程小燕

xcheng@acs-i.org

美国化学文摘社北京代表处

SciFinder在材料科学中的应用

2021年3月

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

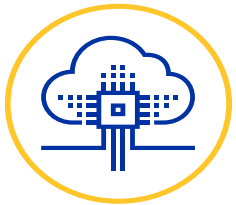
提纲

- 美国化学文摘社简介
- SciFinder简介及检索方式
  - 文献检索（PatentPak及MethodsNow-ANA的应用）
  - 物质检索
  - Markush检索
  - 反应检索（MethodsNow-SYN的应用）
  - SciPlanner
- SciFinder常见问题及解决

美国化学文摘社(CAS)隶属美国化学会(ACS)，致力于追踪、收录、标引科学信息

- 拥有超过110年的经验；创立权威化学索引《化学文摘》(CA)
- 密切追踪、标引和提炼着全球化学相关的文献（包括专利）
- 提供各种科学信息和相关技术产品与服务
- 协助创新和保护创新,助力于解决科研方面的难题与挑战

UNPARALLELED
SCIENTIFIC CONTENT



SPECIALIZED
TECHNOLOGY

UNMATCHED
HUMAN EXPERTISE

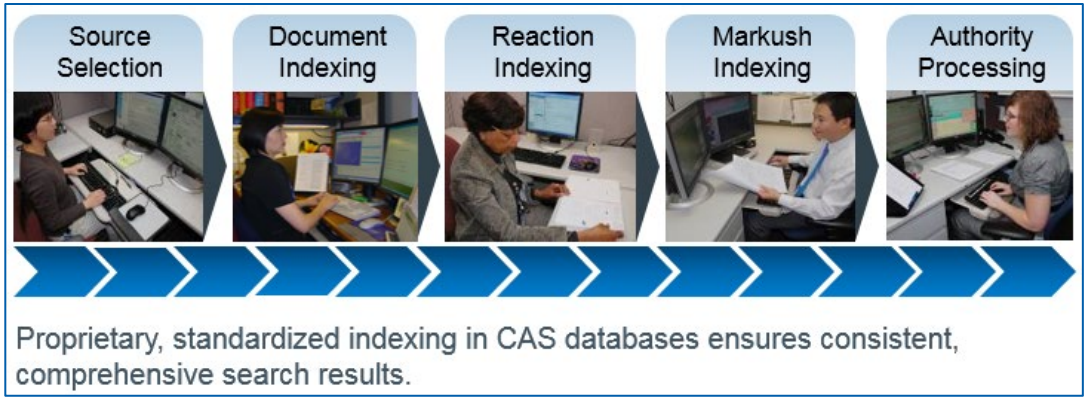
CAS®
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

CAS数据覆盖学科

- **生物化学：**
  - 农化产品管控信息、生化遗传学、发酵、免疫化学、药理学
- **有机化学各领域：**
  - 氨基酸、生物分子、碳水化合物、有机金属化合物、类固醇
- **大分子化学各领域：**
  - 纤维素、木质素、造纸；涂料、墨水
  - 染料、有机颜料；合成橡胶；纺织品、纤维
- **应用化学各领域：**
  - 大气污染、陶瓷、精油、化妆品、化石燃料、黑色金属、合金
- **物理、无机、分析化学各领域：**
  - 表面化学、催化剂、相平衡、核现象、电化学

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

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



- 检索词的同义词拓展：解决不同科研人员由于教育背景、语言、表达习惯不同导致的对同一个技术术语描述的差异。
- 用名称、分子式等检索化合物，会导致检索不全、不准的问题。CAS RN很好地解决了该问题，帮助检索人员实现精准定位化合物的目标。
- 利用SciFinder中的标引信息（Index Term，CAS RN，CAS Role），提高效率，启发思路。

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

CAS各类科学信息研究工具

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

LIMITLESS POSSIBILITIES 无限可能

定制服务应对挑战.

CONTENT SERVICES 内容服务

- 定制数据集合
  Content licensing
- 数据结构
  Data structure
- 数据平台
  Data platforms

TECHNOLOGY SERVICES 技术服务

- 数据架构
  Data architecture
- 平台整合
  Platform integration
- 检索引擎
  Search engines
- 定制解决方案
  Custom solutions

KNOWLEDGE SERVICES 知识服务

- 外包IP检索
  Outsourced IP search
- 数据分析
  Analytics
- 机会分析
  Opportunity exploration
- 技术评估
  Technical Assessment

PROFESSIONAL SERVICES 专业服务

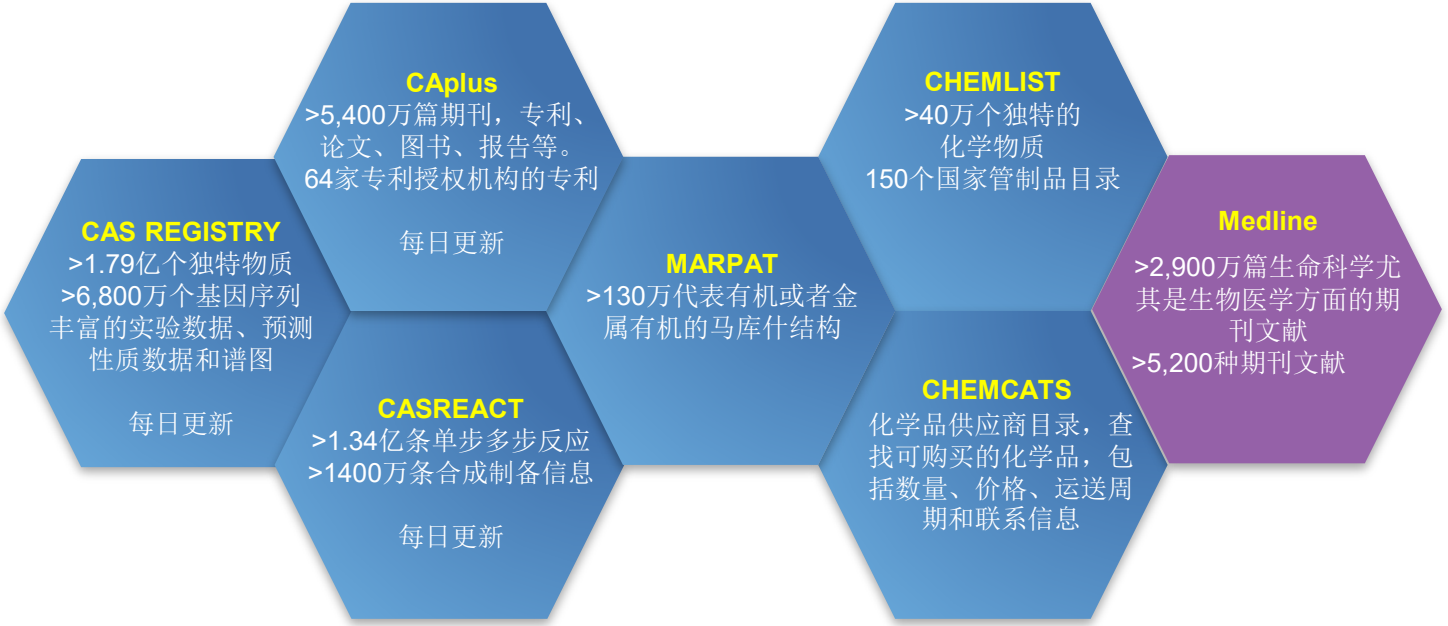
- 人员派遣
  Talent augmentation
- 咨询
  Consulting
- Technical writing
  科技写作
- Scientific analysis
  科研分析

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

提纲

- 美国化学文摘社简介
- SciFinder简介及检索方式
  - 文献检索（PatentPak及MethodsNow-ANA的应用）
  - 物质检索
  - Markush检索
  - 反应检索（MethodsNow-SYN的应用）
  - SciPlanner
- SciFinder常见问题及解决

SciFinder覆盖的数据库

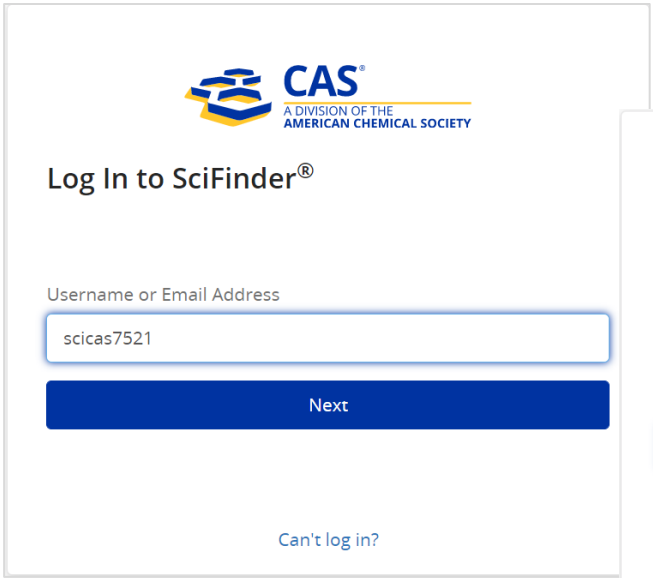


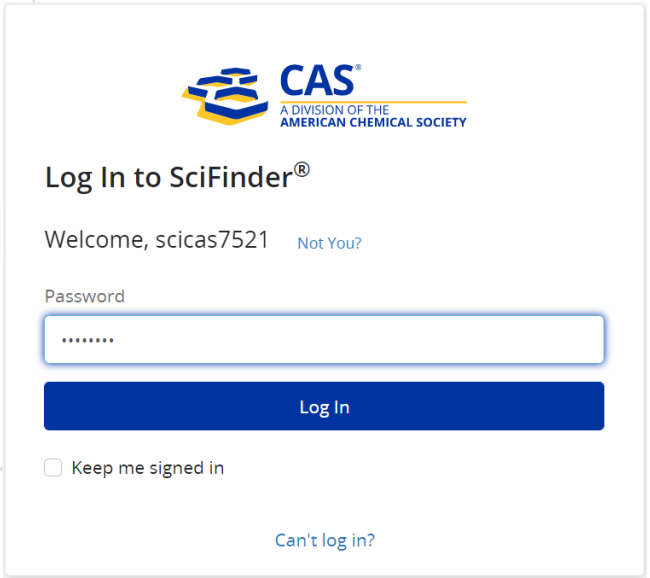
SciFinder是提供经CAS科学家人工标引内容的工具型数据库。

Sources: https://www.cas.org/about/cas-content

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder Web登录网址：https://SciFinder.cas.org





每个用户必须注册后才能使用

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder Web主界面

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder Web检索——文献检索

- 文献检索方法
  - 主题检索
  - 作者名检索
  - 机构名检索
  - 文献标识符检索
  - 期刊名称和专利信息（公开号，申请号等）
  - 从物质，反应获得文献

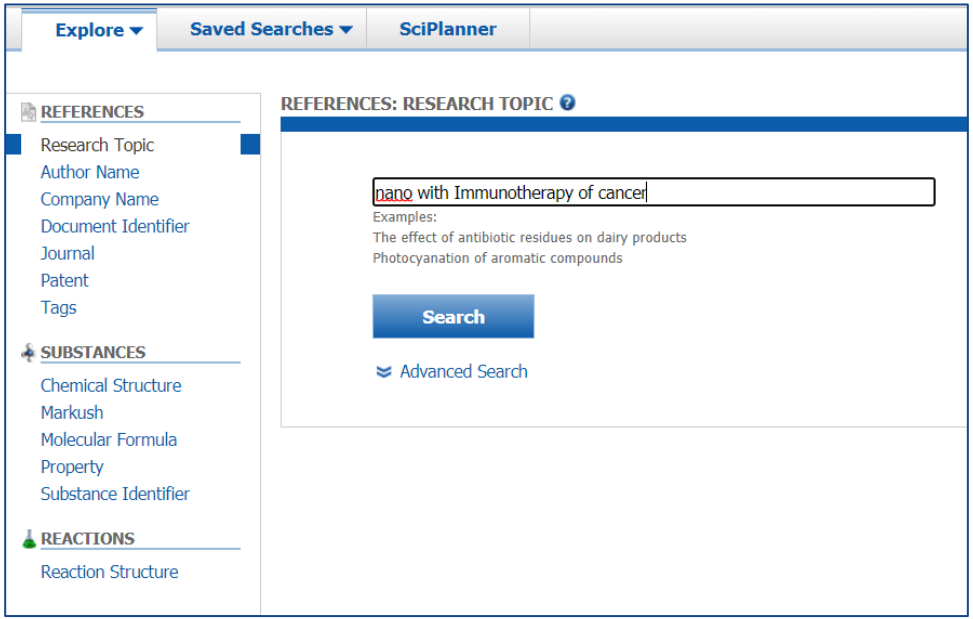
- 检索策略推荐
  - 关注某特定领域的文献：主题检索
  - 关注物质有关的文献：先获得物质，再获得文献
  - 关注某科研人员的文献：作者名检索
  - 关注某机构科研进展：机构名检索

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

文献检索——主题

主题检索： 纳米技术在癌症免疫疗法中的应用

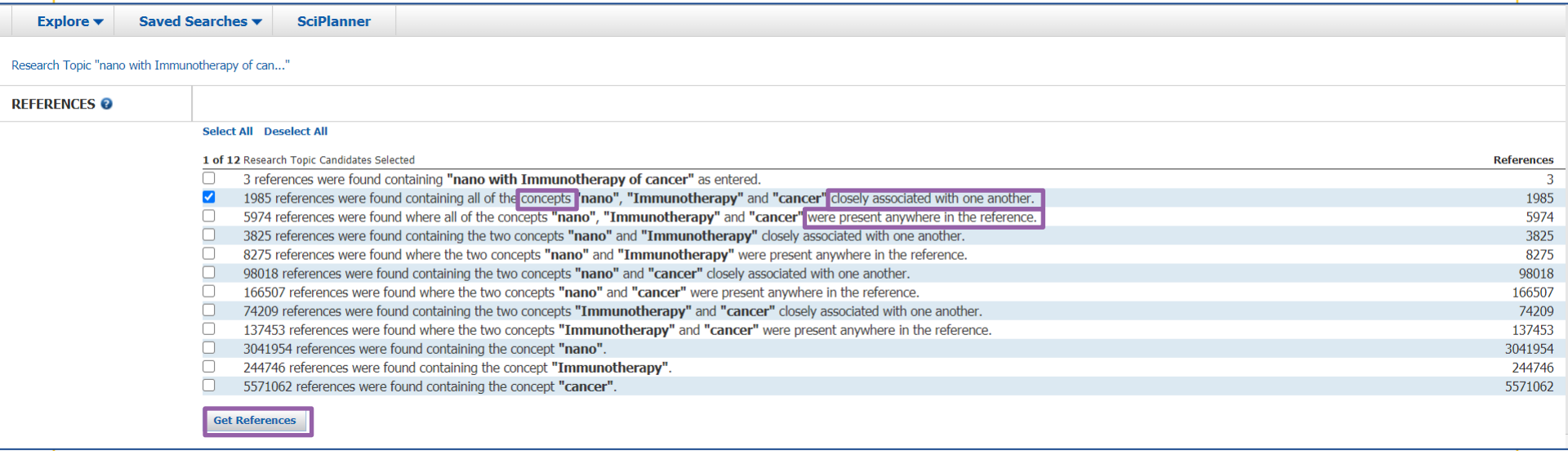
检索式：nano with Immunotherapy of cancer



关键词之间用介词连接：in, with, of...

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

主题检索的候选项



- “Concepts”表示对主题词做了同义词的扩展
- “Closely associated with one another”表示同时出现在一个句子中
- “were present anywhere in the reference”表示同时出现在一篇文献中

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

按被引次数排序——Citing References

Explore ▾ | Saved Searches ▾ | SciPlanner | Save | Print | Export

Research Topic "nano with Immunotherapy of can..." > **references (1547)**

REFERENCES | Get Substances | Get Reactions | Get Related Citations | Tools | Create Keep Me Posted Alert | Send to SciPlanner

Analyze | Refine | Categorize

Analyze by: Author Name

Lu Xiaoling	22
Wang Chao	22
Liu Zhuang	21
Huang Leaf	19
Lin Wenbin	18
Steinmetz Nicole F	17
Zhao Yongxiang	17
Moon James J	16
Kong Deling	15
Li Yaping	15

Show More

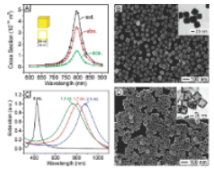
Sort by: Citing References (Accession Number / Author Name / Citing References / Publication Year / Title) | Display Options

Page: 1 of 78

1. **Photothermal Cancer Therapy: Impending Clinical Impact**
Quick View | Other Sources
By Lal, Surbhi; Clare, Susan E.; Halas, Naomi J.
From Accounts of Chemical Research (2008), 41(12), 1842-1851. | Language: English, Database: CAPLUS
~981

A review. Much of the current excitement surrounding **nanoscience** is directly connected to the promise of new **nanoscale** applications in **cancer** diagnostics and therapy. Because of their strongly resonant light-absorbing and light-scattering properties that depend on shape, noble metal **nanoparticles** provide a new and powerful tool for innovative light-based approaches. **Nanoshells**-spherical, dielec. core, gold shell **nanoparticles**-have been central to the development of photothermal **cancer** therapy and diagnostics for the past several years. By manipulating **nanoparticle** shape, researchers can tu...

2. **Immuno Gold Nanocages with Tailored Optical Properties for Targeted Photothermal Destruction of Cancer Cells**
Quick View | Other Sources
By Chen, Jingyi; Wang, Danling; Xi, Jiefeng; Au, Leslie; Siekkinen, Andy; Warsen, Addie; Li, Zhi-Yuan; Zhang, Hui; Xia, Younan; Li, Xingde
From Nano Letters (2007), 7(5), 1318-1322. | Language: English, Database: CAPLUS
~764



Gold **nanocages** with a relatively small size (e.g., ~45 nm in edge length) have been developed, and the structure of these **nanocages** was tailored to achieve strong absorption in the near-IR (NIR) region for photothermal **cancer** treatment. Numerical calcns. show that the **nanocage** has a large absorption cross section of 3.48×10^{-14} m^2, facilitating conversion of NIR irradn. into heat. The gold **nanocages** were conjugated with monoclonal antibodies (anti-HER2) to target epidermal growth factor receptors (EGFR) that are overexpressed on the surface of breast **cancer** cells (SK-BR-3). Our preliminary p...

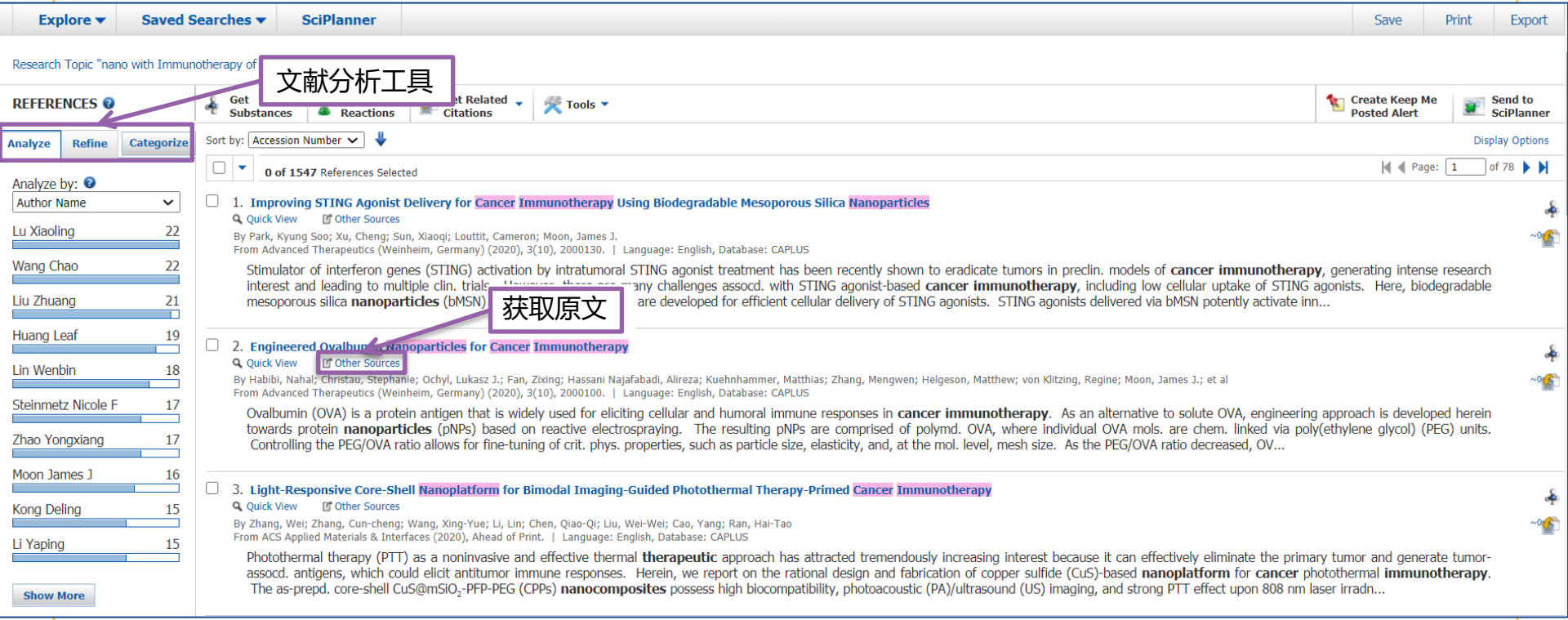
3. **Photothermal therapy with immune-adjuvant nanoparticles together with checkpoint blockade for effective cancer immunotherapy**
Quick View | Other Sources
By Chen, Qian; Xu, Ligeng; Liang, Chao; Wang, Chao; Peng, Rui; Liu, Zhuang
From Nature Communications (2016), 7, 13193. | Language: English, Database: CAPLUS
~405

A **therapeutic** strategy that can eliminate primary tumors, inhibit metastases, and prevent tumor relapses is developed herein by combining adjuvant **nanoparticle**-based photothermal therapy with checkpoint-blockade **immunotherapy**. Indocyanine green (ICG), a photothermal agent, and imiquimod (R837), a Toll-like-receptor-7 agonist, are co-encapsulated by poly(lactic-co-glycolic) acid (PLGA). The formed PLGA-ICG-R837 **nanoparticles** composed purely by three clin. approved components can be used for near-IR laser-triggered photothermal ablation of primary tumors, generating tumor-assocd. antigens, whi...

Citing Reference: 帮助找到最重要的文献

CAS® A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

文献结果集

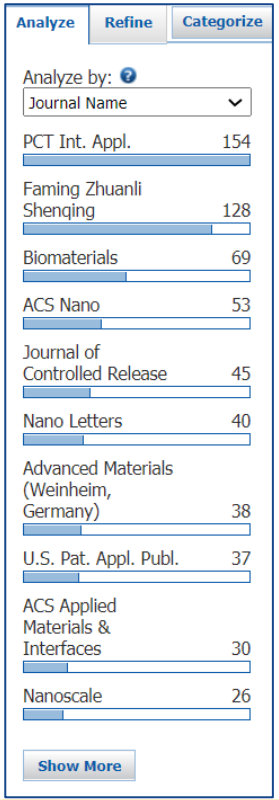


SciFinder提供强大的文献处理工具，帮助处理文献

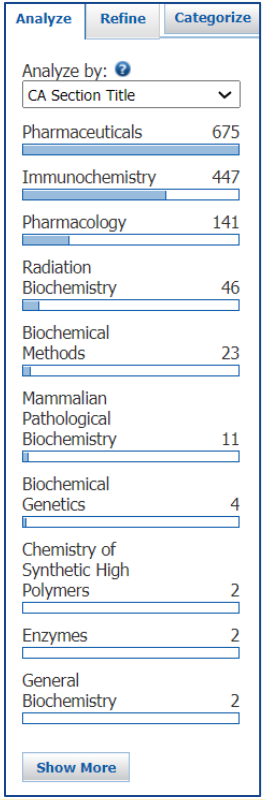
CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

分析文献结果集——Analyze

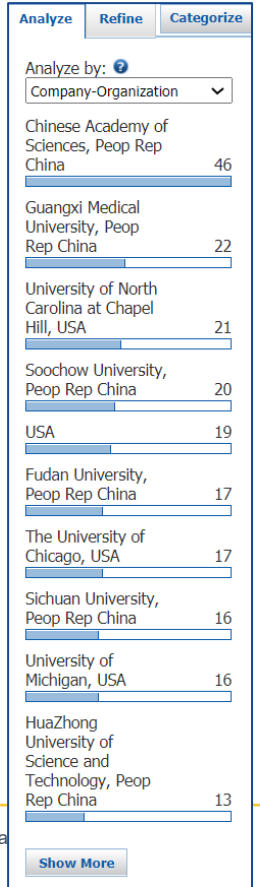
期刊



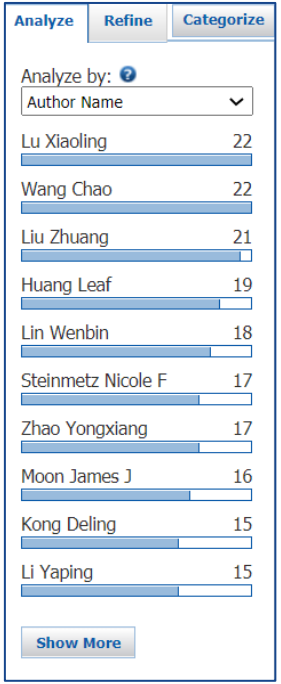
涉及学科领域



本领域研究机构、合作伙伴、竞争对手

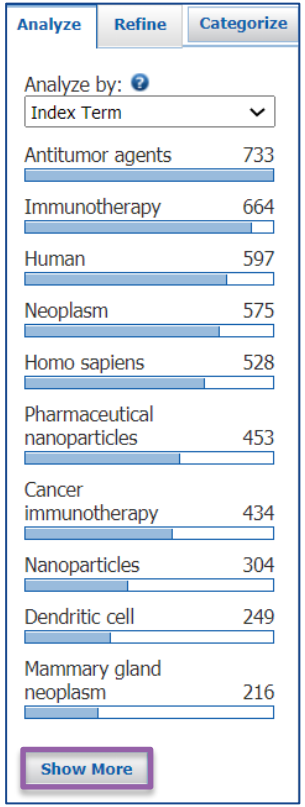


本领域研究人员



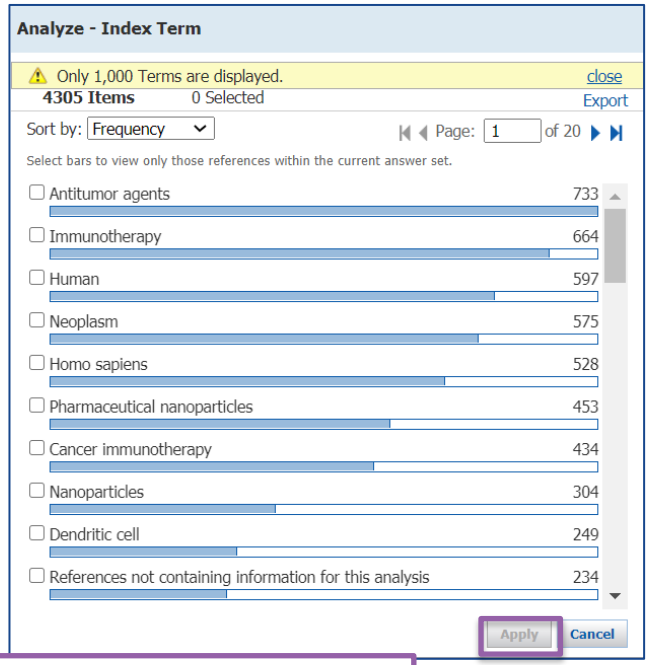
CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

分析文献结果集——Analyze



Index Term：

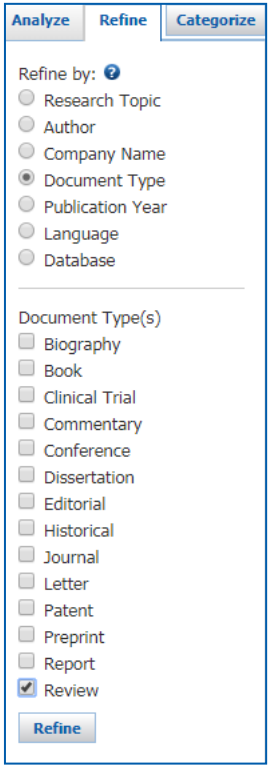
帮助用户了解涉及到的重要技术术语，并修正检索词

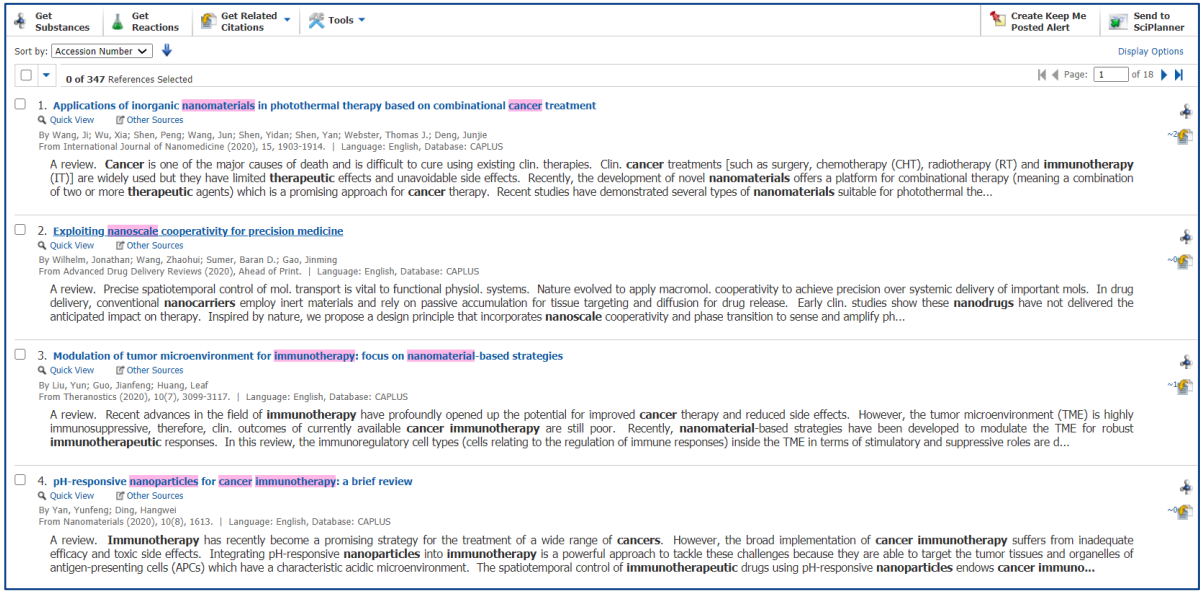


选择感兴趣的内容，点击Apply

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

筛选文献结果集——Refine



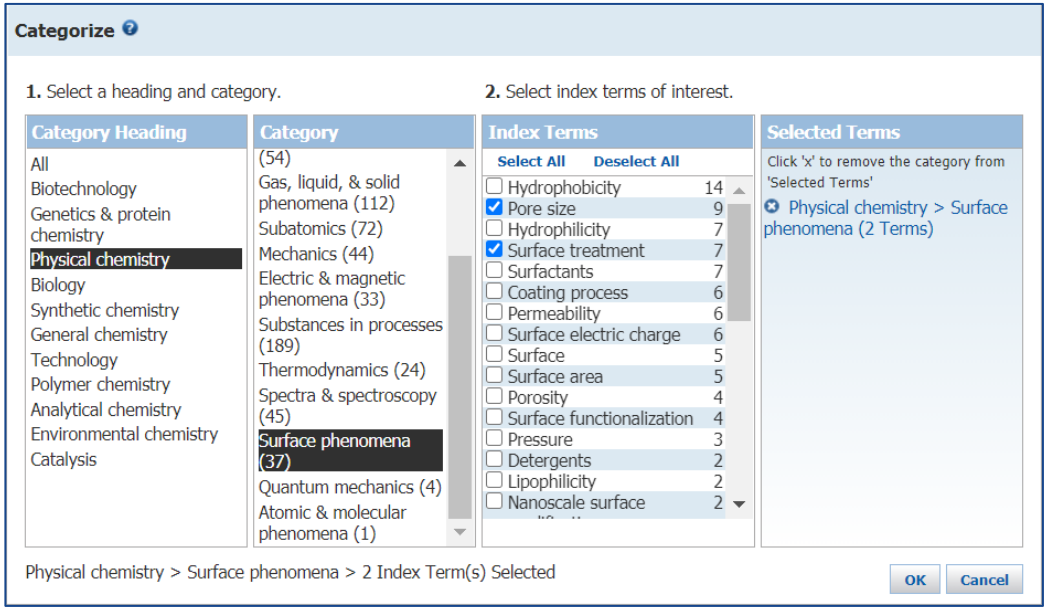


Refine：帮助用户迅速获得需要的文献

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

分类文献结果集——Categorize

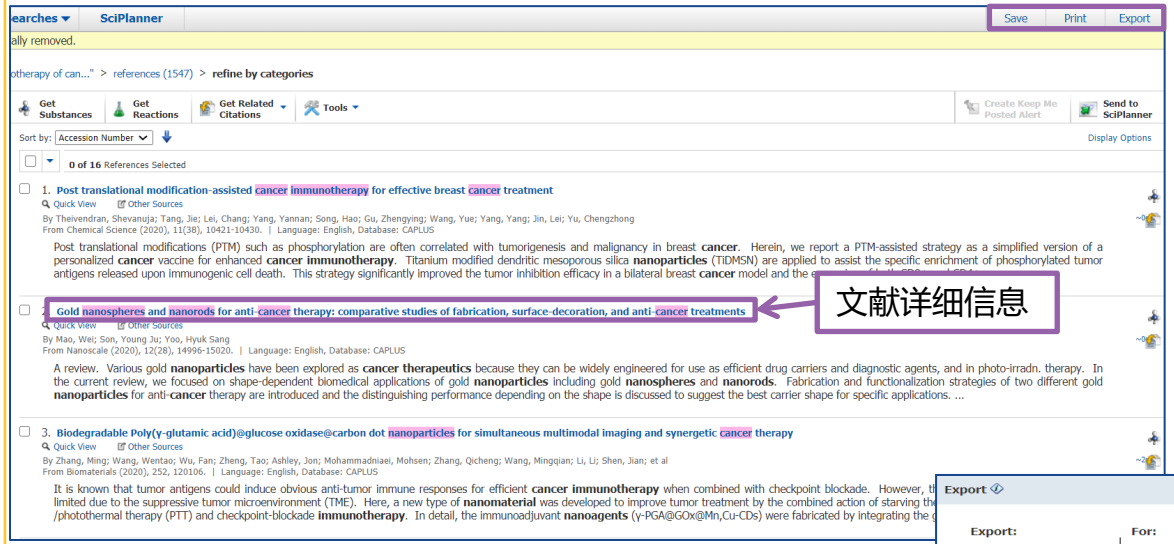
学科领域主分类　学科领域副分类　Index Term　选中的Index Term



Categorize学科分类功能，基于Index Term，根据大学科方向对文献进行自动分类。

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

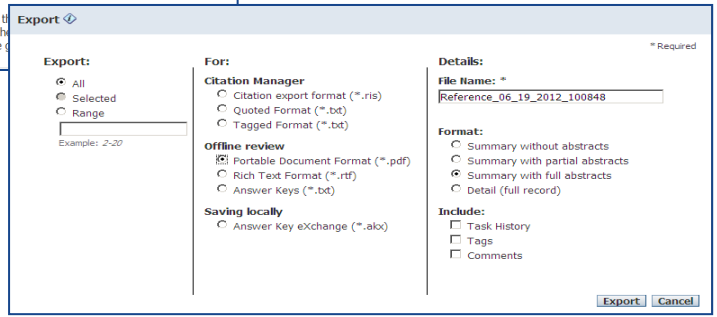
文献结果集的保存——Save，Print，Export



Save：保存在服务器上，方便以后登陆查看，每次可存2万条记录。

Export：导出至本地电脑。

Print：打印成PDF格式



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

Offline Review：保存成PDF，RTF等格式，用于脱机浏览

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

文献信息——题录、摘要、索引

2. Gold nanospheres and nanorods for anti-cancer therapy: comparative studies of fabrication, surface-decoration, and anti-cancer treatments

By: Mao, Wei; Son, Young Ju; Yoo, Hyuk Sang

A review. Various gold nanoparticles have been explored as cancer therapeutics because they can be widely engineered for use as efficient drug carriers and diagnostic agents, and in photo-irradn. therapy. In the current review, we focused on shape-dependent biomedical applications of gold nanoparticles including gold nanospheres and nanorods. Fabrication and functionalization strategies of two different gold nanoparticles for anti-cancer therapy are introduced and the distinguishing performance depending on the shape is discussed to suggest the best carrier shape for specific applications. Moreover, recent advances in anti-cancer immunotherapy using gold nano-carriers are discussed. Thus, this comparative review can be helpful in deciding on suitable shapes and surface-modification strategies for prepg. various gold nanoparticle-based therapeutics in anti-cancer therapy.

Indexing

Pharmacology (Section1-0)

Concepts 重要概念

Diagnosis
Nanocarriers
Nanorods
Photothermal therapy
Therapy
Immunotherapy
Nanoparticles
Nanospheres
Surface treatment

comparative studies of fabrication, surface-decoration, and anti-cancer treatments of gold nanospheres and nanorods

Substances 重要物质

7440-57-5 Gold

comparative studies of fabrication, surface-decoration, and anti-cancer treatments of gold nanospheres and nanorods

Technical or engineered material use; Therapeutic use; Biological study; Uses

Supplementary Terms

gold nanoparticle anticancer therapy surface decoration review

Citations

Ahn, S; Adv Healthcare Mater 2014, 3, 1194
Ajnai, G; J Exp Clin Med 2014, 6, 172
Akiyama, Y; J Controlled Release 2009, 139, 81
Alexandridis, P; Chem Eng Technol 2011, 34, 15
Alhasan, A; Anal Chem 2012, 84, 4153
Ali, M; Biomaterials 2016, 102, 1
Ali, M; J Phys Chem C 2019, 123, 15375
Allen, J; J Colloid Interface Sci 2017, 505, 1172
Almeida, J; Nanomedicine 2014, 10, 503
Almeida, J; Small 2015, 11, 1453

QUICK LINKS
0 Tags, 0 Comments

SOURCE
Nanoscale
Volume12
Issue28
Pages14996-15020
Journal; General Review; Online Computer File
2020
CODEN:NANOHL
ISSN:2040-3372
DOI:10.1039/d0nr01690j

COMPANY/ORGANIZATION
Department of Biomedical Materials Engineering
Kangwon National University
Chuncheon, S. Korea 24341

ACCESSION NUMBER
2020:1210714
CAPLUS

PUBLISHER
Royal Society of Chemistry

LANGUAGE
English

文献详情界面包括：

- 标题
- 摘要
- 文献中重要的技术术语
- 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

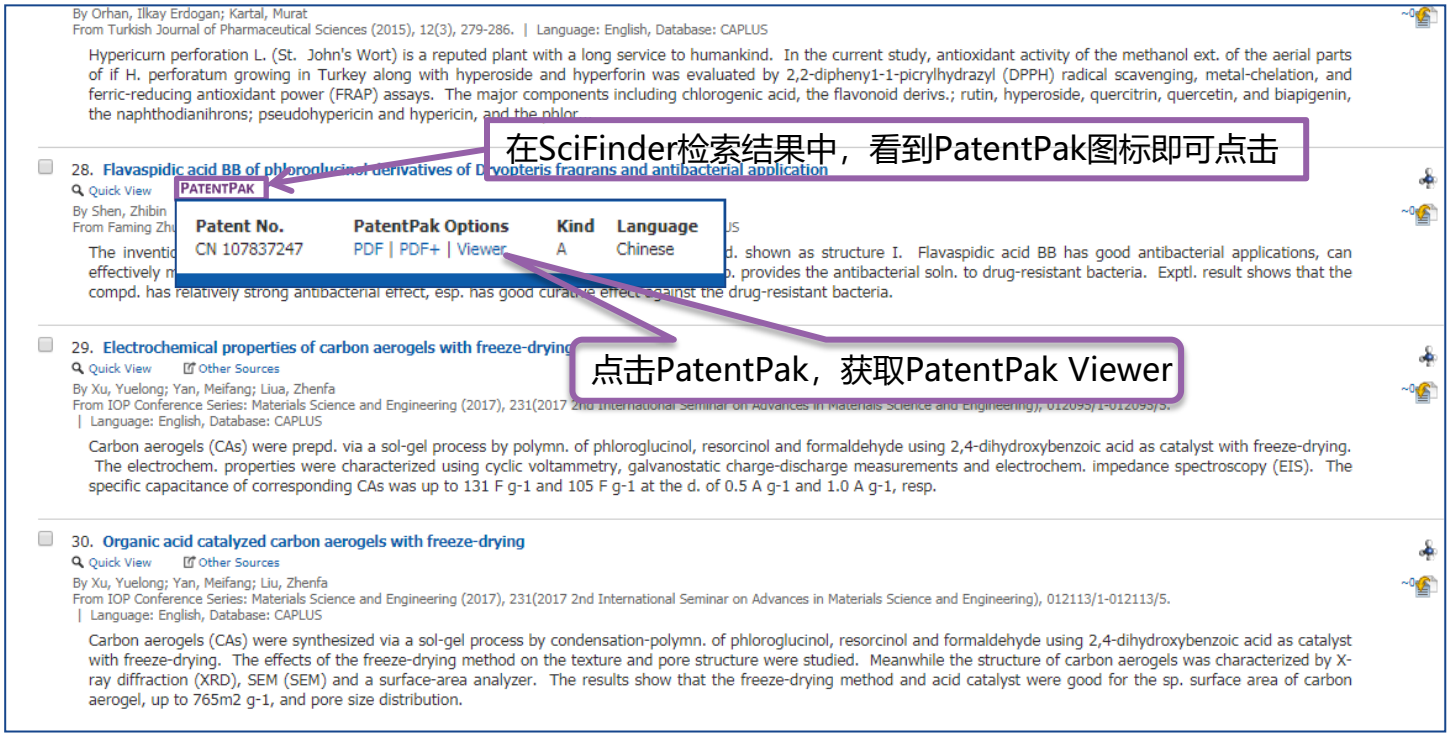
CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

PatentPak™——快速定位专利中重要的物质信息

- 安全、快捷地获得来自全球46个专利授权机构的PDF格式专利文件
- 通过PatentPak 浏览器，快速定位专利PDF文件中的重要物质页码信息，迅速找到难以查找的化学信息
- 在CAS专利族文献中找到你所熟悉语言的专利

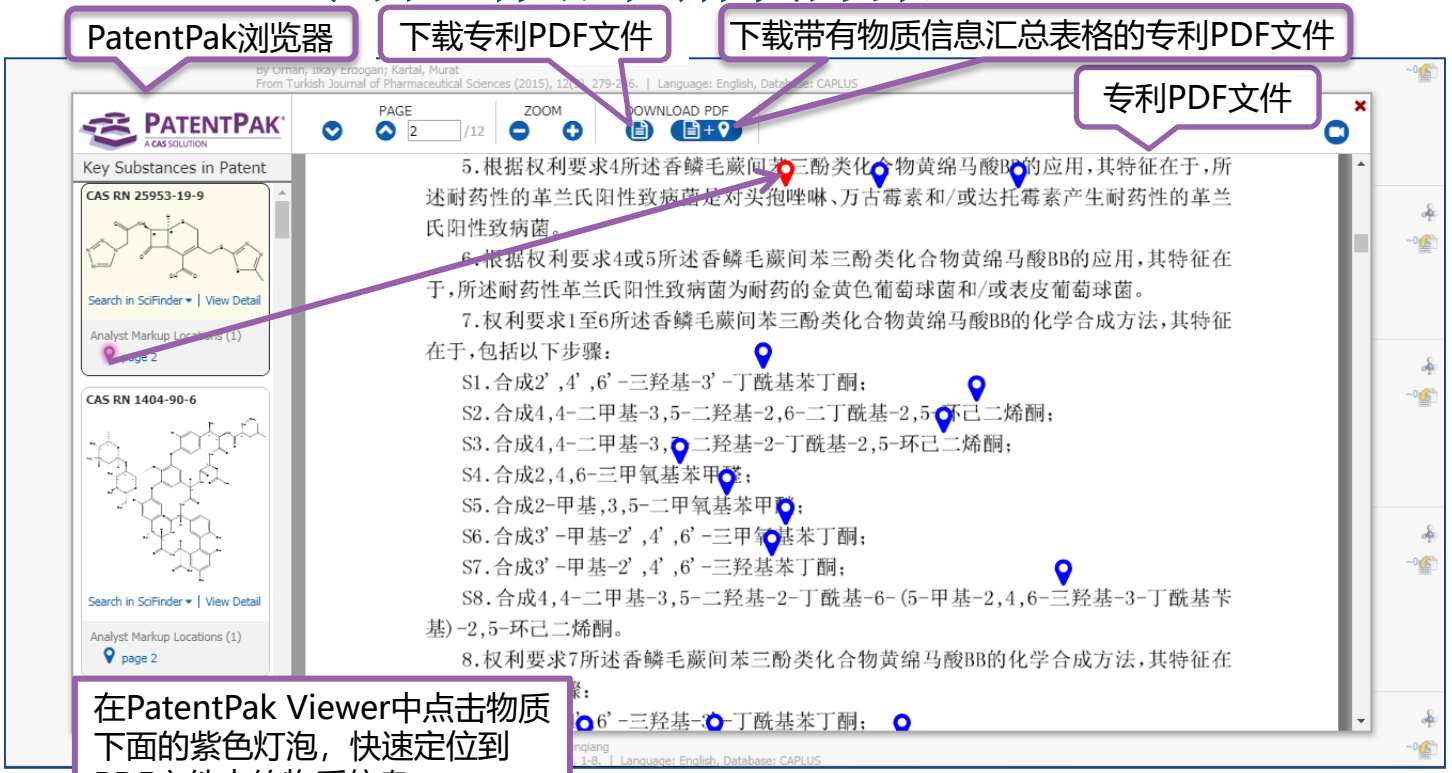
CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

PatentPak——专利工作流程解决方案



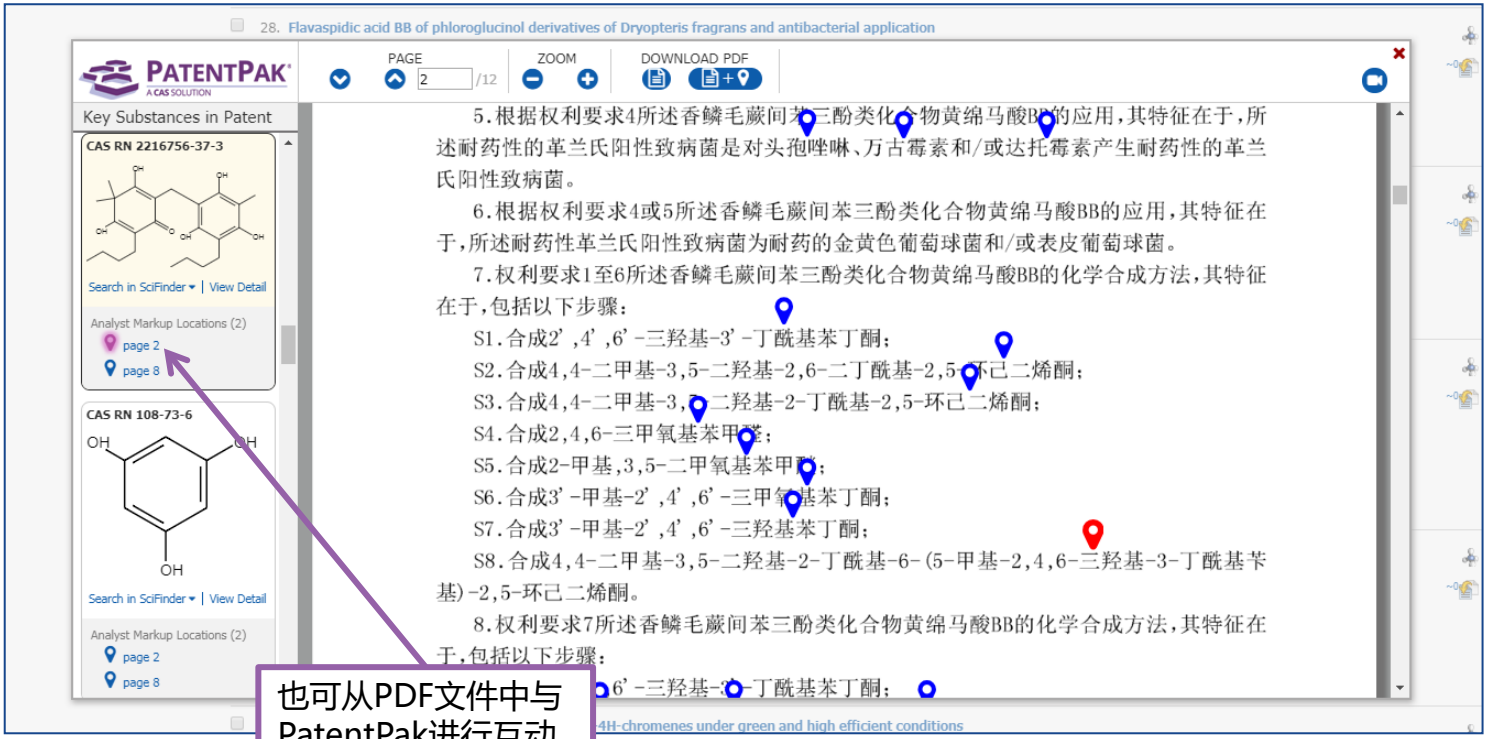
CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

PatentPak——专利工作流程解决方案



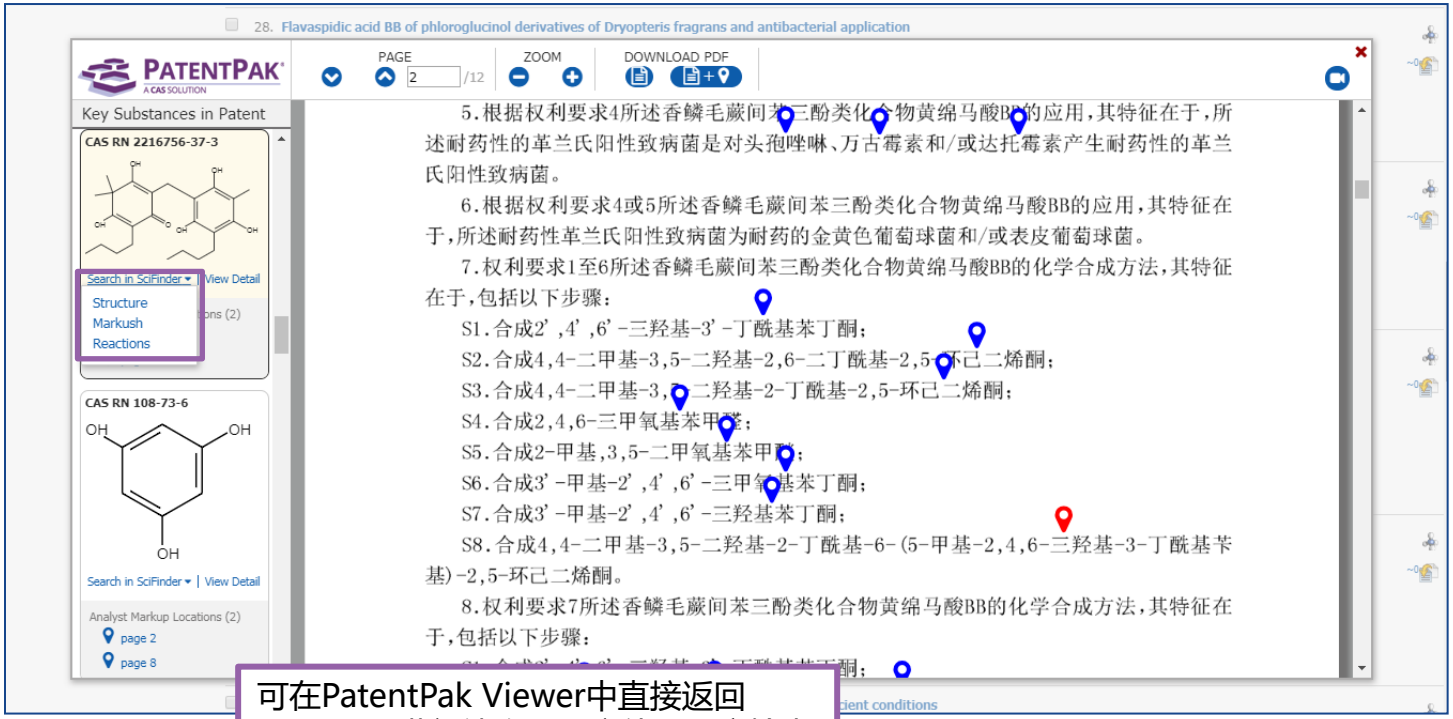
CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

PatentPak——专利工作流程解决方案



CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

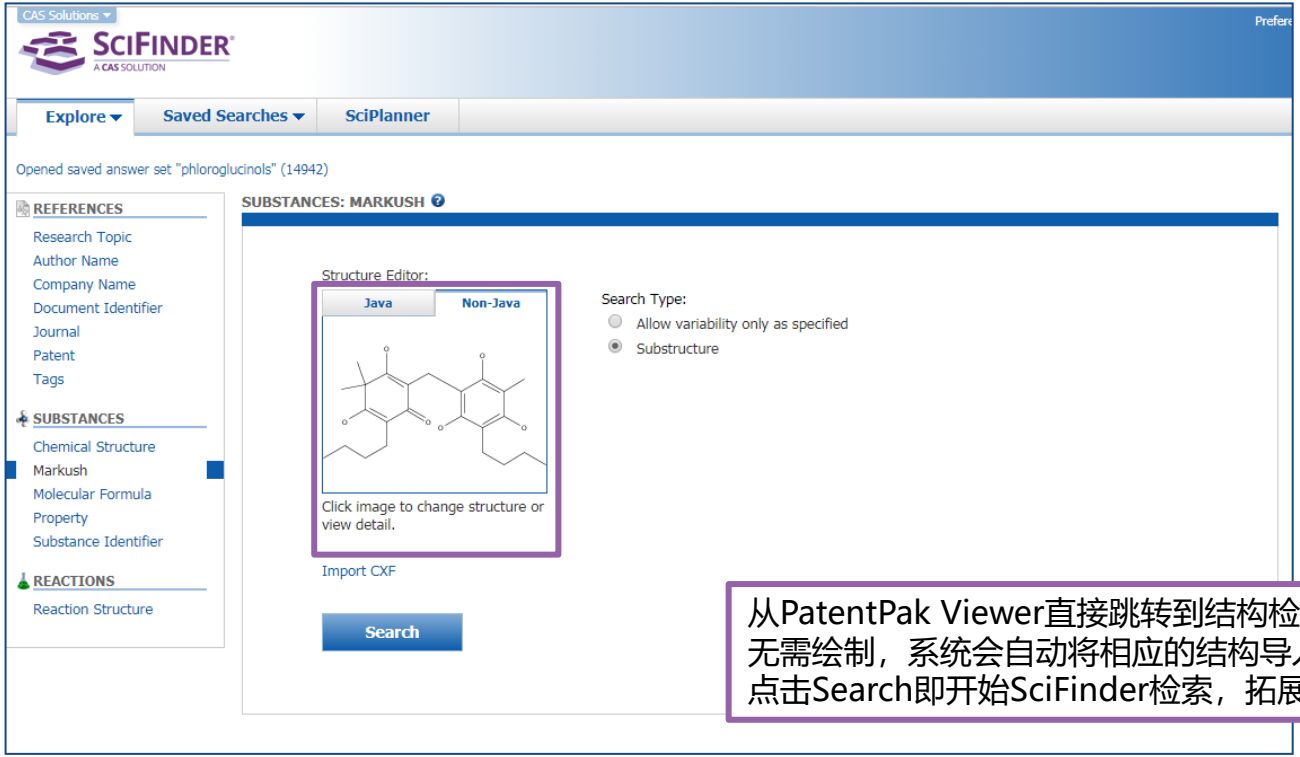
PatentPak——专利工作流程解决方案



可在PatentPak Viewer中直接返回SciFinder进行结构、马库什和反应检索

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

PatentPak——专利工作流程解决方案



从PatentPak Viewer直接跳转到结构检索界面，
无需绘制，系统会自动将相应的结构导入到绘图面板，
点击Search即开始SciFinder检索，拓展新的研究方向

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

利用MethodsNow检索文献——直接获得分析实验方法

MethodsNow – Analysis （www.methodsnow.com）

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…

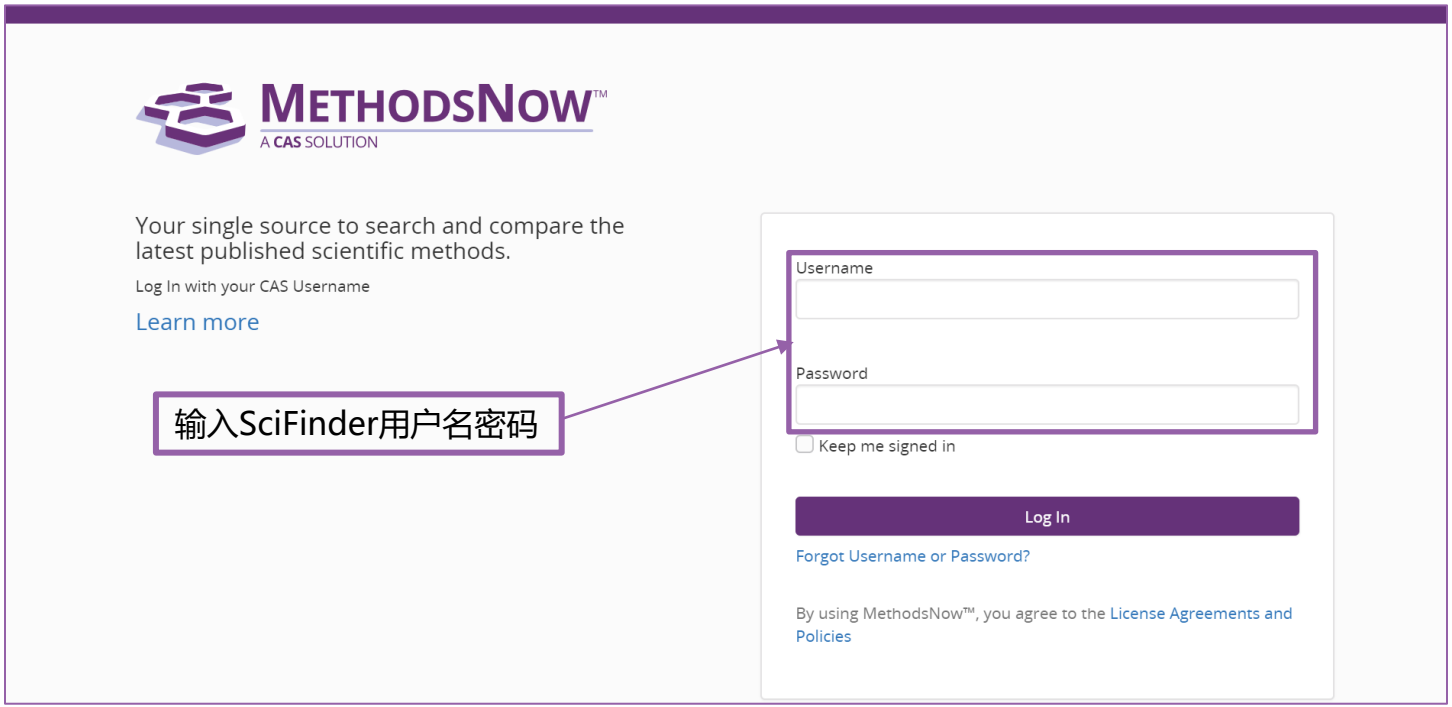
Water: 阴阳离子分析、环境分析、废水分析、微量元素分析…

Polymer: 聚合物分析…

目前有13个大类，45个小类。某些子项目属于多种方法分类！

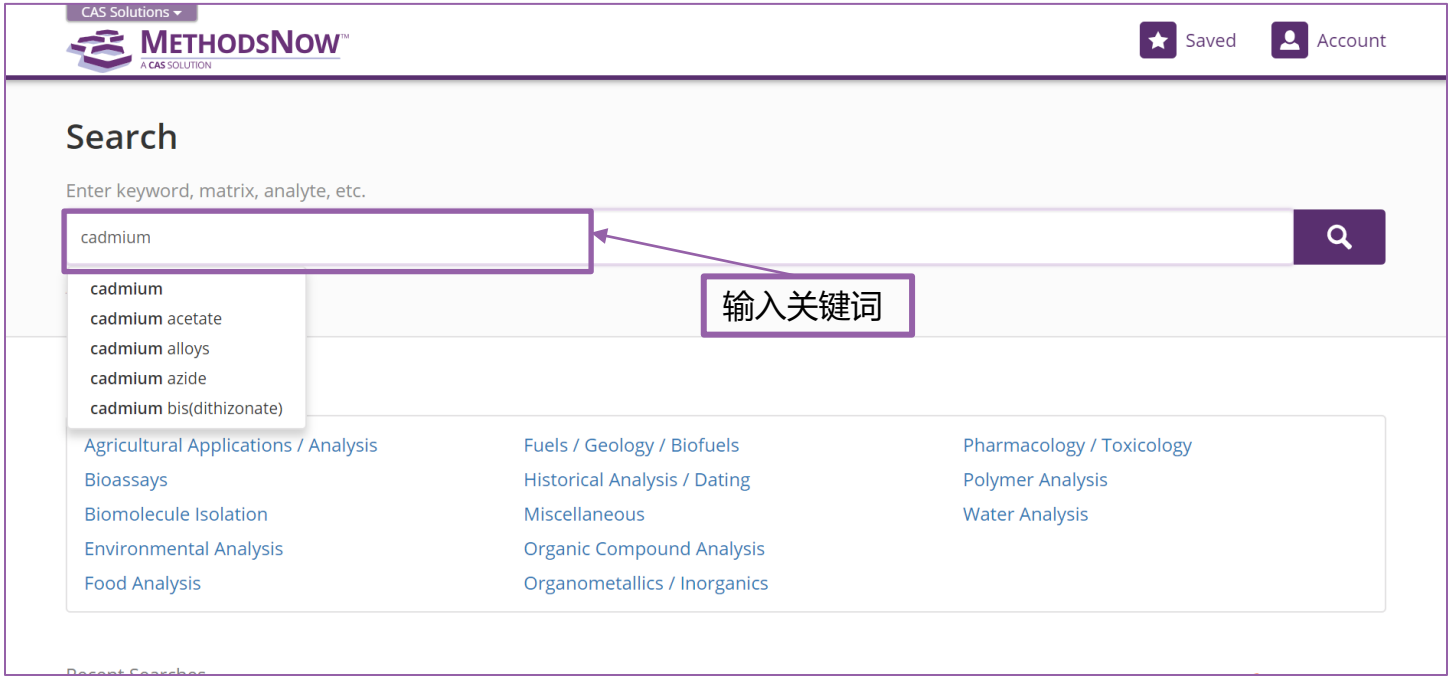
CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

利用MethodsNow检索文献——直接获得分析实验方法



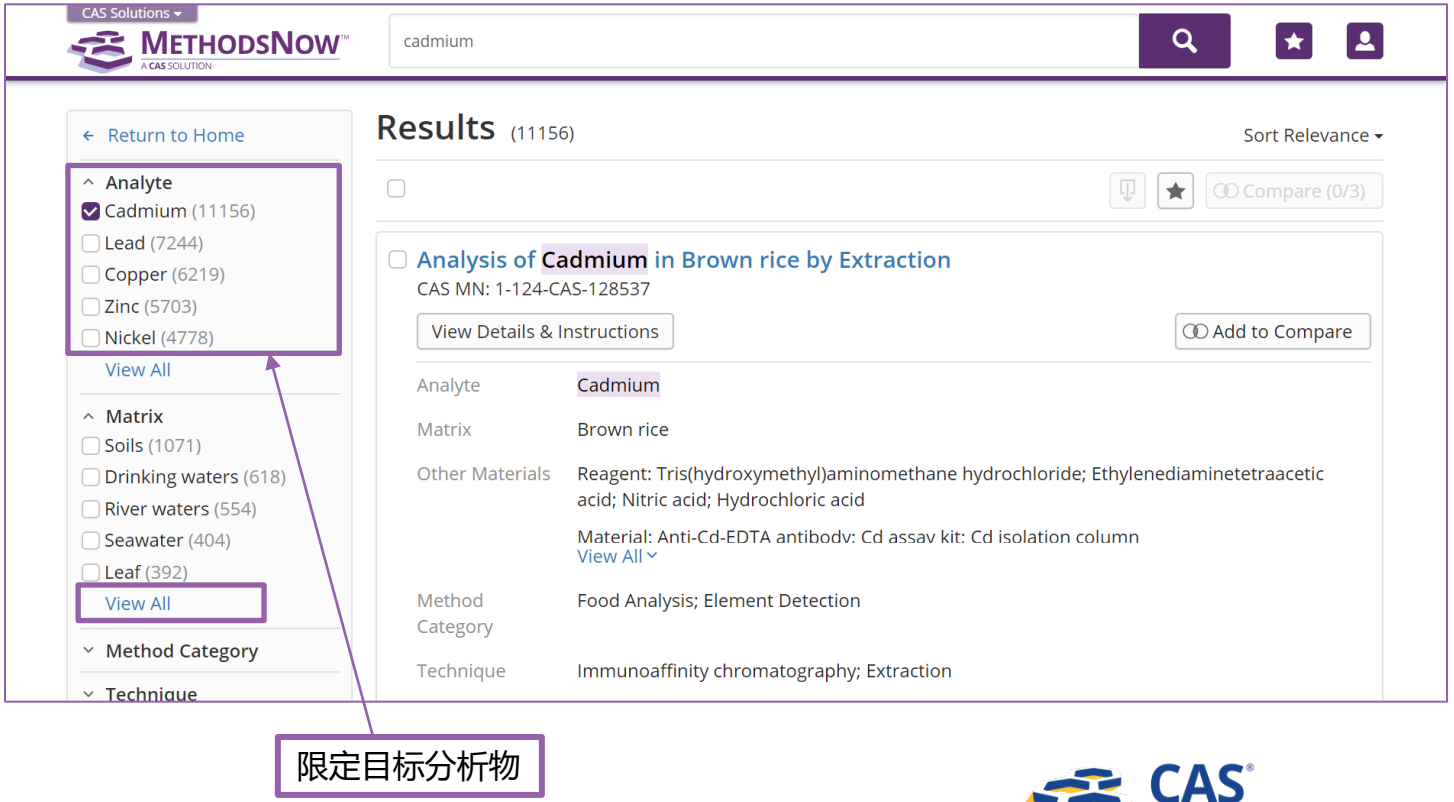
CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

利用MethodsNow检索文献——直接获得分析实验方法



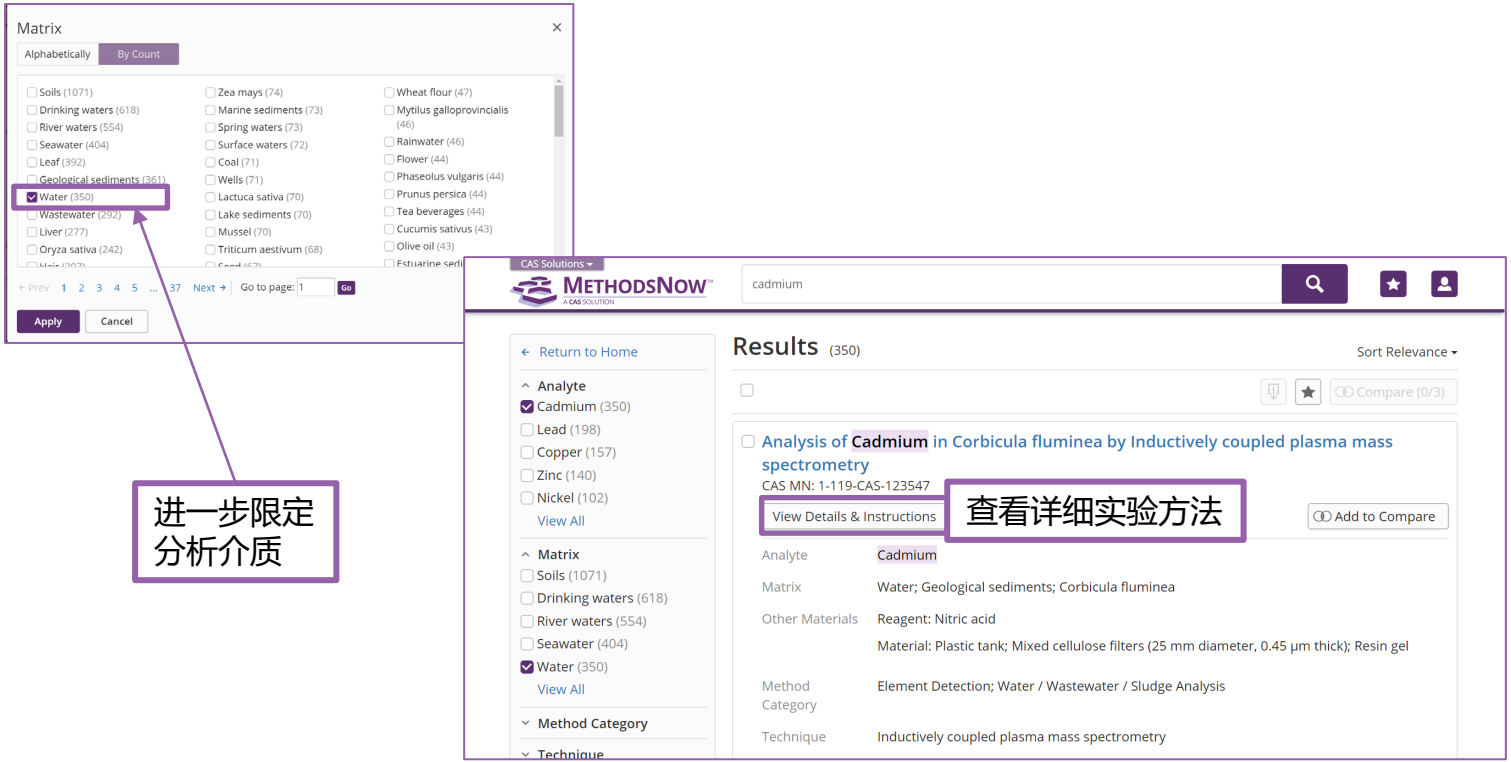
CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

利用MethodsNow检索文献——直接获得分析实验方法



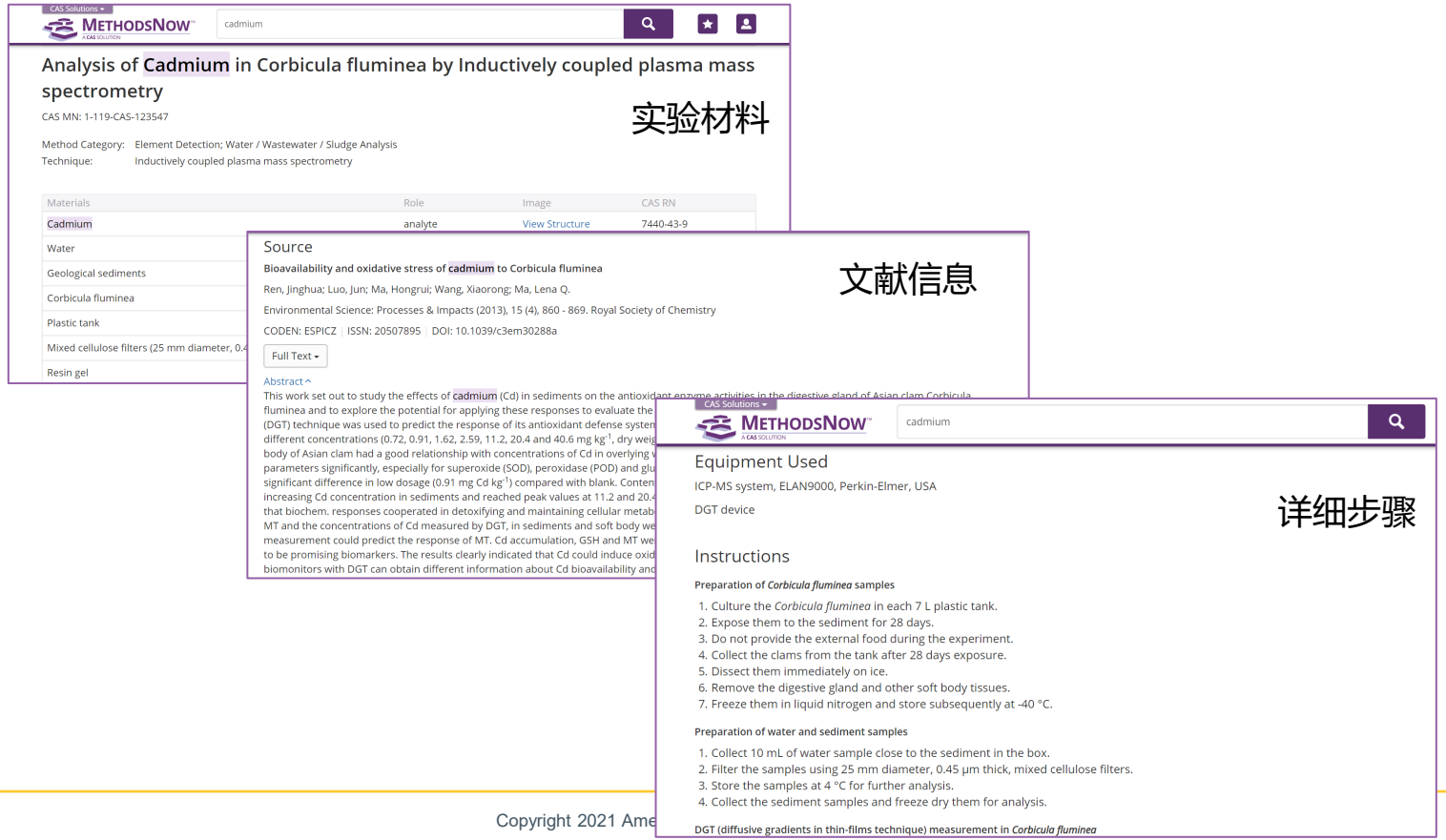
CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

利用MethodsNow检索文献——直接获得分析实验方法



CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

利用MethodsNow检索文献——直接获得分析实验方法



文献检索小结

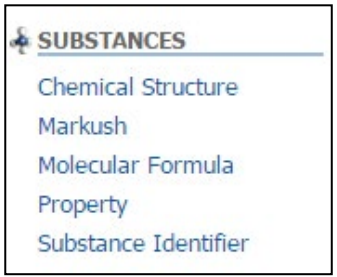
- 主题检索时，使用介词 in, with, of 等作为连接词
- 跟据检索要求选择合适的候选项
- 通过SciFinder 的Analyze/Refine功能来缩小检索的范围
- 尝试将不同的Analyze/Refine功能组合起来用，会有更多的收益
- 使用Categorize可以让系统来实现自动分类

提纲

- 美国化学文摘社简介
- SciFinder简介及检索方式
  - 文献检索（PatentPak及MethodsNow-ANA的应用）
  - 物质检索
  - Markush检索
  - 反应检索 （MethodsNow-SYN的应用）
  - SciPlanner
- SciFinder常见问题及解决

SciFinder检索选项——物质检索

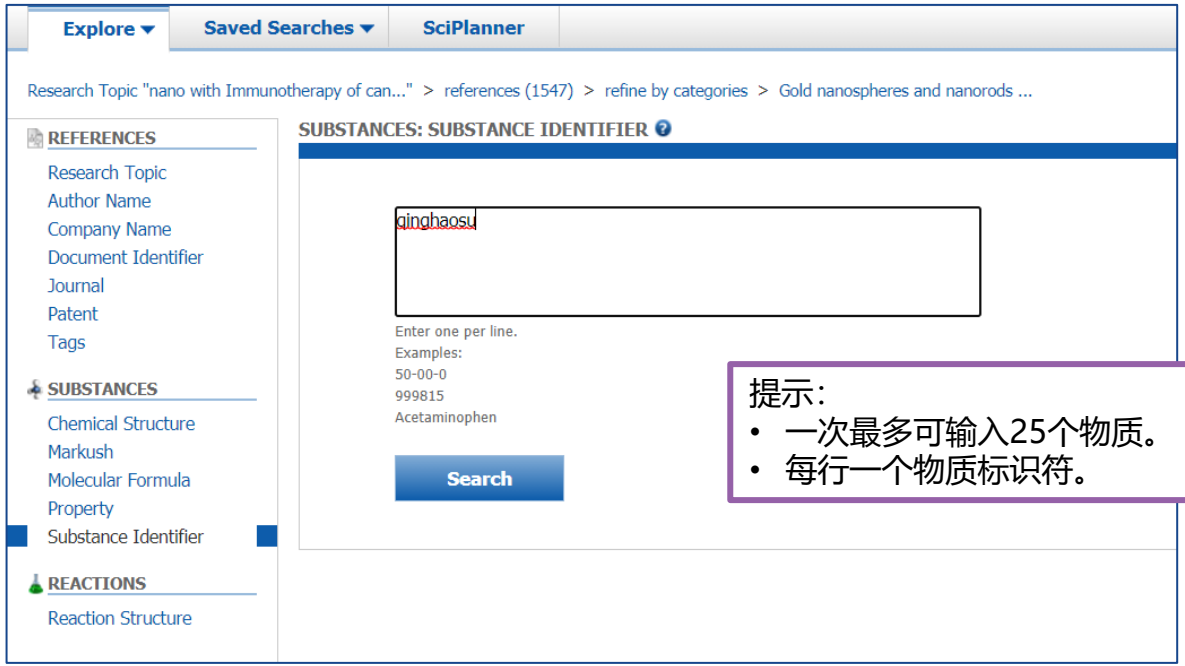
- 物质检索方法
  - —结构式检索
  - —分子式检索
  - —理化性质检索
  - —物质标识符检索：化学名称，CAS RN



- 物质检索策略推荐
  - —有机化合物，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

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索——标识符检索



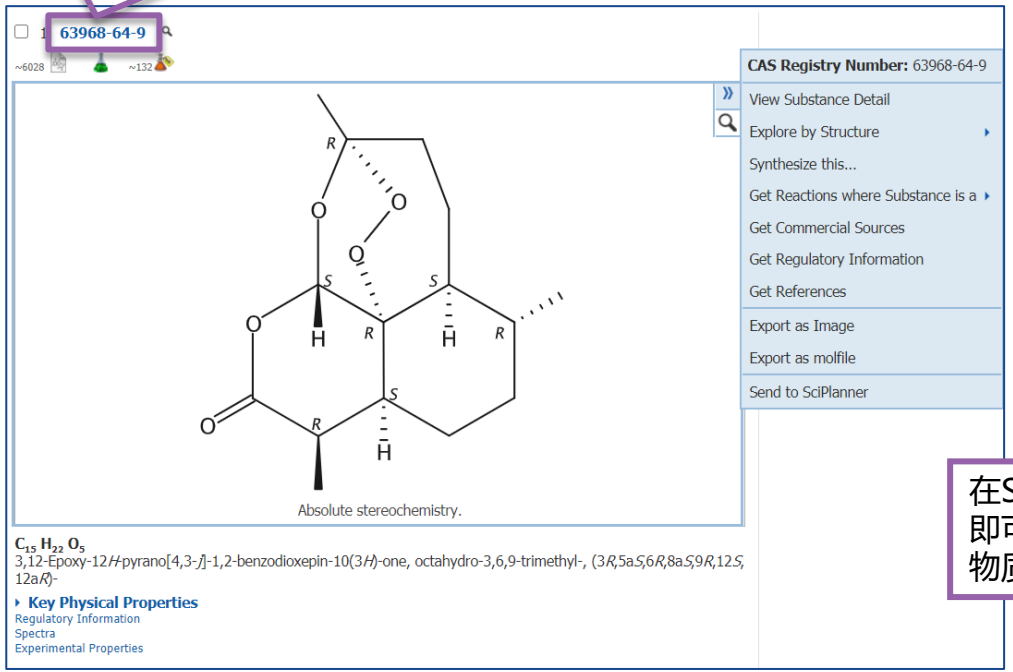
提示：
- 一次最多可输入25个物质。
- 每行一个物质标识符。

物质标识符包括CAS RN和化学名称，化学名称可以是通用名称、商品名、俗名。

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder中的物质记录

点击CAS RN 获得物质详细信息

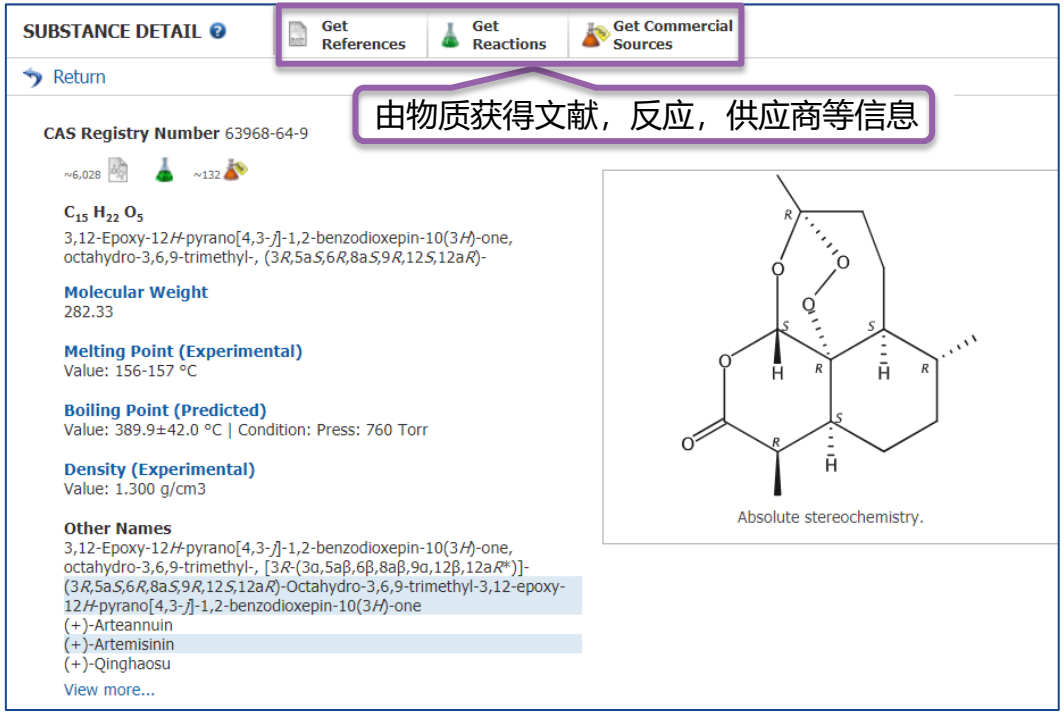


在SciFinder中，鼠标滑过物质，即可打开物质标准菜单，获得与物质相关的所有内容

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

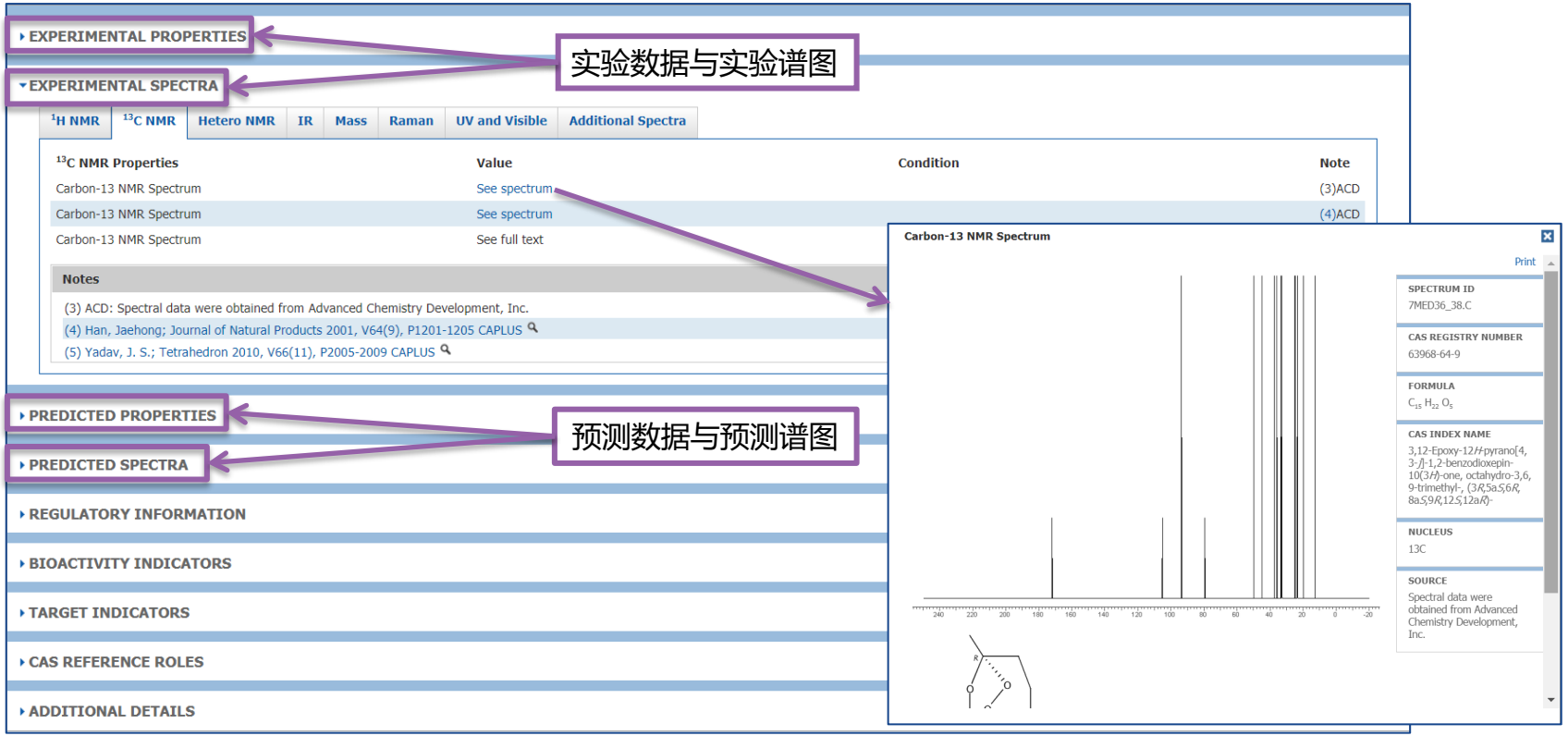
SciFinder中的物质记录

物质详情



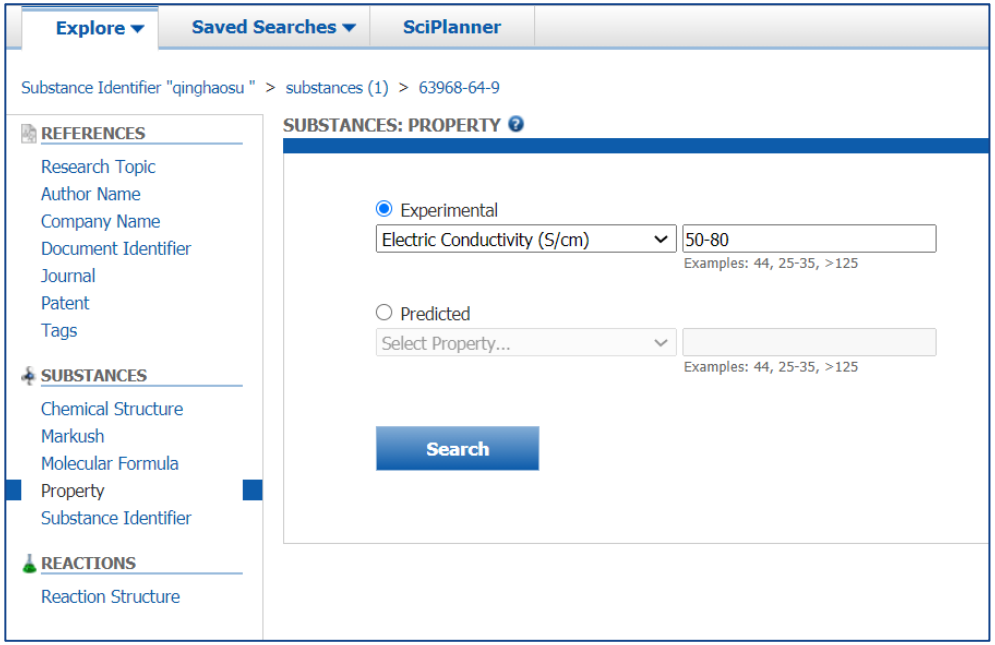
CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder中的物质记录



CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

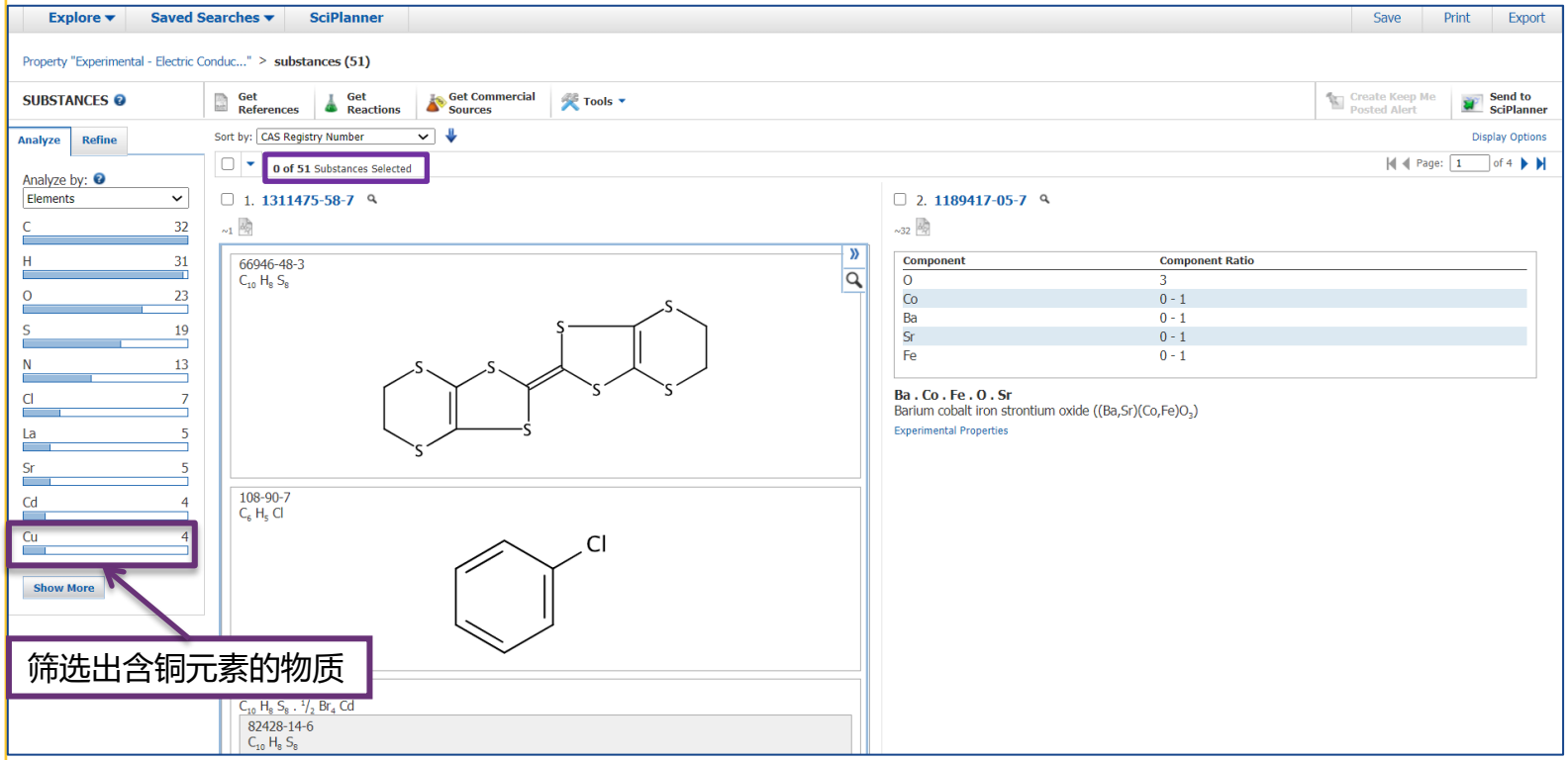
物质检索——Property explore



寻找导电率在50-80的含铜元素的物质

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

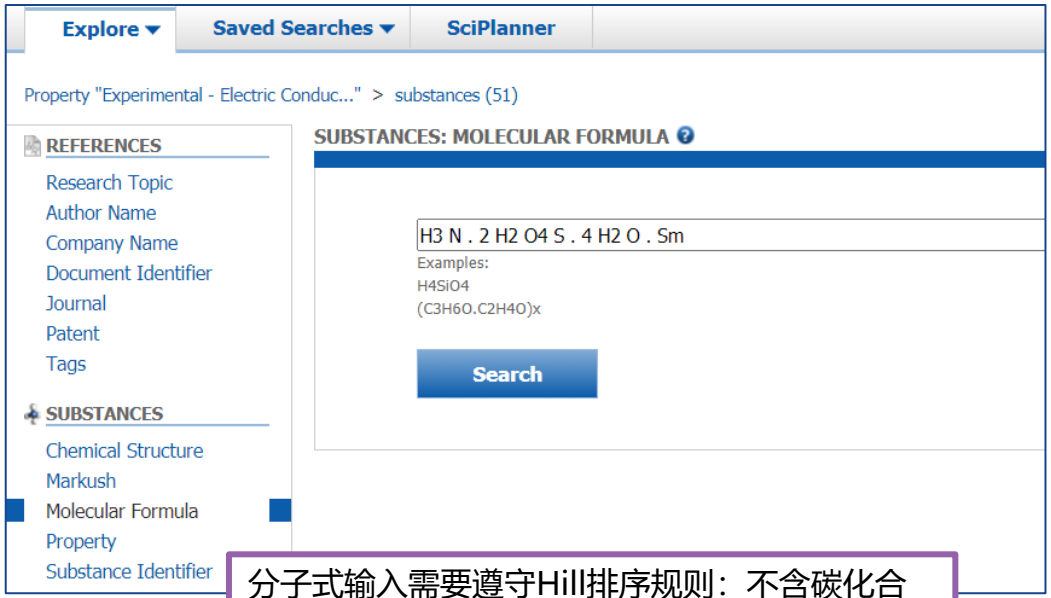
物质结果集的筛选



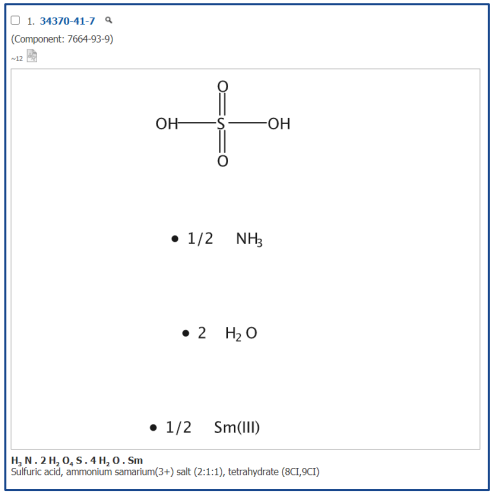
CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索——分子式

检索(N H4) Sm (S O4)2 (H2 O)4, Ammonium Samarium Bis(sulfate(VI)) Tetrahydrate



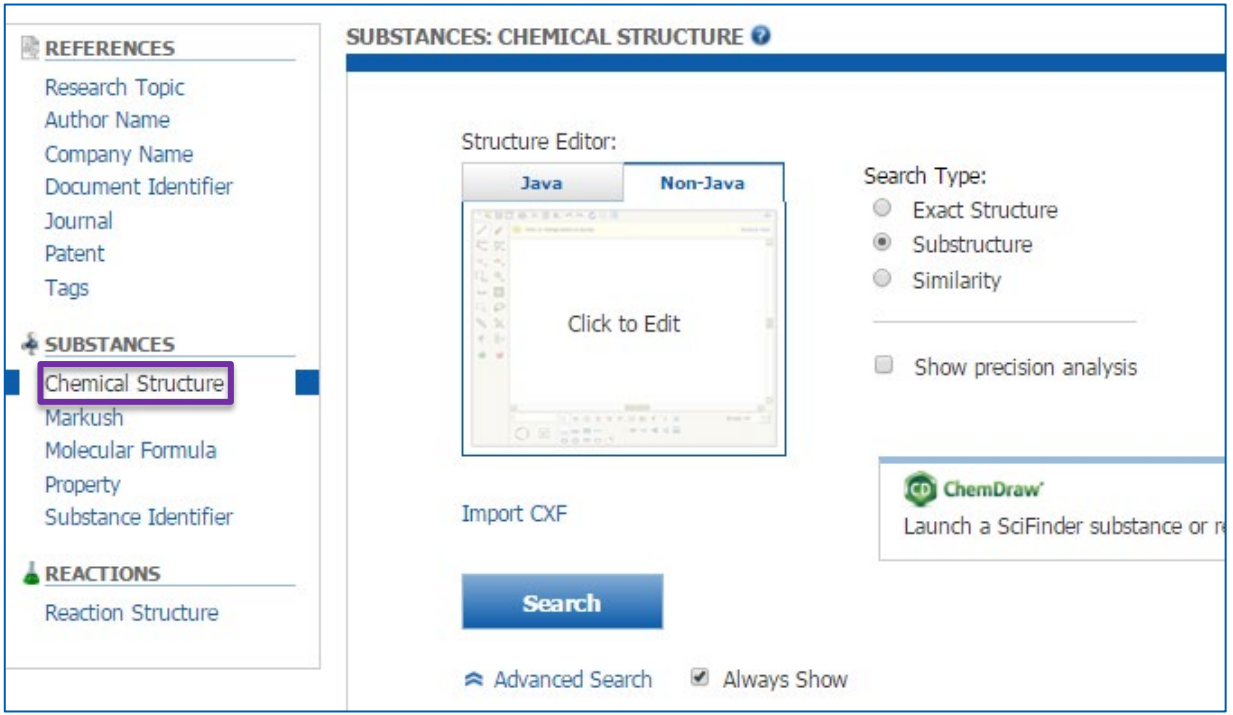
1. 金属盐：金属离子和阴离子间用点（.）分开
2. 不同组份之间用点（.）分开



分子式输入需要遵守Hill排序规则：不含碳化合物，按元素符号的字母顺序排列；分子式为含碳化合物时，则“C”在前；如有氢则紧随其后，其它元素符号按字母顺序排在氢的后面

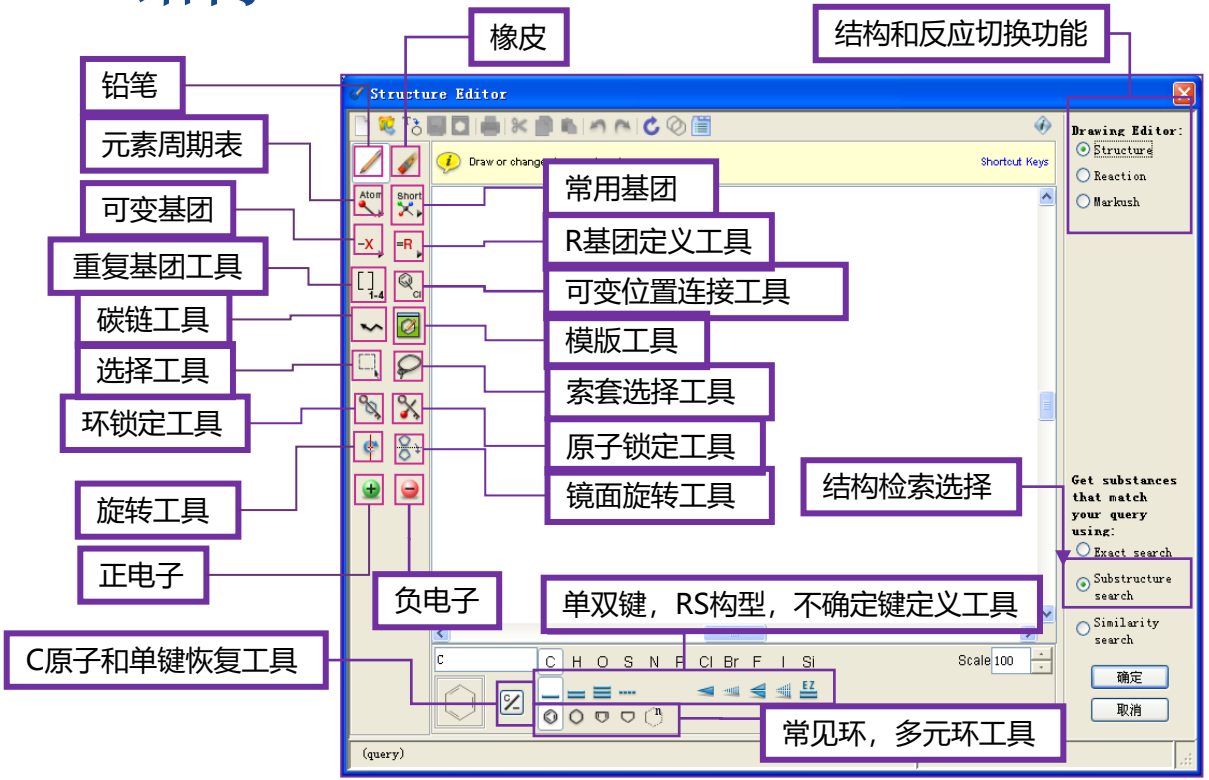
CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索——结构



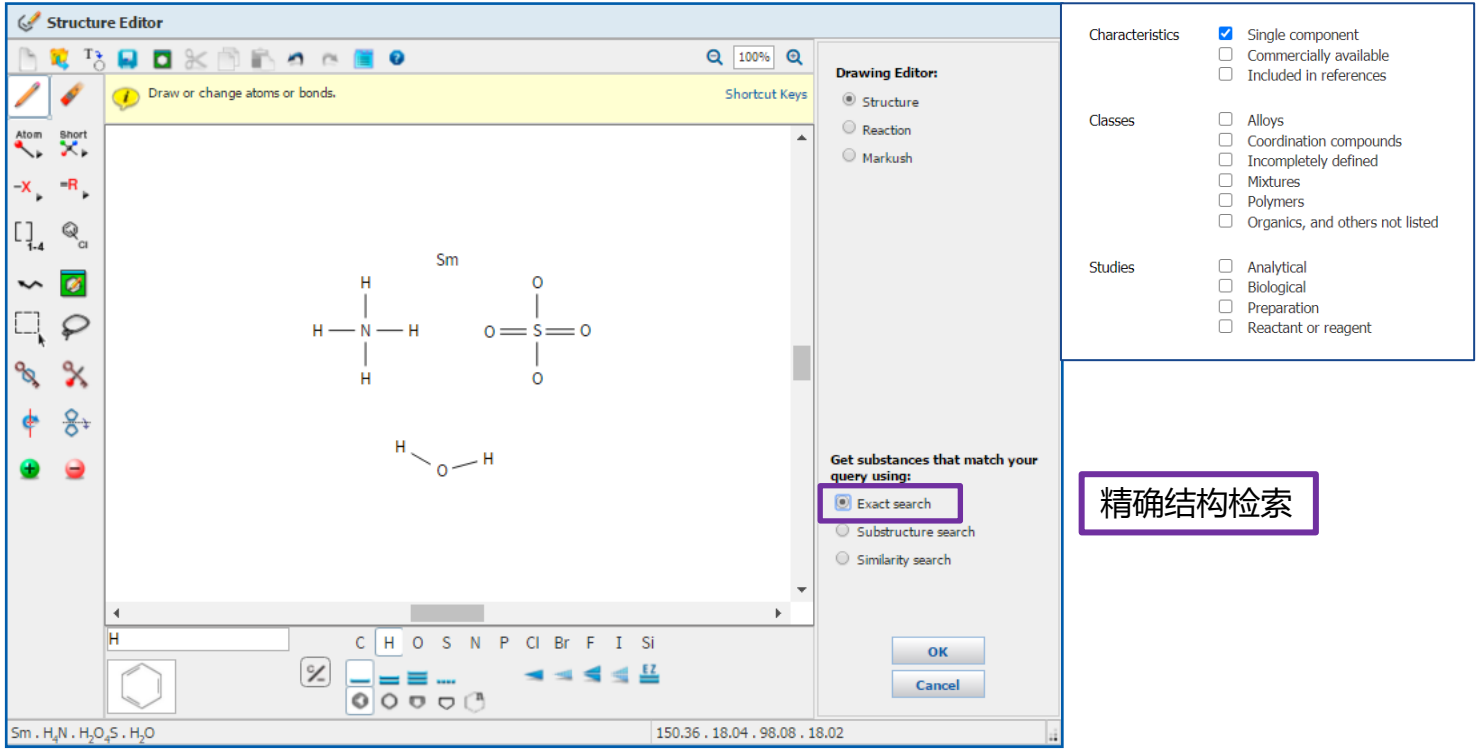
CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索——结构



CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

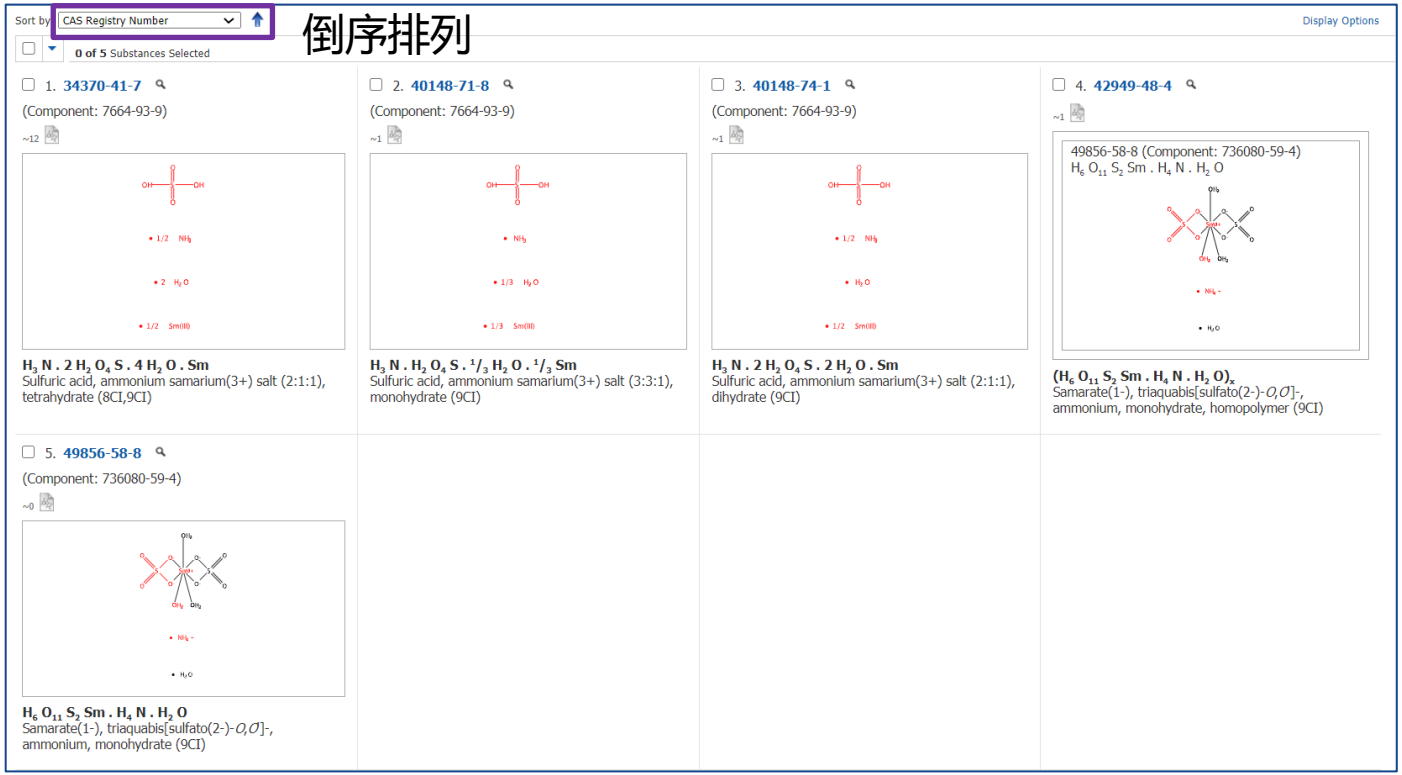
物质检索——精确结构检索



精确结构检索

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

精确结构检索结果集



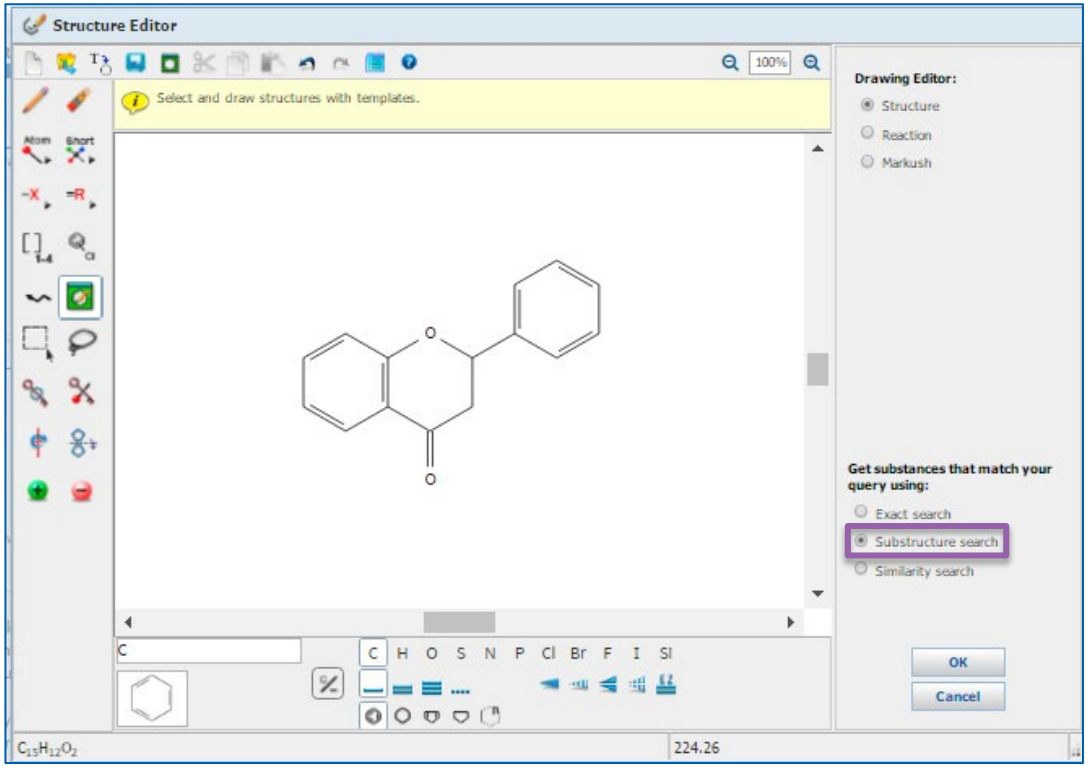
CAS®
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索——精确结构检索

- 精确结构检索：

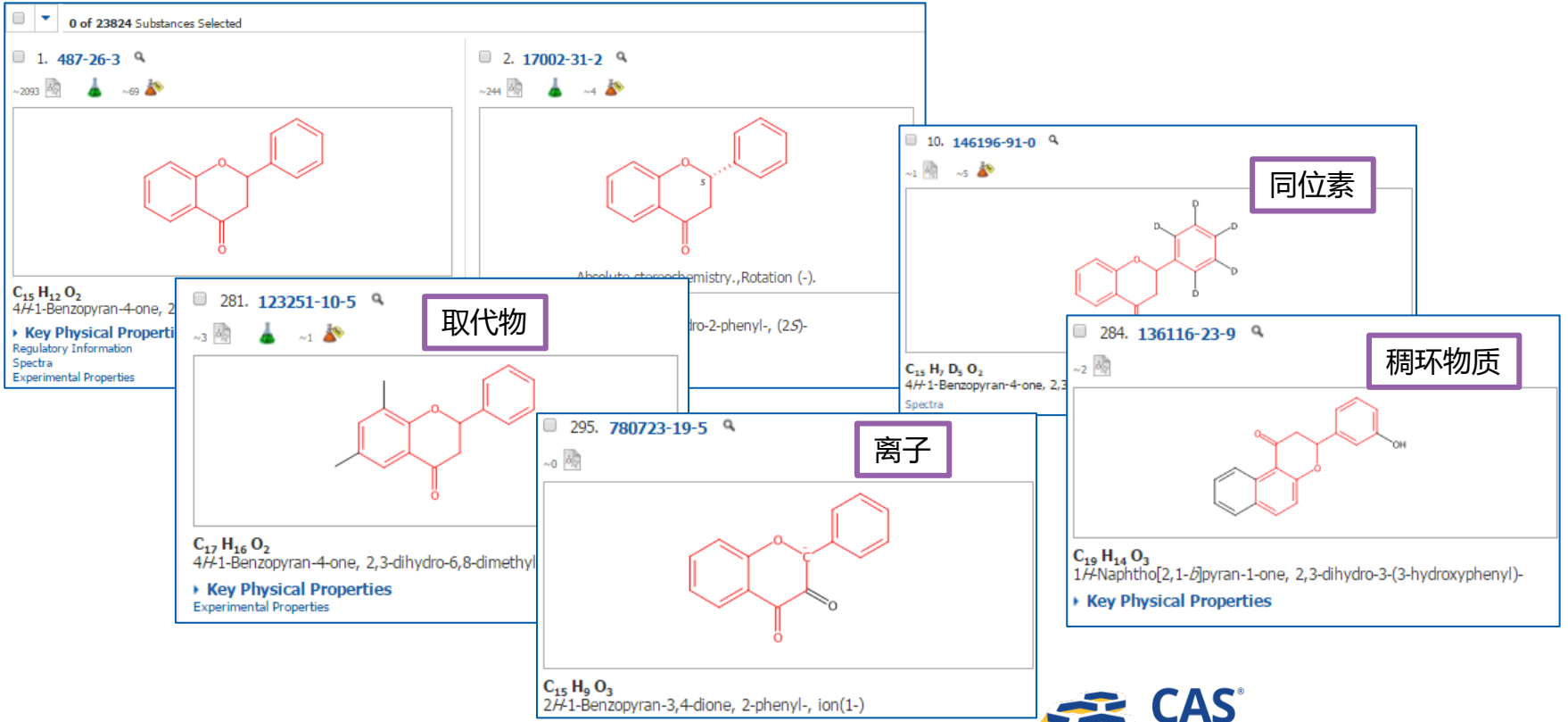
获得被检索结构的盐、混合物、配合物、聚合物等，被检结构不能被取代

物质检索——亚结构检索



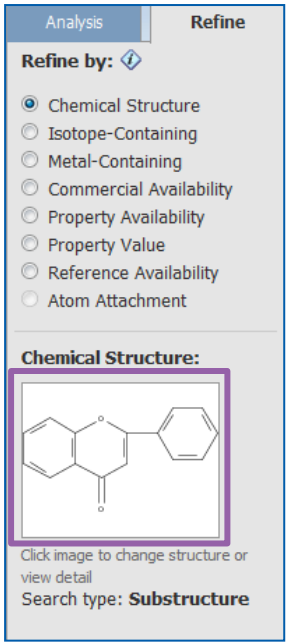
CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索——亚结构检索

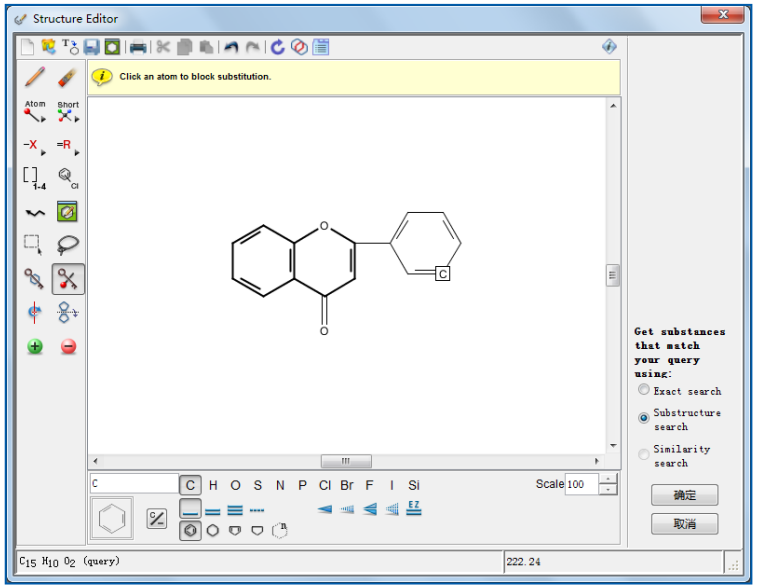


CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

亚结构检索结果的限定



化学结构的再次限定

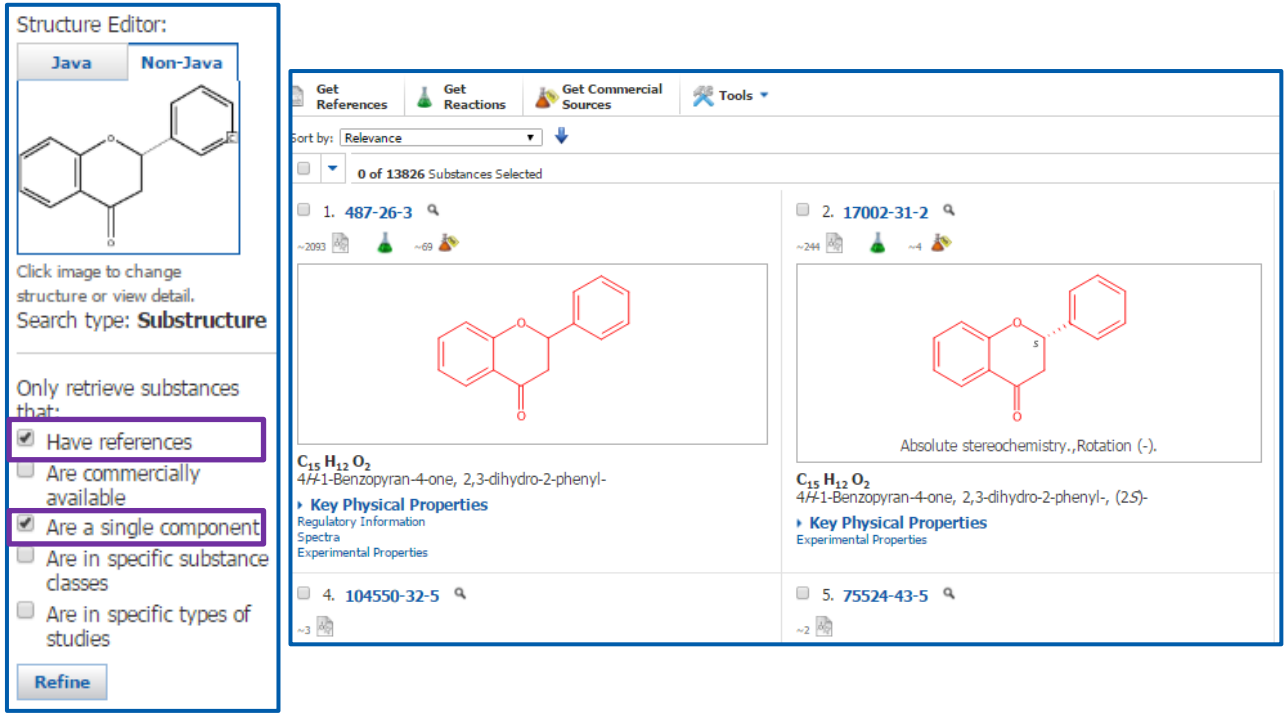


环锁定

原子锁定

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

亚结构检索结果的限定



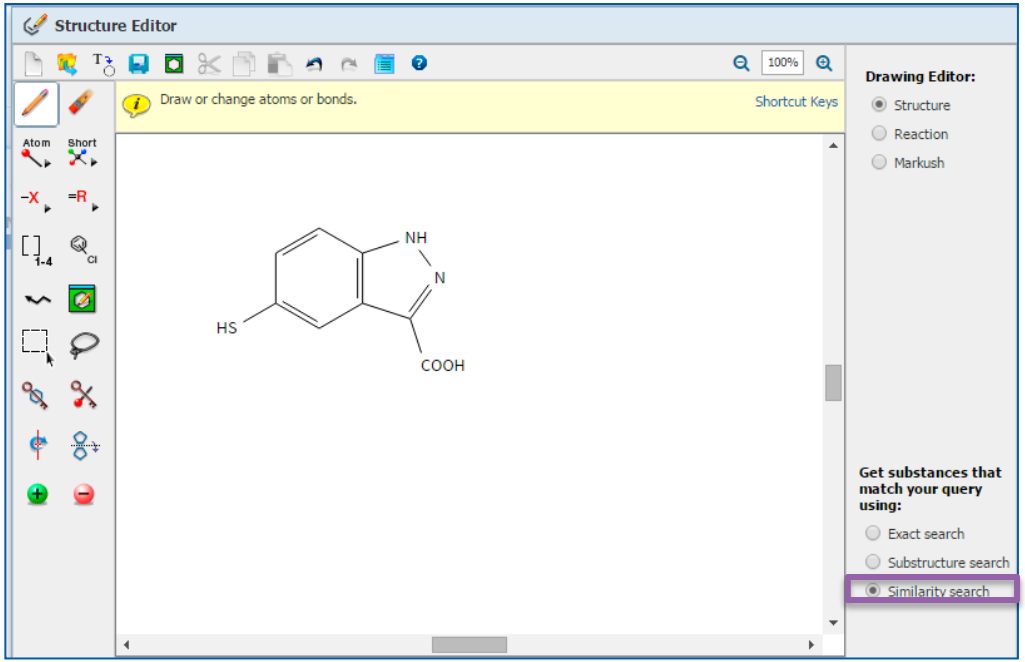
CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索——亚结构检索

- 亚结构检索：

包括精确结构检索结果，及被检索结构的修饰结构

物质检索——相似结构检索



CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

相似结构检索结果

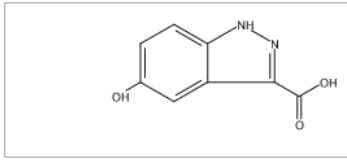
Select All Deselect All

0 of 6 Similarity Candidates Selected	Substances
≥ 99 (most similar)	0
95-98	0
90-94	0
85-89	11
80-84	34
75-79	84
70-74	267
65-69	696
0-64 (least similar)	1818

Get Substances

评分越高，相似度越高，结构越相似

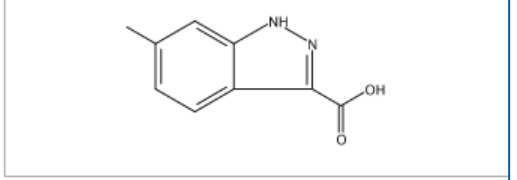
Score: 88
1. 885518-94-5
~1 ~35



$C_8H_6N_2O_3$
1*H*-Indazole-3-carboxylic acid, 5-hydroxy-
Key Physical Properties

取代基变化

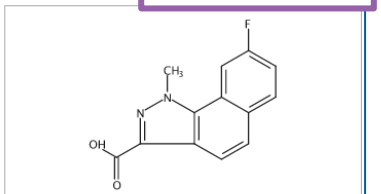
Score: 86
5. 858227-12-0
~7 ~41



$C_9H_8N_2O_2$
1*H*-Indazole-3-carboxylic acid, 6-methyl-
Key Physical Properties

取代基位置变化

Score: 65
541. 1100422-
~1



$C_{13}H_9FN_2O_2$
1*H*-Benz[*g*]indazole-3-carboxylic acid, 8-fluoro-1-methyl-
Key Physical Properties

母体结构变化

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索——相似结构检索

- 相似结构检索：

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

提纲

- 美国化学文摘社简介
- SciFinder简介及检索方式
  - 文献检索（PatentPak及MethodsNow-ANA的应用）
  - 物质检索
  - Markush检索
  - 反应检索（MethodsNow-SYN的应用）
  - SciPlanner
- SciFinder常见问题及解决

Markush检索

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）

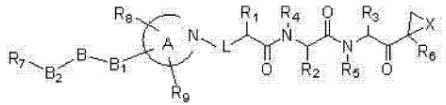
吡嗪 -2- 羧酸（1.5g，12mmol）置于 50ml 反应瓶中，加入 35mL 无水 CH_2Cl_2 溶解，随即加入 1- 羟基苯并三氮唑（1.6g，12mmol）和 N-（3- 二甲氨基丙基）-N'- 乙基碳二亚胺盐酸盐（3.5g，18mmol），室温反应半小时。随后，哌嗪 -1- 甲酸叔丁酯（1.9g，10mmol）加入反应液中，室温反应 3 小时。反应液加入 30mL 饱和碳酸氢钠水溶液稀释，分出有机层，饱和食盐

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

Markush检索

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

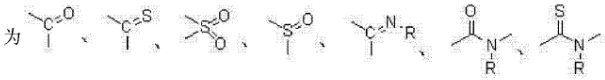
其中：

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；

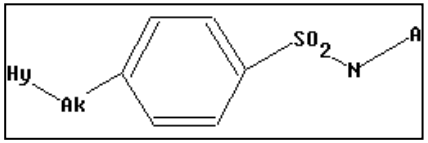
R_8，R_9 分别独立选自 H、OH，C_{1-6} 烷基，C_{1-6} 烷氧基，C_{1-6} 羟基烷基，C_{1-6} 巯基烷基，C_{1-6} 烷基 -D，芳基，杂环芳基，环烷基和杂环基，这些基团可以被卤素、硝基、氨基、CN、C_{1-6} 烷基、卤代的 C_{1-6} 烷基，C_{1-6} 烷氧基或卤代的 C_{1-6} 烷氧基取代，每个基团可与一个或多个芳基或杂环

预测性物质[Prophetic Substance]：

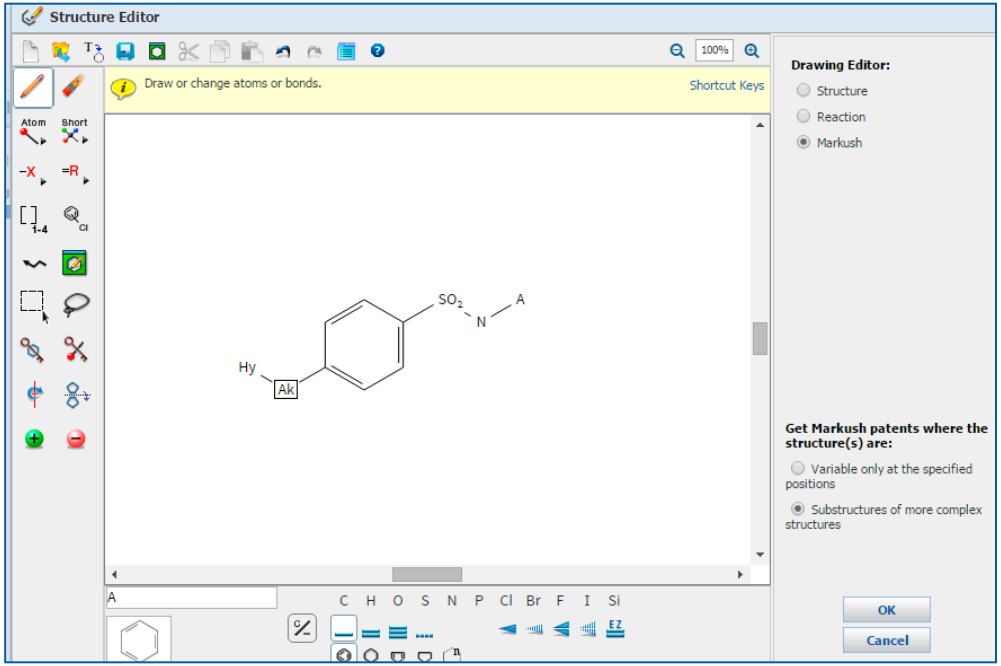
— 使用Markush结构陈述的预测物质，一个Markush可以陈述上百或上千个化学物质

— 专利中所陈述的预测物质，不会被分配CAS RN

— Markush检索，能检索到通过结构检索检不到的专利



可用SciFinder中的Markush检索
查看专利中化合物结构保护范围



CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

提纲

- 美国化学文摘社简介
- SciFinder简介及检索方式
  - 文献检索（PatentPak及MethodsNow-ANA的应用）
  - 物质检索
  - Markush检索
  - 反应检索（MethodsNow-SYN的应用）
  - SciPlanner
- SciFinder常见问题及解决

SciFinder检索选项——反应检索

- 反应检索方法

  结构式

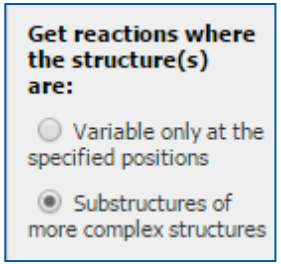
- 常用获取方法

  已知物质：由物质获取反应

  已知文献：从文献中获取反应

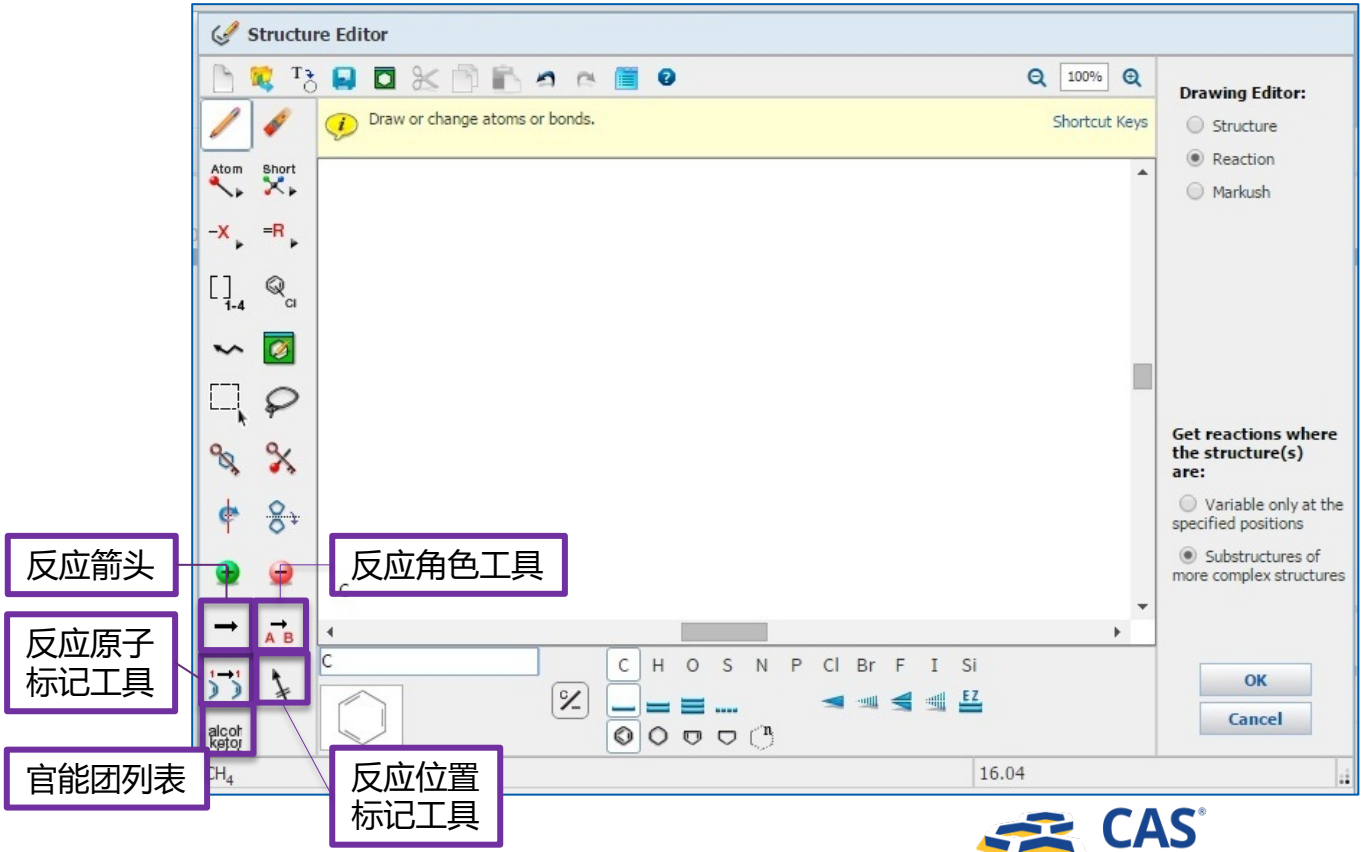
  精确结构反应检索

  亚结构反应检索



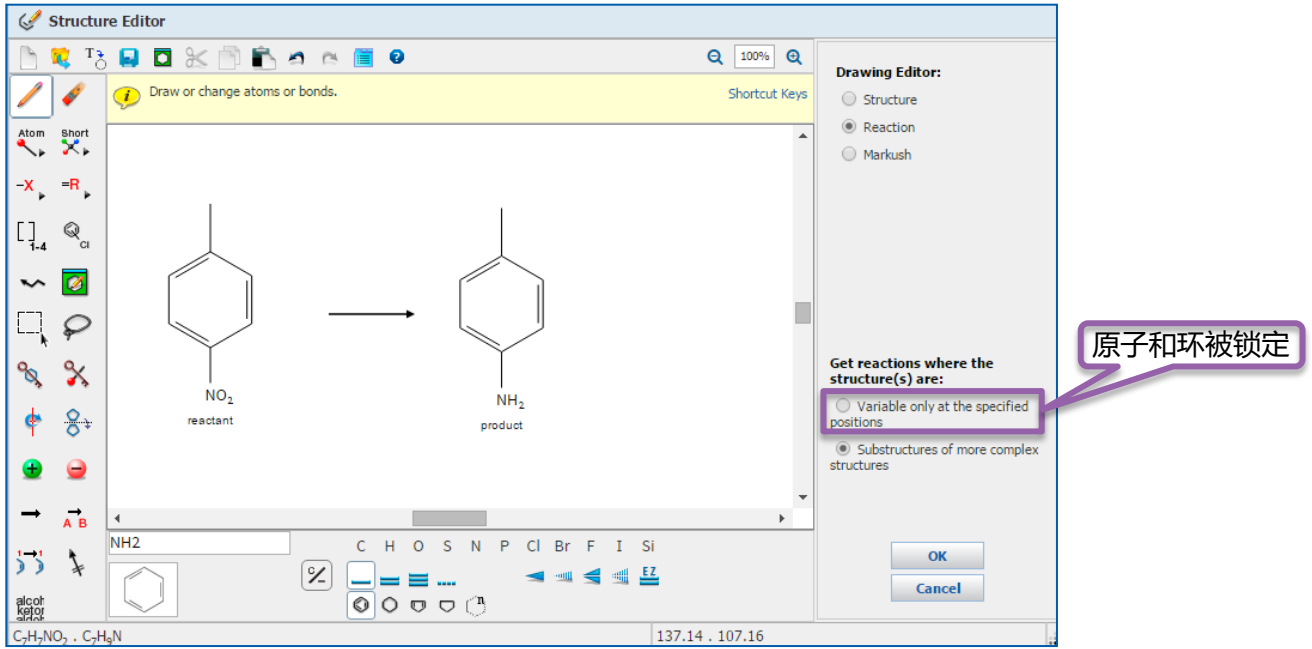
CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

反应绘制工具



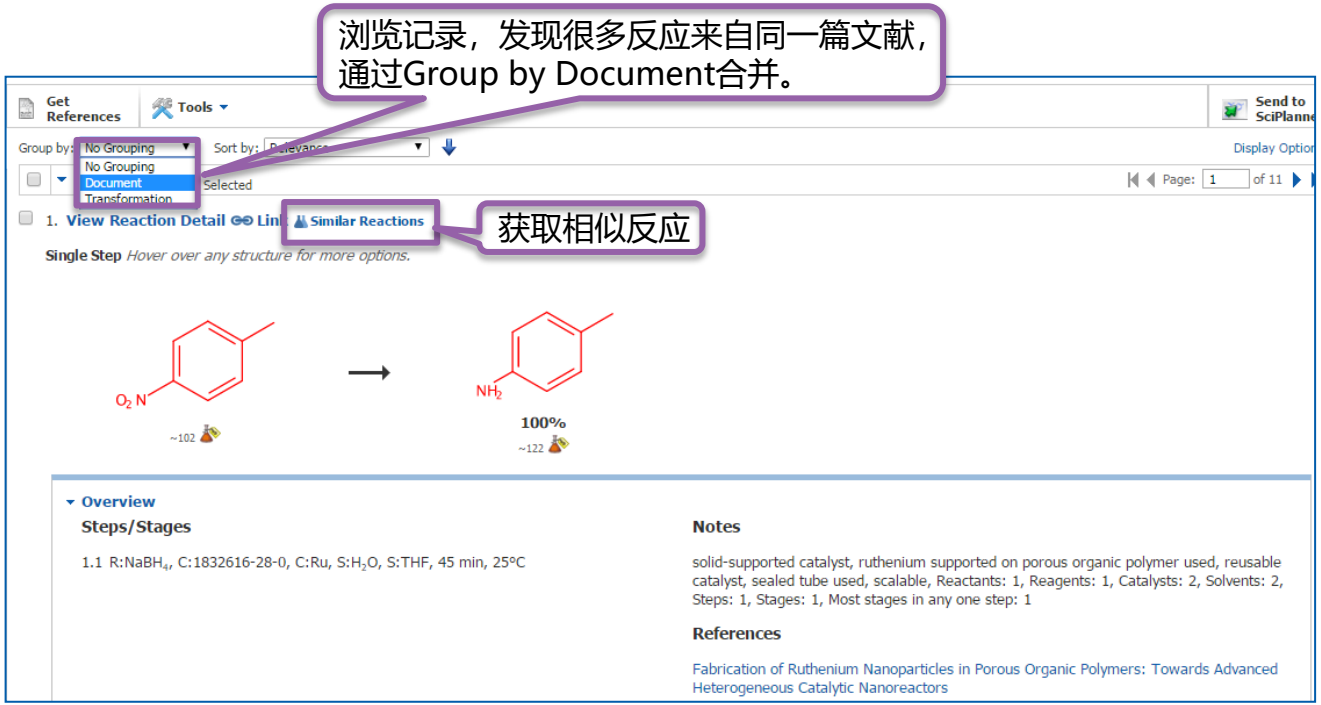
CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder反应检索——原子和环被锁定



CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

反应检索结果



CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

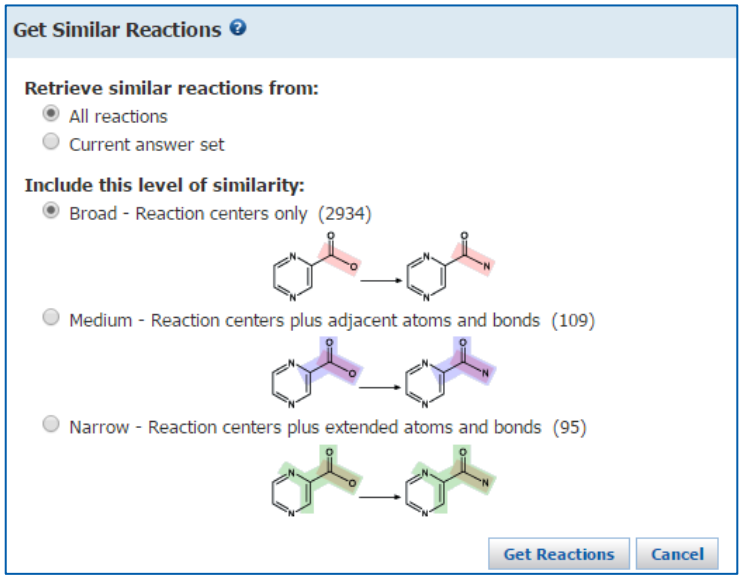
获取相似反应

选择相似反应的相似限制：

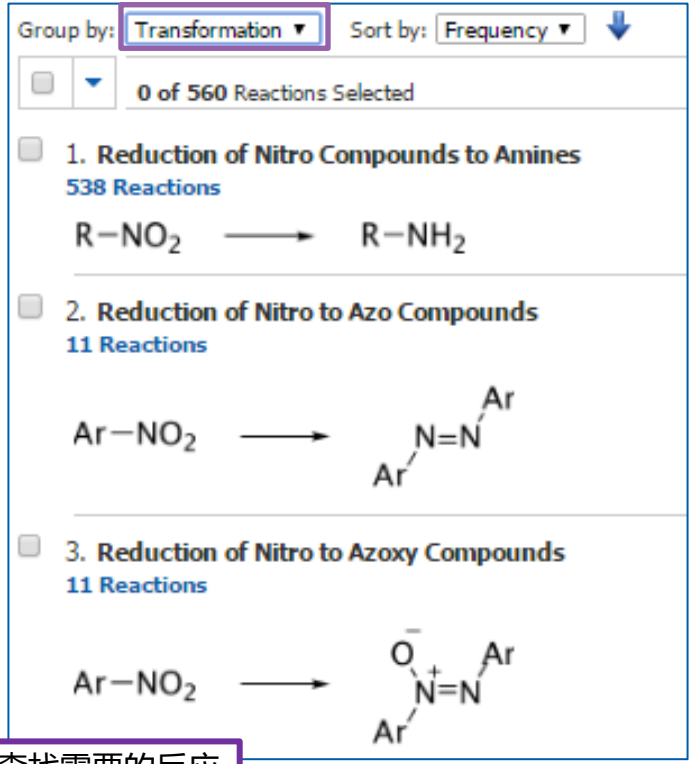
Broad：仅反应中心相似

Medium：反应中心及附属原子和键

Narrow：反应中心及扩展的原子和键



按照反应类型排序



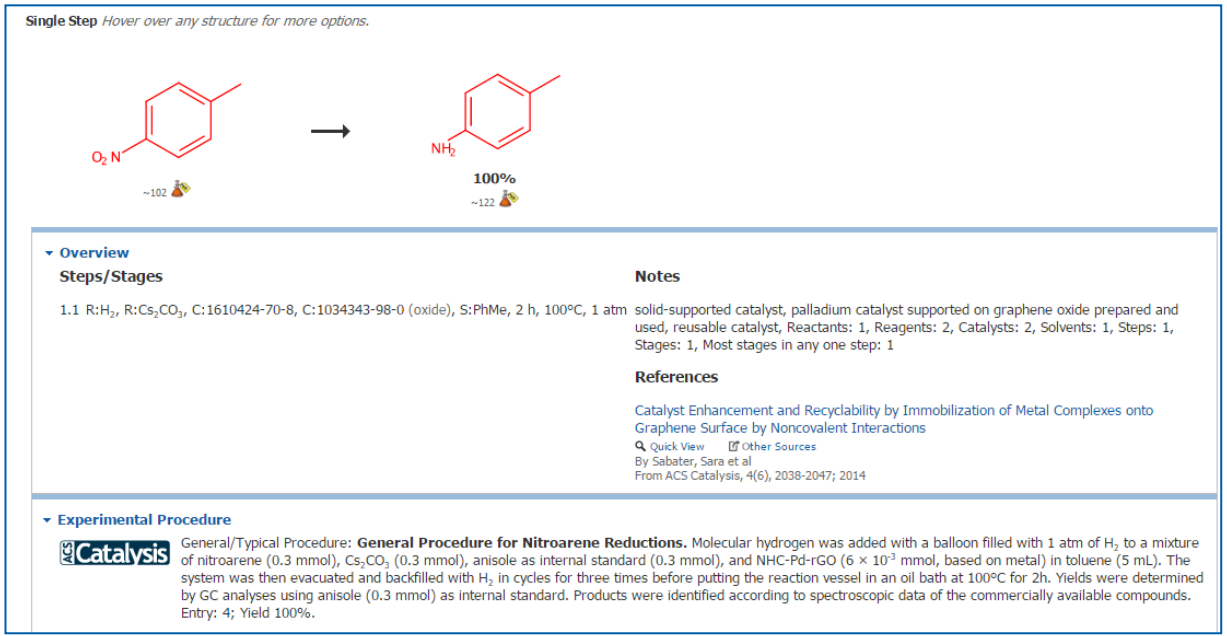
更精确的查找需要的反应

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

反应检索结果的筛选

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder囊括全球最大的反应实验过程合集

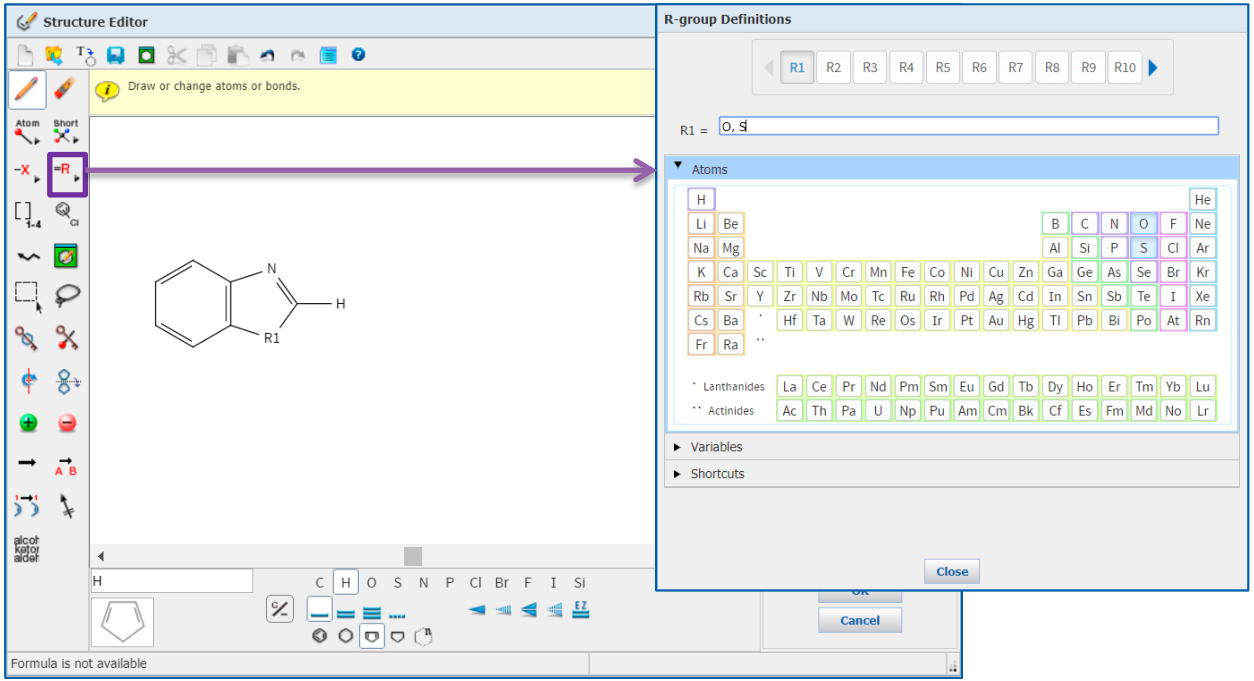


不用阅读全文，直接获得包含实验过程的反应记录

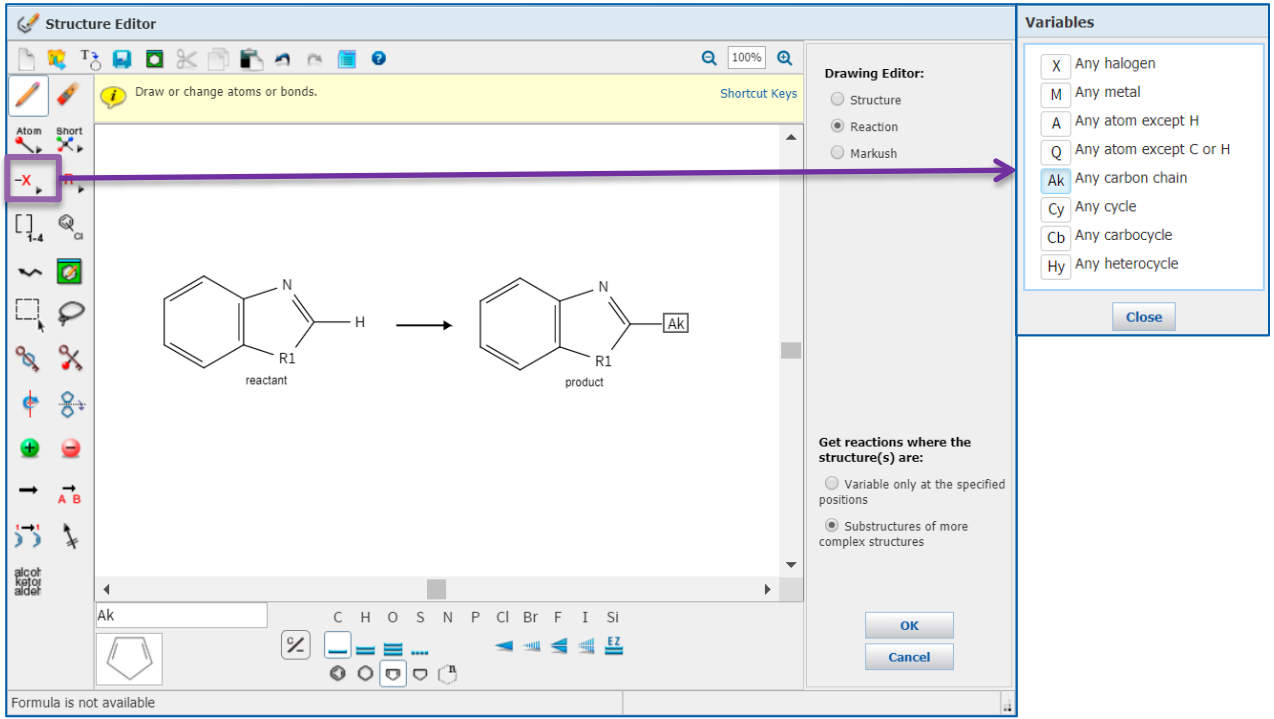
CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

亚结构反应检索

通过C-H活化对苯并噻唑或者恶唑进行烷基化

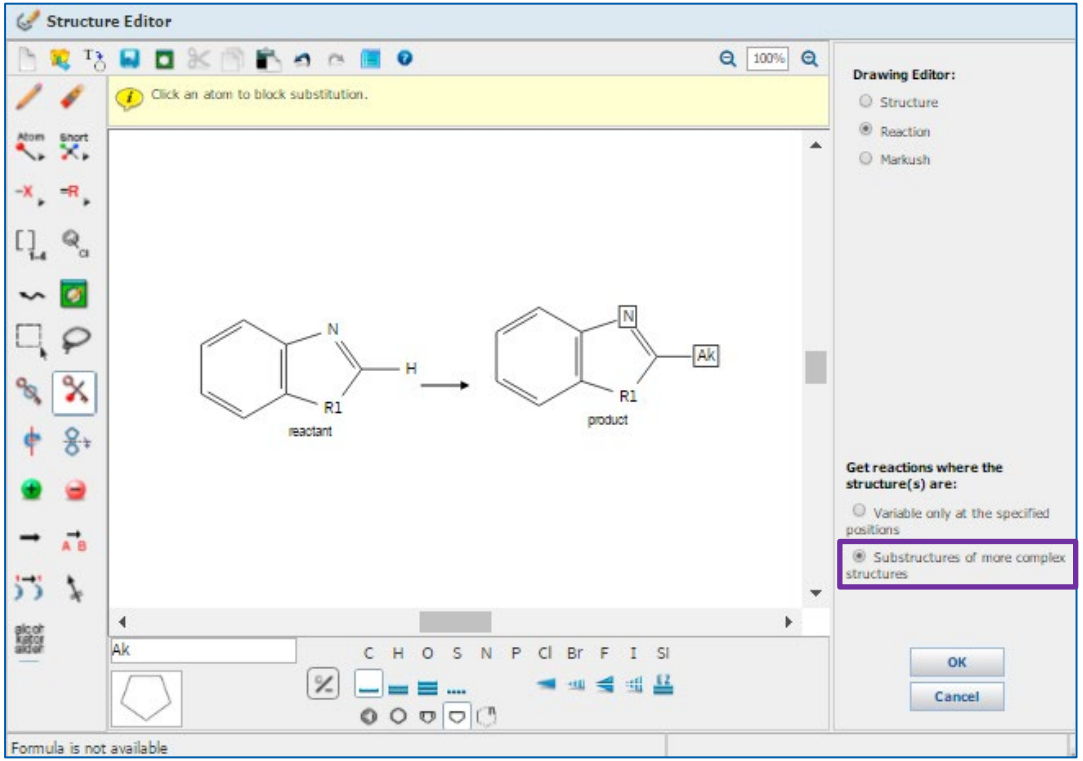


亚结构反应检索



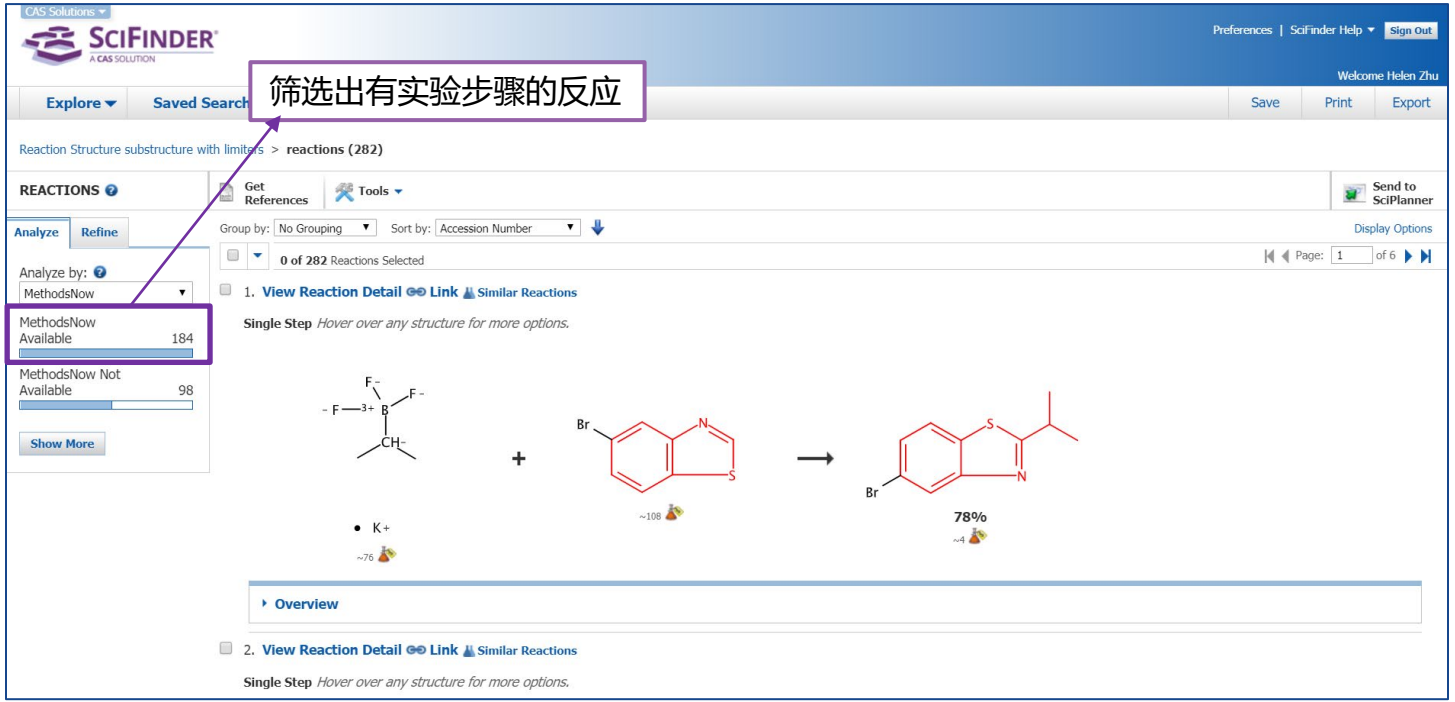
CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

亚结构反应检索



CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

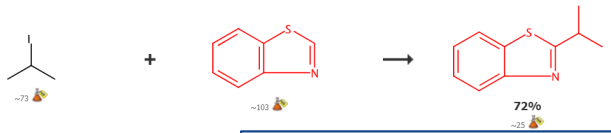
通过后处理工具筛选反应--Analyze



通过后处理工具筛选反应--Analyze

39. View Reaction Detail Link Similar Reactions

Single Step *Hover over any structure for more options.*



Overview

METHODSNOW™

Procedure

1. Add one equivalent of indole, 3 equivalents of benzothi
   Chemglass vial.
2. Purge the vial for 5 minutes under vacuum.

View more...

Available Experimental Data

^{1}H NMR, ^{13}C NMR, HRMS

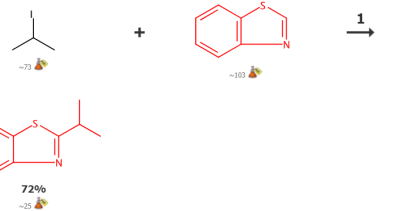
View with MethodsNow

re relief cap

MethodsNow

C-H Functionalization of Heteroarenes Using Unactivated Alkyl Halides through Visible-Light Photoredox Catalysis under Basic Conditions

By Bissonnette, Noah B.; Boyd, Michael J.; May, Gregory D.; Giroux, Simon; Nuhant, Philippe
From Journal of Organic Chemistry, 83(18), 10933-10940; 2018
Published by American Chemical Society



Products	2-(1-Methylethyl)benzothiazole, 72%, CAS RN: 17626-86-7
Reactants	Isopropyl iodide, CAS RN: 75-30-9 Benzothiazole, CAS RN: 95-16-9
Reagents	2,2,6,6-Tetramethylpiperidine, CAS RN: 768-66-1
Catalysts	Iridium(1+), [4,4'-bis(1,1-dimethylethyl)-2,2'-bipyridine-κN^1,κN^1]bis[2-(2-pyridinyl-κN)pher 33)-, hexafluorophosphate(1-) (1:1), CAS RN: 676525-77-2

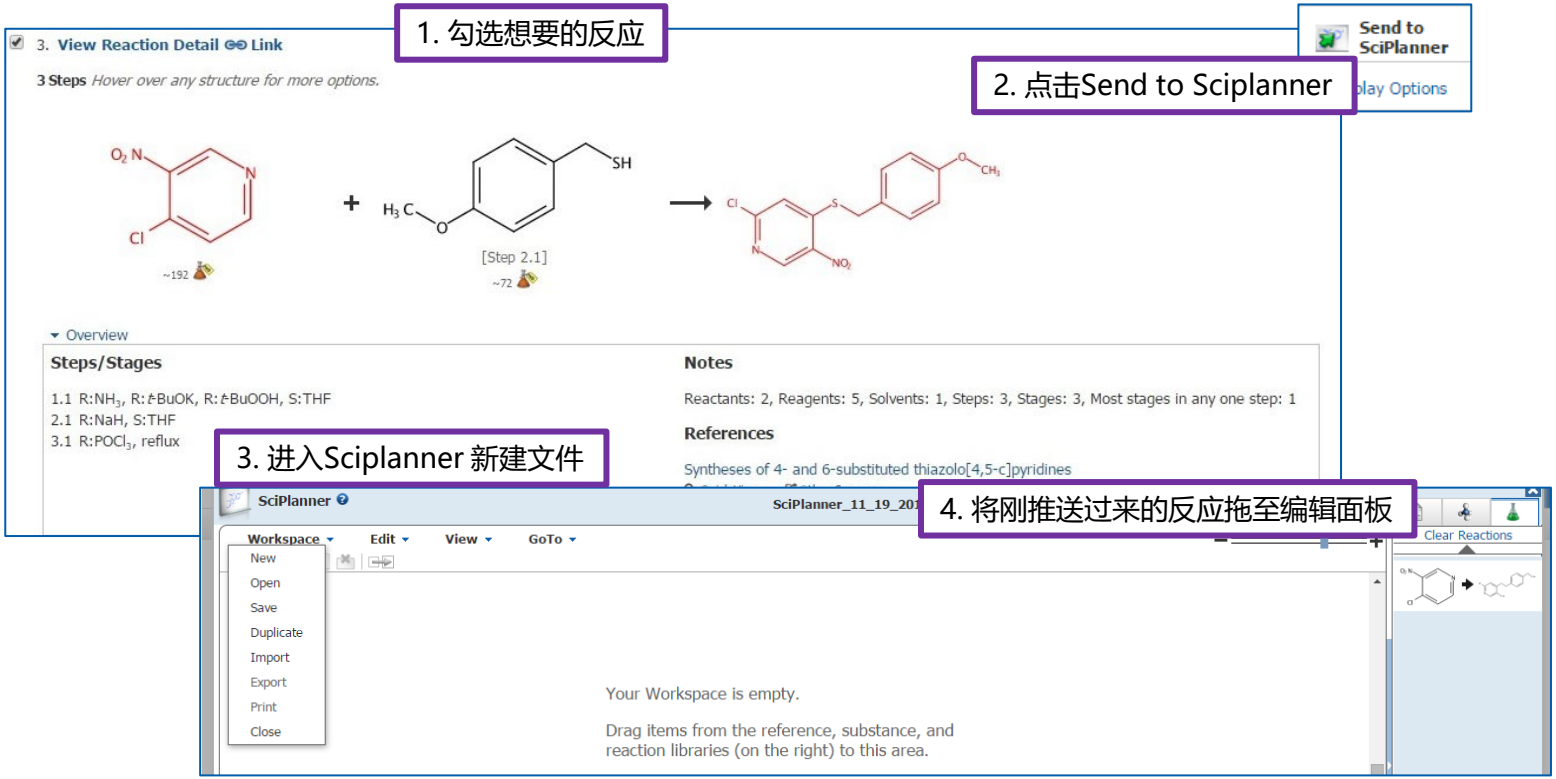
Solvents	Methanol, CAS RN: 67-56-1
Procedure	1. Add one equivalent of indole, 3 equivalents of benzothiazole and 2.5 mol % of $[Ir(ppy)_2(dtbbpy)]PF_6$ to a vial (1 dram, ~3.7 mL), 15 × 45 mm, 13-425 thread with red pressure relief cap Chemglass vial. 2. Purge the vial for 5 minutes under vacuum. 3. Fill the vial with nitrogen gas. 4. Add MeOH (0.5 mL), 3.1 equivalents of Et_3N and 1 equivalent of indole to the reaction mixture under N_2 atmosphere. 5. Remove the nitrogen line. 6. Add 3 equivalents of benzothiazole to the reaction mixture. 7. Irradiate the vial under blue LED light. 8. Stir the reaction mixture overnight at room temperature at 1000 rpm with a small cooling fan (approximately 16 hours). 9. After the completion of the reaction, add 0.25 equivalent of 1,4-dinitrobenzene to the vial. 10. Evaporate the volatiles using a V10 Biotage system. 11. Load the crude mixture onto a 40 g gold ISCO column using hexane/ethyl acetate (100:0 to 0:100) as eluents.
Transformation	Friedel-Crafts Alkylation
^{1}H NMR	(400 MHz, chloroform-d) δ 7.98 (dd, J = 8.2, 1.2 Hz, 1H), 7.85 (dd, J = 8.0, 1.3 Hz, 1H), 7.45 (ddd, J = 8.3, 7.2, 1.3 Hz, 1H), 7.34 (ddd, J = 8.3, 7.3, 1.2 Hz, 1H), 3.43 (hept, J = 6.9 Hz, 1H), 1.48 (d, J = 6.9 Hz, 6H).
^{13}C NMR	(101 MHz, chloroform-d) δ 178.7, 153.3, 134.8, 126.0, 124.7, 122.7, 121.7, 34.2, 23.1 (2C).
HRMS	(ESI), m/z: calcd for $C_{10}H_{12}NS[M + H]^+$: 178.0690, found: 178.0687.
CAS Method Number	3-085-CAS-19169886

提纲

- 美国化学文摘社简介
- SciFinder简介及检索方式
  - 文献检索（PatentPak及MethodsNow-ANA的应用）
  - 物质检索
  - Markush检索
  - 反应检索（MethodsNow-SYN的应用）
  - SciPlanner
- SciFinder常见问题及解决

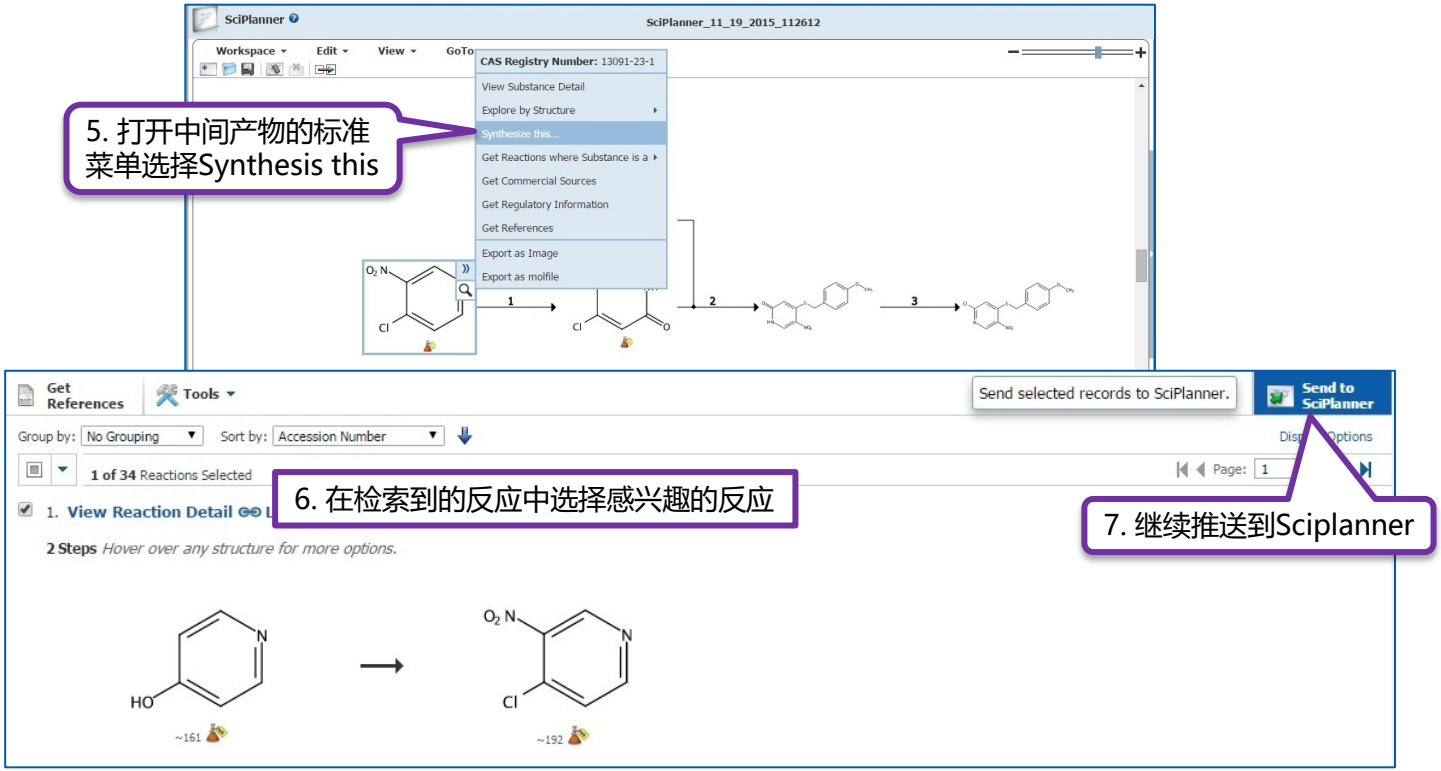
CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciPlanner使用简介



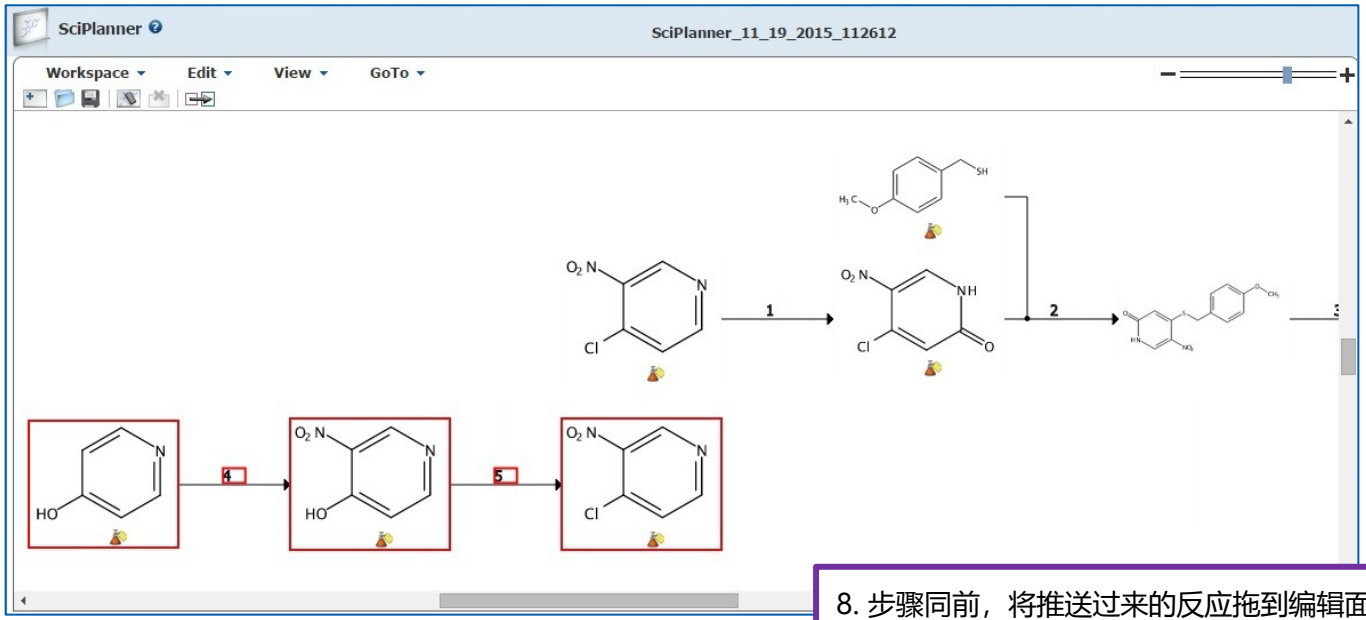
CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciPlanner使用简介



CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

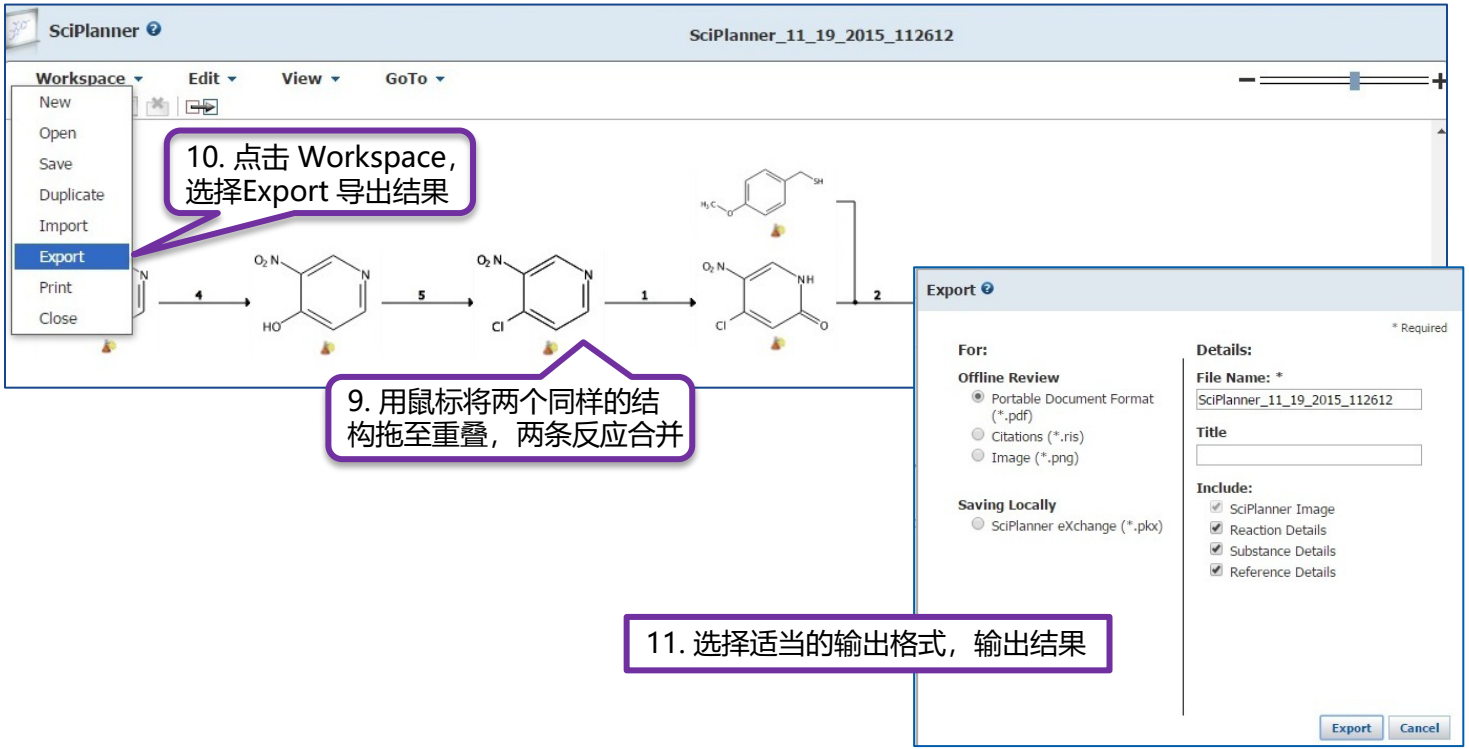
SciPlanner使用简介



8. 步骤同前，将推送过来的反应拖到编辑面板中，可以看到两条反应中存在同样的结构

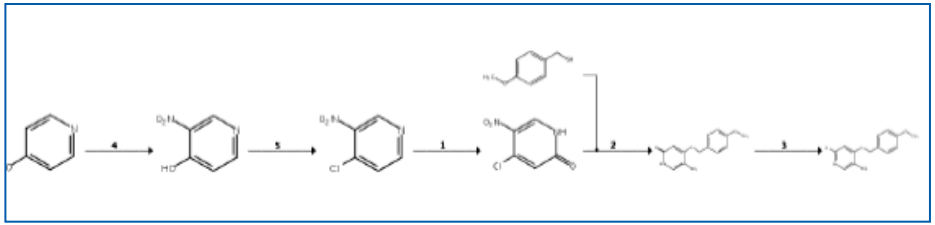
CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciPlanner使用简介



CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciPlanner导出结果



Reaction	Stages		Notes	Yield
5	1.1	R:$POCl_3$, S:PhMe, 0°C → rt; 16 h, rt → 110°C	Reactants: 1, Reagents: 2, Solvents: 2, Steps: 1, Stages: 2	90%
	1.2	R:K_2CO_3, S:H_2O, cooled, pH 10	**Transformation:** 1. Formation of Alkyl Halides from Alcohols	

References

High color rendering index and color stable hybrid white efficient OLEDs with a double emitting layer structure using a single phosphorescence dopant of heteroleptic platinum complexes

By Poloek, Anurach et al

From Journal of Materials Chemistry C: Materials for Optical and Electronic Devices, 2(48), 10343-10356; 2014

Substance Information

1228150-22-8 $C_{13}H_{12}N_2O_4S$ 2(1*H*)-Pyridinone, 4-[[[4-methoxyphenyl]methyl]thio]-5-nitro- **Related Info:** ~ 2 References Reactions	1228150-23-9 $C_{13}H_{11}ClN_2O_3S$ Pyridine, 2-chloro-4-[[[4-methoxyphenyl]methyl]thio]-5-nitro- **Related Info:** ~ 2 References Reactions	13091-23-1 $C_5H_3ClN_2O_2$ Pyridine, 4-chloro-3-nitro- **Related Info:** ~ 391 References Reactions ~ 190 Commercial Sources Regulatory Information
5435-54-1 $C_5H_4N_2O_3$ 4-Pyridinol, 3-nitro- **Related Info:** ~ 113 References Reactions ~ 197 Commercial Sources Regulatory Information	6258-60-2 $C_6H_{10}OS$ Benzenemethanethiol, 4-methoxy- **Related Info:** ~ 749 References Reactions ~ 71 Commercial Sources Regulatory Information	626-64-2 C_5H_5NO 4-Pyridinol **Related Info:** ~ 1351 References Reactions ~ 160 Commercial Sources Regulatory Information
850663-54-6 $C_5H_3ClN_2O_3$ 2(1*H*)-Pyridinone, 4-chloro-5-nitro- **Related Info:** ~ 22 References Reactions ~ 136 Commercial Sources		

CAS®
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

提纲

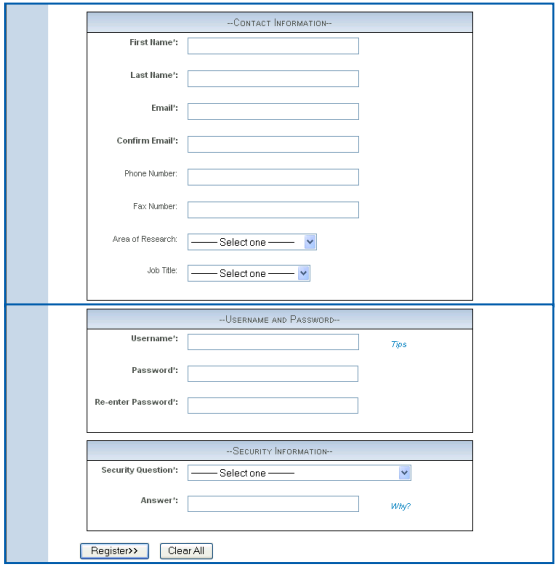
- 美国化学文摘社简介
- SciFinder简介及检索方式
  - 文献检索（PatentPak及MethodsNow-ANA的应用）
  - 物质检索
  - Markush检索
  - 反应检索（MethodsNow-SYN的应用）
  - SciPlanner
- SciFinder常见问题及解决

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder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）

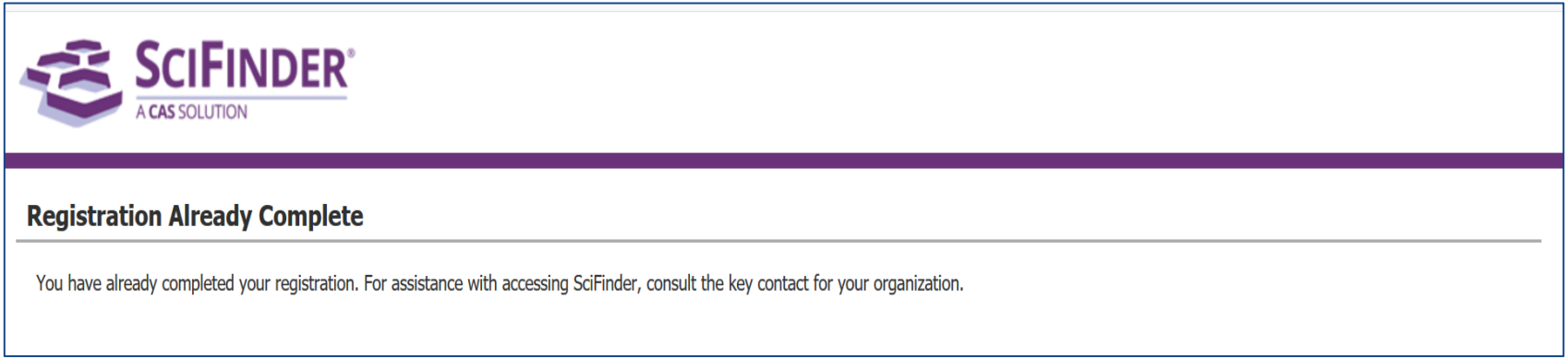
3.密码必须包含 7-15 个字符，并且至少包含三种以下字符：

- 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）。

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

如何获取SciFinder账号



点击激活链接后注册成功。

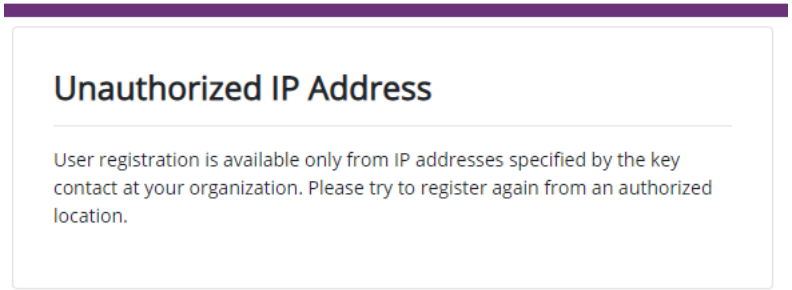
之后直接点击https://SciFinder.cas.org即可访问SciFinder数据库。

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder使用注意事项

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

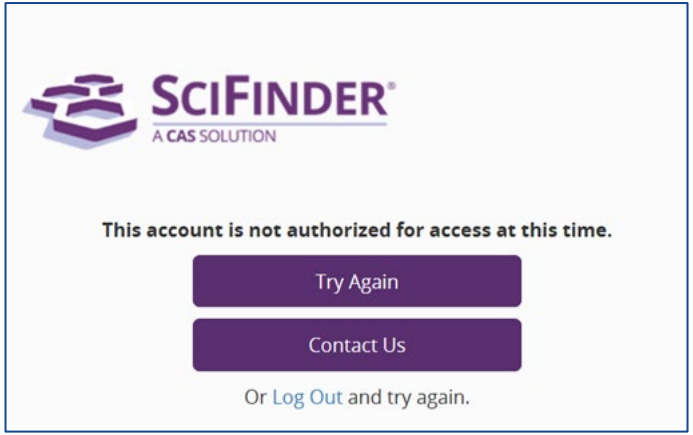
SciFinder常见问题



- 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，且在校园网内，请联系图书馆或china@acs-i.org

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder常见问题



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

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

更多培训资料请访问

https://www.cas.org/support/training/scifinder

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

谢 谢!

欢迎联系：

美国艾赛思国际有限公司北京代表处

ACS International Ltd Beijing Rep Office

china@acs-i.org

www.cas.org

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY