

美国化学文摘社隆重发布

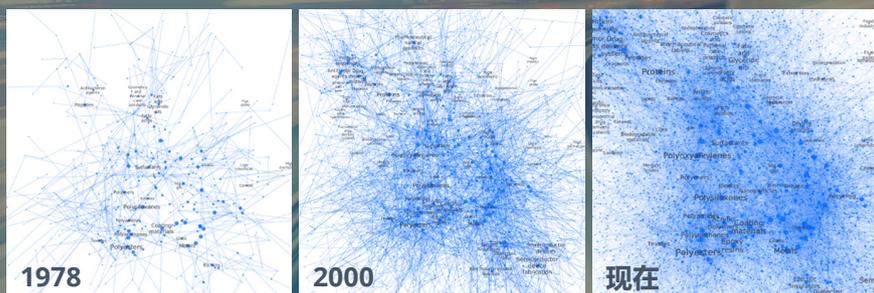


SCIFINDERⁿ

新一代权威科学研究平台

科学信息日益复杂

科学信息趋势



数量

复杂性

关联性

世界各地重要的机构与组织都在使用CAS的产品

制药公司

全球TOP50制药公司中的49个

生物技术公司

全球TOP25生物技术公司中的24个

化学公司

全球TOP50化学公司中的46个

政府组织

全球10大专利局

大学

全球TOP100高校



SciFinder[®]远远超出了我对科研信息平台功能的期望。它不仅是检索工具，还是我的“实验伙伴”，帮助实现了我的想法。在我从事药物研发工作的经历中，还没有其他任何一个信息工具能够做到这一点。

—— Chris Lipinski博士
“里宾斯基五规则”创建者

Speed Up Your Science



SCIFINDERⁿ

A CAS SOLUTION

触发灵感 成就创新



内容全面

便捷访问全球最全面的化学相关数据合集，包括由科学家标引的化学反应、物质和科学文献



高效精准

运用最先进的化学相关性搜索引擎、机器学习和预测分析，攻克海量无序科学数据带来的挑战



助力创新

通过SciFinder[®]从已有的化学信息中获得灵感，实现创新和突破



降低风险

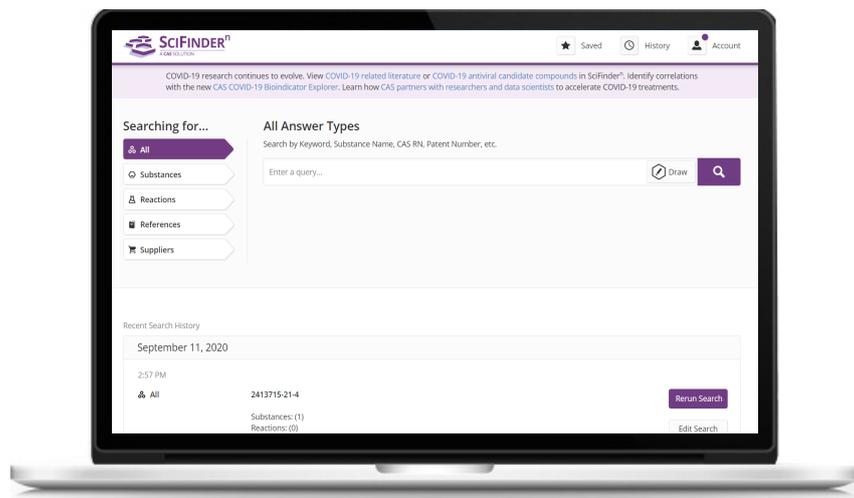
SciFinder[®]有助于理解技术全景，实现创新保护

SciFinder[®]内容

SciFinder[®]是美国化学文摘社（CAS）开发的权威科学研究工具SciFinder系列中全新的化学及相关学科智能研究平台，提供全球最全面、最可靠的化学及相关学科研究信息合集。SciFinder[®]由国际科学家团队追踪全球科技进展，每日收录汇总、标引、管理着世界上的科学专利、期刊等内容，并通过SciFinder[®]中包含的先进检索技术高效揭示、发现重要的技术信息，确保研究人员及时准确地同步最重要的研究进展。SciFinder[®]涵盖了化学及相关领域如化学、生物、医药、材料、食品、工程、农学、物理等多学科、跨学科的科技信息。SciFinder[®]收录的文献类型包括期刊、专利、会议论文、学位论文、图书、技术报告、评论和网络资源等。

SciFinder[®]包含了以下数据库：即CAplusSM

（文献数据库）、CAS REGISTRYSM（物质信息数据库）、CASREACT[®]（化学反应数据库）、MARPAT[®]（马库什结构专利信息数据库）、CHEMLIST[®]（管控化学品信息数据库）、CHEMCATS[®]（化学品商业信息数据库）、MEDLINE[®]（美国国家医学图书馆数据库）。SciFinder[®]还整合了专利解决方案PatentPak[®]、合成方法解决方案MethodsNow[®] Synthesis以及逆合成路线设计CAS Retrosynthesis Tool。



独有功能模块

专利工作流程解决方案PatentPak

PatentPak是一个强大的、全新的专利工作流程解决方案，旨在为用户减少获取专利全文及阅读专利所花费的时间。PatentPak包含来自全球 46 家主要专利局的约1,800万件专利全文，专利数量持续增加。PatentPak提供美国化学文摘社（CAS）科学家增值标引的信息，包括物质在专利中的位置信息、物质对应的结构、CAS号等，为用户节省大量查阅、解读专利的时间。通过PatentPak可直接下载带有CAS增值的物质位置标记信息、结构式等信息在内的专利全文（PDF文件）。

合成方法解决方案MethodsNow Synthesis

MethodsNow Synthesis是美国化学文摘社（CAS）开发的实验合成方法信息数据库，该数据库是迄今为止全球涵盖合成实验方法内容最多的数据库，专门为合成科学家提供。MethodsNow Synthesis提供详细的合成方法信息，包括实验操作步骤、实验原料、实验条件、实验量级、反应转化类型、合成产物谱图信息、合成产物形态等。无需查看原文，即可获得合成方法所需的全部信息。

逆合成路线设计工具CAS Retrosynthesis Tool

基于全球最大的美国化学文摘社（CAS）化学反应数据库（CASREACT），结合先进的算法和人工智能，综合多种因素如原子经济性、收率、绿色、成本等为已被报道分子/未被报道分子提供实验验证或预测的逆合成路线。为合成化学家节省时间并提供新的思路和见解。

CAPLUSSM文献数据库

收录化学及相关学科文献记录5,300多万条，包括19世纪早期至今的源自5万多种科技期刊（包括目前仍在出版的近万种期刊）文献、全球64家专利授权机构的专利文献、会议论文、技术报告、图书、学位论文、评论、会议摘要、e-only期刊、网络预印本等。可用研究主题、作者姓名、机构名称、文献标识号、期刊名、专利信息等进行检索。对于全球9个主要专利机构公布的专利，保证其著录和摘要信息在公布两天之内收入数据库。数据每日更新。

CAS REGISTRY[®]物质信息数据库

物质结构、物质CAS登记号和物质名称的权威数据库。包含超过1.65亿个物质，包括独特的有机物质、无机物质，合金、配合物、矿物质、混合物、聚合物、盐等；及超过6,800万条生物序列。是全球收录物质最多的数据库。CAS REGISTRY是最值得用户信赖的权威资源。用户可以通过化学名称、结构和CAS登记号（CAS Registry Number[®]）、属性和谱图等对物质进行识别，CAS登记号是化学物质唯一的标识。在文献中报道的物质最早可回溯至19世纪初。收录丰富的物质信息，如实验和预测性质数据，包括约80亿条属性值、数据表和谱图。数据每日更新。

CASREACT[®]化学反应数据库

可以检索各类型反应，如有机、无机、金属有机、聚合物等，获得精确、可靠、即时的信息。目前收录了1840年以来的超过1.28亿条单步、多步反应及合成制备反应信息。记录内容涉及反应条件、产率、催化剂、试剂、溶剂、实验步骤等信息。可通过结构式检索或从物质/文献链接获取反应。数据每日更新。

MARPAT[®]马库什结构专利信息数据库

MARPAT收录125余万条可检索的马库什结构，来自于1988年至今CAS收录的专利及1987年至今选择性收录的日本专利。此外，部分收录1984-1987年的英语专利和1986-1987年的法语、德语专利。其他1961年-1987年的数据来自于INPI（法国工业产权局）。2000年1月10日之后的俄罗斯专利和2008年至今的韩国专利也收录在内。可显示530,000篇含有马库什结构的专利引文信息。数据每日更新。

CHEMLIST[®]管控化学品信息数据库

是查询全球重要市场被管控化学品信息（化学名称、别名、库存状态等）的工具。数据库目前收录超过39.4万多种备案/管控物质。覆盖范围为1980年至今的150份名录及目录。数据每周更新。

CHEMCATS[®]化学品商业信息数据库

主要用于查询全球化学品供应商的联系信息、价格、产品纯度、库存等信息。记录内容还包括目录名称、订购号、物质名称、物质CAS登记号、结构式等。数据每周更新。

MEDLINE[®]美国国家医学图书馆数据库

主要收录生命科学尤其是生物医学方面的3,000万篇期刊文献，包括1946年以来约5,300种期刊文献。数据每日更新。

主题词+结构式联合检索

直接通过主题词+结构式联合检索物质或反应，节省检索时间。

The screenshot shows the SciFinder search interface. The search term 'Suzuki reaction' is entered in the search bar. Below the search bar, a chemical structure representing a Suzuki-Miyaura cross-coupling reaction is displayed and highlighted with a red box. The interface also shows options for 'References (4,324)', 'Substances', 'Reactions', and 'Cited By'.

Palladium nanoparticle-graphene hybrids as active catalysts for the Suzuki reaction
 By: Li, Yang; Fan, Xiaobin; Qi, Junjie; Ji, Junyi; Wang, Shulan; Zhang, Guoliang; Zhang, Fengbao
 Nano Research (2010), 3(6), 429-437 | Language: English, Database: CPlus

Graphene has been successfully modified with palladium nanoparticles in a facile manner by reducing palladium acetate [Pd(OAc)₂] in the presence of sodium dodecyl sulfate (SDS), which is used as both surfactant and the reducing agent. The palladium nanoparticle-graphene hybrids (Pd-graphene hybrids) are characterized by high-resolution transmission electron microscopy, atomic force microscopy, Raman spectroscopy, XPS, X-ray diffraction, and energy dispersive X-ray spectroscopy. We demonstrate that the Pd-graphene hybrids can act as an efficient catalyst for the Suzuki reaction under aqueous and aerobic conditions, with the reaction reaching completion in as little as 5 min. The influence of the preparation conditions on the catalytic activities of the hybrids is also investigated.

Full Text | Substances (10) | Reactions (3) | Cited By (225) | Citation Map

Reactions (3) View Expanded

References

Scheme 1 (1 Reaction)

Steps: 1
Yield: 30%

Suppliers (74) | Suppliers (140) | Suppliers (102)

性质检索

- 多种属性检索
- 谱图检索圈定化合物范围
- 质谱-核磁助力化学结构解析

Substance Property

Select Property: Molecular Weight | Enter Value: 125 to 350

Results based on predicted properties only:

46.07
125 to 350
>300

Add Another Property

— AND —

Experimental Spectra

Select Spectrum: Carbon-13 NMR | Enter Value: 152.3, 127.6, 133.1

(Search includes allowance of ± 2 ppm)

Example: 152.3, 127.6, 133.1
155.02 to 207.59
187

Add Another Spectra

Clear All

Substances (2,940) Sort: Relevance View: Partial

Filter by:

- Commercial Availability
 - Available (2,030)
 - Not Available (910)
- Reaction Role
 - Product (2,618)
 - Reactant (1,203)
 - Reagent (75)
 - Catalyst (51)
 - Solvent (18)
- Reference Role
 - Adverse Effect (230)
 - Analytical Study (353)
 - Biological Study (994)

Substance ID	Chemical Name	References	Reactions	Suppliers
6280-45-1	C ₁₄ H ₁₀ O ₂ 2-Methyl-5H-xanthen-9-one	84	98	11
928840-89-5	C ₁₂ H ₁₀ N ₃ 4-Phenyl-5H-pyrrolo[3,2-d]pyrimidine	5	14	6
73453-74-4	C ₁₈ H ₁₂ O ₄ 5,8-Dimethoxy-1,4-phenanthrene-1,10-dione	4	9	6

Markush检索

Markush结构检索，有助于快速判定化合物的新颖性/创造性，为化合物可专利性提供支持，避免化合物专利风险。

Patent Markush (463)

Sort: Relevance

References

1

US20050037234

Patent claim 4

PATENTPAK Full Text

397,398,400,401,403: opt. subst. by 1 or more G4

1185,1186,1188,1189,1191: opt. subst. by 1 or more G4

2

SMILES

导出物质的SMILES，利于快速将SMILES与化学结构对应，提高理解物质信息的效率。

CAS RN
1190307-88-0

CAS Name
Sofosbuvir

Substance Detail

Reactions (603)

Synthesize (528)

Create Retrosynthesis Plan

References (2,873)

Suppliers (76)

Copy SMILES to Clipboard

```
[C@]1(F)[C@@](O[C@H](COP(OC2=CC=CC=C2)[N[C@H](C(OC(C)C)=O)C)=O)[C@H]1O)(N3C(=O)NC(=O)C=C3)[H]
```

反应安全信息

标引并提供反应安全信息，警示实验中潜在的危險，确保试验安全性。

Reaction Detail (Scheme 1, Reaction 1 of 1)

← Prev Next →

📄 📧 ★ Save

Relative stereochemistry shown → Relative stereochemistry shown

Suppliers (53) 64%

Steps: 1
Yield: 64%

Step 1

Alternative Steps (0)

Stage	Reagents	Catalysts	Solvents	Conditions
1	Hydrogen peroxide	Iodine	Acetonitrile Water	5 h, 23 °C

CAS Reaction Number: 31-207-CAS-18256071

Reference

Less sensitive oxygen-rich organic peroxides containing geminal hydroperoxy groups

Notes

safety

Experimental Protocols

MethodsNow™

Products	1803406-76-9 Yield: 64%
Reactants	cis-Tetrahydro-2,5-(1H,3H)-pentalenedione
Reagents	Hydrogen peroxide
Catalysts	Iodine

Safety Information

Caution: the H₂O₂ solutions are strong oxidizers that may cause explosions. All organic peroxides are potentially explosive and require handling with extreme care. Reactions and manipulations should be run in fume hoods behind blast shields. Personal safety gear should include a face shield, lether gloves, a lether apron and hearing protection. Peroxide compound should not come into contact with strong acid, metal salts, or easily oxidized species. All reaction should be run at or below room temperature and performed on small scales. Specifically, 3 exploded upon concentrating a solution containing approximately 30 mg of crystals on the walls of the flask and shattered the flask and damaged the stir bar and but an explosion occurred upon solvent removal under reduced pressure, the flask shattered and even the stir bar was damaged.

[View Less ^](#)

Solvents Acetonitrile
Water

Procedure

- Charge a 50 ml round bottomed flask with a magnetic stir bar, I₂ (0.010 g, 0.040 mmol) in CH₃CN (1 mL).
- Add a 50 wt.% aqueous solution of H₂O₂ (0.10 mL, 1.7 mmol) to the reaction mixture.
- Add cis-1,5-dimethylbicyclo[3.3.0]octane-3,7-dione (0.20 mmol) to the solution.
- Stir the reaction mixture at room temperature (23 °C) for 5 hours.
- At this point, concentrate the reaction mixture under reduced pressure.
- Dissolve the reaction mixture in 1 mL of DCM: CH₃OH (20:1).
- Purify the product by silica gel column chromatography with 4:1 CH₂Cl₂ : EtOAc.

Transformation Formation of Hydroperoxides/ Autoxidation

Scale milligram

Characterization Data

1803406-76-9

Proton NMR Spectrum (400 MHz, CD₃OD, 23 °C, δ) OOH resonances not observed due to exchange with CD₃OD. 2.722.56 (m, 2H, CH), 2.18 (d of d, 4H, J = 14.4, 8.8 Hz), 1.86 (d of d, 4H, J = 14.4, 5.6 Hz).

Carbon-13 NMR (101 MHz, CD₃OD, 23 °C, ppm) 122.10 (peroxy C), 40.54 (CH), 39.03 (CH₂).

Elemental Analysis C₈H₁₂O₈ : C, 40.34; H, 5.92. Found: C, 39.98; H, 5.77.

State white solid.

CAS Method Number 3-614-CAS-2972525

检索历史

- 保存检索式，可随时重新运行检索
- 一键式重新运行或编辑历史检索式

Recent Search History

February 25, 2020

3:29 PM

🔍 Substances As Drawn (0)
Substructure (3,793)
Similarity (8,130)

Rerun Search

Edit Search

3:28 PM

🔍 Substances As Drawn (45)
Substructure (22K)
Similarity (8,130)

Rerun Search

Edit Search

专利

通过PatentPak可实现:

- 直接下载专利原文PDF文件
- 快速定位专利中的物质
- 节省理解专利所花费的时间
- 阅读专利族中熟知语种撰写的等同专利

The screenshot displays the PatentPak interface. On the left, there is a sidebar with 'Key Substances in Patent' and three chemical structures corresponding to CAS RNs 2298390-21-1, 2298390-22-2, and 2298390-23-3. The main area shows a patent document with claims 3, 4, 5, 6, and 7. Claim 3 describes a compound selected from a group consisting of 1-(methoxymethylene)octahydro-1H-4,7-methanoindene, 2-(methoxymethylene)octahydro-1H-4,7-methanoindene, and 1-(ethoxymethylene)octahydro-1H-4,7-methanoindene. Claim 4 describes a mixture of 1-(methoxymethylene)octahydro-1H-4,7-methanoindene and 2-(methoxymethylene)octahydro-1H-4,7-methanoindene. Claim 5 describes a fragrance formulation with specific weight percentages. Claim 6 describes a fragrance formulation further comprising a polymer. Claim 7 describes a fragrance formulation where the polymer is selected from a group including polyacrylate, polyurea, polyurethane, polyacrylamide, polyester, polyether, polyamide, poly(acrylate-co-acrylamide), starch, and silica. The interface includes navigation controls like 'PAGE', 'ZOOM', and 'DOWNLOAD'.

配方

查看配方/制剂信息, 包括配方在原文中的位置, 配方成分含量、作用等。

The screenshot shows a scientific article interface. The article title is 'Macromolecular Prodrugs of Ribavirin: Structure-Function Correlation as Inhibitors of Influenza Infectivity'. The abstract discusses the development of macromolecular prodrugs for ribavirin. A diagram shows a chicken character with a sad face, a graph of 'Ribavirin loading' (Mn), and a happy chicken character, indicating the process of loading ribavirin into a polymer. On the right, a 'Formulations' panel is open, showing the 'PMAA-Co-RBV(Si)MA Polymer: Antiviral Agents'. The panel includes a table with the following data:

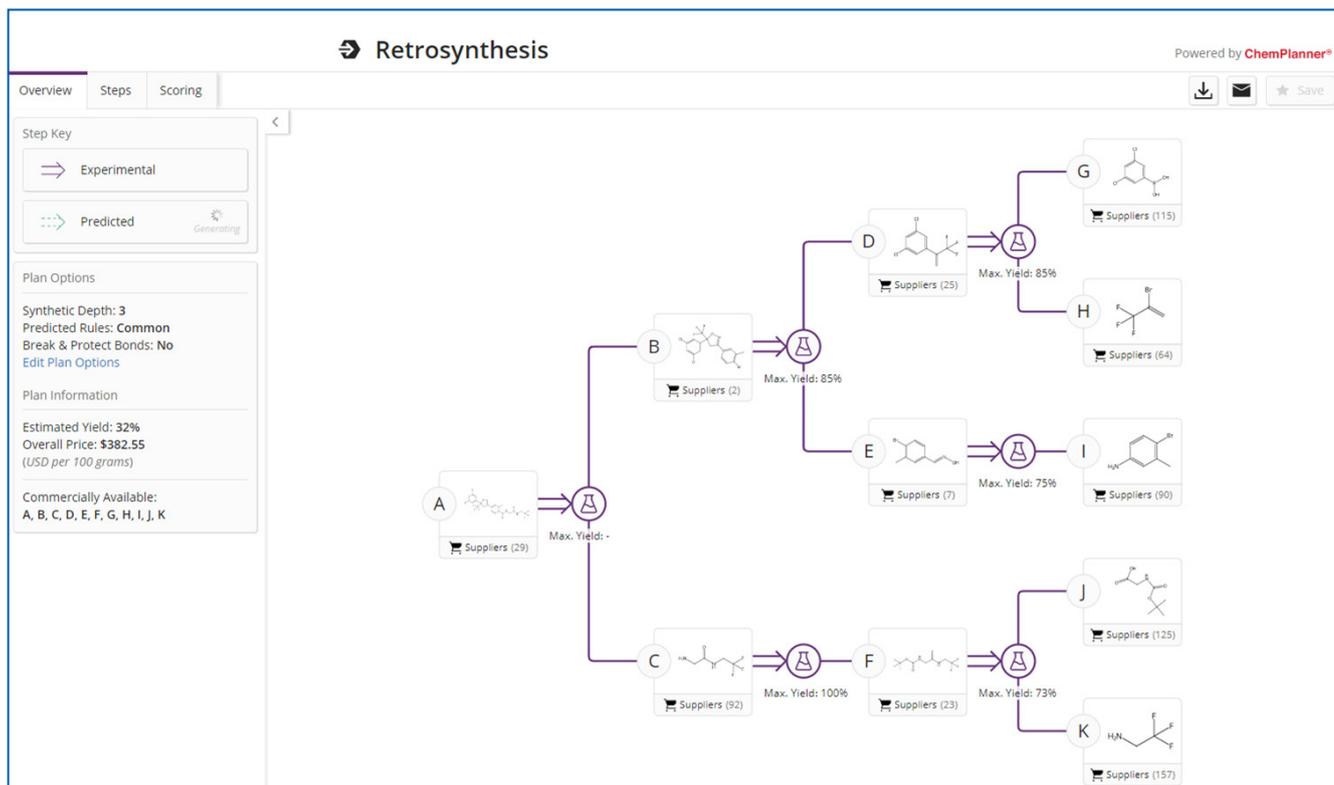
Component	Function	Amount Reported
Methacrylic acid	initiators	78 %
Azobisisobutyronitrile	reagents	0.00801 mmol
4-Cyano-4-[[[dodecylthio]thioxo methyl]thio]pentanoic acid	reagents	0.0411 mmol
Dimethylformamide	diluents	1.4 mL

The interface also includes a sidebar with 'Substances (13)', 'Reactions (18)', and 'Cited By (7)'. The 'Formulations' panel is highlighted with a red box, and the 'Substances' section in the sidebar is also highlighted with a red box.

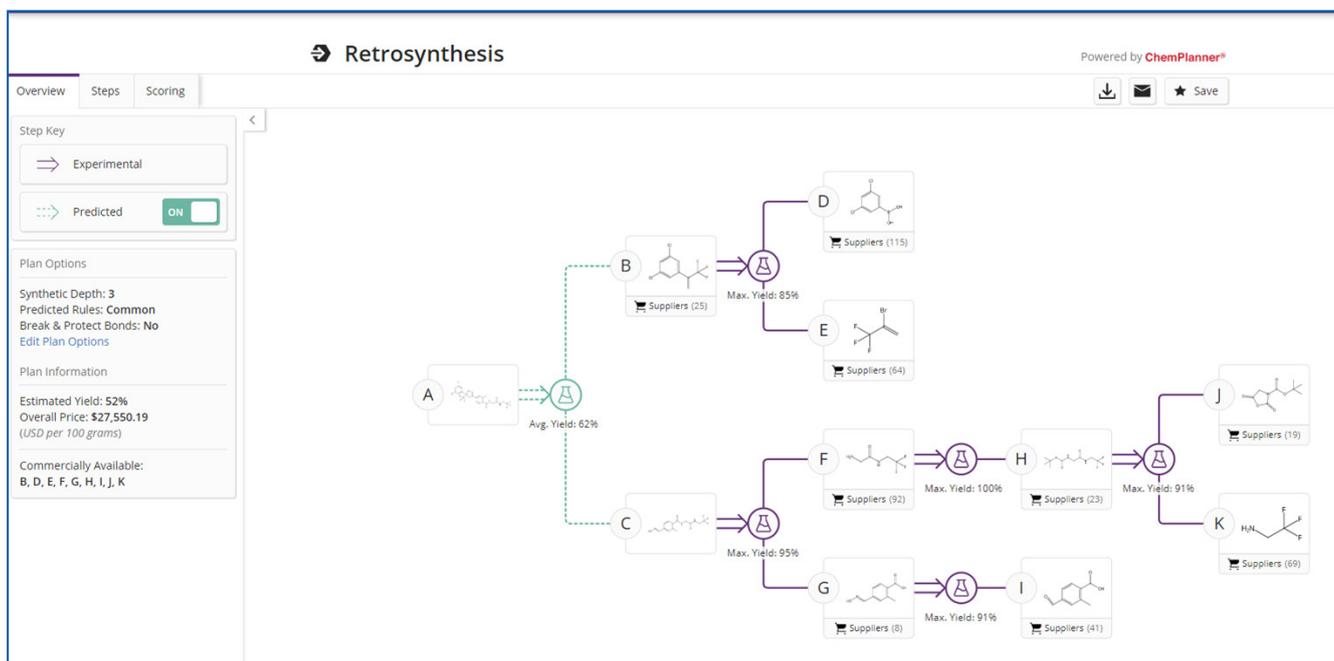
SciFinderⁿ中的Retrosynthesis逆合成路线设计工具

物质的逆合成路线设计

- 快速提供最优的逆合成路线
- 可以自定义选择替代路线
- 可以获取预测逆合成路线



现有文献报道的合成路线



预测的合成路线

合成路线设计的参数设置

在进行预测的反应路线设计时，可对合成深度、反应规则的常见性和结构中键的保护或断裂设置。

Plan Options

Powered by ChemPlanner®

Select Synthetic Depth

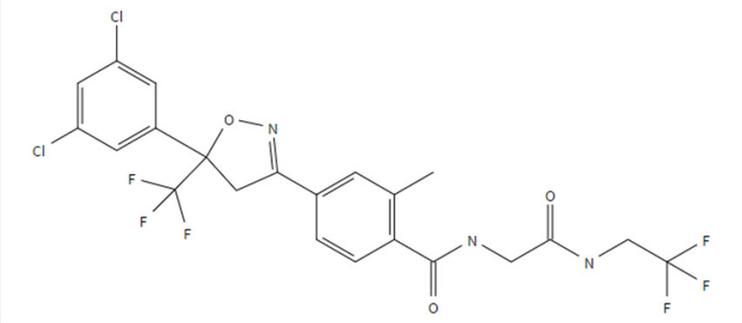
Synthetic depth restricts the number of steps generated in the plan. [Learn More.](#)

1
 2
 3
 4



Break and Protect Bonds

You may select one bond to break in the first step of the plan. Any bonds you protect will not break, though their order may change. [Learn More.](#)



Set Rules Supporting Predicted Reactions

Common rules are supported by many literature examples. Uncommon and Rare rules are supported by fewer examples, but may expose novel approaches. [Learn More.](#)

Common
 Uncommon (includes Common Rules)
 Rare (includes Common and Uncommon Rules)

自定义权重

Scoring自定义权重一共有5项，每项有4个设置（off, low, medium, high）。

- Complexity Reduction表示每一步原料结构相对于产物结构的复杂性；
- Convergence表示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；
- Yield表示反应路线中每一步的产率，这会影响目标分子的产率；
- Atom Efficiency表示每一步的原子转化经济性。

Retrosynthesis

Powered by ChemPlanner®

Overview Steps **Scoring**

Scoring Profiles

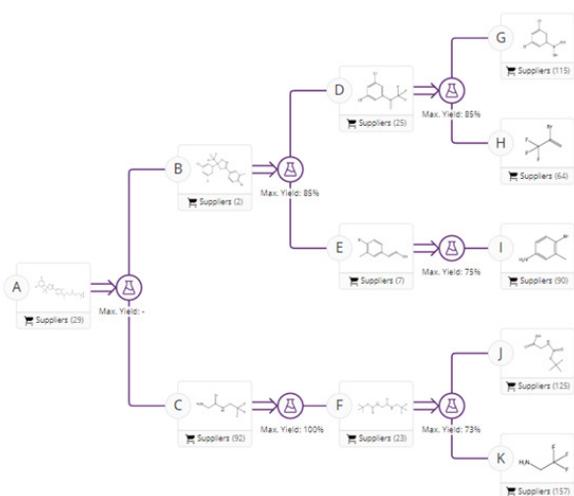
Complexity Reduction

Convergence

Evidence

Yield

Atom Efficiency





WHERE SCIENCE &
STRATEGY CONVERGE
科学与战略的结合

更多信息，请访问：

WWW.CAS.ORG/SCIFINDER-N

美国艾赛思国际有限公司北京代表处
Tel: 010-62508026/7
Email: china@acs-i.org
www.cas.org

关
注
我
们



ACS
Chemistry for Life®

运用化学的力量改善人们的生活