

SciFinder Web使用介绍

李虹

SciFinder培训专员

2014.11

提纲



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

美国化学文摘社—Chemical Abstracts Service

SciFinder®
The choice for chemistry research.™

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



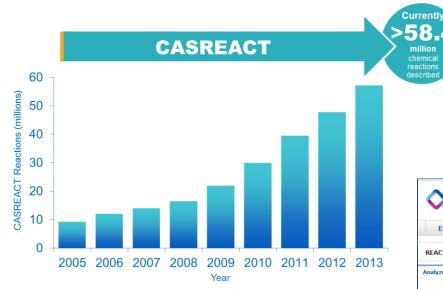
SciFinder的覆盖内容



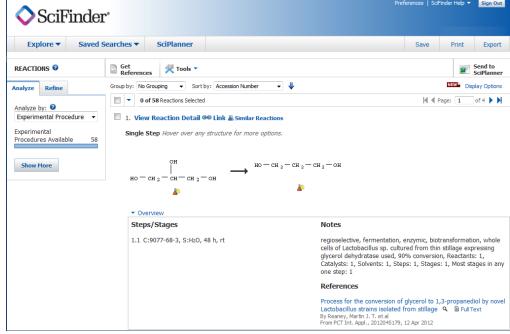




CASREACT® 是检索化学反应最权威的来源

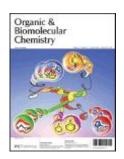


CASREACT是世界上最大的,更新速度最快的反应数据库



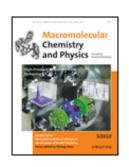


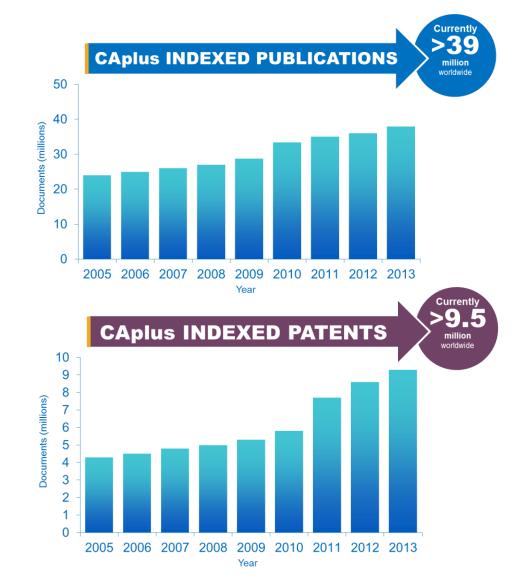




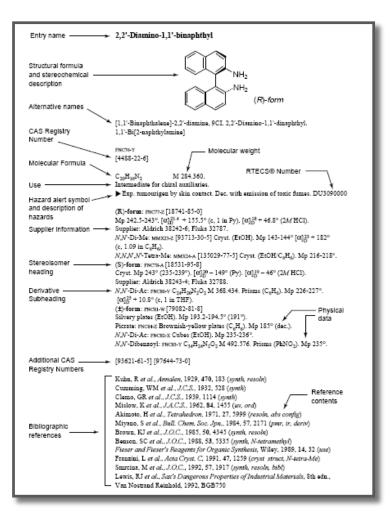








CAS REGISTRYSM 是化学物质信息的"黄金标准" for chemistry research."





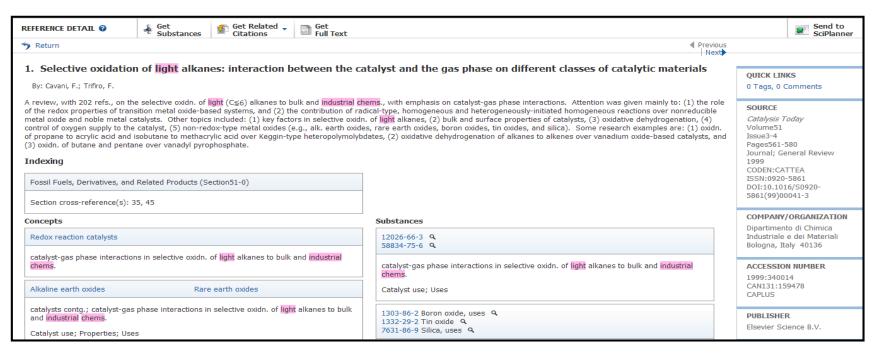
提纲



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







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

一篇完整的文献界面包括:

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



SciFinder中的文献检索方法

• 功能方面

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

• 检索方法推荐

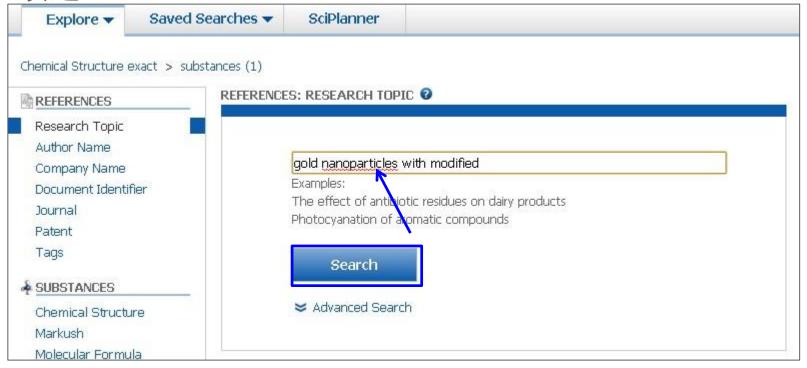
- 关注某特定领域的文献——-主题检索
- 关注某科研人员的文献——-作者名检索



SciFinder Web中的主题检索

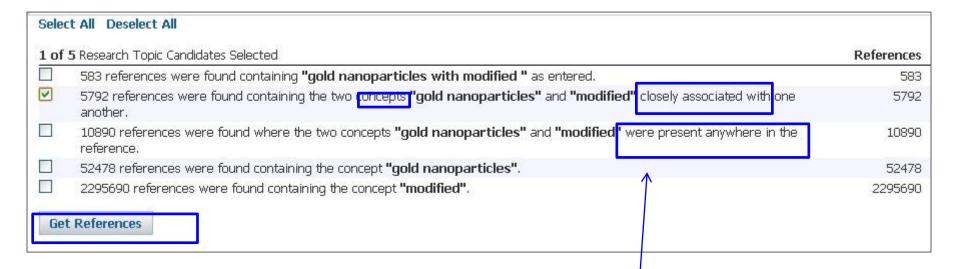
主题: gold nanoparticles with modified (金纳米颗粒的

改进)









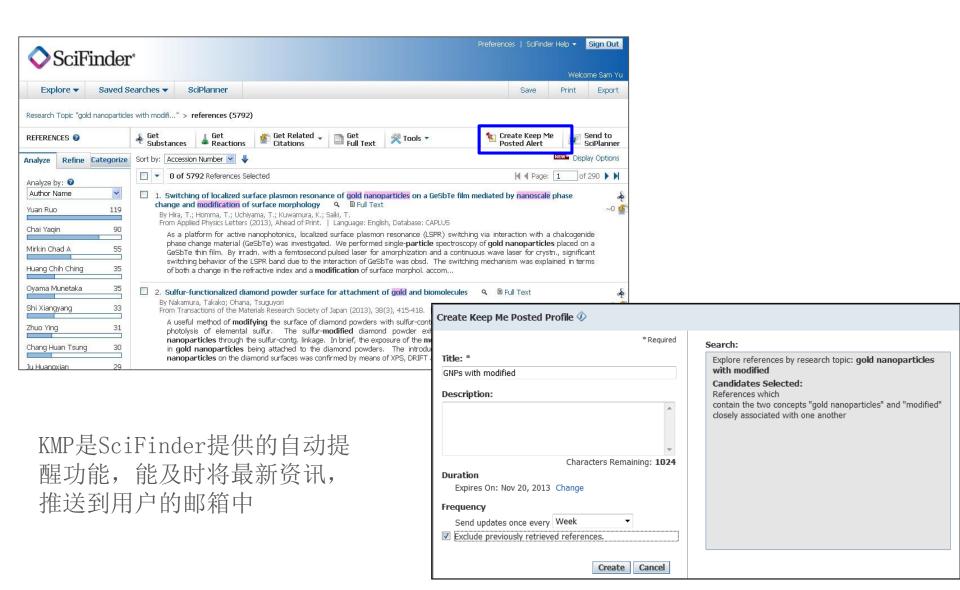
"Concept"表示做了同意词的扩展

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

"present anywhere in the reference" 表示同时出现在一段话中

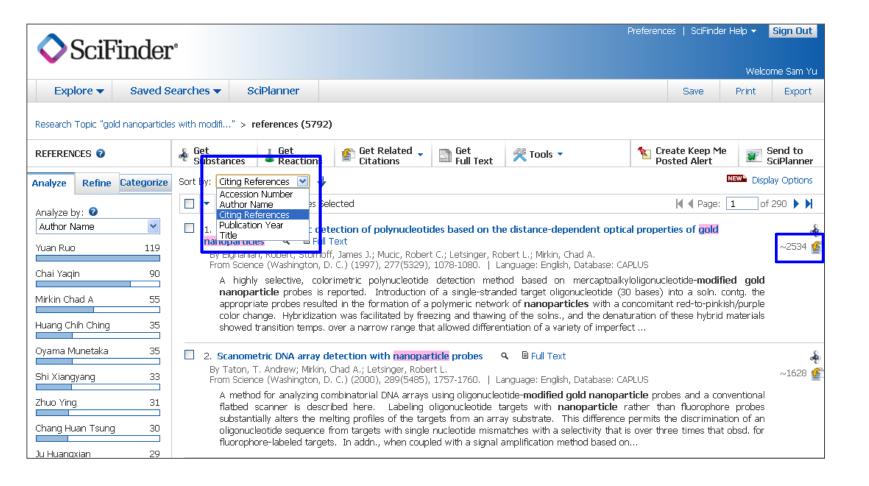
SciFinder中的KMP







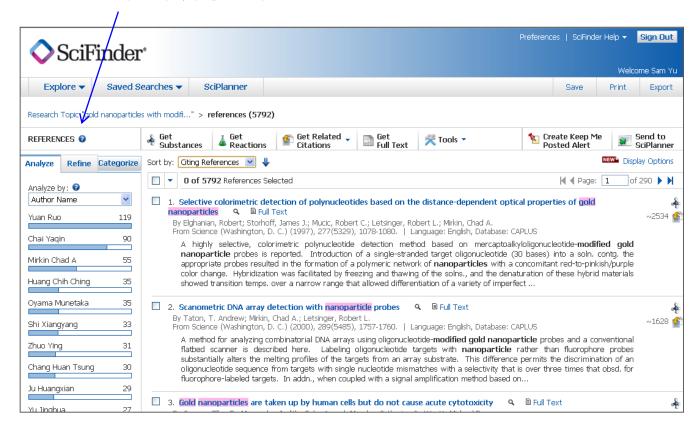
SciFinder提供的引文排序— Citing Reference





SciFinder 中的文献检索结果

文献分析工具



SciFinder提供强大的文献处理工具,帮助处理文献

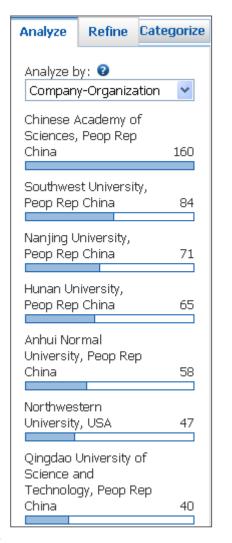




领域内主要研 究人员,专家



主要研究机构,合作伙伴,竞争对手

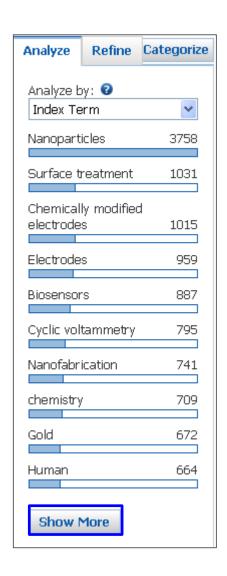


主要出版杂志,机构,潜在投稿期刊

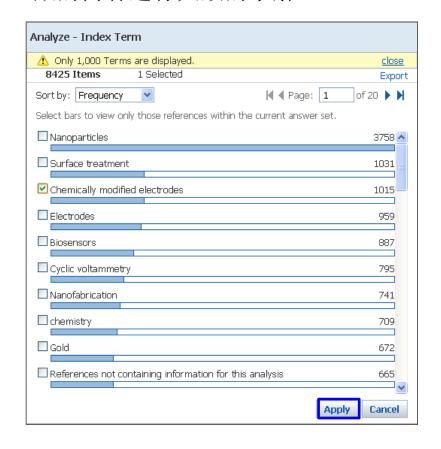
Analyze	Refine	Categorize		
Analyze by: 🕝				
Journal M	Journal Name			
Biosensors & bioelectronics 351				
Faming Zhuanli Shenqing 221				
Langmuir 170				
Talanta	150			
Journal of the American Chemical Society 121				
Analyst (Cambridge, United Kingdom) 119				
Analytica chimica acta 116				
Electroanalysis 106				



SciFinder中的Analysis By Index Term



索引词(Index Term):可以帮助我们对文献的内容进行大致的了解



选择感兴趣的内容,点击Apply

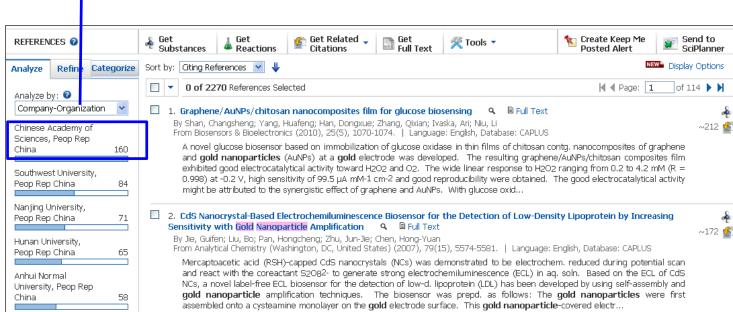






Refine: 帮助用户迅速获得需要的文献

中科院



结果集的保存

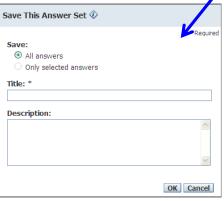




Export:

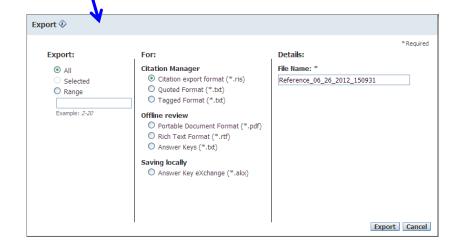
Citation manager: 保存成RIS格式, 用于导入EndNote等文献管理工具

Offline Review:保存过成PDF,RTF格式,用于脱机浏览



Save:

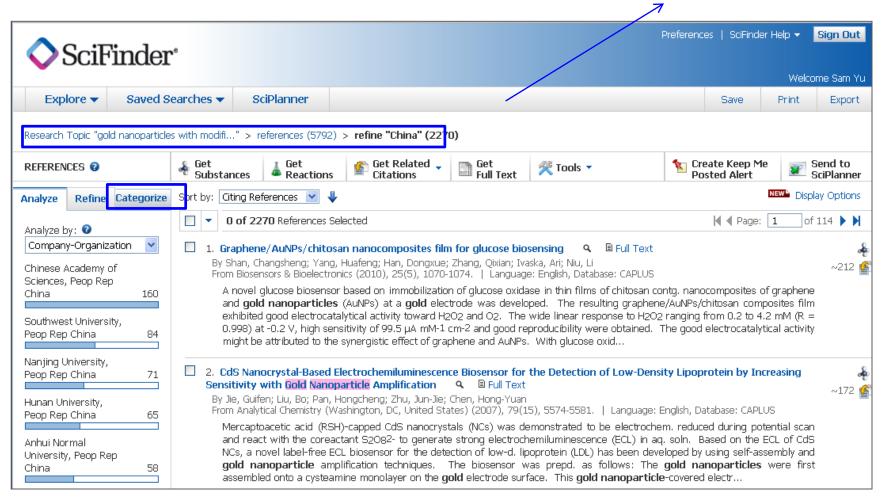
保存在服务器上,可登陆后查看





SciFinder 中的Categorize

通过历史导航条回到任一检索界面



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



SciFinder中的Categorize



练习



• 检索和转基因食品安全评估的文献,获得近5年的综述文献

- 检索策略:
 - Topic Search: Genetically Modified Food with safety
 - Refine publish year: 2008-
 - Refine document type: Review

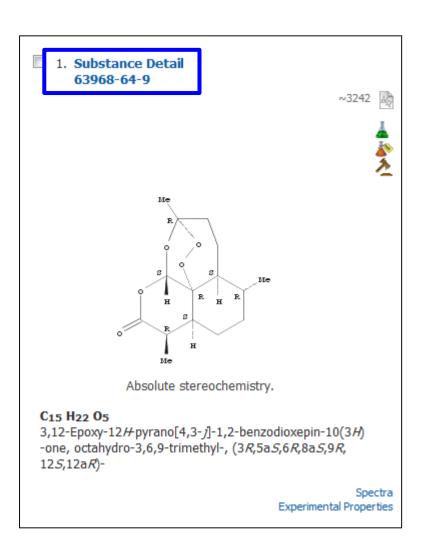
提纲



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

SciFinder中的物质结果界面

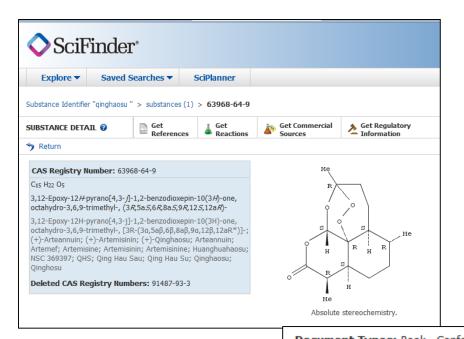




一个完整的物质结果界面包含:

- •物质详情连接
- •文献连接
- •反应连接
- •商品信息连接
- •管制品信息连接
- •谱图连接
- •实验性质连接





物质的的CAS号、分子式、结构式、化学名、别名

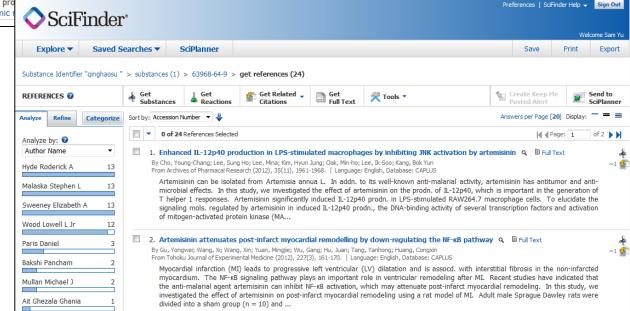
按照CAS Role分类的 专利、非专利文献列 表。对某类文献感兴 趣,仅需点击交叉处 的 即可方便快捷 地获取。

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





物质的生物活性和靶点信息, 直接点击,获得相关文献





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

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



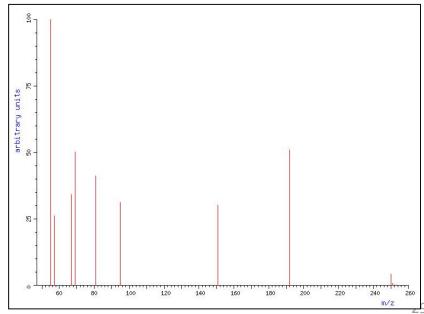
Biological Properties	Value	Condition	Note	Top
ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion)	See full text		(1)CAS	
Half-Life (Biological)	See full text	1 of 2	(9)CAS	
Median Lethal Dose(LD50)	5576 mg/kg	Organism: rat Route: oral	(14)APC	
Median Lethal Dose(LD50)	5105 mg/kg	Organism: mouse Route: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

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



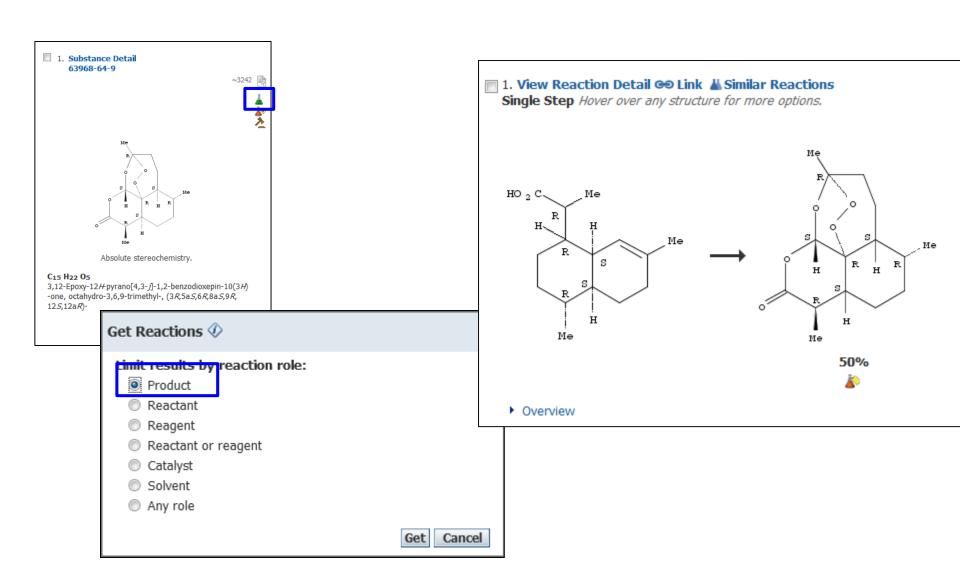
Value	Condition	Note To
See full text	1 of 8	(3)CAS
See full text	1 of 2	(4)IC
See full text	1 of 11	(11)CAS
See spectrum		(13)WSS
See spectrum		(13)WSS
See full text	1 of 10	(1)CAS
See full text	1 of 10	(15)CAS
See full text	1 of 2	(5)CAS
See full text	1 of 2	(24)CAS
See full text		(22)CAS
See full text		(25)CAS
	See full text See full text See spectrum See spectrum See full text	See full text 1 of 8 See full text 1 of 2 See full text 1 of 11 See spectrum 5ee spectrum See full text 1 of 10 See full text 1 of 10 See full text 1 of 2 See full text 1 of 2 See full text 1 of 2 See full text 1 of 2

物质的实验谱图



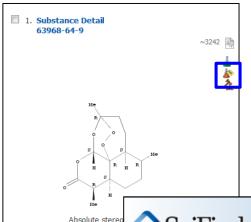
物质有关的反应



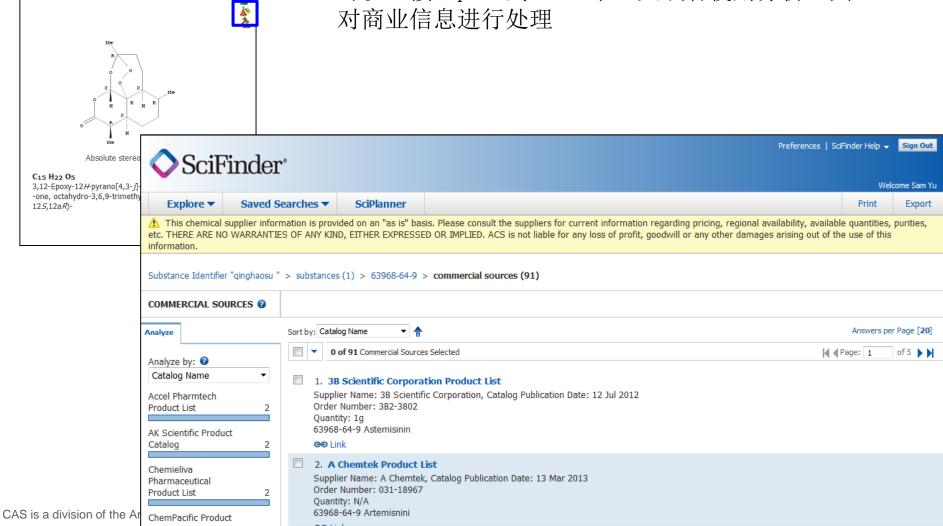






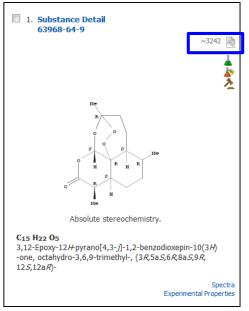


可以直接Export到Excel中,又或者使用分析工具,



物质有关的文献信息





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

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



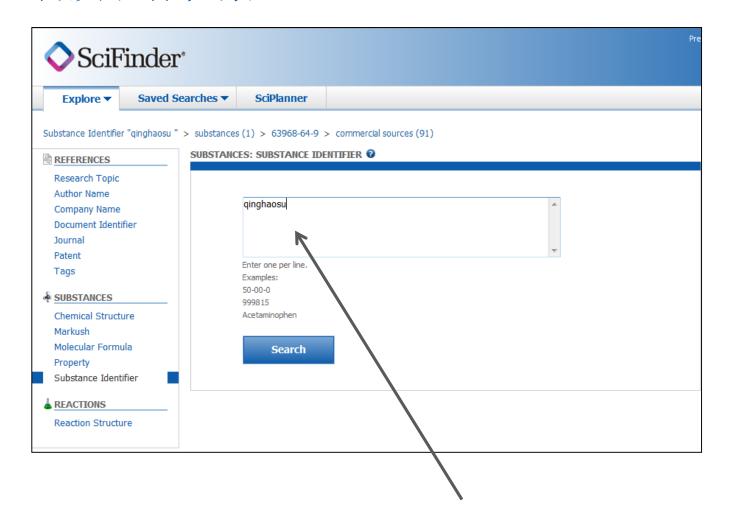


- 功能方面
 - 物质名称, CAS No
 - 分子式
 - 结构式
 - 理化性质
- 推荐的物质检索功能
 - 有机物,天然产物及衍生物 ---结构比较方便
 - 无机物

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



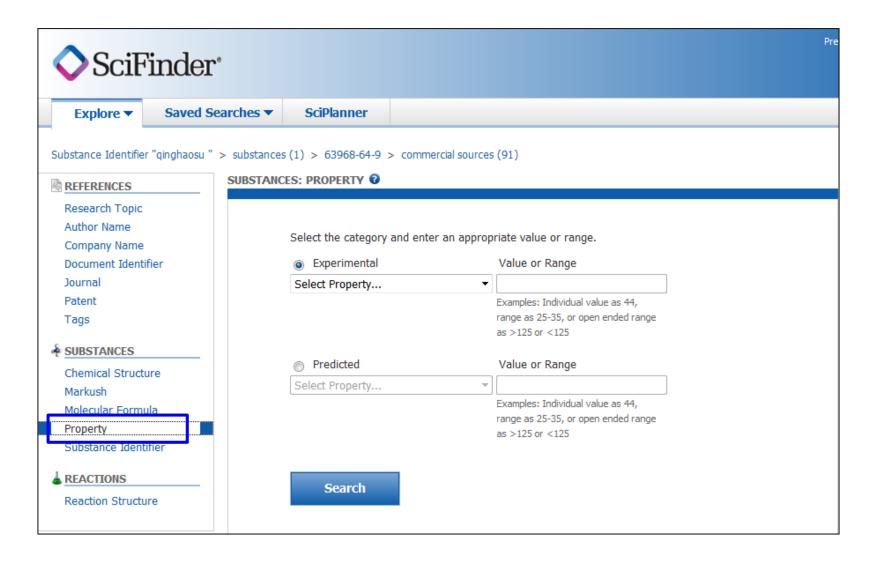
物质名称检索



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

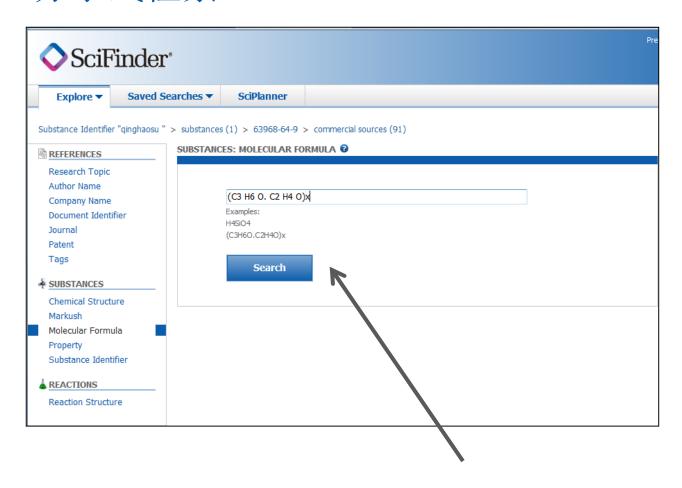








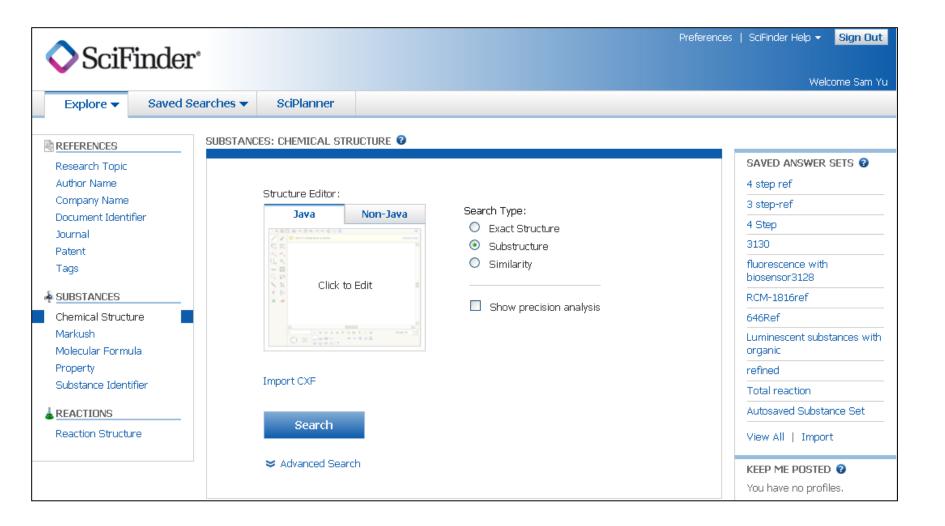




SciFinder中的分子式的检索,需要按照HILL排序方式输入,简单来说,CH写前面,其他的按照字母顺序写

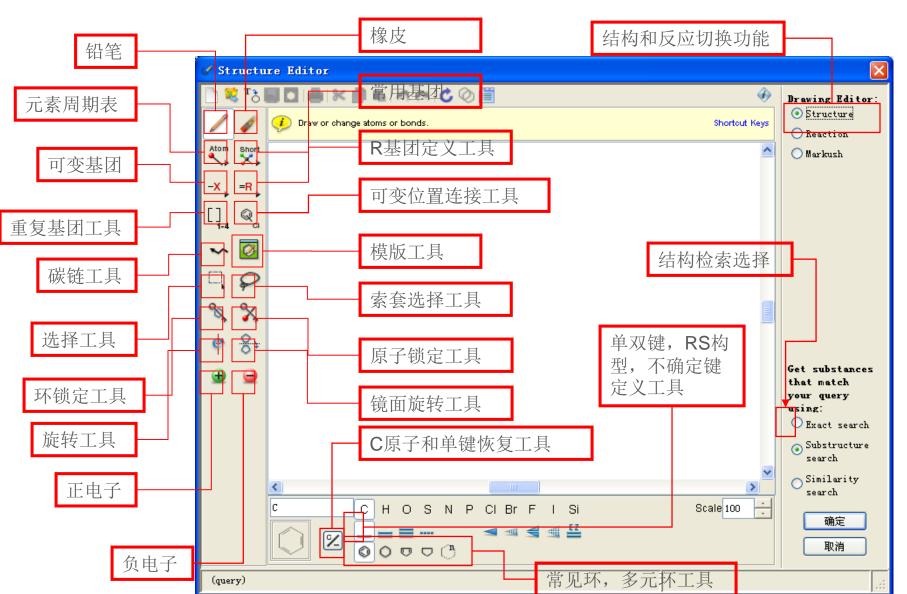
结构式检索





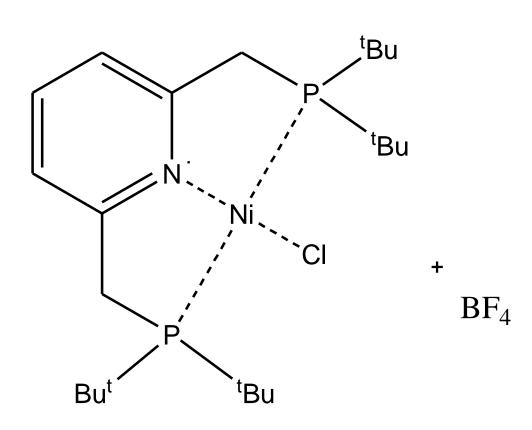


SciFinder结构绘制工具







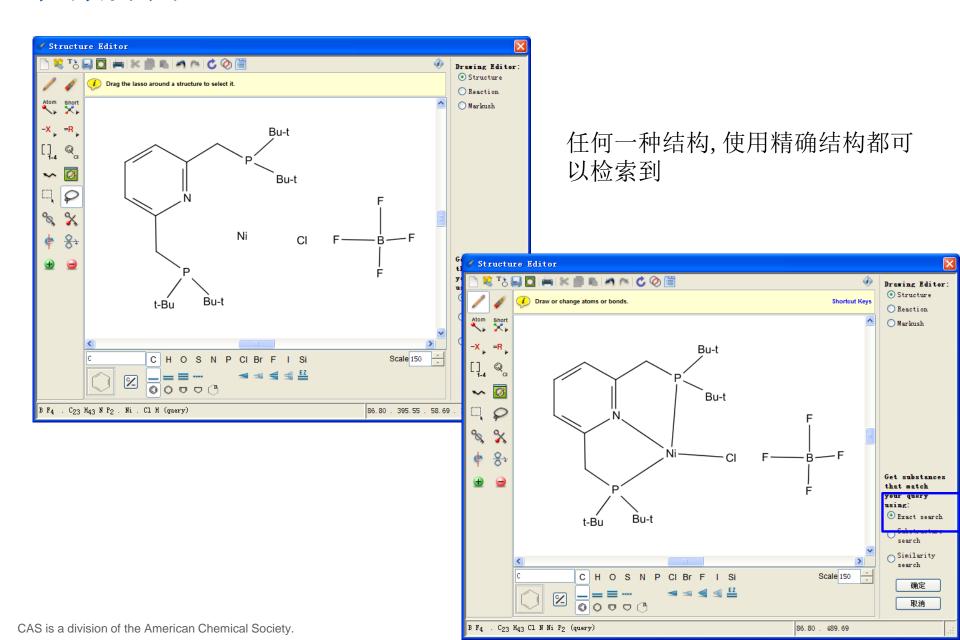


该结构中包含:

配体 金属 阳离子

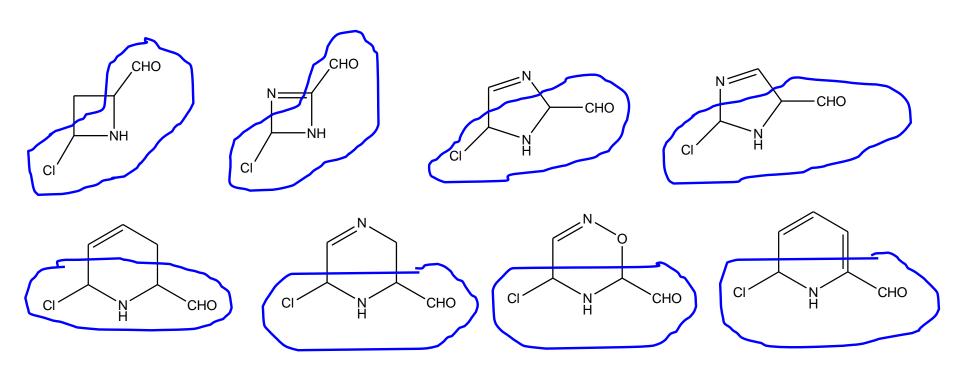








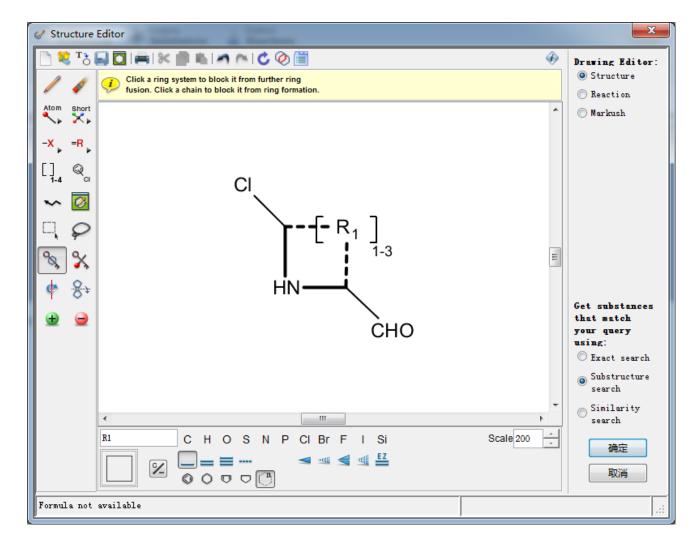




41

结构定义

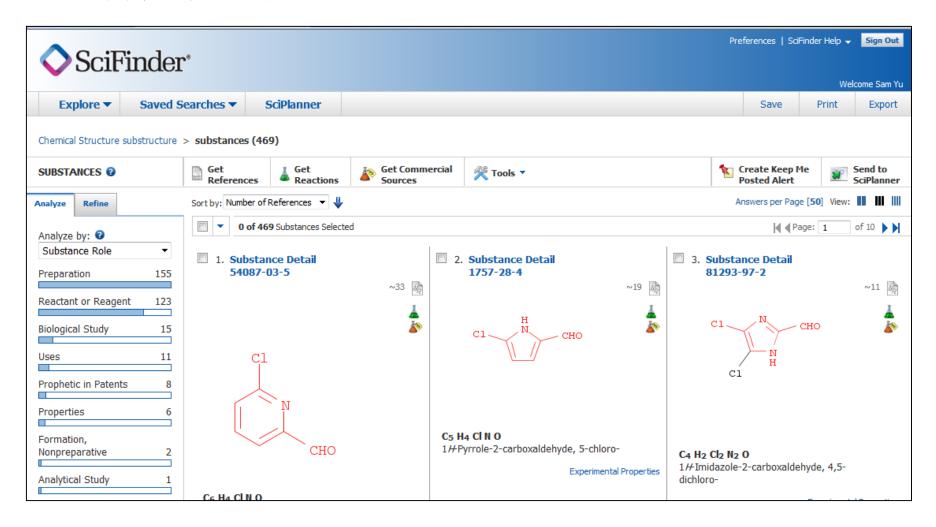




用亚结构检索获得所有的物质







练习



- 用结构检索二茂铁
- 检索策略
 - 绘制两个换戊二烯
 - 绘制一个铁
 - 精确检索,选择配位化合物

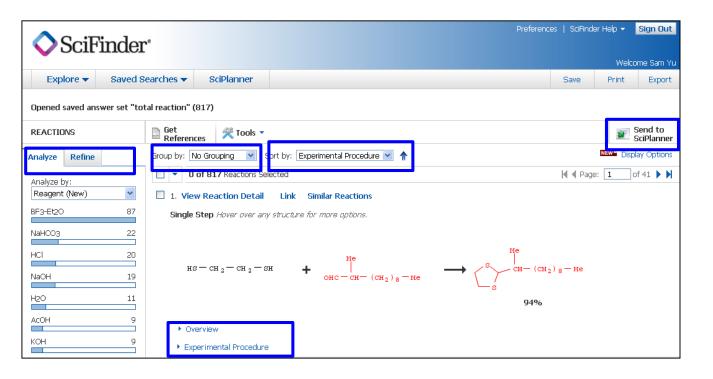
提纲



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



SciFinder Web中的反应记录

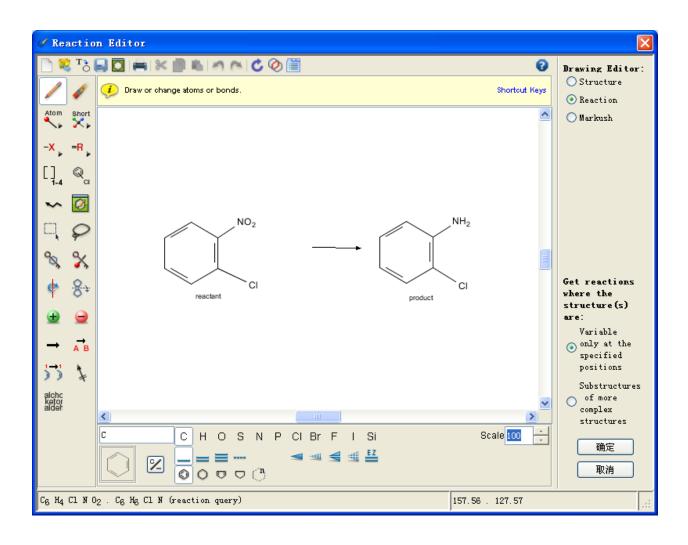


- 1. 反应分组功能
- 2. 反应排序功能
- 3. 反应后处理功能
- 4. 反应全景及实验过程
- 5. SciPlanner





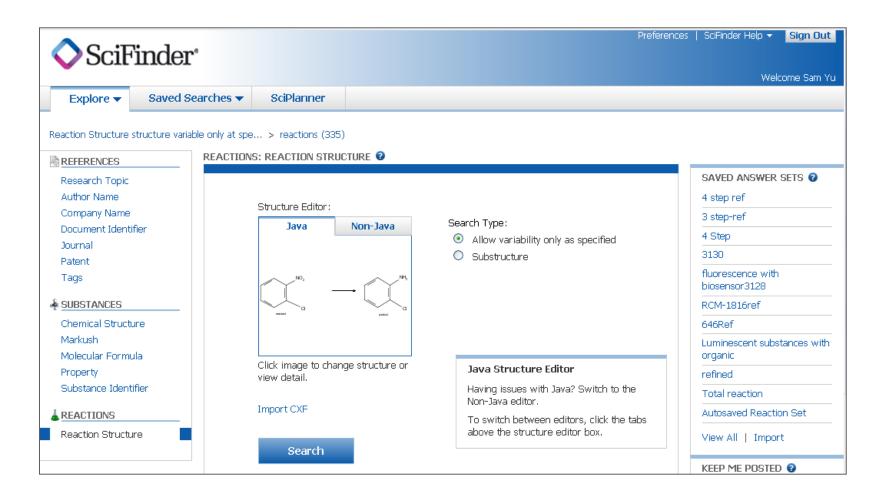
SciFinder反应检索



Allow variability only as specified: 仅在特定位点发生变化 Substructure:亚结构检索,允许有更多取代情况

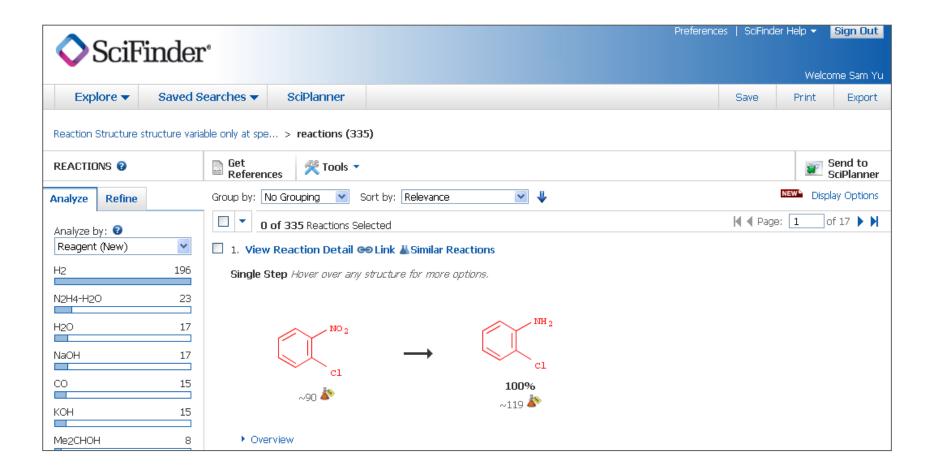






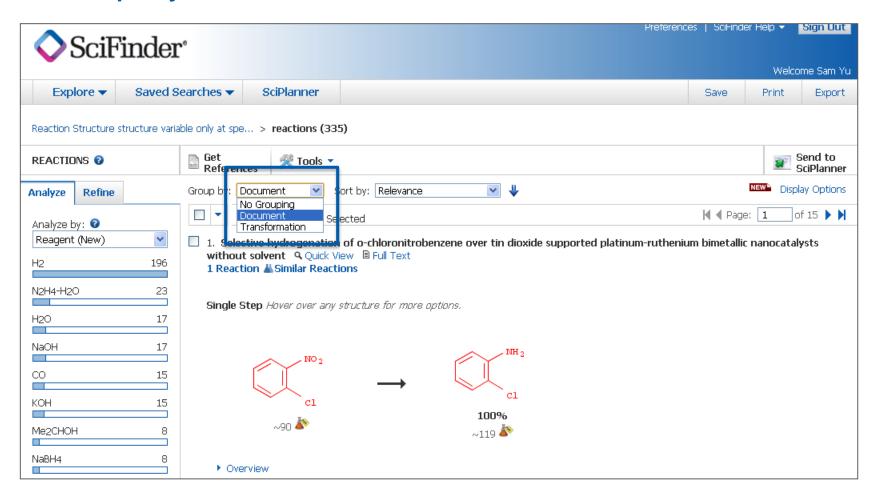






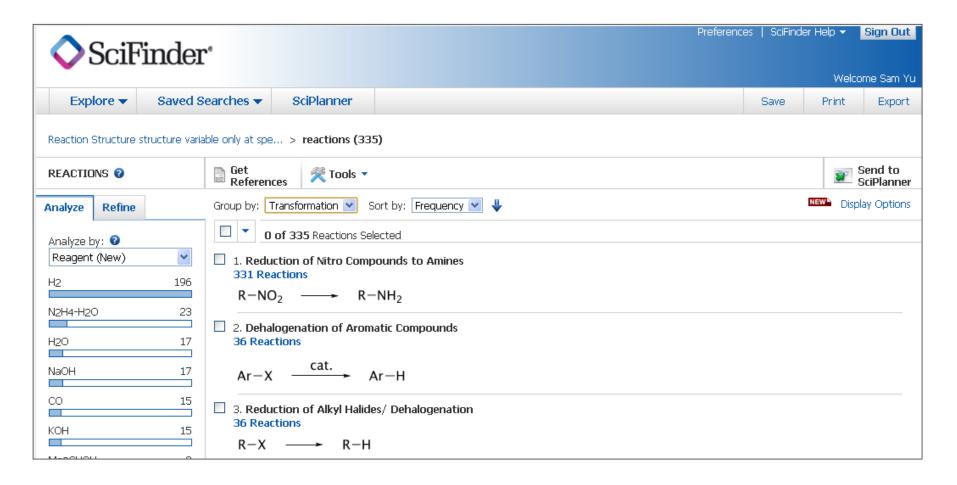


Group by Document 按照出处文献分类显示



来自同一篇文献的反应都被整合到一起并集中显示

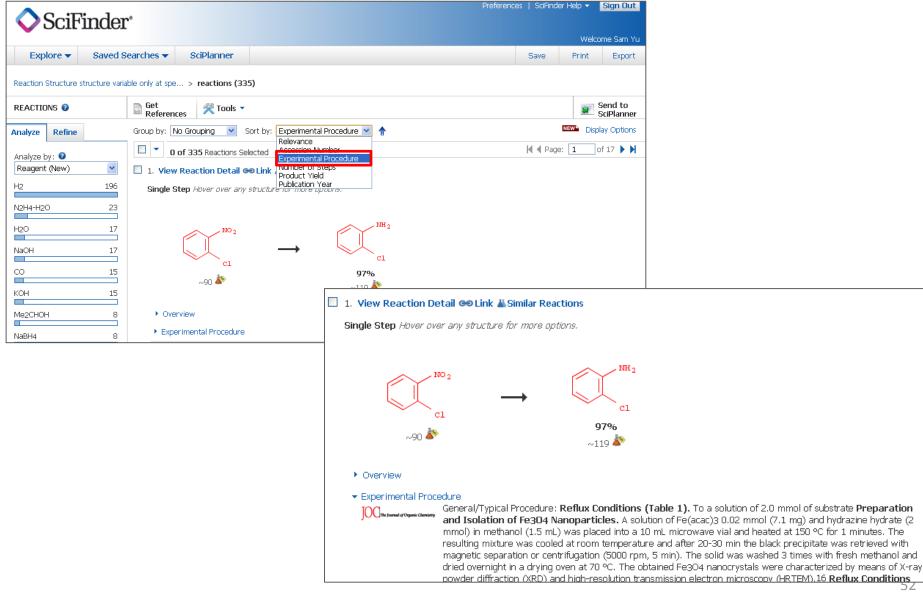
Group by Transformation 按照反应类型分类显示。



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



获得有实验步骤的反应结果集



练习



- 检索从硝基吡啶还原成吡啶氨的反应,
- 检索策略
 - 分别绘制硝基吡啶和吡啶氨
 - 中间绘制箭头,确定反应物和产物

提纲



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



SciFinder Web的注册和登陆

SciFinder Web的系统要求

Windows用户支持IE 9. x或者FireFox 2. x

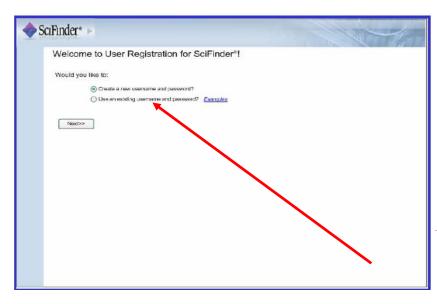
Mac 用户支持 Firefox 和 Safari

Java 安装(初次使用结构时自动安装,建议安装Java 7)

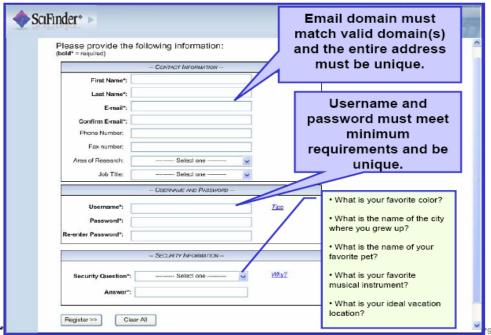
在图书馆相关页面上找到SciFinder Web注册用的网址

点击URL创建SciFinder Web账号





开始创建SciFinder Web帐号 创建ID所用的IP不能是代理服务 器的IP





设置用户名及密码注意事项

用户名:

必须是唯一的,且包含 5-15 个字符。它可以只包含字母或字母组合、数字和/或以下特殊字符:

- (破折号)
- _ (下划线)
- . (句点)
- @ (表示 "at" 的符号)

密码:

必须包含 7-15 个字符,并且至少包含三个以下字符:

字母

混合的大小写字母

数字

非字母数字的字符(例如@、#、%、&、*)

密码设置小技巧:

1: 不要和账号中有重复的字符

2: 密码格式最好是abc@123

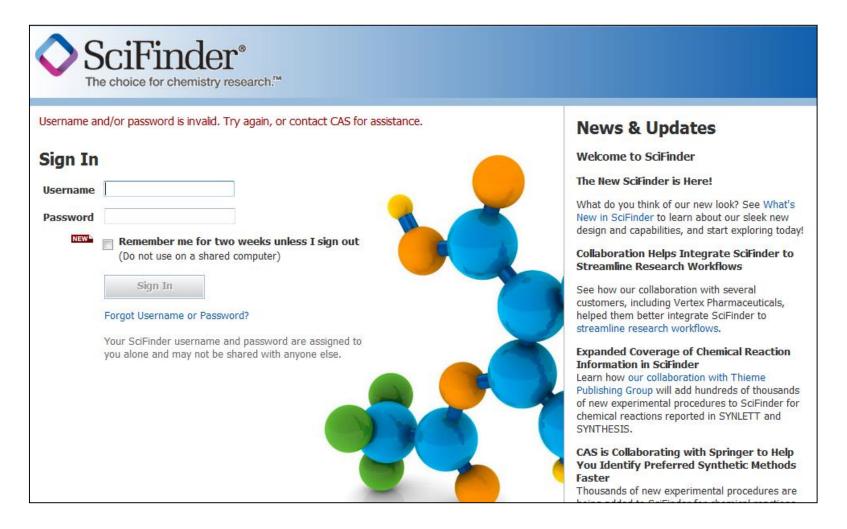








SciFinder Web 常见问题



账号或密码错误,请在username处填写,截图,并与图书馆联系





任何需要反馈给图书馆的问题,都请点击测试IP地址的链接

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



Your IP address comes across to CAS as: 210.32.9.45

将页面截图下来,一并发给图书馆





SciFinder Web的注意事项

鉴于360浏览器,及360安全卫士会对SciFinder Web的使用造成一定的影响,如打不开全文链接,无法下载,并会对SciFinder的一些功能进行屏蔽,我们建议不要使用360浏览器访问SciFinder,即使在用其他浏览器的时候,也请关闭360安全卫士



SciFinder Web网络在线资源平台

www.igroup.com.cn/cas



资源下载: PDF文件

在线演示: Flash演示

网络培训:不定期的网络专题培训

SciFinder北方高校群: 275247551



Thank You

李虹

SciFinder 培训专员

Mail: Della@igroup.com.cn

Tel:010-82335058-808