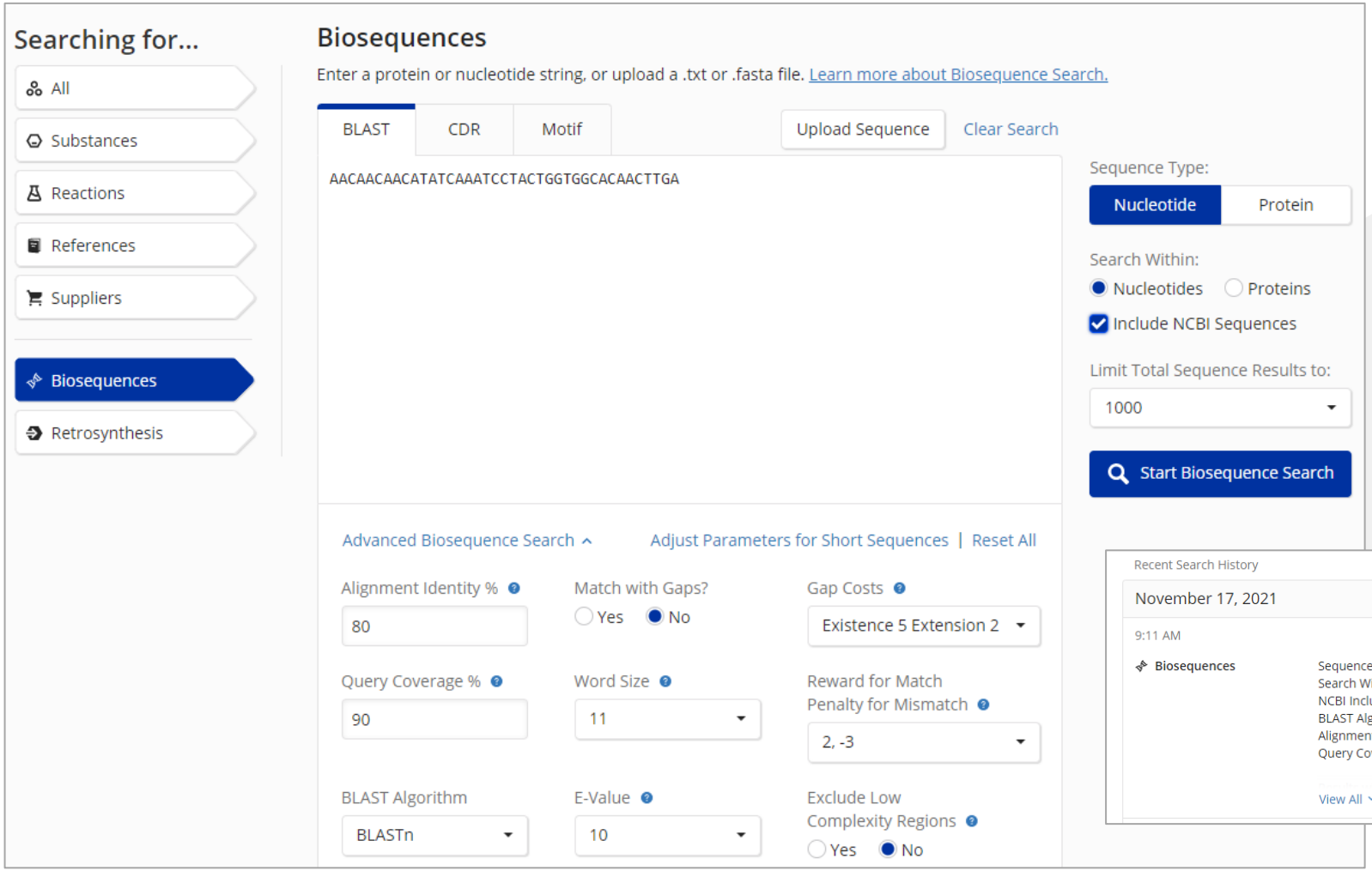
Nucleotide-Nucleotides

Nucleotide-Proteins

CAS SciFinder-n Help:
https://scifinder-n.cas.org/help/#t=Searching_in_SciFinder-n%2FBiosequence_Search%2FBiosequence_Search.htm&rhsearch=biosequence&rhhlterm=biosequence&rhsyns=%20

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

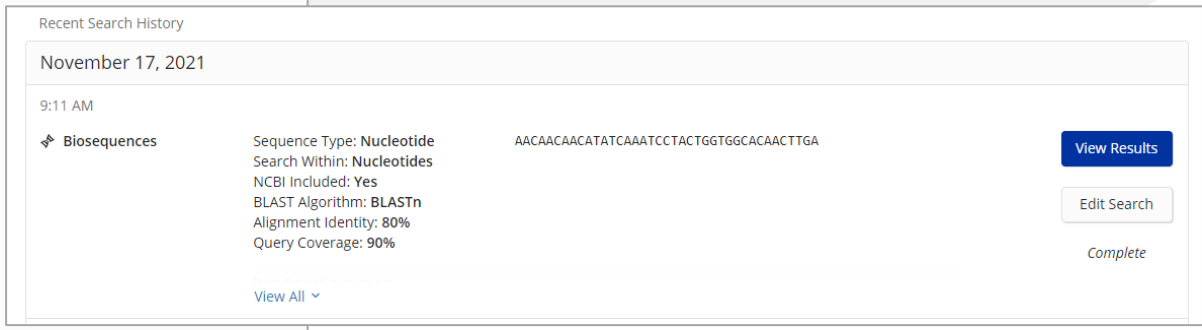
高级检索：设置相关参数



Query coverage = coverage/query

Sequence identity= matches/coverage

(Coverage = matches + mismatches)



BLAST检索结果

序列结果排序

可视化地图

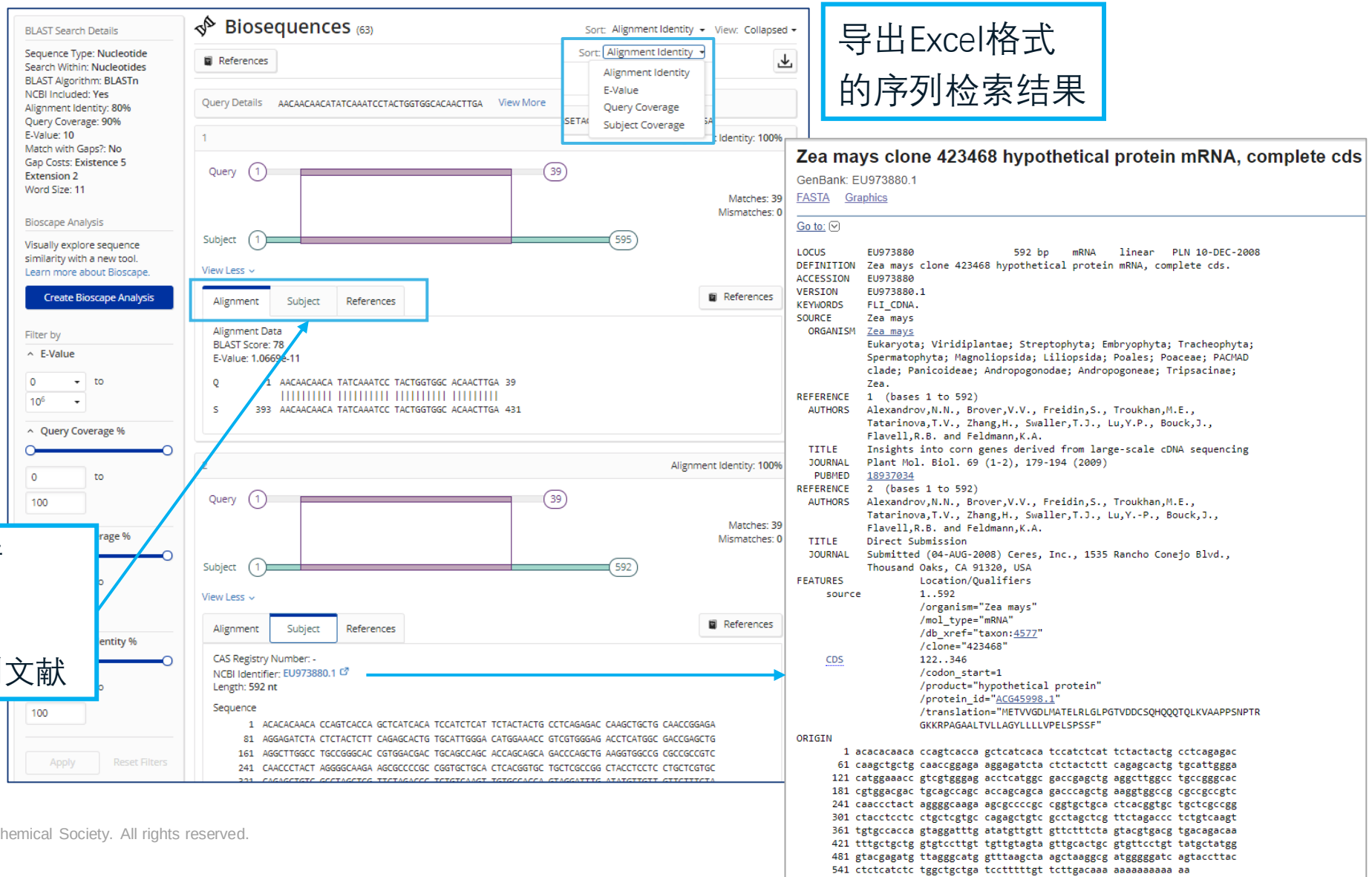
结果筛选

序列一致性详情

目标序列

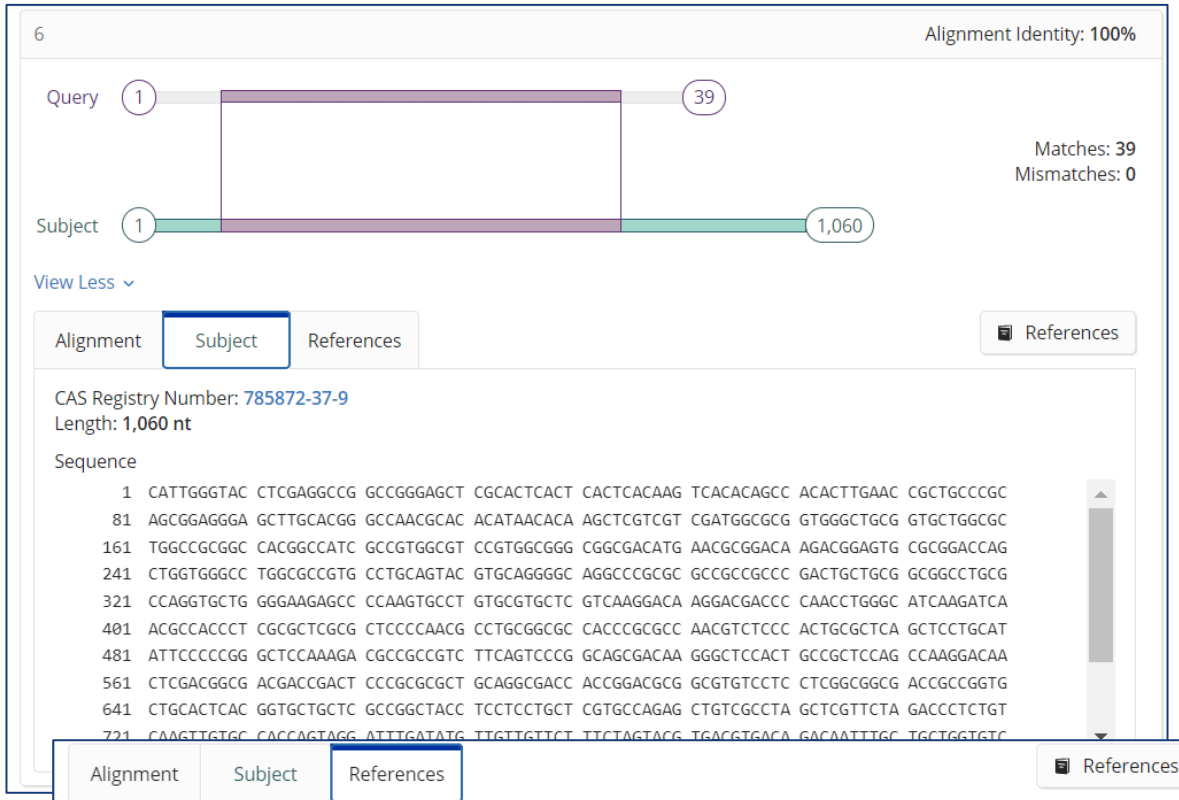
披露序列的专利文献

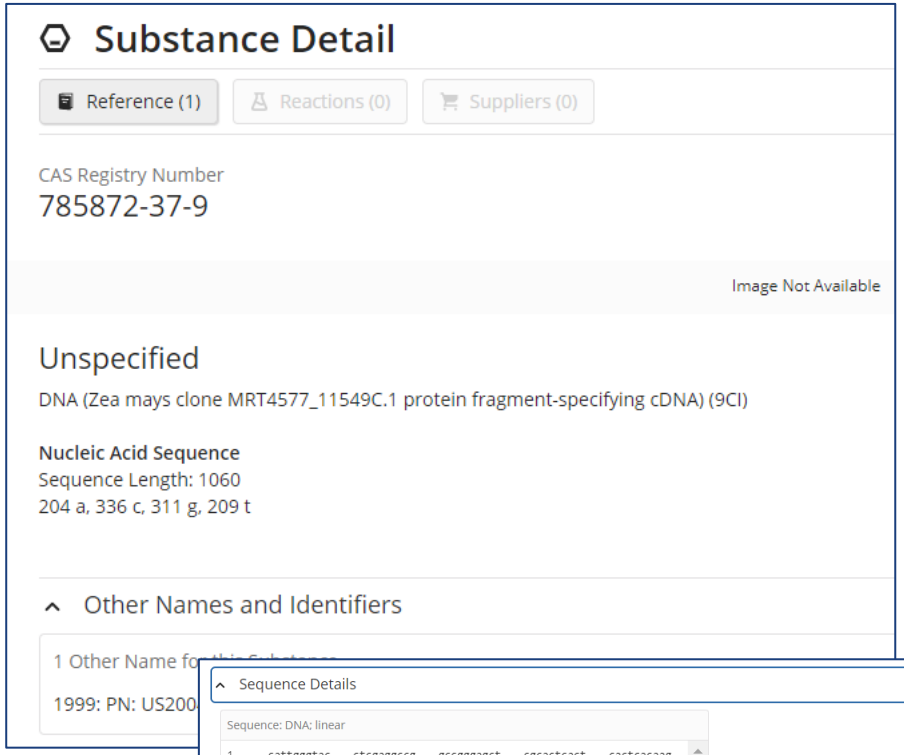
导出Excel格式的序列检索结果

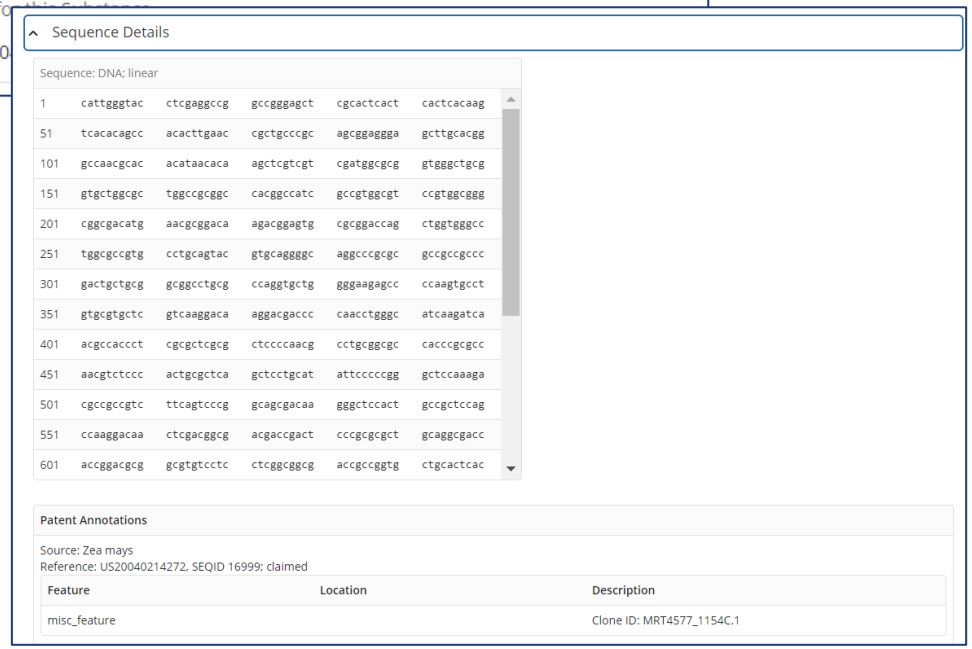


CAS
A division of the American Chemical Society

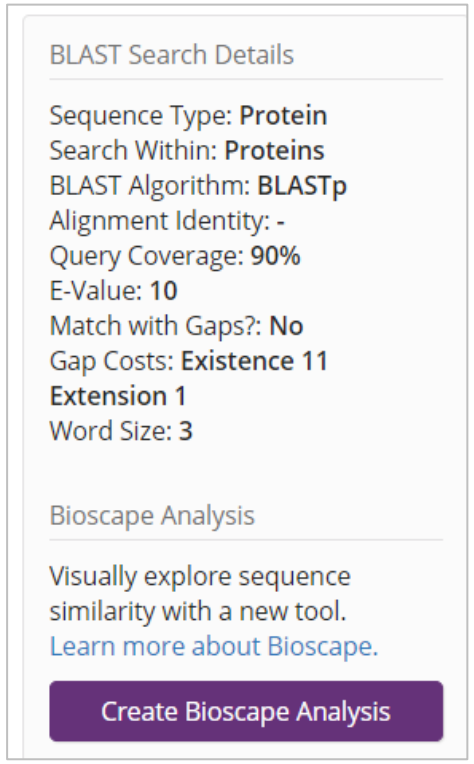
BLAST检索结果

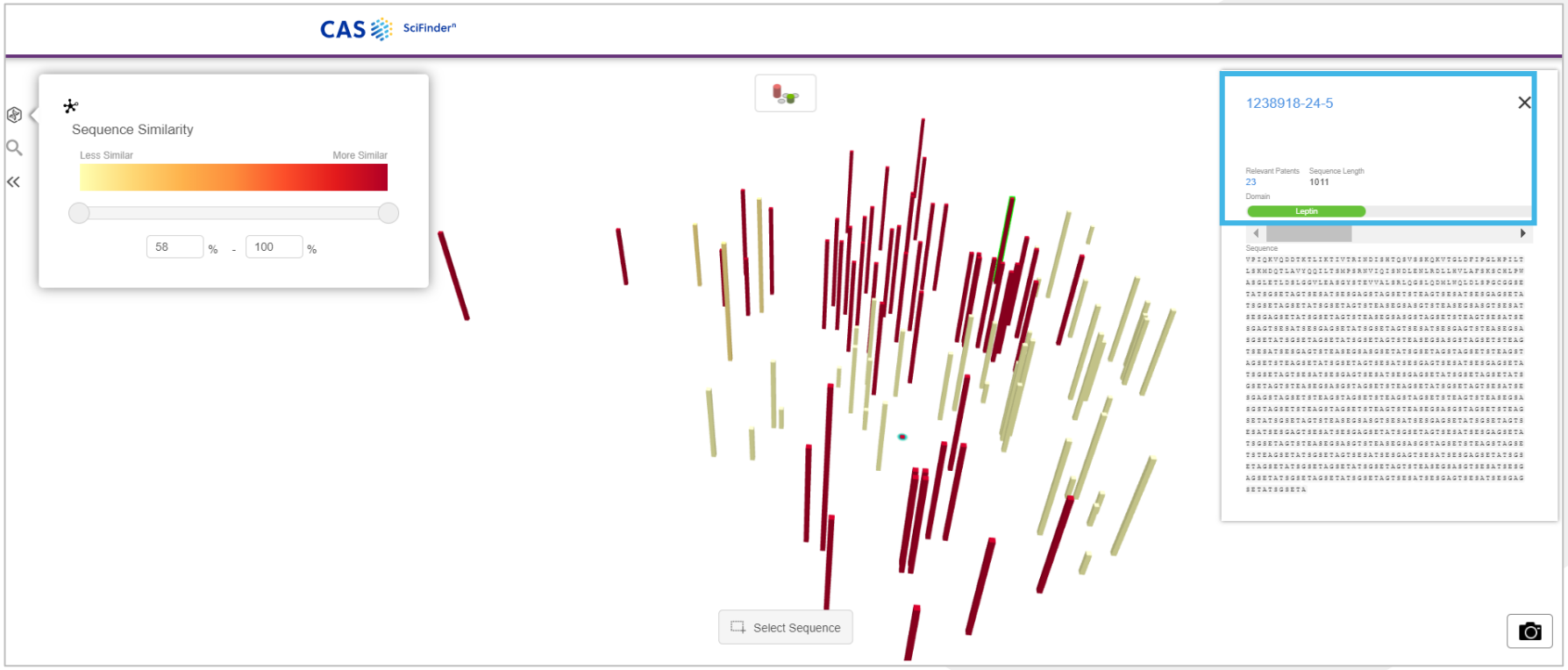

6
Alignment Identity: 100%
Query 1 39
Subject 1 1,060
Matches: 39
Mismatches: 0
View Less
Alignment
Subject
References
References
CAS Registry Number: 785872-37-9
Length: 1,060 nt
Sequence
1 CATTGGGTAC CTCGAGGCCG GCCGGGAGCT CGCACTCACT CACTCACAAG TCACACAGCC ACACTTGAAC CGCTGCCCGC
81 AGCGGAGGGA GCTTGCACGG GCCAACGCAC ACATAACACA AGCTCGTCGT CGATGGCGCG GTGGGCTGCG GTGCTGGCGC
161 TGGCCGCGGC CACGGCCATC GCCGTGGCGT CCGTGGCGGG CGGCGACATG AACGCGGACA AGACGGAGTG CGCGGACCAG
241 CTGGTGGGCC TGGCGCCGTG CCTGCAGTAC GTGCAGGGGC AGGCCCGCGC GCCGCCGCCC GACTGCTGCG GCGGCCTGCG
321 CCAGGTGCTG GGGAAGAGCC CCAAGTGCCT GTGCGTGCTC GTCAAGGACA AGGACGACCC CAACCTGGGC ATCAAGATCA
401 ACGCCACCCT CGCGCTCGCG CTCCCCAACG CCTGCGGCGC CACCCGCGCC AACGTCTCCC ACTGCGCTCA GCTCCTGCAT
481 ATTCCCCCGG GCTCCAAAGA CGCCGCCGTC TTCAGTCCCG GCAGCGACAA GGGCTCCACT GCCGCTCCAG CCAAGGACAA
561 CTCGACGGCG ACGACCGACT CCCGCGCGCT GCAGGCGACC ACCGGACGCG GCGTGTCCTC CTCGGCGGCG ACCGCCGGTG
641 CTGCACTCAC GGTGCTGCTC GCCGGCTACC TCCTCCTGCT CGTGCCAGAG CTGTCGCCTA GCTCGTTCTA GACCCTCTGT
721 CAAGTTGTGC CACCAGTAGG ATTTGATATG TTGTTGTTCT TTCTAGTACG TGACGTGACA GACAATTTGC TGCTGGTGTC
Alignment
Subject
References
References
Nucleic acid molecules and other molecules associated with plants
Assignees: LA ROSA, THOMAS J.; ZHOU, YIHUA; KOVALIC, DAVID K.; CAO, YONGWEI; LIU, JINGDONG; CHEIKH, NORDINE; SHUKLA, HRIDAYABHIRANJAN; RUFF, THOMAS G.; HARDEMAN, KRISTINE J.; EDGERTON, MICHAEL D.; VARAGONA, MARGUERITE; WU, WEI; CONNER, TIMOTHY W.
US20120216318 A1 | Seq ID No: 16999
Nucleic acid molecules and other molecules associated with plants
Assignees: LA ROSA, THOMAS; ZHOU, YIHUA; KOVALIC, DAVID; CAO, YONGWEI; LIU, JINGDONG; CHEIKH, NORDINE; SHUKLA, HRIDAYABHIRANJAN; RUFF, THOMAS; HARDEMAN, KRISTINE; EDGERTON, MICHAEL; VARAGONA, MARGUERITE; WU, WEI; CONNER, TIMOTHY
US20040214272 A1 | Seq ID No: 16999
Nucleic acid molecules and other molecules associated with plants


Substance Detail
Reference (1)
Reactions (0)
Suppliers (0)
CAS Registry Number
785872-37-9
Image Not Available
Unspecified
DNA (Zea mays clone MRT4577_11549C.1 protein fragment-specifying cDNA) (9CI)
Nucleic Acid Sequence
Sequence Length: 1060
204 a, 336 c, 311 g, 209 t
Other Names and Identifiers
1 Other Name
1999: PN: US200


Sequence Details
Sequence: DNA; linear
1 cattgggtac ctcgaggccg gccgggagct cgcactcact cactcacaag
51 tcacacagcc acacttgaac cgctgcccgc agcggaggga gcttgcacgg
101 gccaacgcac acataacaca agctcgtcgt cgatggcgcg gtgggctgcg
151 gtgctggcgc tggccgcggc cacggccatc gccgtggcgt ccgtggcggg
201 cggcgacatg aacgcggaca agacggagtg cgcggaccag ctggtgggcc
251 tggcgccgtg cctgcagtac gtgcaggggc aggcccgcgc gccgccgccc
301 gactgctgcg gcggcctgcg ccaggtgctg gggaagagcc ccaagtgcct
351 gtgcgtgctc gtcaaggaca aggacgaccc caacctgggc atcaagatca
401 acgccaccct cgcgctcgcg ctccccaacg cctgcggcgc cacccgcgcc
451 aacgtctccc actgcgctca gctcctgcat attccccggg gctccaaaga
501 cgccgccgtc ttcagtcccg gcagcgacaa gggctccact gccgctccag
551 ccaaggacaa ctcgacggcg acgaccgact cccgcgcgct gcaggcgacc
601 accggacgcg gcgtgtcctc ctcggcggcg accgccggtg ctgcactcac
Patent Annotations
Source: Zea mays
Reference: US20040214272, SEQID 16999; claimed
Feature
Location
Description
misc_feature
Clone ID: MRT4577_1154C.1

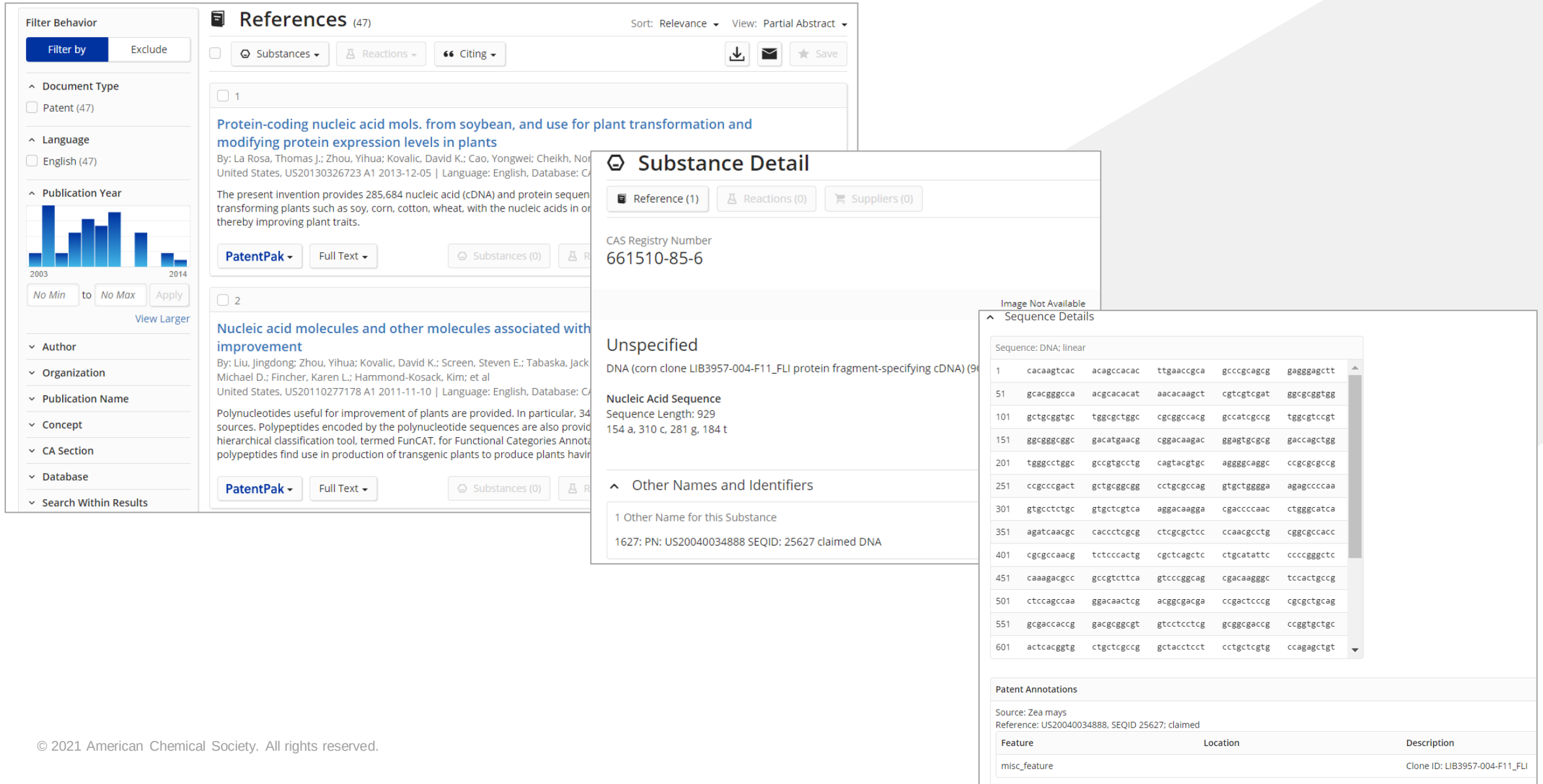
BioScape Analysis



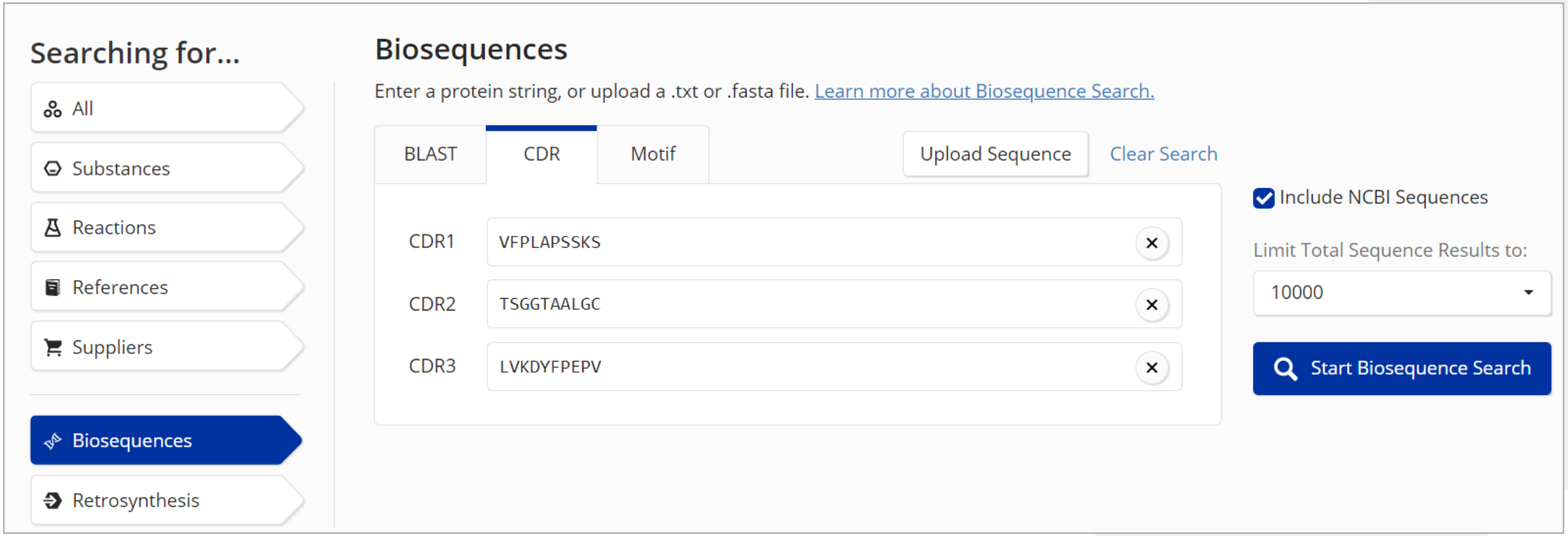


BioScape Analysis：依据相似性可视化序列，获得相应专利布局信息

序列详情及相关的专利文献结果



Biosequences Search™--CDR检索

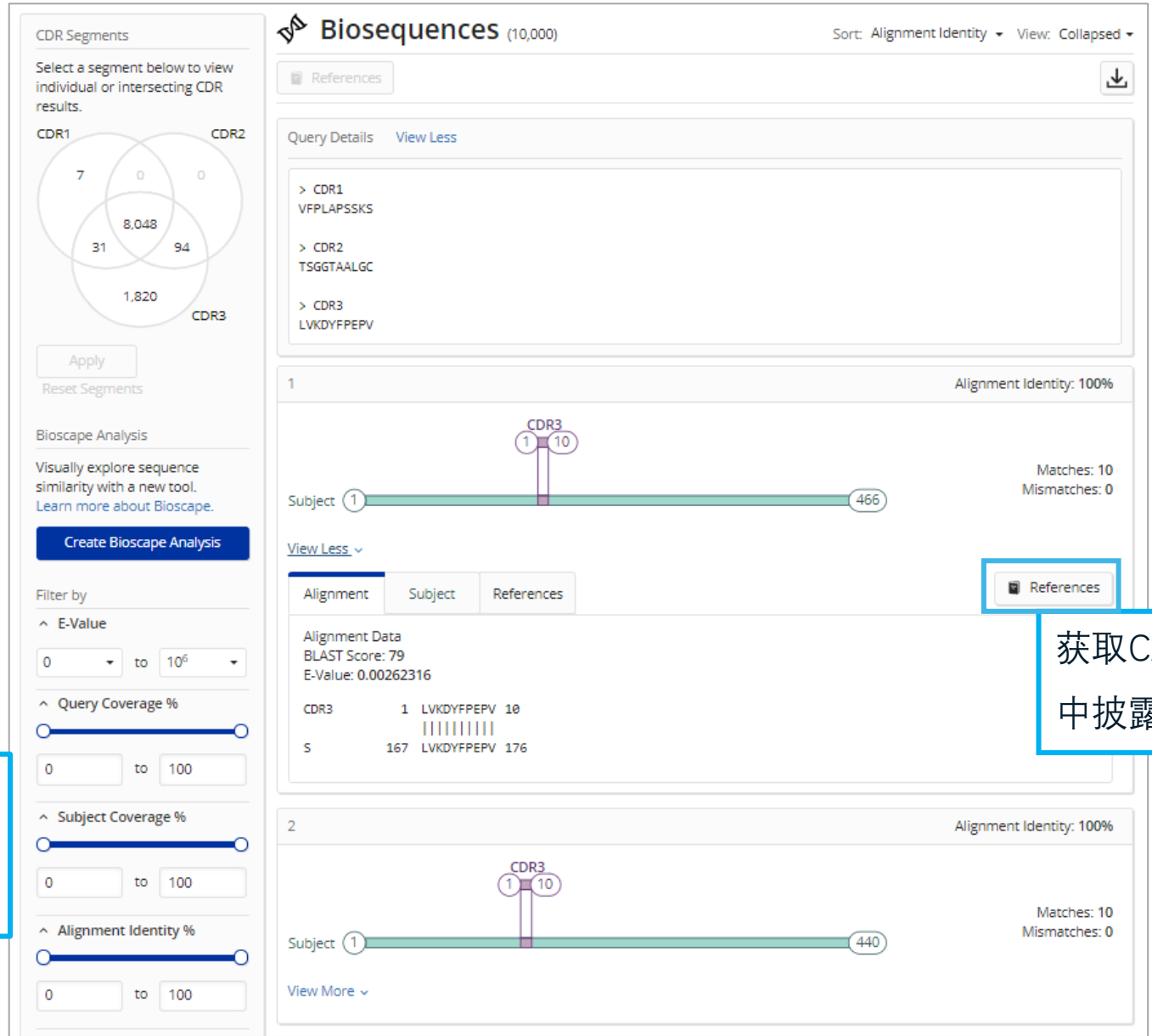


CAS SciFinder-n Help:
https://scifinder-n.cas.org/help/#t=Searching_in_SciFinder-n%2FBiosequence_Search%2FBiosequence_Search_-_CDR.htm&rhsearch=CDR&rhhlterm=CDR&rhsyns=%20

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

CDR检索结果

- 左侧呈现匹配到query中某一个或者多个CDR区的subject序列的数量。
- 点击圈内的数字，再点Apply即可查看匹配的序列结果。
- 点Reset segments，可重新选择查看匹配的序列结果。



下载Excel格式文件

获取CAS SciFinder-n中披露该序列的文献

Query Coverage % = coverage/query

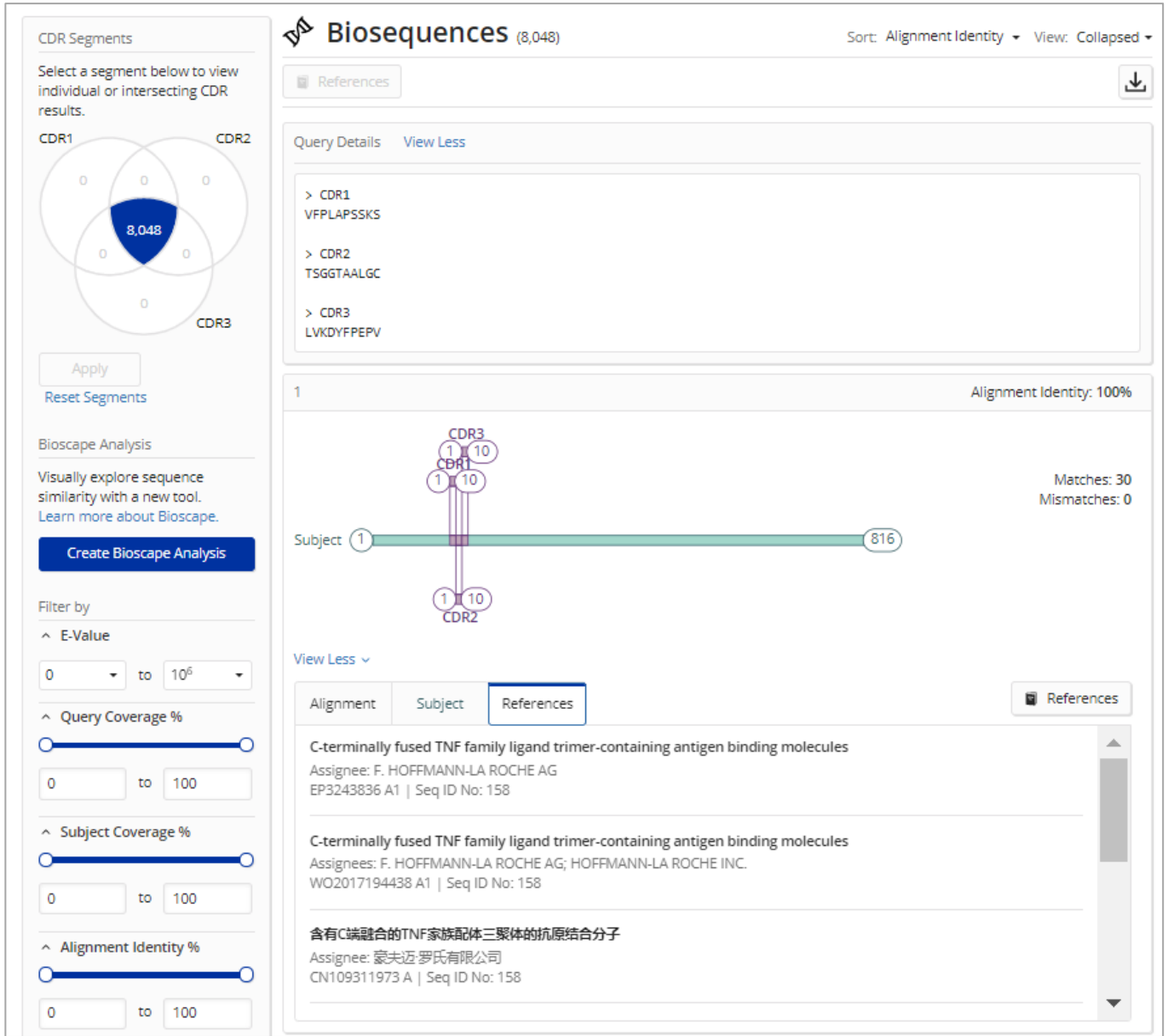
Subject Coverage % = coverage/subject

Alignment Identity % = matches/query

CAS
A division of the American Chemical Society

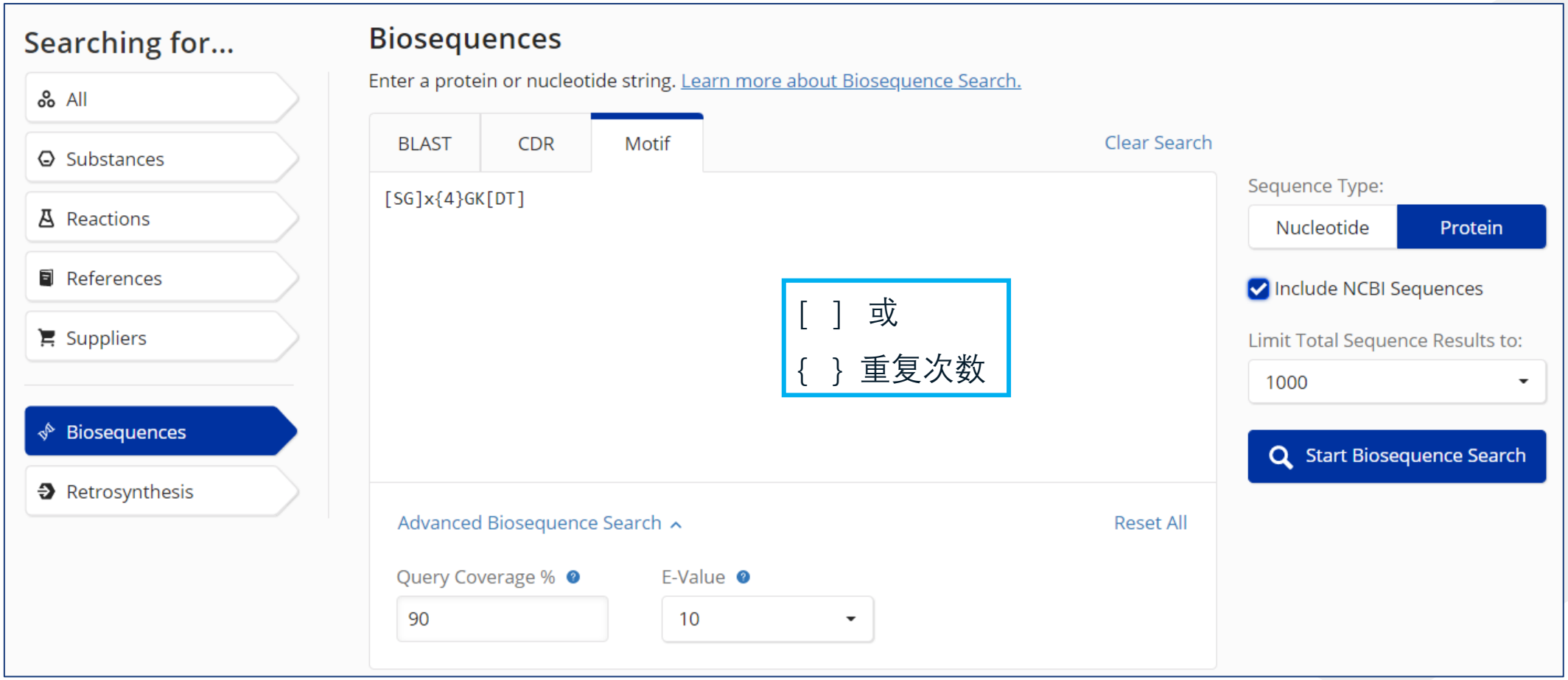
CDR检索结果

查看query中三个CDR区都被包含的8048个序列结果



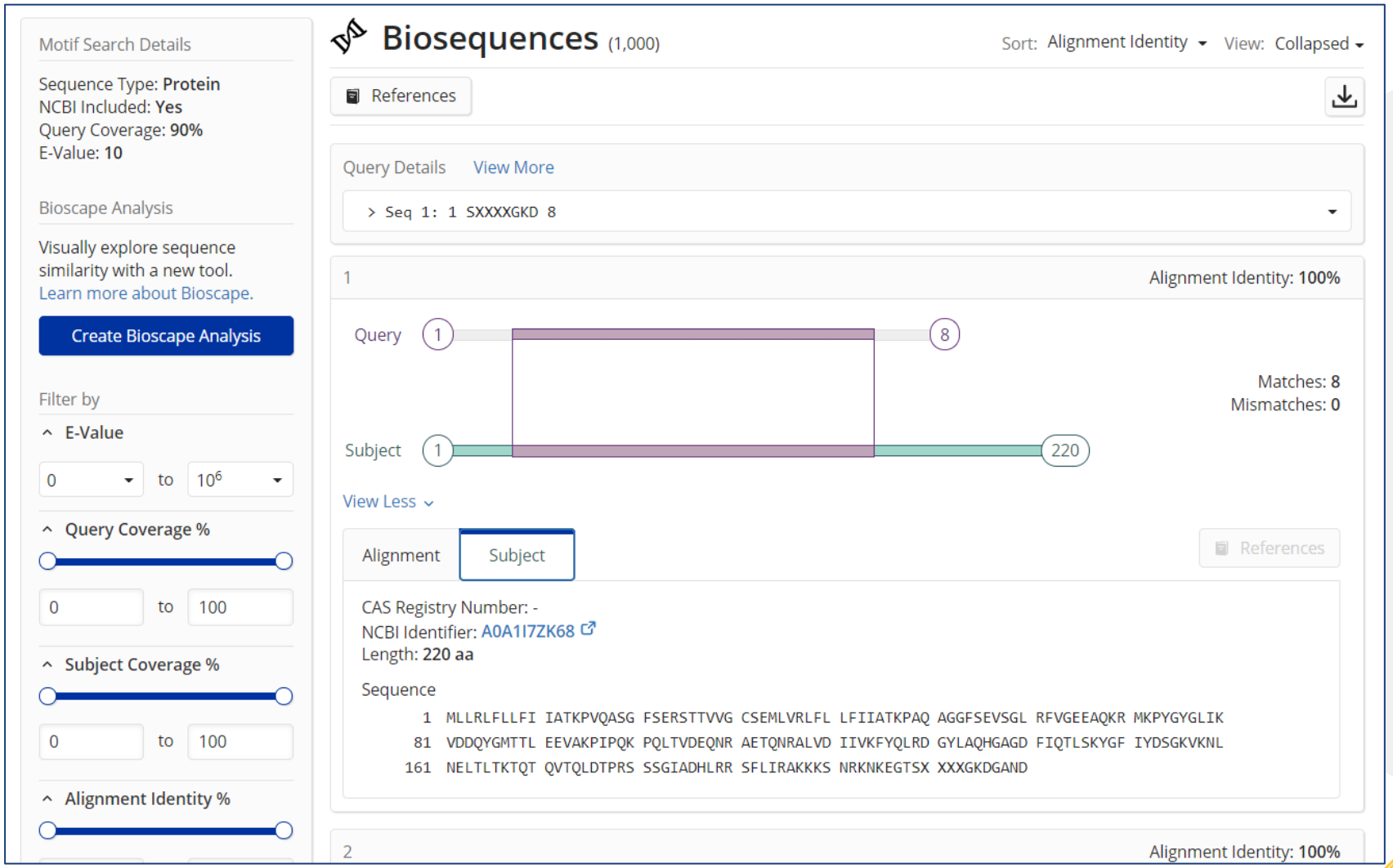
CAS
A division of the American Chemical Society

Biosequences Search™--Motif检索



CAS SciFinder-n Help:
https://scifinder-n.cas.org/help/#t=Searching_in_SciFinder-n%2FBiosequence_Search%2FBiosequence_Search_-_Motif.htm&rhsearch=motif&rhhlterm=motif&rhsyns=%20

Motif检索结果



大纲

- CAS SciFinder^{n}中的反应检索
  - 检索反应的常用方法
  - 反应结果集的排序与筛选
  - Synthetic Methods™的使用
  - 关键词与反应式的联合检索

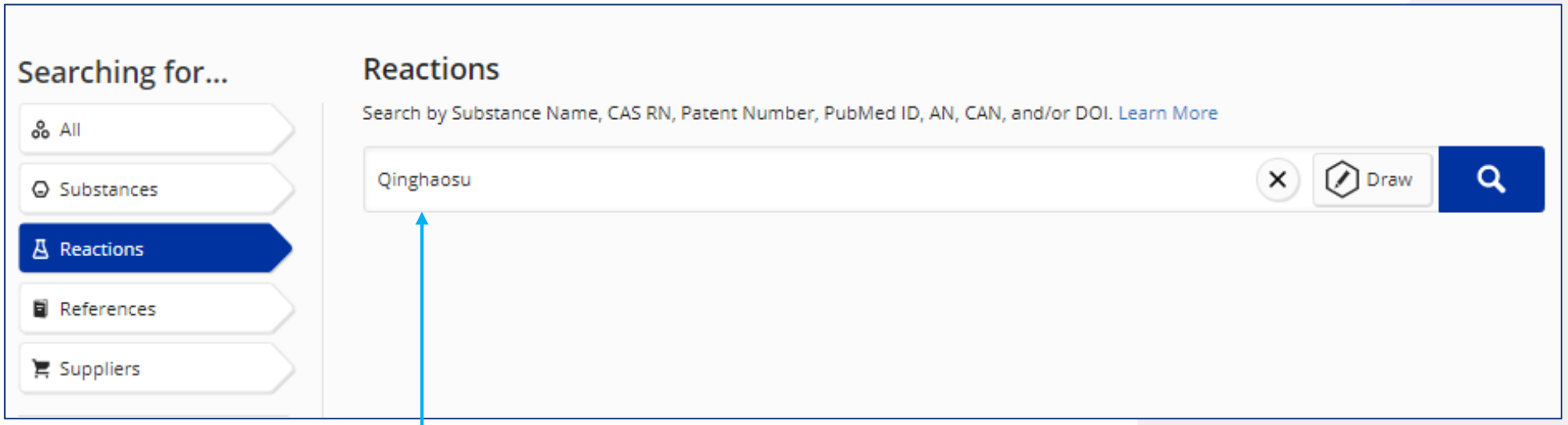
视频链接：
https://american-chemical-society.zoom.us/rec/share/eheXjH8iLM3q7tT2flBtPm-c-_IMCDEF8qCgXmSngeTk7DtculPYx1IZZn83BYc.cAuZdpJTknUmPvaK?startTime=1647338414000

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

反应检索

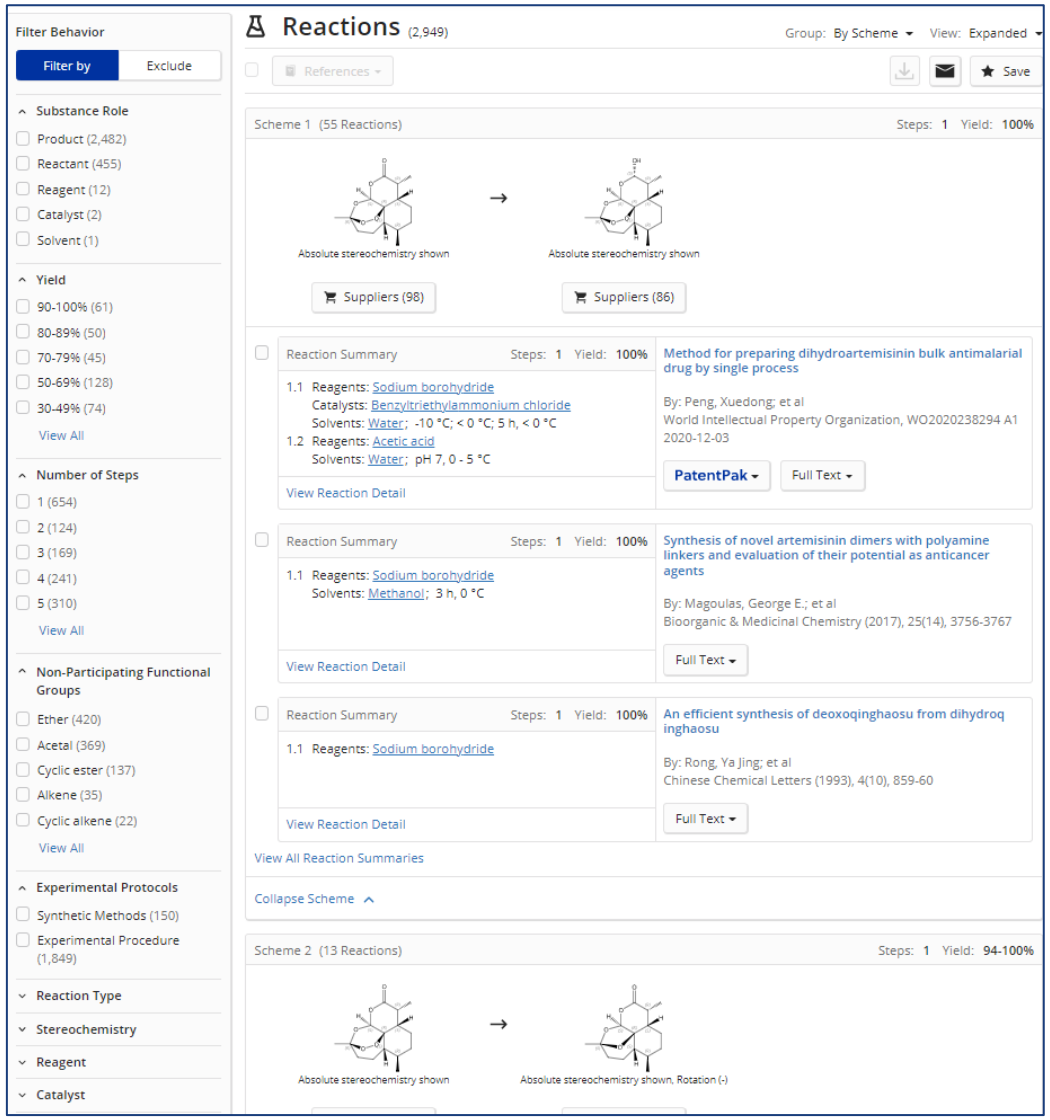
- 反应检索方法
  - 结构式
  - 关键词
  - 物质名称、登记号
  - 文献标识符：专利号、收录号、DOI
- 常用获取方法推荐
  - 已知物质：由物质获取反应
  - 已知文献：从文献中获取反应
  - 精确结构反应检索
  - 亚结构反应检索

反应检索



通过物质标识符、文献标识符进行检索

反应检索--标识符



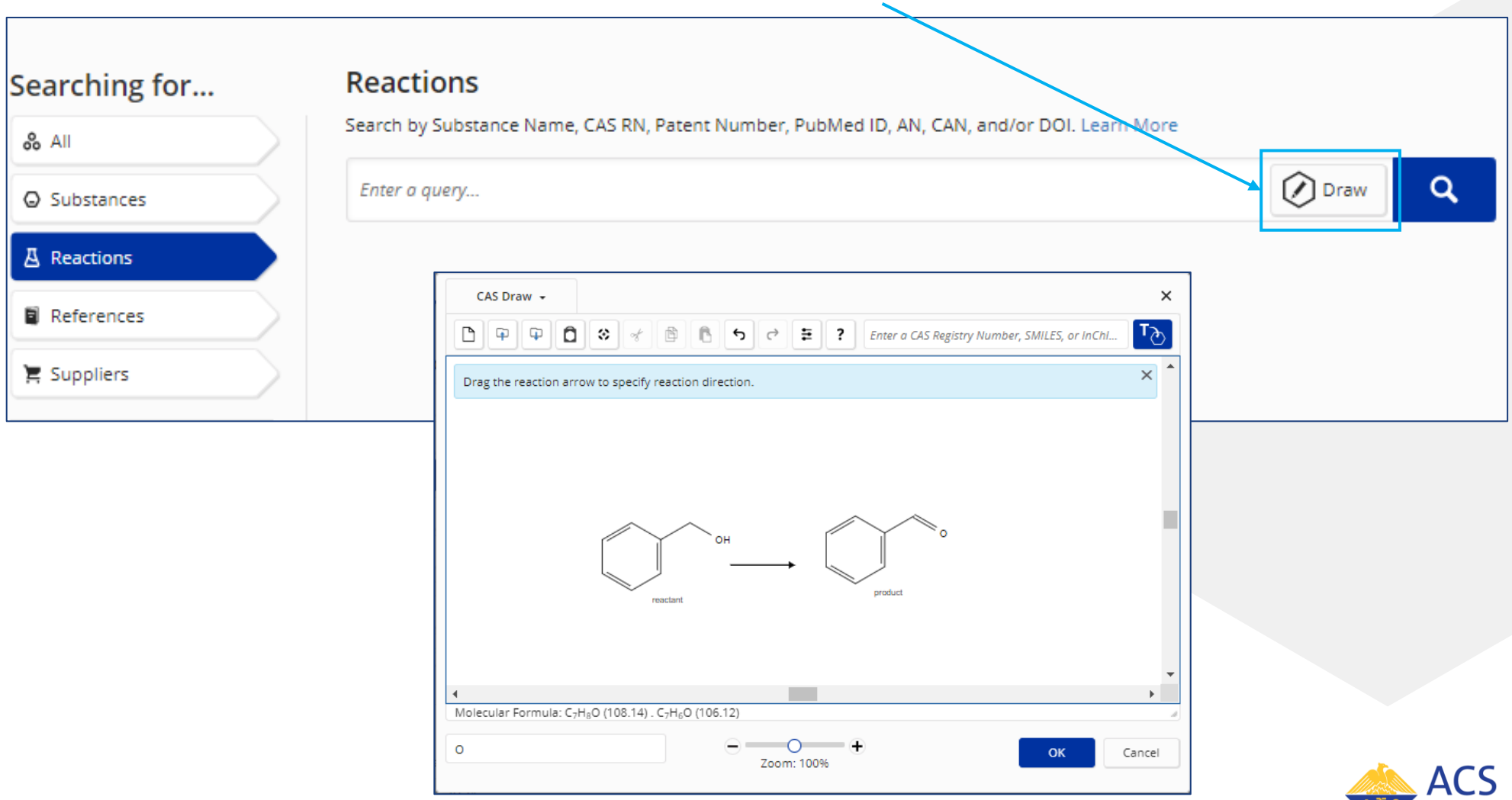
一步由物**质标识**符或文献**标识**符**获**得反**应**信息

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

反应检索

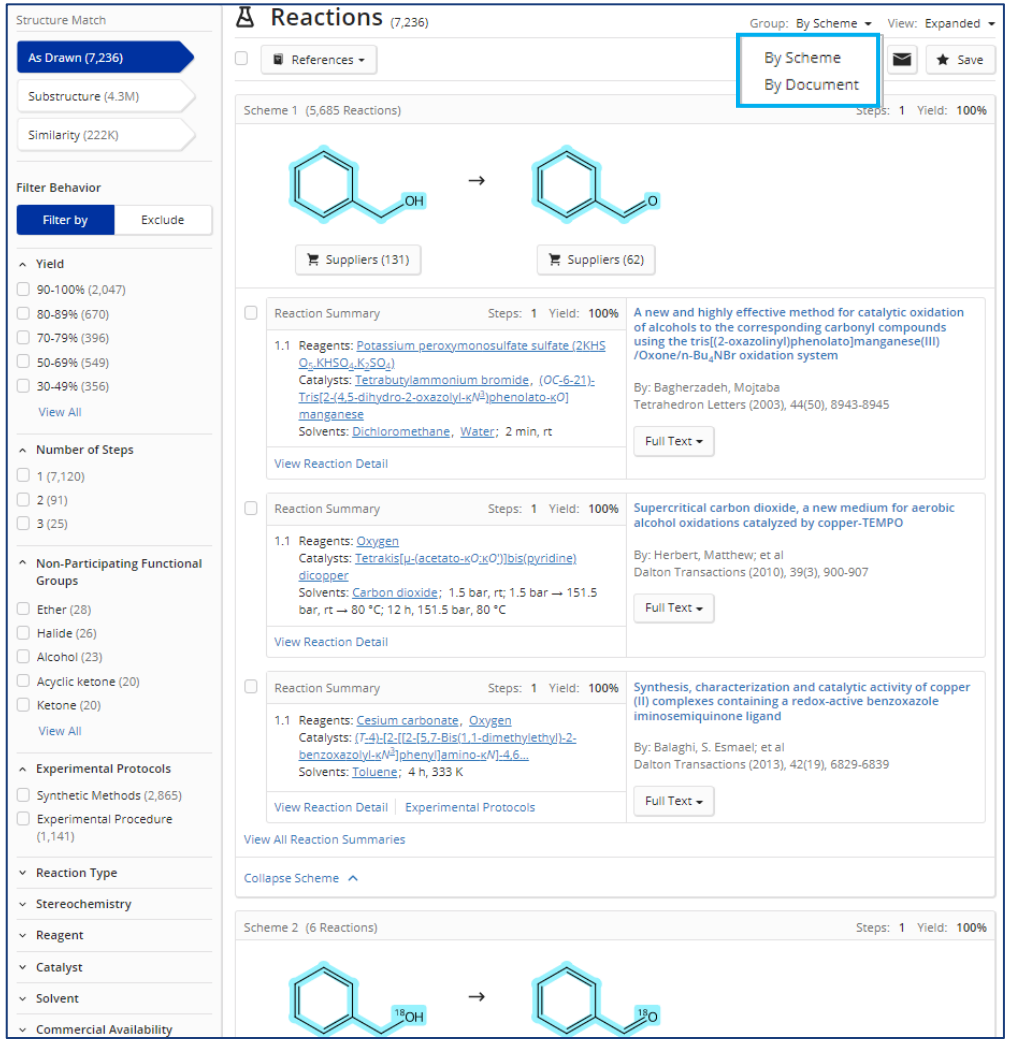
通过结构式进行检索



ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

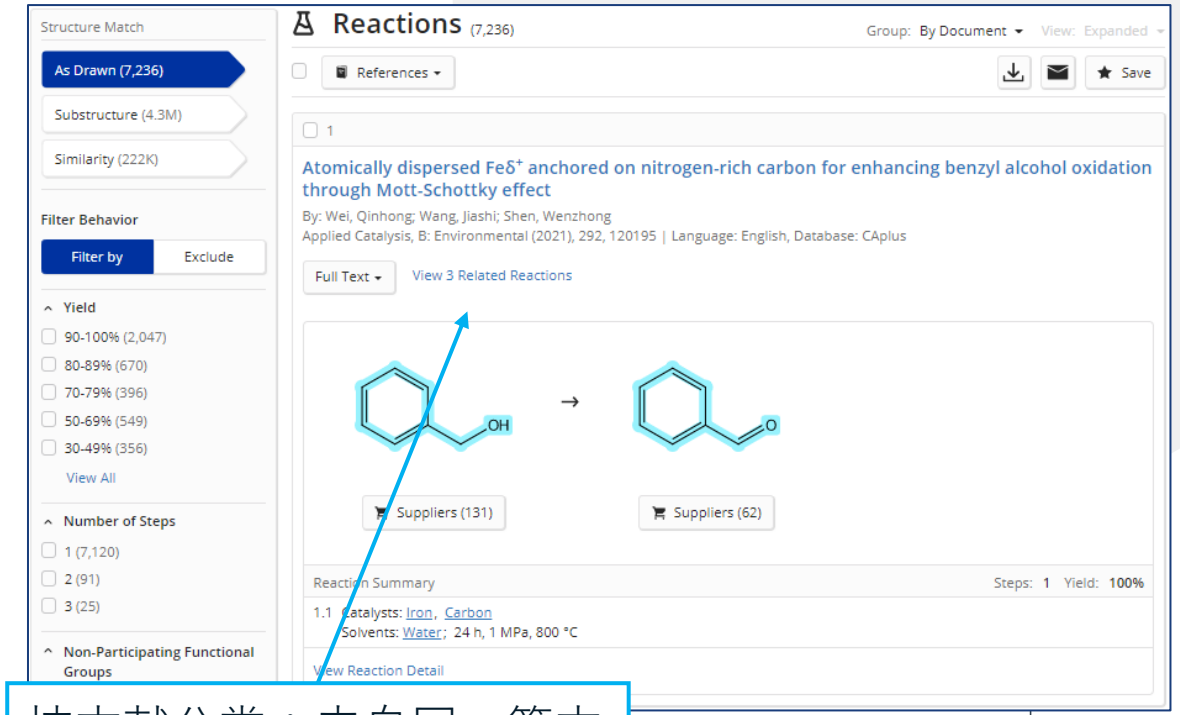
反应检索--结果集排序



反应排序：

按类型排序

按文献排序



按文献分类：来自同一篇文献的反应收在一条记录里

反应检索--结果集筛选

精确反**应检**索

亚结构反**应检**索

相似反**应检**索

反**应筛选**类别：

产率、反**应**步数

不参与反**应**的官能**团**

实验步**骤**

反**应**类型、立体化学

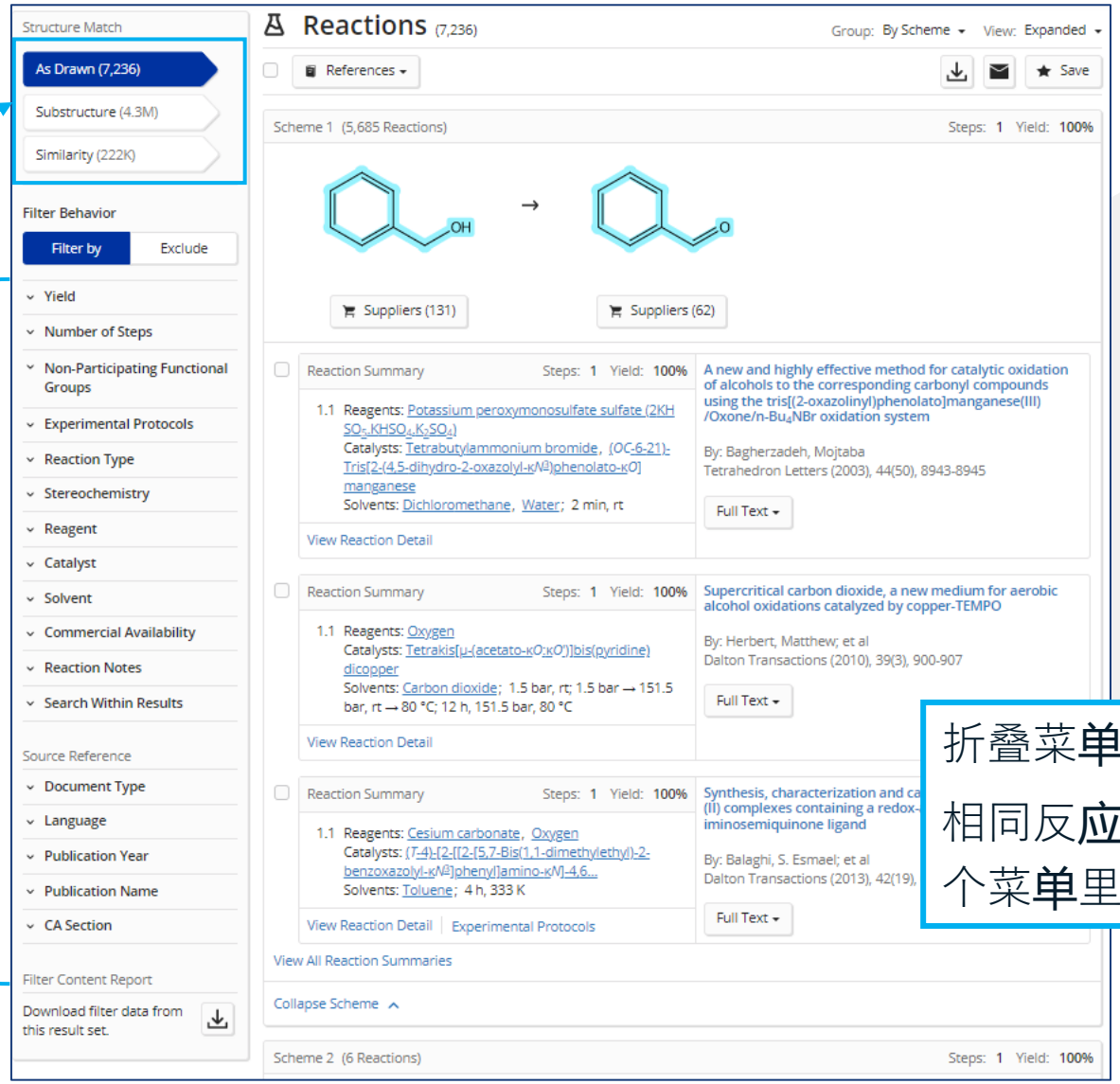
试剂、催化**剂**、溶**剂**

商**业**来源……

文献**筛选**类别：

文献类型、**语**言

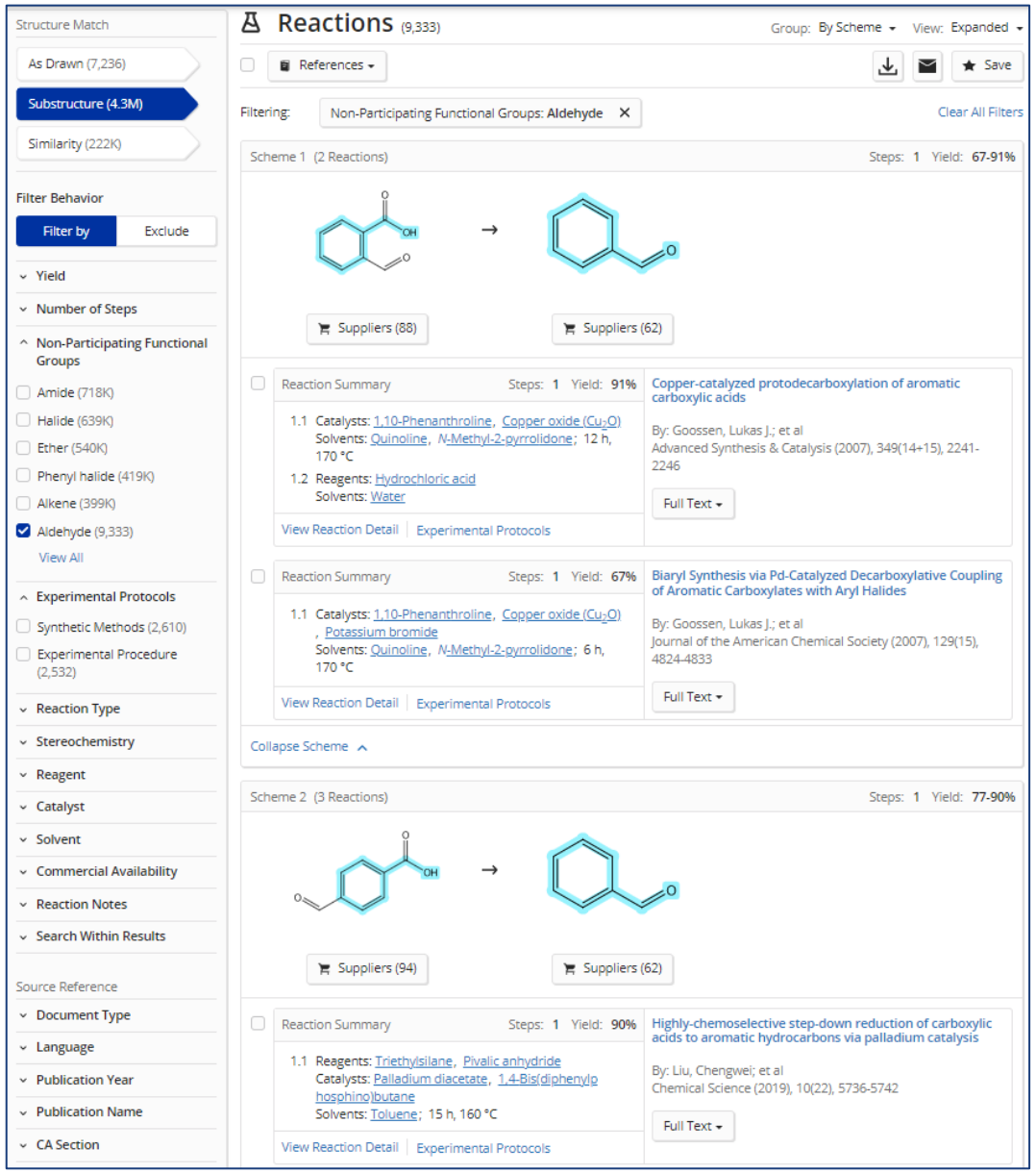
出版年份、刊物名



折叠菜**单显**示：

相同反**应**类型的反**应**放在一个菜**单**里，方便**阅读**和**筛选**

反应检索--结果集筛选：不参与反应官能团

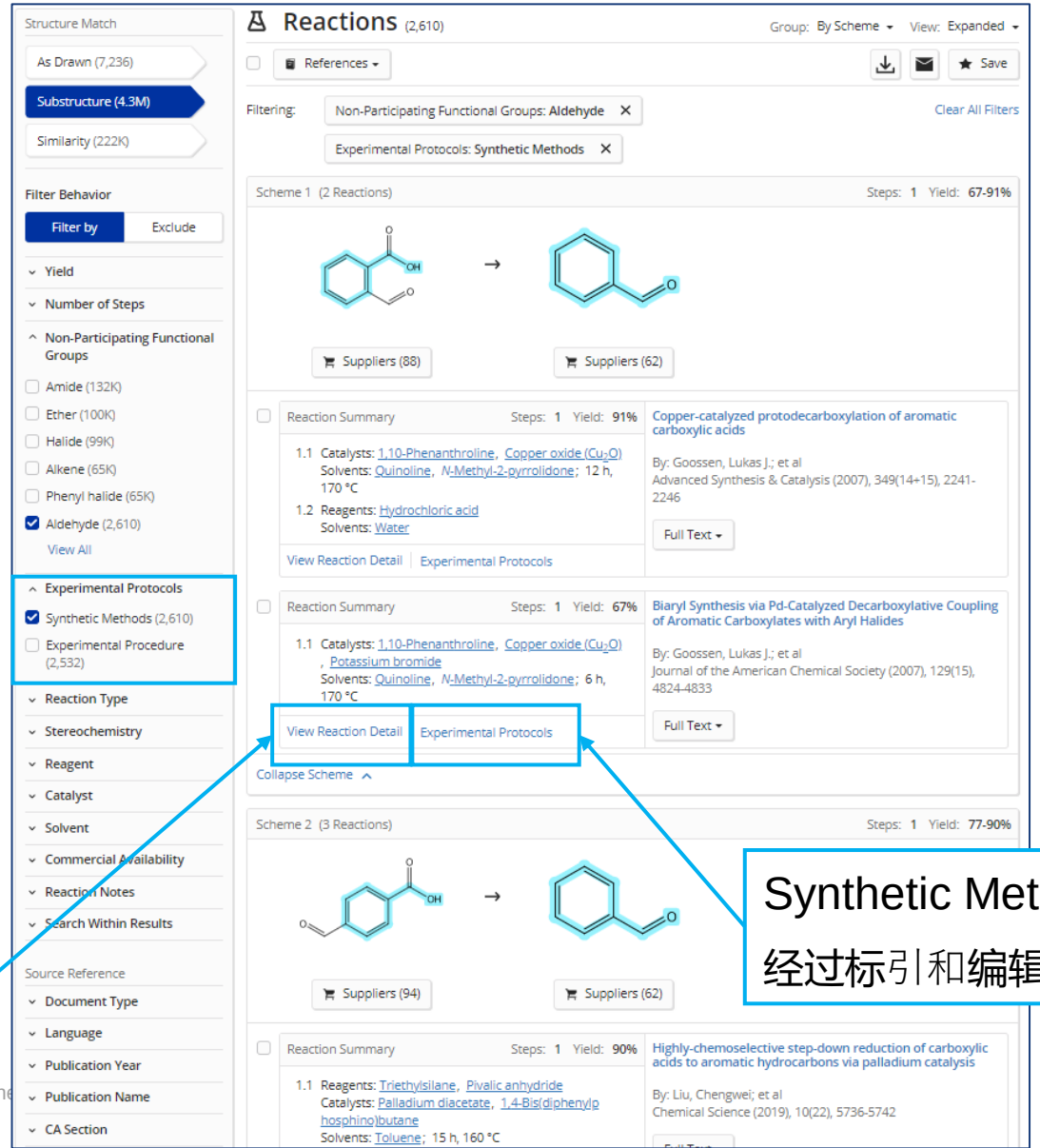


不参与反应官能团：出现在反应前后，但

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

反应检索--结果集筛选：Synthetic Methods™



查看反应详情

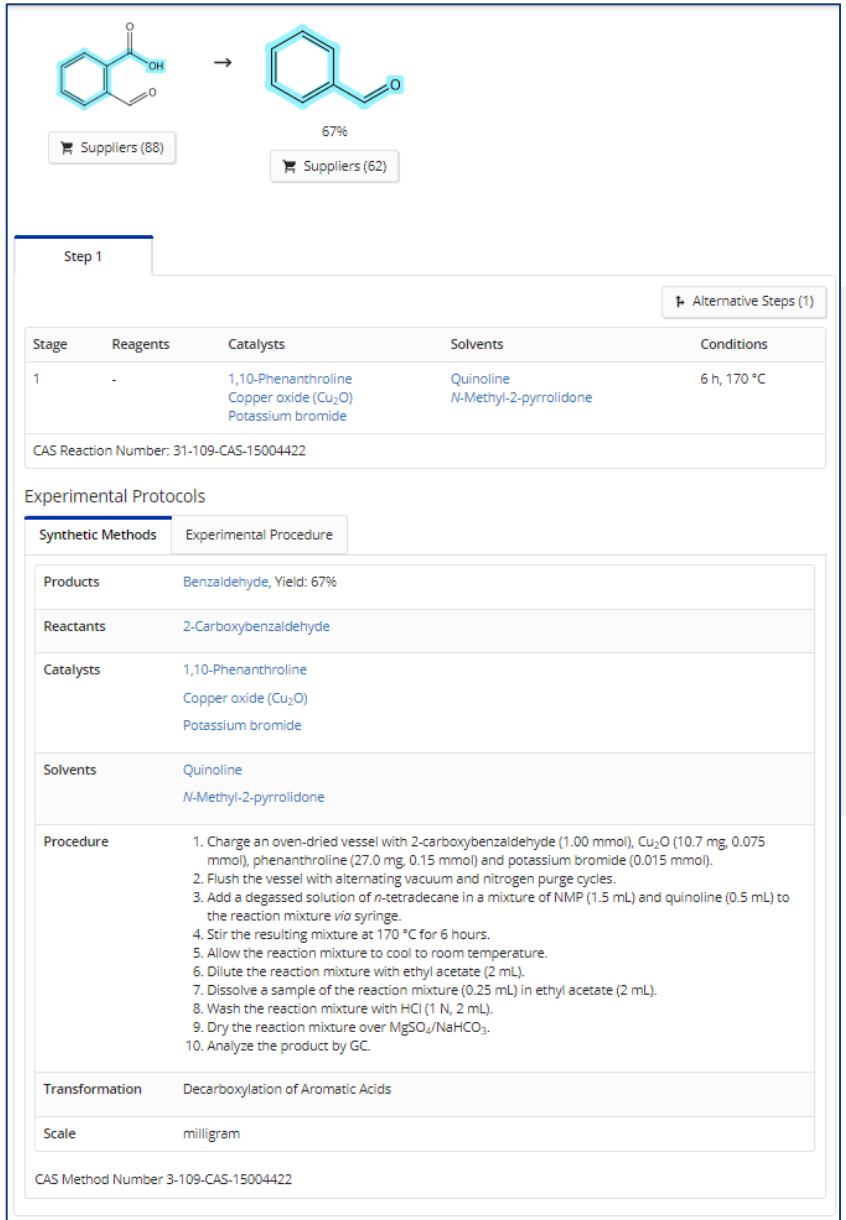
Synthetic Methods™ ：

经过标引和编辑的完整的反应操作信息

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

反应检索--结果集筛选：Synthetic Methods™

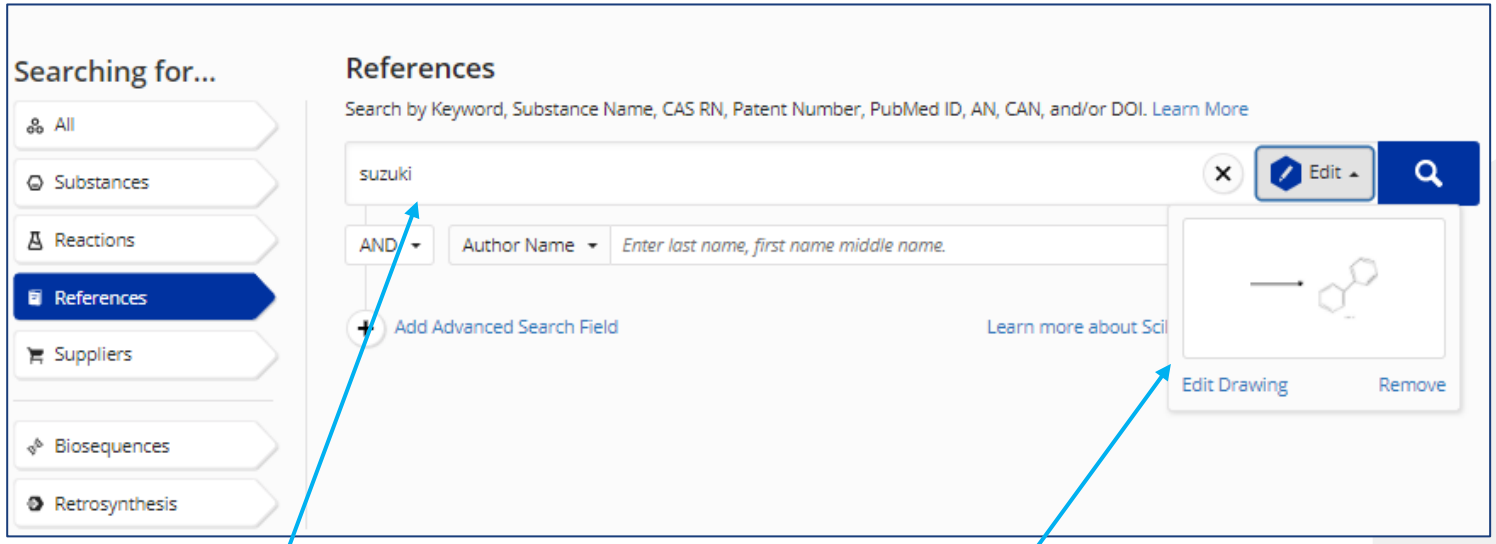


Synthetic Methods™：

分类**显**示**详**尽信息，方便操作

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

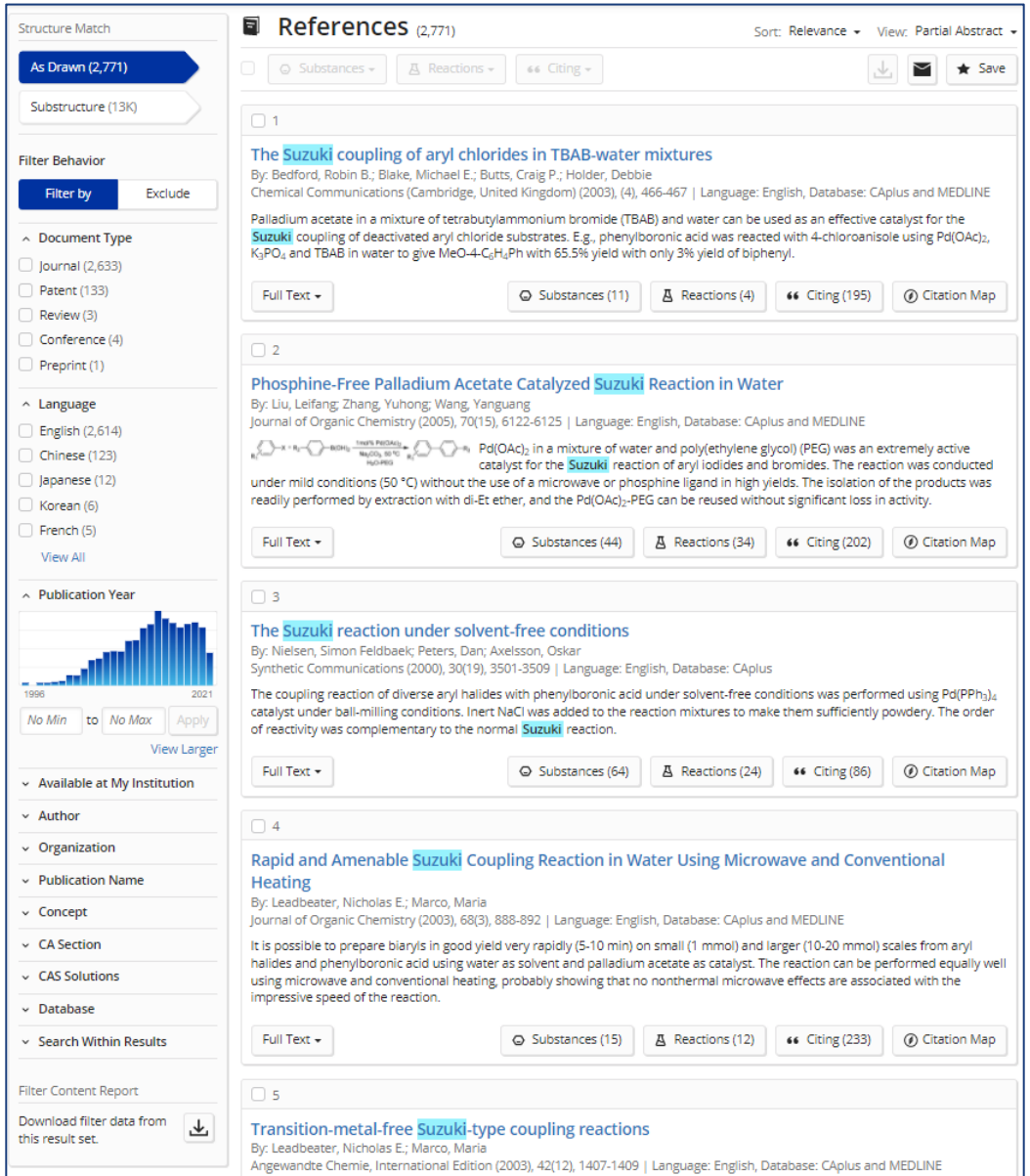
联合检索--反应式与关键词



文献检索框里
输入关键词

结构编辑器
中绘制反应

联合检索--反应式与关键词



联合检索提高了检索速度

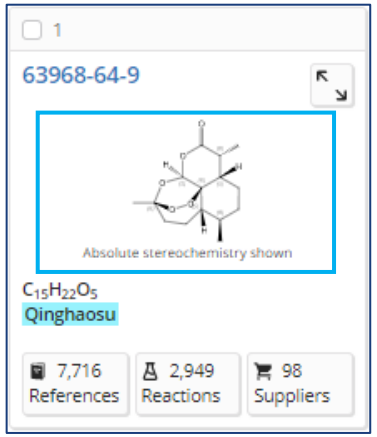
ACS International

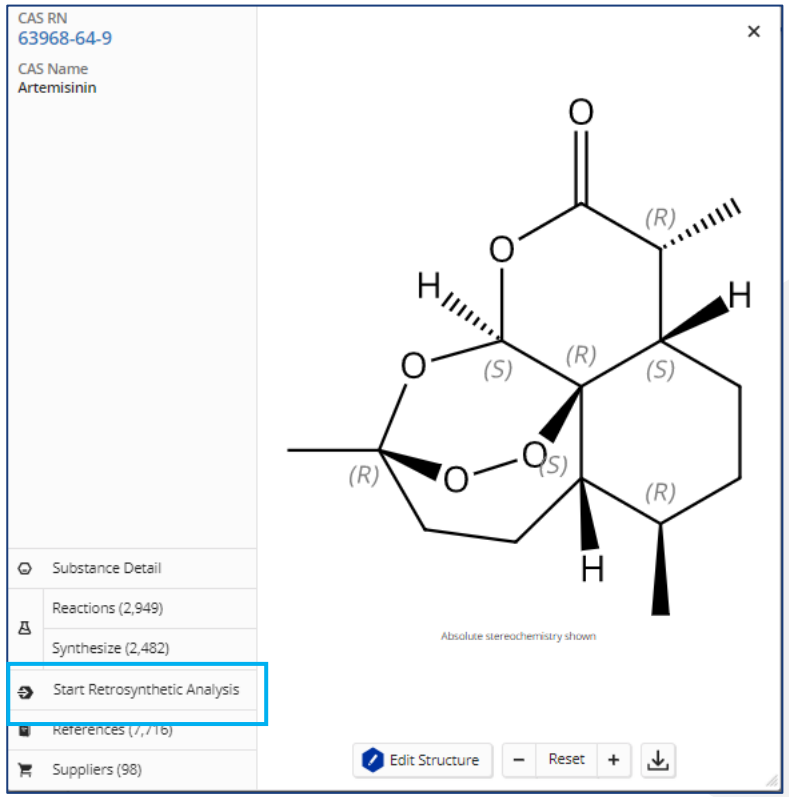
CAS
A division of the American Chemical Society

大纲

- CAS Retrosynthesis Tool的使用
  - 获得已知化合物的逆合成反应路线
  - 获得未知化合物的逆合成反应路线

CAS Retrosynthesis Tool--由物质获得





从已知化合物**获**得逆合成路**线**：

点**击**物**质结**构，**弹**出的物**质**菜**单**中点**击**Create Retrosynthesis

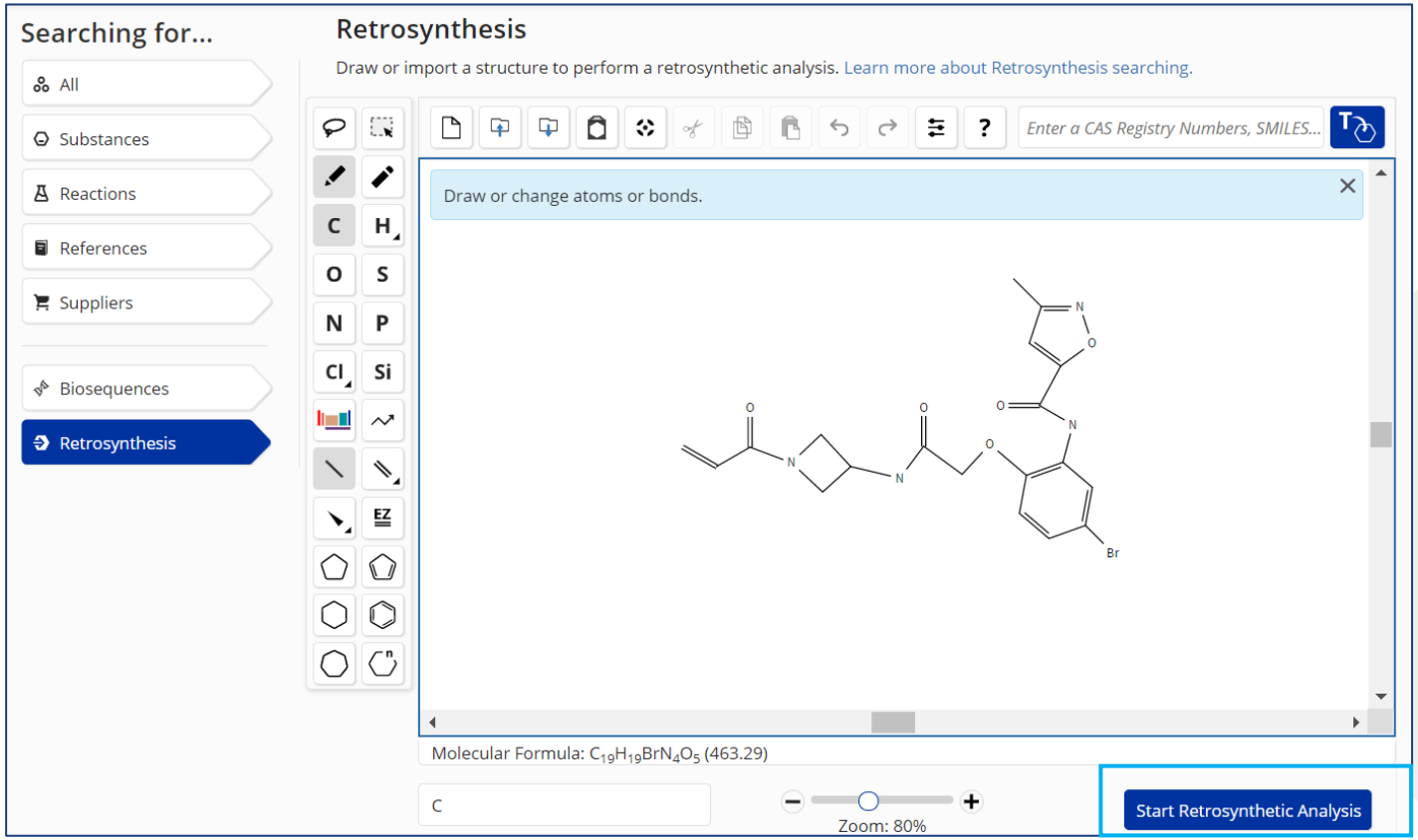
CAS Retrosynthesis Tool：

逆合成反**应**路**线设计**功能，

启**发**合成**实验设计**思路高效

获取逆合成反**应**路**线**

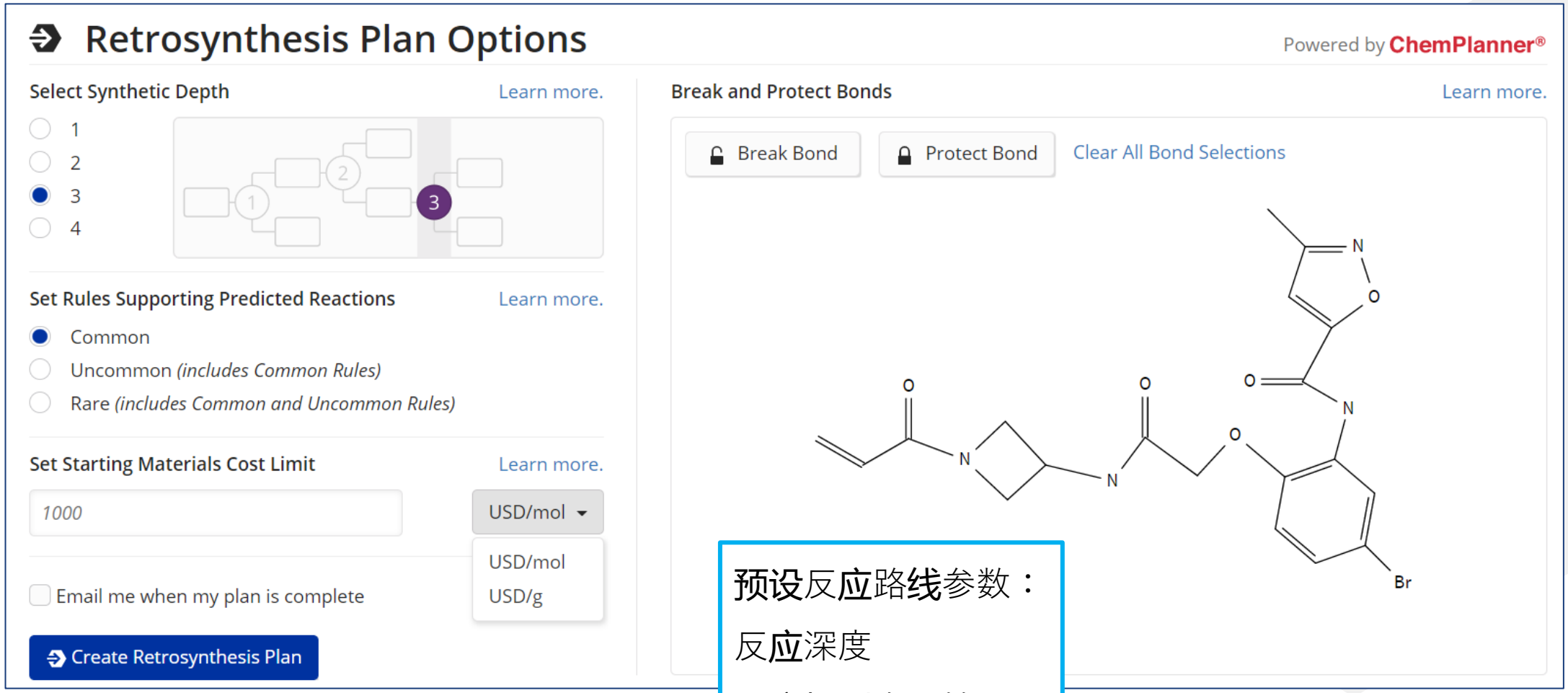
CAS Retrosynthesis Tool—直接绘制



绘制目标化合物：

从Retrosynthesis检索项打开绘图板，绘制目标化合物，获得实验路线

CAS Retrosynthesis Tool—预设参数



预设反应路线参数：

反应深度

反应规则常见性

起始原料费用

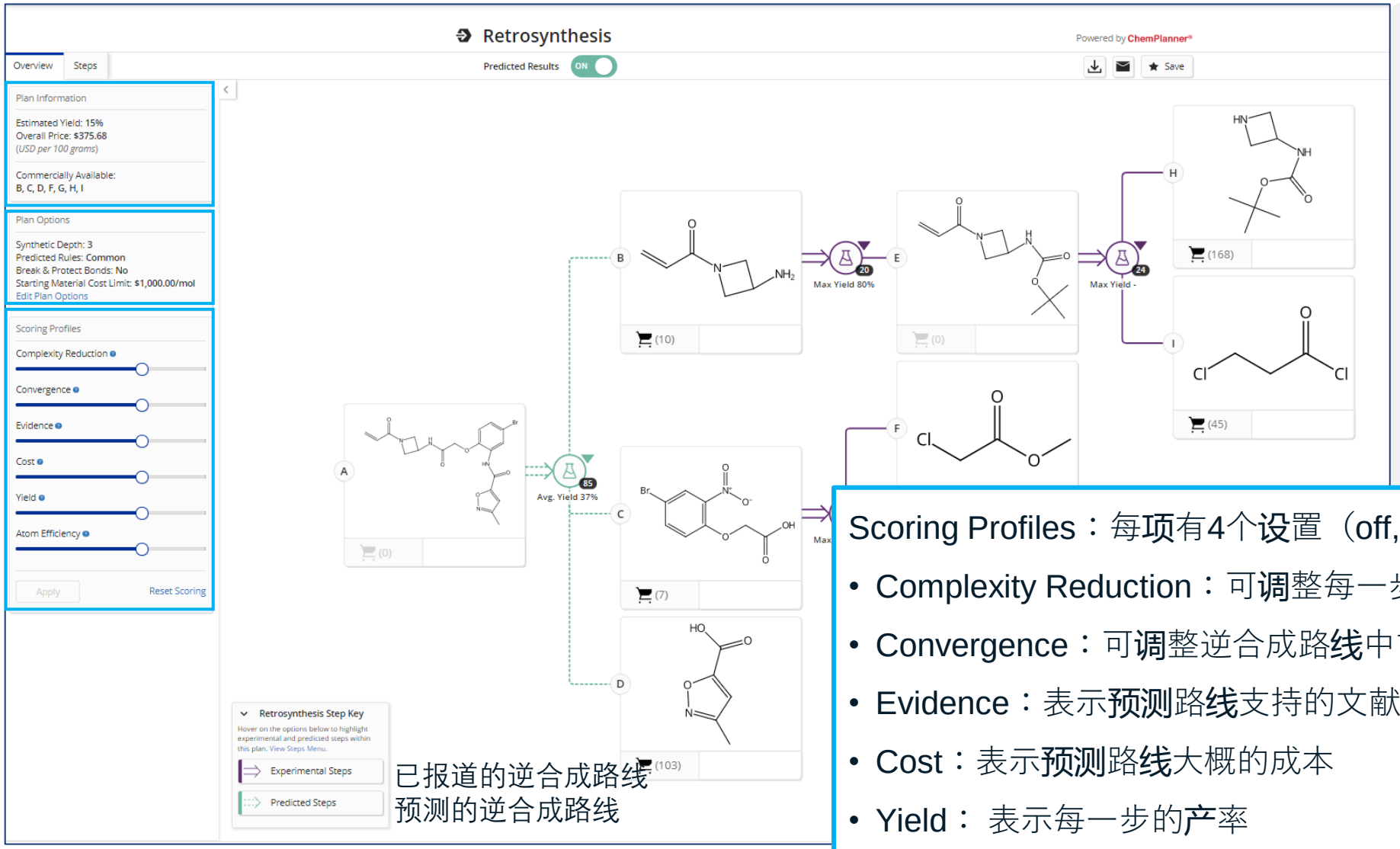
设置断裂键或保护键

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

CAS Retrosynthesis Tool—路线概览

路线概览

重设参数

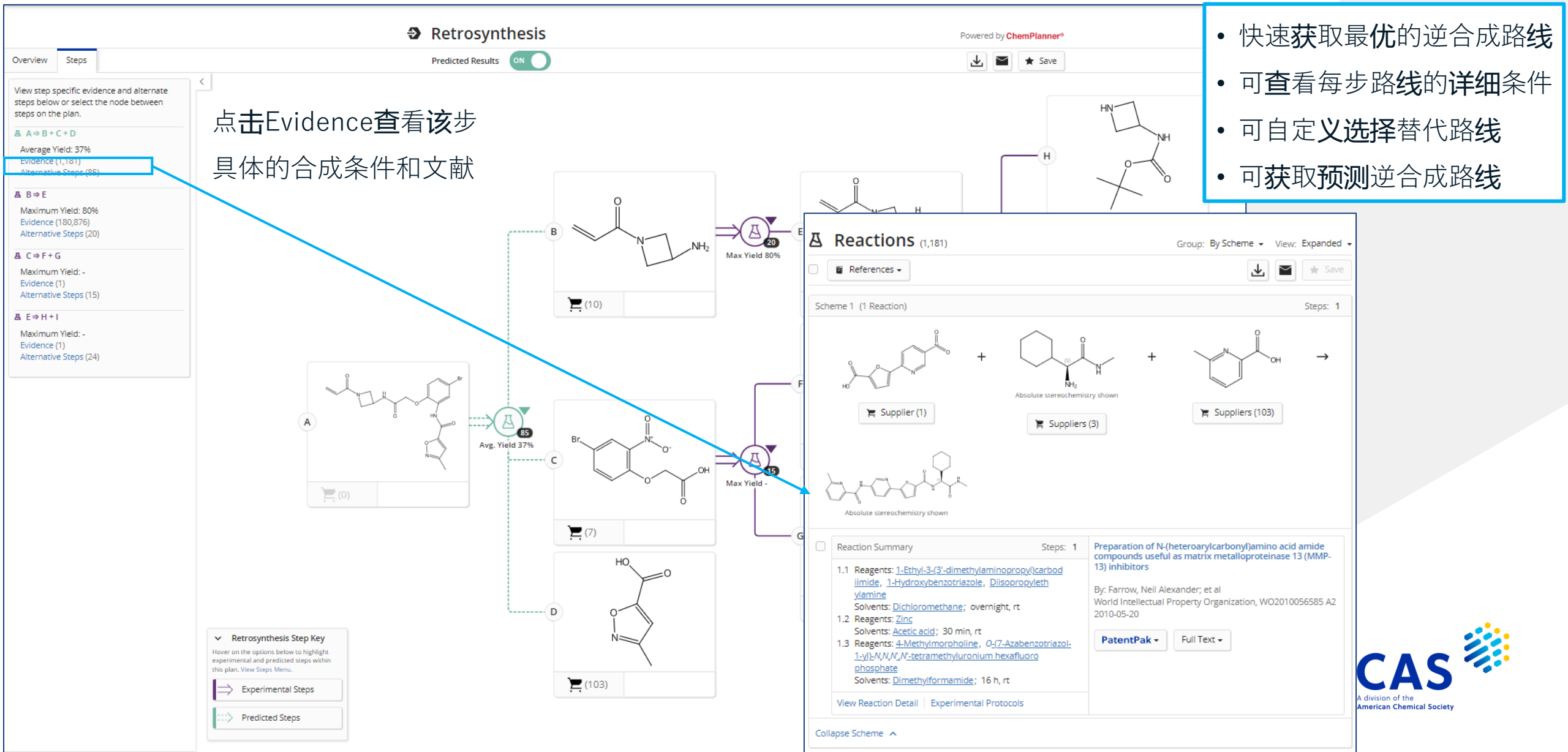


已报道的逆合成路线
预测的逆合成路线

Scoring Profiles：每项有4个设置（off, low, medium, high）

- Complexity Reduction：可调整每一步原料结构的复杂性
- Convergence：可调整逆合成路线中前体的数量
- Evidence：表示预测路线支持的文献数量多少
- Cost：表示预测路线大概的成本
- Yield： 表示每一步的产率
- Atom Efficiency：表示每一步的原子转化效率

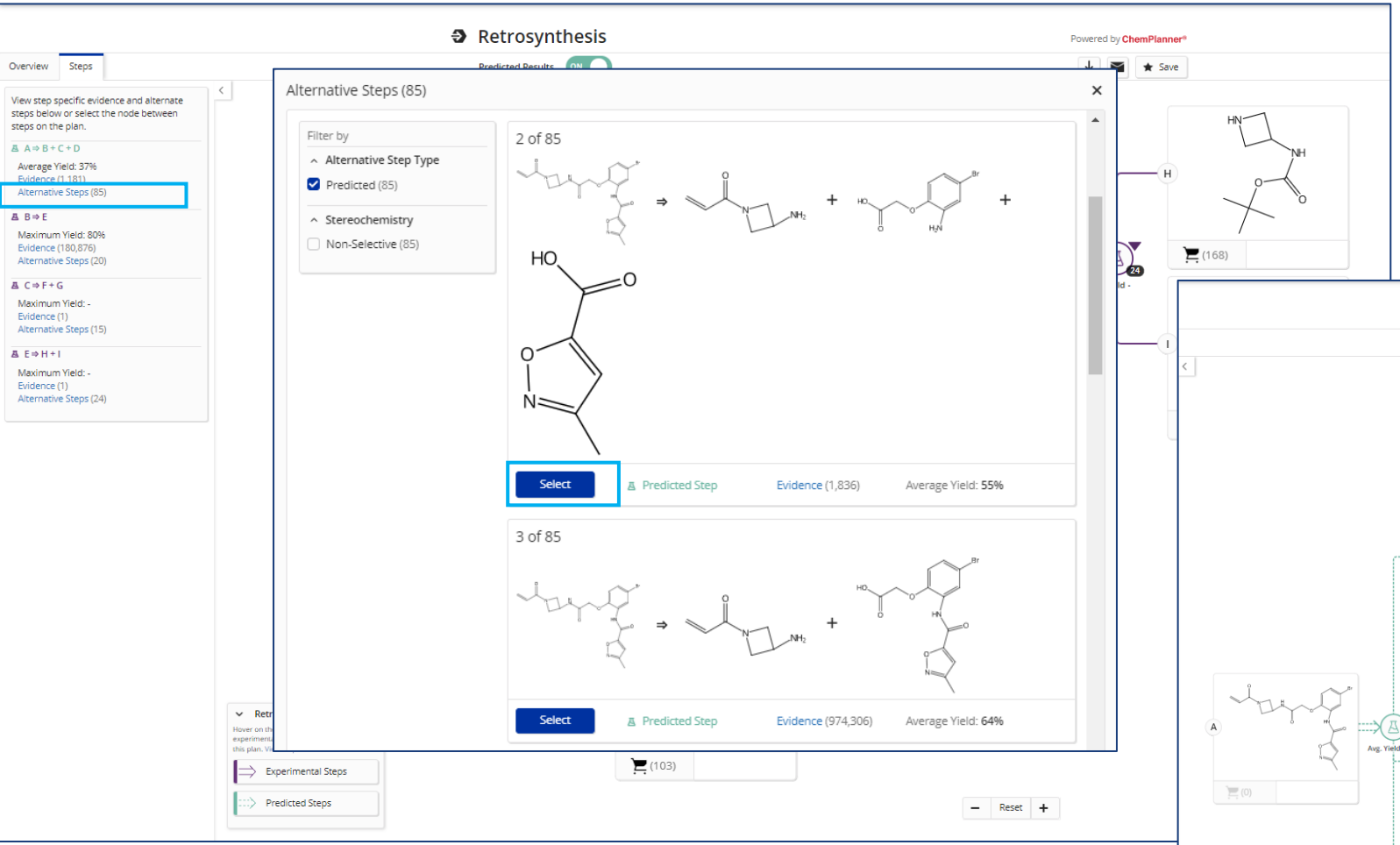
CAS Retrosynthesis Tool—路线详情

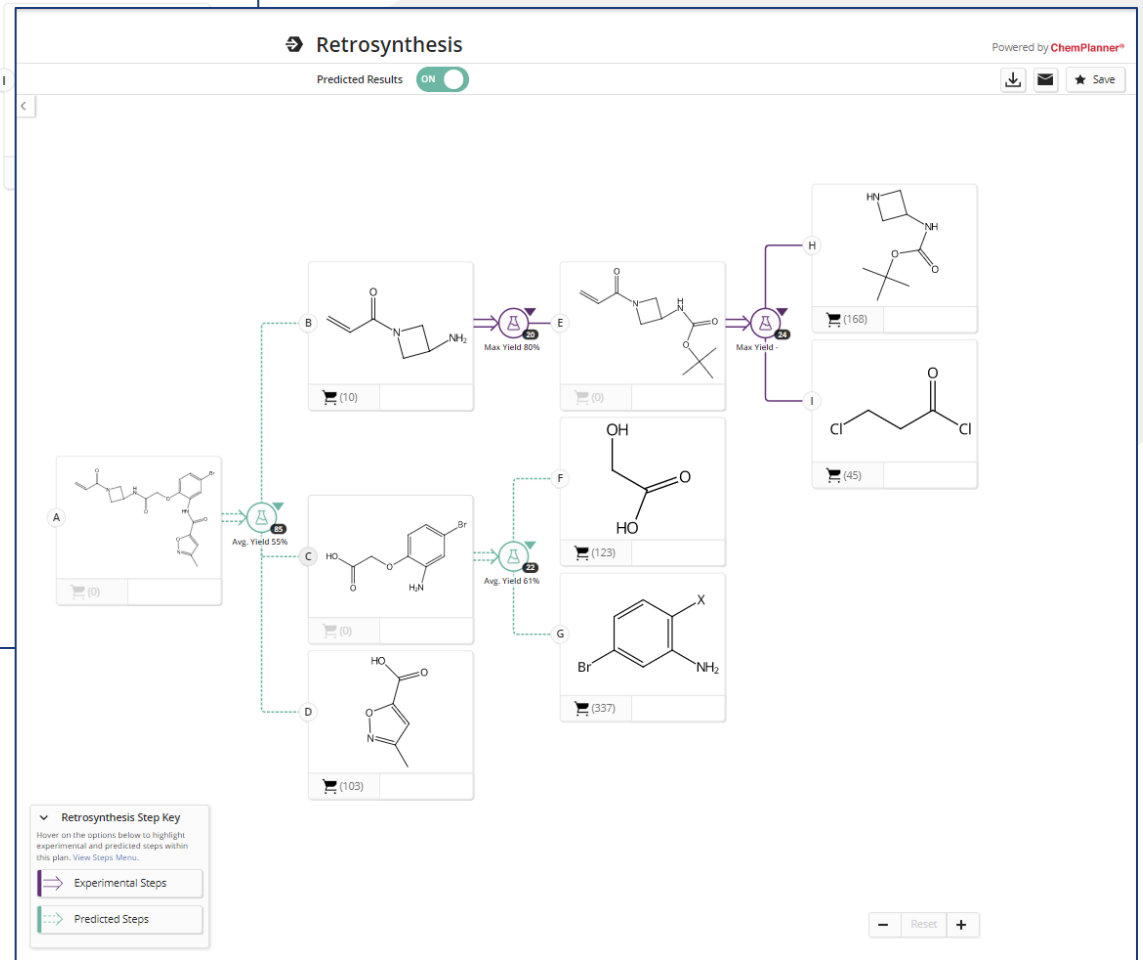


- 快速**获**取最**优**的逆合成路**线**
- 可**查**看每步路**线**的**详细**条件
- 可自定**义选择**替代路**线**
- 可**获**取**预测**逆合成路**线**

CAS
A division of the American Chemical Society

CAS Retrosynthesis Tool—路线详情





点击Alternative Steps查看并选择替换路线，

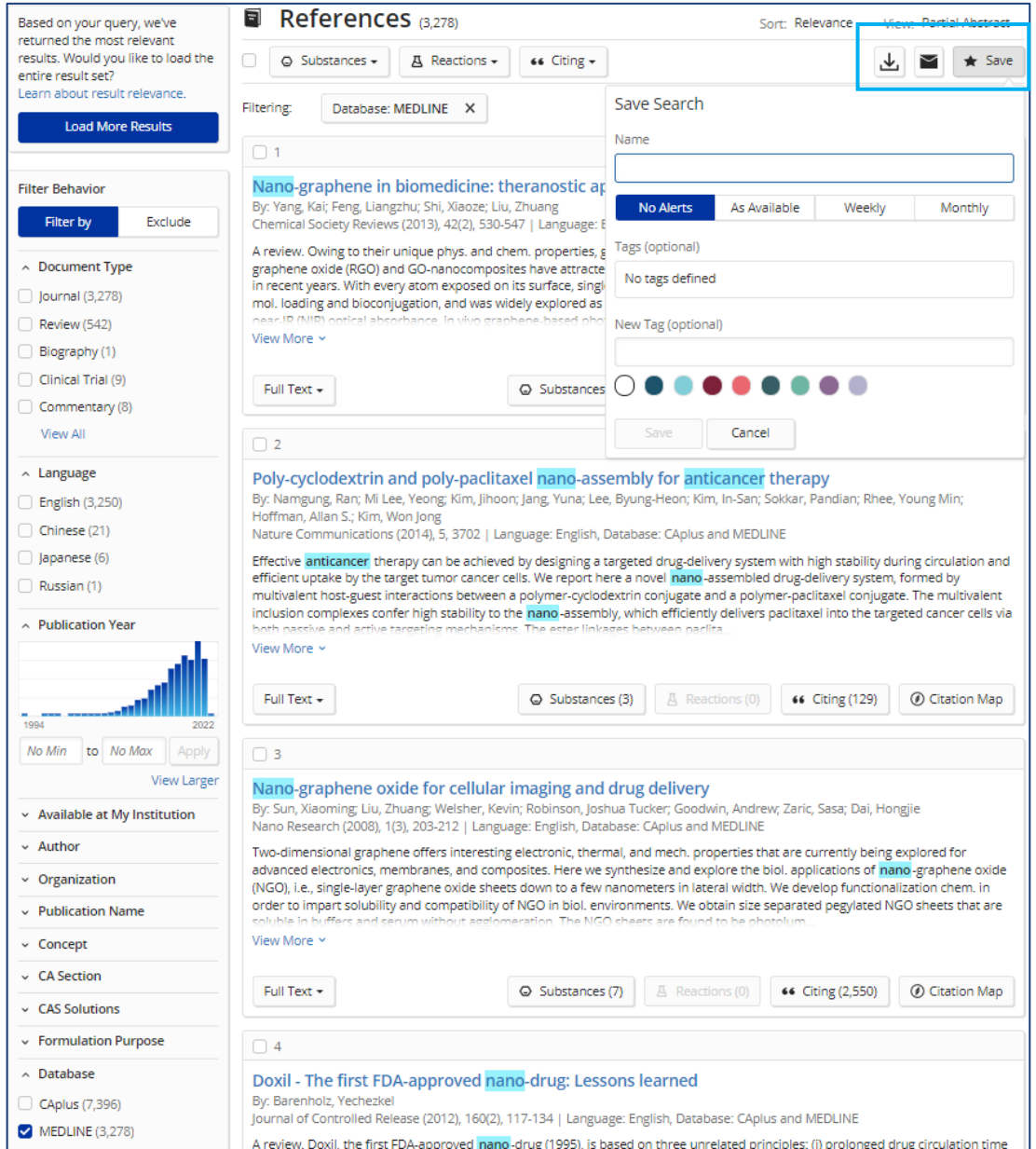
得到自定义的合成路线

检索信息的管理

- 保存&导出检索结果及标签
- 设置提醒检索结果
- 合并保存的检索结果
- 历史检索记录

视频链接:
https://casevents.webex.com/ec3300/eventcenter/enroll/register.do?siteurl=casevents&formId=307159432&confId=307159432&formType=1&loadFlag=1&eventType=1&accessType=viewRecording&internalPBRecordTicket=4832534b00000005f9f2504b4d303988091b40fd51809aeb9c8ce4f3074cbeb71e9b2937afea5257

检索信息的管理--保存、下载，设置提醒和标签



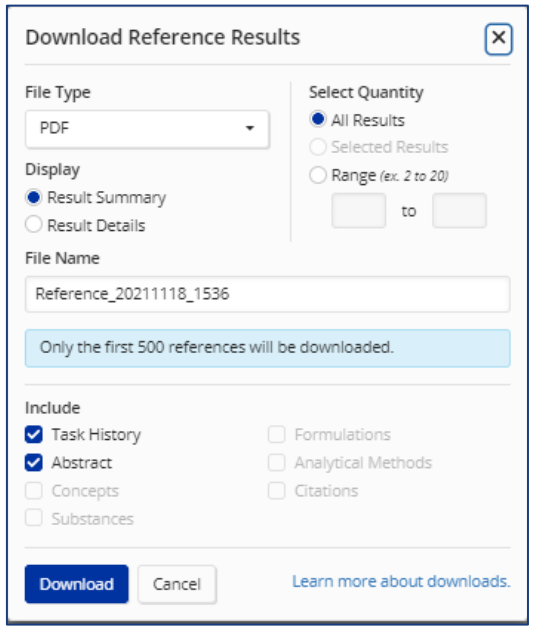
下载
分享链接
保存

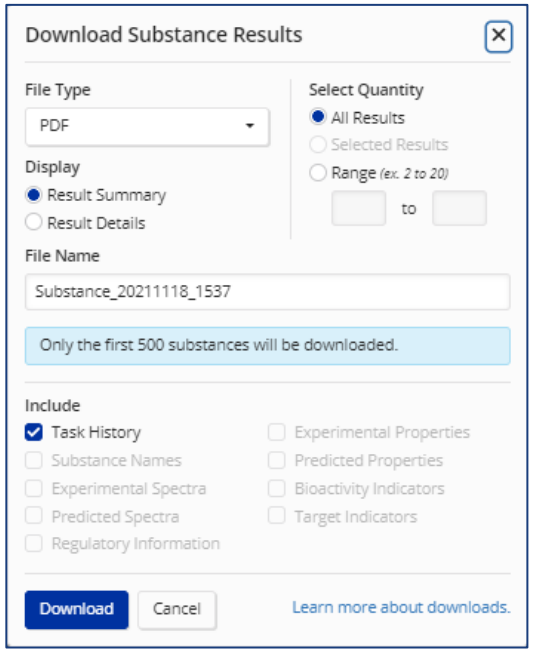
设置提醒频率：
即时，每周，每月

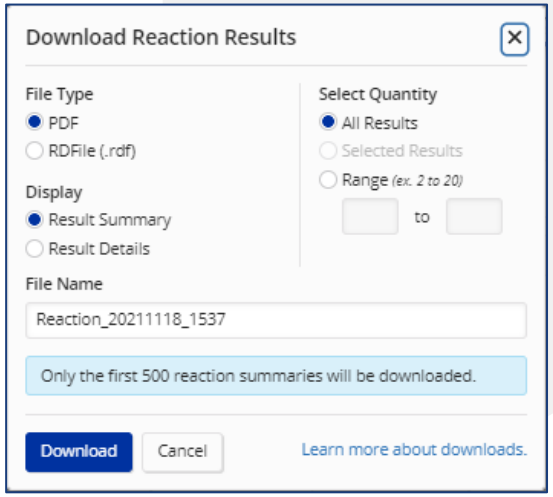
ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

检索信息的管理--导出文件格式

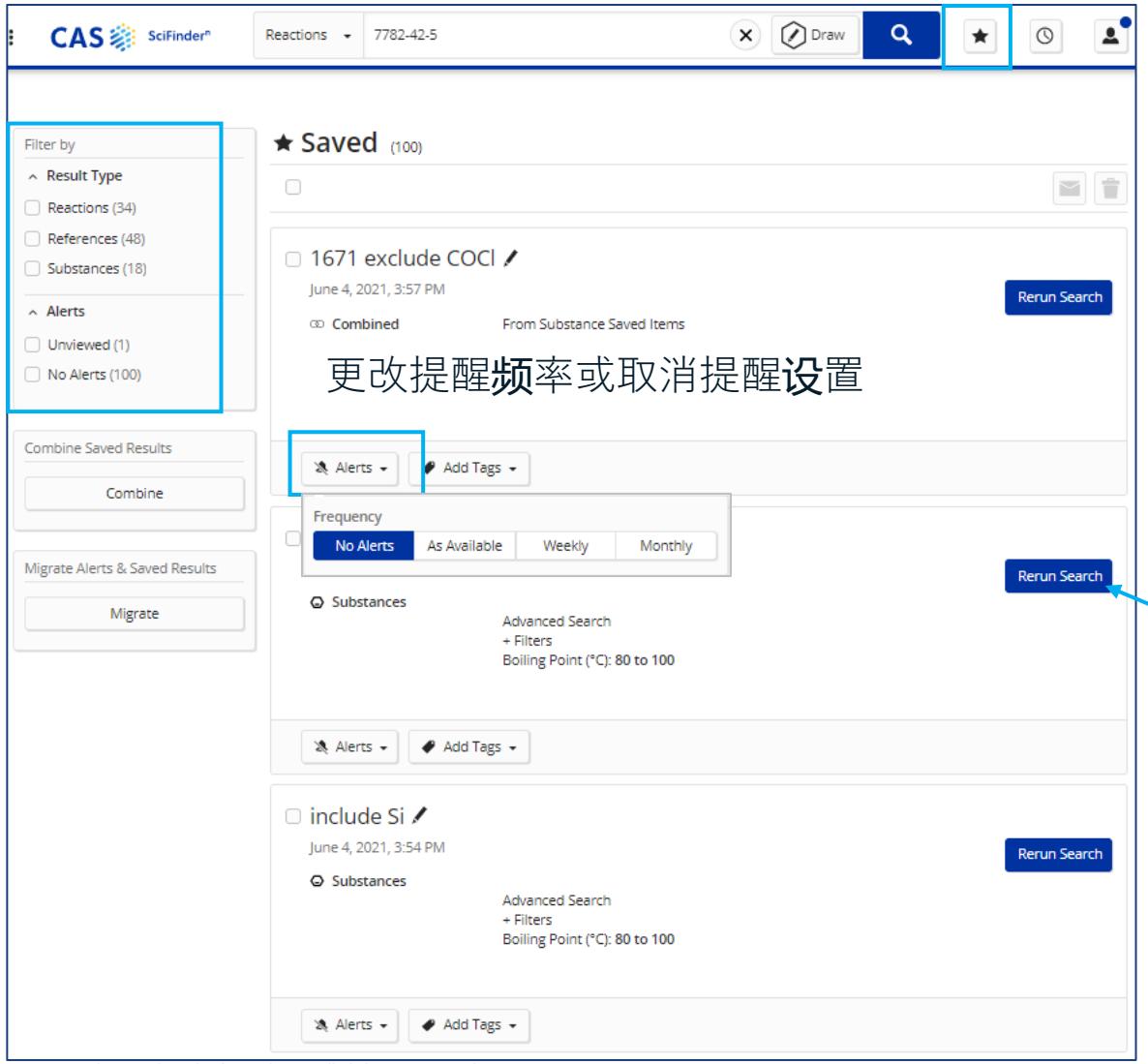






ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

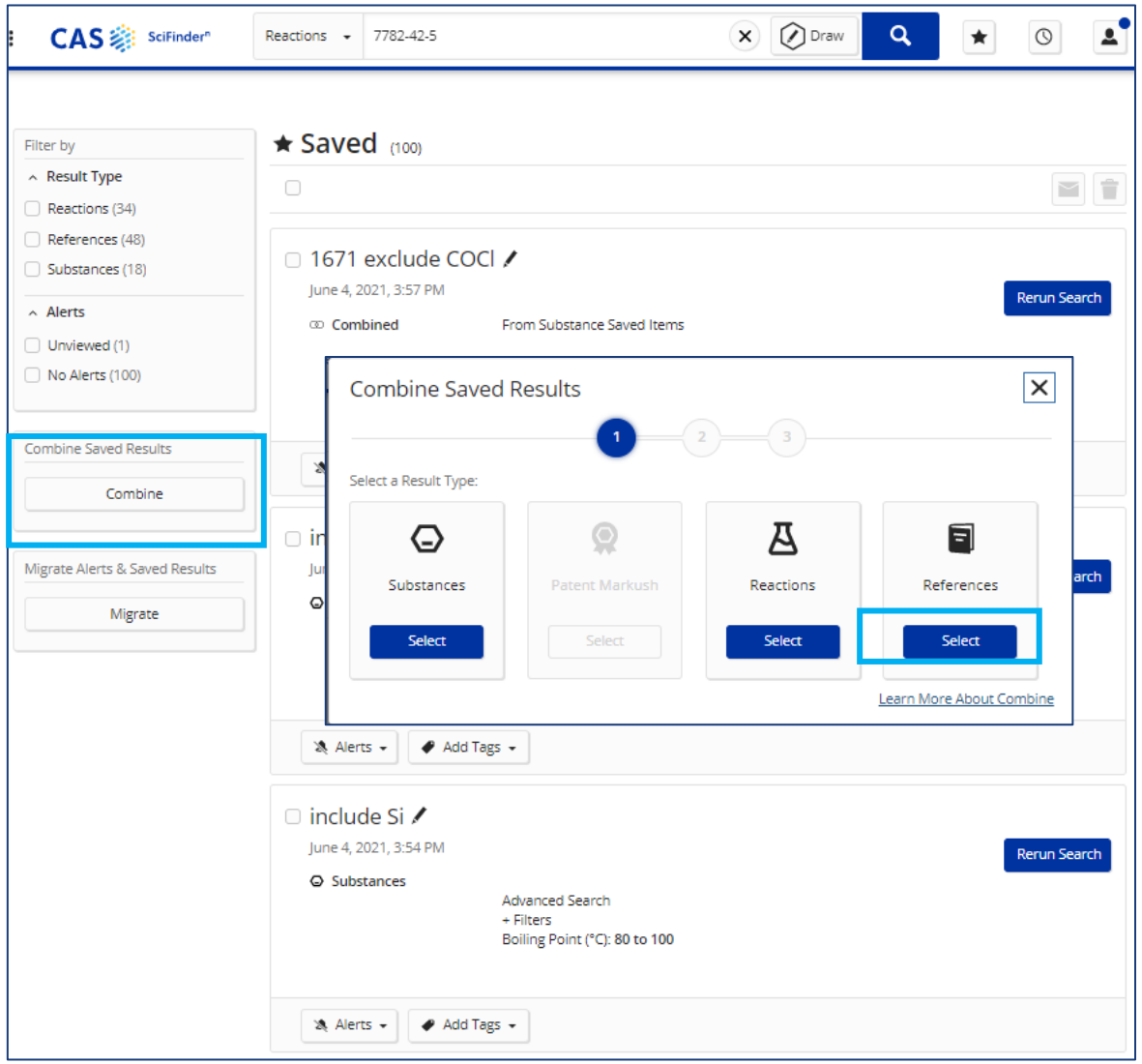
检索信息的管理--查看保存结果，更改提醒设置

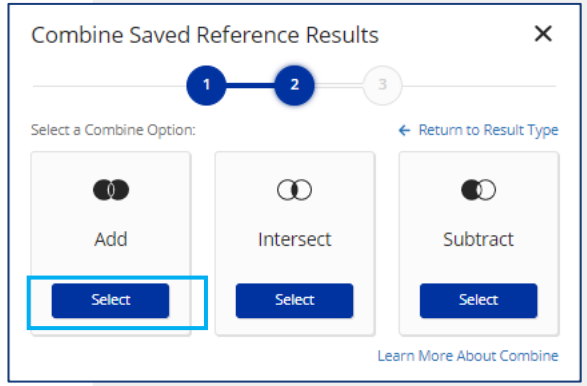


更新检索结果

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

检索信息的管理--合并保存的结果

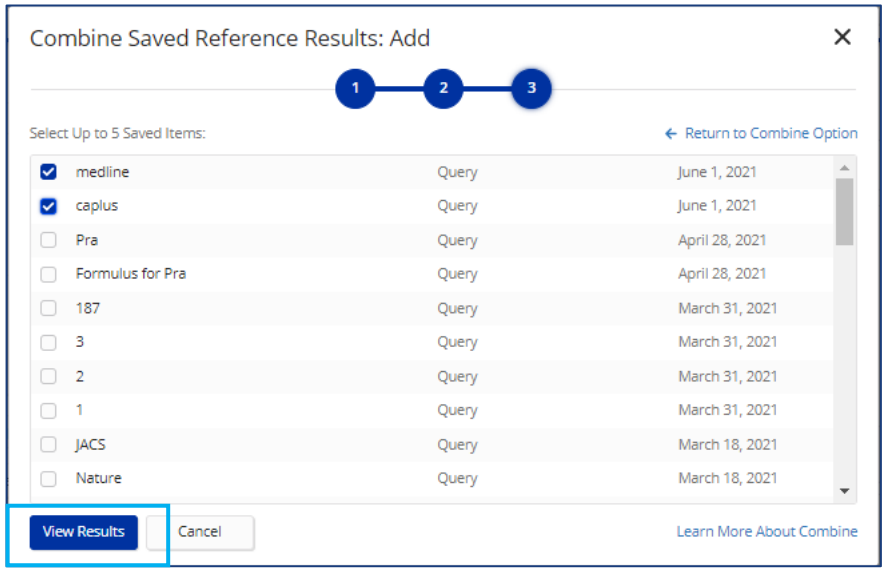


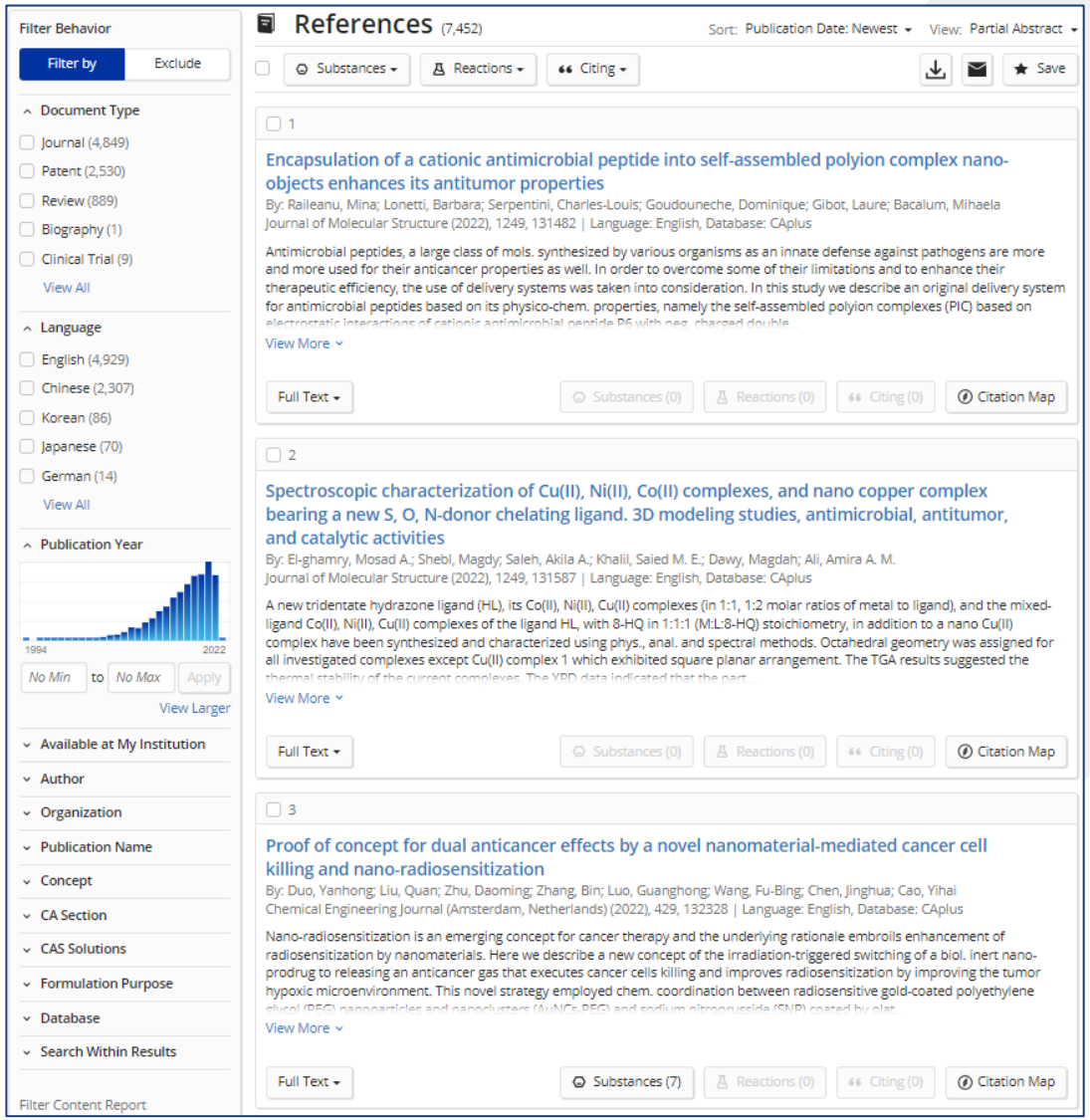


在保存的结果中点击左侧Combine按钮；

选择需要进行合并操作的结果集类型和操作类型

检索信息的管理--合并保存的结果

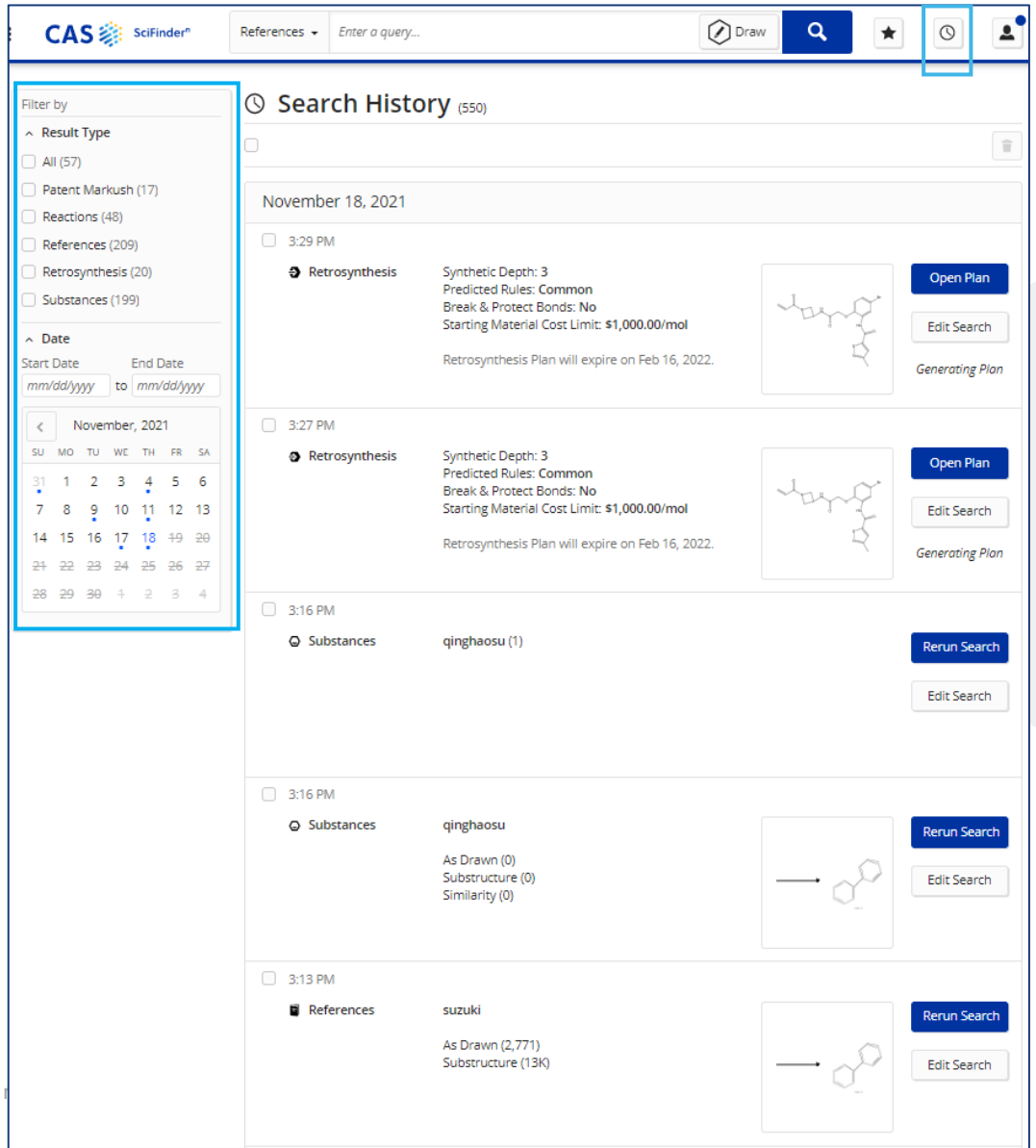




勾选需要合并的结果集， 点击View Results, 获得合并后的结果集

CAS
A division of the American Chemical Society

检索信息的管理--管理检索历史



按照检索类型或检索时间查找

重新编辑检索项

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

分析方法的获取—Analitical Methods

- 介绍
- 检索方法
- 结果详情

视频链接:
https://american-chemical-society.zoom.us/rec/play/d6Q-xA-DR_ODf7WaxdDaLaAYkIDyrc3K4vSqoixkuqJNL7S6dwrhwbguRgDYXekpphbY-mXLb0HlRbTU.wkg9K9htCp0Yq_aE

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

分析方法的类别--13大类45小类；某些子类属多个分类

Organic Compound Analysis: 天然产物分离分析， 手性分离， 活性药物成分及代谢产物分析…

Organometallics / Inorganics: 地质分析， 无机物分析， 金属有机化合物分析

Pharmacology / Toxicology: 成瘾药物检测， 有毒物检测…

Bioassays: 生物探针， 生物标定细胞实验， 生物标定药物实验， 生物医学材料分析， 生物分子/生物组织分离测定…

Water Analysis: 阴阳离子分析， 元素测定， 痕量元素分析， 废水分析， 生物标记公共卫生分析…

Historical Analysis / Dating: 考古分析， 同位素分析

Environmental Analysis: 土壤/空气/水分析， 农药残留分析…

Agricultural Applications / Analysis: 除草剂分析…

Food Analysis: 脂肪酸分析， 脂肪酸酯分析， 蛋白质分析…

Fuels / Geology / Biofuels: 生物燃料分析， 油气分析， 石油产品分析， 煤炭加工…

Miscellaneous: 化妆品分析， 爆炸物分析， 纳米材料分析…

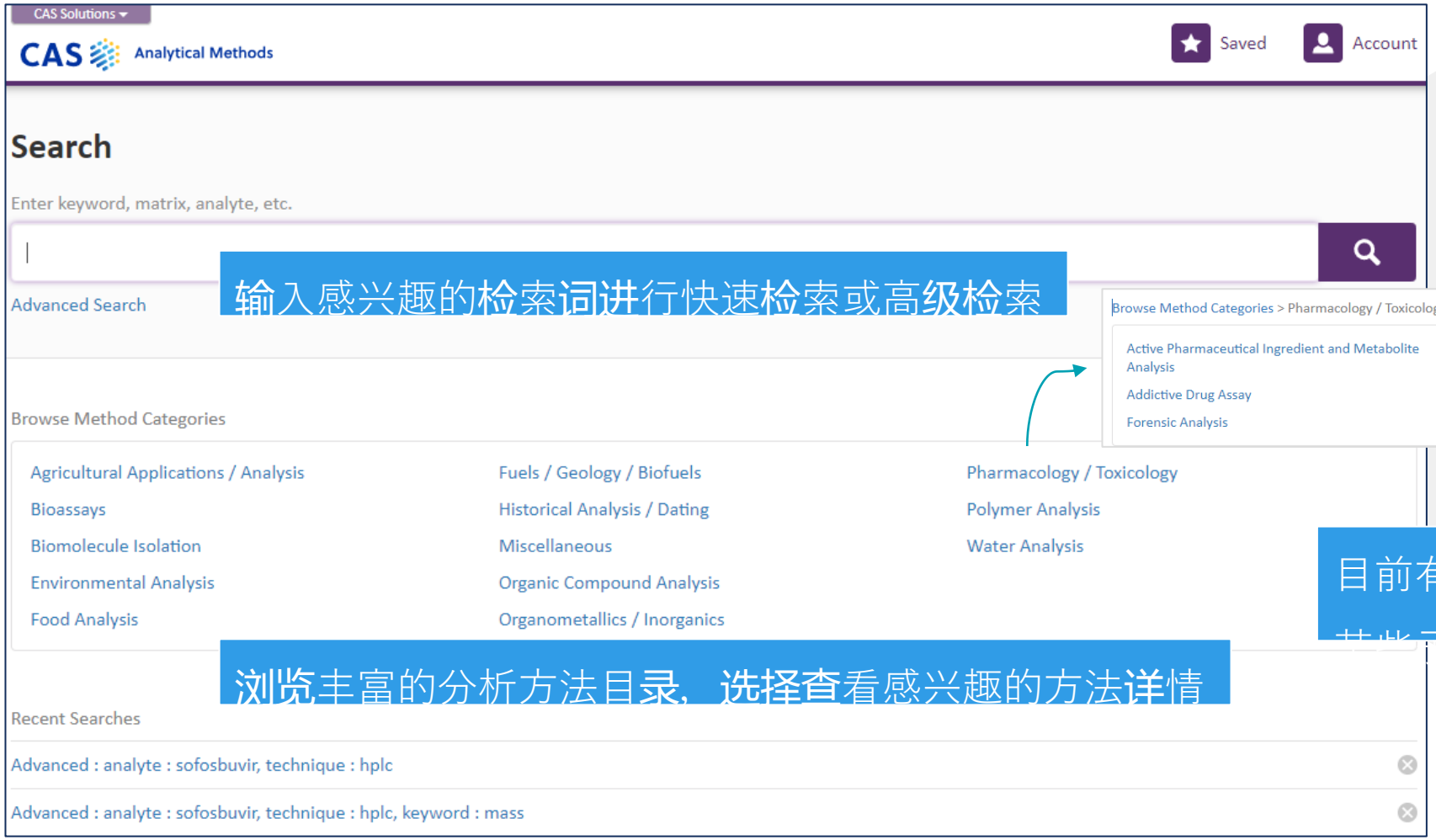
Water: 阴阳离子分析、环境分析、废水分析、微量元素分析…

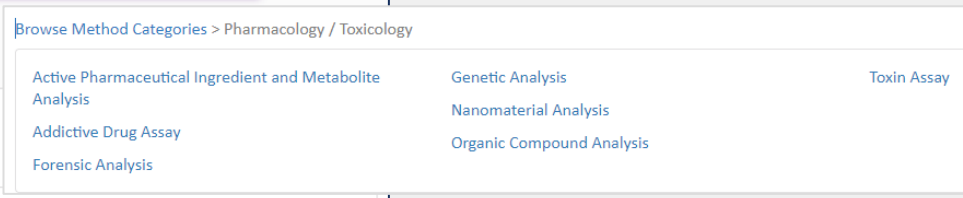
Polymer: 聚合物分析…

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

分析方法的获取—Analytical Methods

https://methods.cas.org （与SciFinder-n登录账号相同）





目前有13个大类，45个小类。

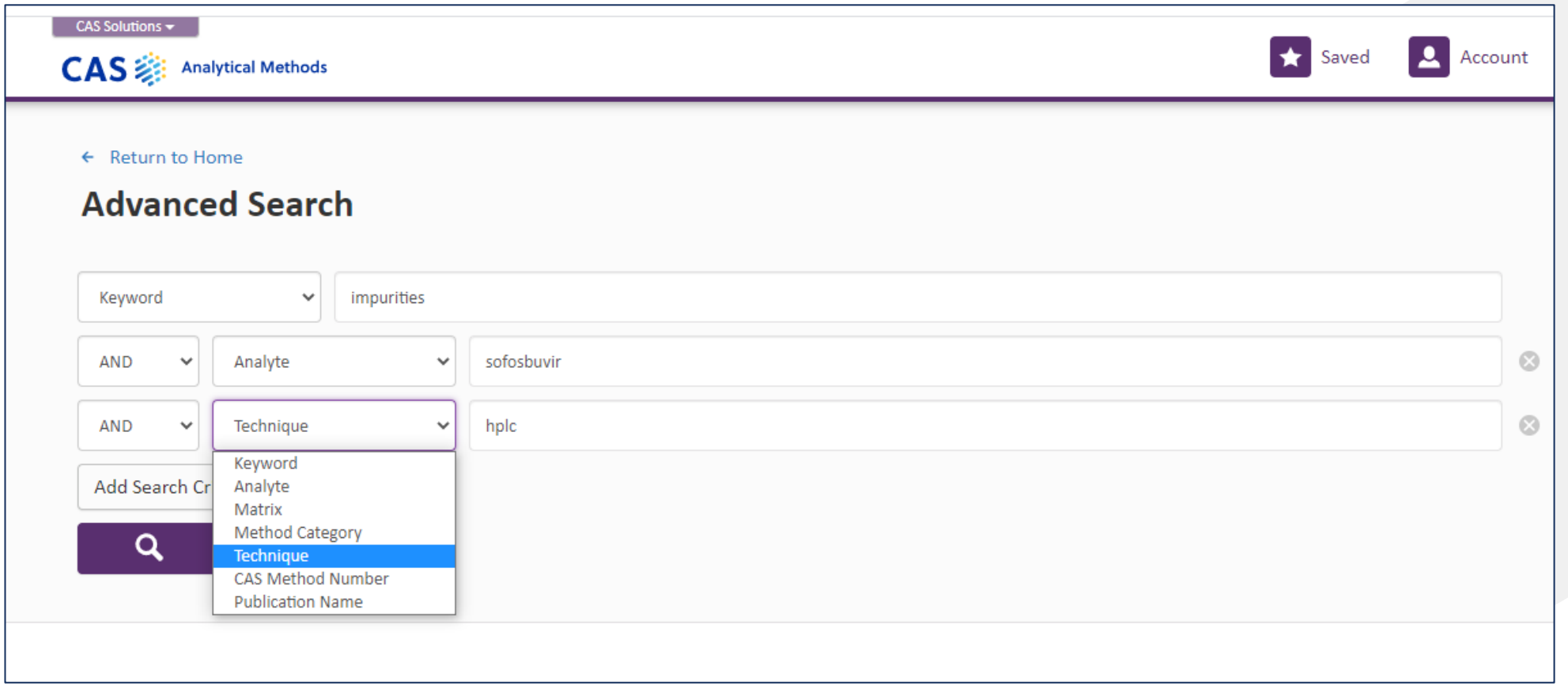
其些子类属于多种方法分类！

ACS International

CAS A division of the American Chemical Society

分析方法的获取—Analytical Methods

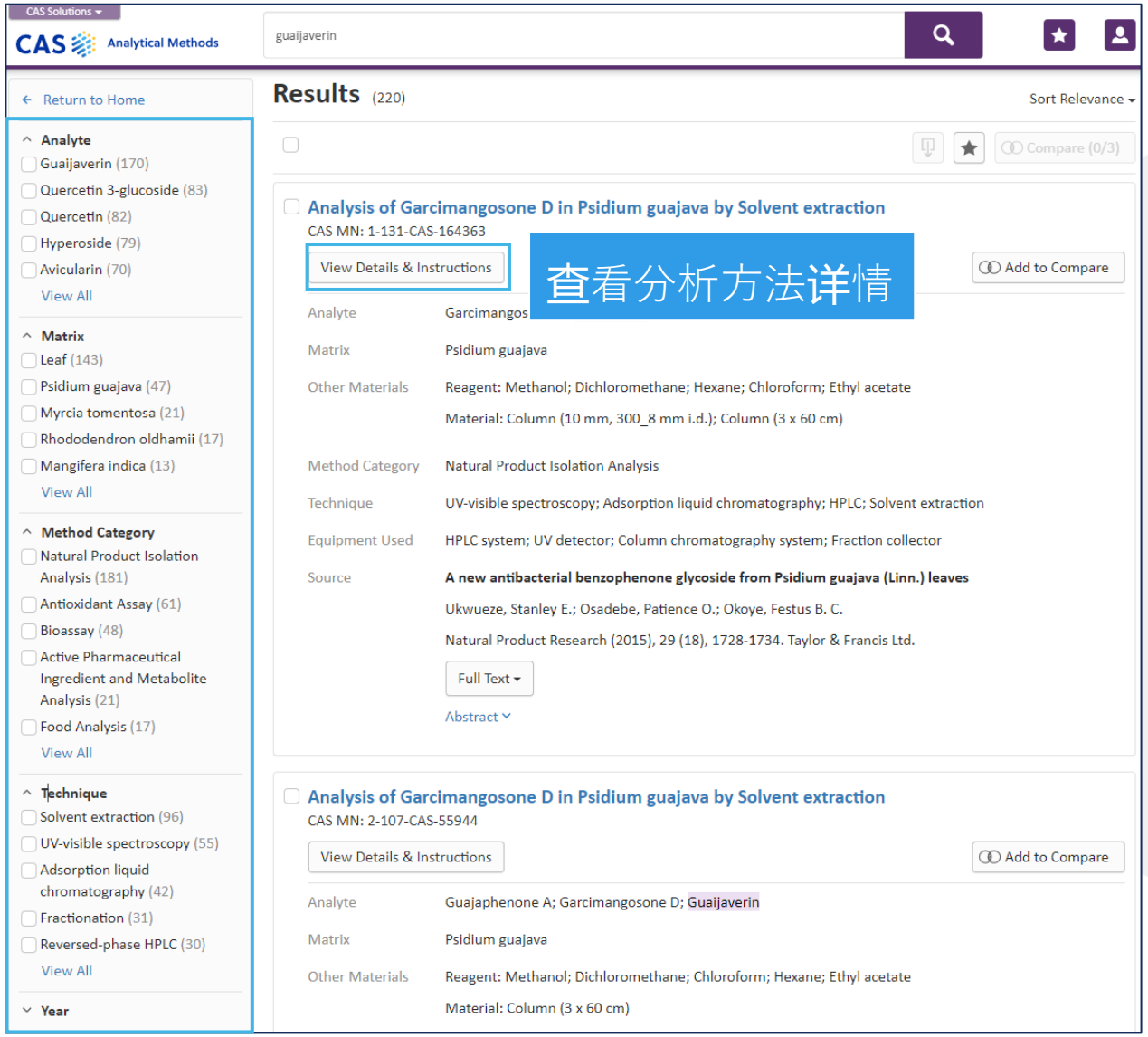
利用运算符连接不同的检索域，快速获得更相关的结果



ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

分析方法的获取—Analytical Methods

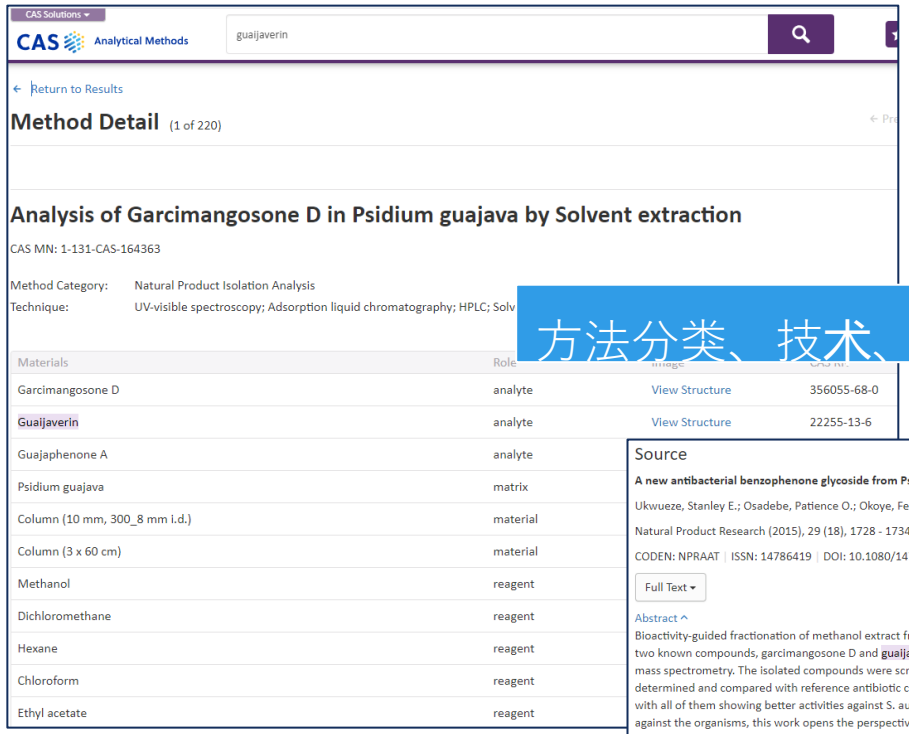


根据分析物、分析基质、方法分类、所用技术、年份筛选分析方法

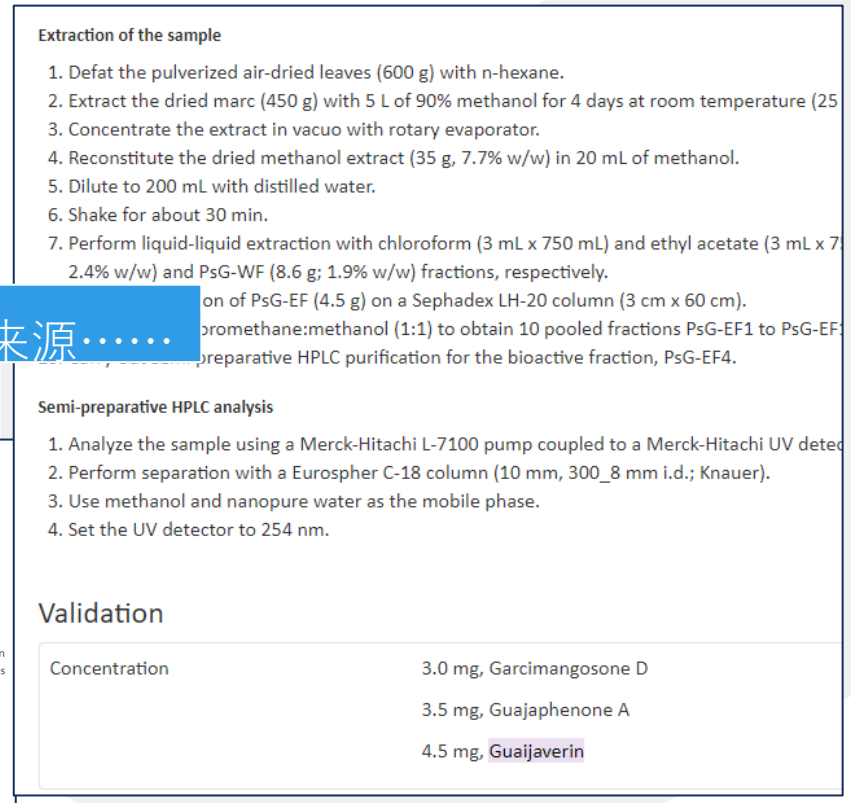
ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

分析方法详情



方法分类、技术、所用材料/物质、角色、文献来源……



实验条件、实验步骤和数据有效性验证…

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

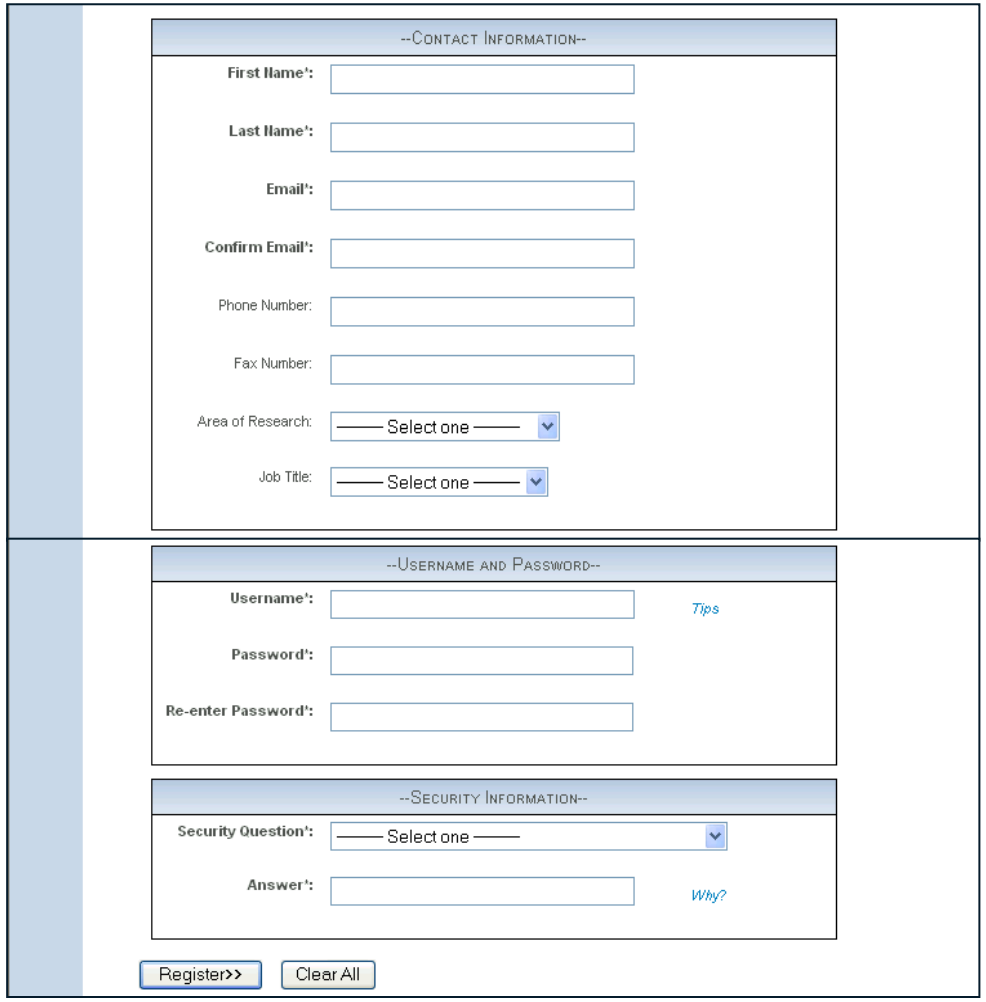
大纲

- CAS及CAS SciFinder^{n}简介
- 常见检索方式
  - 文献检索
  - 物质检索（CAS Markush检索）
  - 生物序列检索
  - 反应检索
  - 逆合成反应路线设计（CAS Retrosynthesis Tool）
  - 检索信息的管理
  - 分析方法的获取（ Analytical Methods ）
- 常见问题及解决

浏览器选择建议

- Windows 7以上用户建议升级IE到10以上，不支持IE7、IE8
- Chrome和FireFox浏览器在所有系统上的表现都优于IE浏览器
- 不建议使用360浏览器检索SciFinder，会被自动拦截相关功能或插件

如何获取CAS SciFinder账号



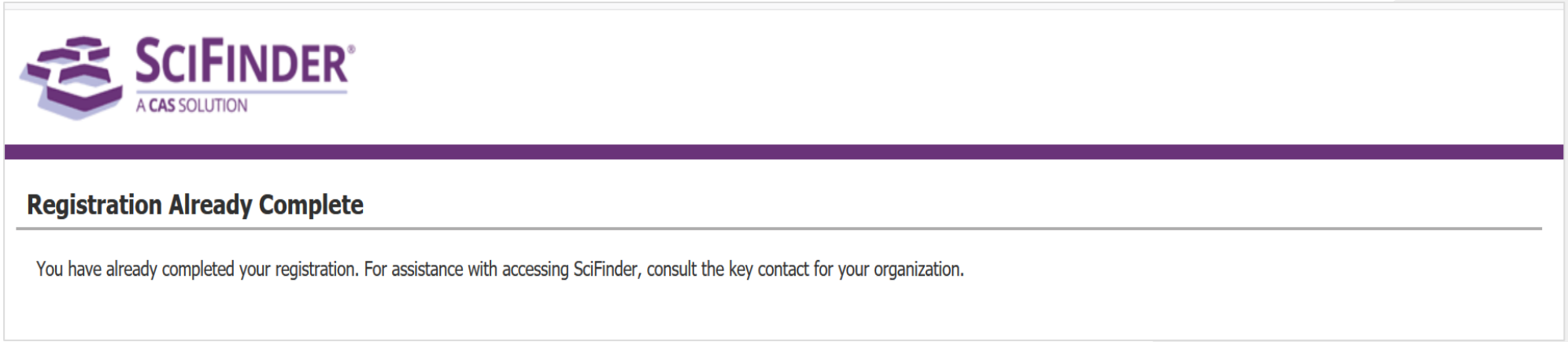
请注意：
1.必须输入真实姓名和学校邮箱。
2.用户名必须是唯一的，且包含 5-15 个字符。它可以只包含字母或字母组合、数字和/或以下特殊字符：
- -（破折号）
- _（下划线）
- .（句点）
- @（表示“at”的符号）

3.密码必须包含 7-15 个字符，并且至少包含三种以下字符：
- 字母
- 混合的大小写字母
- 数字
- 非字母数字的字符（例如 @、#、%、&、*）

例：abc@123
4.从下拉列表中选择一个密码提示问题并给出答案。
单击 Register（注册）。

登录学校图书馆网站找到CAS SciFinder数据库说明页，按照提示进行注册

如何获取CAS SciFinder账号



点击激活链接后注册成功。

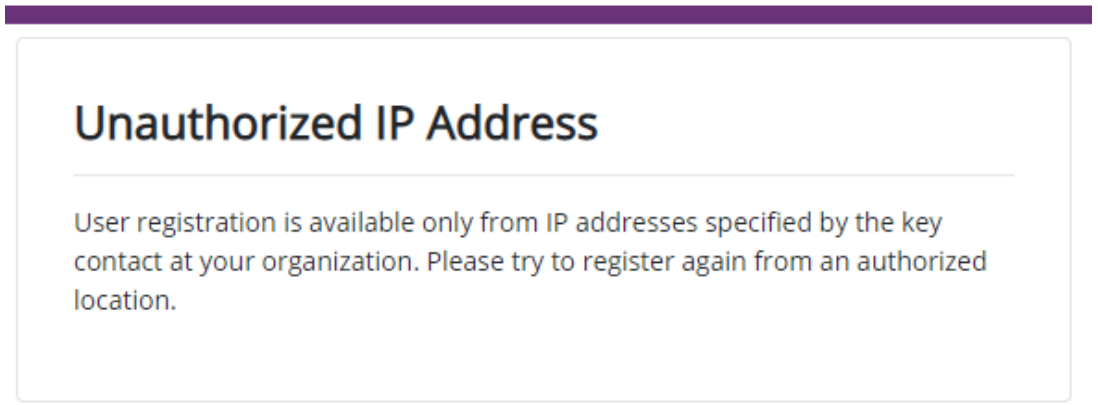
之后直接点击https://SciFinder-n.cas.org即可访问。

使用注意事项

- 一人注册一个帐号
- 实名注册，请提供真实姓名信息（中文名用汉语拼音全拼）
- 不得过量下载（以电子形式存储不超过5,000条记录）
- 不得账号分享
- 不得将账号用于非学术研究

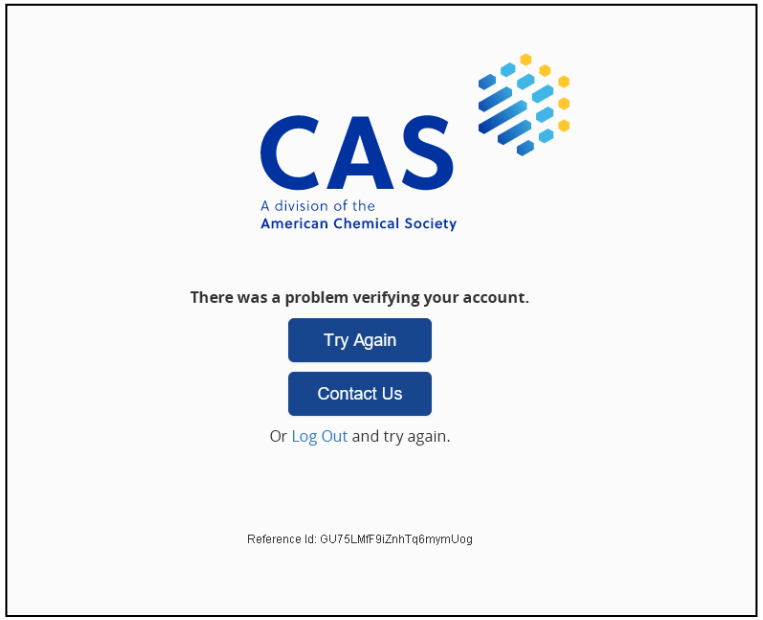
ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

常见问题



- 检查注册链接是否正确
- 确认连入校园网，且不是通过VPN连接
- 如果链接正确，且在校园内，请联系图书馆或china@acs-i.org

常见问题



- 确认账号密码是否正确
- 如果账号密码正确，请填写问题报告后联系图书馆或china@acs-i.org

2022年CAS SciFinder^{n}论坛直播日程表

	日期	主题	主讲人
基础培训	3月1日	文献信息的获取	刘萌萌
	3月8日	物质信息的获取	钱欣
	3月15日	反应信息的获取	程小燕
	3月22日	生物序列的获取	刘萌萌
	3月29日	利用CAS SciFinder^{n}顺利开题、进行文献综述	钱欣
检索策略详解	4月25日	聚合物相关信息获取策略	程小燕
	5月24日	无机与金属有机化合物相关信息获取策略	钱欣
	6月14日	光电材料相关信息获取策略	程小燕
	7月5日	农化相关信息获取策略	钱欣
	9月13日	药物结构设计与合成	程小燕
	10月11日	天然植物化学相关信息获取策略	钱欣
	11月8日	稀土材料相关信息获取策略	程小燕
	11月29日	纳米材料相关信息获取策略	钱欣
	12月20日	催化合成信息获取策略	程小燕

直播时间：

18:00 – 19:00

关注公众号：ACS美国化学会
随时观看回放，了解直播信息

CAS
A division of the
American Chemical Society

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

谢 谢！

关注我们

ACS Chemistry for Life®

运用化学的力量改善人们的生活

china@acs-i.org

+86-10-62508026/27

www.cas.org

美国化学文摘社北京代表处

ACS International

CAS A division of the American Chemical Society