CAS SCIFINDER^{n}
使用技巧手册

2022 年 1 月

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

CAS SciFinder^{n}是美国化学文摘社（CAS）出品的新一代的权威科学研究工具，是化学及相关学科智能研究平台，提供全球全面、可靠的化学及相关学科研究信息和分析工具。CAS SciFinder^{n} 由国际科学家团队追踪全球科技进展，每日收录汇总、标引、管理着世界上的专利、科技期刊等内容，并通过 CAS SciFinder^{n} 平台提供的先进检索技术高效揭示重要的技术信息，确保研究人员及时同步全球重要的研究进展。CAS SciFinder^{n} 涵盖了化学及相关领域，如化学、生物、医药、材料、食品、应用化学、化学工程、农学、高分子、物理等多学科、跨学科的科技信息；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、预印本和网络资源等。

CAS SciFinder^{n} 独特内容和特色：

提升文献检索效率：业界最先进的检索引擎之一，将文献检索时间缩短一半，获得更精确的结果，提高检索效率。

高效设计合成计划：充分利用全球最大的单步和多步反应数据库之一，全面考量反应条件、产率、催化剂和实验步骤，高效设计出合成计划（可节省一半的时间）。

Synthetic Methods 合成方法解决方案：Synthetic Methods 是CAS SciFinder^{n}中的模块，是世界上最大合成方法合集之一，涵盖顶级期刊及专利中的合成制备信息，提供合成方法的每步详细操作信息，以易于阅读的表格形式展示实验详情，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

CAS PatentPak®专利分析解决方案：CAS PatentPak 是 CAS SciFinder^{n} 中的模块，服务于科研人员和知识产权人士。PatentPak 在定位和分析大量专利中的化学结构方面，可以为研究人员节省一半以上的时间。PatentPak 是加速化学专利分析最可靠的工具之一；迄今为止只有 PatentPak 采用人工标引——研究人员可以快速识别专利中难以发现的物质（例如，表格化合物和图形图像内的化合物）。使用 PatentPak 可以访问 CAS REGISTRY^{SM}——世界上最全面的可公开获取的物质信息集合。

逆合成路线设计工具Retrosynthesis：基于全球最大的化学反应数据合集CAS REACTIONS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。

支撑生物学研究：生物序列检索工具Biosequences Search 提供超过12亿条可检索生物序列，可进行 FTO 检索、侵权检索。

可视化检索结果：用户友好的可视化工具可以帮助用户快速做出更好的决策，这些工具可以精确定位趋势、模式和异常值，帮助将信息转化为洞察。

CAS REGISTRY：全球最大的物质数据合集，收录自19世纪初至今公开披露的超过1.9亿个独特的物质（包括合金、配合物、矿物、混合物、聚合物和盐），CAS登记号被誉为化学物质的黄金标准，是向WHO提交INN申请时必须提供的信息，被广泛地应用在科研界及商务流程中。

CAS Reactions：CAS创立的全球最大化学反应合集，收录1840年以来源自专利和非专利文献的1.4亿多条单步和多步反应。CAS的科学家在标引化学反应过程中提供了独特的增值信息，包括：实验安全信息、反应类型、反应条件及详细的实验操作步骤等，节省了用户从全文中总结、归纳相关反应信息所花费的时间。

马库什结构：CAS是全球唯一提供专利马库什结构的机构。从全球64家专利授权机构公开的专利中提取超过130万个可检索及浏览的马库什结构。一个马库什结构可能涵盖数千甚至数万个化合物，提升了用户进行化合物结构新颖性和创造性检索的能力。

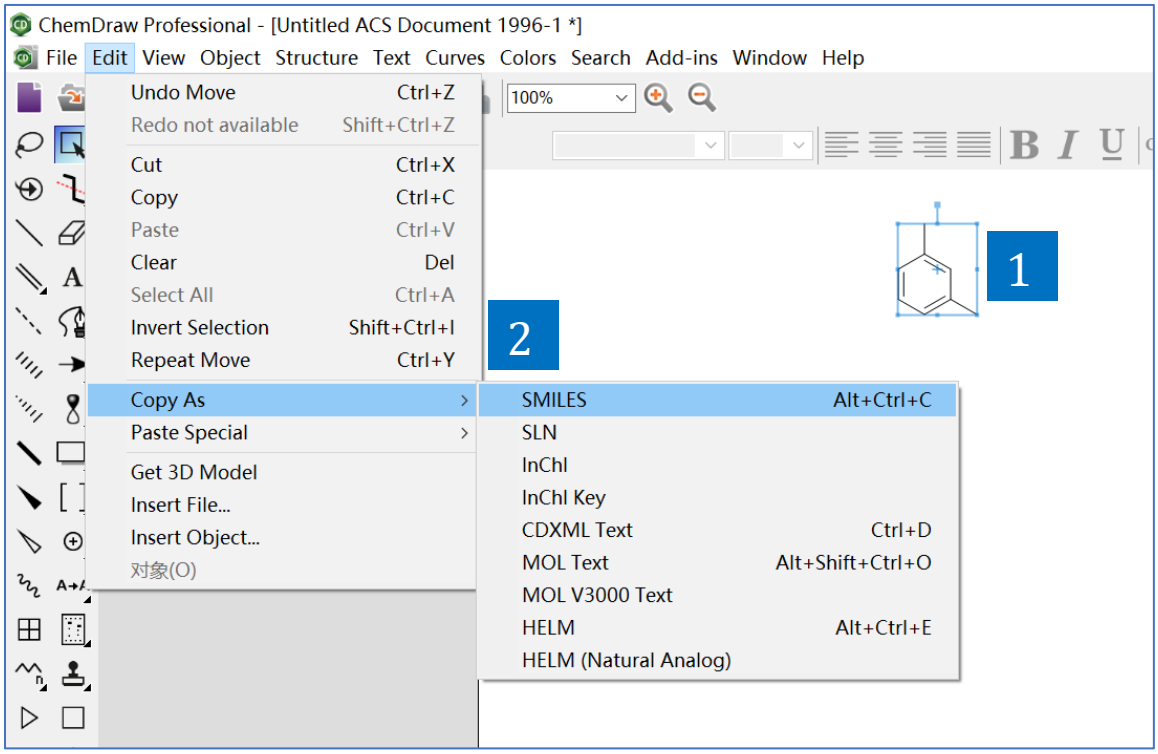
目录

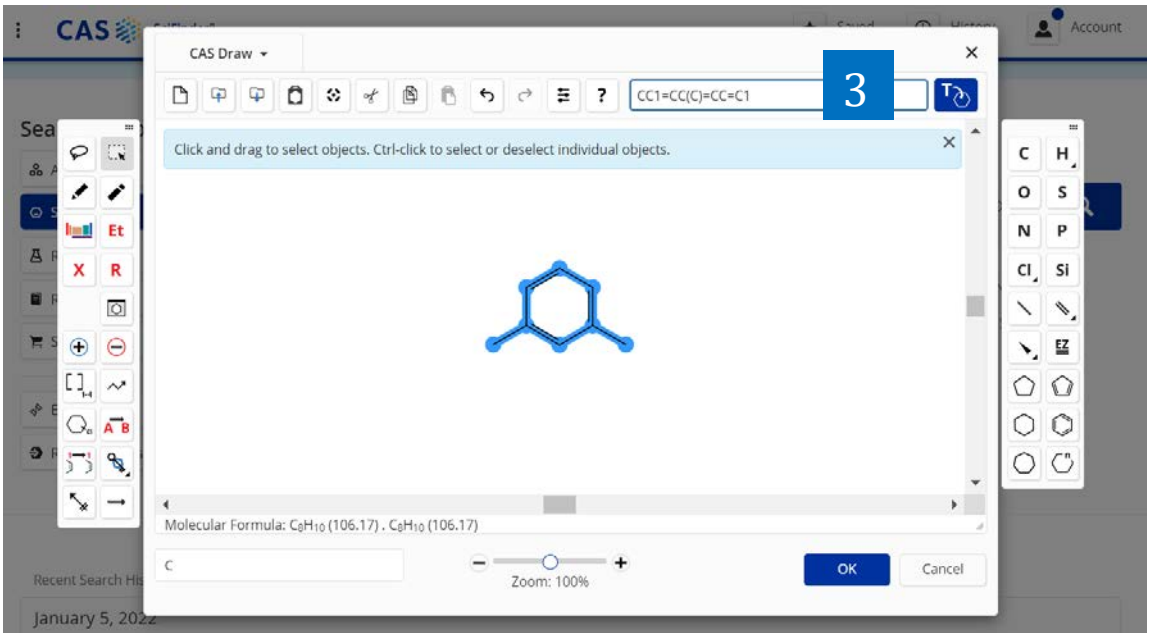
物质检索

与 ChemDraw 联用

可通过以下三种方式利用 ChemDraw 所绘制的结构在 CAS SciFinder[n] 中进行检索。

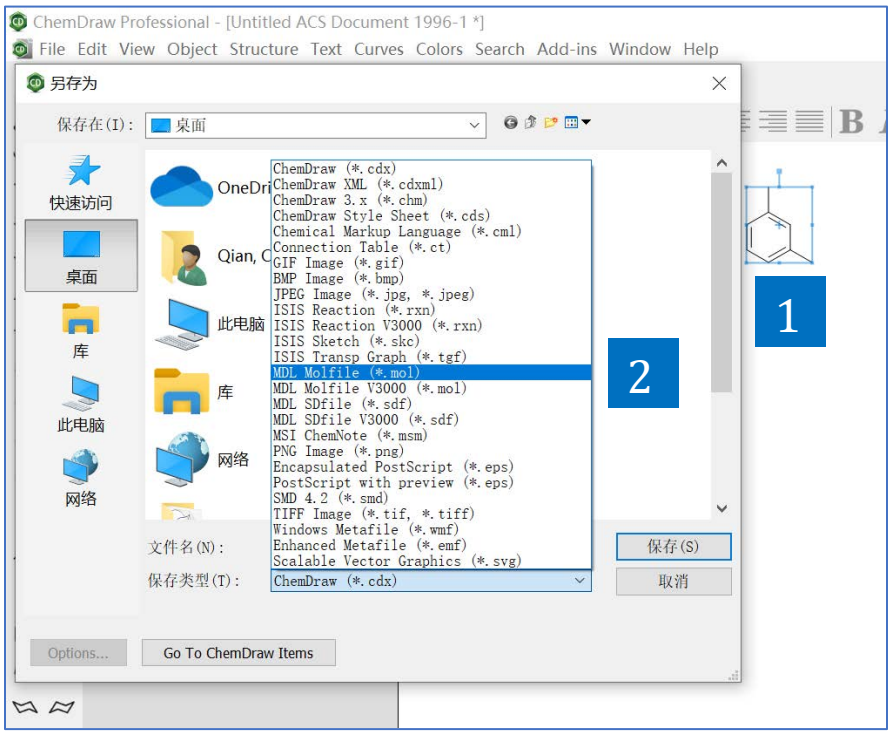
一. 利用在 ChemDraw 中获得的物质 SMILES、InChI，将结构导入到 CAS SciFinder[n] 的结构编辑器中：

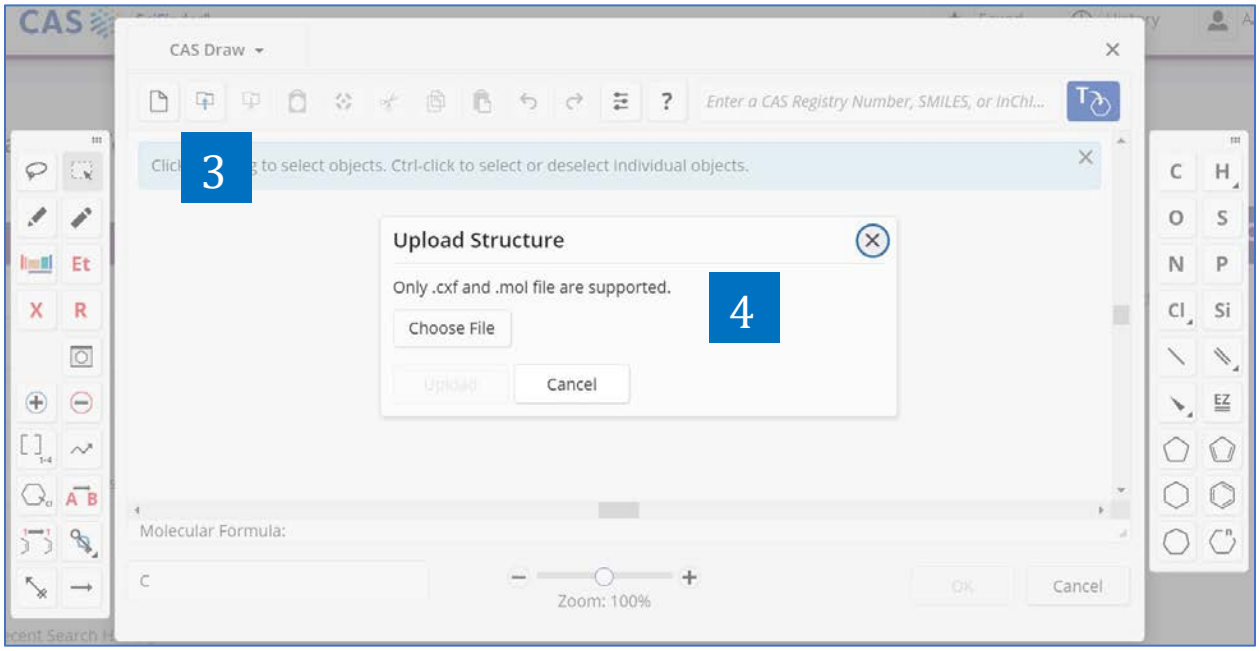




1. 在 ChemDraw 中绘制好结构，并选中。
2. 点击上方菜单 Edit，选择 Copy As, 然后再选择 SMILES 或 InChI。
3. 在此粘贴在 ChemDraw 中获得的 SMILES 或 InChI，将结构导入到 CAS SciFinder^n 的结构编辑器中。

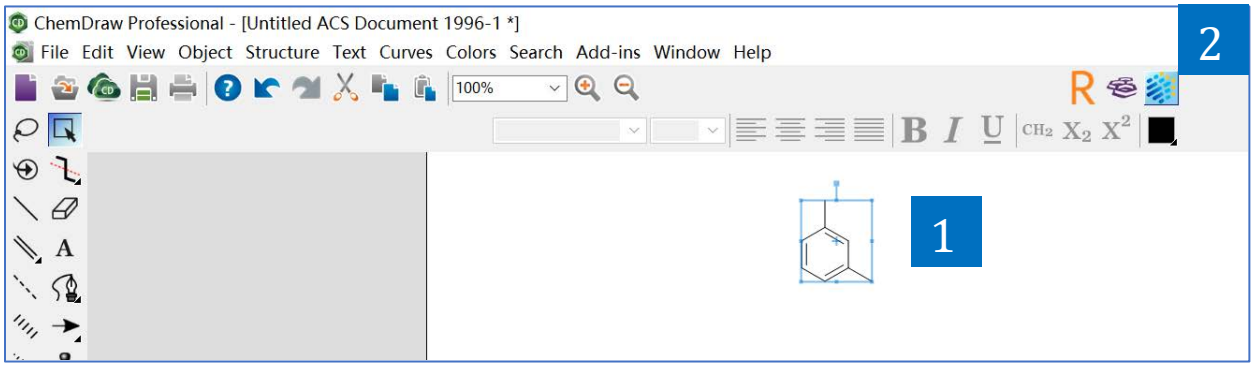
二. 将 ChemDraw 中绘制的结构保存为.mol 格式文件，然后再导入到 CAS SciFinder^n 的结构编辑器中：

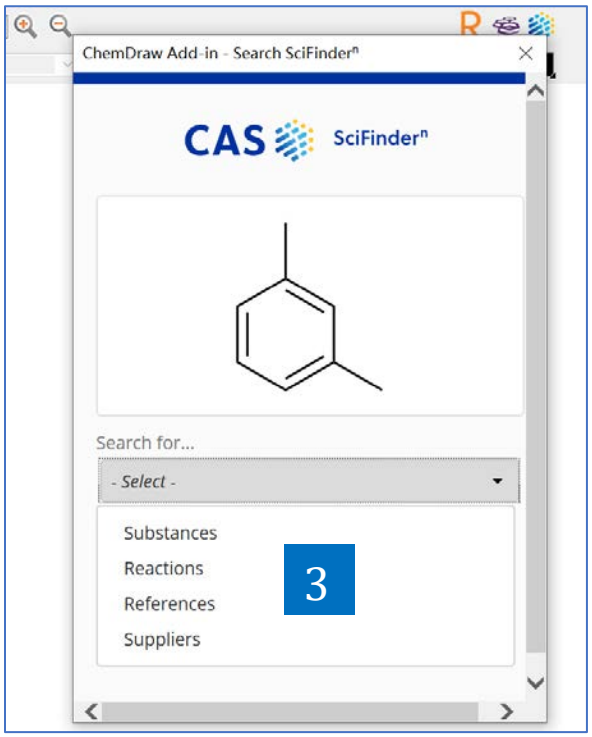




1. 在 ChemDraw 中绘制好结构，并选中。
2. 点击上方菜单 File，选择 Save As, 将其保存为 MDL Molfile(*.mol)格式的文件。
3. 导入结构。
4. 根据保存的路径，导入.mol 格式的文件。

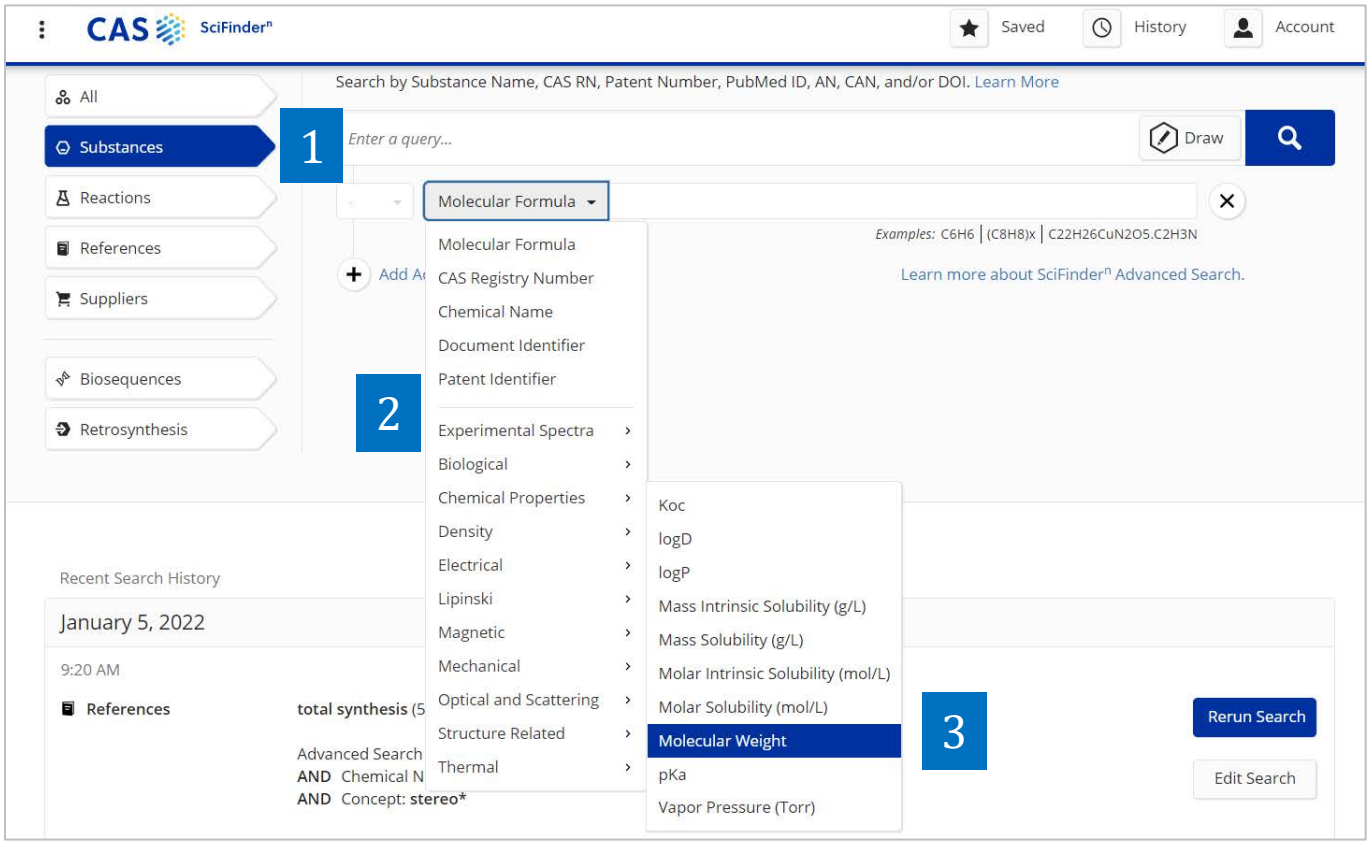
三. 直接在 ChemDraw 18.2 以上版本中，点击 Search SciFinder^n 或点击右上角的 CAS SciFinder^n 标识图标，则可直接跳转至 CAS SciFinder^n 中进行检索。



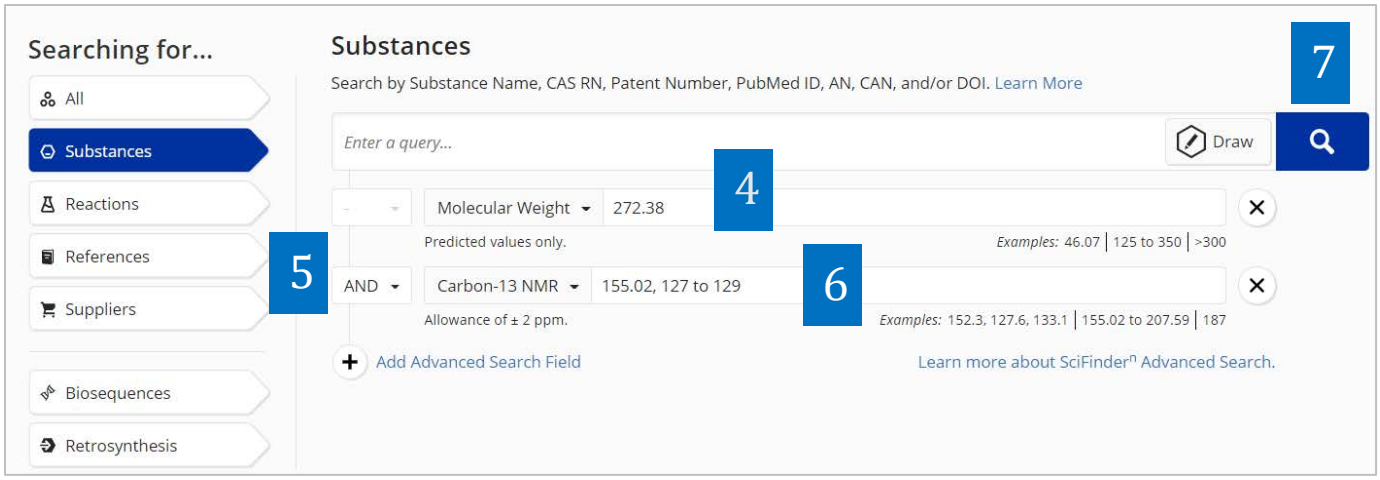


1. **绘制结构并选中。**
2. **点击** 
3. 选择检索类型，在 CAS SciFinder^n 中检索 Chemdraw 中绘制的结构。

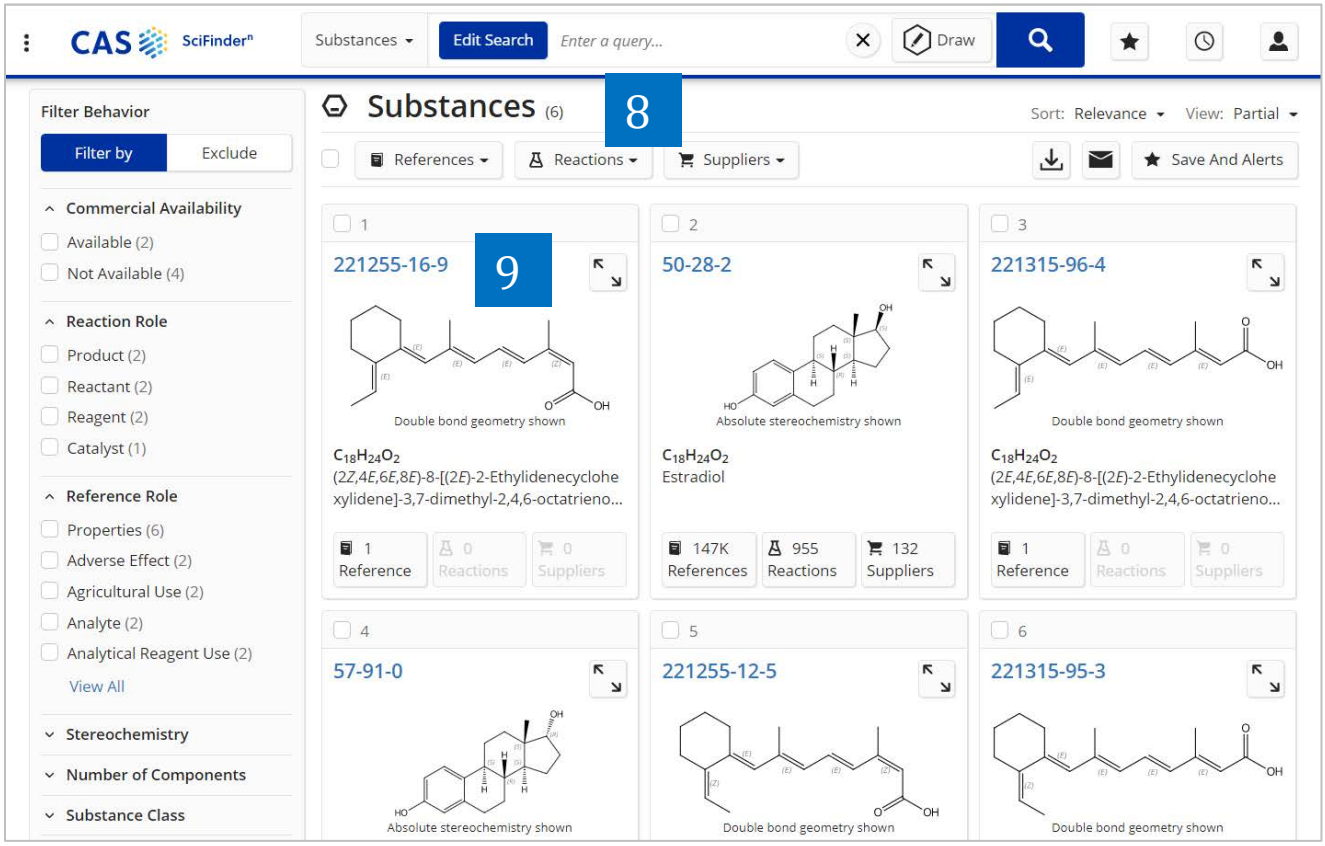
通过质谱-核磁谱图联用助力物质结构解析



1. 选择 Substances
2. 通过 Advanced Search，使用 Experimental Spectra，输入核磁图谱数据
3. 通过 Advanced Search，使用 Chemical Properties，选 Molecular Weight 输入分子量数据

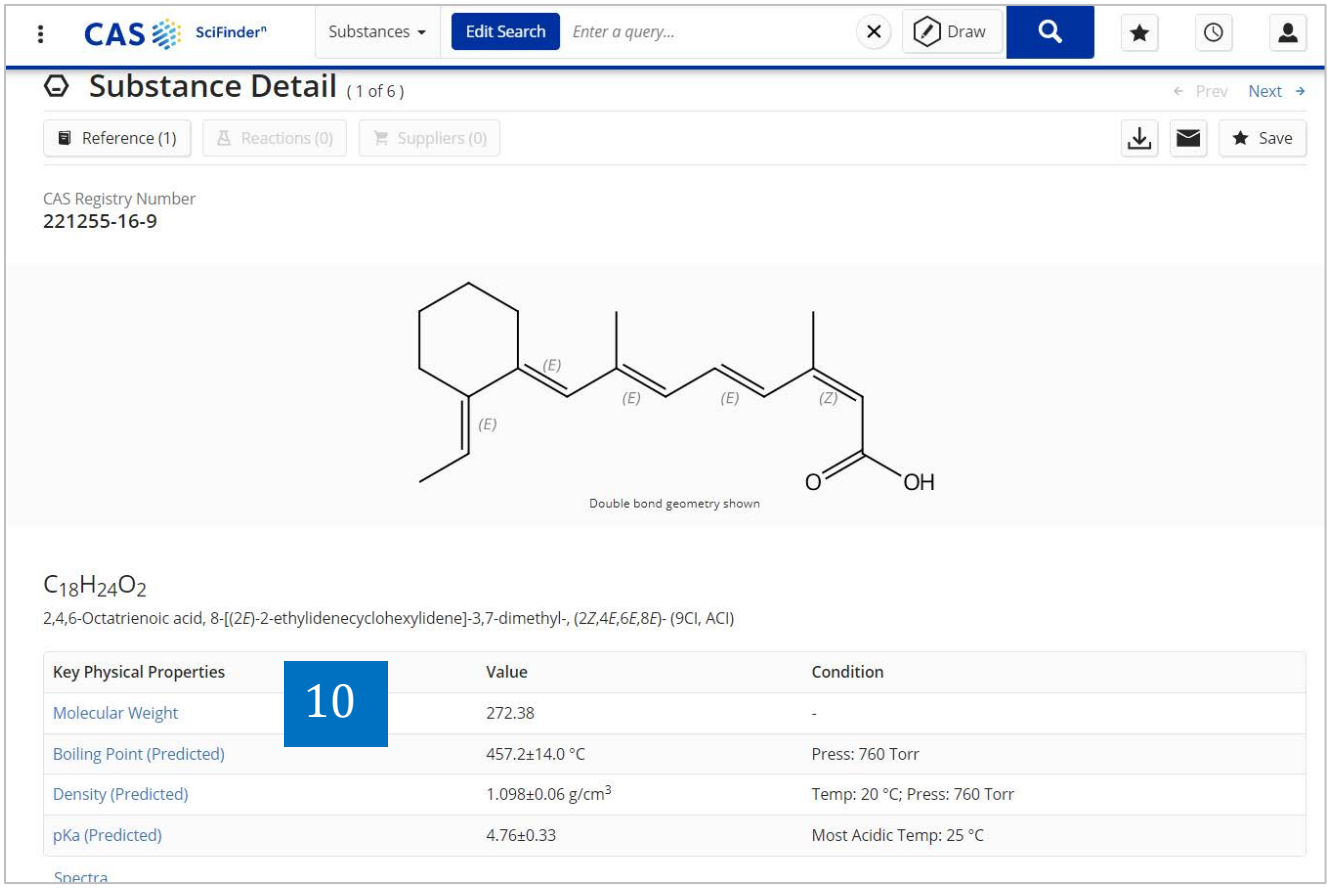


4. 选择分子量，输入具体值或者是区间范围
5. 选择逻辑算符（and, or, not）
6. 输入核磁数值，可以是具体值或者区间范围
7. 开始检索



8. 获得的物质结果均满足检索需求

9. 点击物质 CAS 登记号查看物质详情

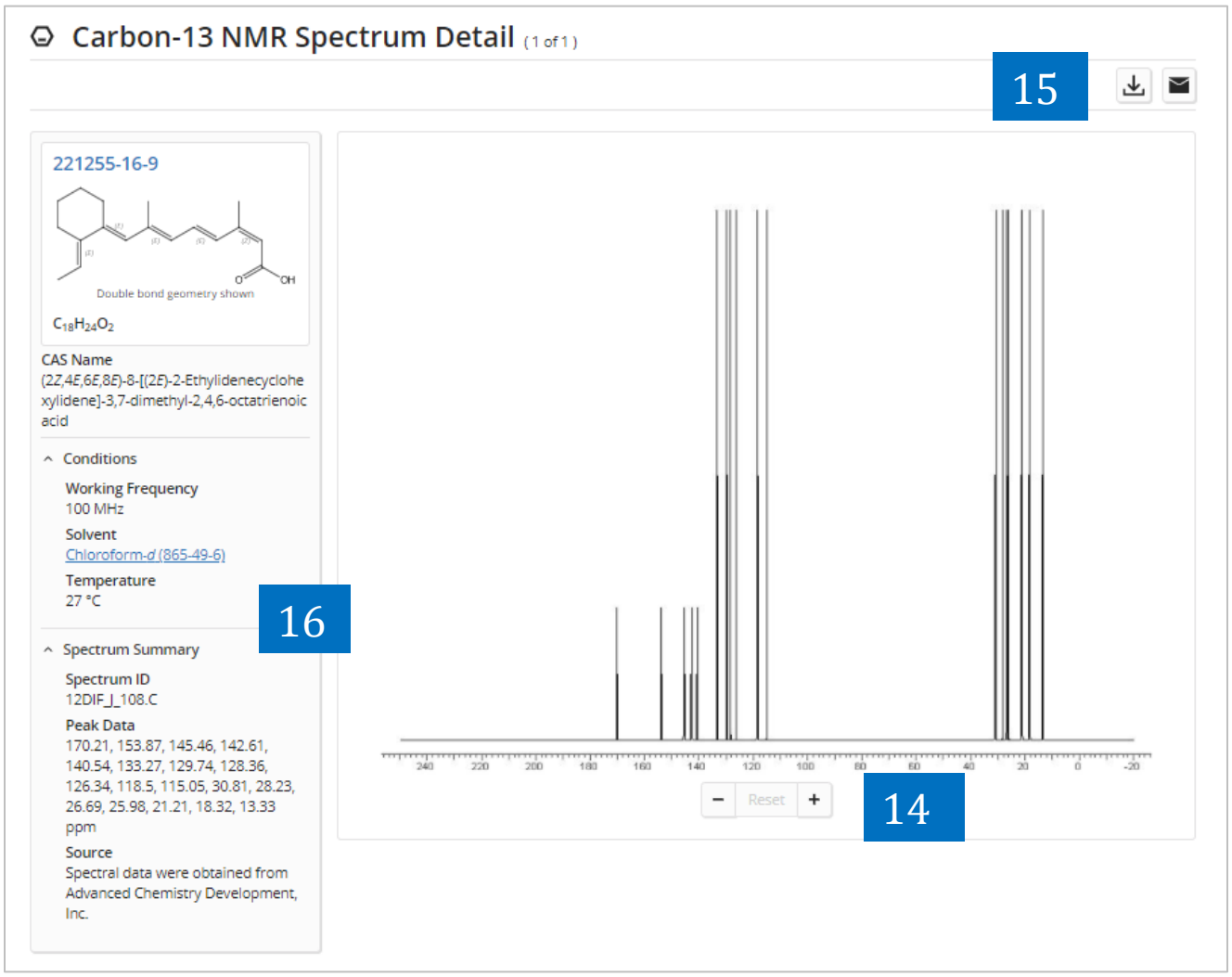


10. 查看物质分子量

11. 物质详情中的实验谱图

12. 点击超链接，查看核磁谱图

13. 谱图信息的文献来源

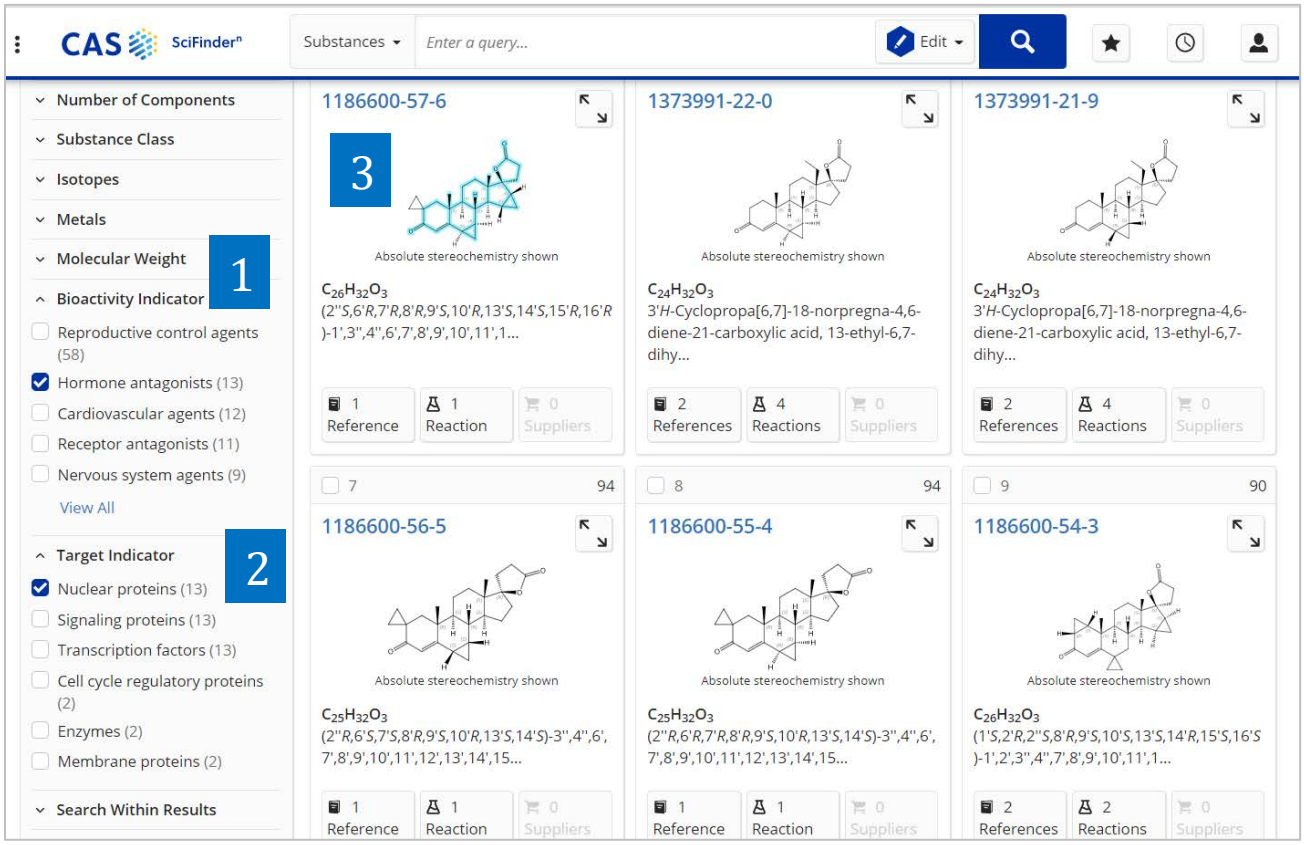


14. 缩放谱图

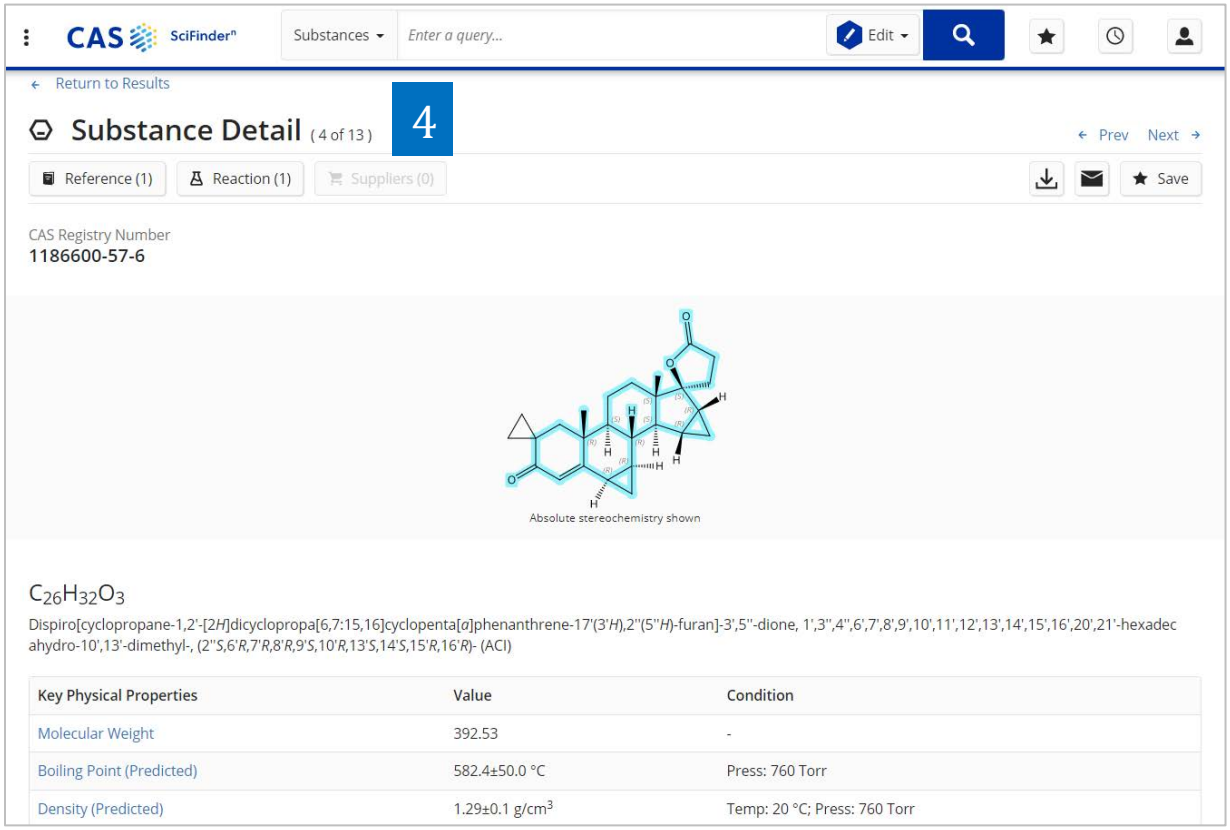
15. 下载谱图图片和谱图详情

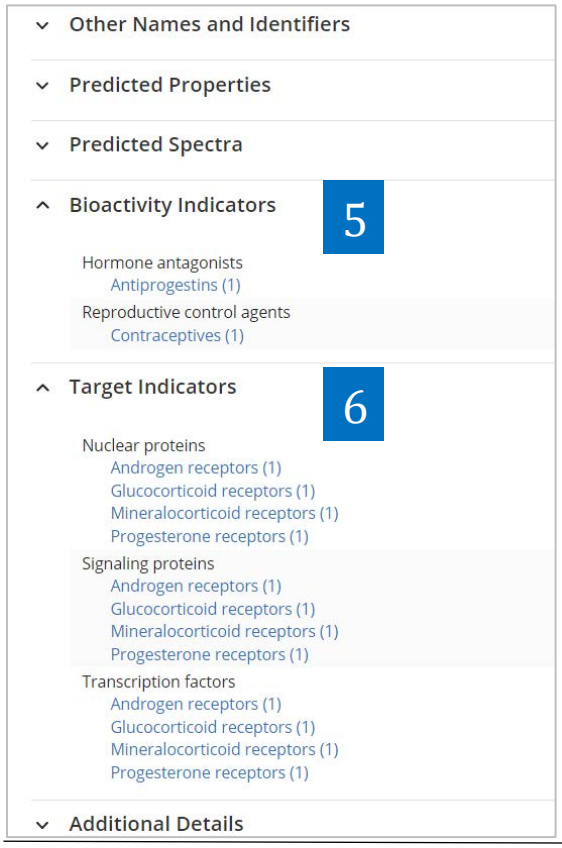
16. 测试条件和谱图数据

通过生物活性、靶点筛选物质



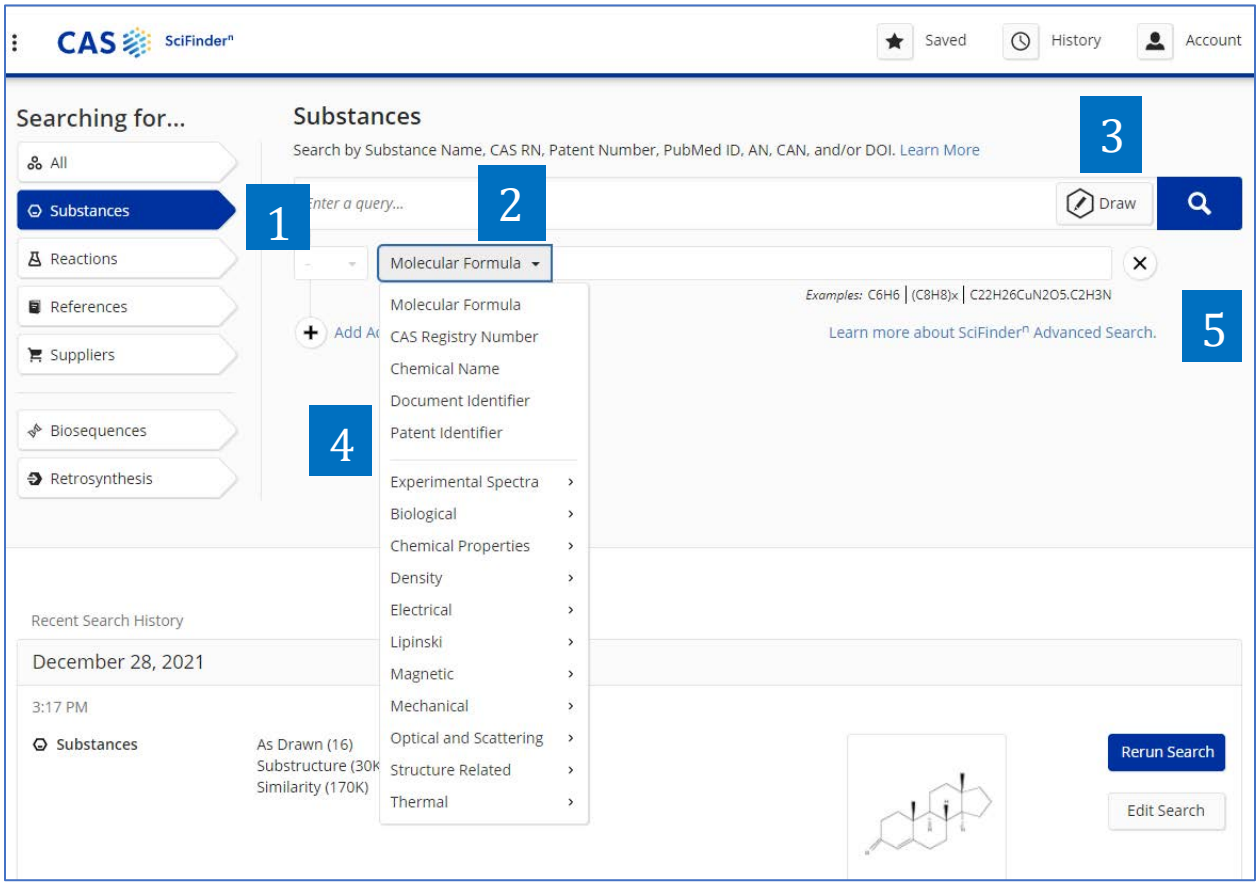
1. 在物质结果集页面左侧，点击 Bioactivity Indicator，根据适应症筛选物质
2. 点击 Target Indicator，根据靶点筛选物质
3. 点击物质 CAS 登记号， 获取物质的生物活性及靶点详情


CAS SciFinder^{n}
Substances
Enter a query...
Edit
Return to Results
Substance Detail (4 of 13)
4
Prev
Next
Reference (1)
Reaction (1)
Suppliers (0)
Save
CAS Registry Number
1186600-57-6
Absolute stereochemistry shown
$C_{26}H_{32}O_3$
Dispiro[cyclopropane-1,2'-[2H]dicyclopropa[6,7:15,16]cyclopenta[a]phenanthrene-17'(3'H),2''(5''H)-furan]-3',5''-dione, 1',3'',4'',6',7',8',9',10',11',12',13',14',15',16',20',21'-hexadecahydro-10',13'-dimethyl-, (2''S,6'R,7'R,8'R,9'S,10'R,13'S,14'S,15'R,16'R)- (ACI)
Key Physical Properties
Value
Condition
Molecular Weight
392.53
-
Boiling Point (Predicted)
582.4±50.0 °C
Press: 760 Torr
Density (Predicted)
1.29±0.1 g/cm3
Temp: 20 °C; Press: 760 Torr

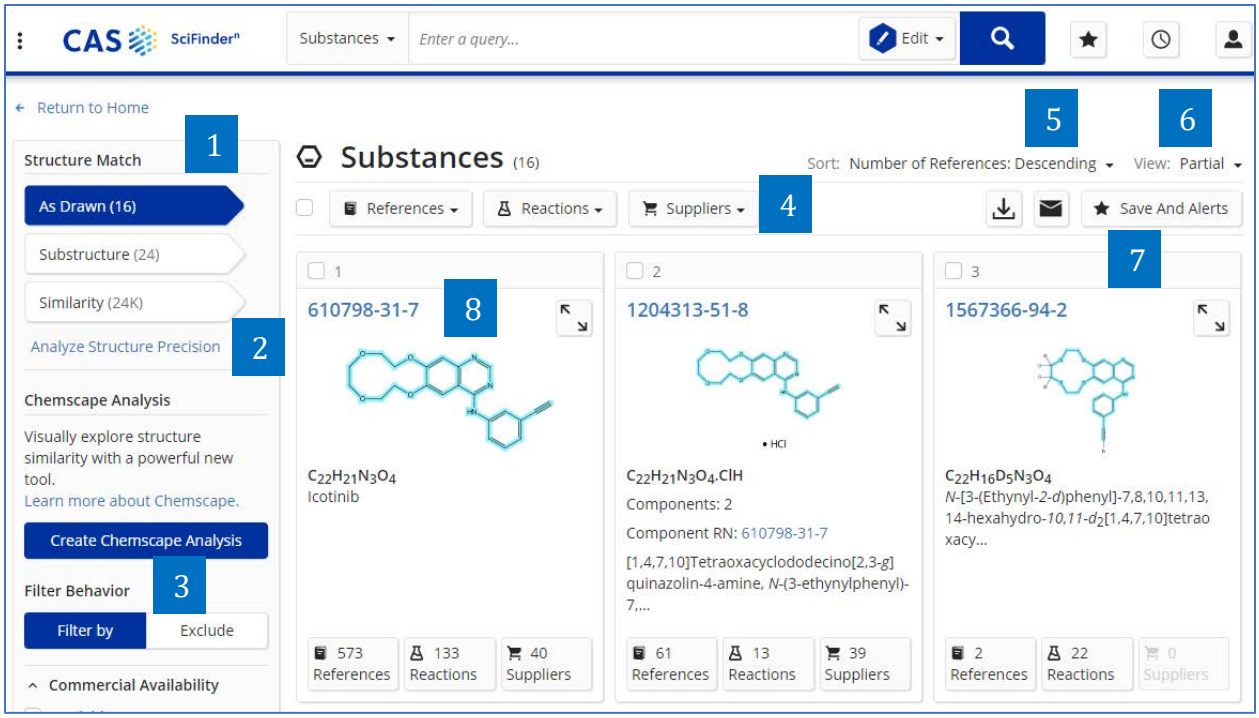

Other Names and Identifiers
Predicted Properties
Predicted Spectra
Bioactivity Indicators
5
Hormone antagonists
Antiprogestins (1)
Reproductive control agents
Contraceptives (1)
Target Indicators
6
Nuclear proteins
Androgen receptors (1)
Glucocorticoid receptors (1)
Mineralocorticoid receptors (1)
Progesterone receptors (1)
Signaling proteins
Androgen receptors (1)
Glucocorticoid receptors (1)
Mineralocorticoid receptors (1)
Progesterone receptors (1)
Transcription factors
Androgen receptors (1)
Glucocorticoid receptors (1)
Mineralocorticoid receptors (1)
Progesterone receptors (1)
Additional Details

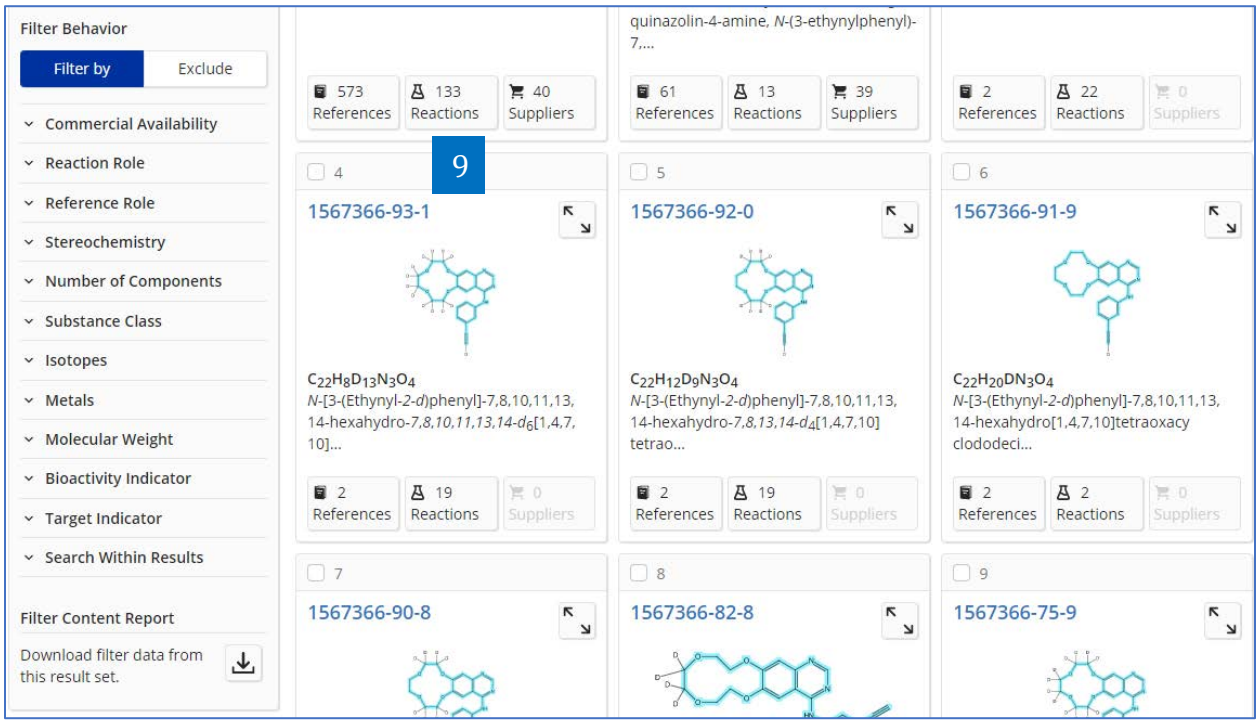
4. 点击物质的 CAS 登记号，即可获得物质详情。
5. 在物质详情页面，点击 Bioactivity Indicators 下方的蓝色超链接，即可获得相应适应症的研究文献。
6. 在物质详情页面，点击 Target Indicators 下方的蓝色超链接，即可获得相应靶点的研究文献。

获取物质信息



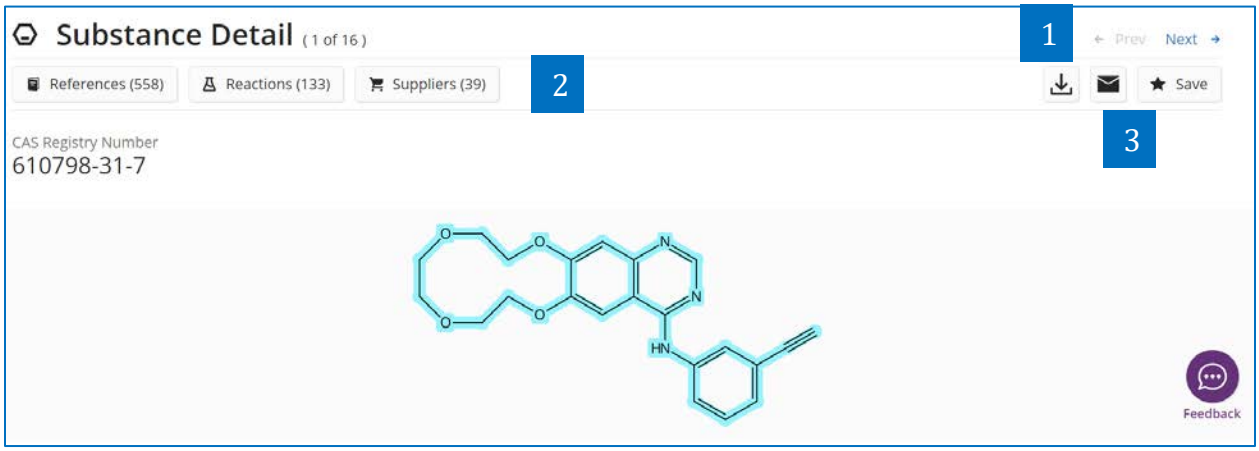
1. 选择 Substances，进行物质检索
2. 输入检索文本：物质名称、CAS 登记号、专利号等
3. 点击 Draw，绘制结构
4. 点击 Add Advanced Search，用逻辑运算符连接不同字段进行分子式、物质属性和实验谱图等检索
5. 开始检索

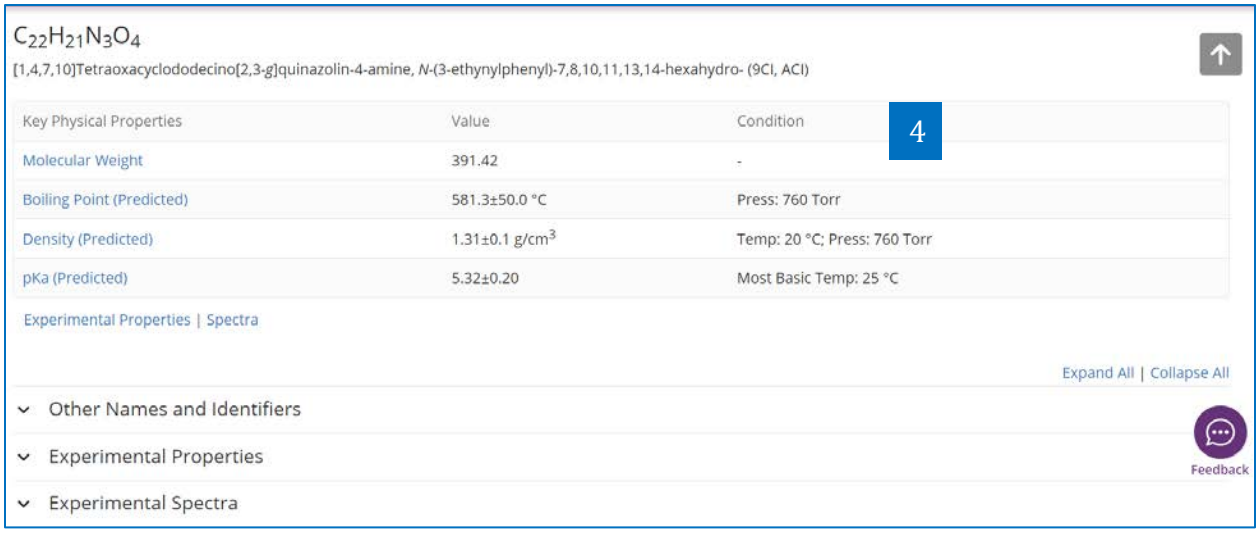


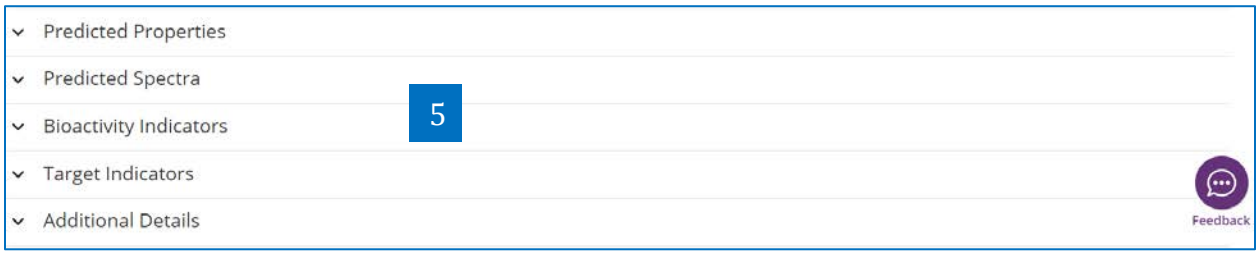


1. 如果选择了结构检索，则在结果集页面将呈现结构匹配程度：As Drawn 表示被检索结构中的原子和键被锁定后得到的结果；Substructure 表示亚结构检索结果，Similarity 表示相似结构检索结果。

2. 点击 Analyze Structure Precision，对结构检索结果进行更细化的结构分类。
3. 物质结果的聚类分析：商业上可获得性、反应角色、文献角色、立体化学、组份数、物质类型、同位素、金属、分子量、实验属性、实验谱图、管控信息、生物活性、靶点、结构筛选等。
4. 物质结果集中与物质相关的文献、反应和供应商
5. 对物质进行重新排序
6. 选择展示物质信息详略
7. 下载、邮件分享、或保存物质结果并设置提醒
8. 点击 CAS 登记号，查看物质详情
9. 此物质相关的文献、反应和供应商

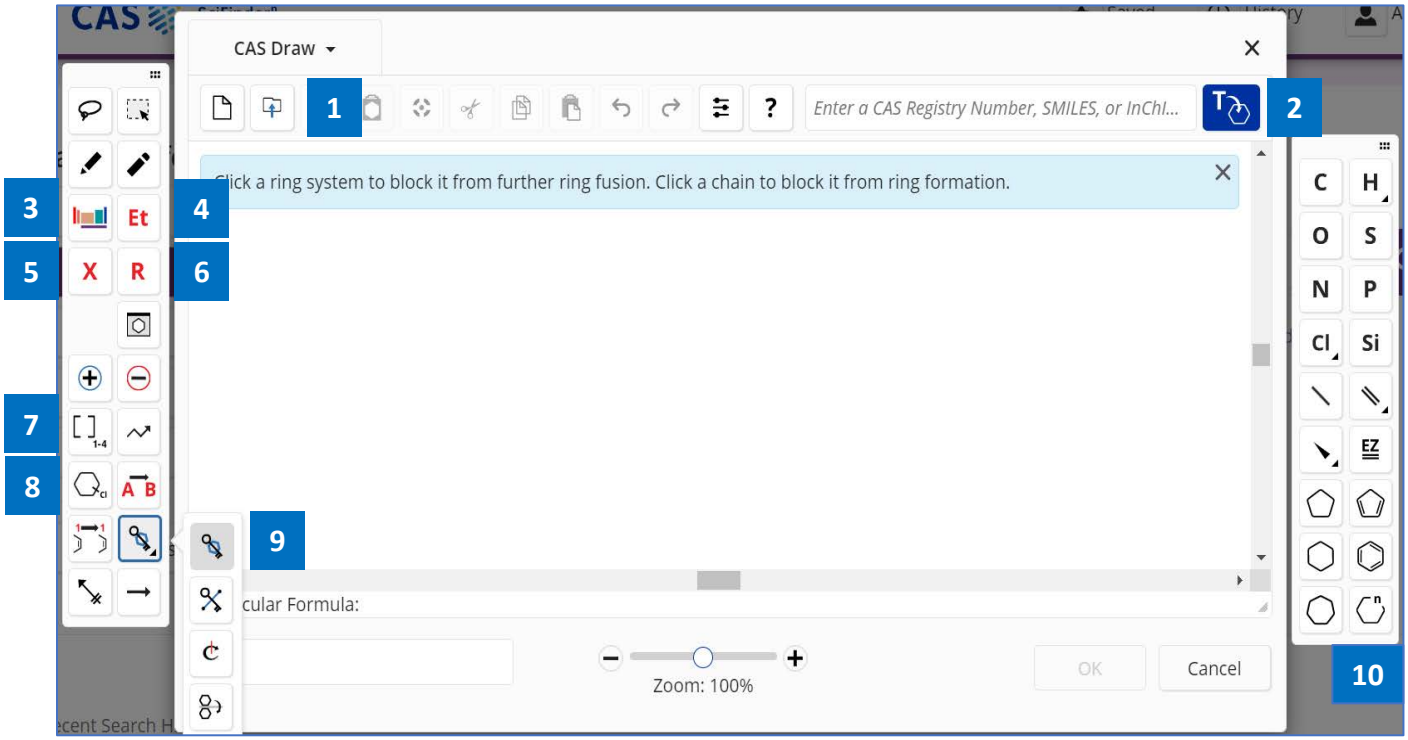




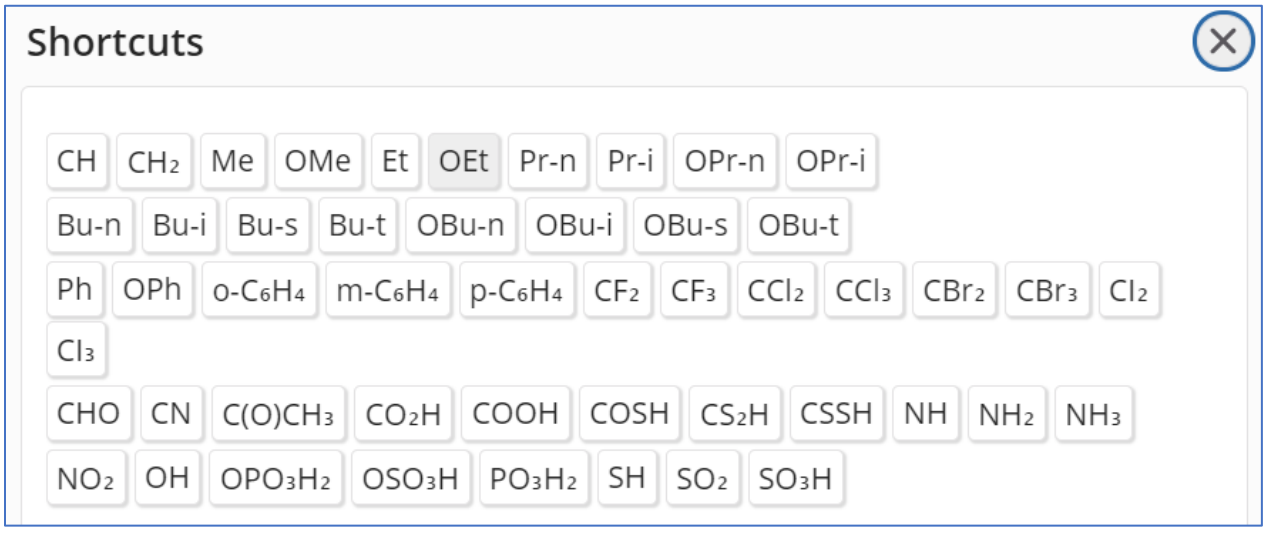


1. 点击左右箭头，查看前一个或后一个物质的详细信息
2. 此物质相关的文献、反应和供应商
3. 下载、分享及保存物质详情
4. 物质的物理属性信息
5. 物质名称、实验属性、实验谱图、预测属性、预测谱图、管控信息及其他信息

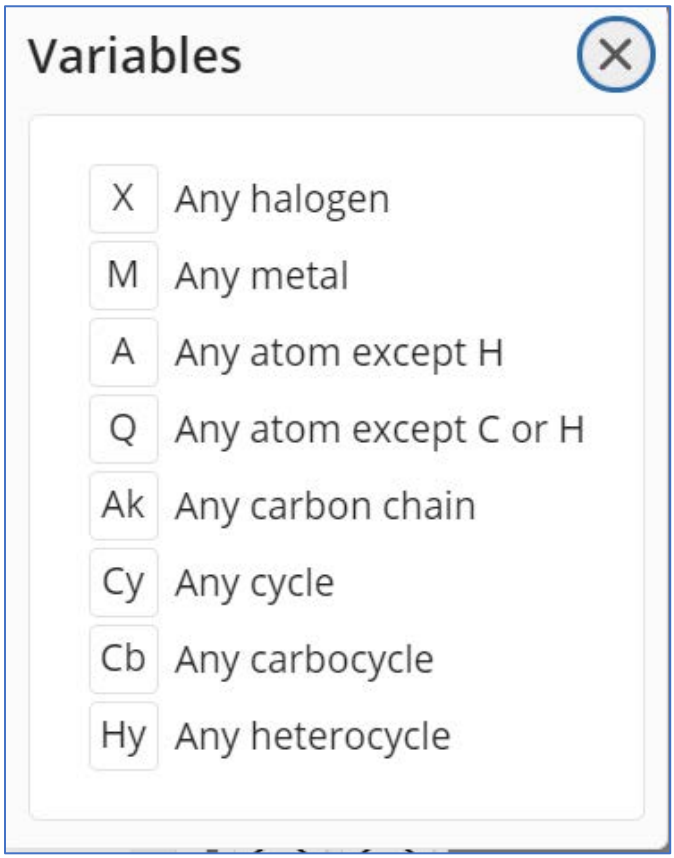
结构编辑器



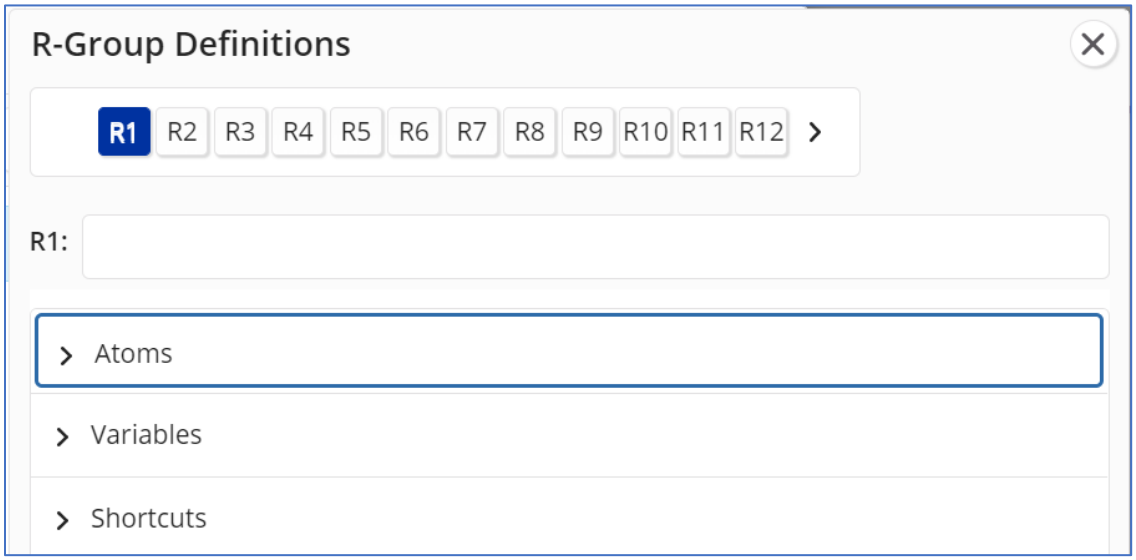
1. 导入.cxf或者.mol格式文件。
2. 可以直接输入物质的CAS登记号、SMILES或者InChI转化为相应的结构。
3. 元素周期表。
4. 常用官能团列表。



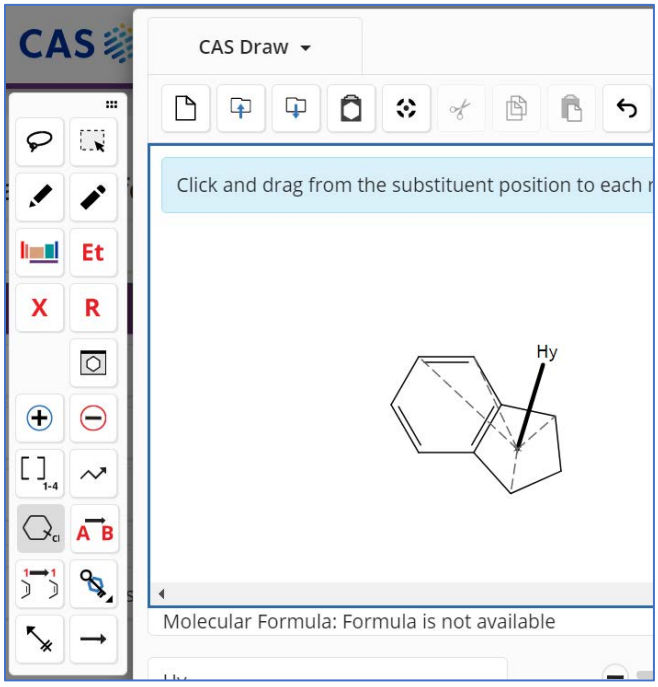
5. 选择可变基团，包括：X: 任意卤素；M: 任意金属；A: 除氢外的任意原子；Q: 除碳/氢外的任意原子；Ak: 任意碳链；Cy: 任意环；Cb: 任意碳环；Hy: 任意杂环。



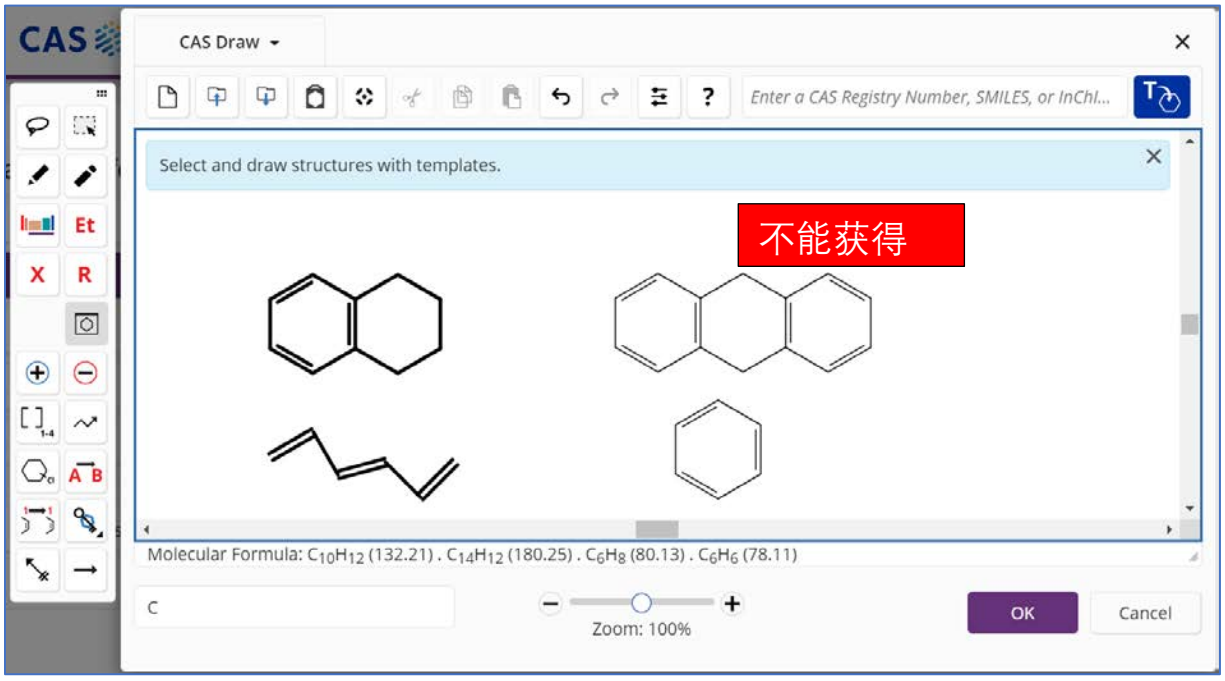
6. 定义R基团。



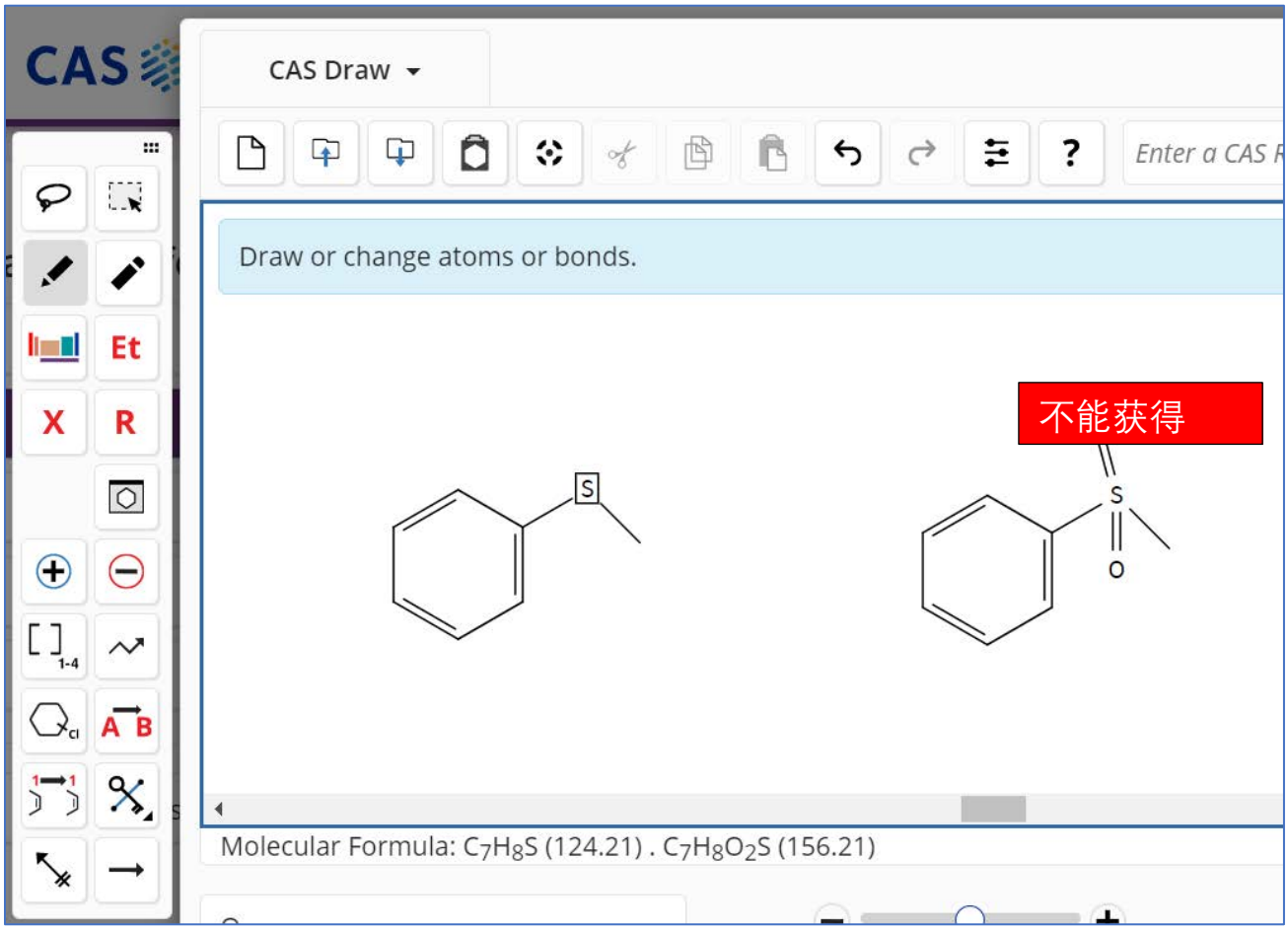
7. 重复原子或者基团。
8. 环上的取代位点不固定。

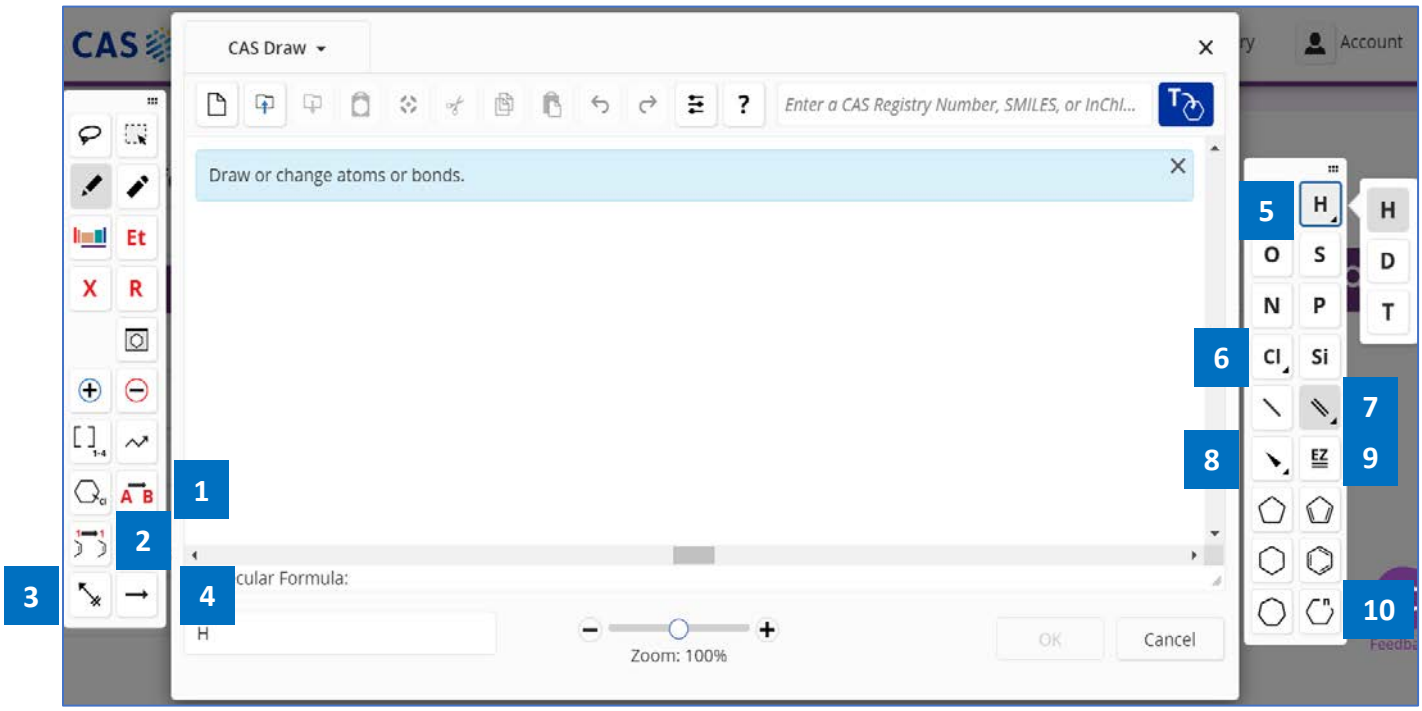


9. 环锁定。当用该功能锁定某个环（系），表示该环（系）不能成为更大环系的一部分；如果用该功能锁定某个链，则表示该链不能成为某个环（系）的一部分。例：

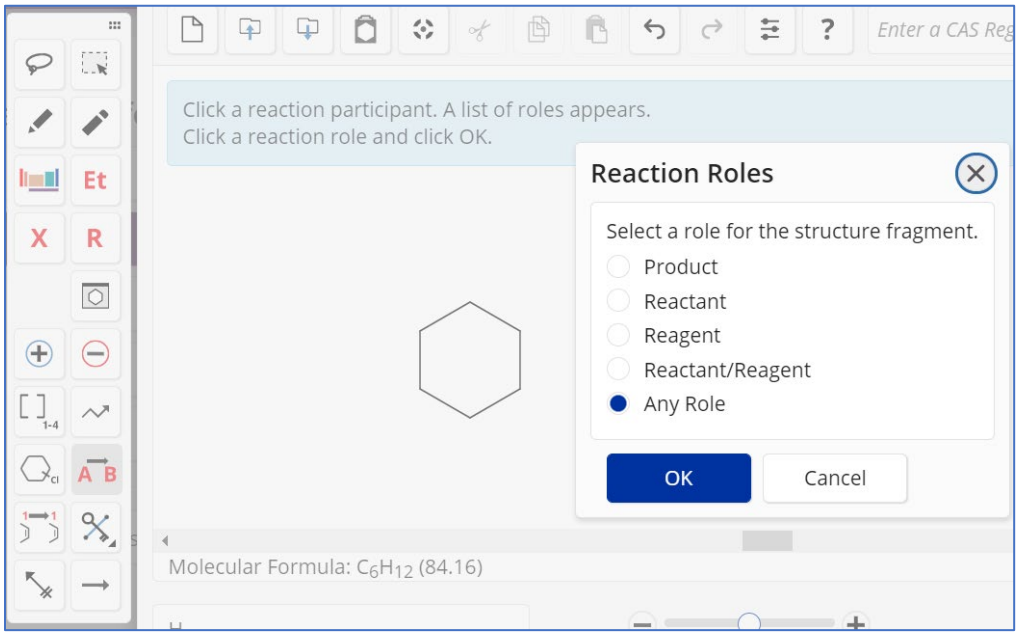


10. 锁定原子。若某原子被锁定，则表明该原子只能连接氢原子。例：





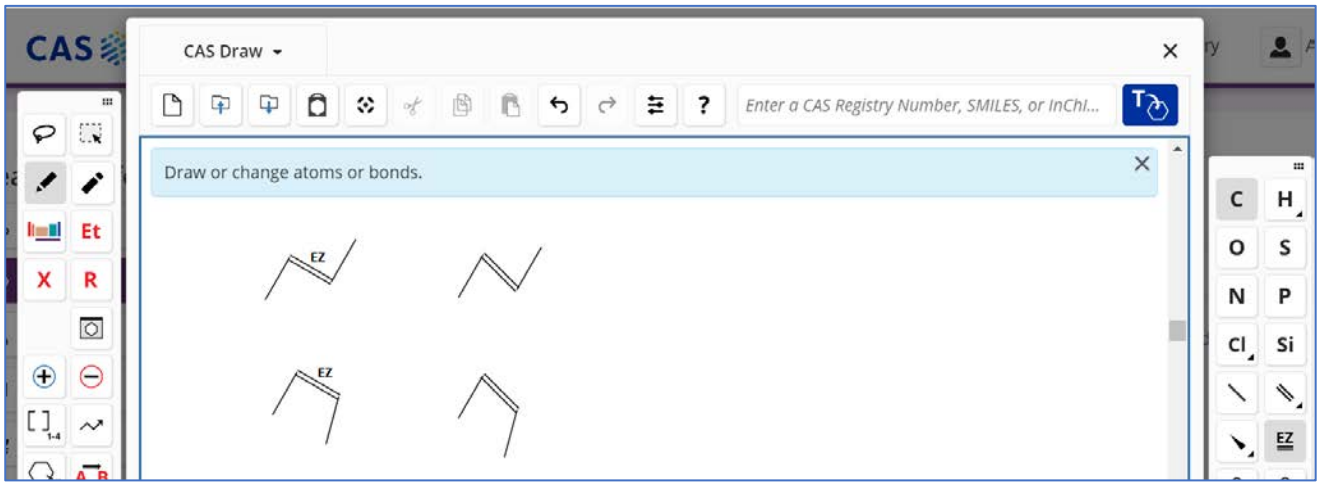
1. 反应角色定义工具，用于定义物质在反应中的角色。



2. 反应原子标记工具。在原料和产物中以相同数字被标记的原子，表明其反应前后为同一原子。
3. 反应键标记工具，起始物的某键被标记，则表明此键在反应过程中发生断开等变化；

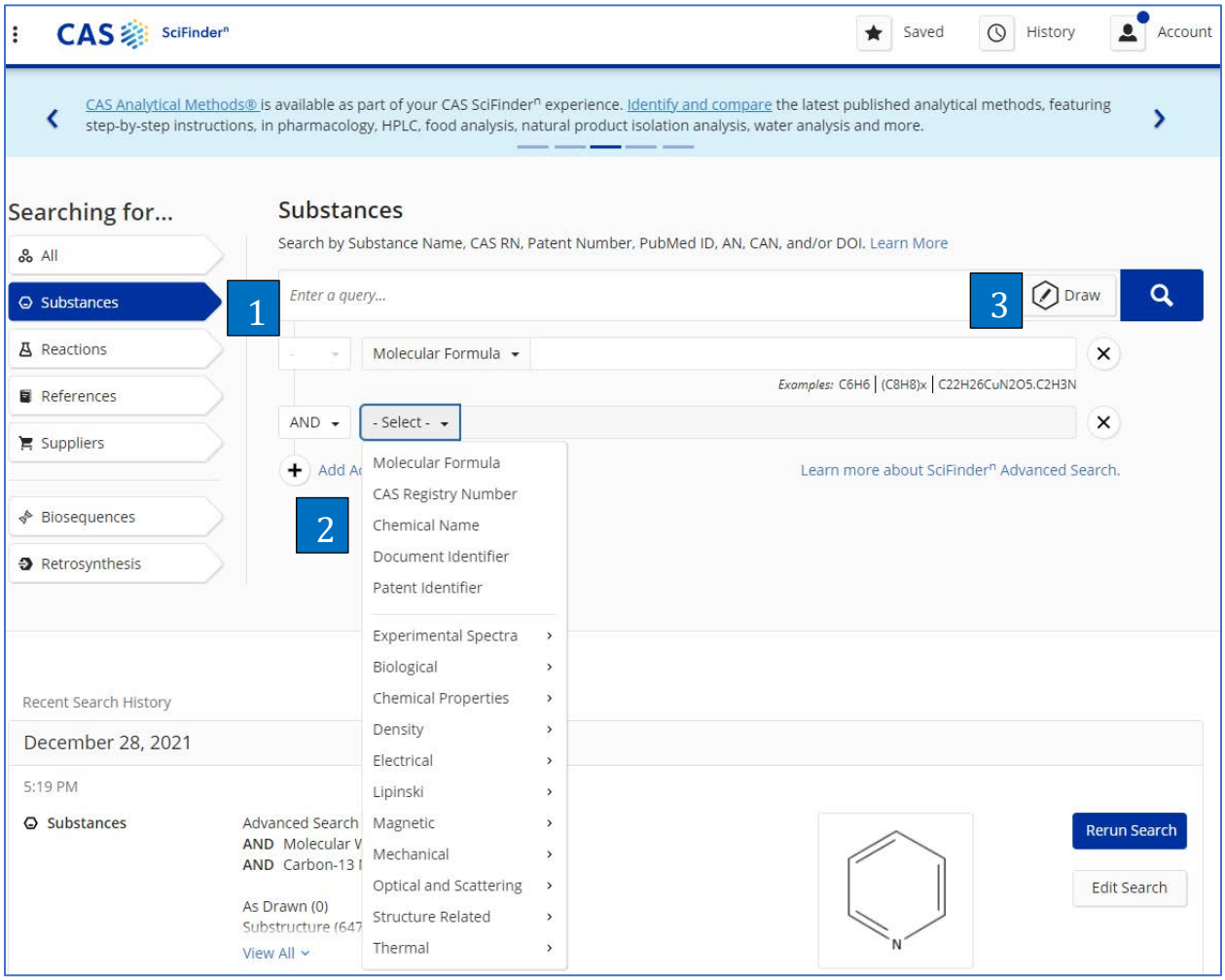
产物的某键被标记，则表明此键在反应过程中是新生成的键。

4. 反应箭头。箭头左边的物质是起始物或者试剂，右边为产物。
5. 点击H键，可以选择H原子，或者同位素D或者T。
6. 点击Cl，可以选择卤素：F，Cl，Br，I。
7. 可以选择双键，三键，或者不确定键。
8. 绘制立体键。
9. 用于锁定双键的立体构型，若绘制E构型烯烃，使用此键锁定后，结果集只包含该双键位置为E构型的烯烃，Z构型同理。



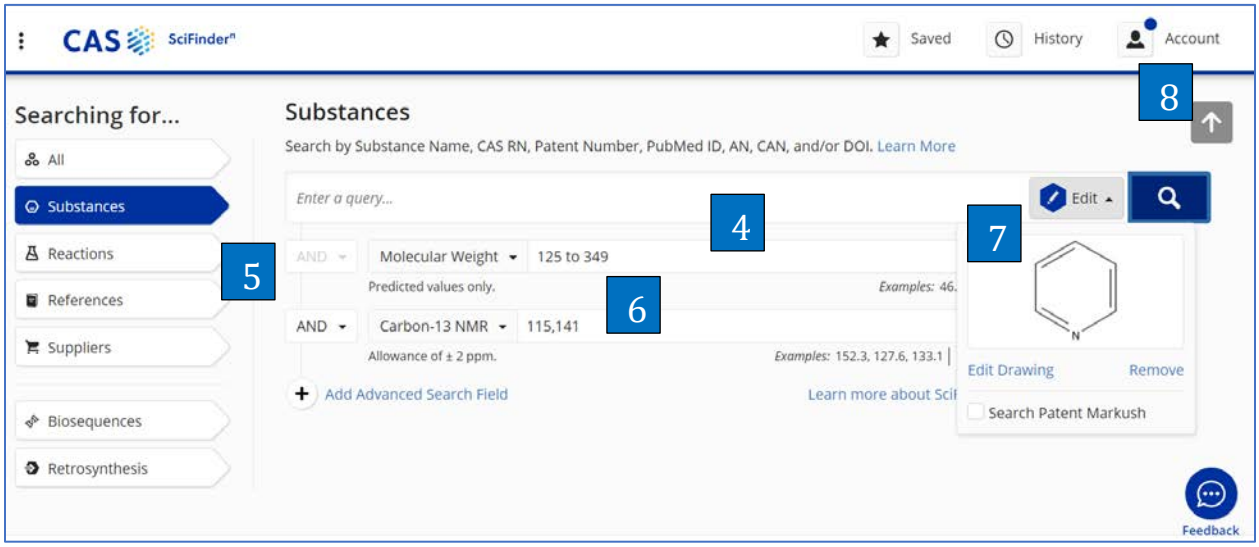
10. 绘制指定碳原子个数的碳环。

物质高级检索



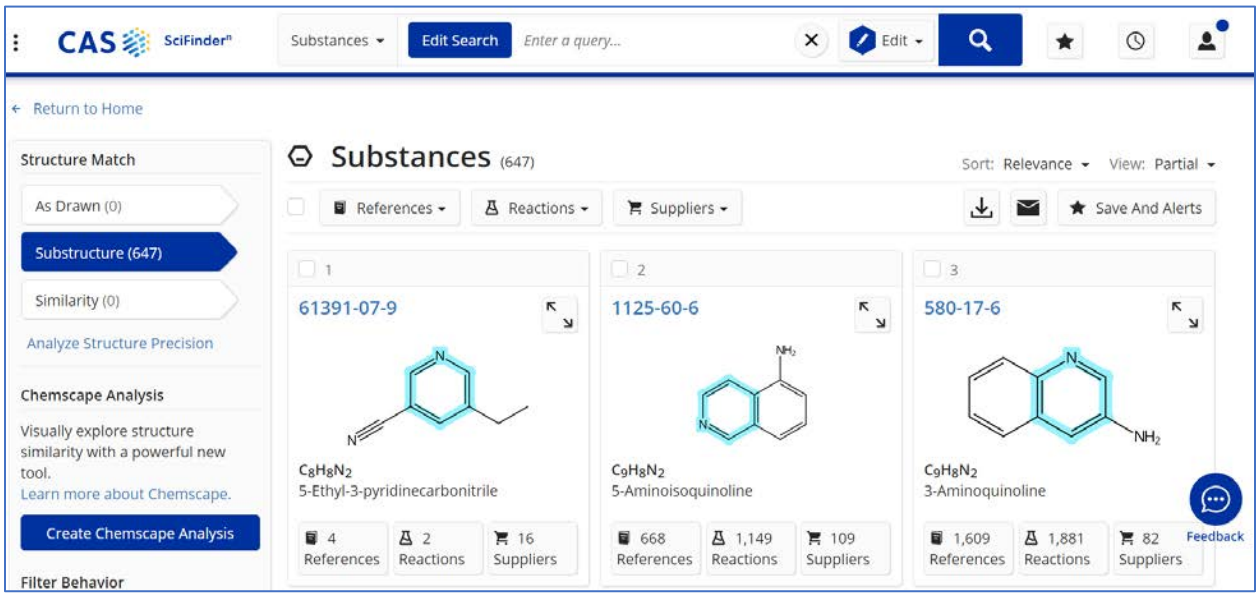
1. 选择 Substances，然后点击 Add Advanced Search Field。
2. 点击 Select，展示可检索字段。
3. 如果同时还需要检索结构式，则可点击 Draw，绘制结构式。

例 1：查找符合分子量在 125-350 之间；核磁碳谱峰值包括 115，141；包含吡啶结构片段的物质

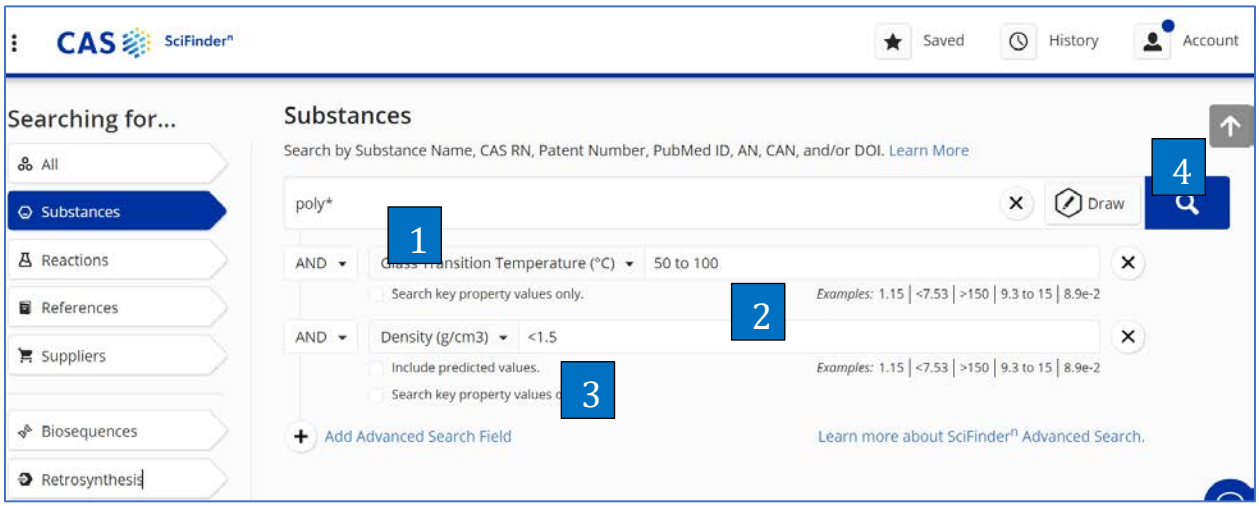


1. 选择需要检索的字段（如，Molecular Weight），输入检索式
2. 如果需要其他更多检索字段，则可再次点击 Add Advanced Search Field，添加其他检索字段。不同字段可使用“AND”或“OR” 或”NOT”进行连接
3. 输入检索式
4. 绘制好等待检索的结构式
5. 点击检索

获得满足检索需求的物质结果集

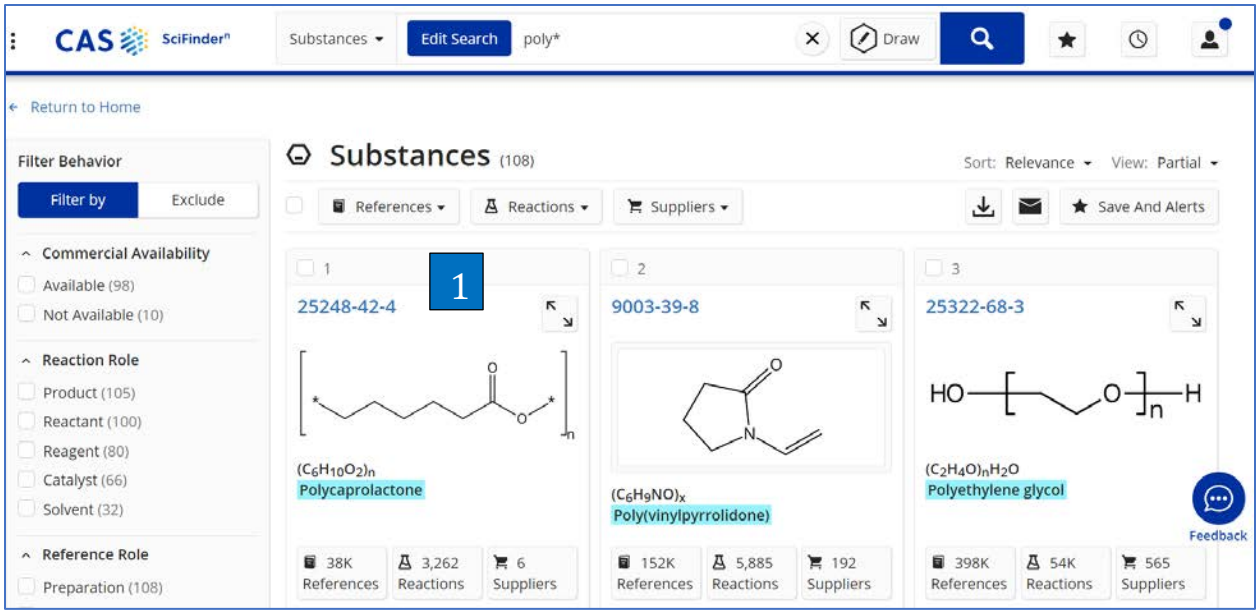


例 2：获取玻璃体转化温度在 50-100 摄氏度之间；密度小于 1.5g/cm^3 的聚合物



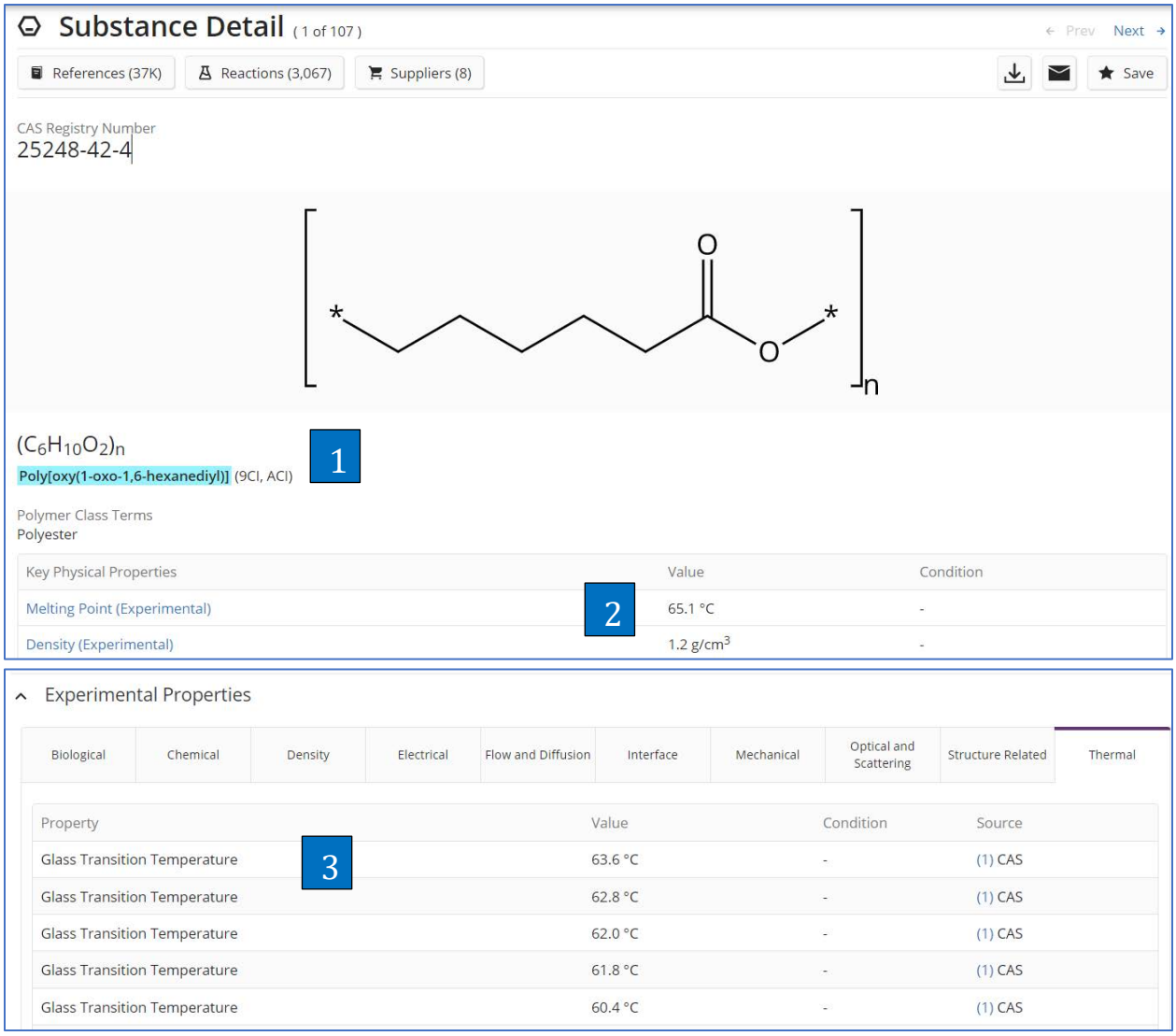
1. 选择 Substances，然后在文本框输入 poly*（关于星号*的用法，请见 CAS SciFindern 使用技巧之通配符的使用）。
2. 选择 Glass Transition Temperature，输入数值区间。
3. 选择 Density，输入数值区间。
4. 点击检索

获得符合检索需求的结果



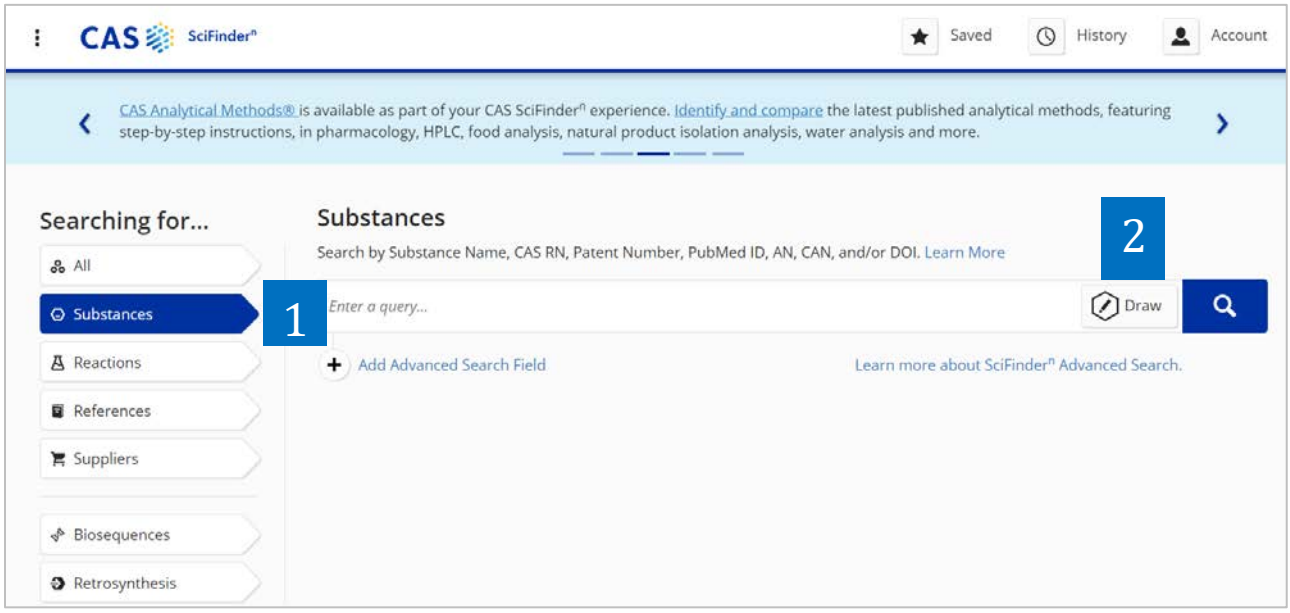
1. 点击物质 CAS 登记号，查看物质信息详情。

可在物质信息详情中查看完整信息。

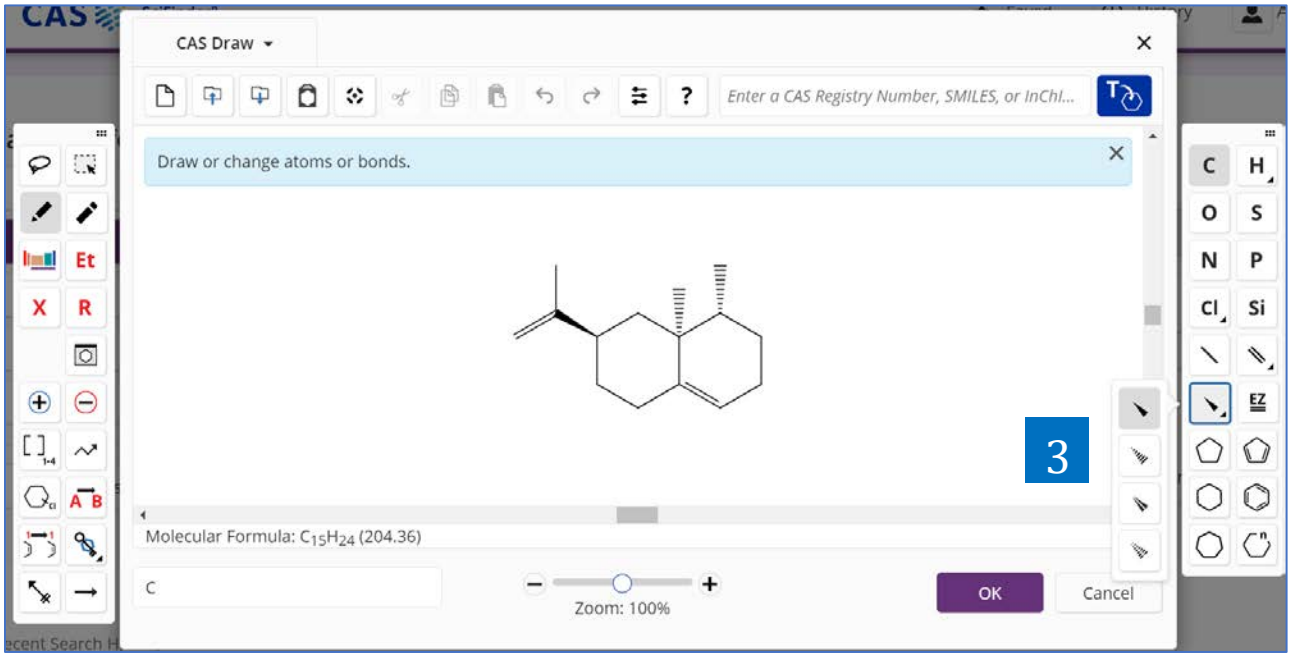


1. 该物质为一种聚酯。
2. 该聚合物的密度为 1.2g/cm^3。
3. 该聚合物的玻璃体转化温度。

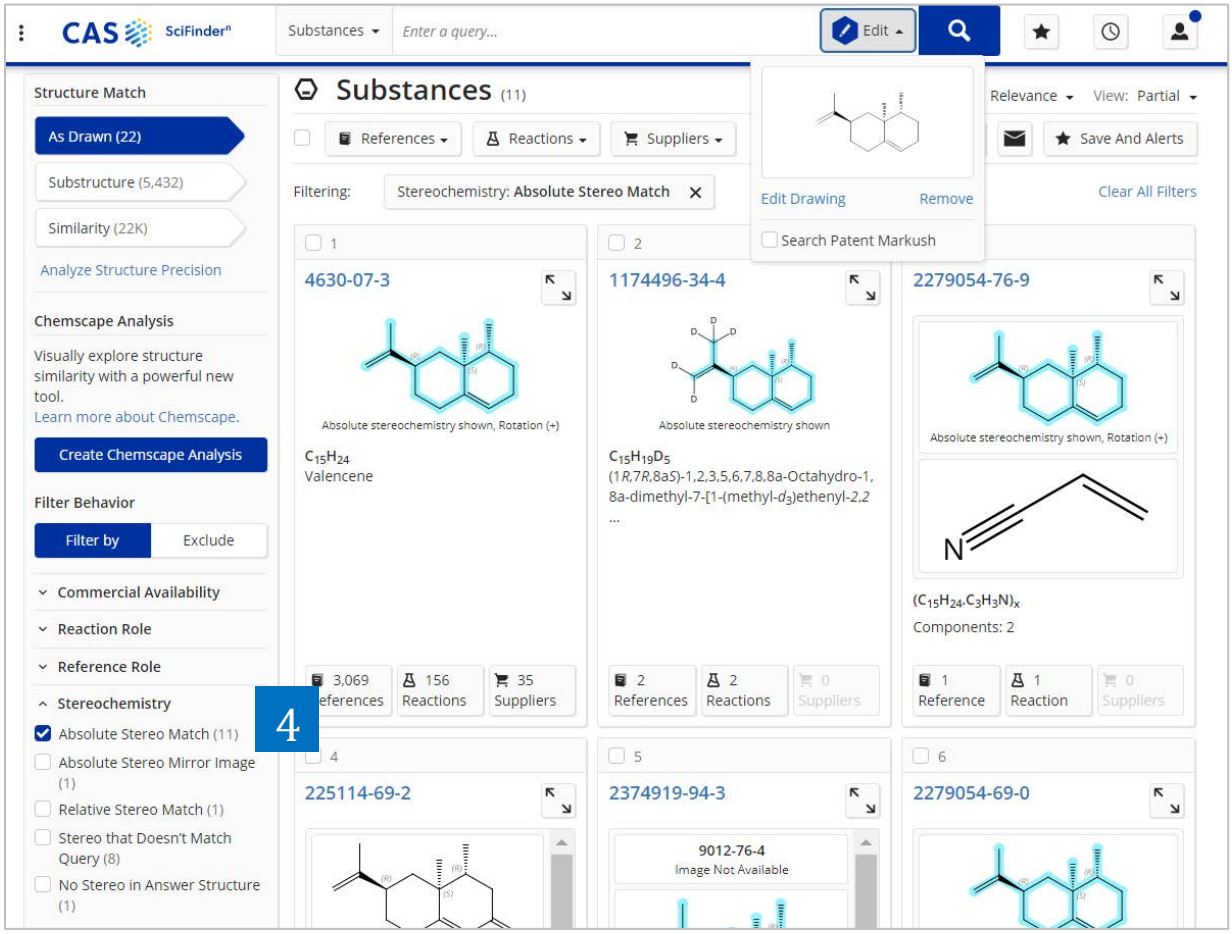
手性化合物的检索



1. 选择 Substances，进行物质检索。
2. 在结构编辑器中绘制出手性化合物的结构。



3. 绘制结构时，使用手性异构键标注结构中的手性特征。

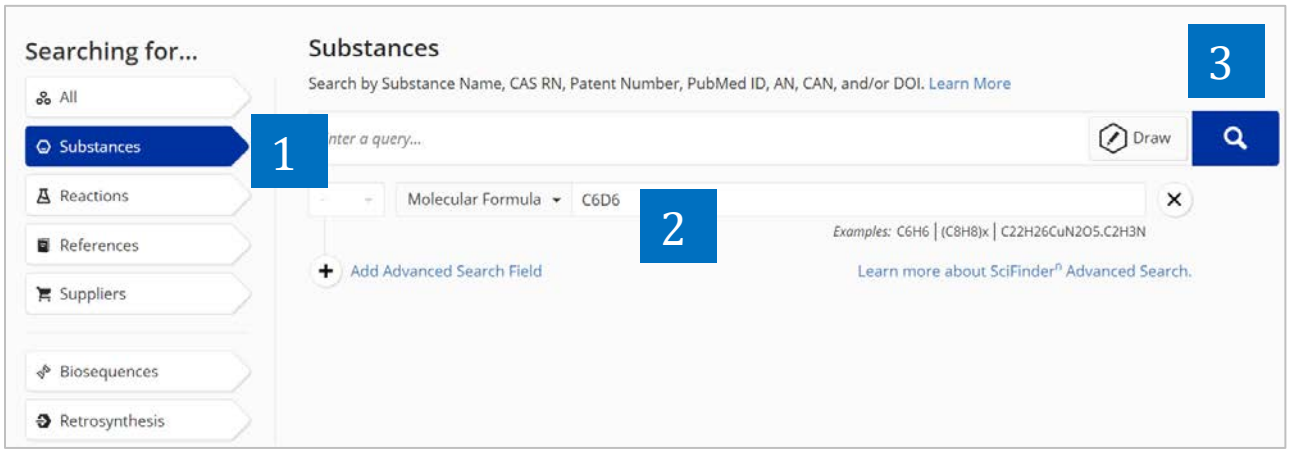


4. 在物质结果集中，通过左侧 Stereochemistry 浏览并选择需要的手性物质。

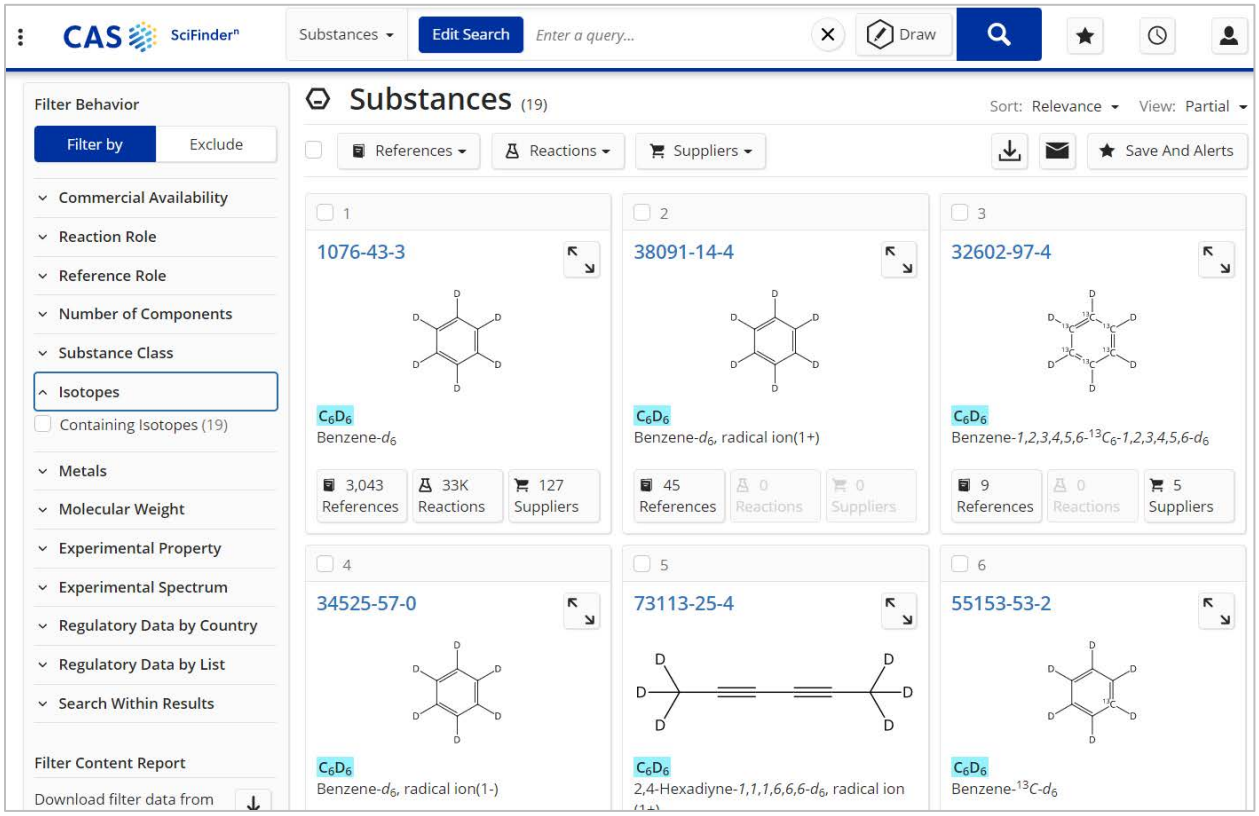
检索同位素标记的化合物

可通过输入分子式或绘制结构式获取同位素标记的化合物。

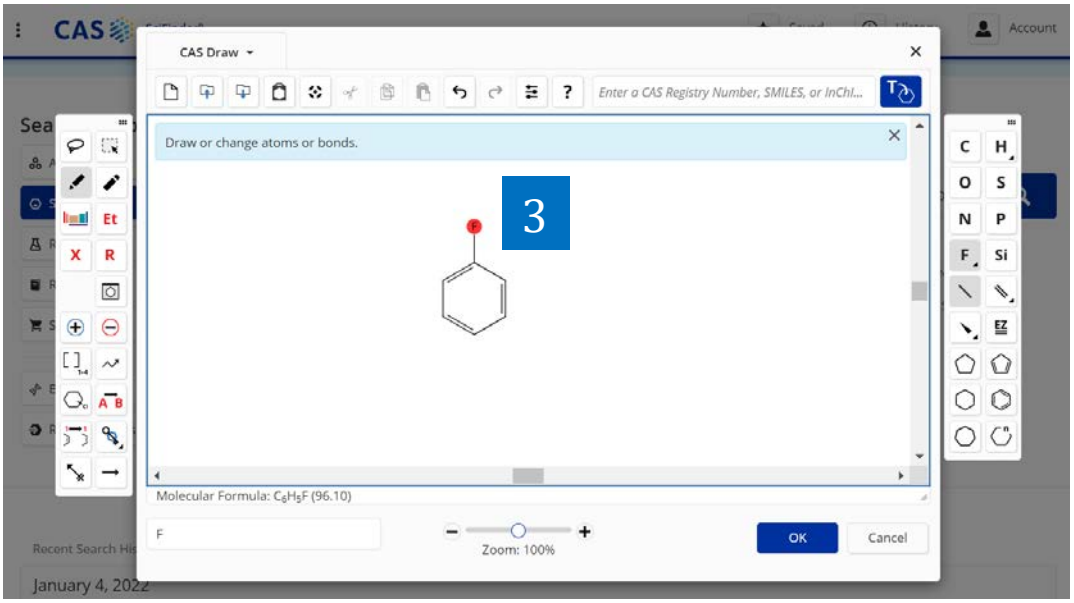
方法一：输入分子式获取同位素标记的化合物（此方法只适用于 H 的同位素 D 和 T 标记的分子）。



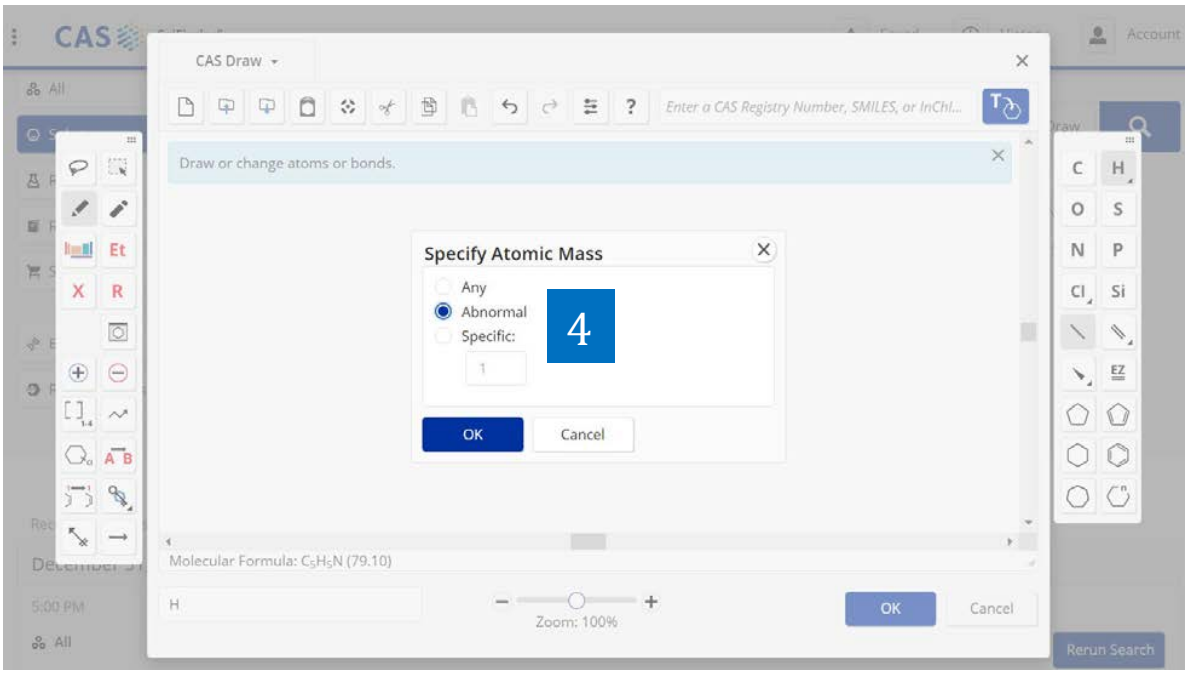
1. 点击 Substances
2. 点击 Add Advanced Search Field, 选择 Molecular Formula，然后输入分子式（如可直接输入 H 的同位素 D 或 T）。
3. 开始检索



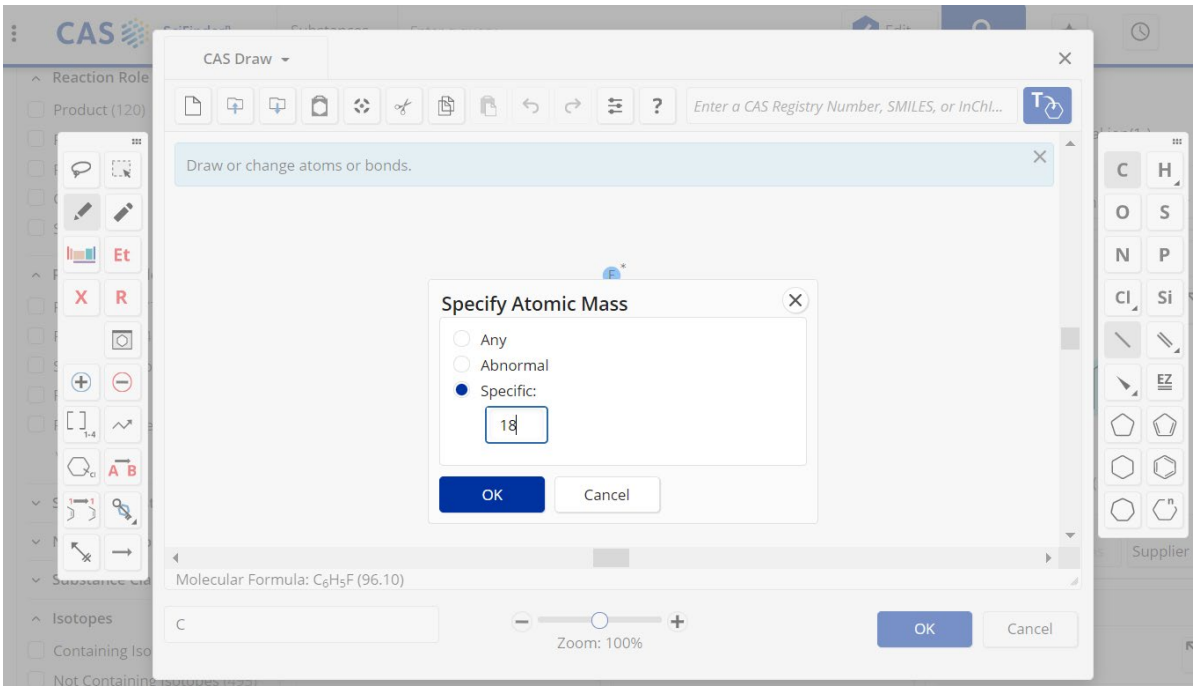
方法二：通过结构式检索同位素标记的物质（适用于所有元素的同位素标记分子）。

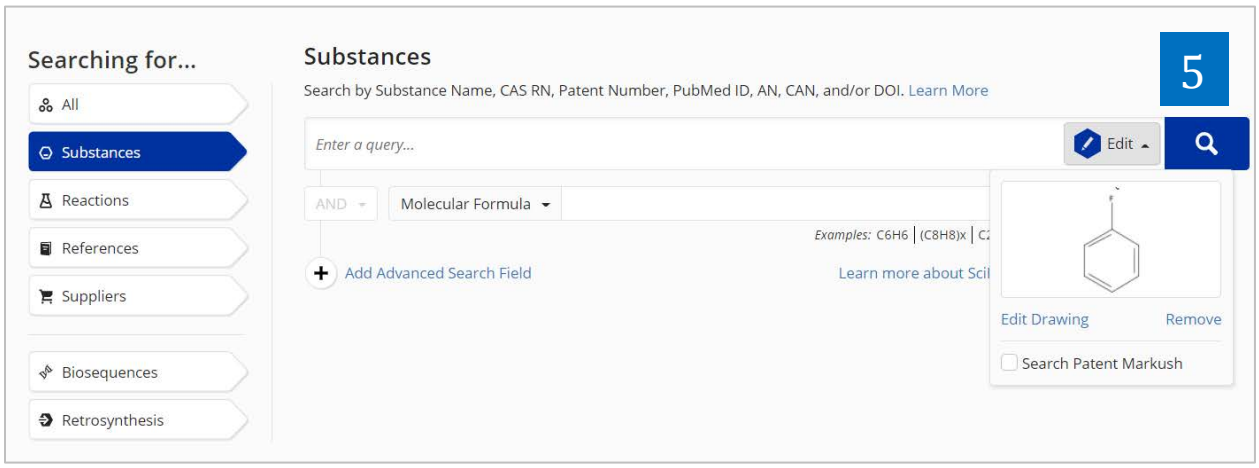


3. 鼠标悬在绘制结构中的原子上（例如 F），点击鼠标右键。

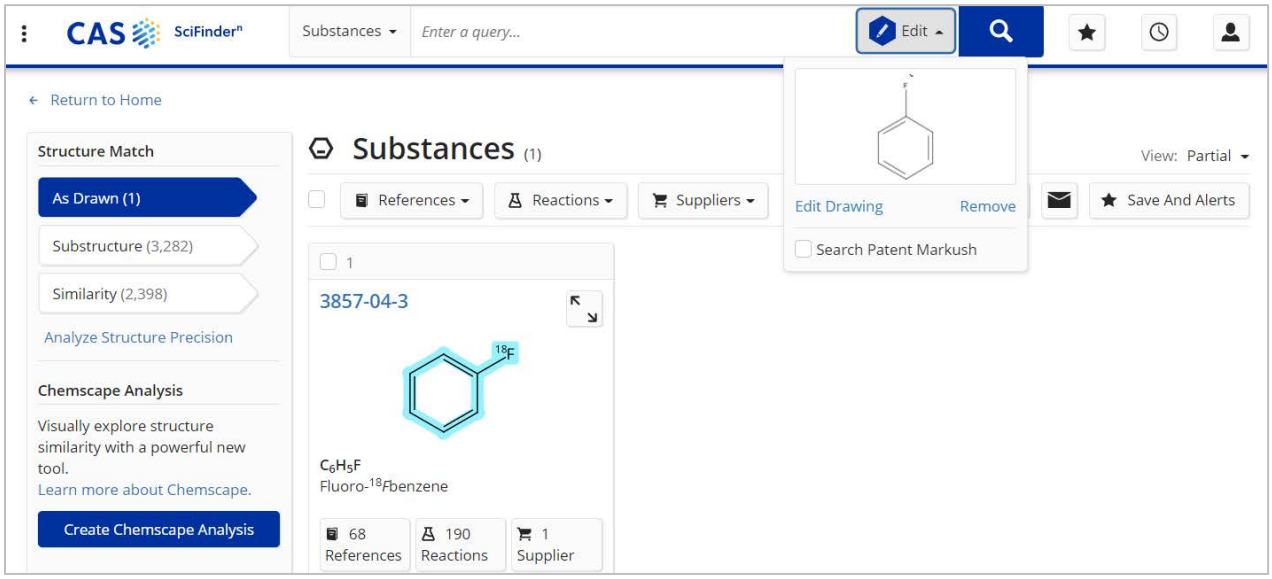


4. 在弹出窗口中点击 Abnormal，可获取所有 F 原子的同位素标记物；点 Specific 可输入特定的氟同位素相对原子质量，例如输入 18，点击 OK。



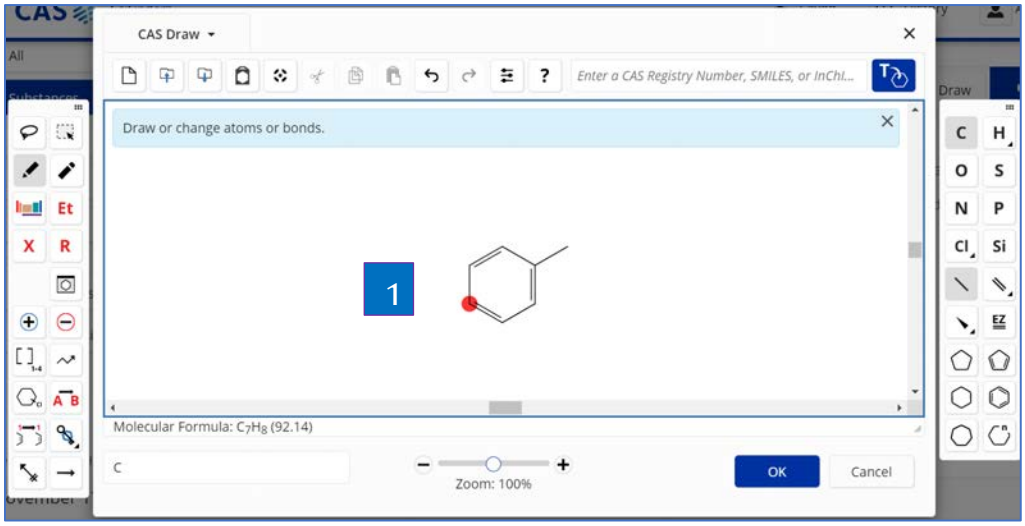


5. 开始检索，获取感兴趣的结果。

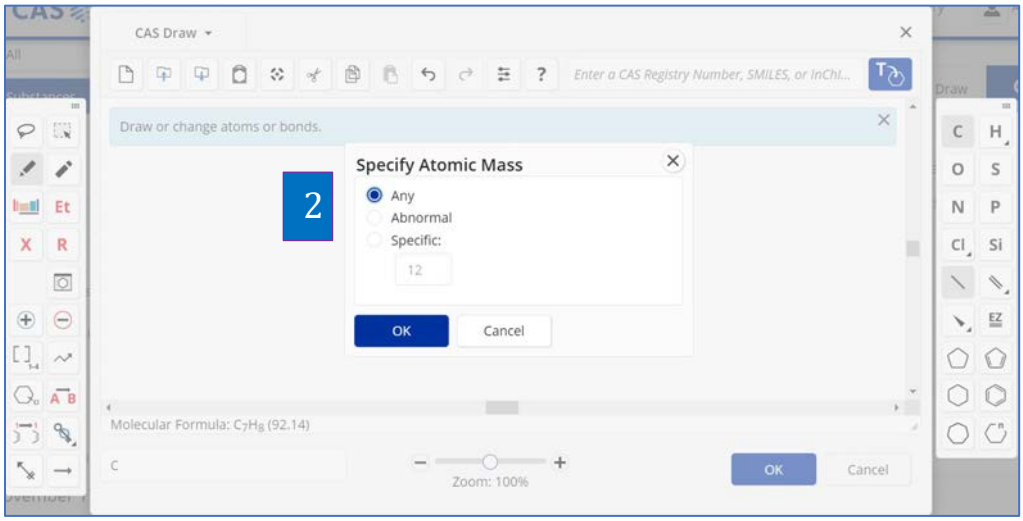


绘制结构式时，如何绘制同位素

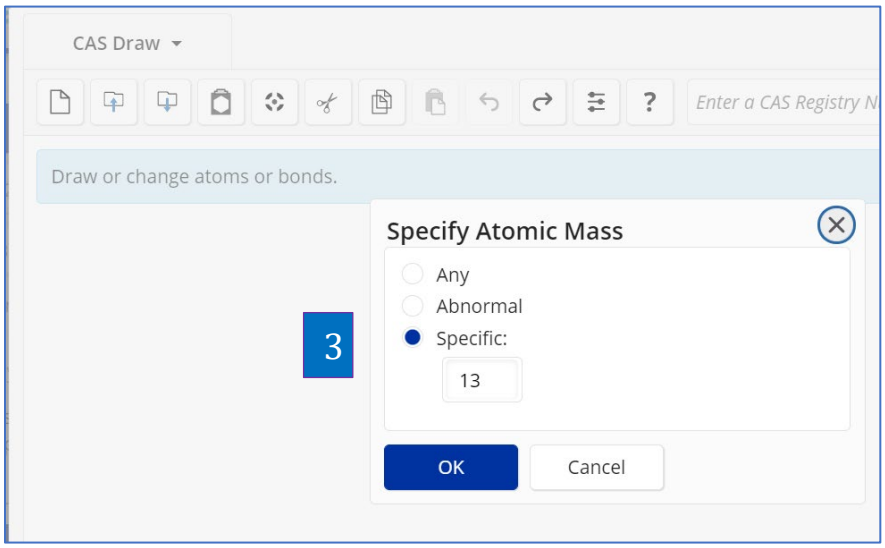
绘制结构时，可绘制特定原子的同位素，以获取其同位素标记的物质、同位素标记的物质参与的反应、研究同位素标记的物质的文献等信息。



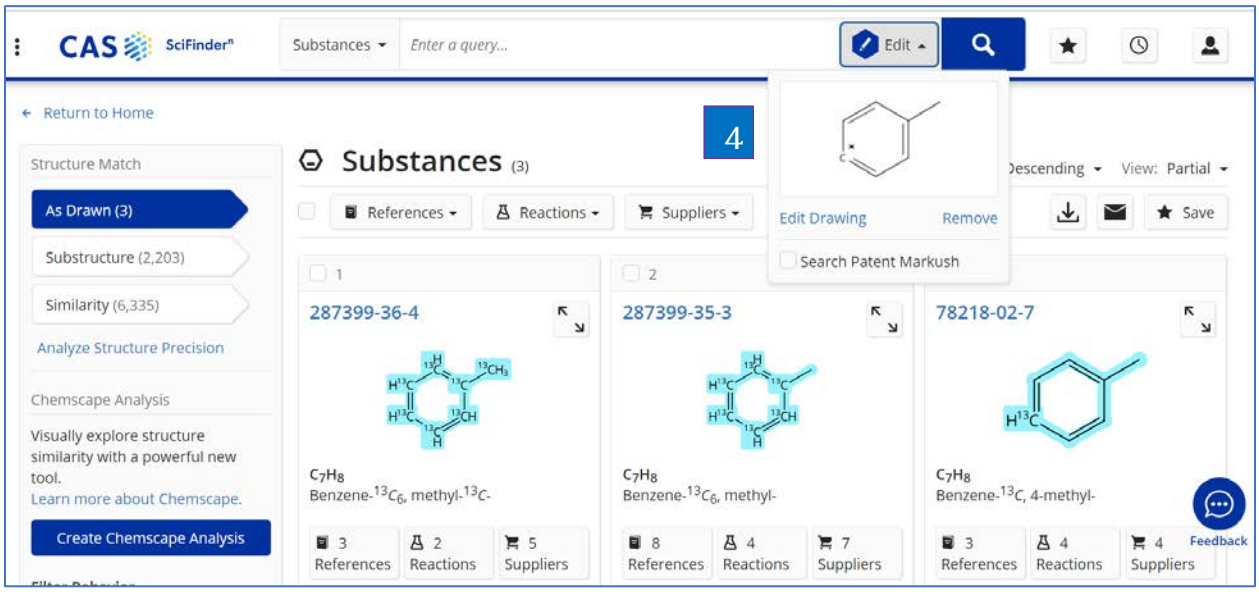
1. 绘制结构，选中需要标记同位素的原子，点击鼠标右键。



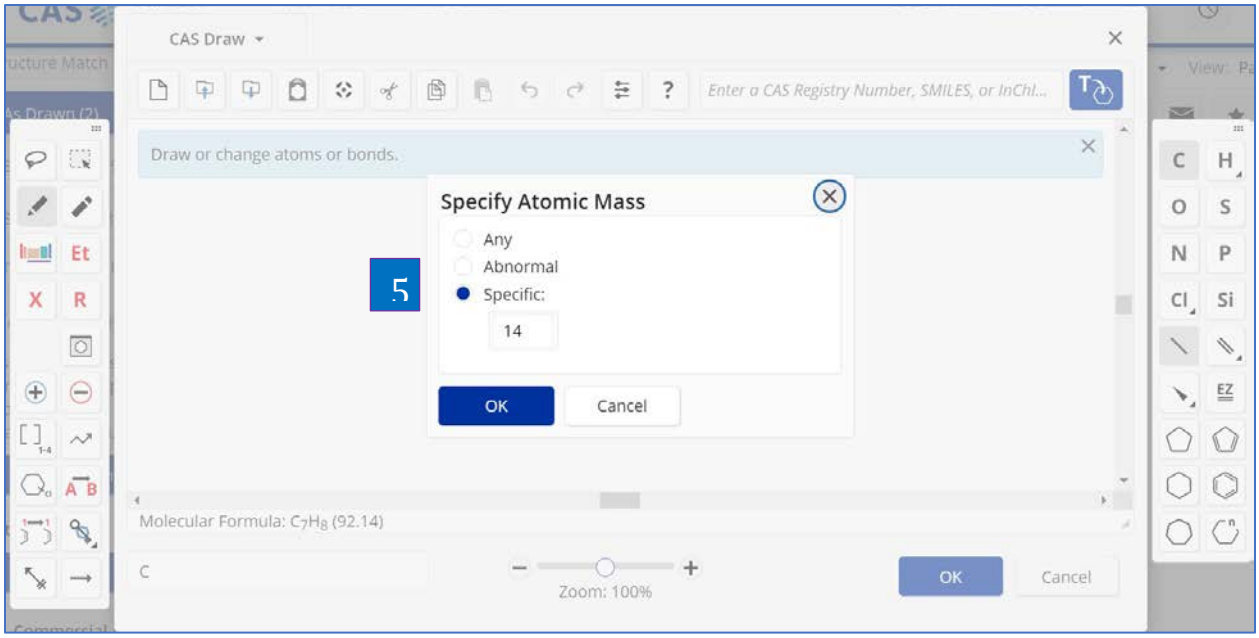
2. 在弹出窗口中，选择原子量为 Any（默认值，任意元素）、Abnormal（任意同位素）或 Specific（特定同位素）。



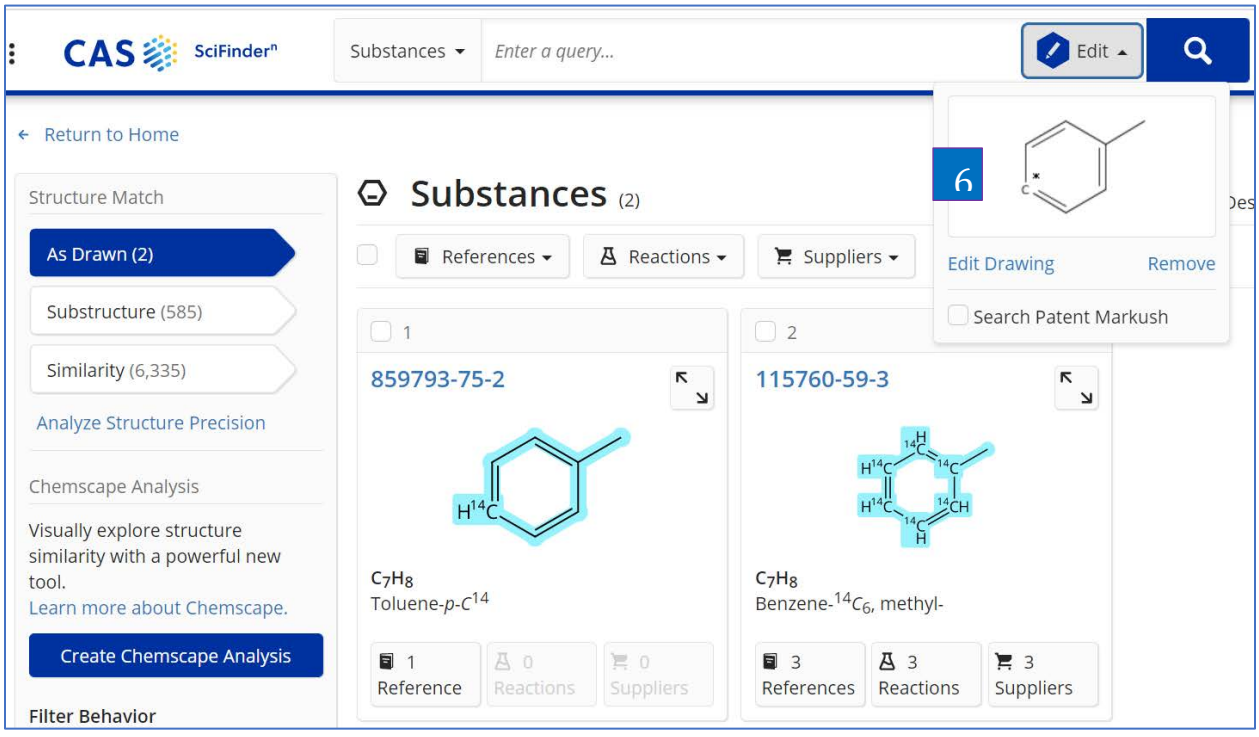
3. 选择 Specific，并输入数值 13，表面此处的碳原子为 ^{13}C。



4. 所得结果均为满足设定需要：甲基对位的碳为 ^{13}C。



5. 若希望甲基对位的碳原子为 ^{14}C，则输入值 14

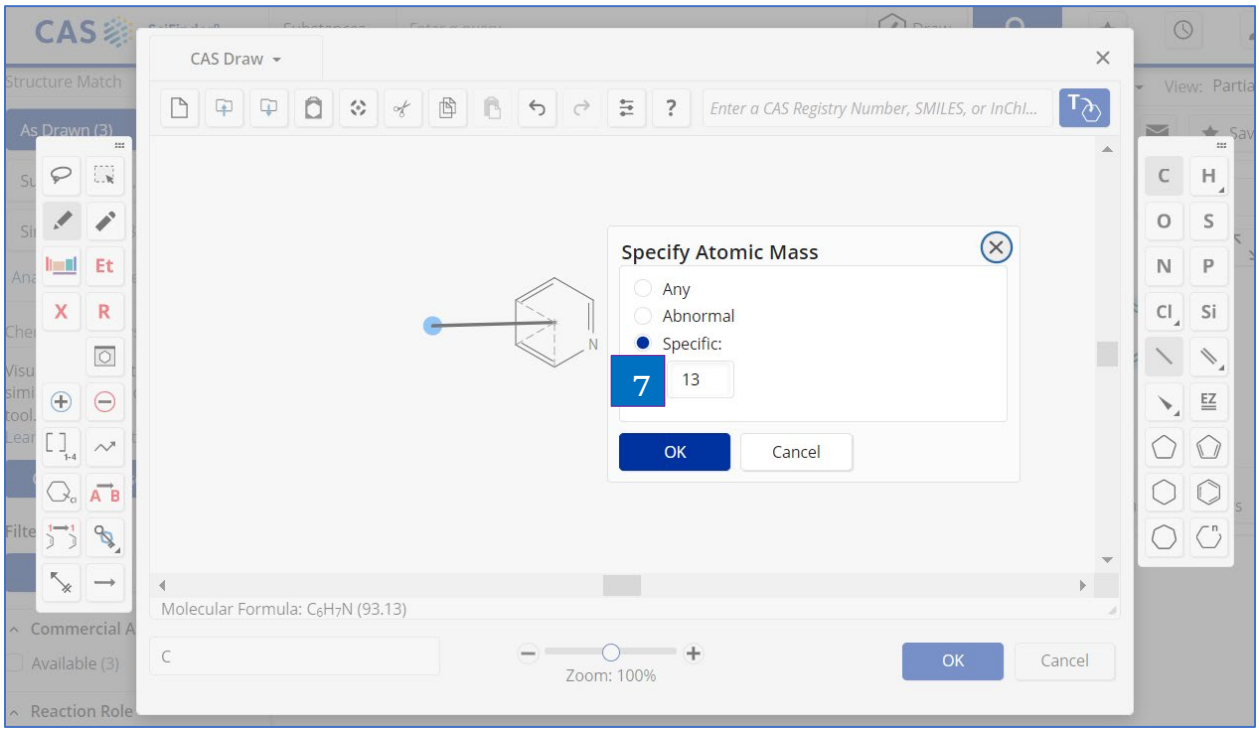


6. 获得指定原子为 ^{14}C 的物质。

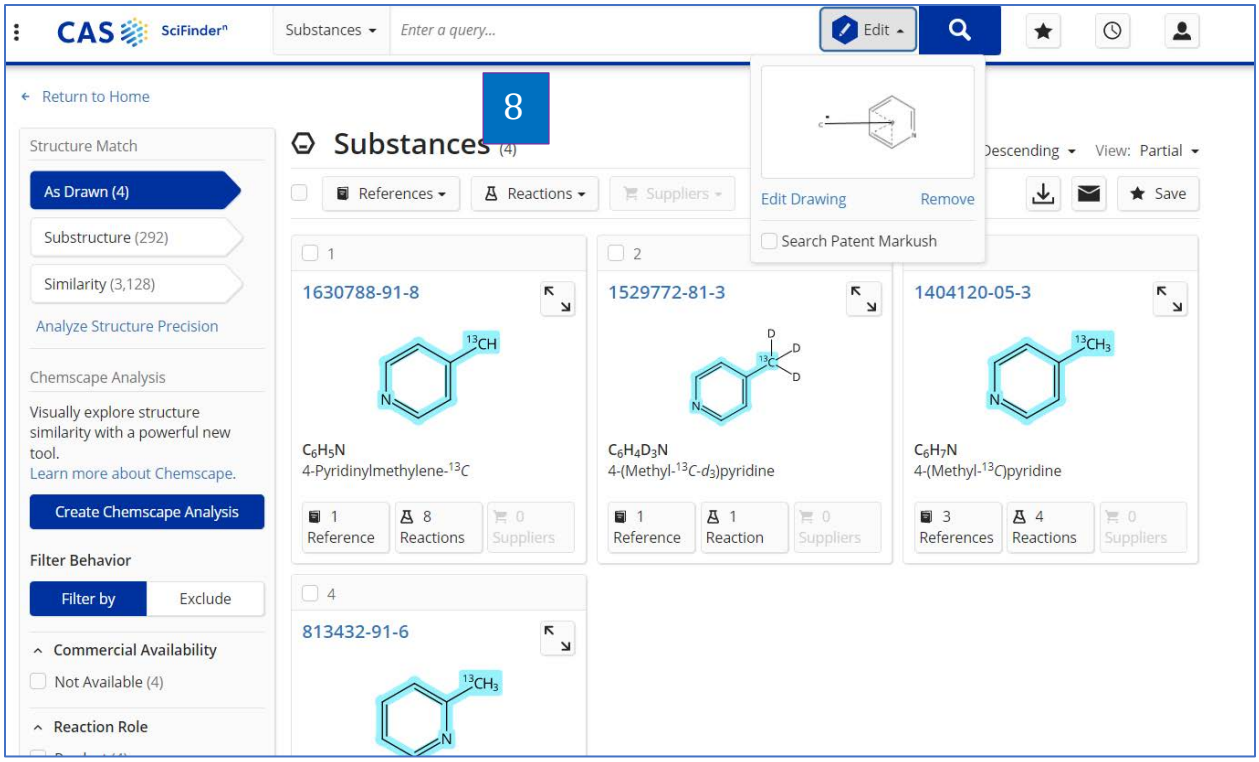
案例

获取具如下结构特征的物质：

吡啶环中 N 原子的邻位、间位或者对位至少连接一个甲基，且甲基碳为 ^{13}C。



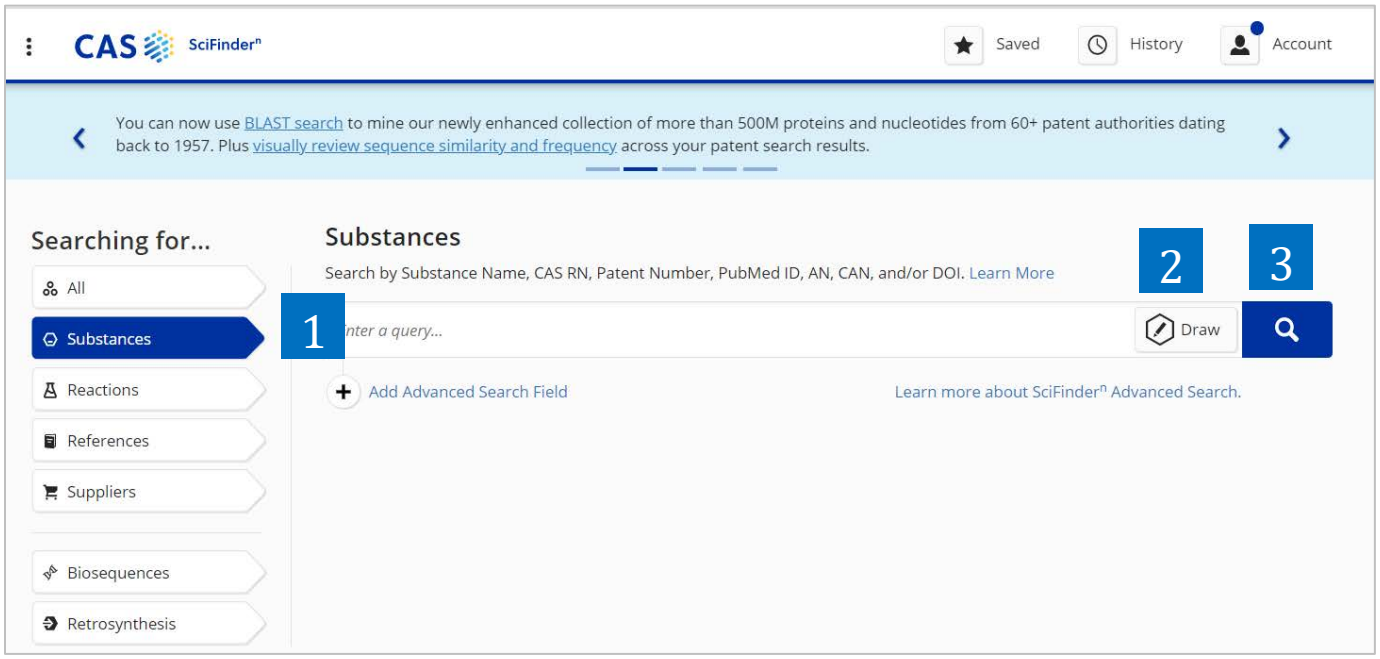
7. 将甲基碳的原子量设置为 13


CAS SciFinder
Substances
Enter a query...
Edit
Return to Home
8
Substances (4)
Edit Drawing
Remove
Search Patent Markush
Structure Match
As Drawn (4)
Substructure (292)
Similarity (3,128)
Analyze Structure Precision
Chemscape Analysis
Visually explore structure similarity with a powerful new tool.
Learn more about Chemscape.
Create Chemscape Analysis
Filter Behavior
Filter by
Exclude
Commercial Availability
Not Available (4)
Reaction Role
References
Reactions
Suppliers
Save
1
1630788-91-8
C6H5N
4-Pyridinylmethylene-13C
1 Reference
8 Reactions
0 Suppliers
2
1529772-81-3
C6H4D3N
4-(Methyl-13C-d3)pyridine
1 Reference
1 Reaction
0 Suppliers
1404120-05-3
C6H7N
4-(Methyl-13C)pyridine
3 References
4 Reactions
0 Suppliers
4
813432-91-6

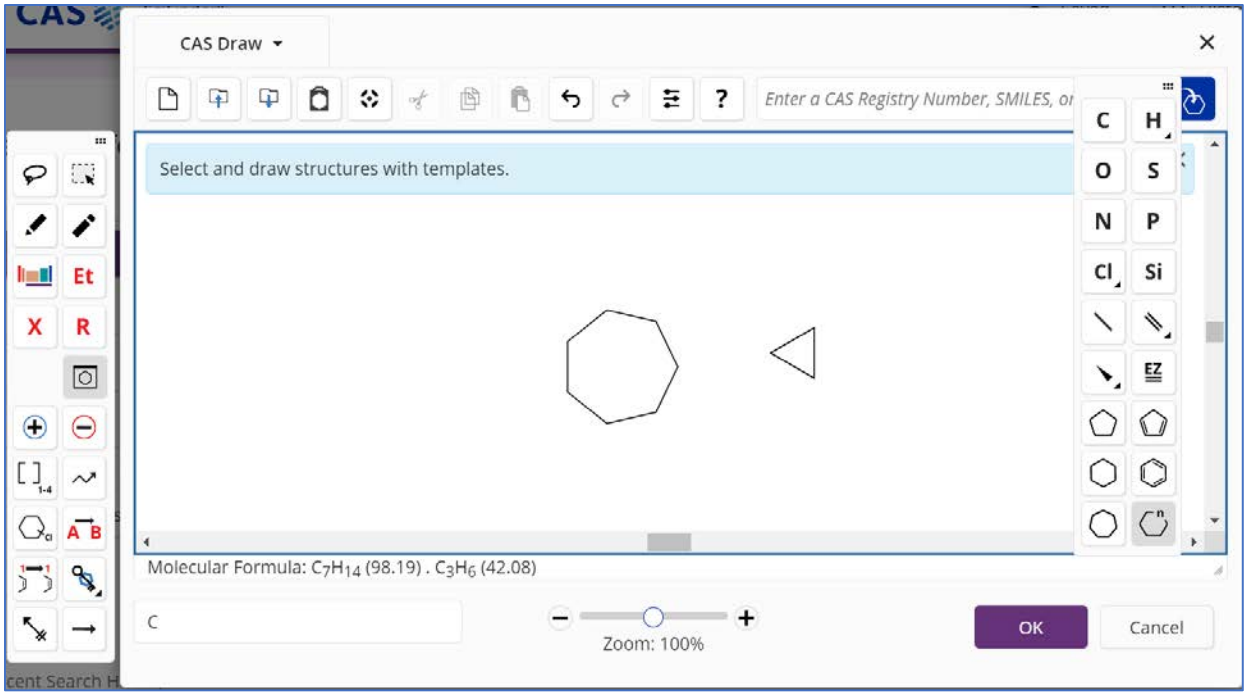
8. 获得满足要求的物质。

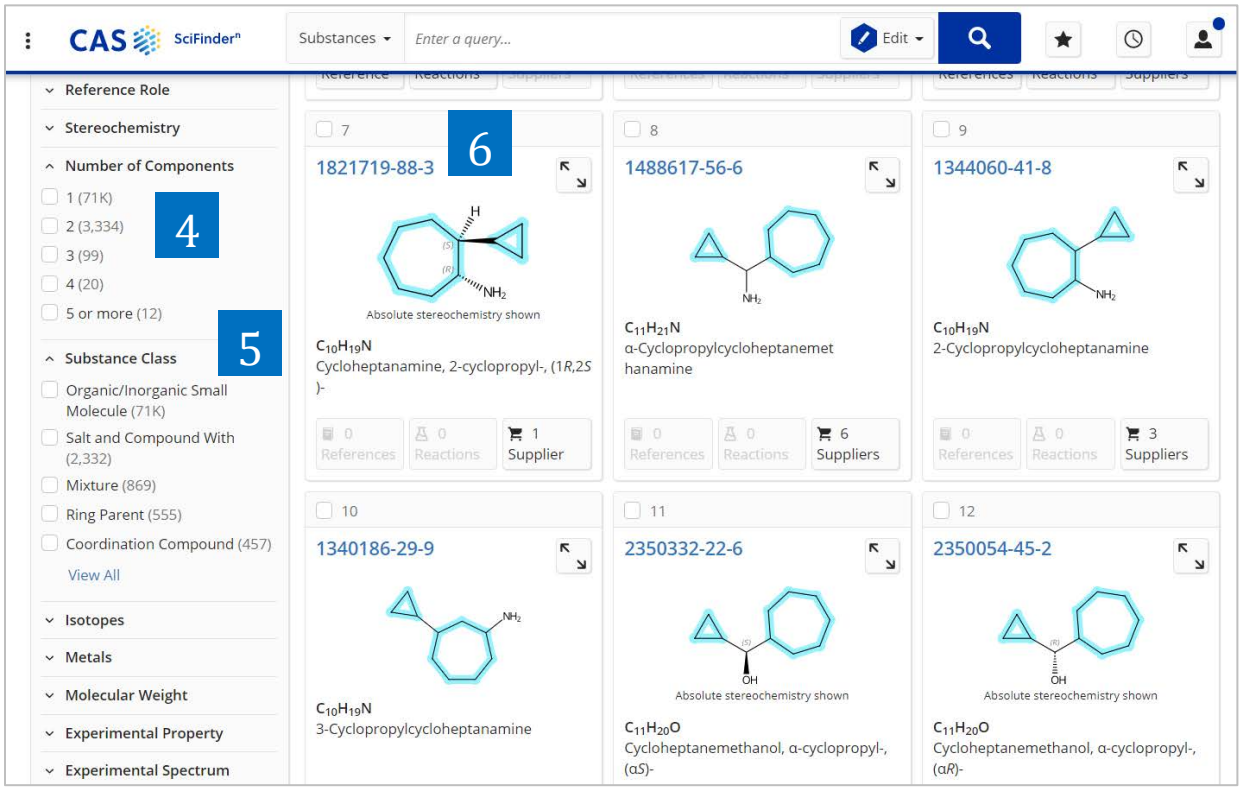
片段结构的物质检索

如果希望某些重要的结构片段一定要出现在物质中，且对这些片段相互之间的连接方式和位置不明确要求的话，则可以在 CAS SciFinder[n] 中用片段结构检索来实现。



1. 选择 Substances，进行物质检索。
2. 点击 Draw，打开结构编辑器并绘制结构。
3. 开始检索。

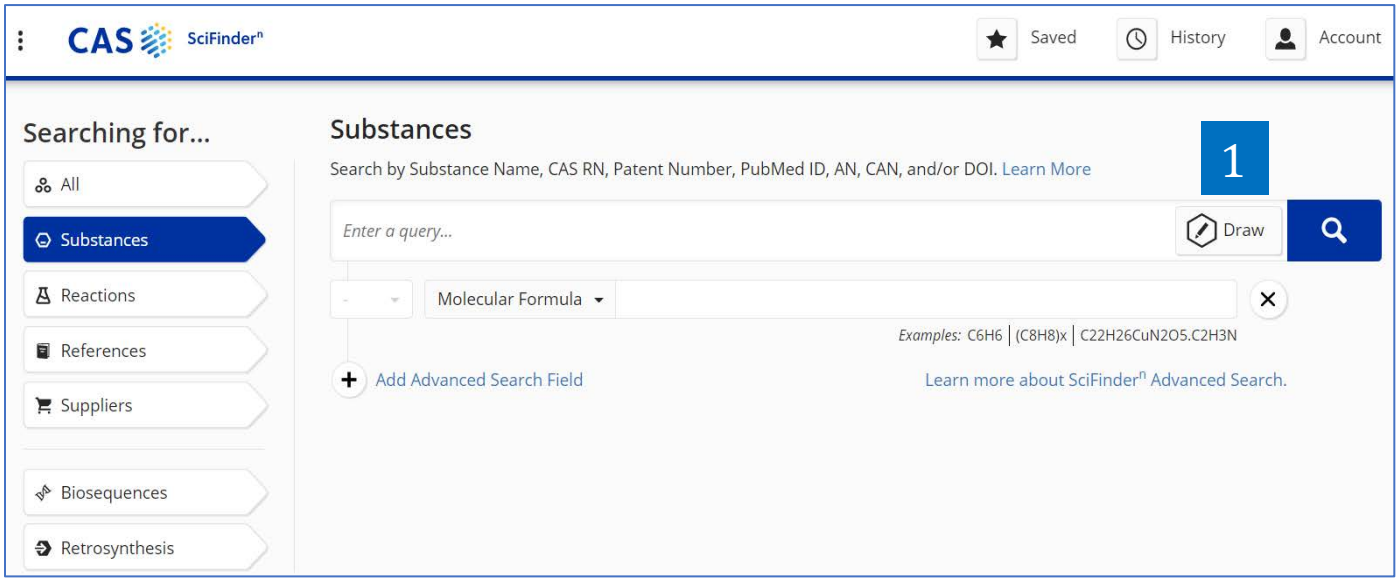

CAS Draw
Enter a CAS Registry Number, SMILES, or
Select and draw structures with templates.
Molecular Formula: C7H14 (98.19) . C3H6 (42.08)
Zoom: 100%
OK
Cancel


CAS SciFinder
Substances
Enter a query...
Edit
Reference Role
Stereochemistry
Number of Components
1 (71K)
2 (3,334)
3 (99)
4 (20)
5 or more (12)
Substance Class
Organic/Inorganic Small Molecule (71K)
Salt and Compound With (2,332)
Mixture (869)
Ring Parent (555)
Coordination Compound (457)
View All
Isotopes
Metals
Molecular Weight
Experimental Property
Experimental Spectrum
4
5
6
7
1821719-88-3
Absolute stereochemistry shown
C10H19N
Cycloheptanamine, 2-cyclopropyl-, (1R,2S)-
0 References
0 Reactions
1 Supplier
8
1488617-56-6
C11H21N
α-Cyclopropylcycloheptanemethanamine
0 References
0 Reactions
6 Suppliers
9
1344060-41-8
C10H19N
2-Cyclopropylcycloheptanamine
0 References
0 Reactions
3 Suppliers
10
1340186-29-9
C10H19N
3-Cyclopropylcycloheptanamine
11
2350332-22-6
Absolute stereochemistry shown
C11H20O
Cycloheptanemethanol, α-cyclopropyl-, (αS)-
12
2350054-45-2
Absolute stereochemistry shown
C11H20O
Cycloheptanemethanol, α-cyclopropyl-, (αR)-

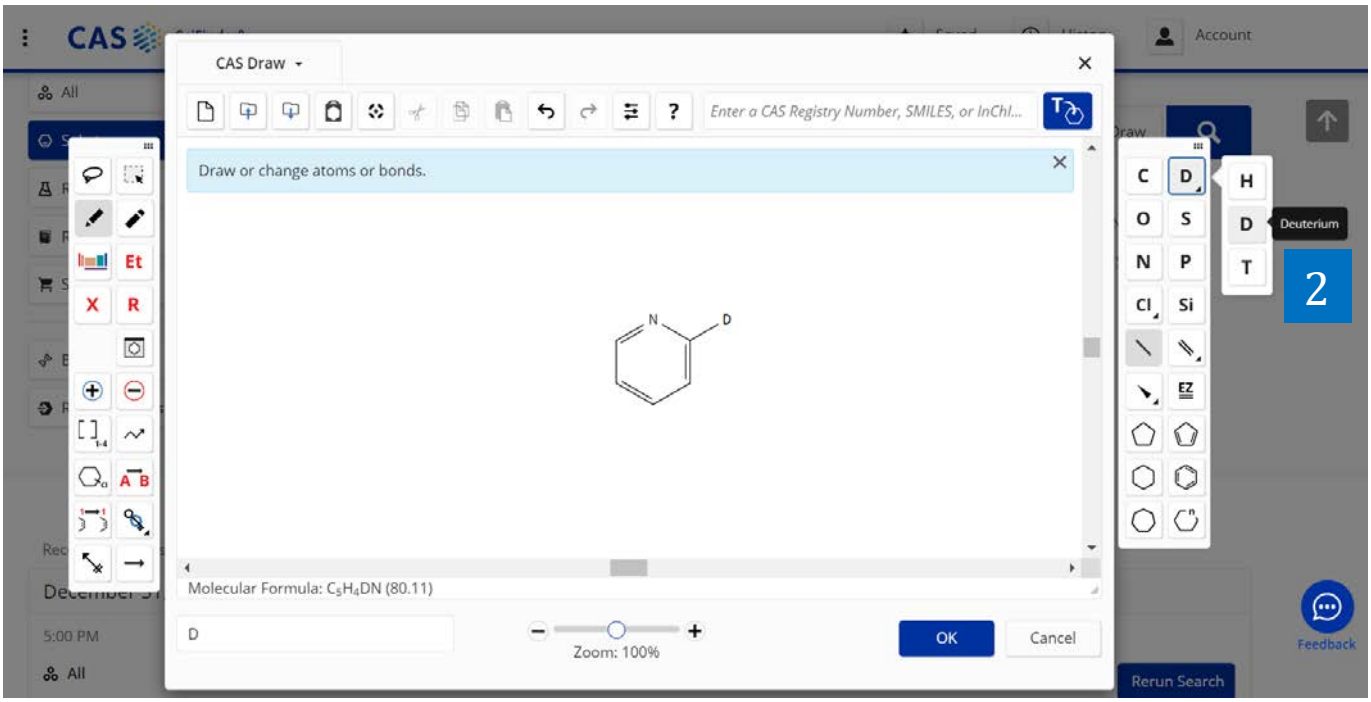
4. 在结果集页面左侧 Number of Components 下勾选相应选项，限定被检索的片段在同一个组分或多个不同组分中（如：选择 1，表示被检索片段在同一个组分中；选择 2，表示被检索片段分别在 2 个不同组分中等；以此类推）。
5. 可继续通过 Substance Class，筛选物质类型。
6. 点击 CAS 登记号，查看物质详情。

直接在结构中绘制氢的同位素 D 和 T

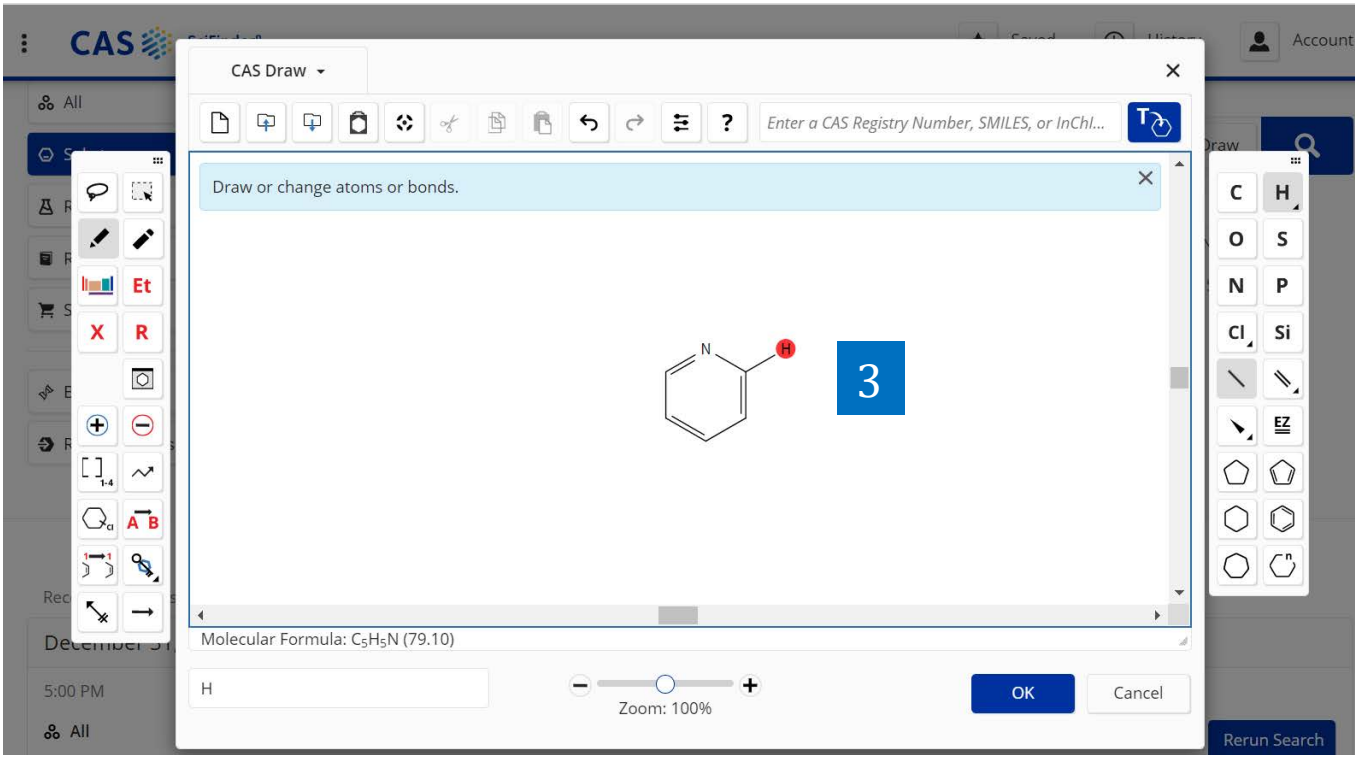
在 CAS SciFinder^n 的结构编辑器中，可以直接在结构中绘制氢的同位素原子 D 和 T，获取含有氘或氚同位素标记的物质。

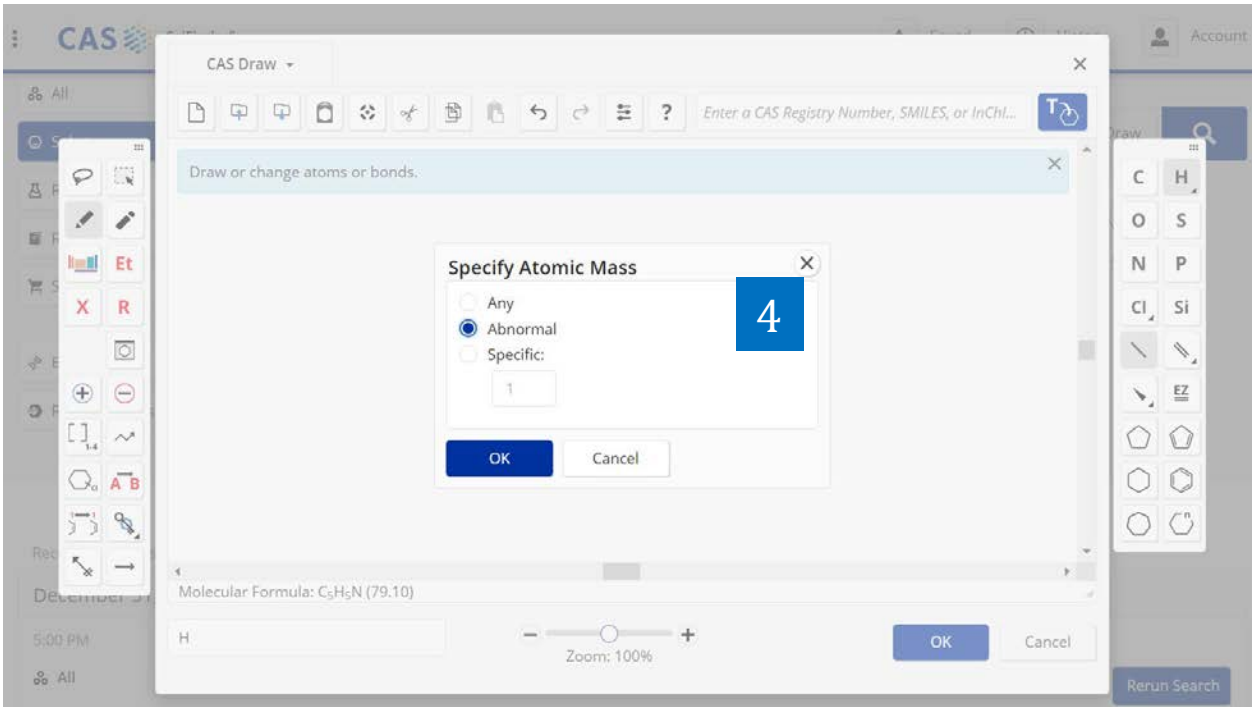


1. 点击 Draw，打开结构编辑器。

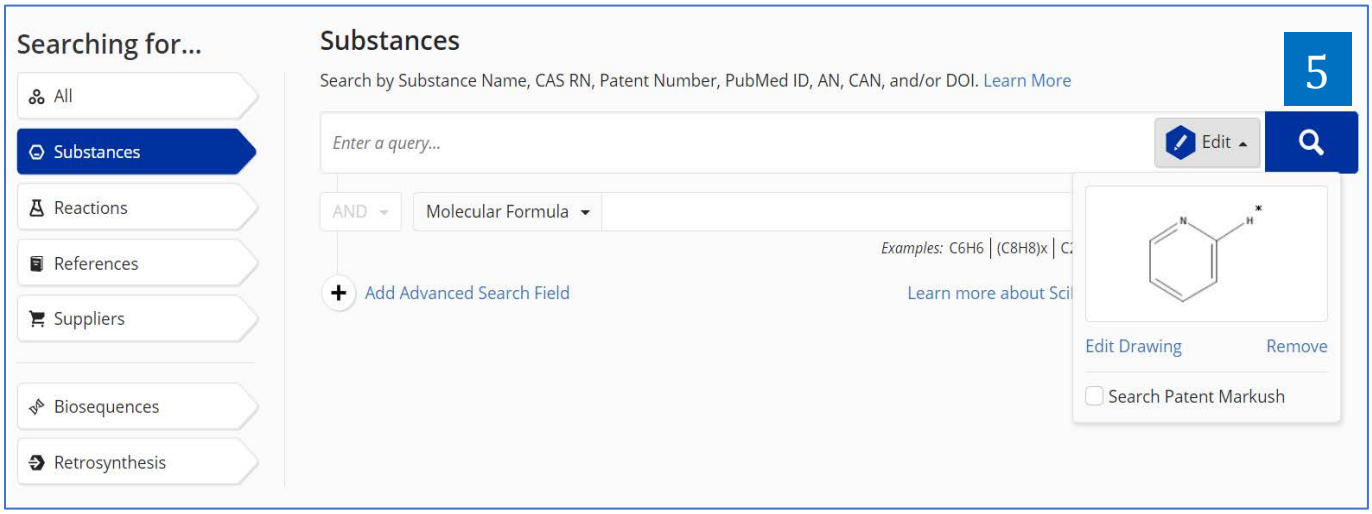


2. 点击 H 原子按键，选择 D 或者 T 绘制。

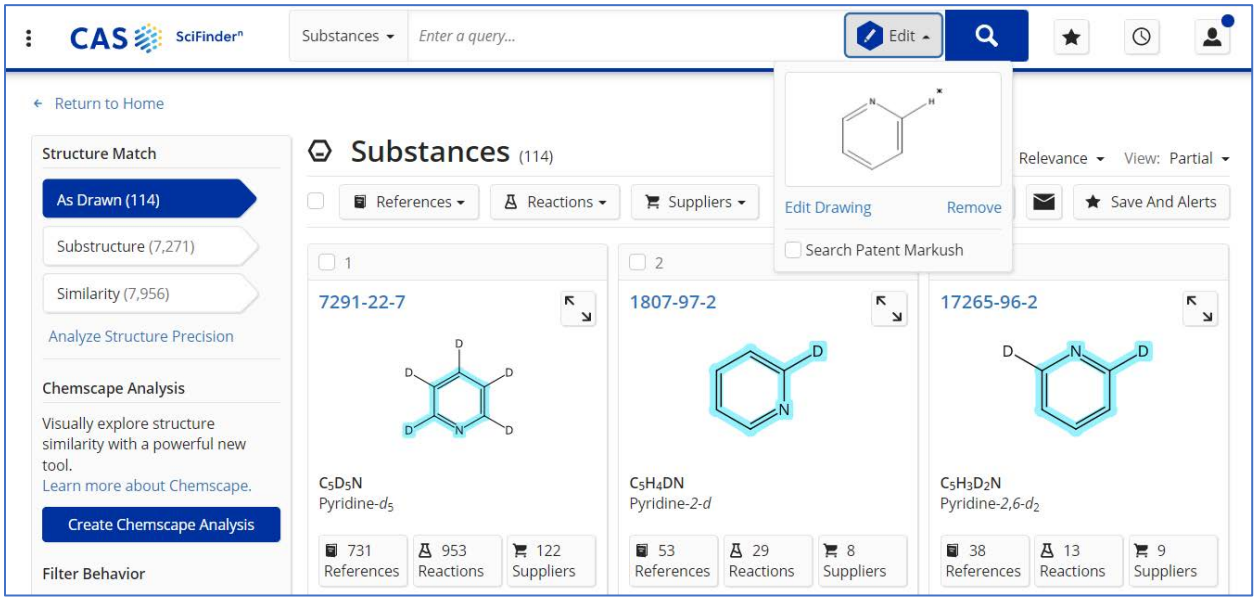




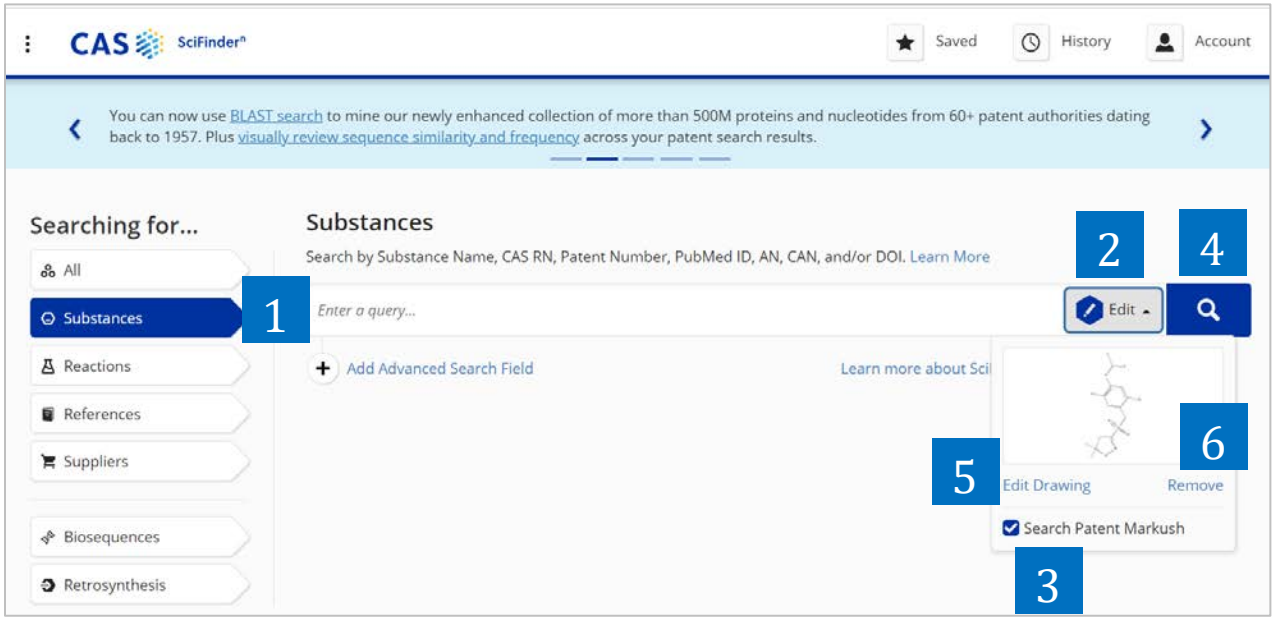
3. 或者，鼠标置于 H 上，然后点击鼠标邮件，进行氢原子的同位素设置。
4. 在弹出窗口中点击 Abnormal，可获取所有氢同位素标记物质；点 Specific 可输入特定的氢同位素相对原子质量，例如输入 2 或 3 可分别检索 D 或 T。



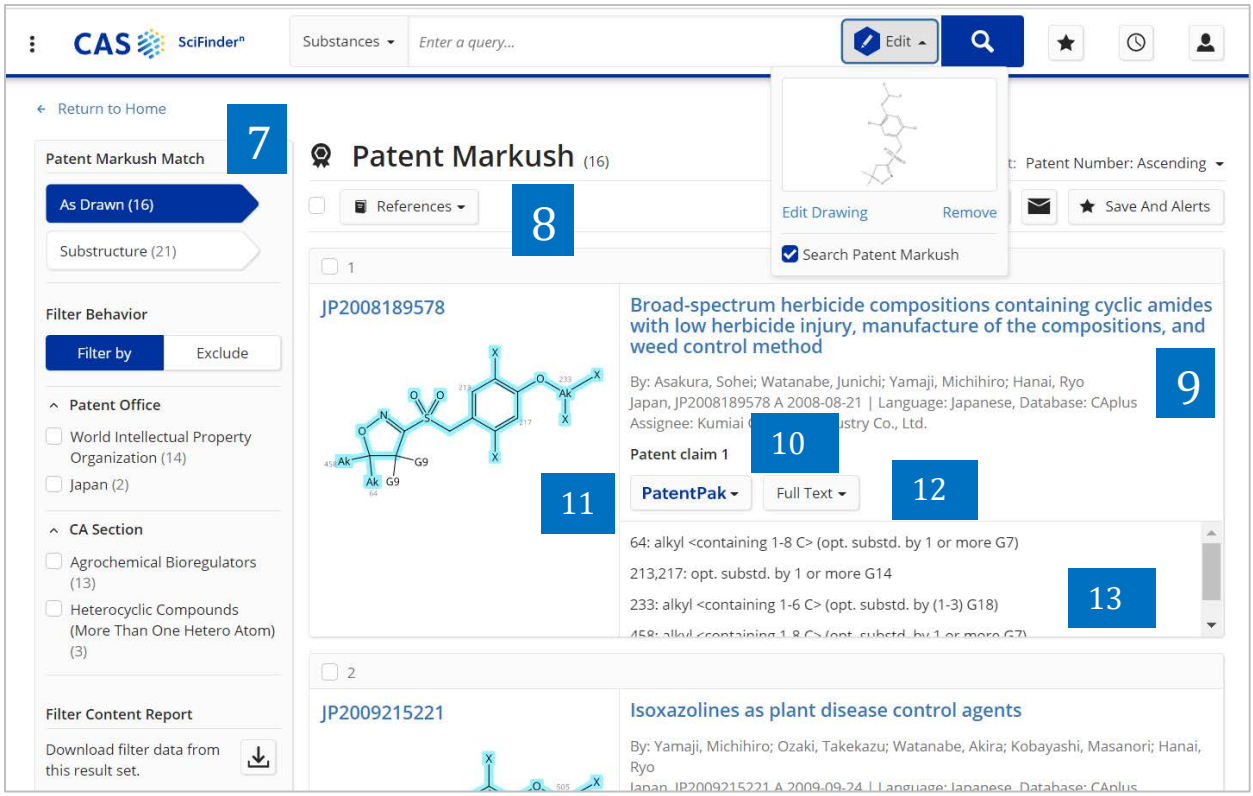
5. 开始检索，获取感兴趣的结果。



马库什结构检索



1. 选择 Substances
2. 点击 Draw，打开结构编辑器绘制检索结构
3. 上传结构后，勾选 Search Patent Markush
4. 开始检索
5. 点击 Edit Drawing，可重新编辑结构
6. 点击 Remove，去除已上传的结构



7. Markush 结构检索结果的匹配方式：As Drawn，Substructure

8. 点击专利号，获取专利文献详情

9. 专利的著录信息

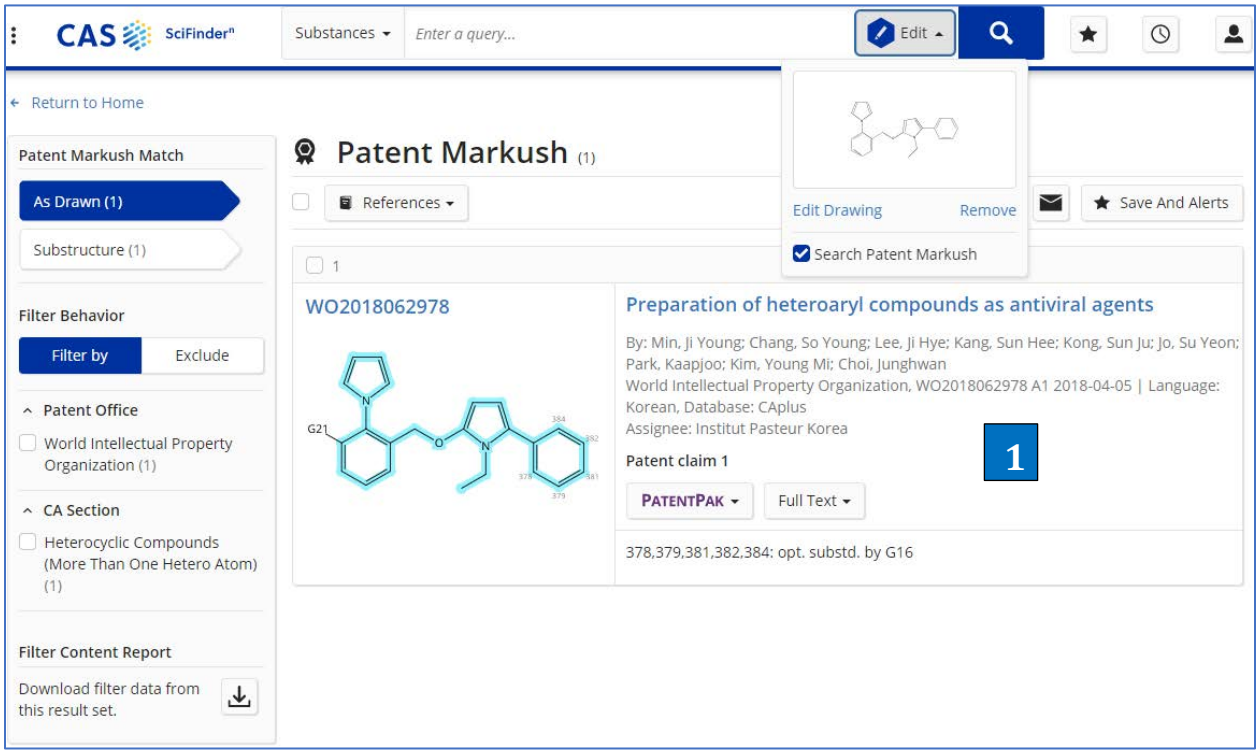
10. 该马库什结构在专利中出现的位置

11. PatantPak：获取专利（同族）全文、定位专利中的重要物质

12. 专利的全文链接，链接至相应专利局网站

13. 马库什结构详情

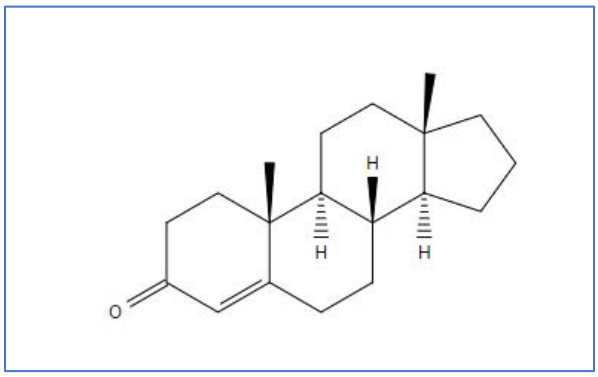
马库什结构检索结果页直接呈现专利著录信息

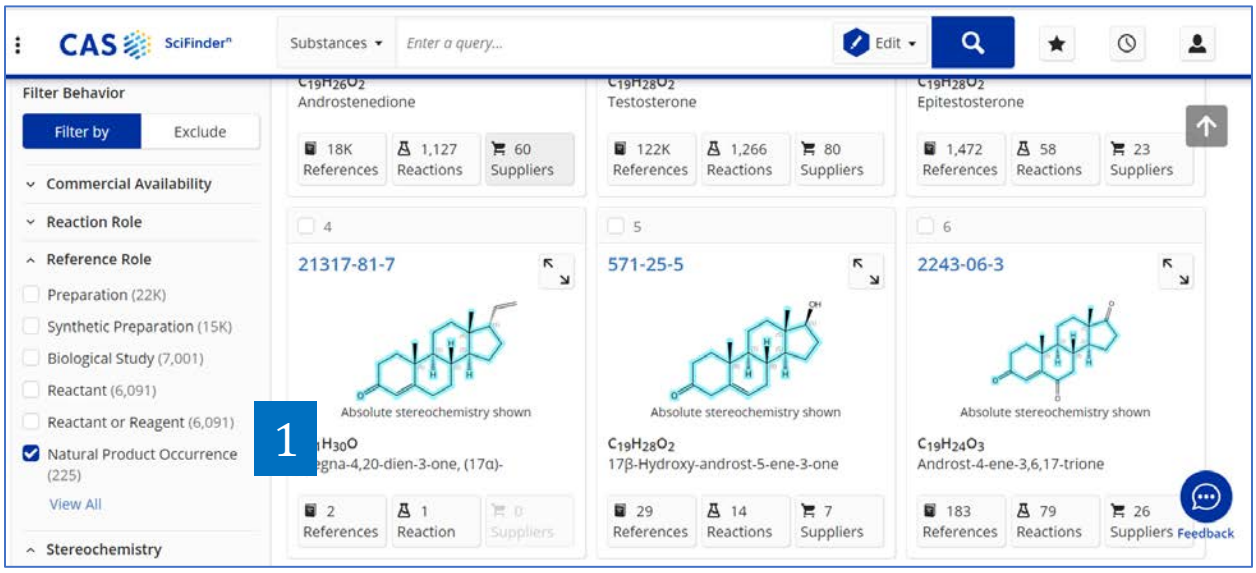


1. 马库什结构检索结果页除展示马库什结构、专利号外，同时展示专利标题、发明人、专利局、专利原始撰写语种、申请人等信息。

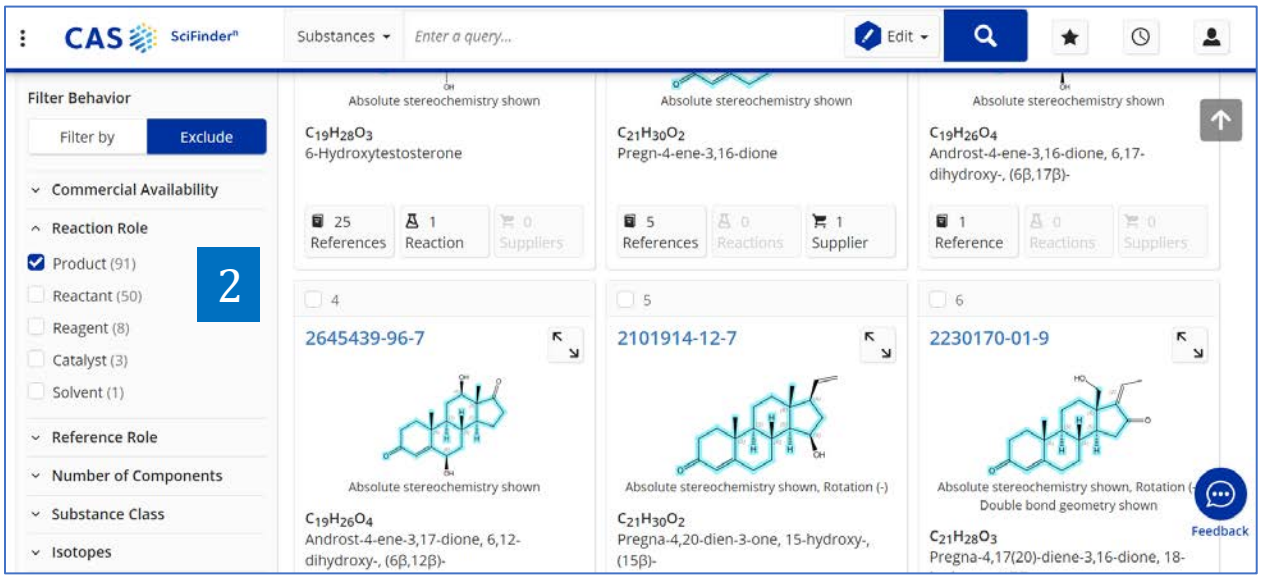
如何检索一个天然产物是否被合成

包含如下结构的天然产物，哪些还没有被合成出来？

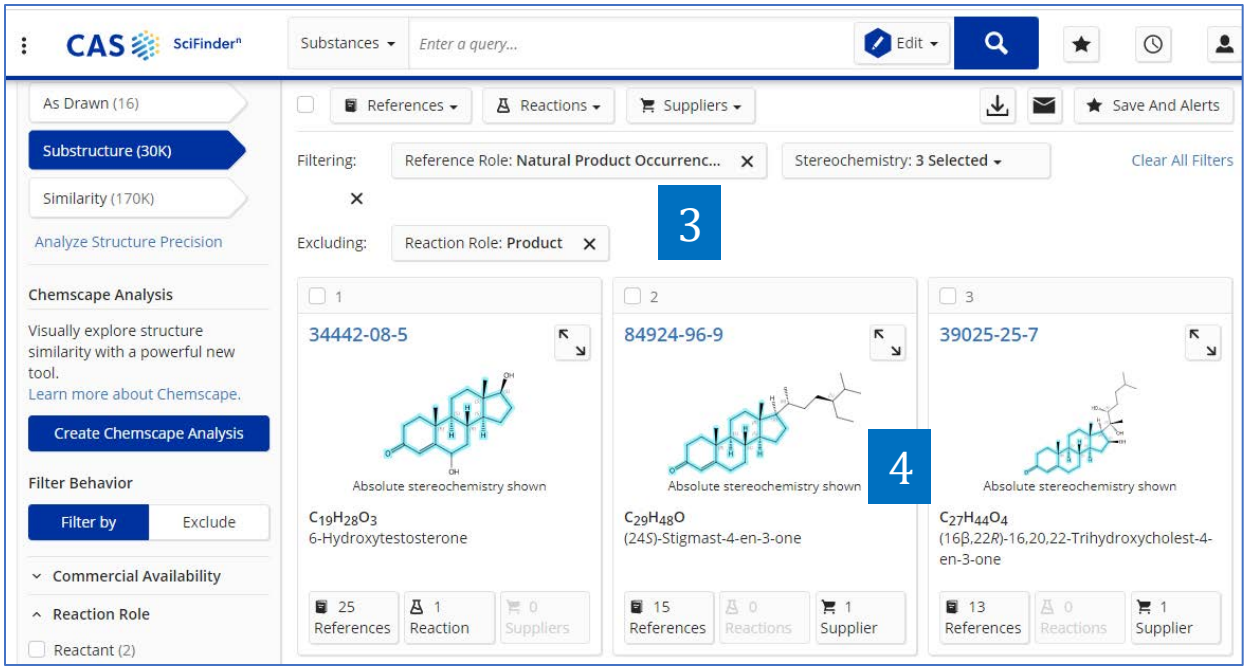


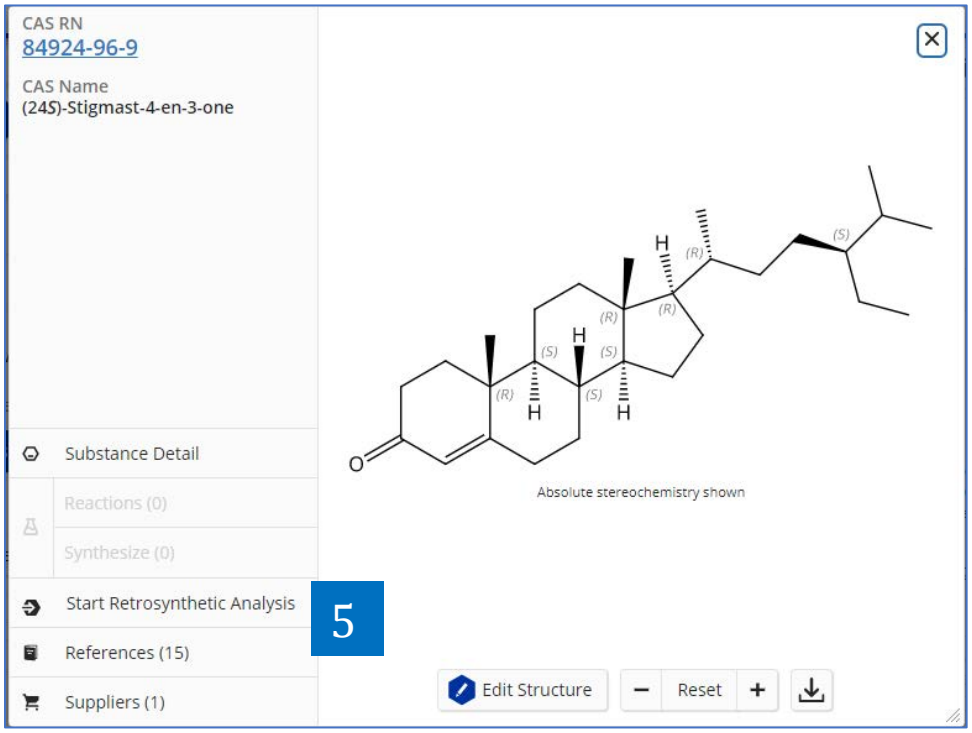


1. 在物质结果集页面左侧，勾选 Reference Role 选项下的 Natural Product Occurrence，将物质限定为天然产物。



2. 选择 Filter Behavior Exclude，再勾选 Reaction Role 选项下的 Product，排除已有合成反应的天然产物。

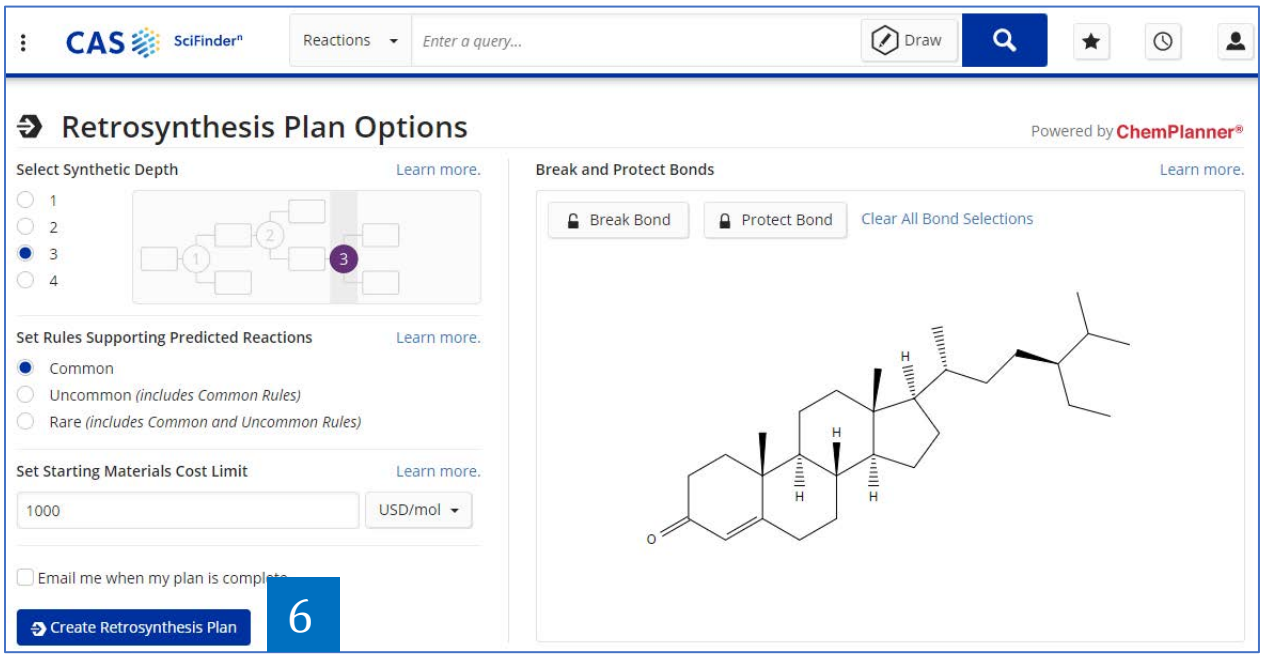




3. 获得没有合成反应的天然产物。

4. 点击目标天然产物的结构。

5. 在弹出窗口中点击 Start Retrosynthetic Analysis，开始逆合成路线分析。



6. 点击 Create Retrosynthesis Plan，获取该物质的预测逆合成路线。

获取化学品供应商信息

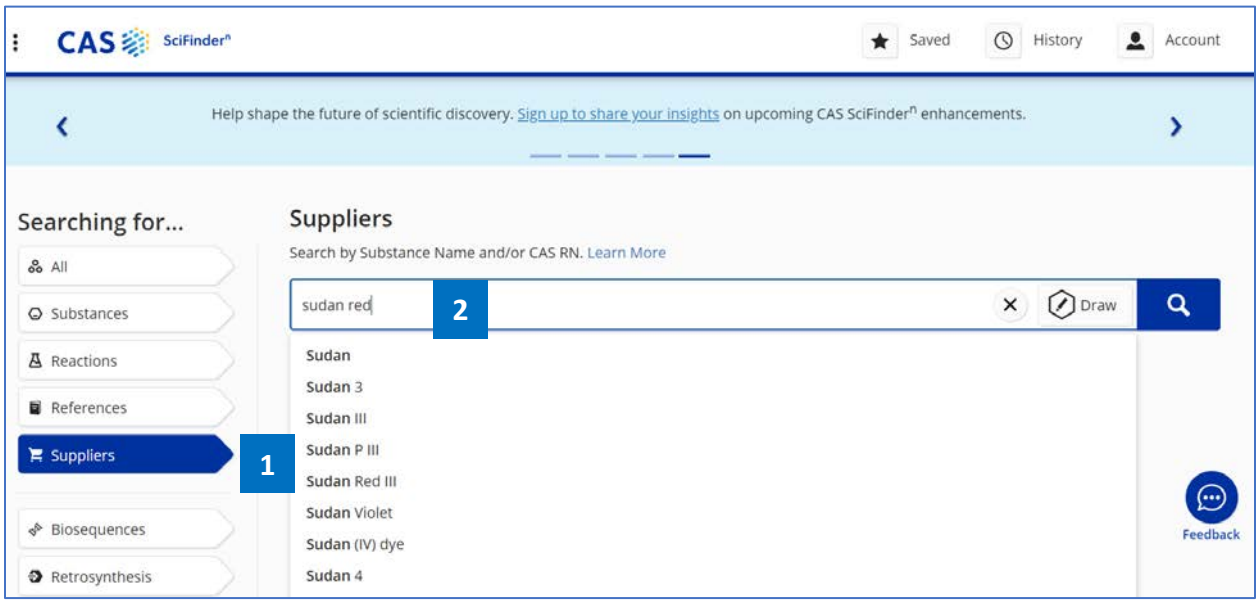
在 CAS SciFinder^{n} 中可通过以下三种方式获取化学品供应商的信息：

1、直接在 Suppliers 检索框中输入所需化学品的物质名称（包括商品名、俗名等）或者 CAS 登记号进行检索。

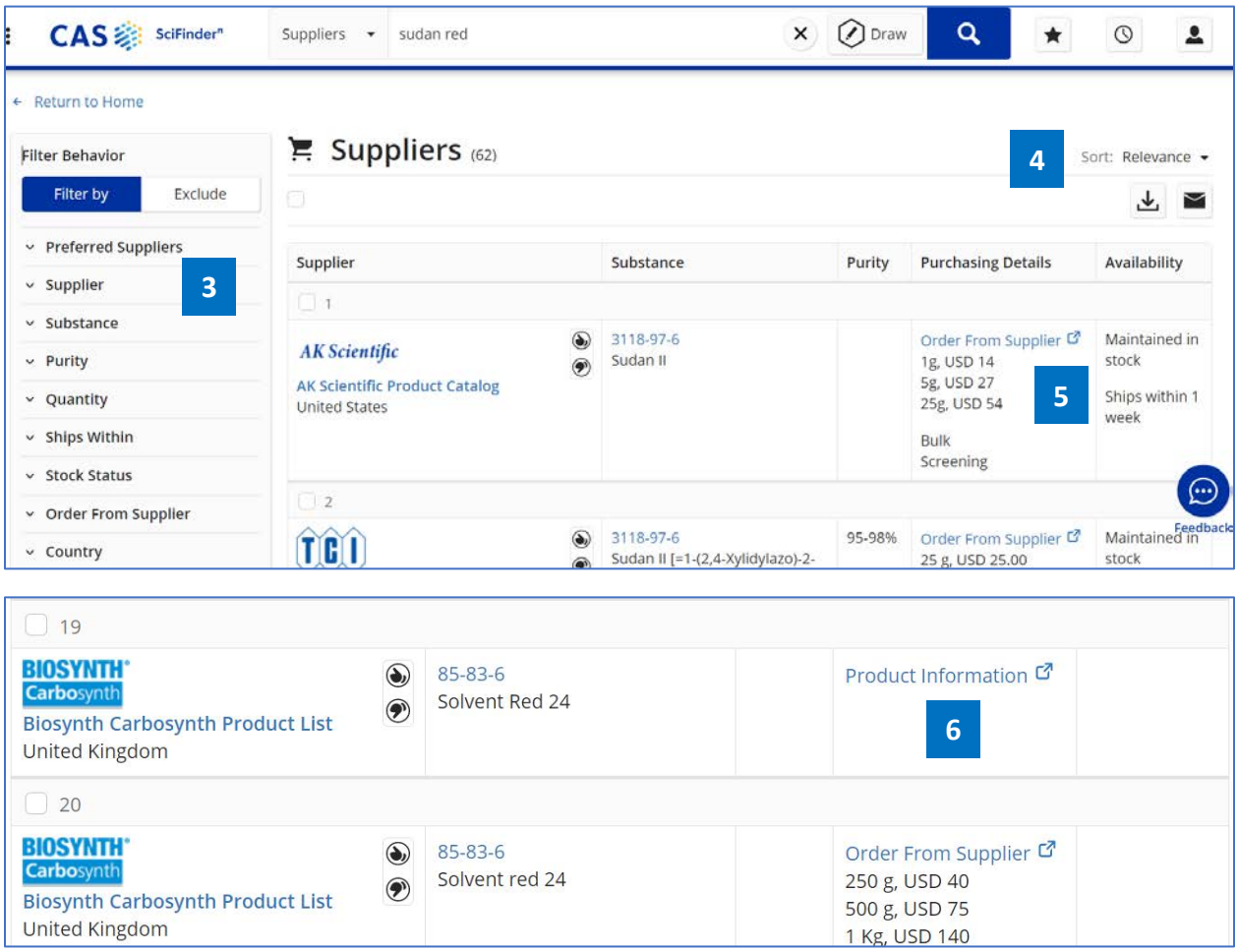
2、在物质结果集页面，点击相应的 suppliers 获得供应商信息。

3、在反应结果集中页面点击相应的 Suppliers 获取供应商信息。

方法 1、直接在 Suppliers 检索框中输入所需化学品的物质名称（包括商品名、俗名等）或者 CAS 登记号进行检索。

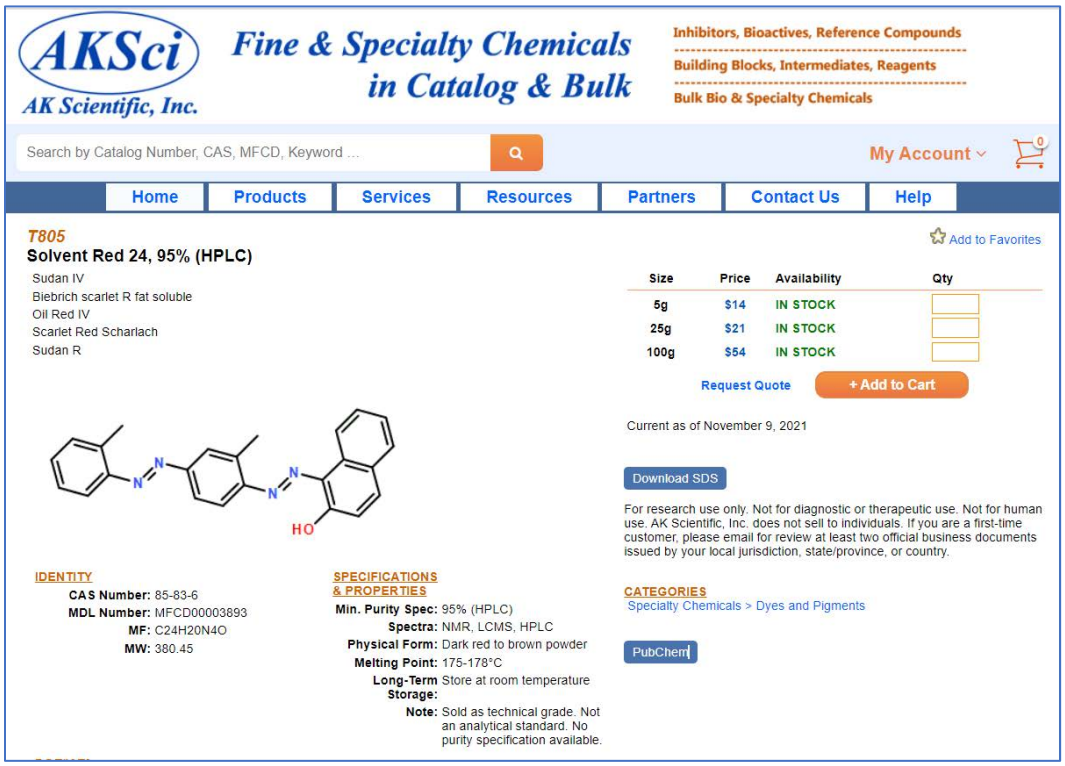


1. 点击 Suppliers
2. 输入所需化学品的物质名称（包括商品名，俗名等），或者 CAS 登记号

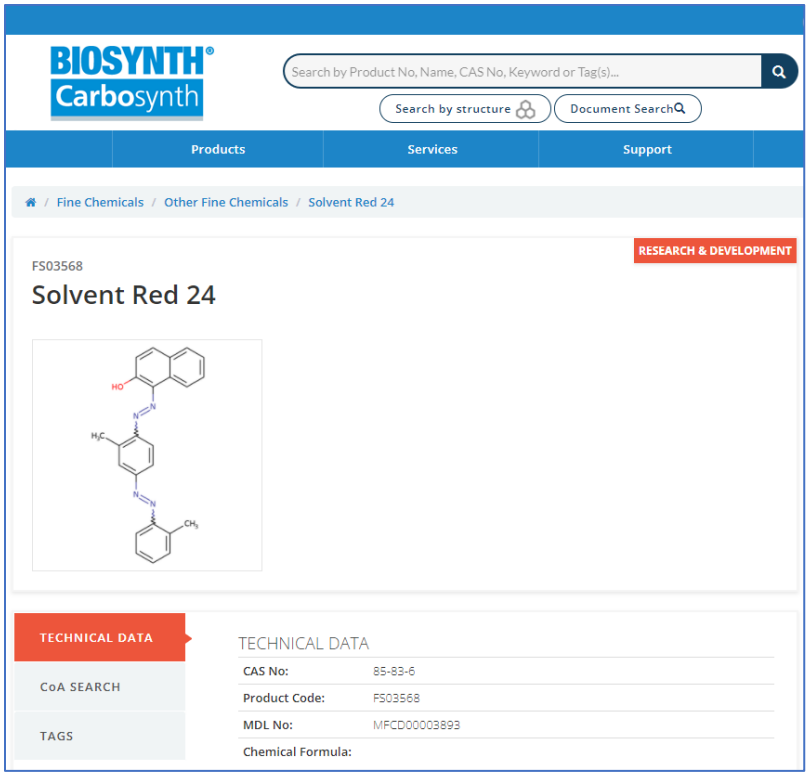


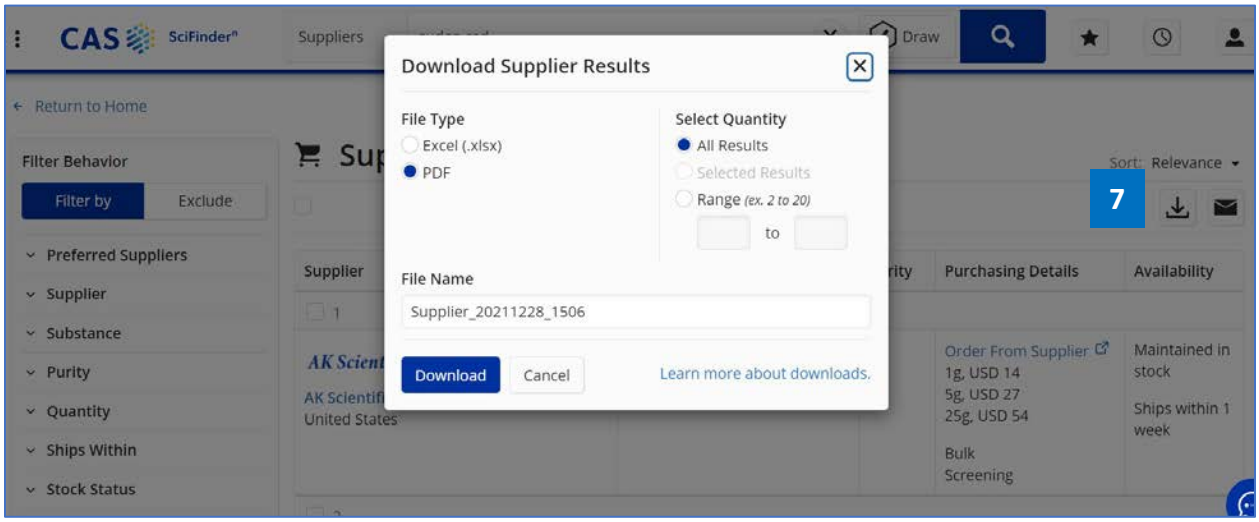
3. 供应商筛选选项，可以根据：优选供应商、供应商名称、产品纯度、产品量级、运送时间、储存状态、是否有直达订购链接、国家等对供应商结果进行筛选。
4. 可以按照供应商名称的字母排列顺序、运送时间或产品纯度对供应商进行重新排序。
5. 点击 order from suppliers，直接访问产品订购页面。
6. 点击 product information，访问该供应商对此产品的描述信息。

点击 order from suppliers 所获界面：



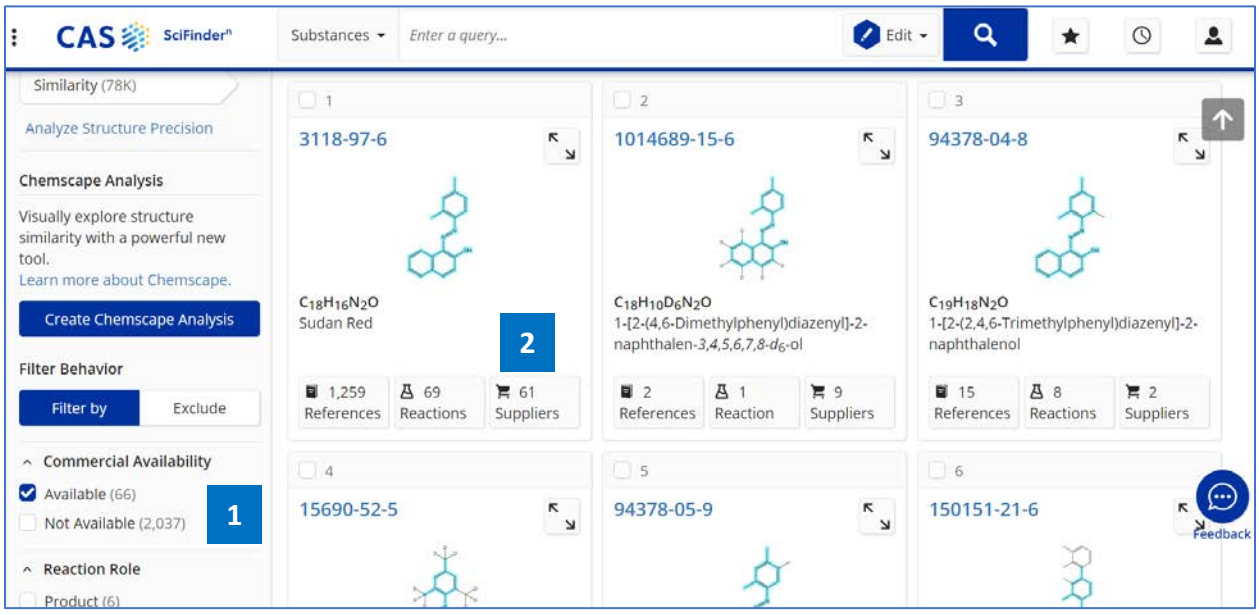
点击 Product Information 所获界面：





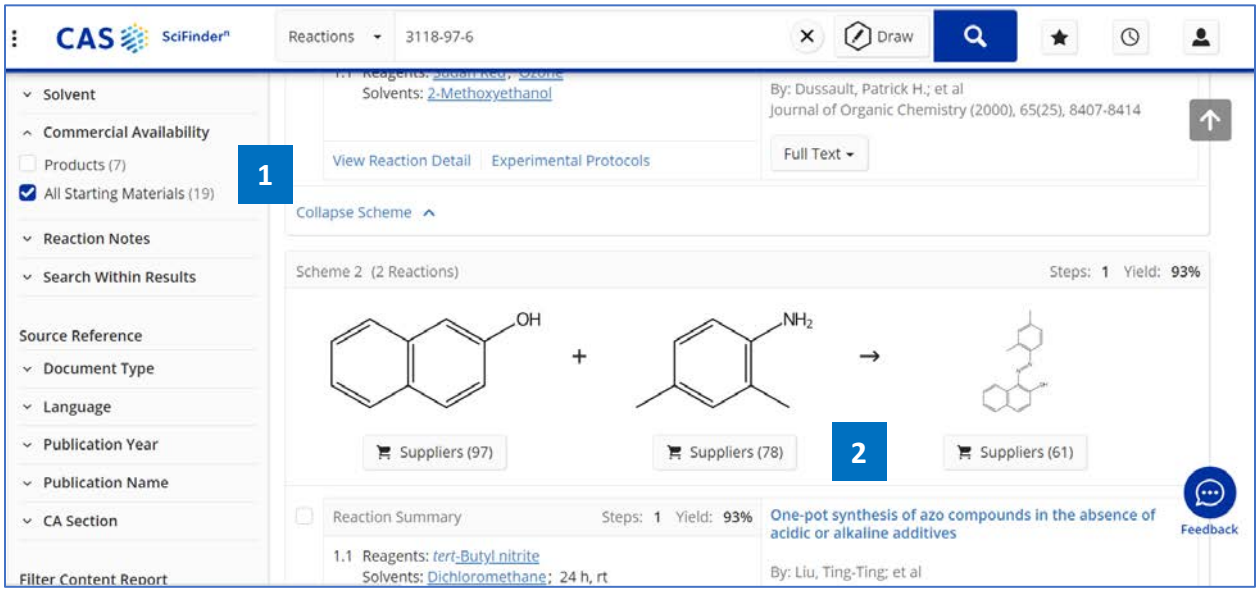
7. 供应商结果集可以导出为 Excel 或者 PDF 格式文件。

方法二、在物质结果集页面，点击相应的 suppliers 获得供应商信息。



1. 在物质结果集页面，筛选有供应商信息的物质。
2. 点击 Suppliers 按钮，查看供应商信息。

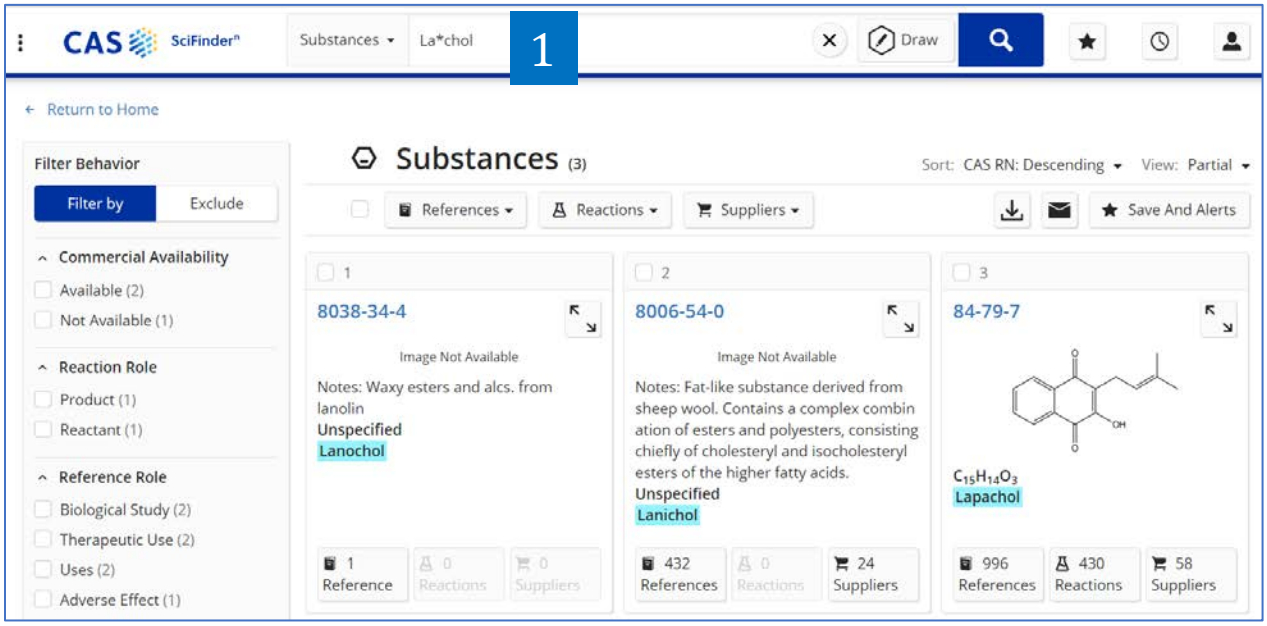
方法三、在反应结果集页面点击相应的 Suppliers 获取供应商信息。



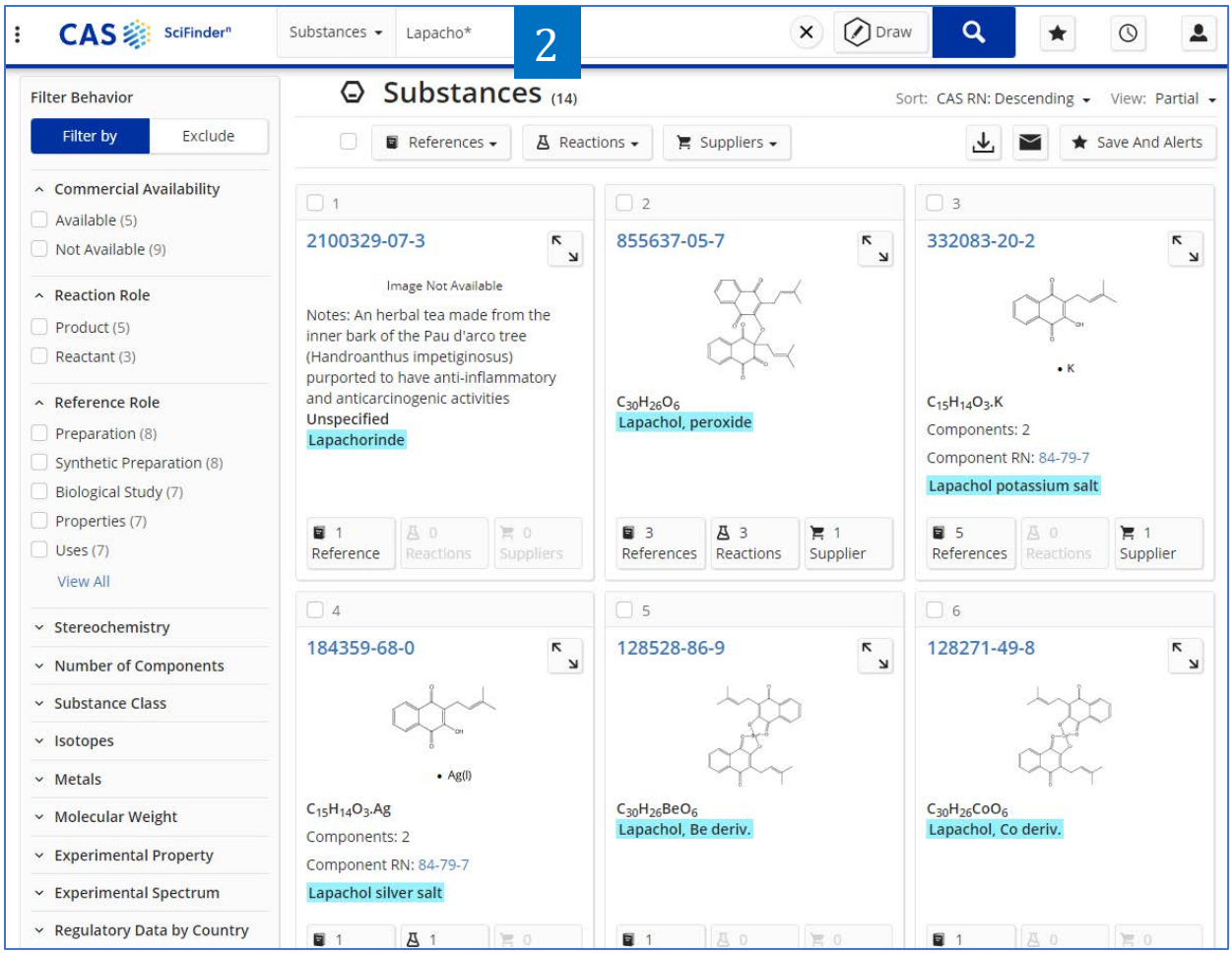
1. 在反应结果集页面，筛选起始物或者产物有供应商信息的反应。
2. 点击 Suppliers 按钮，查看供应商信息。

用物质名检索时可使用通配符 “*”

注：通配符 “*” 代表 0 或多个字符；可用于词中或者词尾。



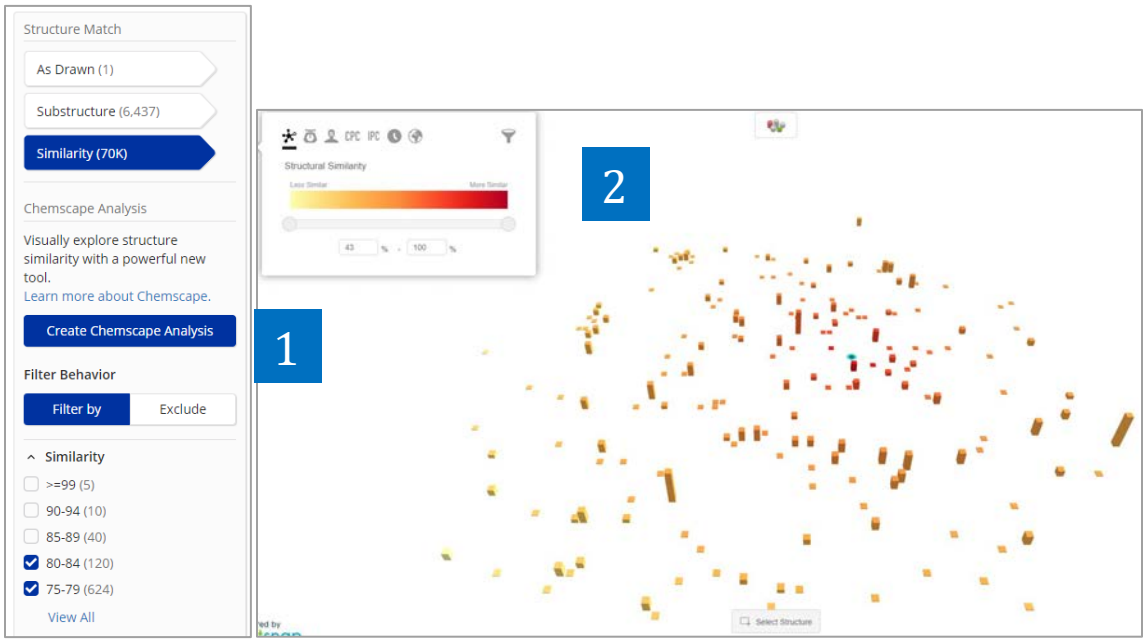
1. 此处输入 La*chol，可以检索到 Lapachol, Lanochol 和 Lanichol 等。



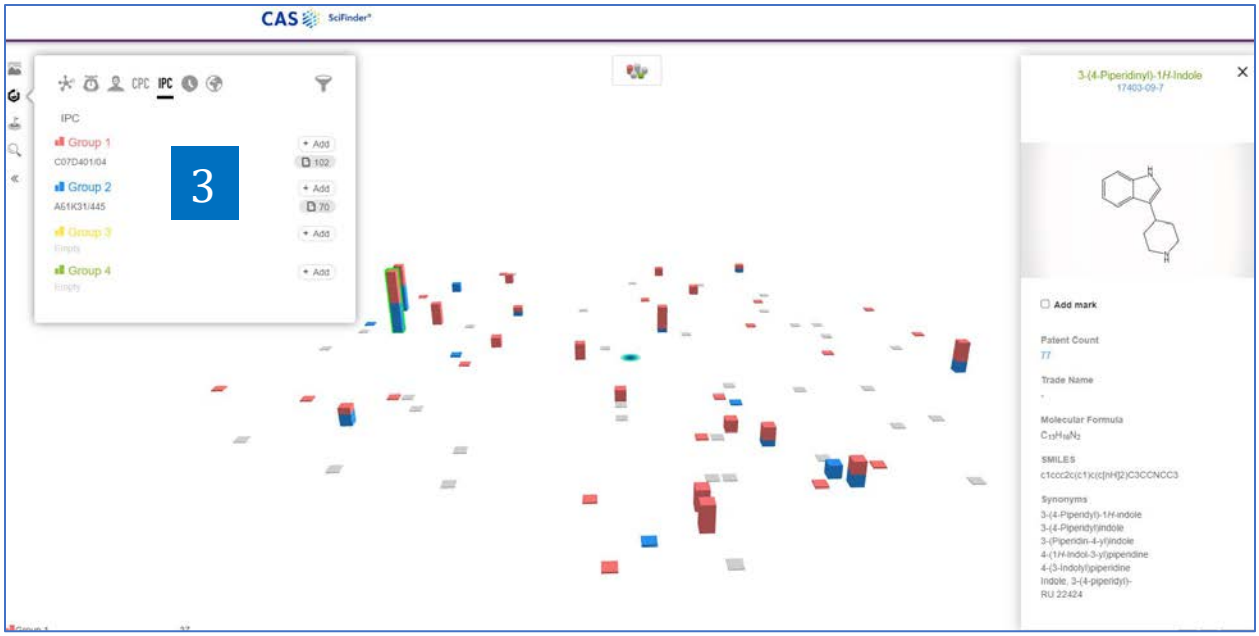
2. 此处输入 Lapacho*，可以检索到 Lapachorinde, lapachol peroxide, lapachol potassium salt 等。

可视化分析结构检索结果（Chemscape 分析）

利用 Chemscape 可视化一组物质结果集的结构相似性和专利全景。结构检索后的物质结果集页面会出现 Create Chemscape Analysis 选项。



1. 点击 Create Chemscape Analysis 进行可视化分析。
2. 视图中物质所处位置与其和被检索物质结构的相似度相关，每个柱子代表一个物质，柱子高度与该物质被披露的专利数量相关。

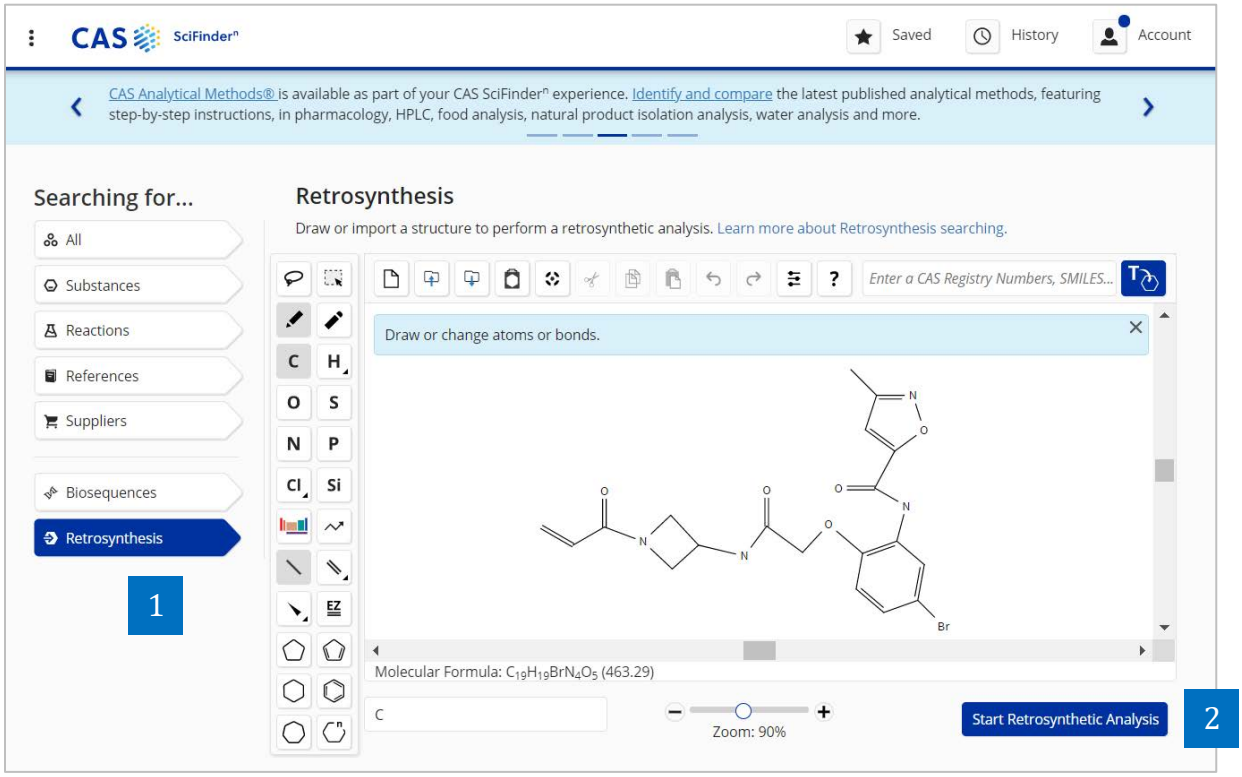


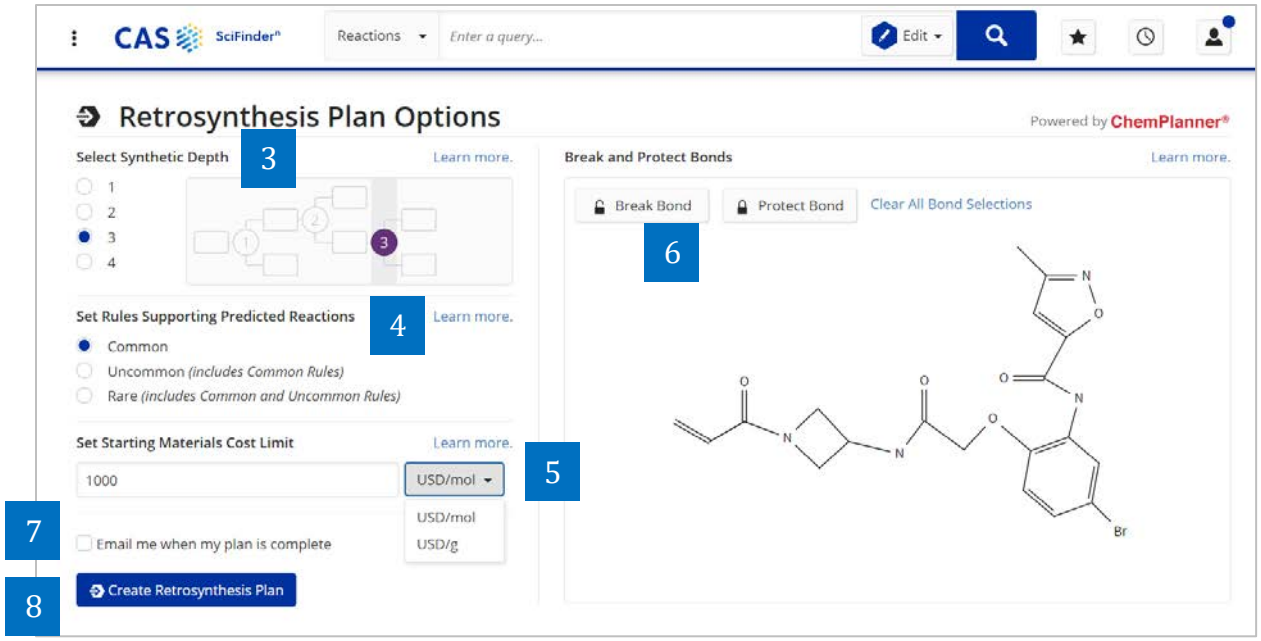
3. 根据申请人、CPC、IPC、公布年和专利受理机构等对物质进行分组。

反应检索

逆合成路线设计工具 (Retrosynthesis)

逆合成路线设计工具可用于未知化合物和已知化合物，设计预测的或者已经报道的逆合成路线。





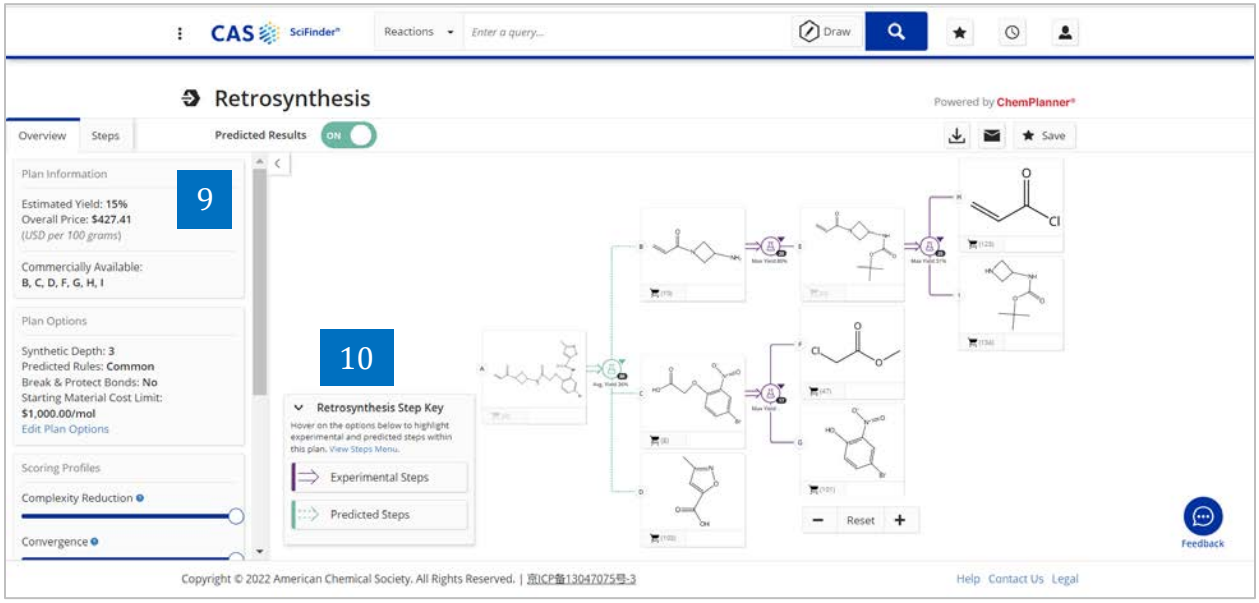
1. 点击 Retrosynthesis，打开结构编辑器。
2. 结构绘制完成后，点击 Start Retrosynthetic Analysis 打开 Retrosynthesis Plan Options 窗口。
3. 合成深度通过为最长路径设置最多四个步骤来限制逆合成计划中允许的合成步骤数。
4. 选择支持预测反应的规则：

   通用规则（Common rules）包括实验室中经常使用的反应类型，有大量的文献实例支持的规则；

   不常见（Uncommon rules）或**稀有（Rare rules）**规则则是由较少实例支持的规则，但有可能揭示更多新颖的合成方法。

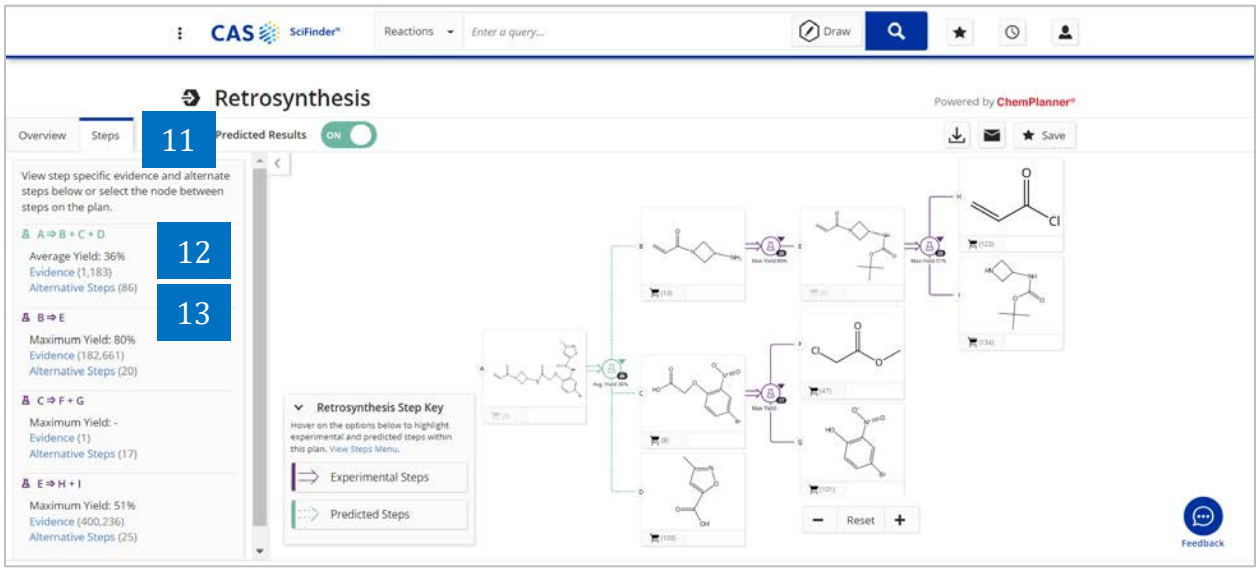
5. 设置起始物成本（单位为：美元/摩尔或美元/克）。
6. 设置断开键 (break bond) 和保护键(protect bond)：断开键的含义为整个路线最后一步合成的键，一个路线只能设置一根断开键；保护键的含义为整个路线都不会发生变化的键，一条路线可以同时设置几根保护键。
7. 化合物的预测逆合成路线可能需要数分钟完成（约 10 分钟左右），可以点击 Email me when my plan is completed。即路线预测完毕后向注册 CAS SciFinder^{n} 账号的邮箱发送通知。

8. 创建路线。



9. 结果呈现：Overview 显示完整逆合成路线，预估产率和成本。

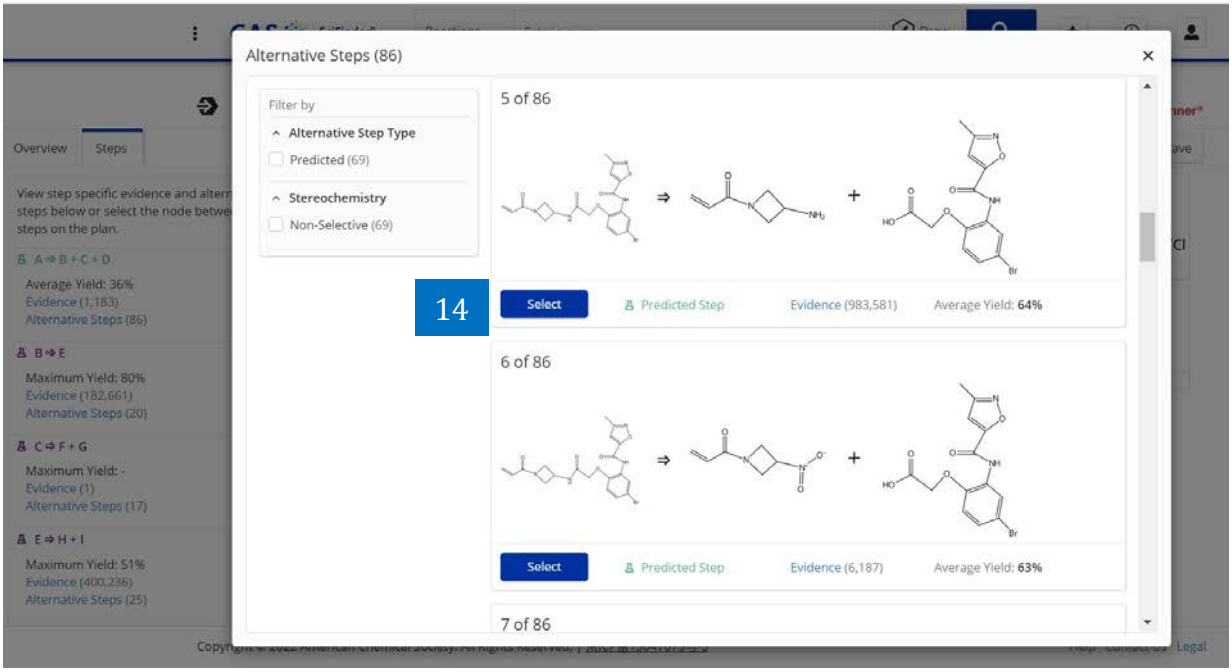
10. 紫色代表来源于已经报道的反应；绿色代表预测的反应路线。



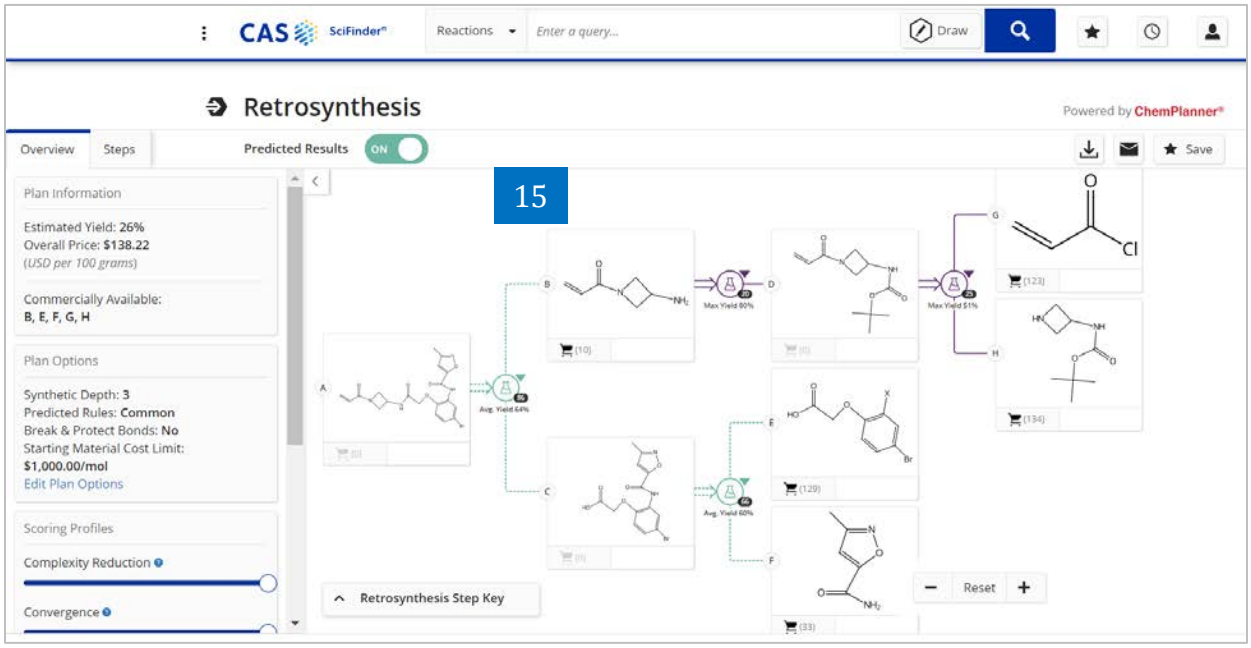
11. 点击 Steps，显示合成路线中具体步骤信息，产率及可替代步骤。

12. Evidence 表示支持此反应步骤的反应和文献信息，点击即获得反应信息结果集。

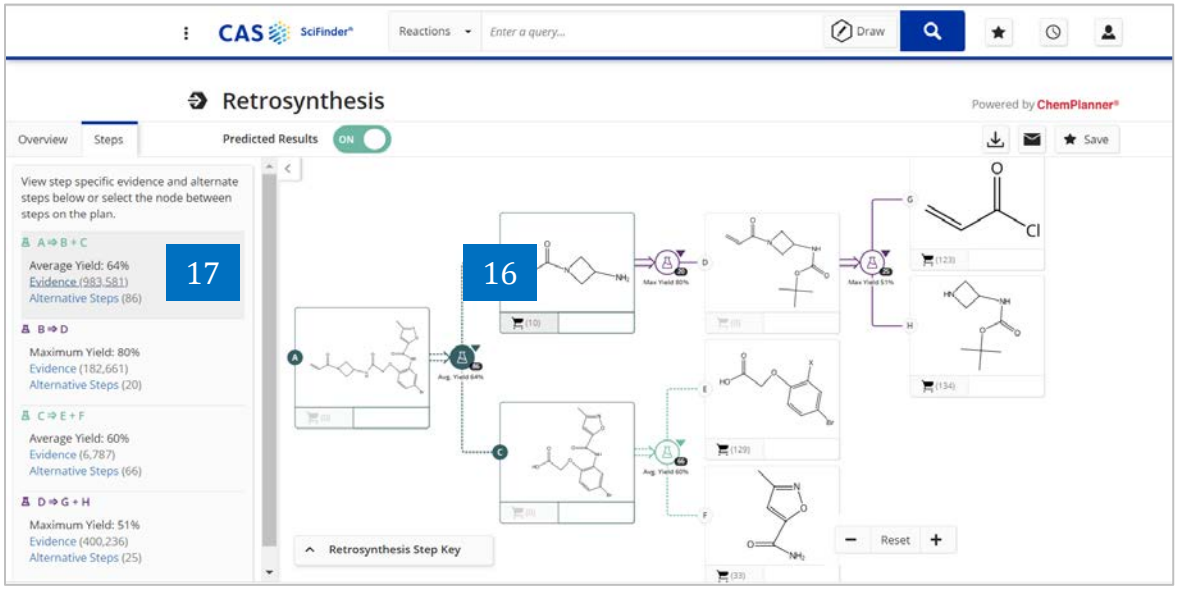
13. Alternative Steps 可替代反应步骤。



14. 选择感兴趣的反应步骤，整个逆合成路线发生改变。

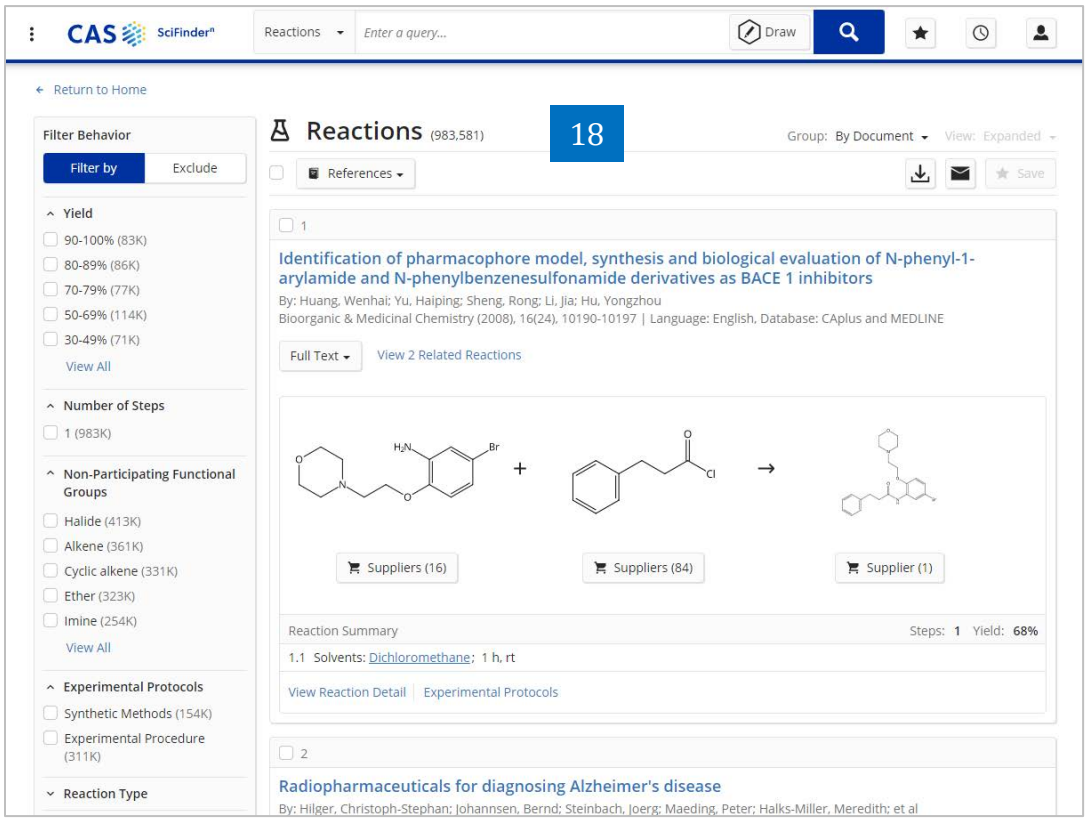


15. 整个实验路线发生改变，其中绿色路线为预测路线。

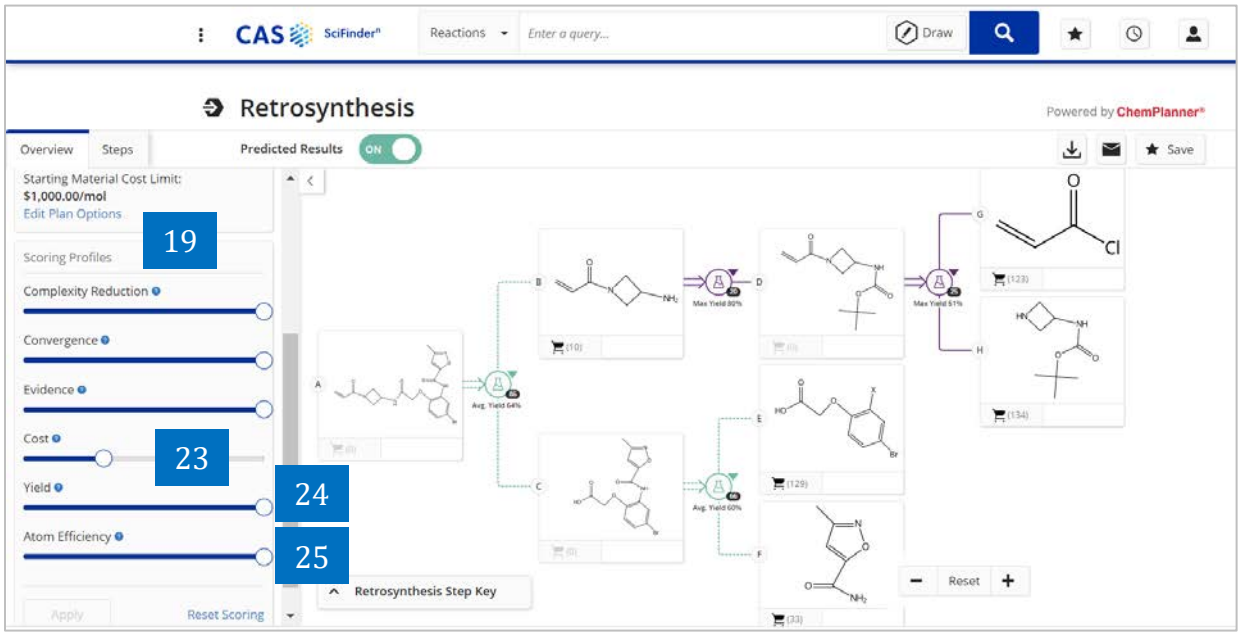


16. 当鼠标移到某一步骤时，右侧路线图中该路线的底物 /产物标识转为高亮。

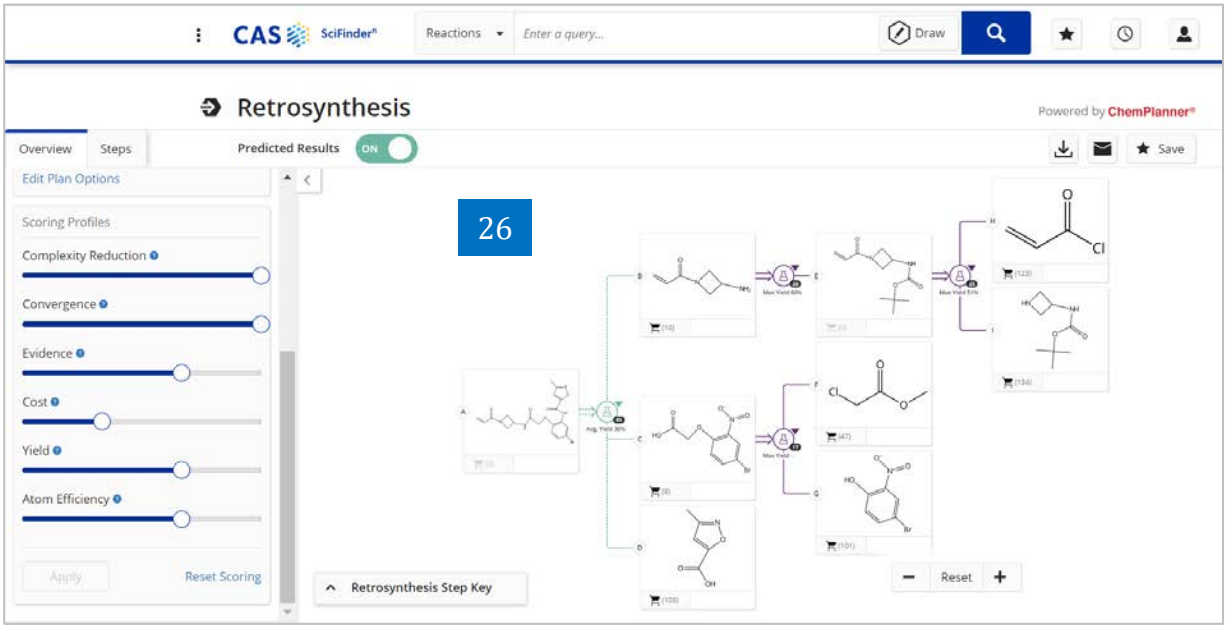
17. 点击 Evidence，查看支持此反应步骤的反应和文献信息。



18. 支持该步骤的反应结果集。

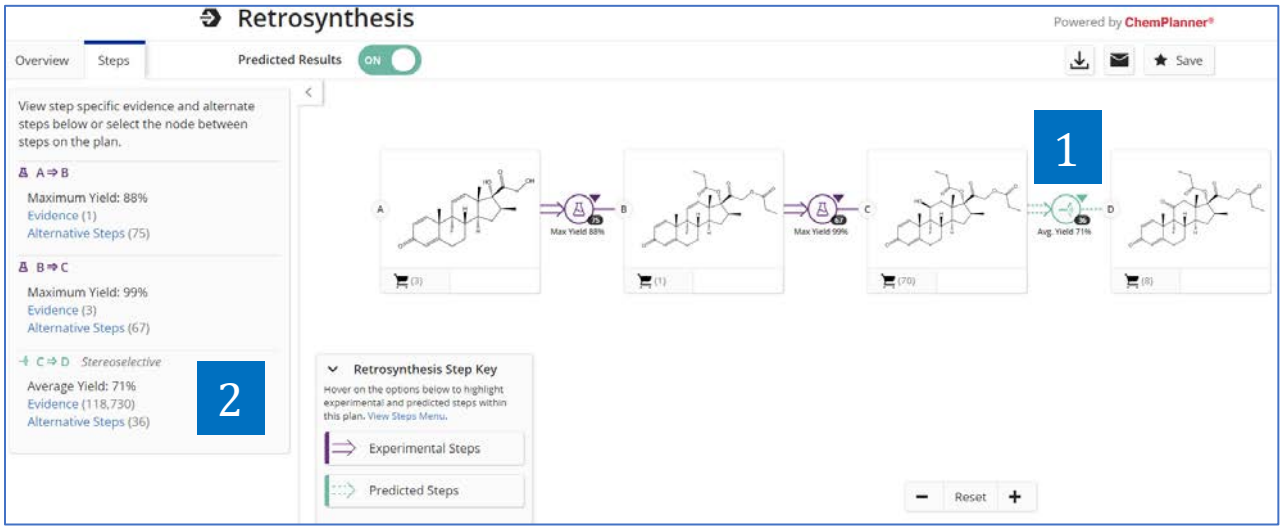


19. Scoring Profile 评分配置，可以设置为 Off(极左)、Low、Medium 或 High(极右); 每个评分配置的默认设置是 “Medium” 。将滑块一直移动到左边会将该设置的评分 “关闭” 。
20. 降低复杂性：降低步骤起始物相对于该步产物的复杂性。
21. 汇聚：调高 Convergence 会提高路线的汇聚（减少反应路线的线性长度）。
22. 依据：根据支持特定反应类型的证据例子的数量多少来排列计划步骤/备选方案。
23. 成本：根据起始物的成本价格（由低到高）来排列计划步骤/备选方案。
24. 产率：增加路线计划中每一步的产率，这有助于提高目标分子的产率。
25. 原子经济性：减少未被包含在产物中的反应物的原子数。提高原子经济性，就是提高反应物中的原子转化为产物中原子的比例。

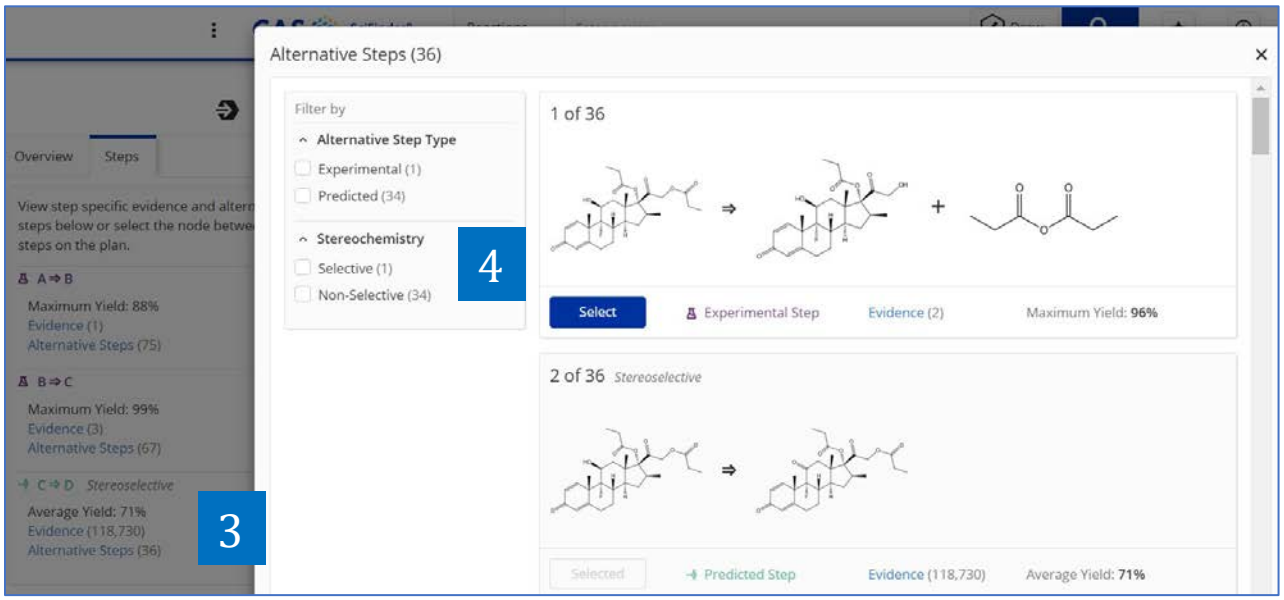


26. 更改评分配置之后的路线。

逆合成路线之立体选择性反应

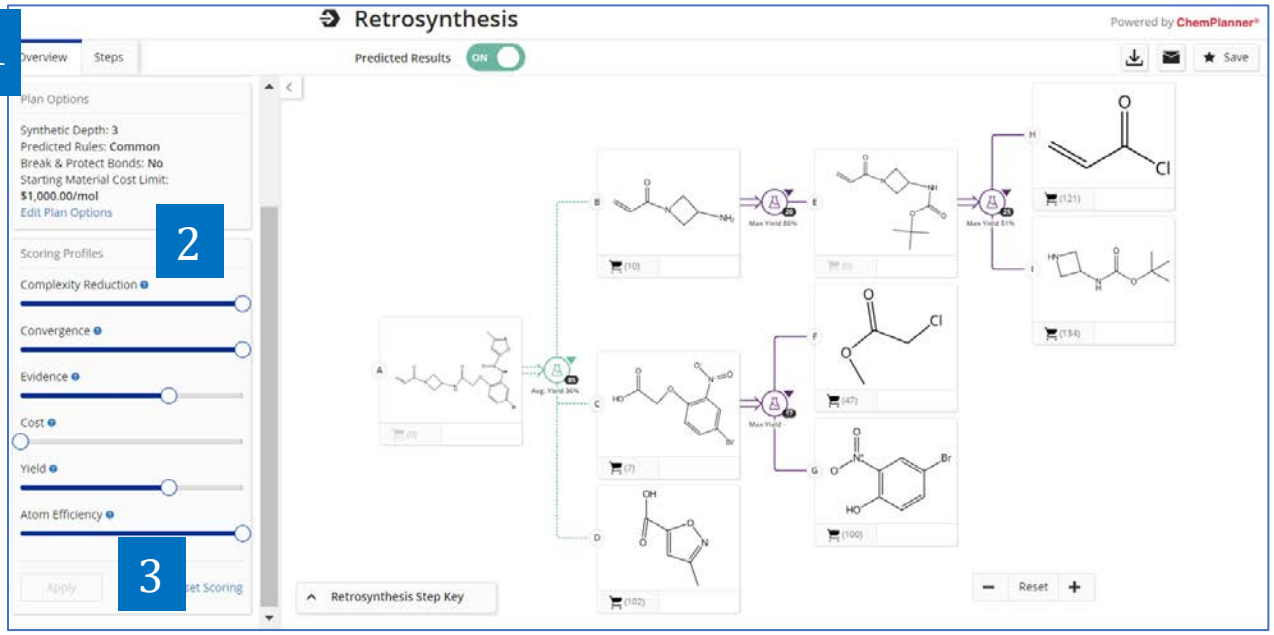


1. 此符号表示该步反应为立体选择性反应。
2. 在左侧对应的 Steps 也会以 Stereoselective 标记立体选择性反应。



3. 点击 Alternative Steps 查看替代步骤。
4. 在替代步骤结果集页面，可通过 Stereochemistry 选择立体选择性反应。

逆合成路线之自定义分值 (Scoring) 功能



1. 在逆合成路线结果中，点击左侧 Overview。
2. 一共有 5 项，每项有 4 个设置（off, low, medium, high）。用鼠标拖动滚动条，即可调整设置级别。

   Complexity Reduction：降低每步反应物相对于产物的复杂度；

   Convergence：调整逆合成路收敛性；

   Evidence：每步反应的支持文献数量；

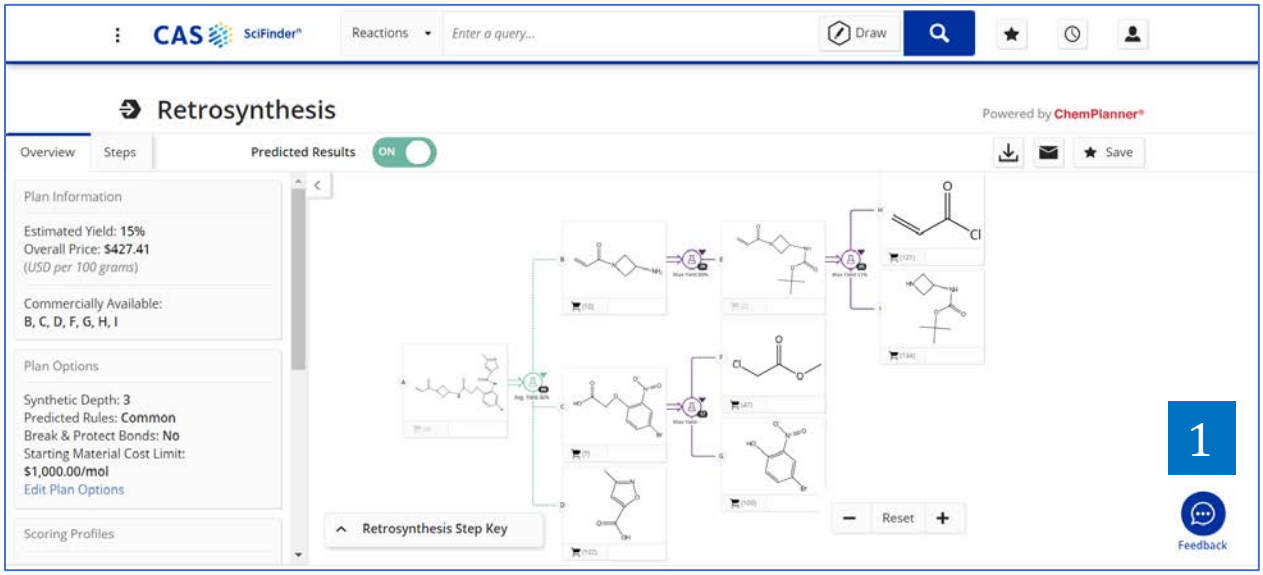
   Yield：每一步反应的产率，对目标分子的产率有影响；

   Atom Efficiency：反应物的原子转化经济性。

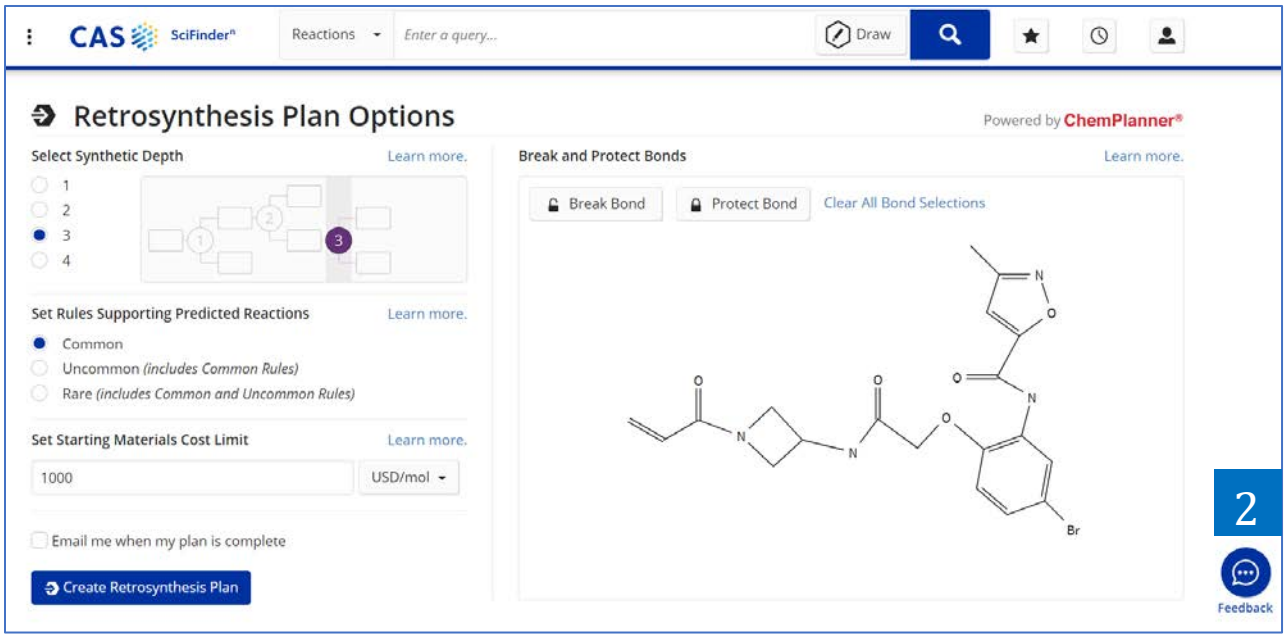
   以上五项选择的更详细信息，可在 CAS SciFinder^{n} help 中获得：

   https://scifinder-n.cas.org/help/#t=Working_with_Search_Results%2FRetrosynthesis%2FRetrosynthesis_Page_-_Options_Tab.htm&rhsearch=scoring%20profile&rhhlterm=scoring%20profile&rhsyns=%20
3. 点击 Apply，完成设置。

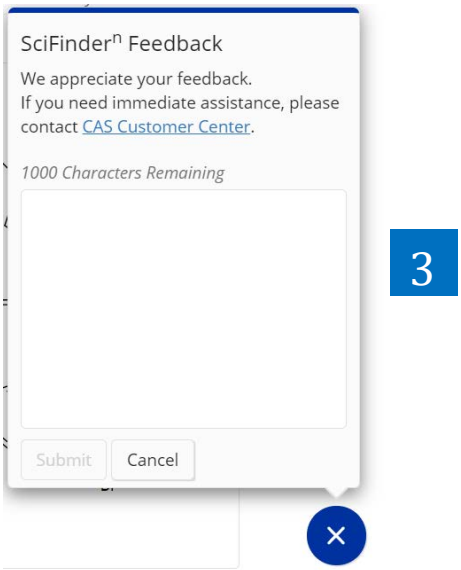
利用 Retrosynthesis 的产品反馈功能



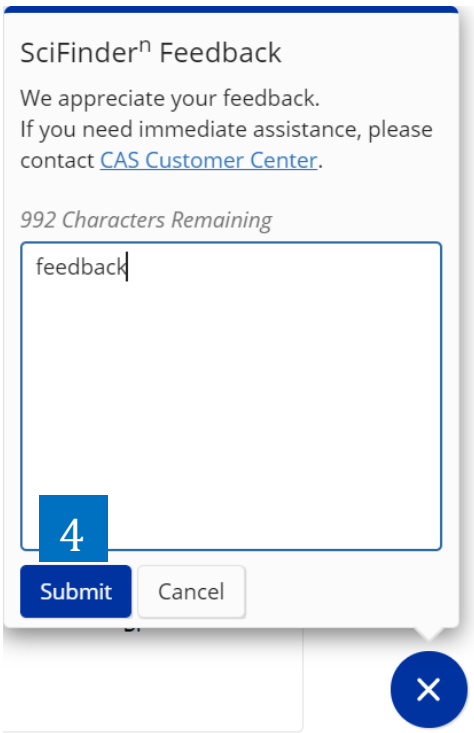
1. 在 Retrosynthesis 的结果页面，点击 Feedback 图标，进行使用反馈。



2. 也可以在 Retrosynthesis 的 Plan option 页面点击 Feedback 图标，进行使用反馈。

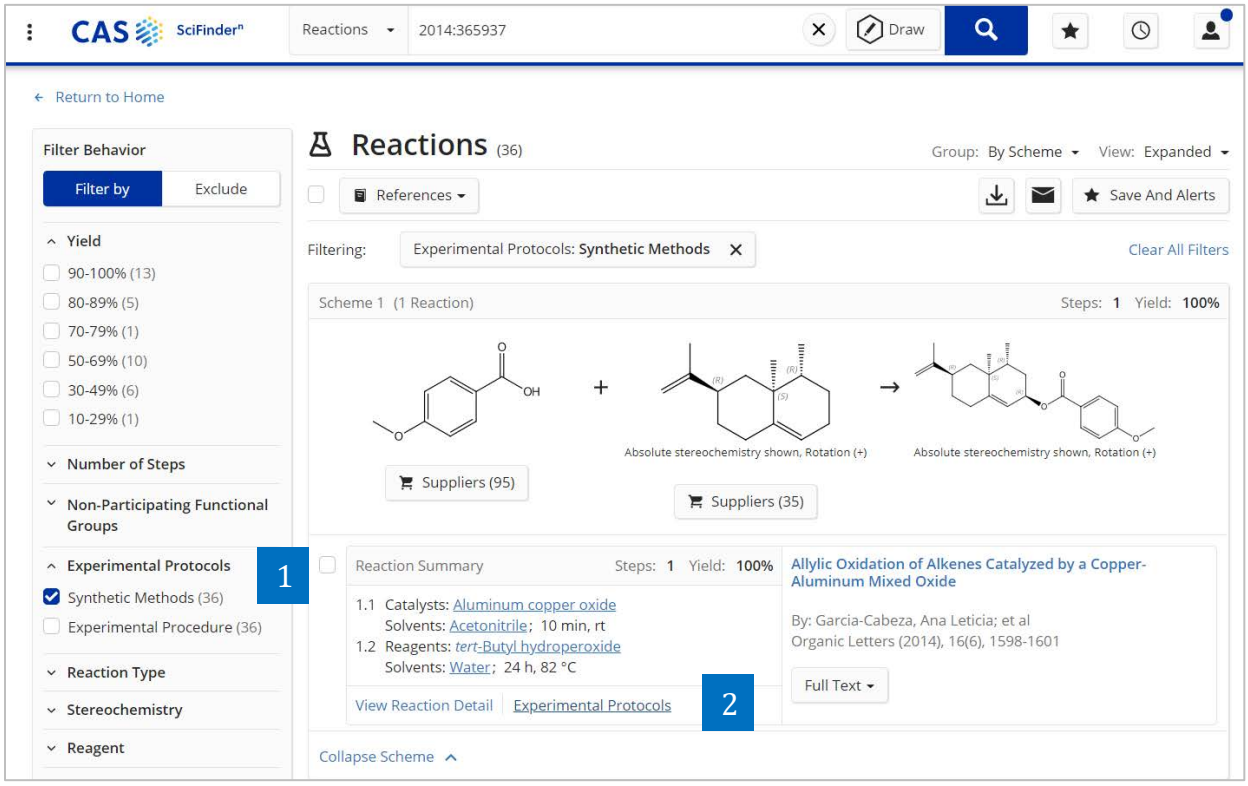


3. 点击 Feedback 后，弹出此窗口，请在此输入反馈内容。

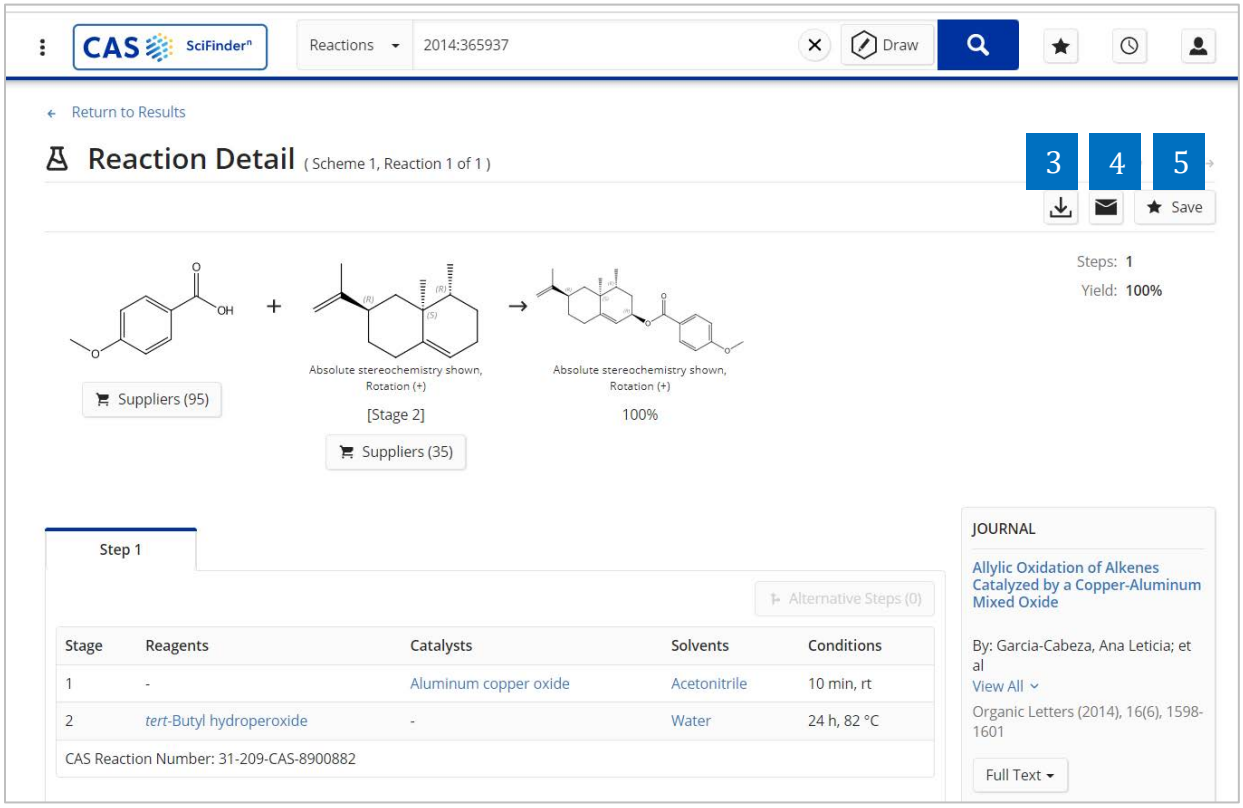


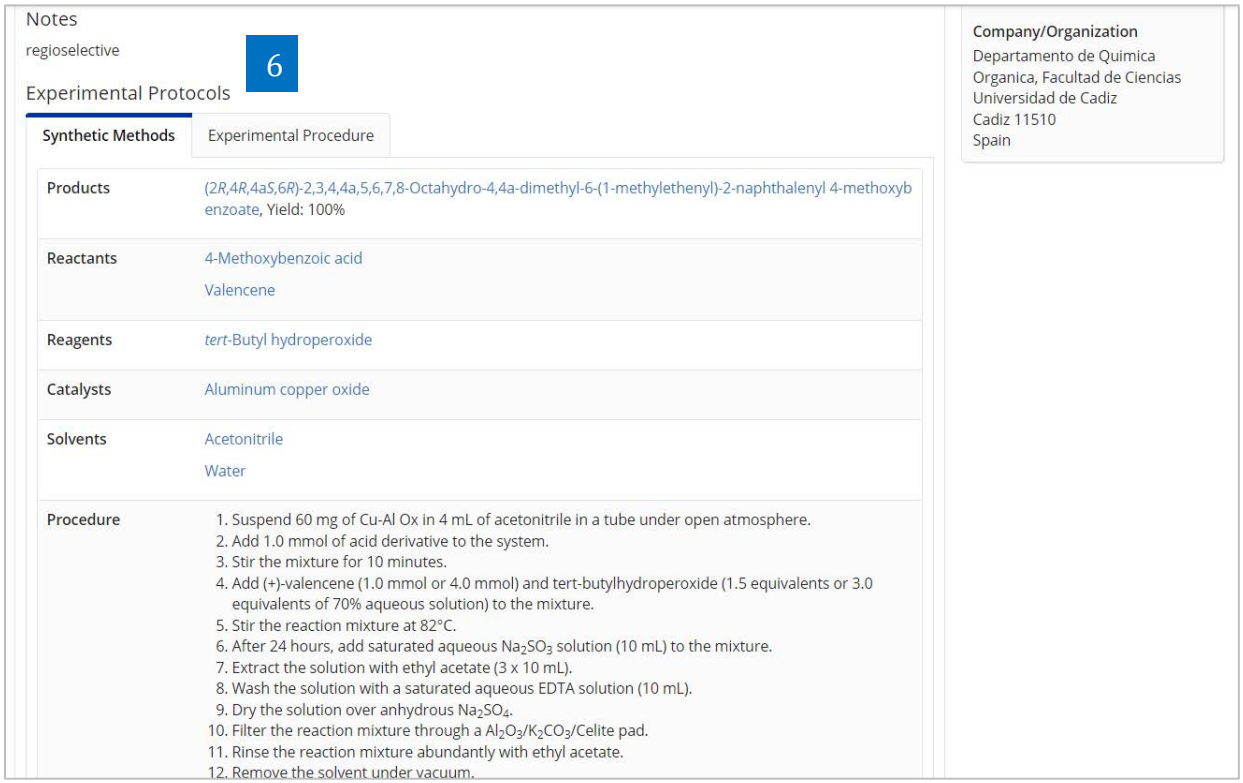
4. 点击 Submit，提交反馈信息。

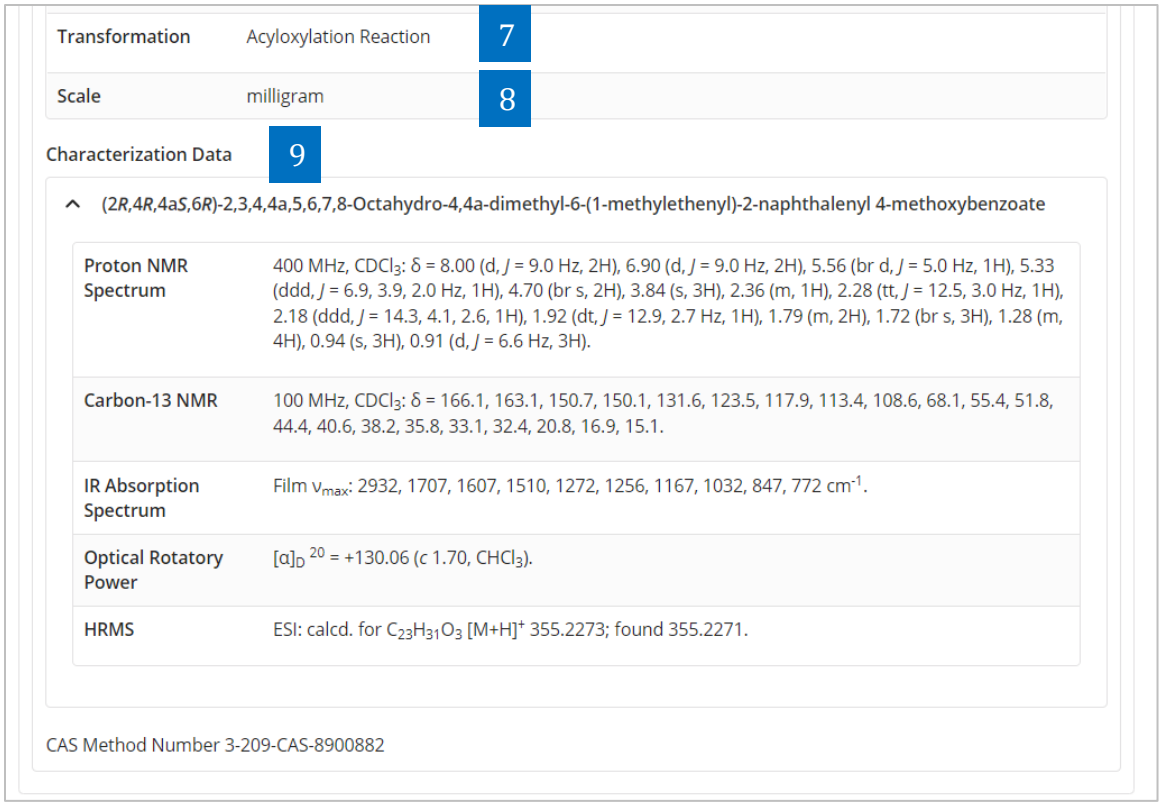
合成实验详情的获取



1. 在反应结果集页面左侧选择 Experimental Protocols 项下的 Synthetic Methods。
2. 点击 Experimental Protocols 获取 CAS 科学家增值标引的实验详情。

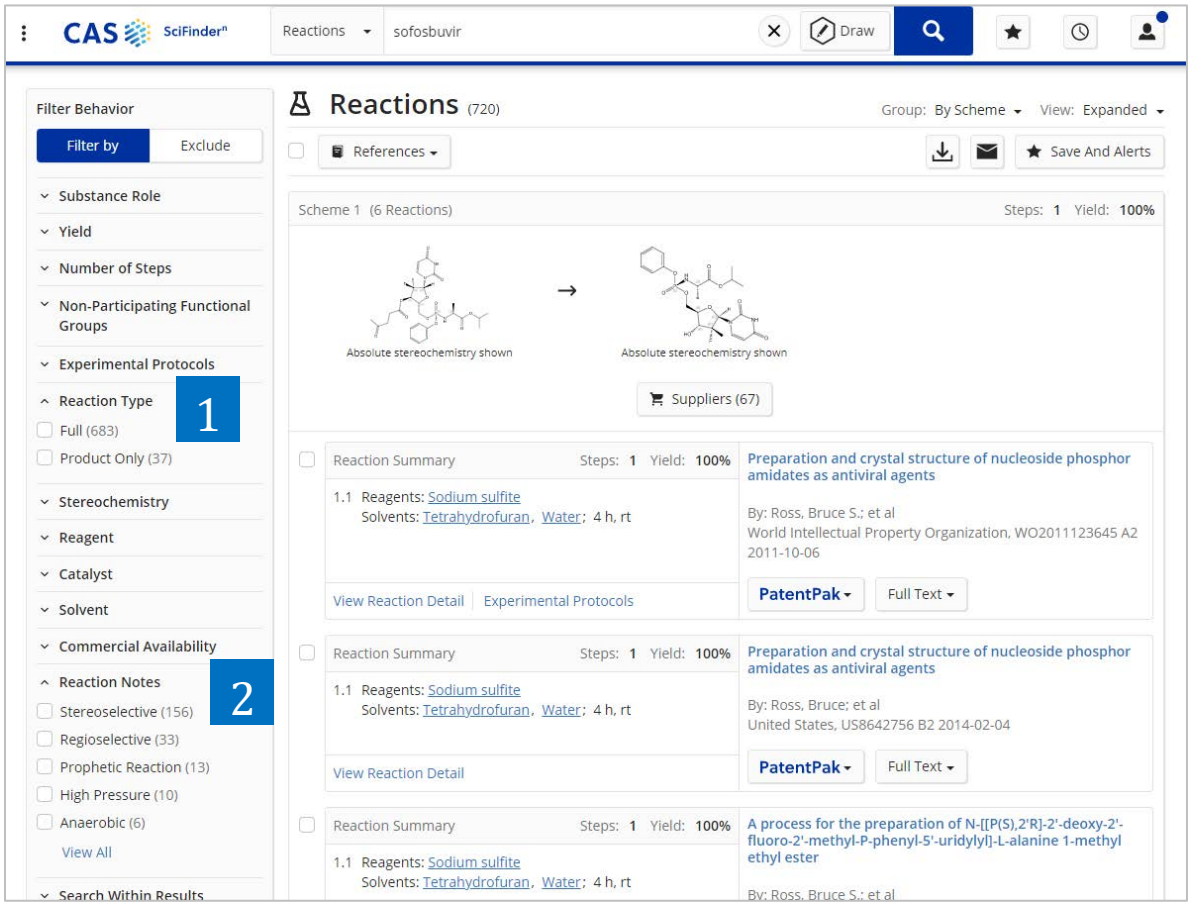

CAS SciFinder^{n}
Reactions
2014:365937
Draw
Return to Results
Reaction Detail (Scheme 1, Reaction 1 of 1)
3
4
5
Save
Steps: 1
Yield: 100%
Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)
Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)
Suppliers (95)
[Stage 2]
Suppliers (35)
100%
Step 1
Alternative Steps (0)
Stage
Reagents
Catalysts
Solvents
Conditions
1
-
Aluminum copper oxide
Acetonitrile
10 min, rt
2
tert-Butyl hydroperoxide
-
Water
24 h, 82 °C
CAS Reaction Number: 31-209-CAS-8900882
JOURNAL
Allylic Oxidation of Alkenes Catalyzed by a Copper-Aluminum Mixed Oxide
By: Garcia-Cabeza, Ana Leticia; et al
View All
Organic Letters (2014), 16(6), 1598-1601
Full Text


Notes
regioselective
6
Experimental Protocols
Synthetic Methods
Experimental Procedure
Products
(2R,4R,4aS,6R)-2,3,4,4a,5,6,7,8-Octahydro-4,4a-dimethyl-6-(1-methylethenyl)-2-naphthalenyl 4-methoxybenzoate, Yield: 100%
Reactants
4-Methoxybenzoic acid
Valencene
Reagents
tert-Butyl hydroperoxide
Catalysts
Aluminum copper oxide
Solvents
Acetonitrile
Water
Procedure
1. Suspend 60 mg of Cu-Al Ox in 4 mL of acetonitrile in a tube under open atmosphere.
2. Add 1.0 mmol of acid derivative to the system.
3. Stir the mixture for 10 minutes.
4. Add (+)-valencene (1.0 mmol or 4.0 mmol) and tert-butylhydroperoxide (1.5 equivalents or 3.0 equivalents of 70% aqueous solution) to the mixture.
5. Stir the reaction mixture at 82°C.
6. After 24 hours, add saturated aqueous Na_2SO_3 solution (10 mL) to the mixture.
7. Extract the solution with ethyl acetate (3 x 10 mL).
8. Wash the solution with a saturated aqueous EDTA solution (10 mL).
9. Dry the solution over anhydrous Na_2SO_4.
10. Filter the reaction mixture through a Al_2O_3/K_2CO_3/Celite pad.
11. Rinse the reaction mixture abundantly with ethyl acetate.
12. Remove the solvent under vacuum.
Company/Organization
Departamento de Quimica Organica, Facultad de Ciencias
Universidad de Cadiz
Cadiz 11510
Spain

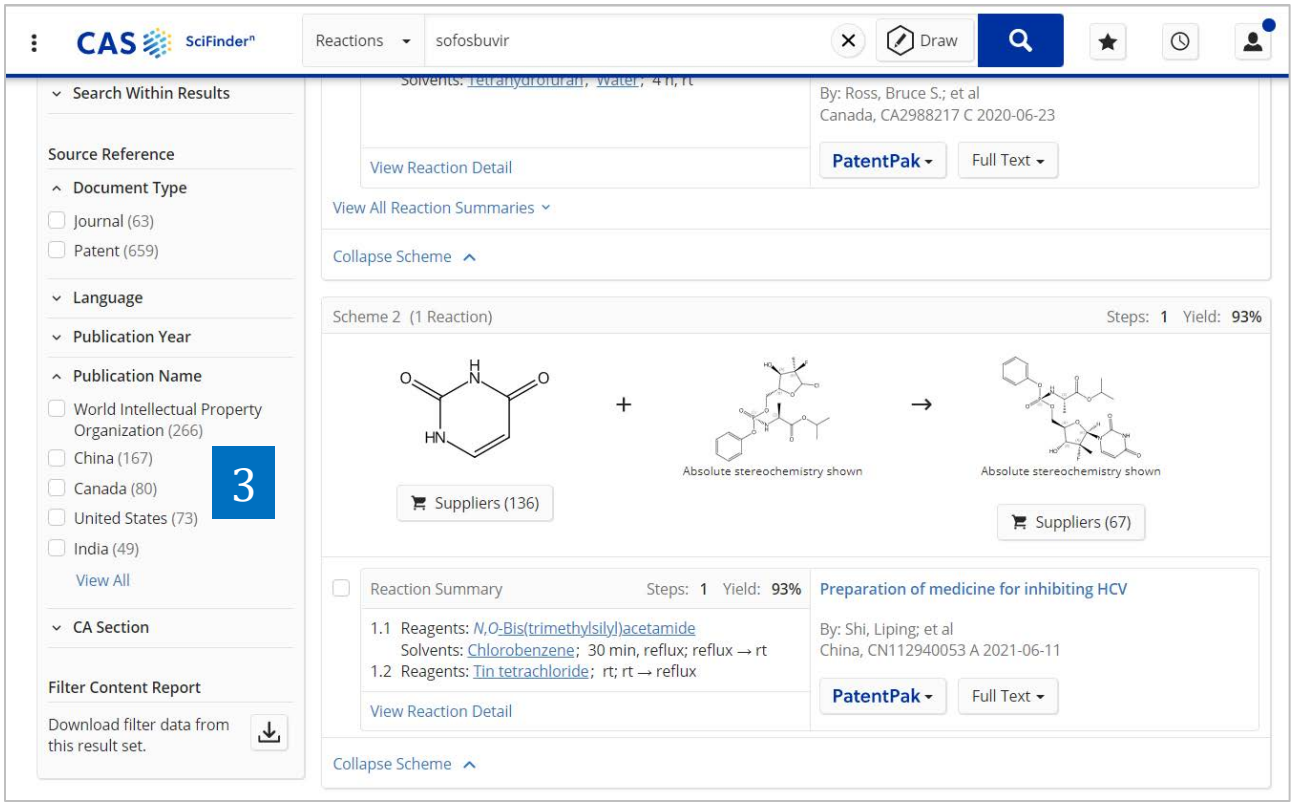


3. 下载、分享或保存实验详情
4. 报道反应的文献
5. 实验中涉及的所有物质及其在反应中的角色
6. 实验中涉及的所有实验步骤
7. 反应转化类型
8. 反应量级
9. 产物的谱图表征信息及属性特征

获取特定反应类型及其文献来源

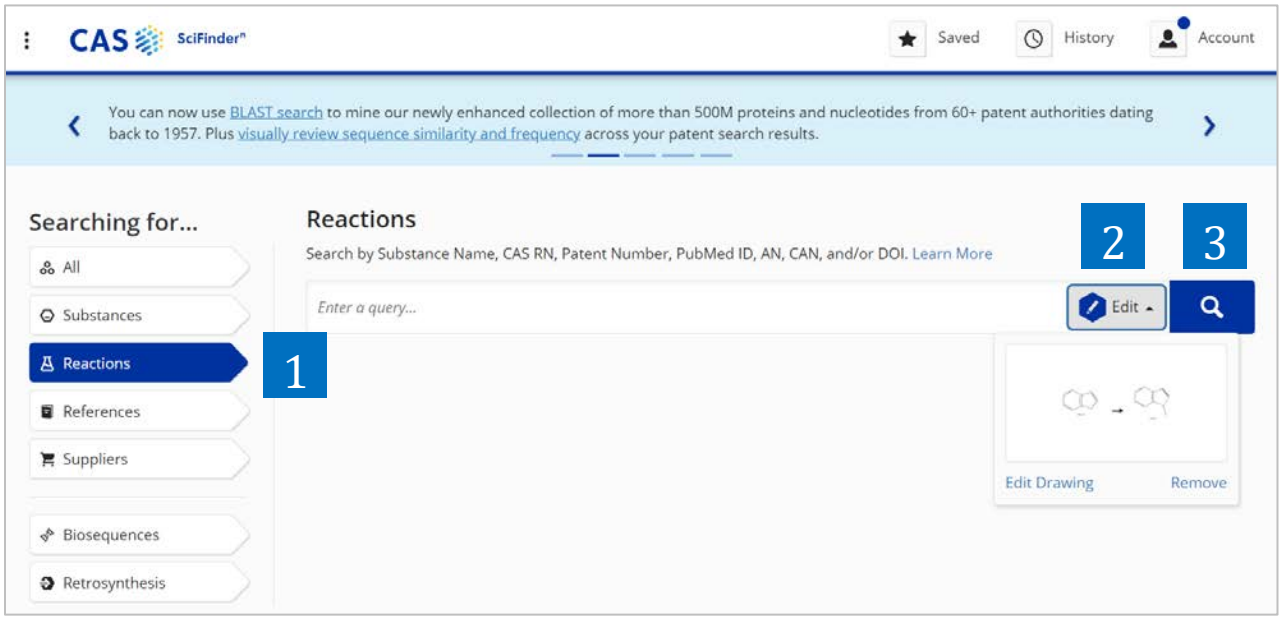


1. 在反应结果集页面，通过左侧 Reaction Type，查看反应类型为完整反应或仅有产物的反应。
2. 在反应结果集页面，通过左侧 Reaction Notes，浏览或获取反应涉及的安全信息等。

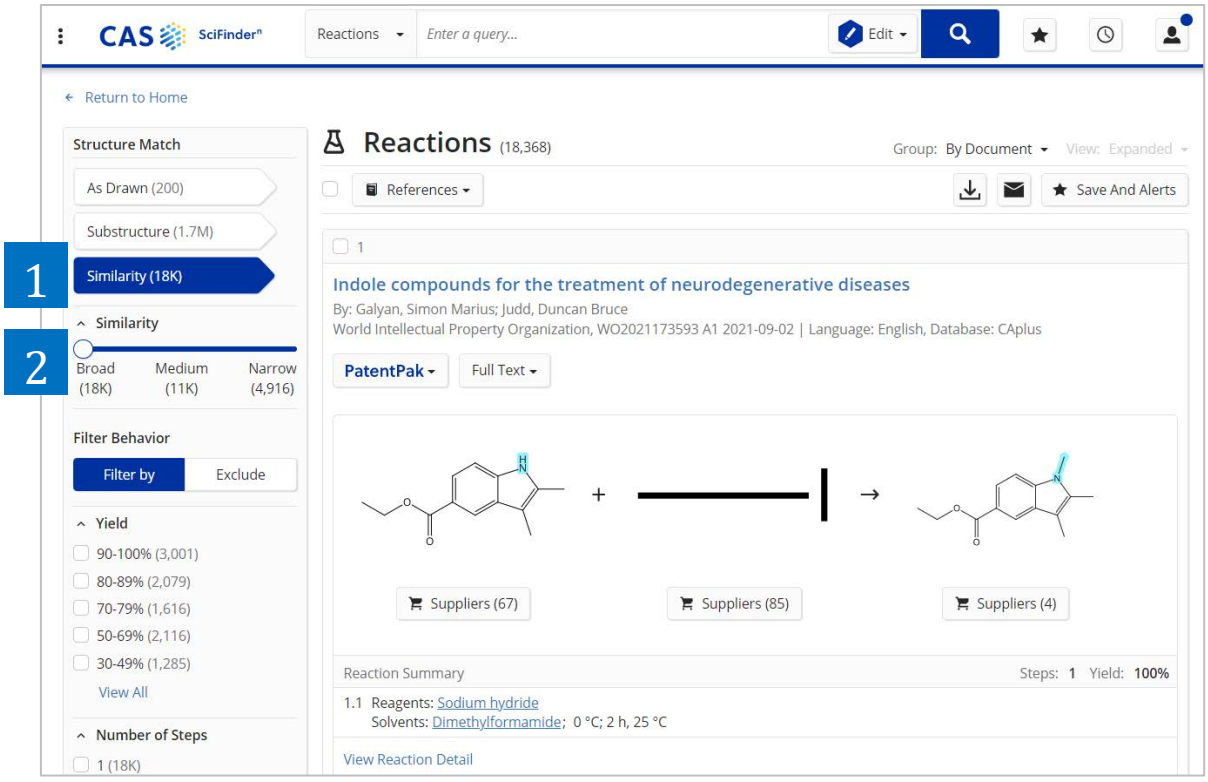


3. 在反应结果集页面，通过左侧的 Publication Name，可以选择自己感兴趣的反应文献来源。

相似反应检索

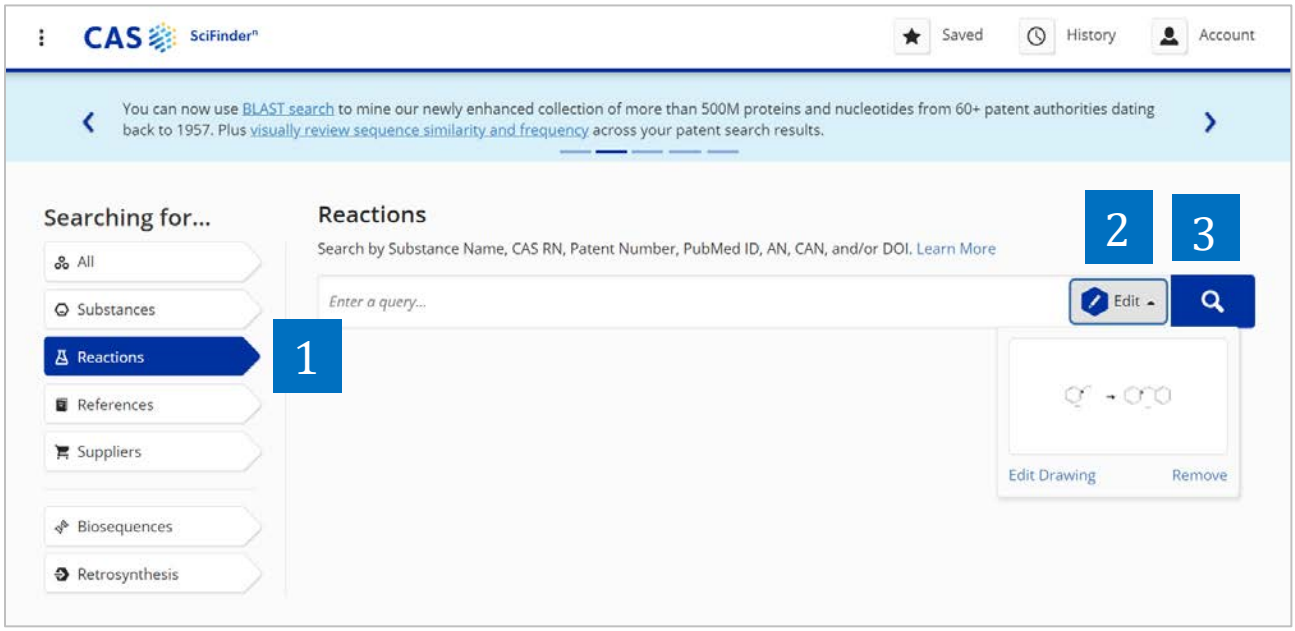


1. 选择 Reactions，进行反应检索。
2. 点击结构编辑器，绘制反应原料和产物。
3. 点击开始反应检索。

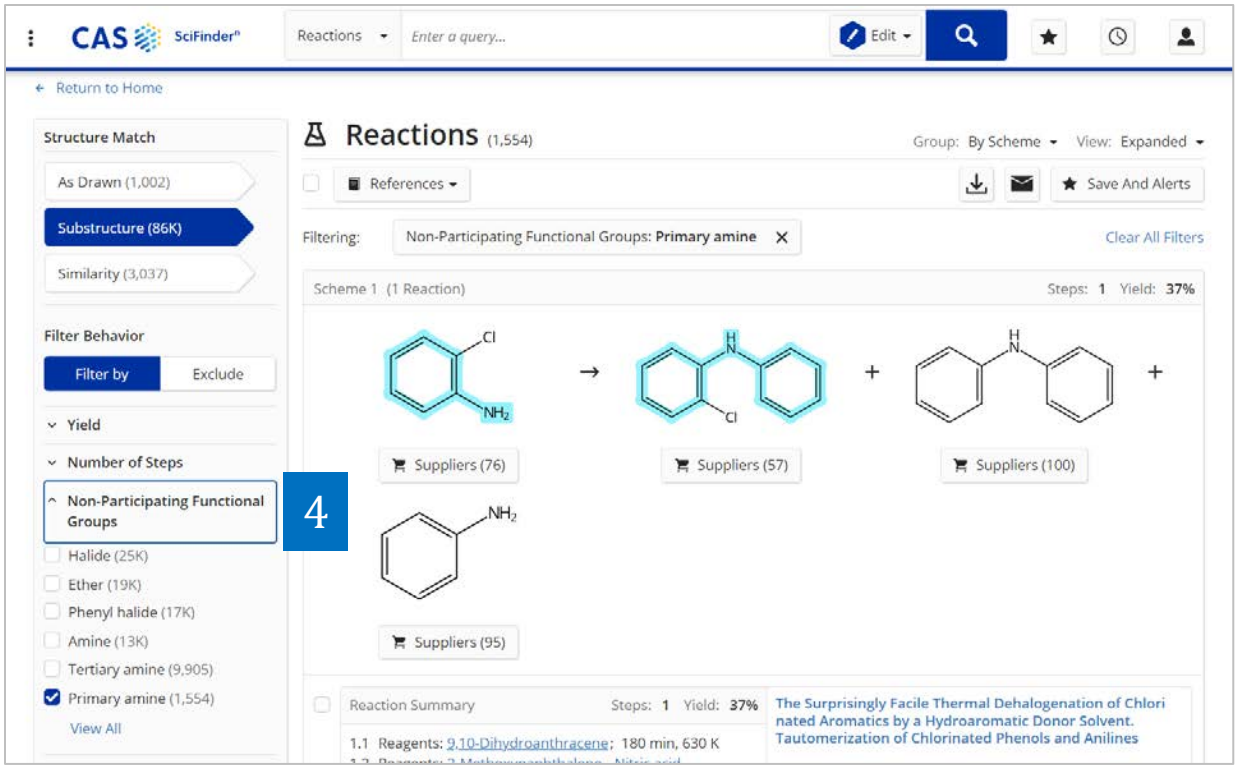


4. 根据 Structure Match，选择 Similarity 的反应结果。
5. 通过 Similarity 相似度，拉动显示条，自由选择查看相似度 Broad, Medium 或 Narrow 的结果。

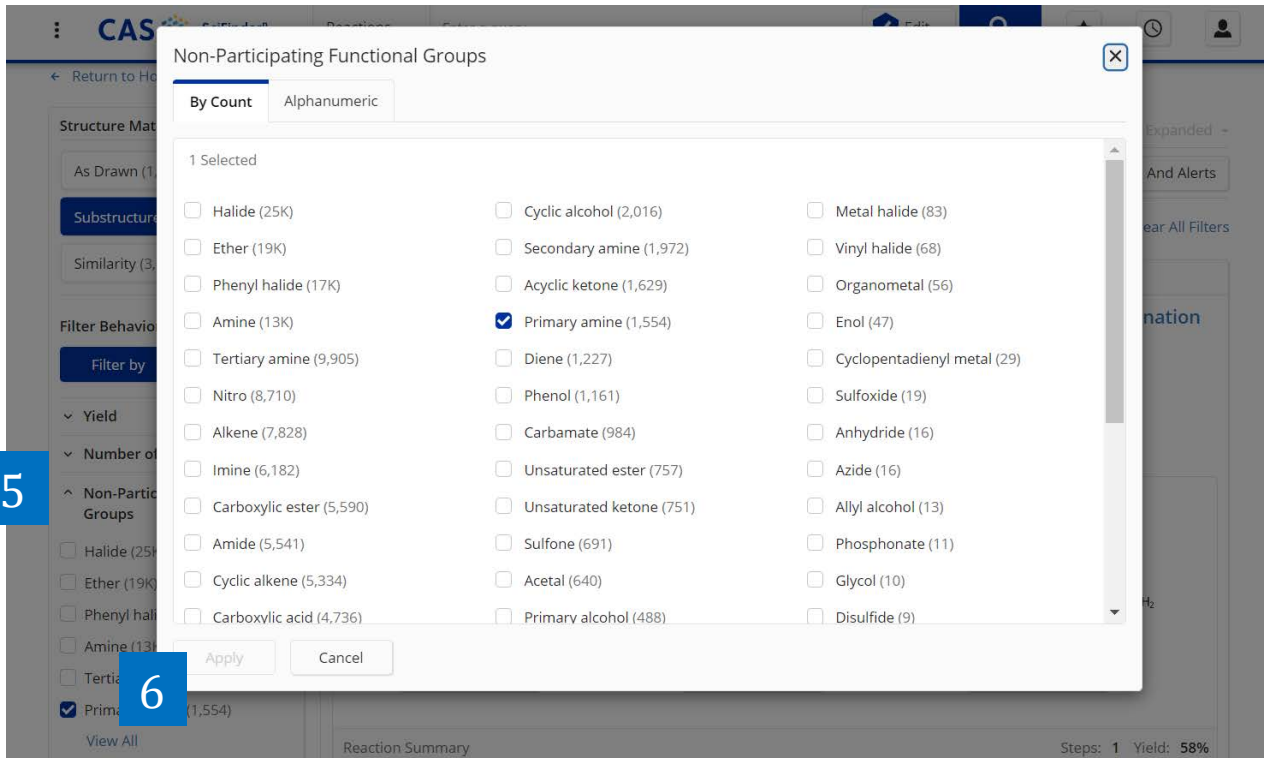
筛选不参与反应的官能团



1. 点击 Reactions 进行反应检索。
2. 点击结构编辑器输入反应式。
3. 开始检索。

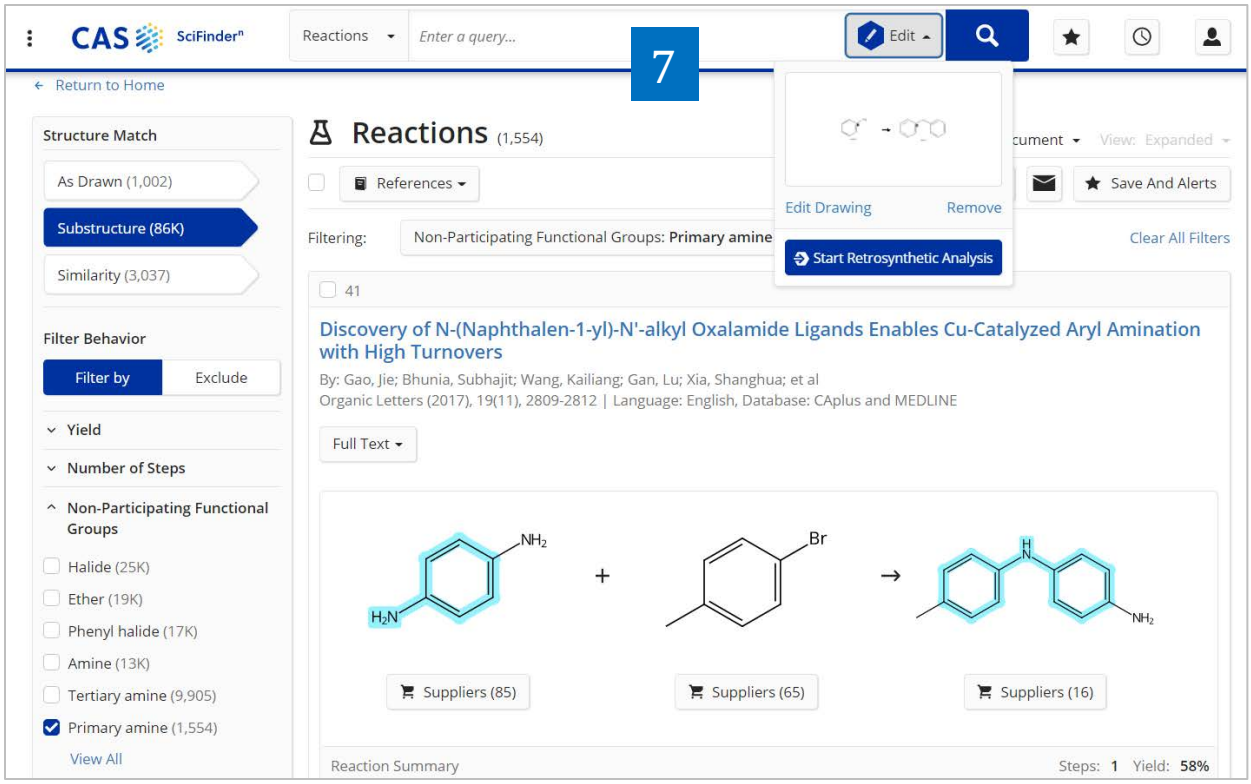


4. 反应结果集页面左侧 Non-Participating Functional Groups 筛选项下列出了不参与反应的官能团（按照反应结果数量排序），如果要查看所有不参与反应的官能团，则可点击 View All 获得完整的官能团列表。



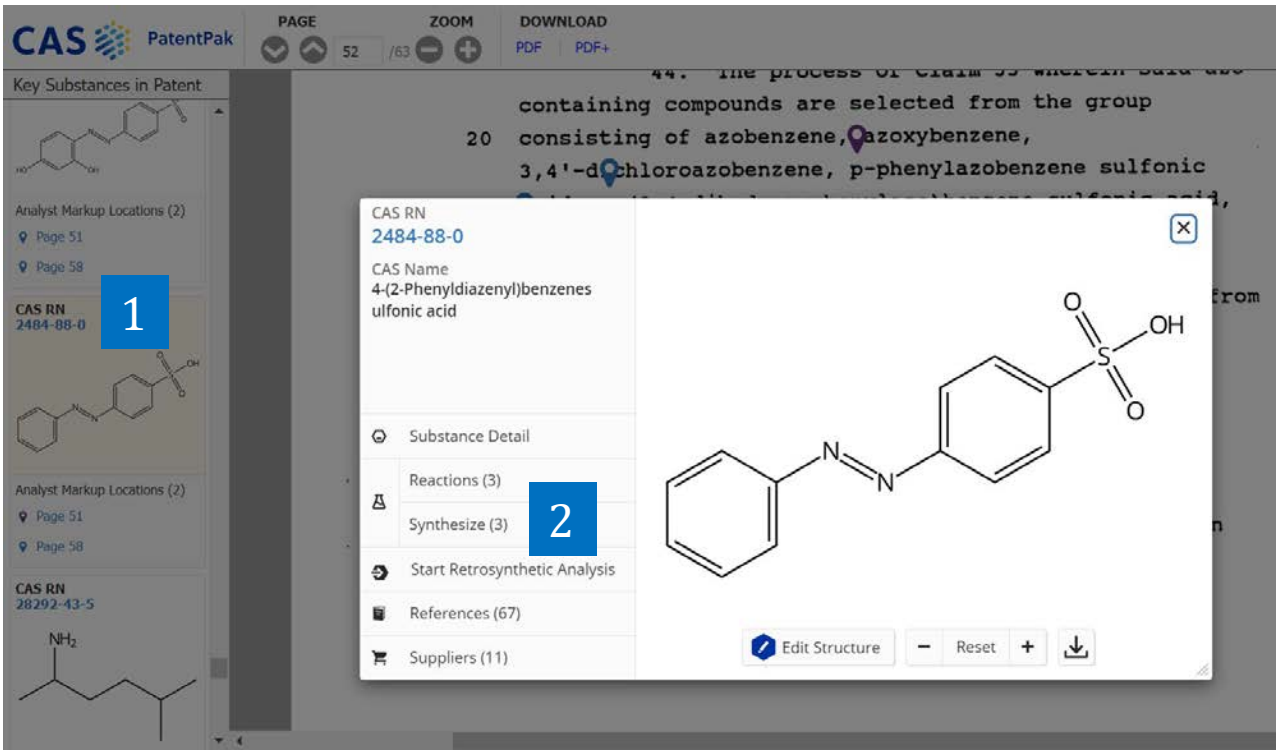
5. 根据结果数量或官能团名称字母顺序排列不参与反应的官能团。

6. 勾选目标官能团后，点击 Apply 获取该官能团不参与反应的结果。


CAS SciFinder
Reactions
Enter a query...
Edit
7
Return to Home
Structure Match
As Drawn (1,002)
Substructure (86K)
Similarity (3,037)
Filter Behavior
Filter by
Exclude
Yield
Number of Steps
Non-Participating Functional Groups
Halide (25K)
Ether (19K)
Phenyl halide (17K)
Amine (13K)
Tertiary amine (9,905)
Primary amine (1,554)
View All
Reactions (1,554)
References
Filtering:
Non-Participating Functional Groups: Primary amine
Edit Drawing
Remove
Start Retrosynthetic Analysis
Save And Alerts
Clear All Filters
41
Discovery of N-(Naphthalen-1-yl)-N'-alkyl Oxalamide Ligands Enables Cu-Catalyzed Aryl Amination with High Turnovers
By: Gao, Jie; Bhunia, Subhajit; Wang, Kailiang; Gan, Lu; Xia, Shanghua; et al
Organic Letters (2017), 19(11), 2809-2812 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE
Full Text
Suppliers (85)
Suppliers (65)
Suppliers (16)
Reaction Summary
Steps: 1 Yield: 58%

7. 浏览目标结果。

在 PatentPak Viewer 中使用 Retrosynthesis



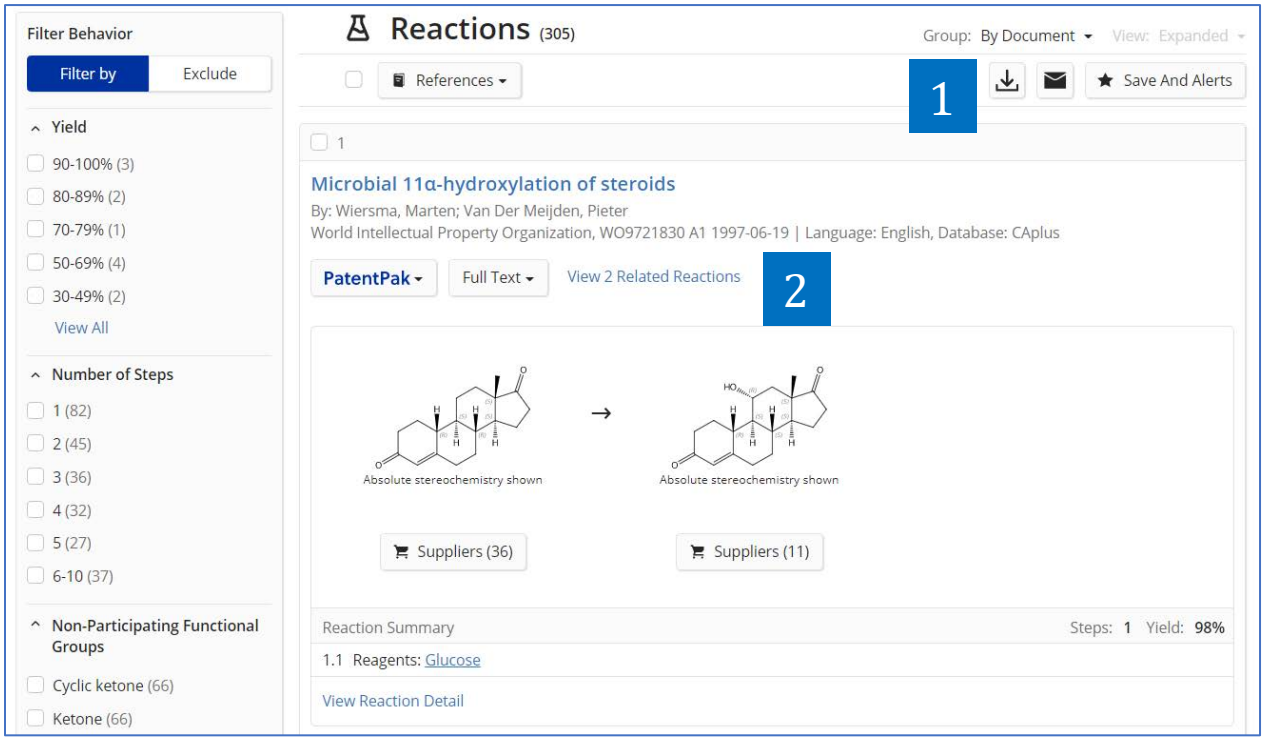
1. 在 PatentPak Viewer 中，点击物质结构。
2. 在弹出窗口中点击 Start Retrosynthetic Analysis，对此物质进行逆合成反应路线分析。

反应结果集的排序

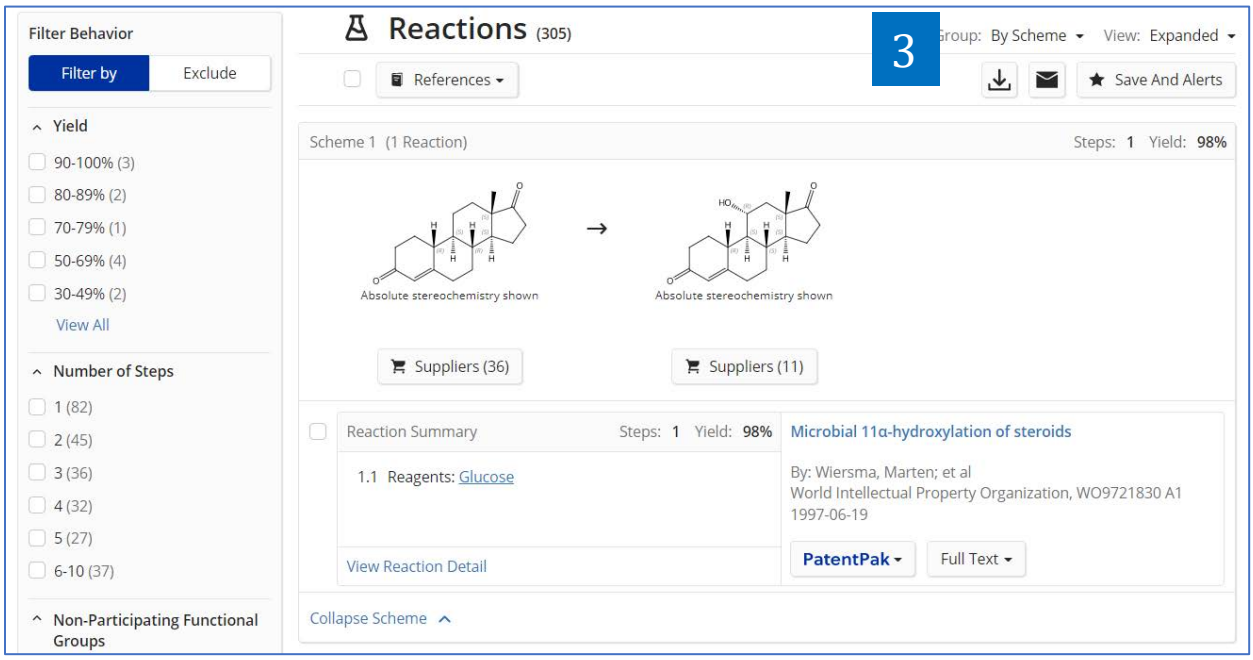
在 CAS SciFindern 反应结果集页面，提供两种结果排列方式：

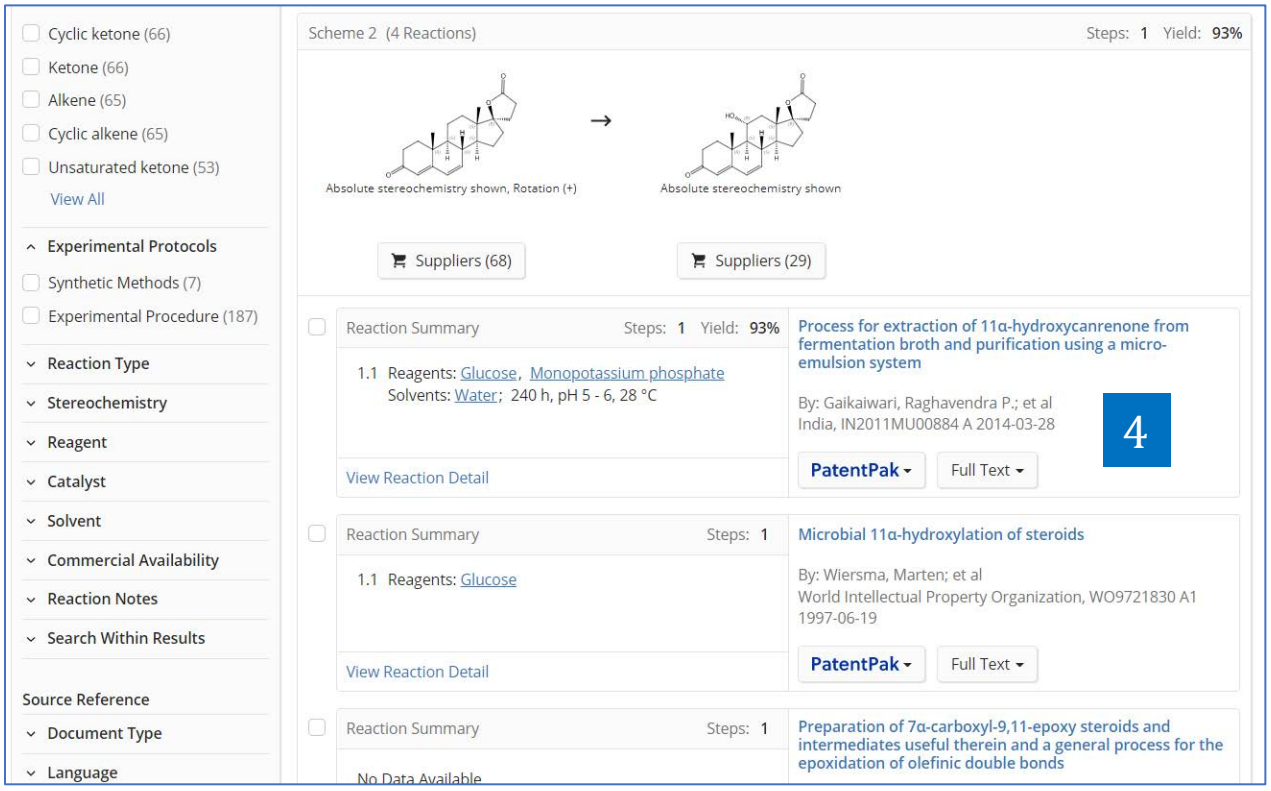
1- By Scheme, 将来自不同文献，底物和产物相同的多条记录仅展示为一条记录。

2- By Document, 当一篇文献报道了多条反应时，仅展示其中与被检索反应式最相关的一条反应。



3. 选择 Group: By Document 对反应检索结果进行排序。
4. 当选择按照 By Document 时，点击 View 2 Related Reactions 查看该文献报道的所有反应。



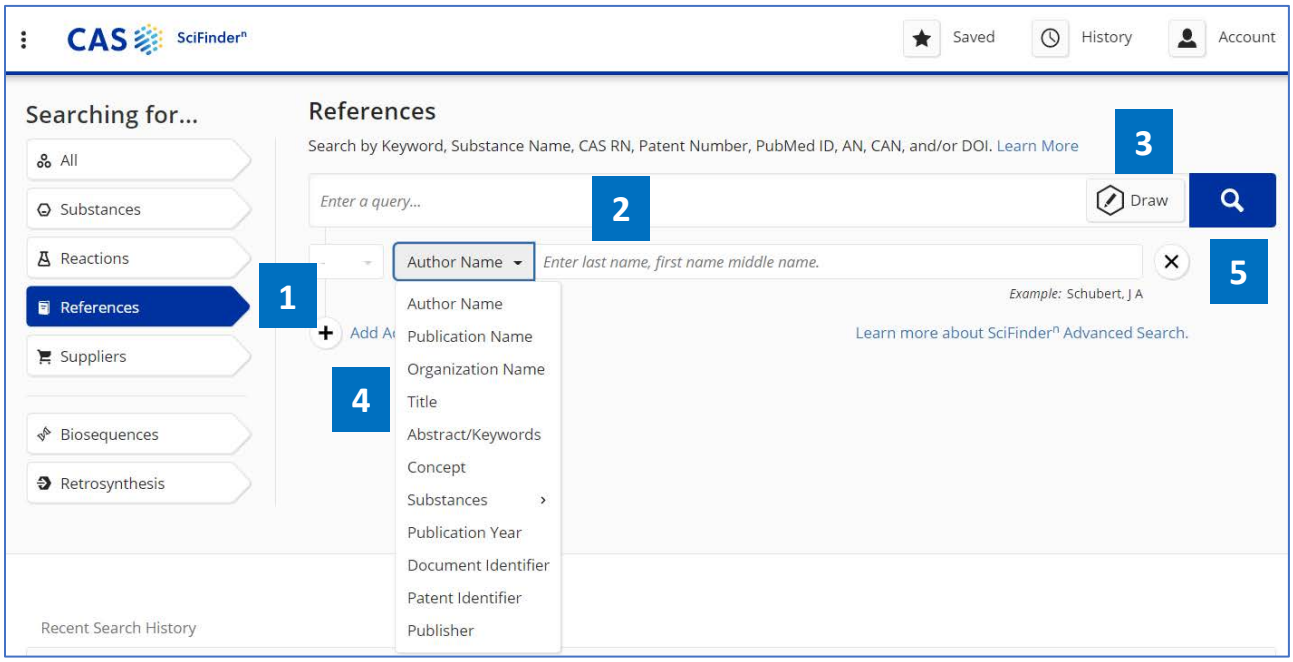


5. 选择 Group: By Scheme 对反应检索结果进行排序。

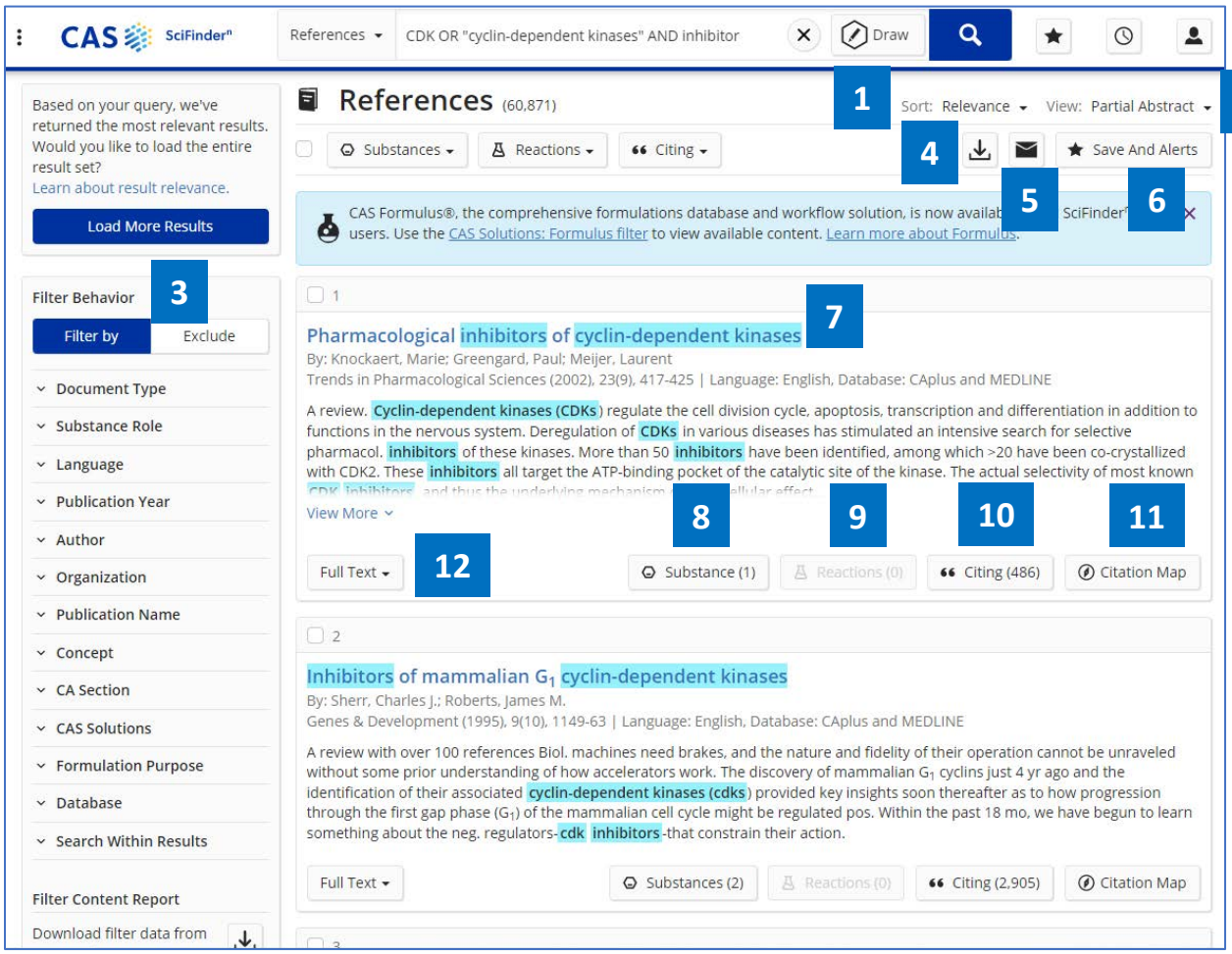
6. 当选择按照 By Scheme 时，反应结果会呈现底物和产物相同的文献。

文献检索

文献信息的获取



1. 在 CAS SciFinder^{n} 主页选择 References，进行文献检索。
2. 输入检索信息：关键词、物质名称、CAS 号、专利号或者文献 ID 号等。
3. 点击 Draw，绘制结构，可以通过结构式（反应式）直接检索文献；也可以同时在 2 所示的文本框中输入相应文本，联合检索文本与结构获取相关文献，所得文献结果既匹配输入的文本，还匹配绘制的物质（反应）结构。
4. 点击 Add Advanced Search Field，可输入更多检索条件进行检索。
5. 开始检索。

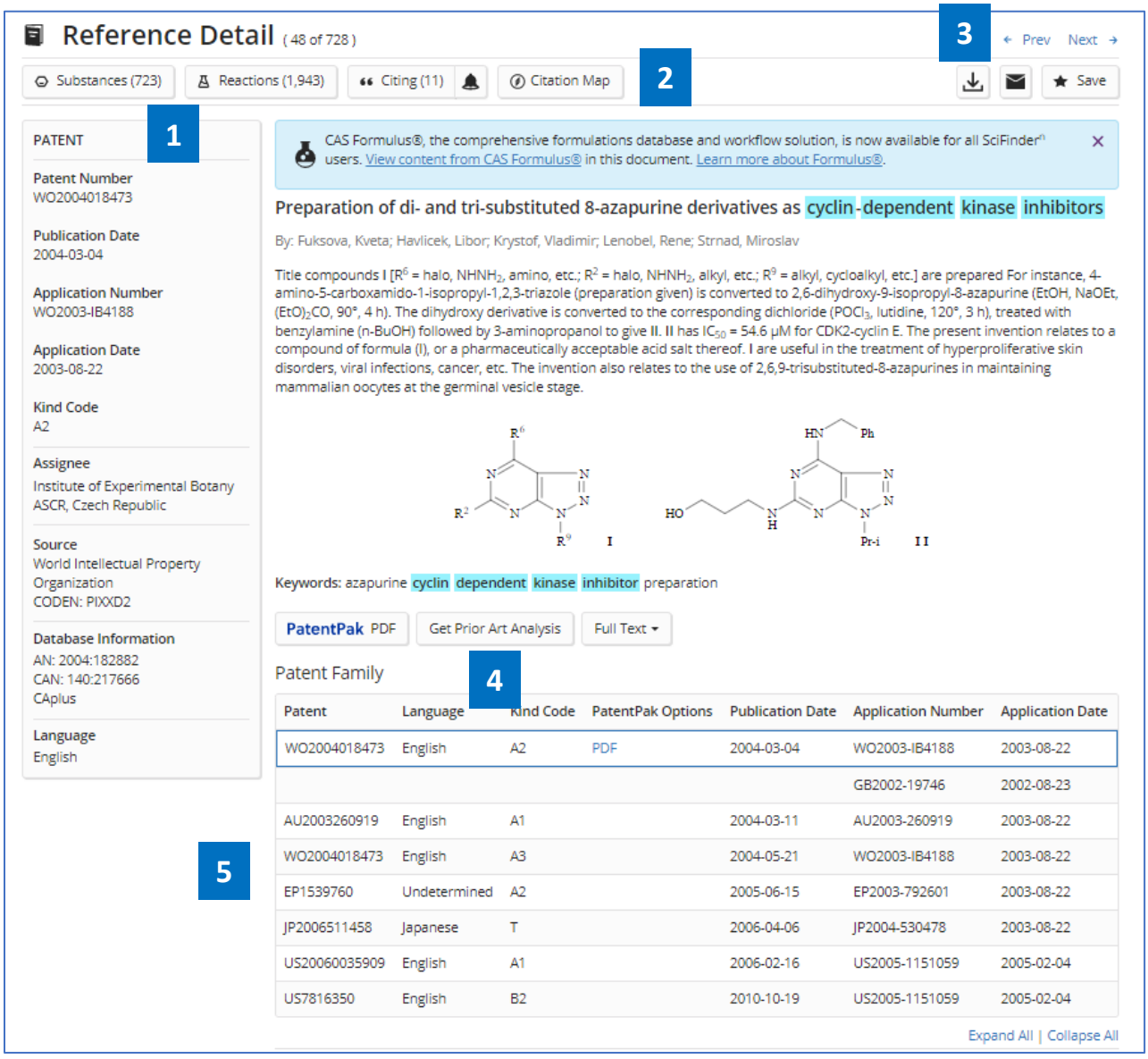


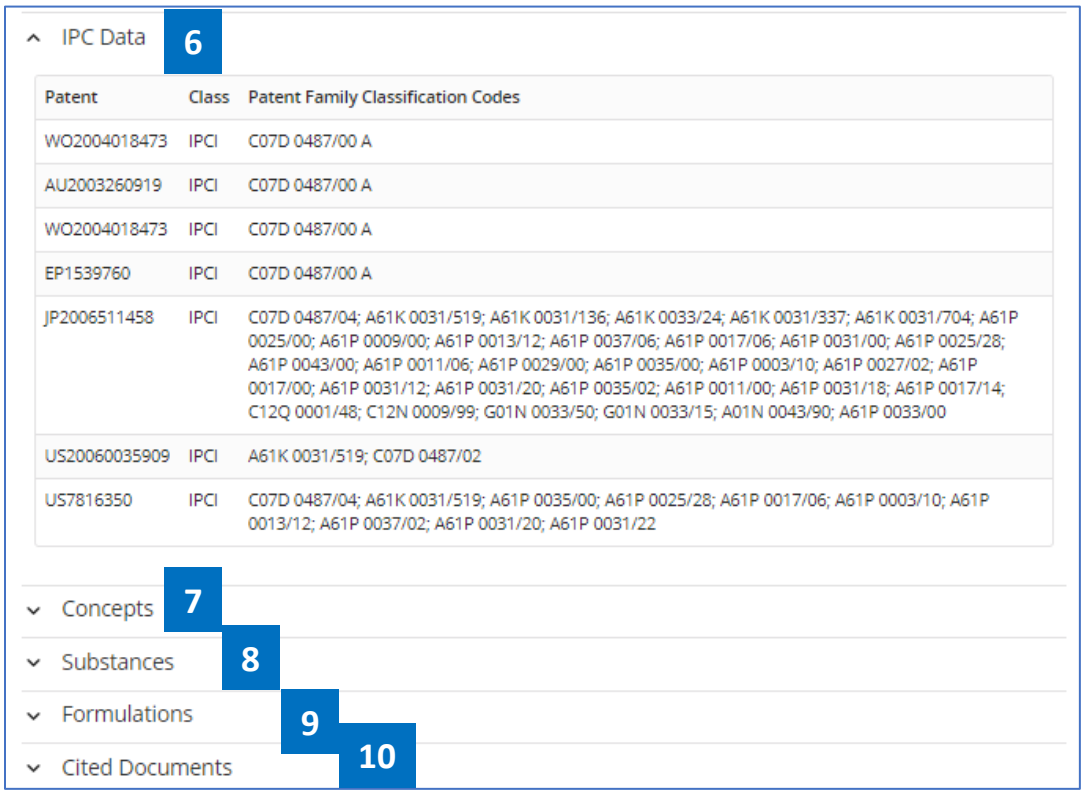
1. 点击 文献结果集页面 Sort 右侧小箭头，对结果按照引用次数、相关性、公开日期等进行排序
2. 点击 View 右侧小箭头，选择结果展示的详略
3. 全面的文献结果筛选或者排除选项
4. 通过 PDF, rtf, ris, txt, xlsx 等格式下载检索结果
5. 通过电子邮件分享检索结果
6. 保存检索结果, 并可同时设置信息更新提醒
7. 点击题目，查看文献详情
8. 获取文献中的物质
9. 获取文献中的反应

10. 获取引用本文章的文献

11. 引文地图，获取前向及后向引用

12. 获取全文链接

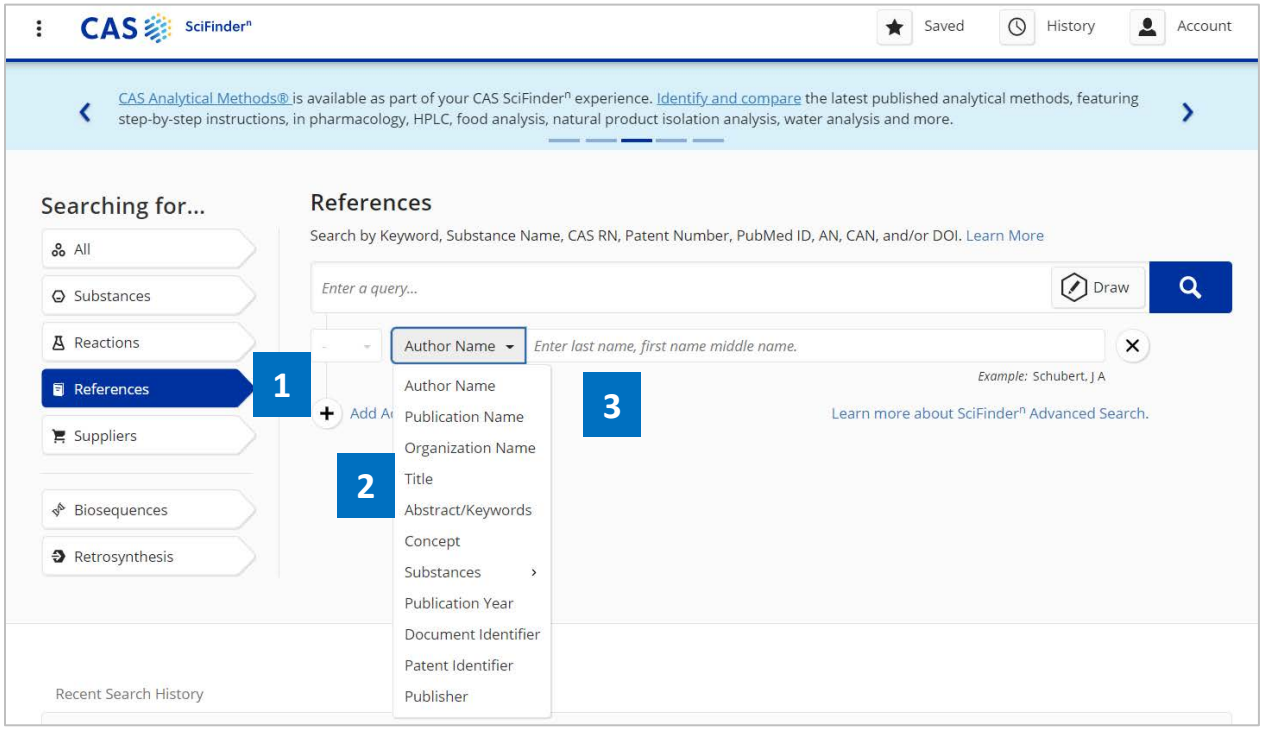




1. 文献书目信息
2. 文献相关信息：物质、反应、引文、引文地图
3. 点击左右箭头，查看上一篇或下一篇文献的详情
4. 获取专利相关的现有技术
5. 专利族成员信息
6. 专利分类号
7. CAS 科学家标引的文章中重要技术术语
8. 文献中报道的物质及其在文献中的研究角色
9. 文献中的制剂配方信息
10. 文献的参考文献

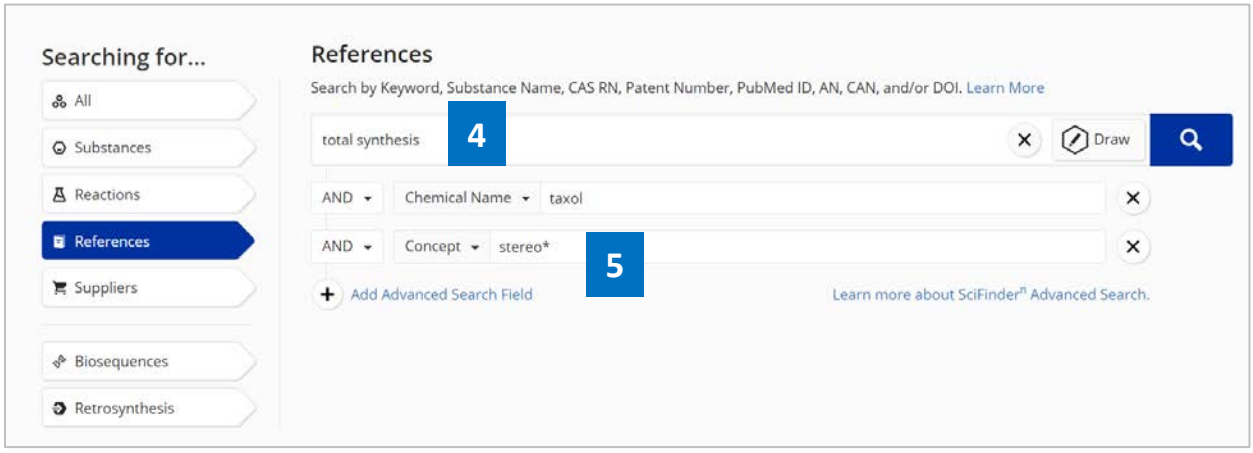
高级文献检索

使用高级文献检索，可以快速获得更相关的结果。



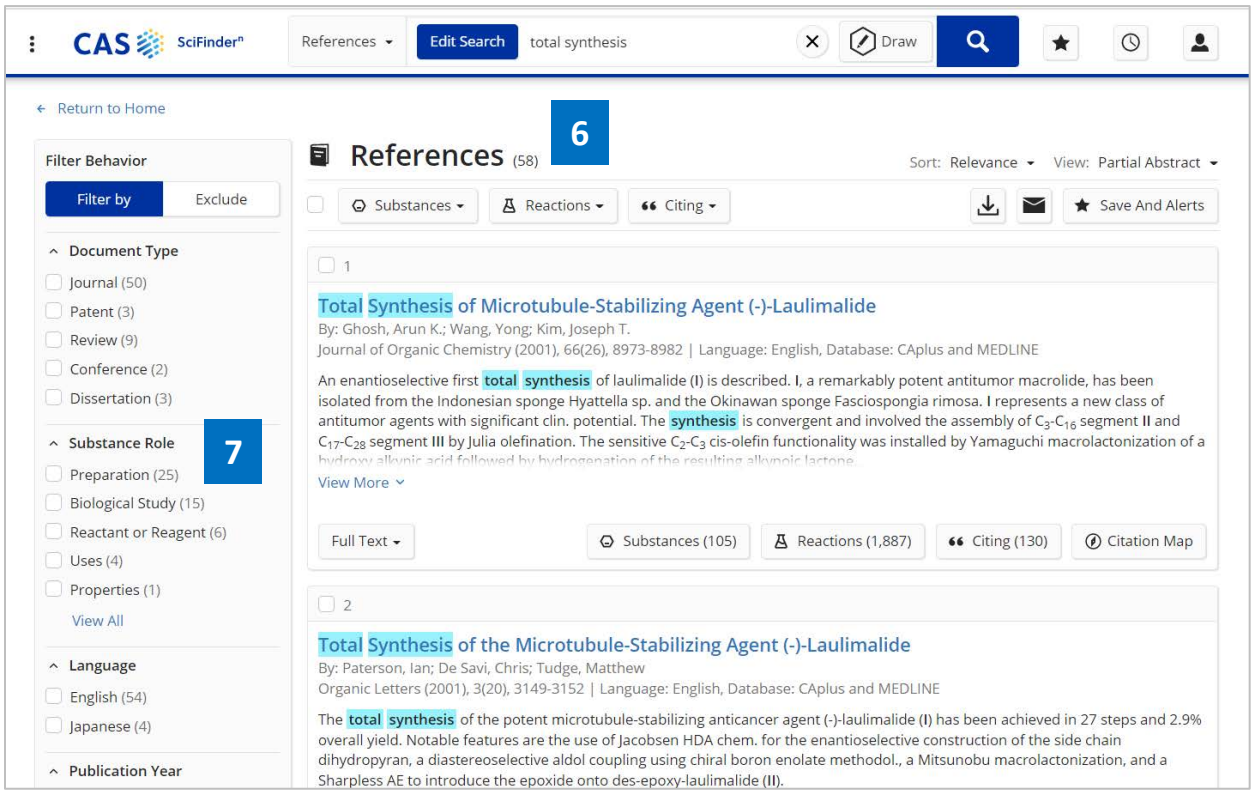
1. 在主页面，选择 References。
2. 选择逻辑运算符 and, or ,not，连接不同的检索字段。
3. 根据需要，选择相应的检索字段。

例：紫杉醇全合成，并包含“stereo”这一 concept。



4. 在相应的字段输入检索词。

5. 可以使用通配符“*”，通配符*代表 1 或者多个字符，可用于词中或者词尾。



6. 获得文献结果集

7. 通过 substance role 限定物质的具体研究信息，如：制备（preparation）。

CAS SciFinder^n References Edit Search total synthesis Draw

Reference Detail (1 of 58)

Prev Next

Substances (105) Reactions (1,887) Citing (130) Citation Map Save

8

JOURNAL

Source
Journal of Organic Chemistry
Volume: 66
Issue: 26
Pages: 8973-8982
Journal; Article; Research Support, U.S. Gov't, P.H.S.
2001
DOI:
10.1021/jo010854h

CODEN: JOCEAH
ISSN: 0022-3263
ISSN-L: 0022-3263

Database Information
AN: 2001:869107
CAN: 136:151030
PubMed ID: 11749630
CAplus and MEDLINE

Company/Organization
Department of Chemistry
University of Illinois at Chicago
Chicago, Illinois 60607
United States

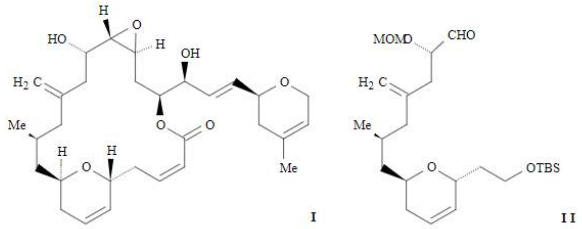
Email
arunghos@uic.edu

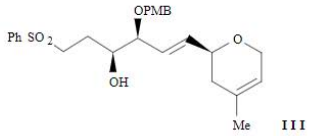
Publisher
American Chemical Society

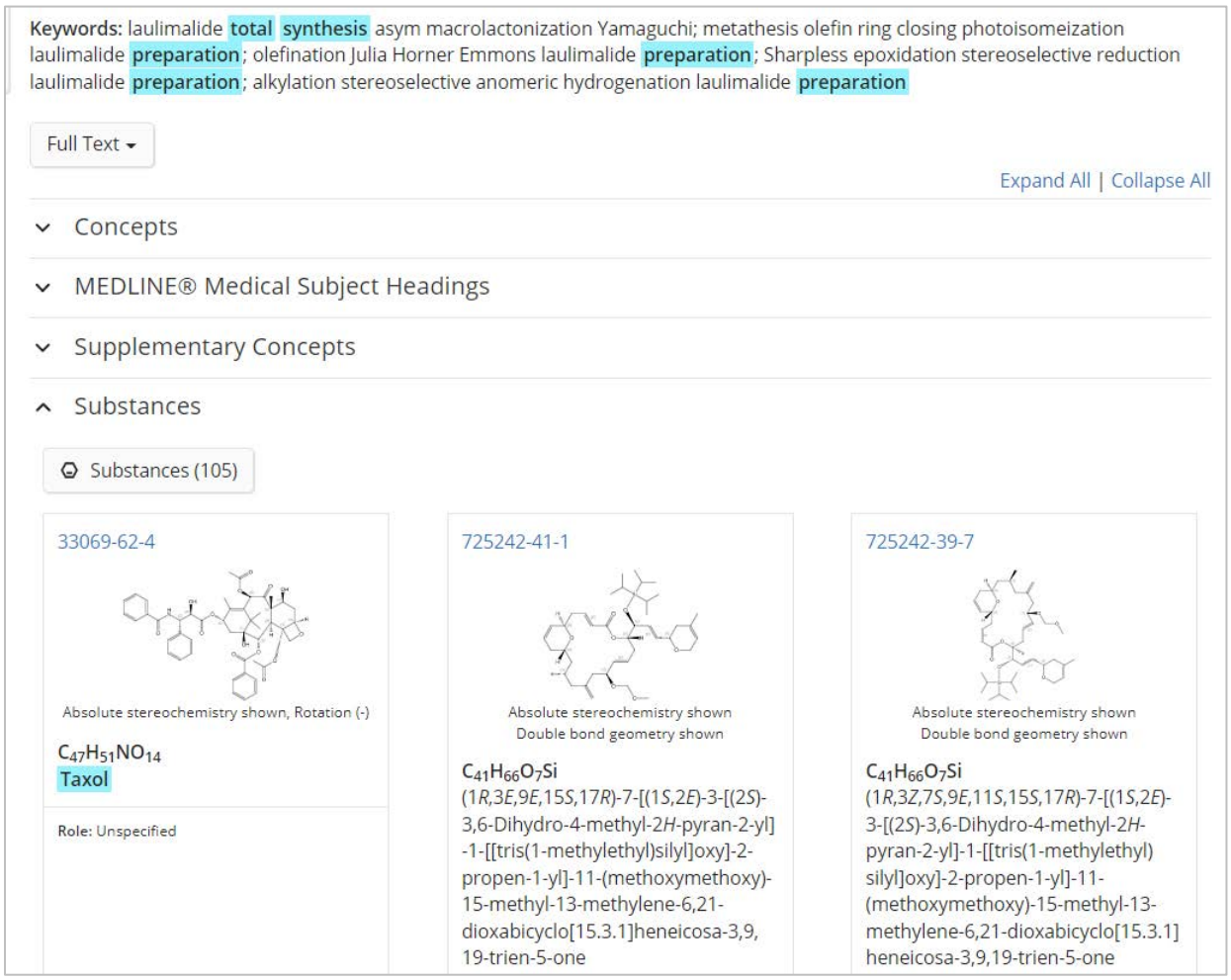
Total Synthesis of Microtubule-Stabilizing Agent (-)-Laulimalide

By: Ghosh, Arun K.; Wang, Yong; Kim, Joseph T.

An enantioselective first total synthesis of laulimalide (**I**) is described. **I**, a remarkably potent antitumor macrolide, has been isolated from the Indonesian sponge Hyattella sp. and the Okinawan sponge Fasciospongia rimosa. **I** represents a new class of antitumor agents with significant clin. potential. The synthesis is convergent and involved the assembly of C_3-C_{16} segment **II** and C_{17}-C_{28} segment **III** by Julia olefination. The sensitive C_2-C_3 cis-olefin functionality was installed by Yamaguchi macrolactonization of a hydroxy alkynic acid followed by hydrogenation of the resulting alkynoic lactone over Lindlar's catalyst. Initial attempts of intramol. Still's variant of Horner-Emmons olefination between the C_{19}-phosphonocetate and C_3-aldehyde provided a 1:2 mixture of cis- and trans-macrolactones. The trans-isomer was photoisomerized to a mixture of cis- and trans-isomers. The other key steps involved ring-closing olefin metathesis to construct both dihydropyran units, stereoselective anomeric alkylation to functionalize the dihydropyran ring, stereoselective reduction of the resulting alkynyl ketone to set the C_{20}-hydroxyl stereochem., and a novel Julia olefination protocol for the installation of the C_{13}-exo-methylene unit. The sensitive epoxide at C_{16}-C_{17} was introduced in a highly stereoselective manner by Sharpless epoxidation at the final stage of the synthesis.



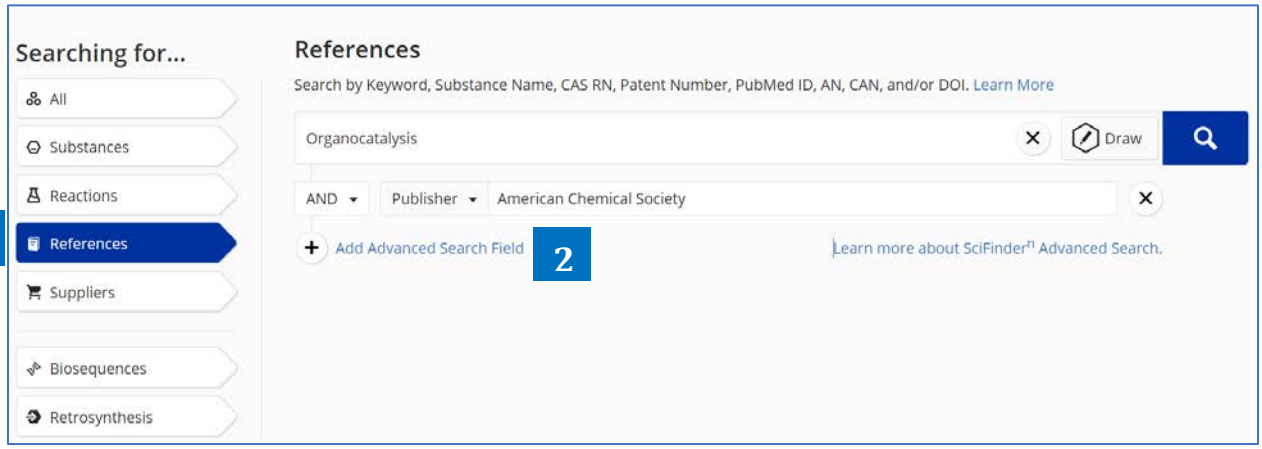




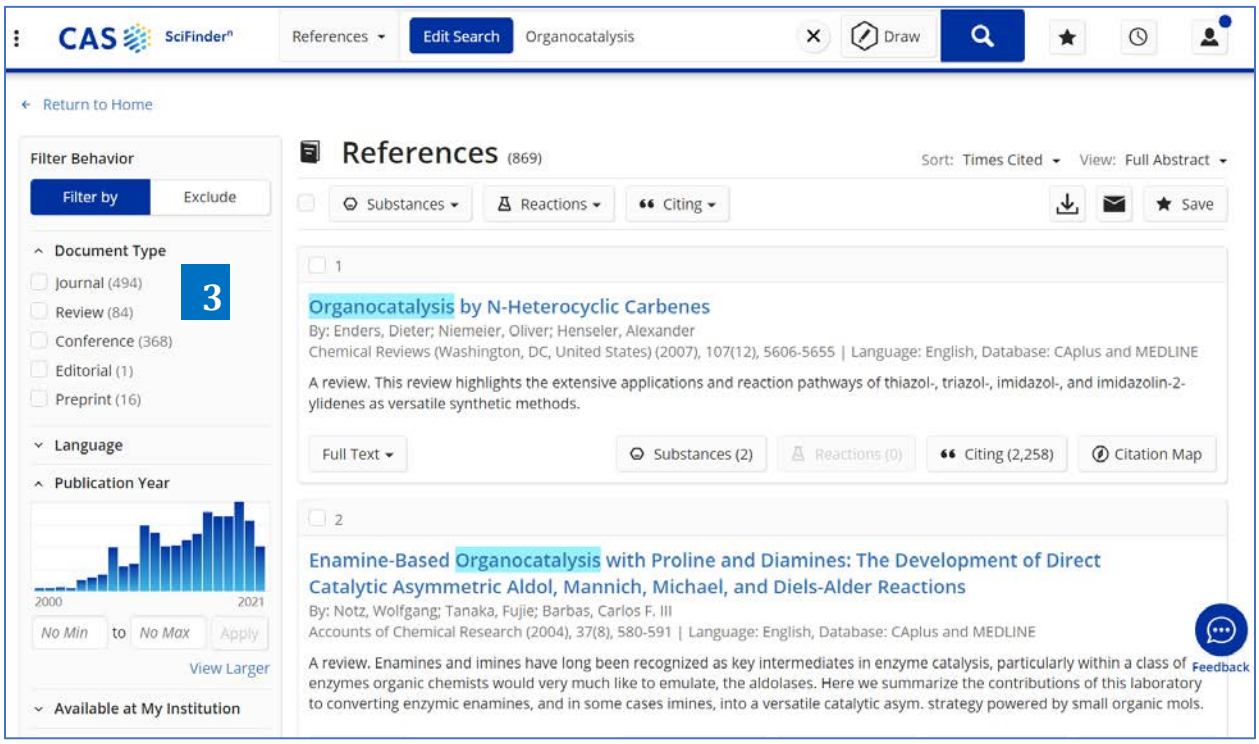
8. 未限定检索字段的词语，则可能出现在标题、摘要、Keywords、Concept、MEDLINE Medical Subject Headings、Supplementary Concepts 和 Substances 中；并以湖蓝色标亮显示。

出版社检索

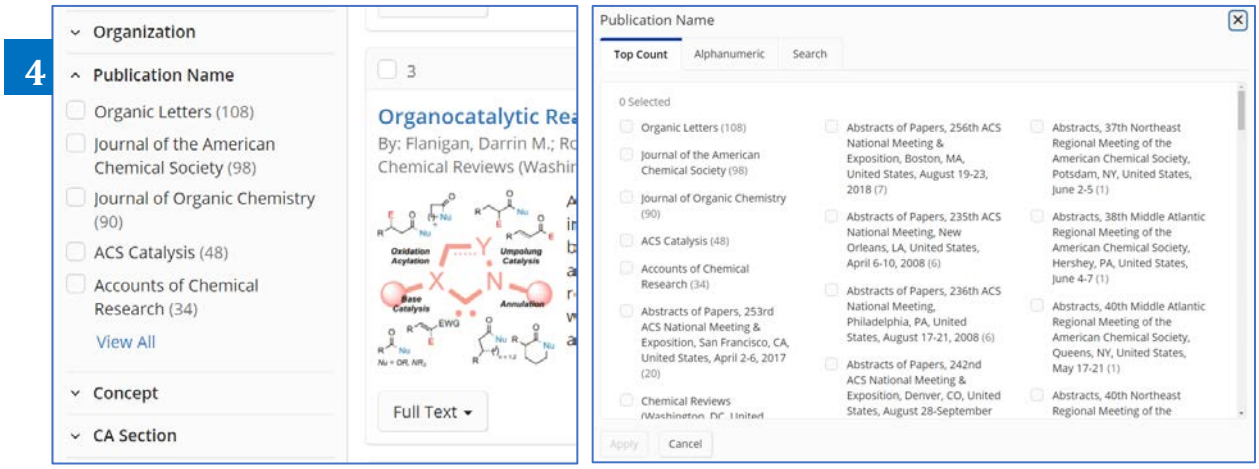
在进行文献检索时，可选择 Add Advanced Search Field，输入出版社名称，将检索结果限定为某出版社旗下出版刊物中的文献。



1. 选择 References，在检索框中输入主题词。
2. 点击 Add Advanced Search Field，然后点击 Select 下拉菜单，再在菜单中选中”publisher”，最后在输入框中输入出版社名称。



3. 在结果集页面，可通过 Document Type 分析/筛选该出版社旗下各类型文献。



4. 也可通过 Publication Name 筛选出该出版社旗下某期刊发表的文献。

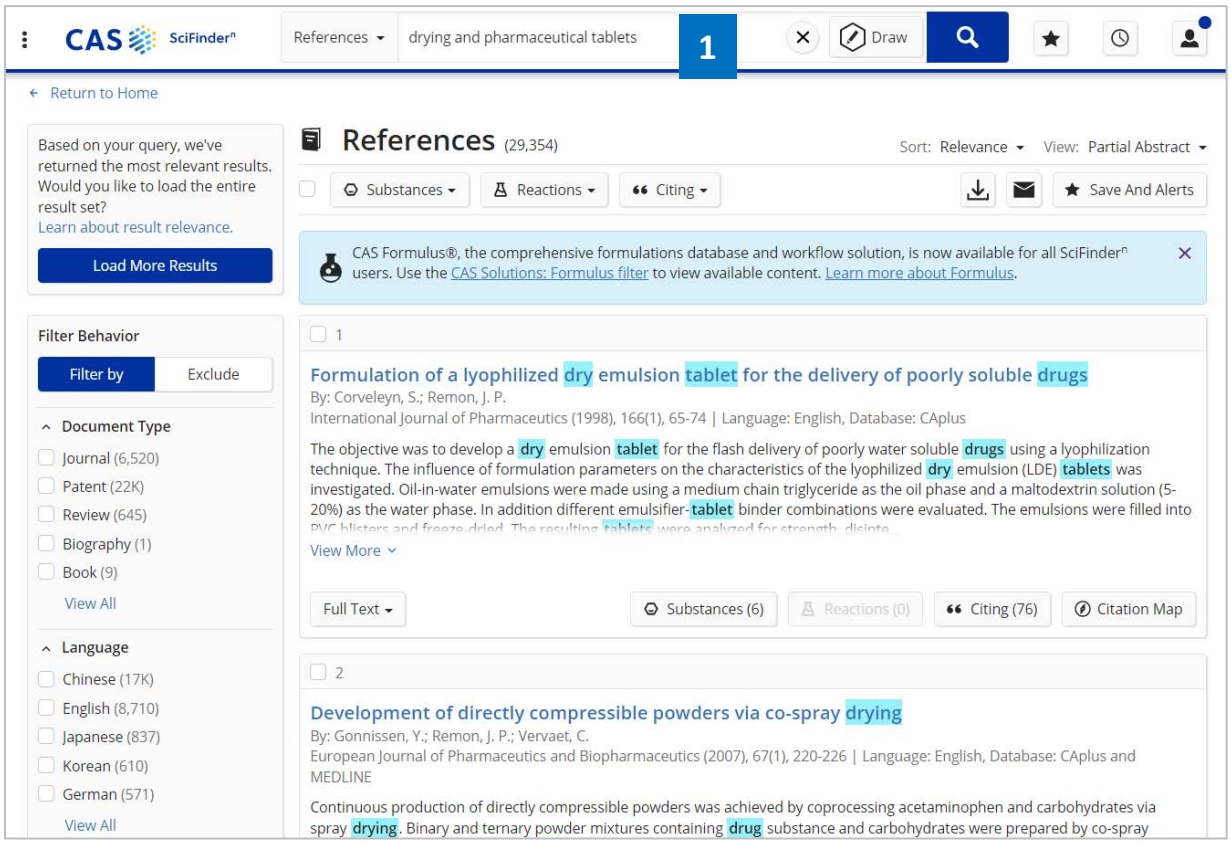
获取制剂（配方）信息

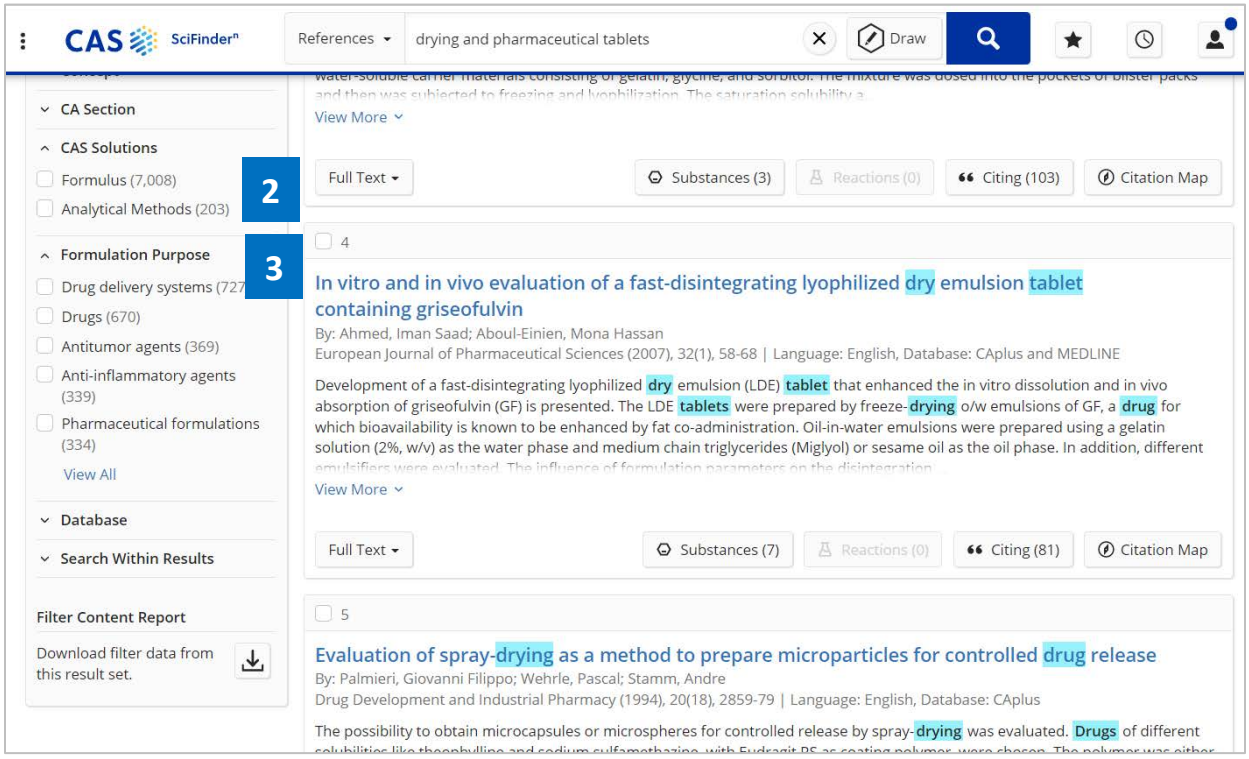
在 CAS SciFinder^n 中，可通过以下两种方式获取制剂（配方）信息：

一. 直接在 References 检索框中输入检索式，在得到的文献结果页面左侧选择 Formulation Purpose,获得感兴趣的制剂（配方）信息。

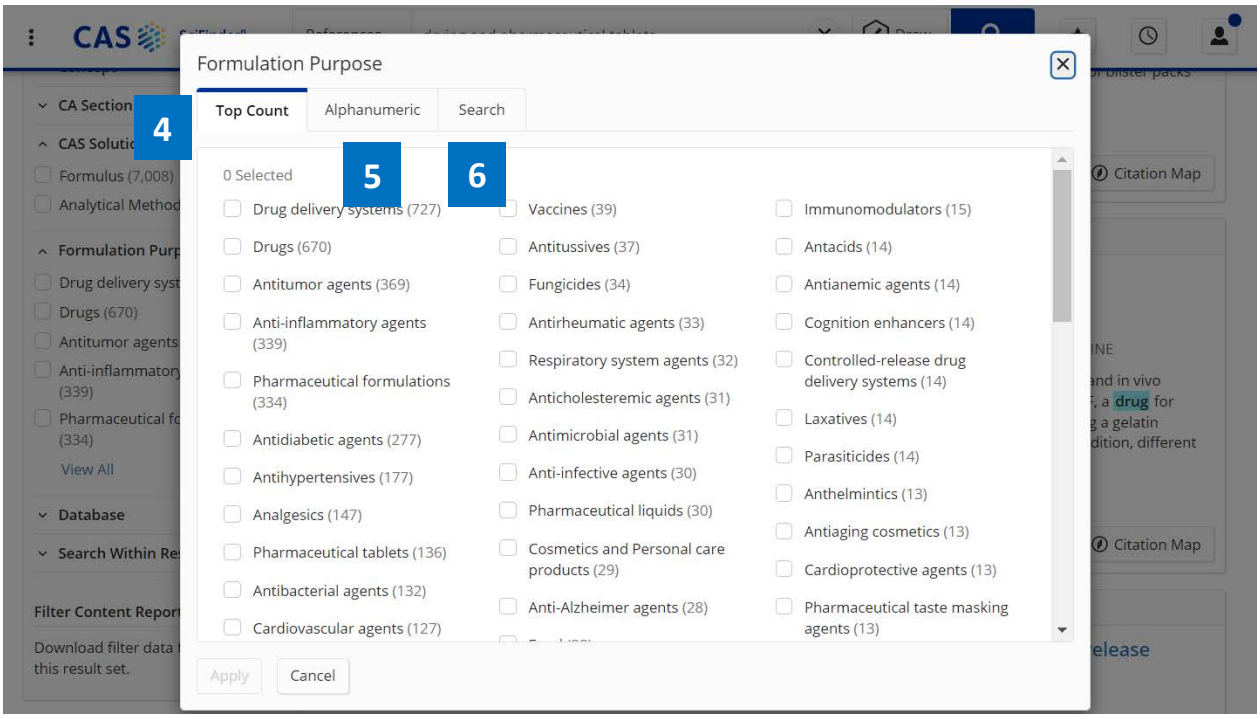
二. 从物质检索开始，通过物质获取文献，然后在文献结果页面左侧选择 Formulation Purpose, 获得感兴趣的制剂（配方）信息。

方法一：直接在 References 检索框中输入检索式，在得到的文献结果页面左侧选择 Formulation Purpose,获得感兴趣的制剂（配方）信息：

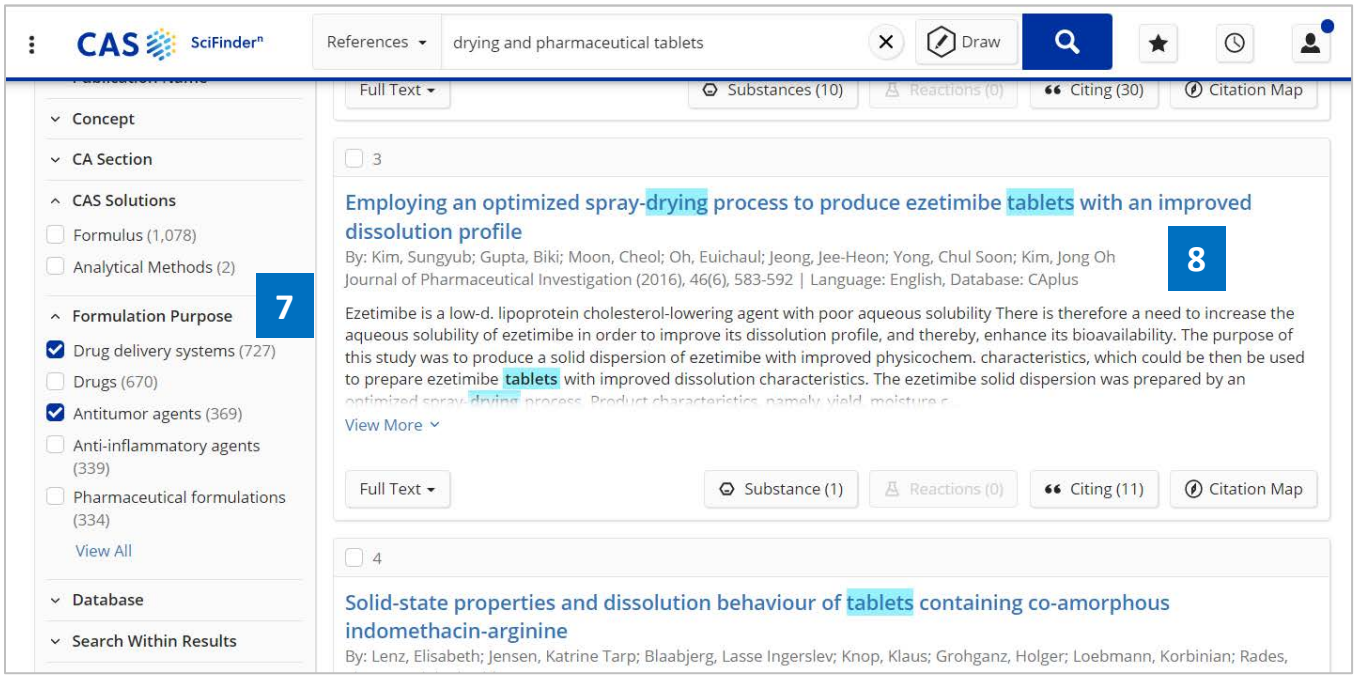




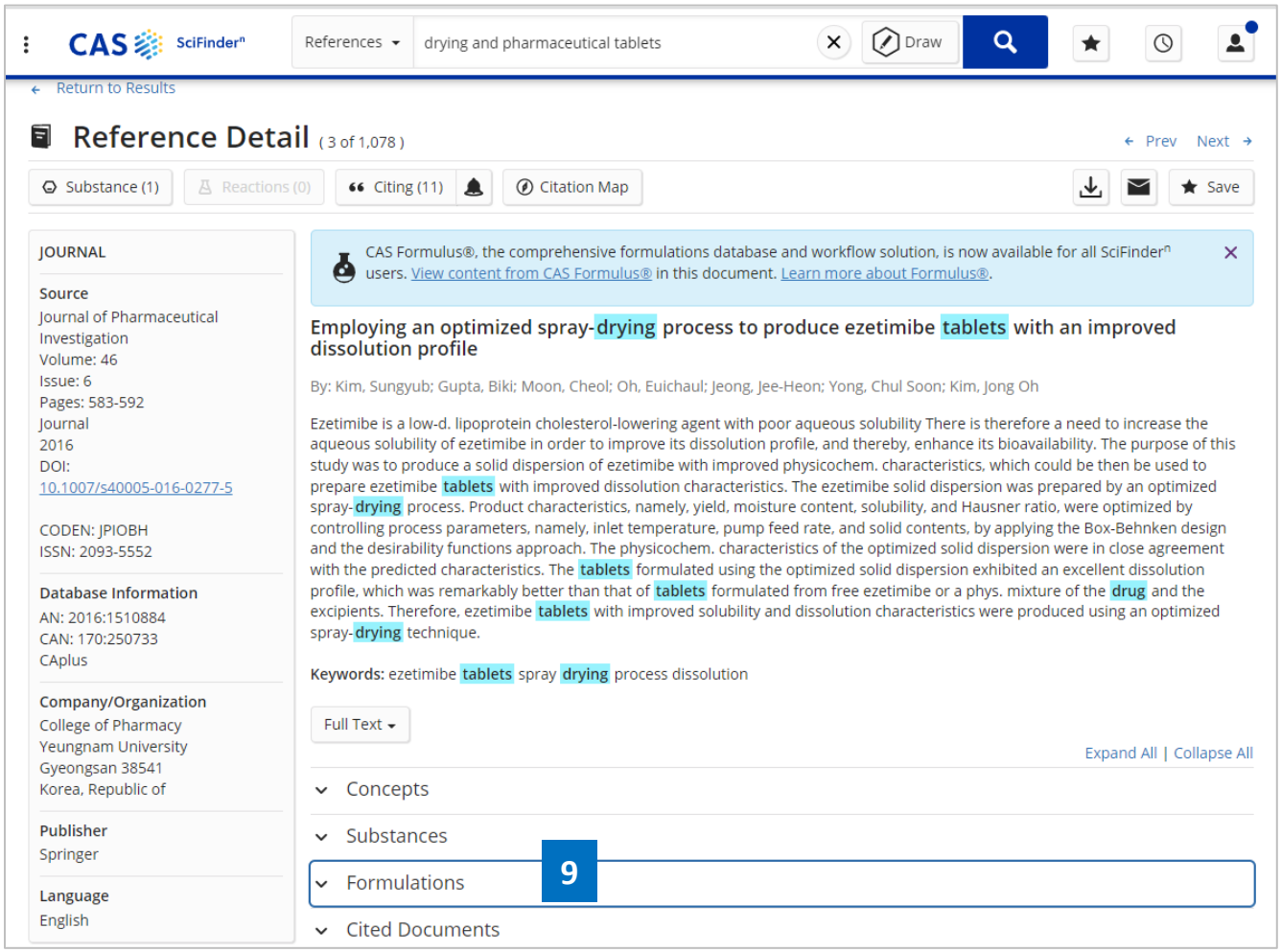
1. 选择 References，输入检索式
2. 在文献结果集页面左侧，勾选 CAS Solutions 下的 Formulus，可以获得制剂（配方）的更多信息。
3. 在文献结果集页面左侧，勾选 Formulation Purpose 下的相应选项，获取针对某适应症的制剂信息，点击 View All 可查看全部选项列表。



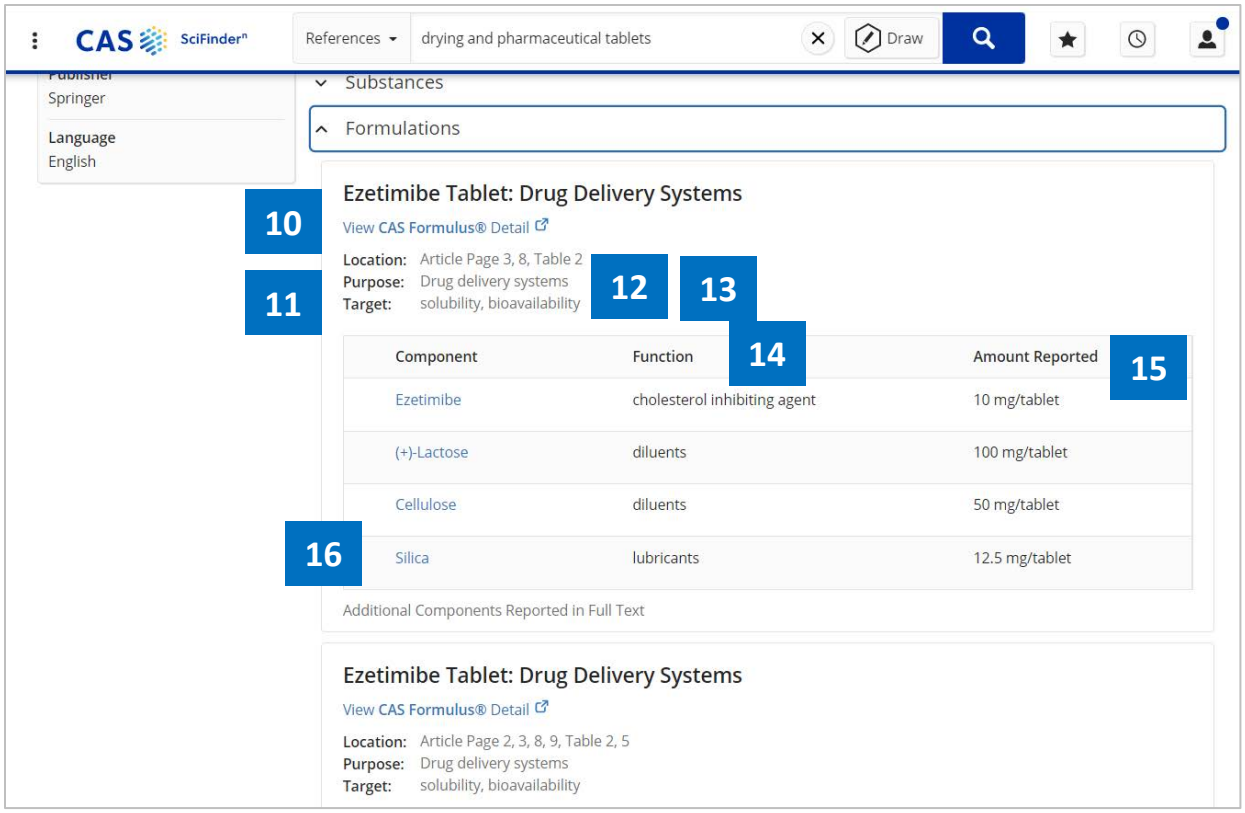
4. 根据文献数量对选项进行排序。
5. 根据选项字母顺序排序。
6. 直接输入感兴趣的 formulation purpose, 快速获取目标信息。



7. 可以选择一个或者几个选项。
8. 点击题目查看文献信息详情。



9. 点击 Formulations 查看制剂（配方）信息。



10. 点击 View Formulus Detail，将进入 CAS 另一个解决方案 Formulus (关于 Formulus 的更多信息，请咨询美国化学摘社北京代表处：china@acs-i.org)

11. 该制剂（配方）在原文中出现的位置。

12. 制剂（配方）用途。

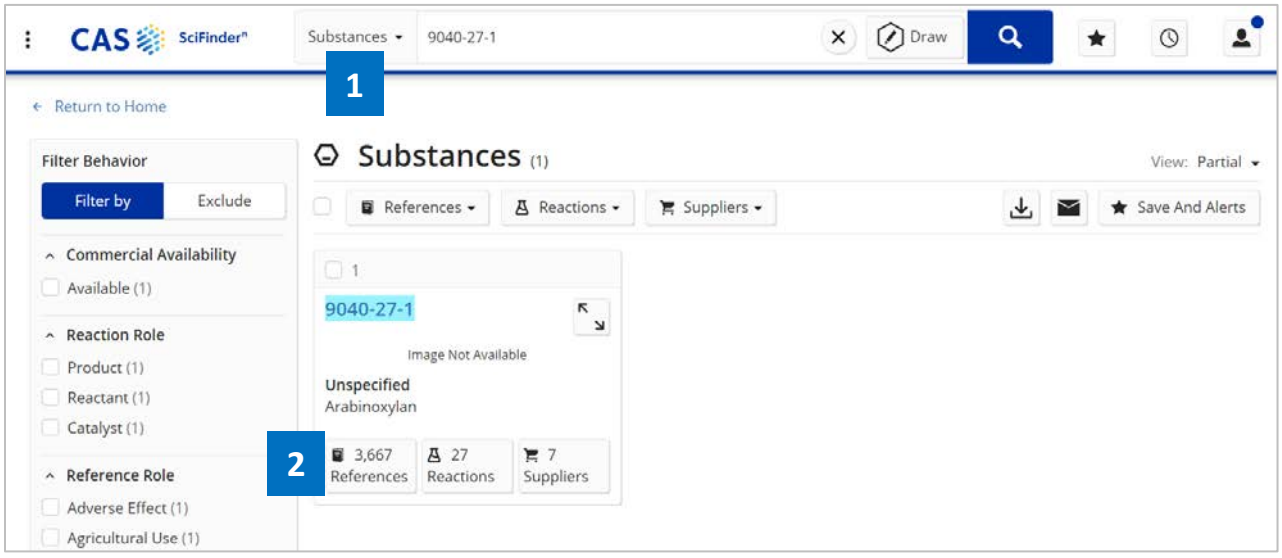
13. 制剂（配方）中的成分。

14. 各成分所起的作用。

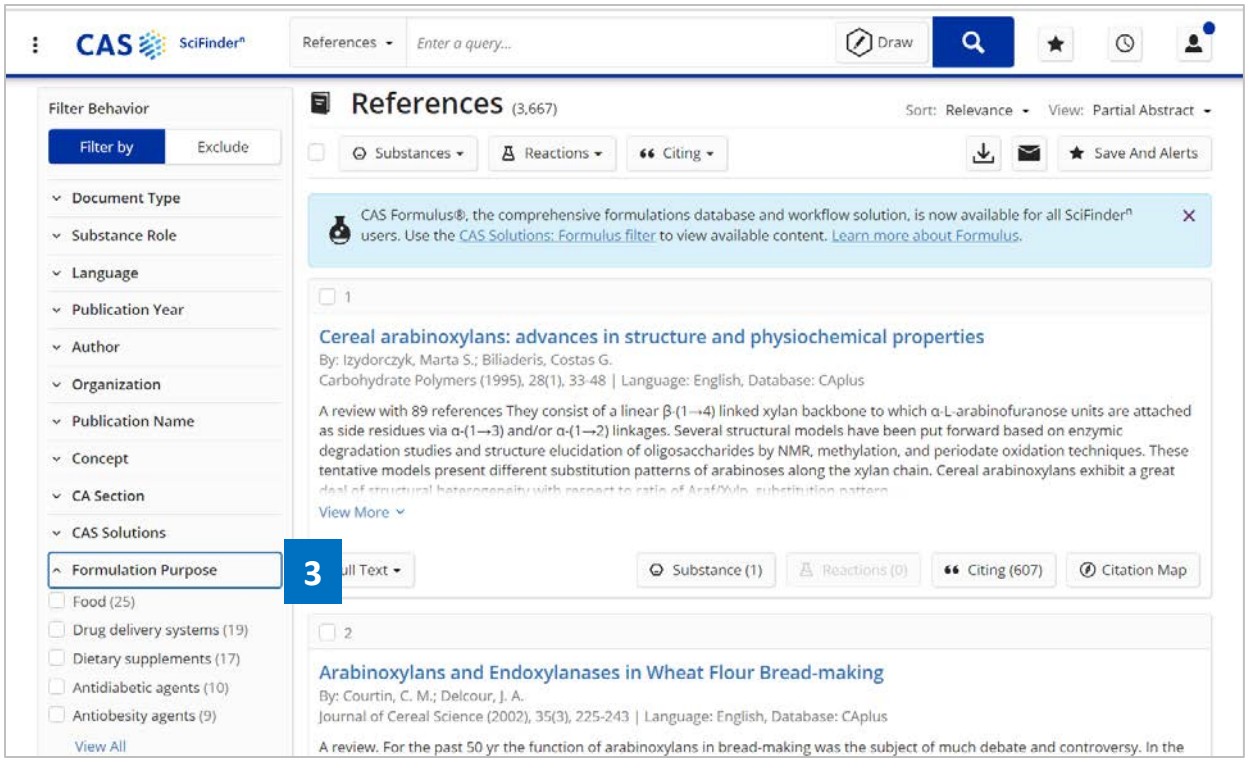
15. 成分含量。

16. 点击蓝色超链接的物质名，可以获取其物质信息详情。

方法二：从物质检索开始，通过物质获取文献，然后在文献结果页面左侧选择 Formulation Purpose，获得感兴趣的制剂（配方）信息（以获取阿拉伯木聚糖制剂信息为例）：



1. 进行物质检索，获得物质检索结果集。
2. 由物质获得文献结果集。

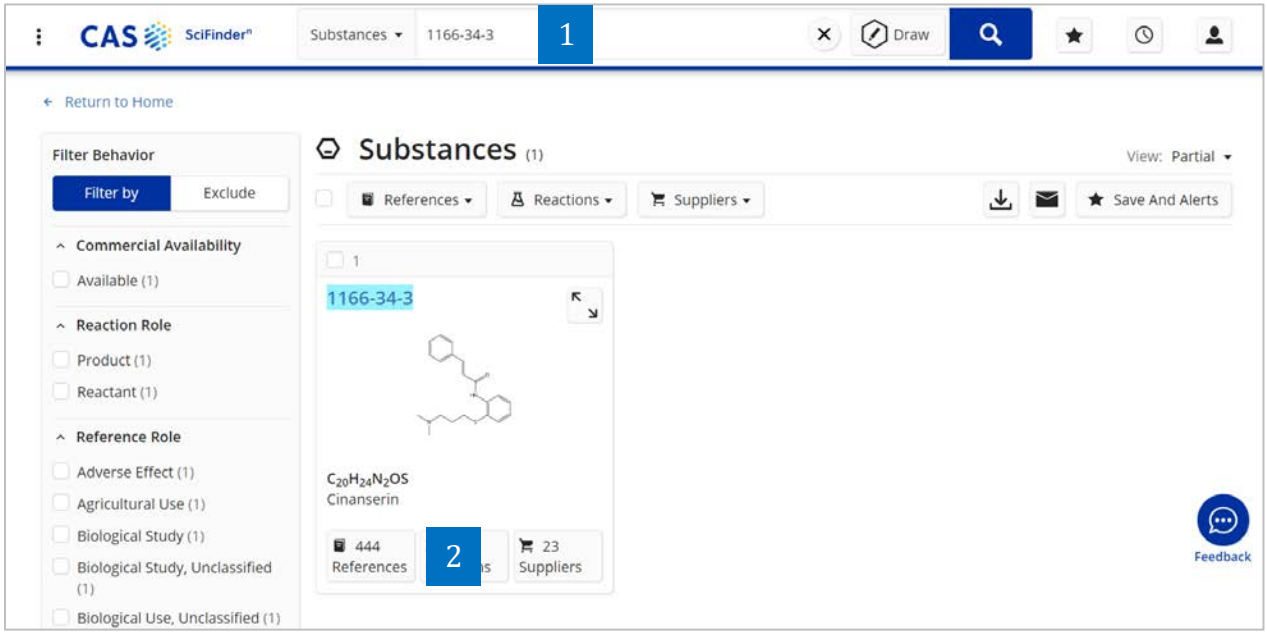


3. 在 Formulation Purpose 中勾选所需目标制剂信息。其余内容同方法一，在此不再赘述。

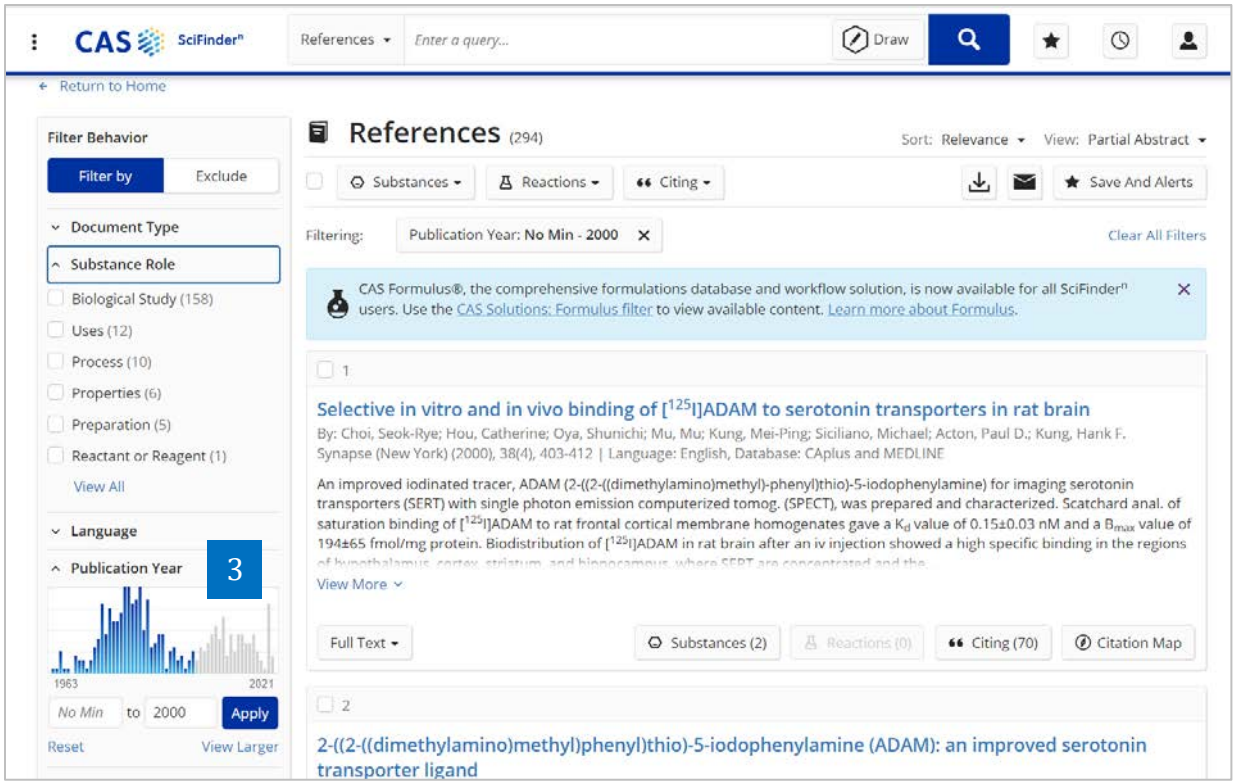
药物重定位 (Repositioning)

药物重定位指对现有药物进行研究以用于新的治疗目的。这种模式已经取得了许多成功，相比于新药研发，其可大大缩减研发成本和时间。因此药物重定位逐渐成为很多科研机构、医药企业看重的策略之一。

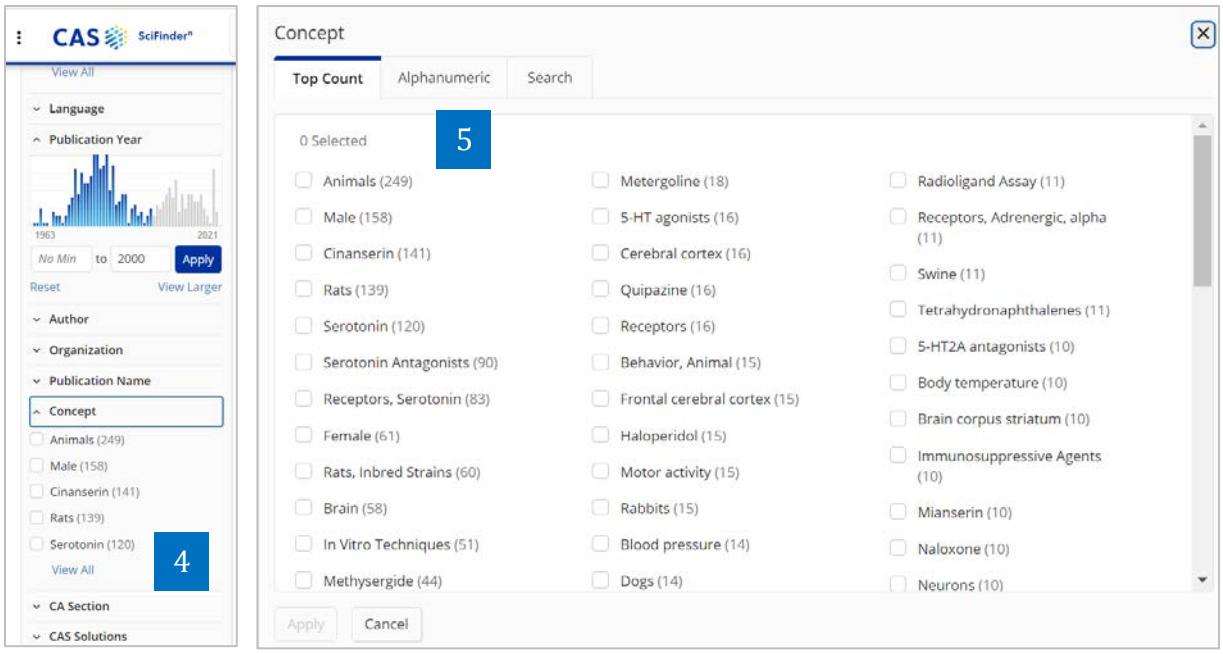
此处以肉桂硫胺为例，介绍如何在 CAS SciFinder[n] 中检索药物的重利用信息：



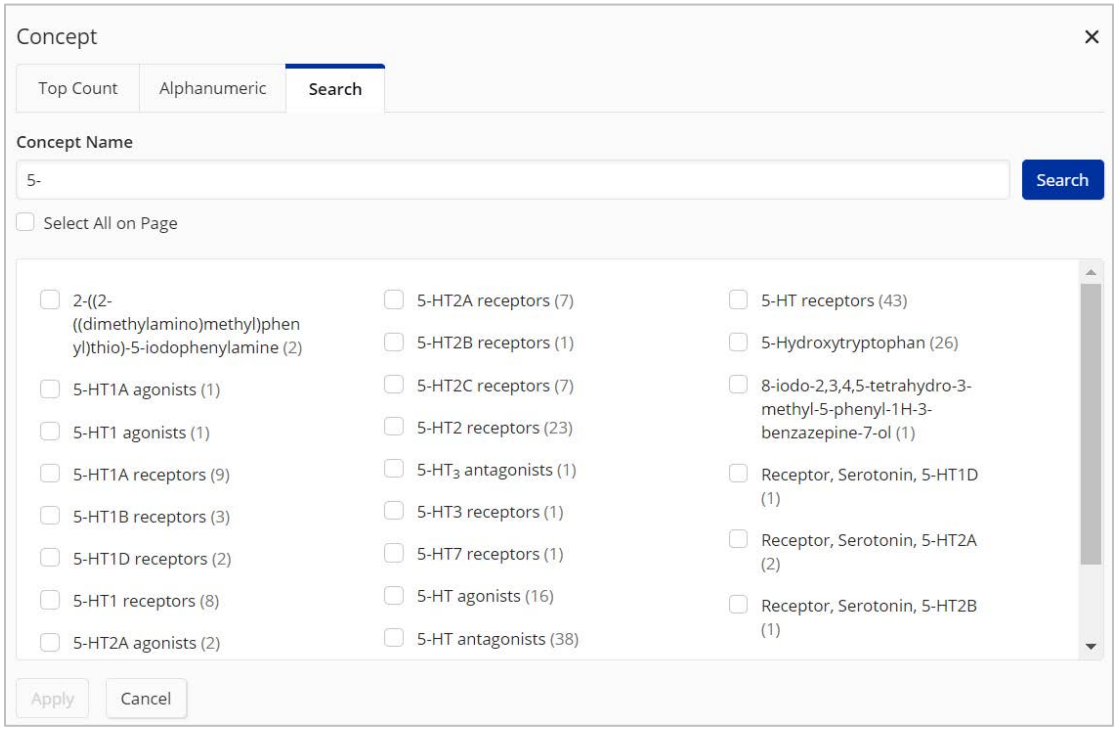
1. 通过肉桂硫胺的 CAS 登记号、化学名称或者结构式等方式检索得到肉桂硫胺的物质信息。
2. 获取报道肉桂硫胺的文献。



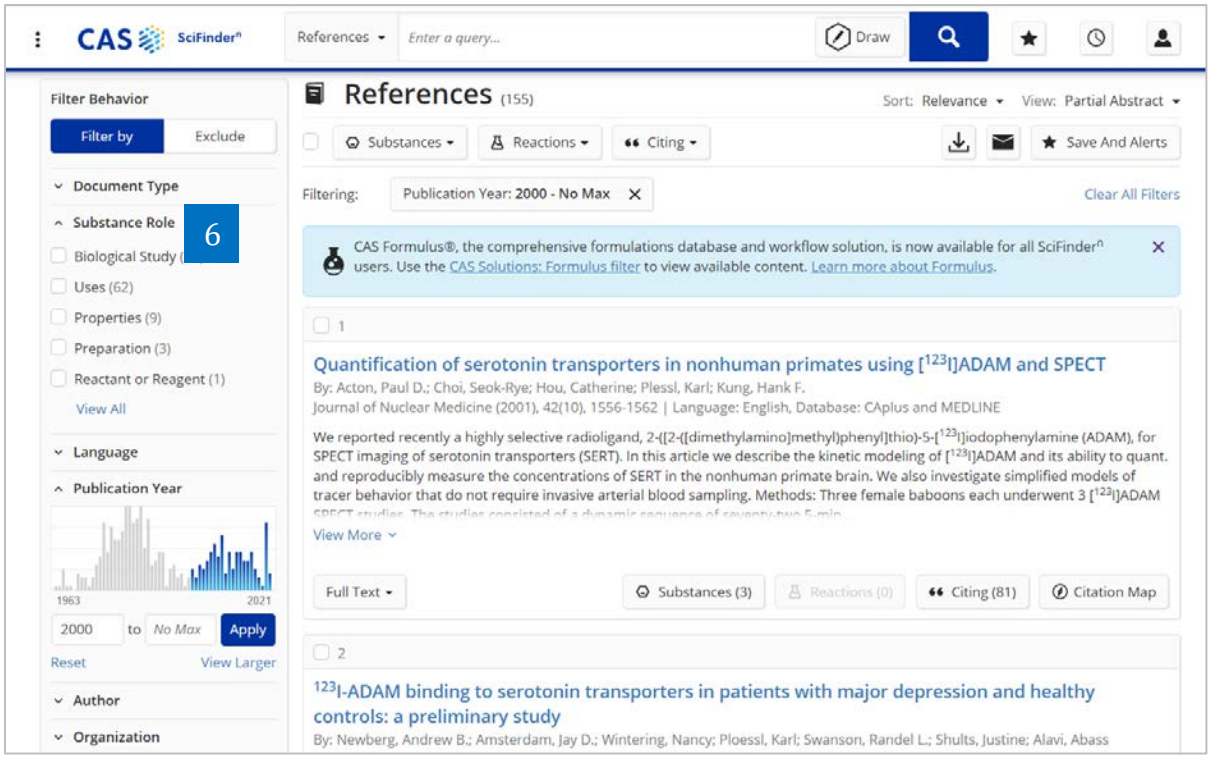
3. 在文献页面，通过左侧的 Publication Year 限定文献结果，如：筛选 2000 年以前发表的文献。



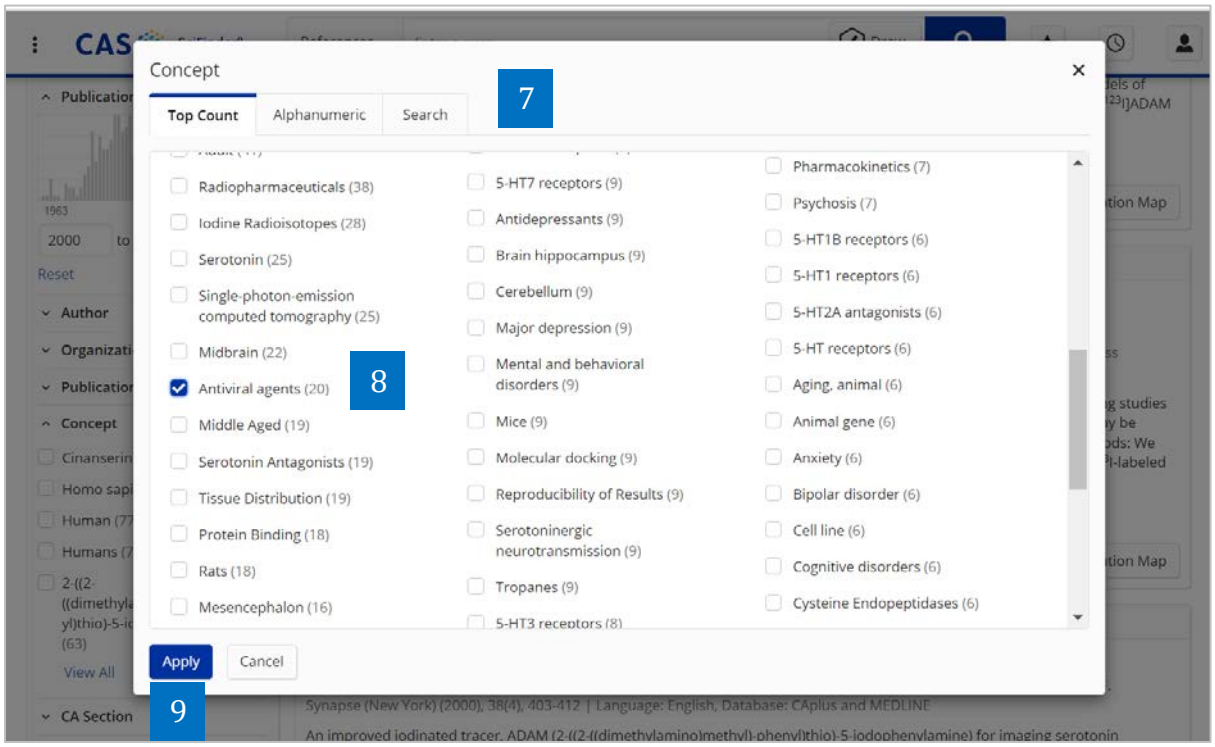
4. 点击 View All，查看所有 Concept。



5. 浏览 2000 年之前文献中的 Concept，发现肉桂硫胺作为一种 5-HT 系列受体拮抗剂，早期一直用作抗精神疾病药物。因此早期文献中以 5-HT，Brain, Antidepressants 等 concept 为主。可以继续在 Concept 搜索特定的核心研究点。



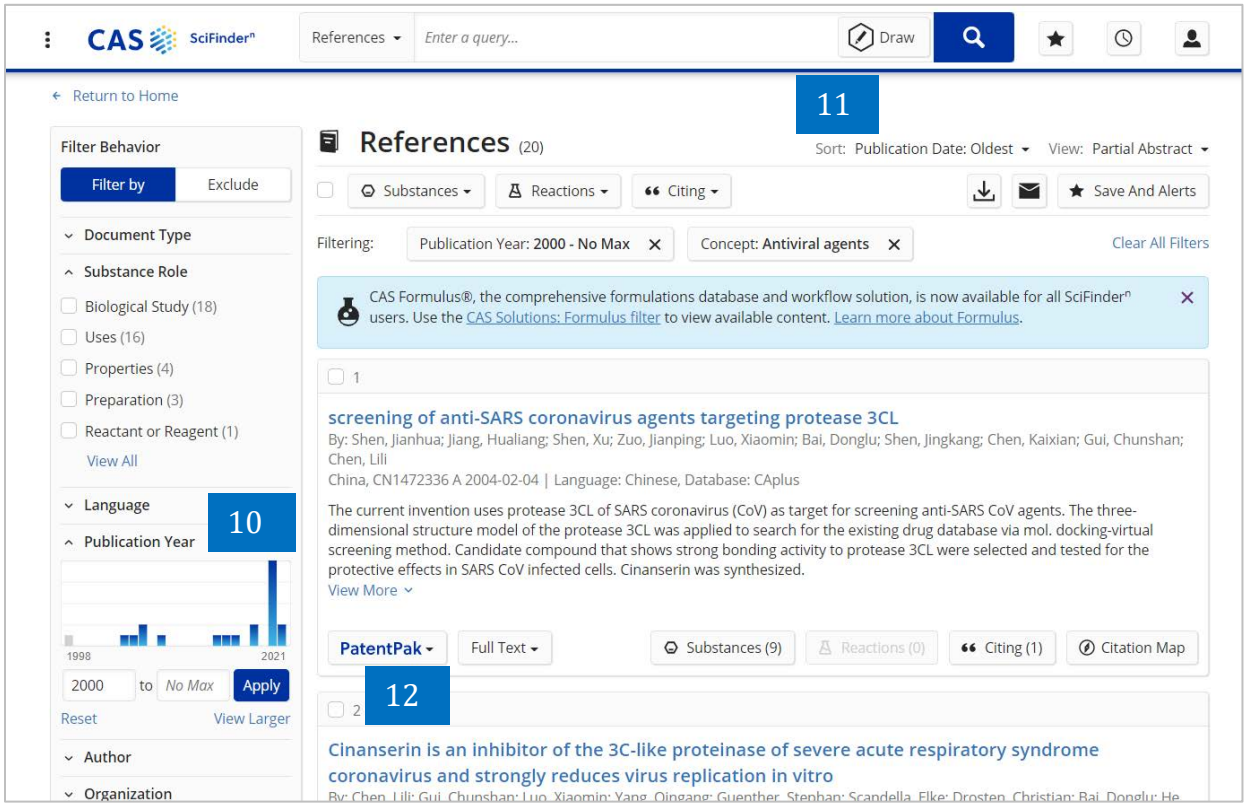
6. 将肉桂硫胺文献结果集的发表年限定为 2000 年之后。



7. 浏览 2000 年后文献中涉及的 Concept（也可以点击 Search, 输入关注的适应症）。

8. 发现 Antiviral agents 的研究结果较多，勾选此词条，进一步获取相关研究信息。

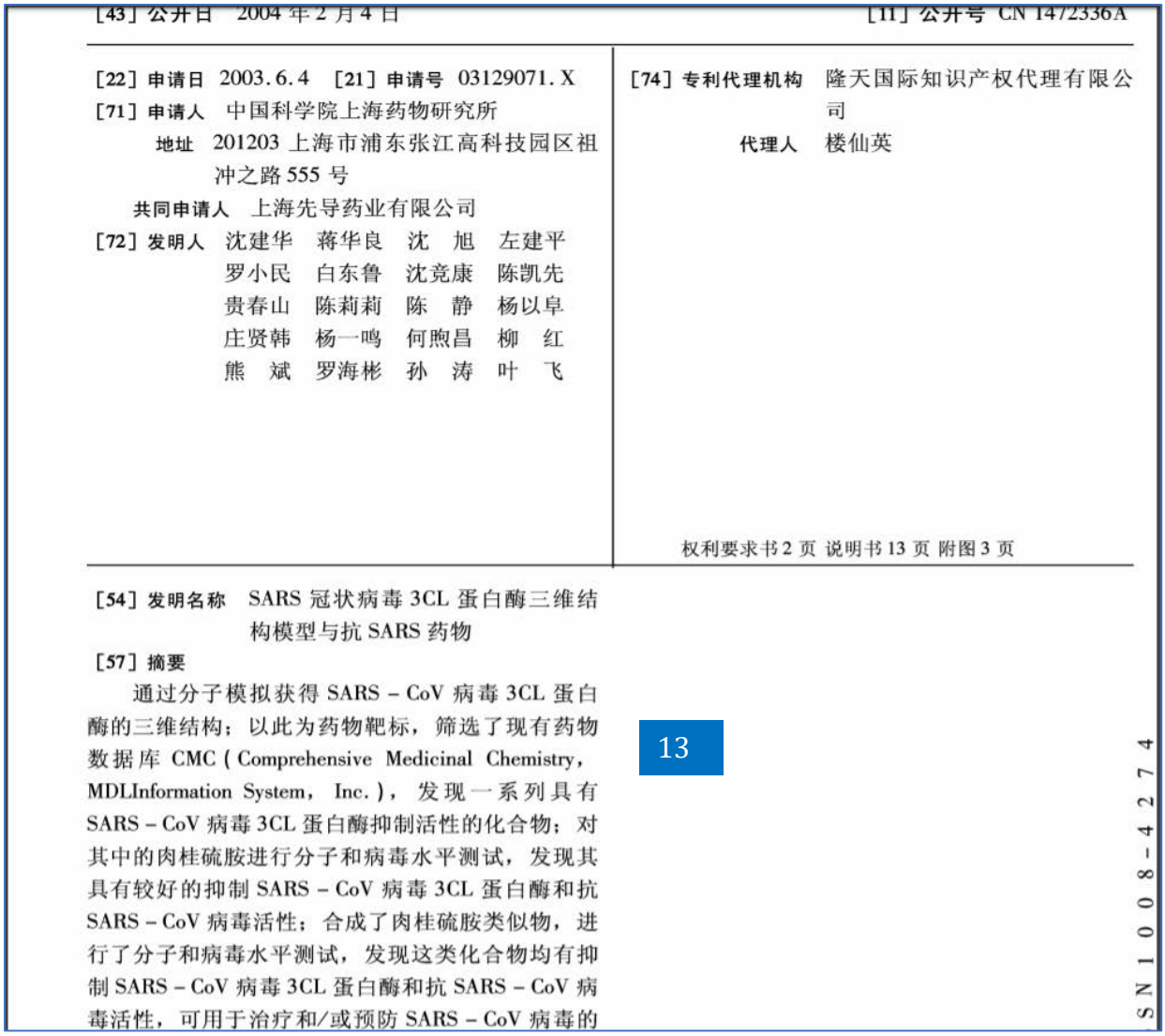
9. 点击 Apply，得到肉桂硫胺用于抗病毒研究方面的文献。



10. 通过 Publication Year 可以发现，有关 Antiviral agents 的文献多发表于 2000 年以后（灰色条表示在 1998 也包含 Antiviral agents 的 Concept 结果，这也是 CAS SciFinder^{n} 中有关肉桂硫胺抗病毒方面的第一篇报道）。

11. Sort 中选择：Publication Date: Oldest，将文献结果集按照发表日期的新旧重新排序。

12. 点击 PatentPak，获取专利全文。



[43] 公开日 2004 年 2 月 4 日 [11] 公开号 CN 1472336A

[22] 申请日 2003.6.4 [21] 申请号 03129071.X

[71] 申请人 中国科学院上海药物研究所

地址 201203 上海市浦东张江高科技园区祖冲之路 555 号

共同申请人 上海先导药业有限公司

[72] 发明人 沈建华 蒋华良 沈 旭 左建平 罗小民 白东鲁 沈竞康 陈凯先 贵春山 陈莉莉 陈 静 杨以阜 庄贤韩 杨一鸣 何煦昌 柳 红 熊 斌 罗海彬 孙 涛 叶 飞

[74] 专利代理机构 隆天国际知识产权代理有限公司

代理人 楼仙英

权利要求书 2 页 说明书 13 页 附图 3 页

[54] 发明名称 SARS 冠状病毒 3CL 蛋白酶三维结构模型与抗 SARS 药物

[57] 摘要

通过分子模拟获得 SARS – CoV 病毒 3CL 蛋白酶的三维结构；以此为药物靶标，筛选了现有药物数据库 CMC (Comprehensive Medicinal Chemistry, MDLInformation System, Inc.)，发现一系列具有 SARS – CoV 病毒 3CL 蛋白酶抑制活性的化合物；对其中的肉桂硫胺进行分子和病毒水平测试，发现其具有较好的抑制 SARS – CoV 病毒 3CL 蛋白酶和抗 SARS – CoV 病毒活性；合成了肉桂硫胺类似物，进行了分子和病毒水平测试，发现这类化合物均有抑制 SARS – CoV 病毒 3CL 蛋白酶和抗 SARS – CoV 病毒活性，可用于治疗和/或预防 SARS – CoV 病毒的

13

SN1008-4274

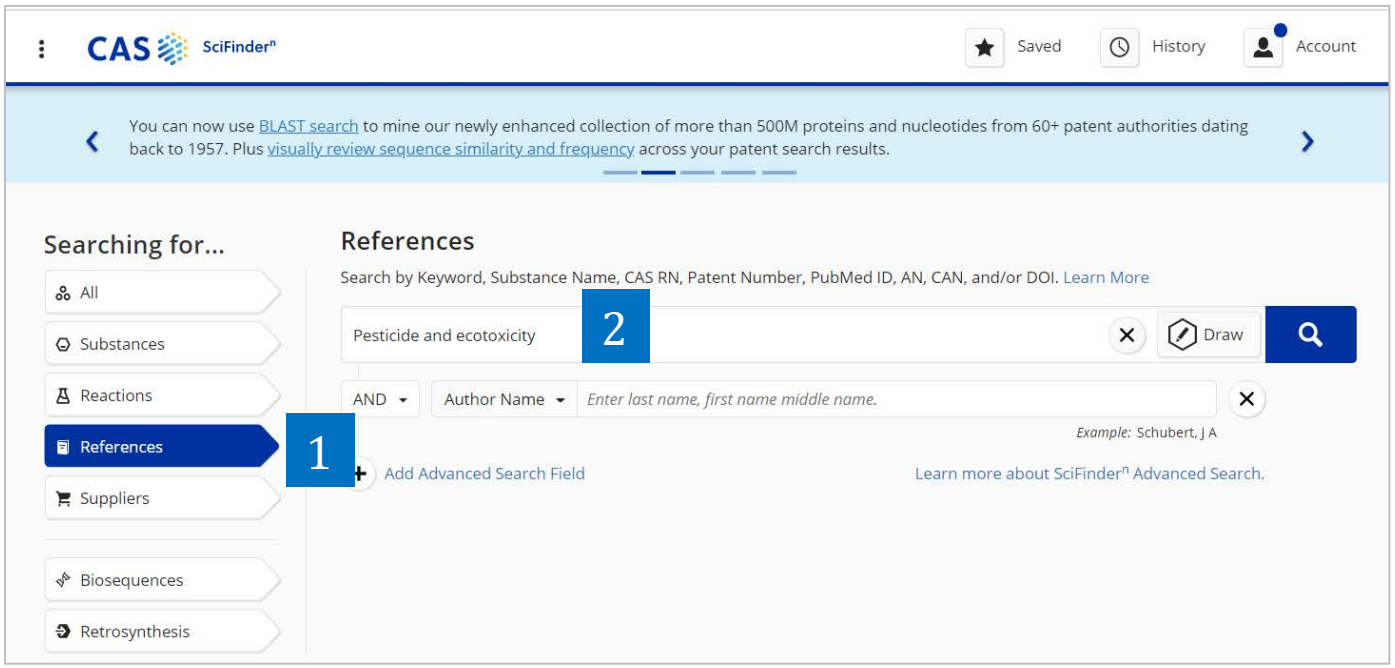
13. 在 CAS SciFinder[n] 中通过 PatentPak 直接下载的专利原文。

布尔逻辑运算符在文献检索中的应用

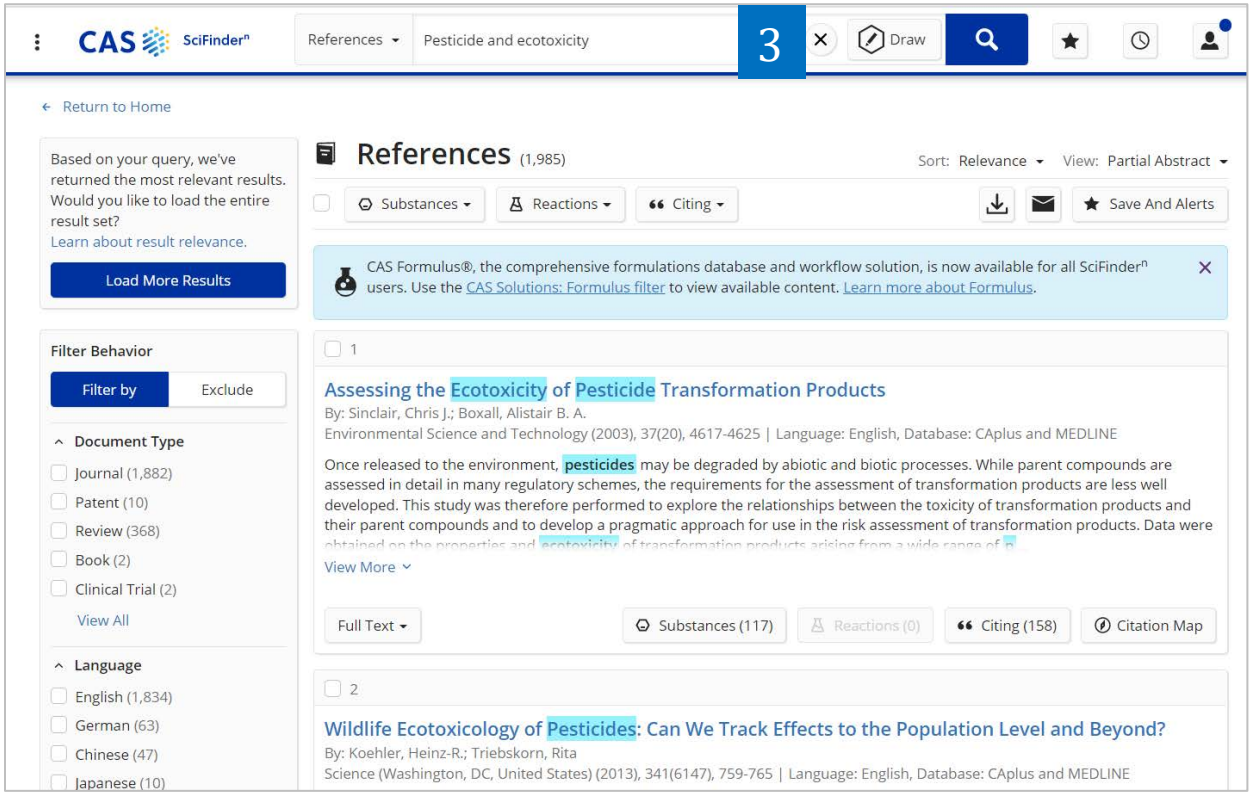
在 CAS SciFinder^{n} 中用文本词语检索文献时，可使用以下布尔逻辑运算符：

1. AND：表示两个（多个）被检索的词语同时出现在同一篇文献中；
2. OR：表示在检索结果中出现任意一个被检索词即可；
3. NOT：排除某个被检索词出现在检索结果中；
4. “ ”：表示被检索的是一个确定的词语或词组；
5. ( )：在检索式中有多个布尔逻辑运算符时，可用括号指定不同布尔逻辑运算符间的运行顺序。

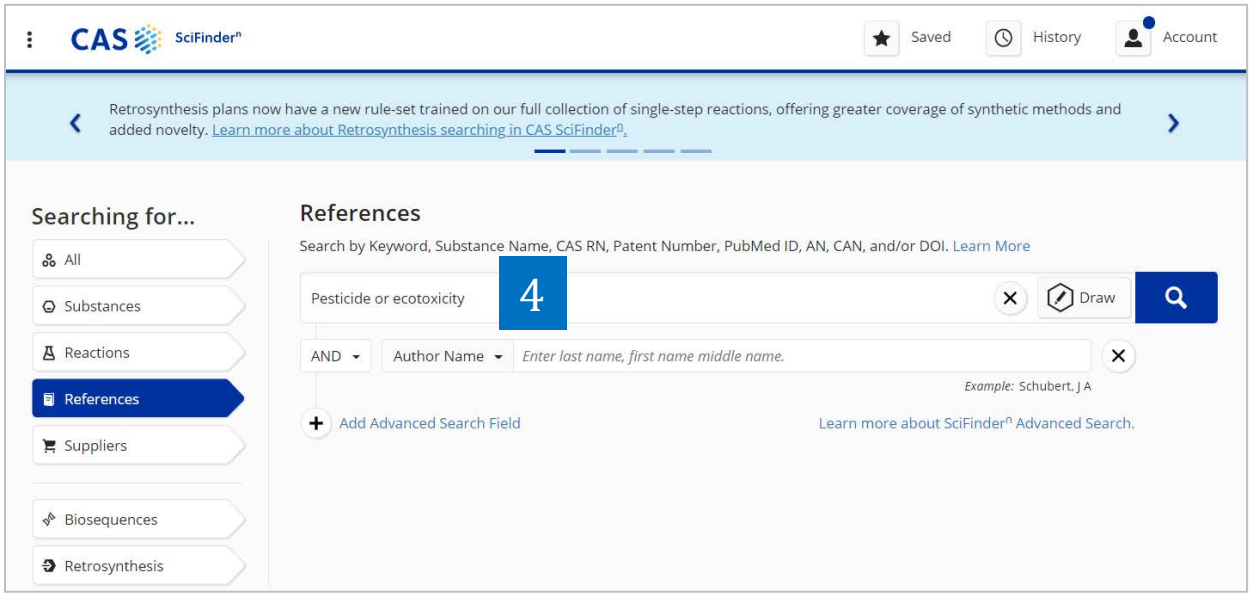
注：CAS SciFindern 中布尔逻辑运算符默认的运算顺序是 OR > AND > NOT



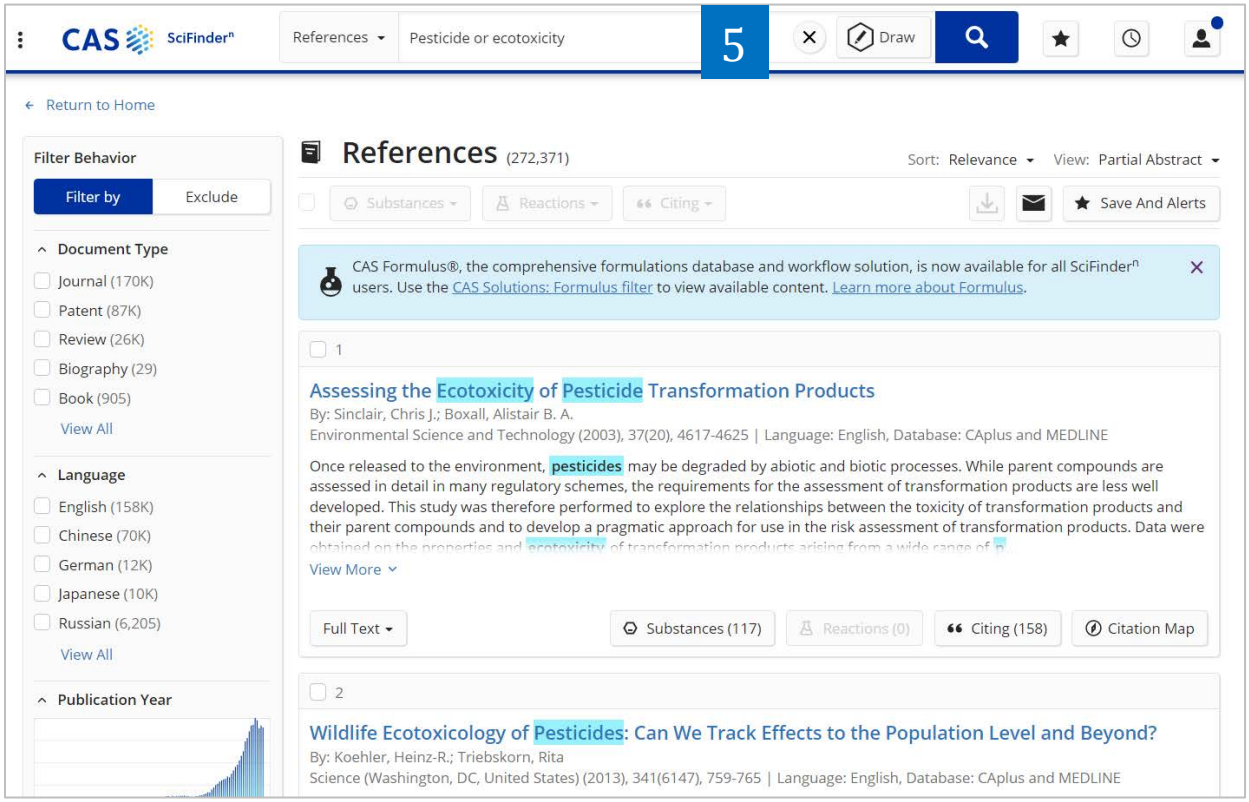
1. 点击 References。
2. 使用 AND 连接两个检索词，如 Pesticide and ecotoxicity，表示在检索结果中 Pesticide 和 ecotoxicity 同时出现。



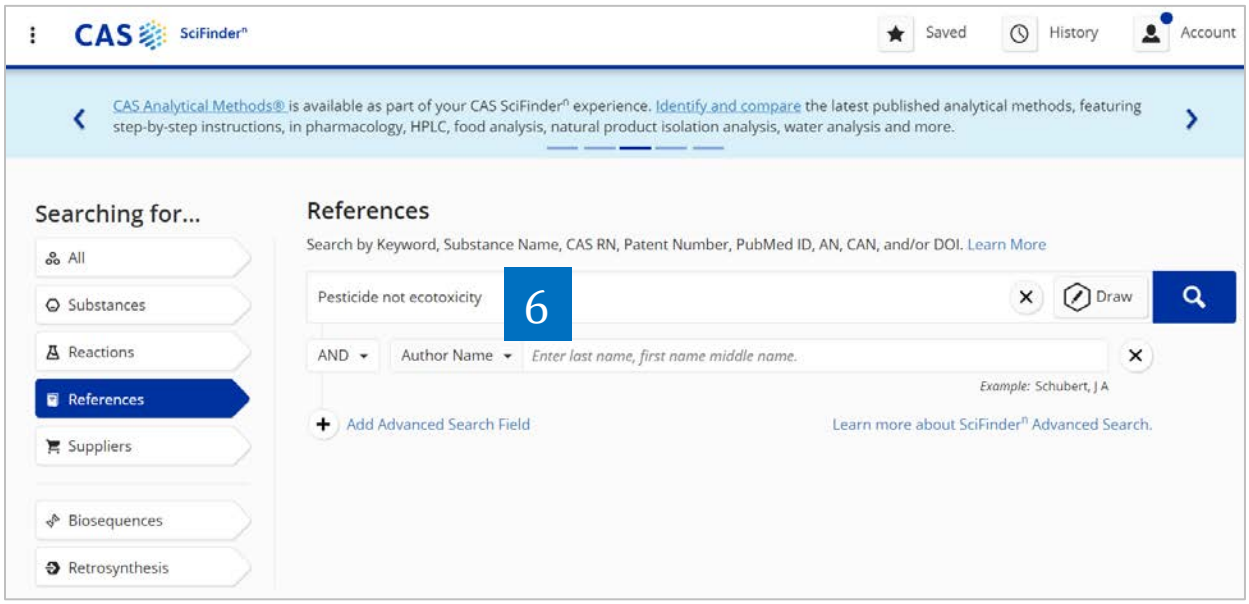
3. 所得结果集。



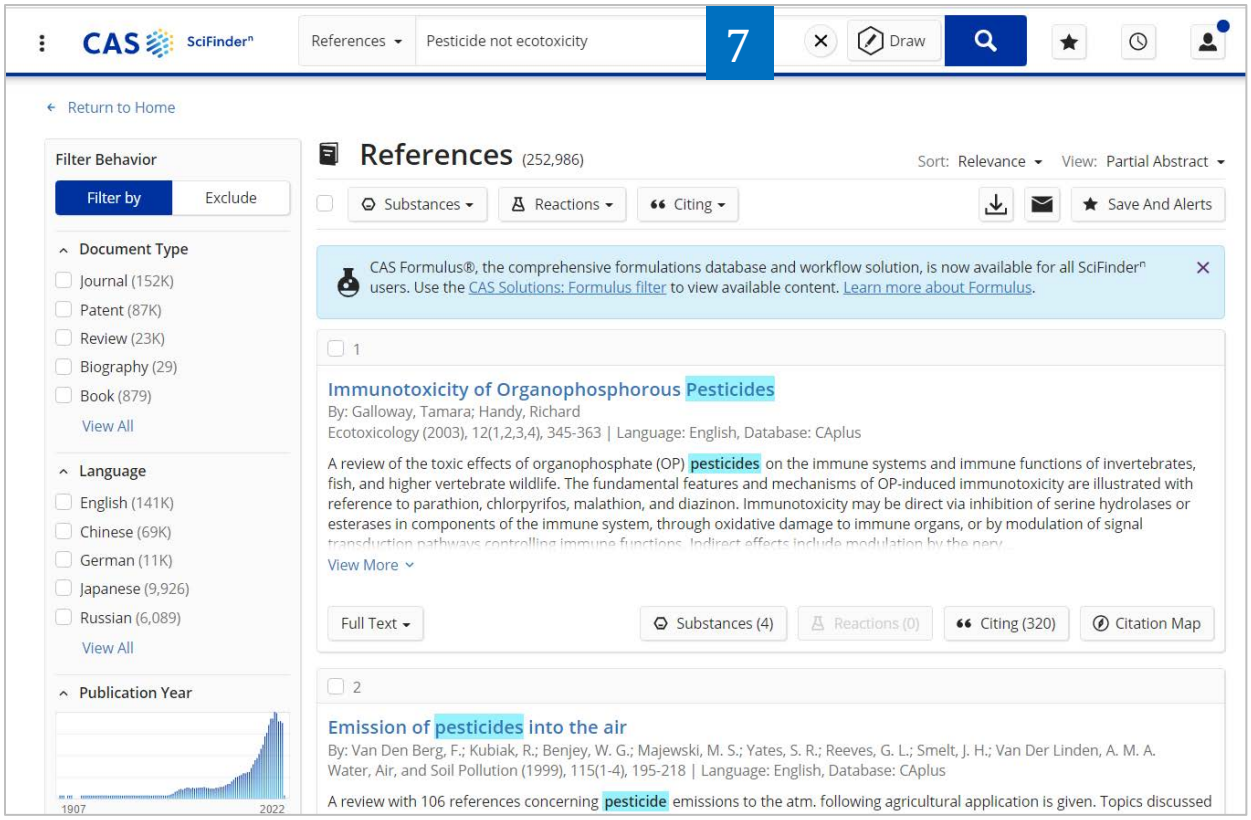
4. 使用 OR 连接两个检索词，如 Pesticide and ecotoxicity，表示 Pesticide 和 ecotoxicity 任意一个出现即可。



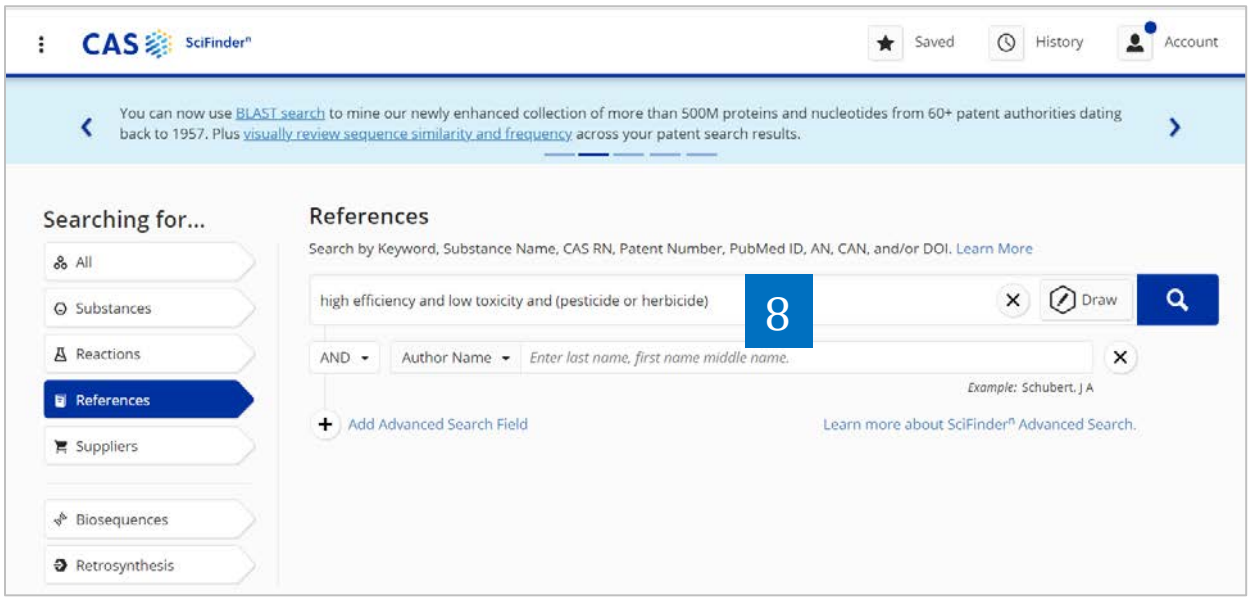
5. 所得结果集。



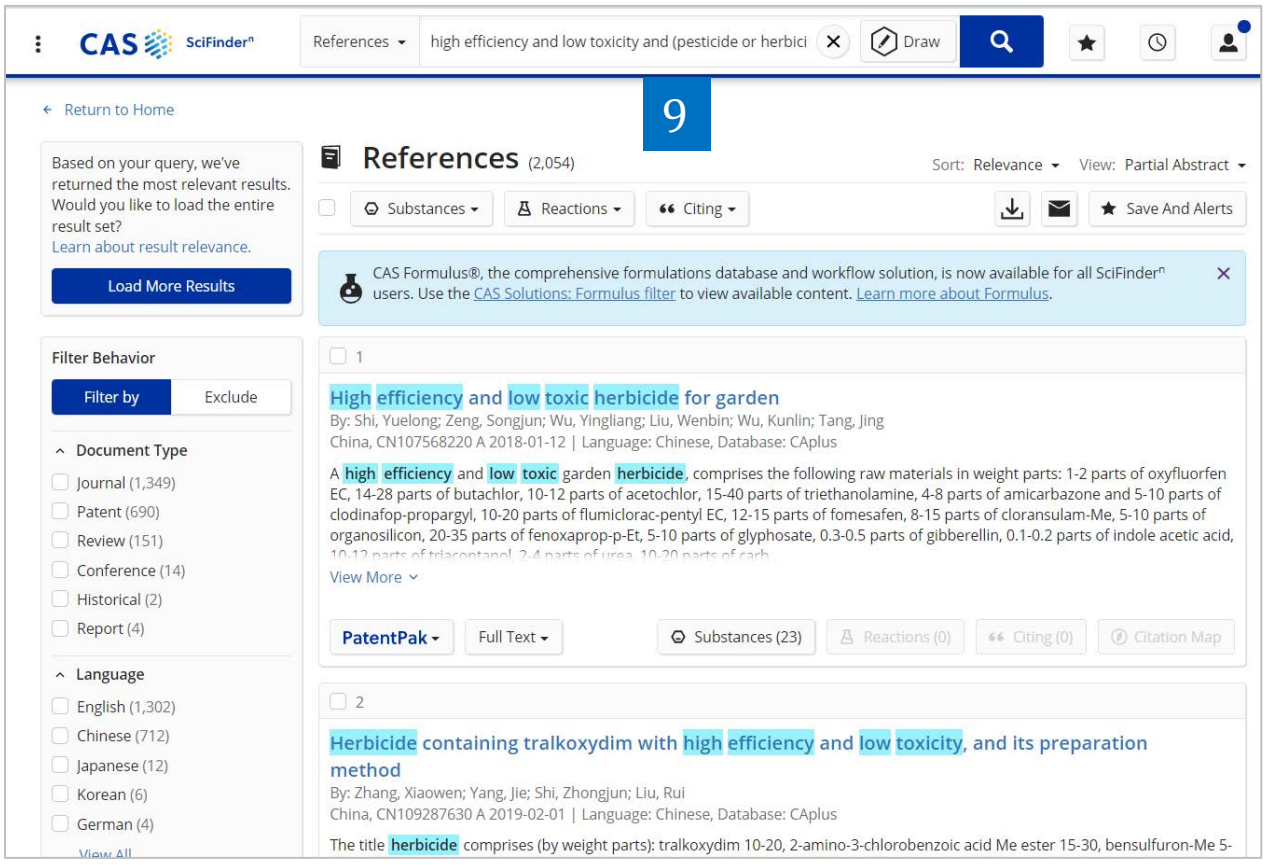
6. 使用 NOT 连接两个单词或词组，如 Pesticide not ecotoxicity，则得到只包含 Pesticide 而去除 ecotoxicity 的结果。


CAS SciFinder
References
Pesticide not ecotoxicity
7
Draw
Return to Home
Filter Behavior
Filter by
Exclude
Document Type
Journal (152K)
Patent (87K)
Review (23K)
Biography (29)
Book (879)
View All
Language
English (141K)
Chinese (69K)
German (11K)
Japanese (9,926)
Russian (6,089)
View All
Publication Year
1907
2022
References (252,986)
Sort: Relevance
View: Partial Abstract
Substances
Reactions
Citing
Save And Alerts
CAS Formulus®, the comprehensive formulations database and workflow solution, is now available for all SciFinder users. Use the CAS Solutions: Formulus filter to view available content. Learn more about Formulus.
1
Immunotoxicity of Organophosphorous Pesticides
By: Galloway, Tamara; Handy, Richard
Ecotoxicology (2003), 12(1,2,3,4), 345-363 | Language: English, Database: CAplus
A review of the toxic effects of organophosphate (OP) pesticides on the immune systems and immune functions of invertebrates, fish, and higher vertebrate wildlife. The fundamental features and mechanisms of OP-induced immunotoxicity are illustrated with reference to parathion, chlorpyrifos, malathion, and diazinon. Immunotoxicity may be direct via inhibition of serine hydrolases or esterases in components of the immune system, through oxidative damage to immune organs, or by modulation of signal
View More
Full Text
Substances (4)
Reactions (0)
Citing (320)
Citation Map
2
Emission of pesticides into the air
By: Van Den Berg, F.; Kubiak, R.; Benjey, W. G.; Majewski, M. S.; Yates, S. R.; Reeves, G. L.; Smelt, J. H.; Van Der Linden, A. M. A.
Water, Air, and Soil Pollution (1999), 115(1-4), 195-218 | Language: English, Database: CAplus
A review with 106 references concerning pesticide emissions to the atm. following agricultural application is given. Topics discussed

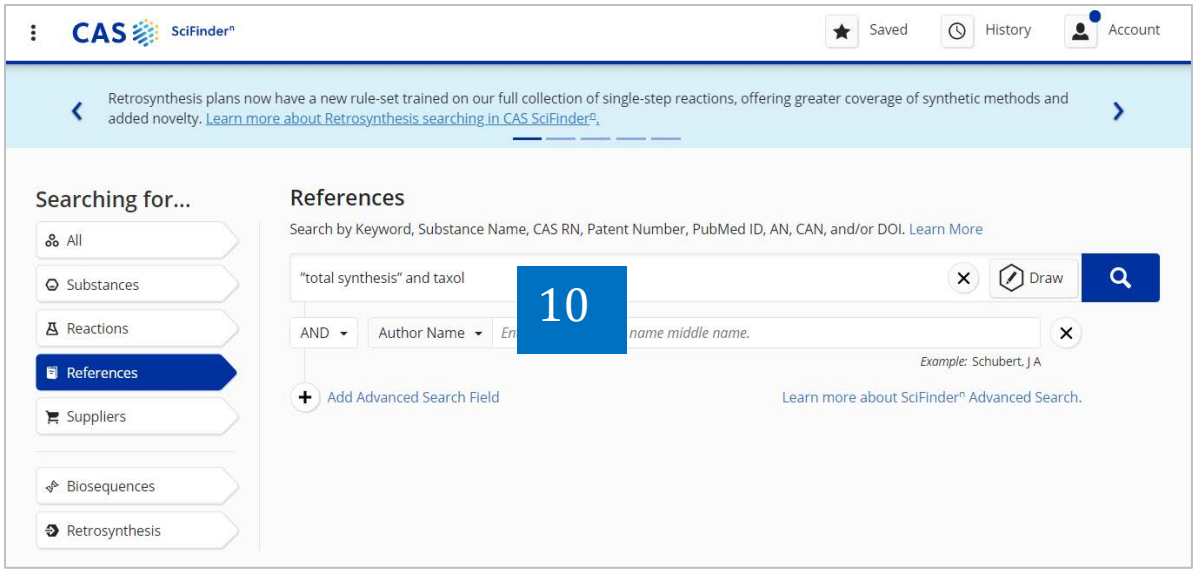
7. 所得结果集。


CAS SciFinder
Saved
History
Account
You can now use BLAST search to mine our newly enhanced collection of more than 500M proteins and nucleotides from 60+ patent authorities dating back to 1957. Plus visually review sequence similarity and frequency across your patent search results.
Searching for...
All
Substances
Reactions
References
Suppliers
Biosequences
Retrosynthesis
References
Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. Learn More
high efficiency and low toxicity and (pesticide or herbicide)
8
Draw
AND
Author Name
Enter last name, first name middle name.
Example: Schubert, J A
Add Advanced Search Field
Learn more about SciFinder Advanced Search.

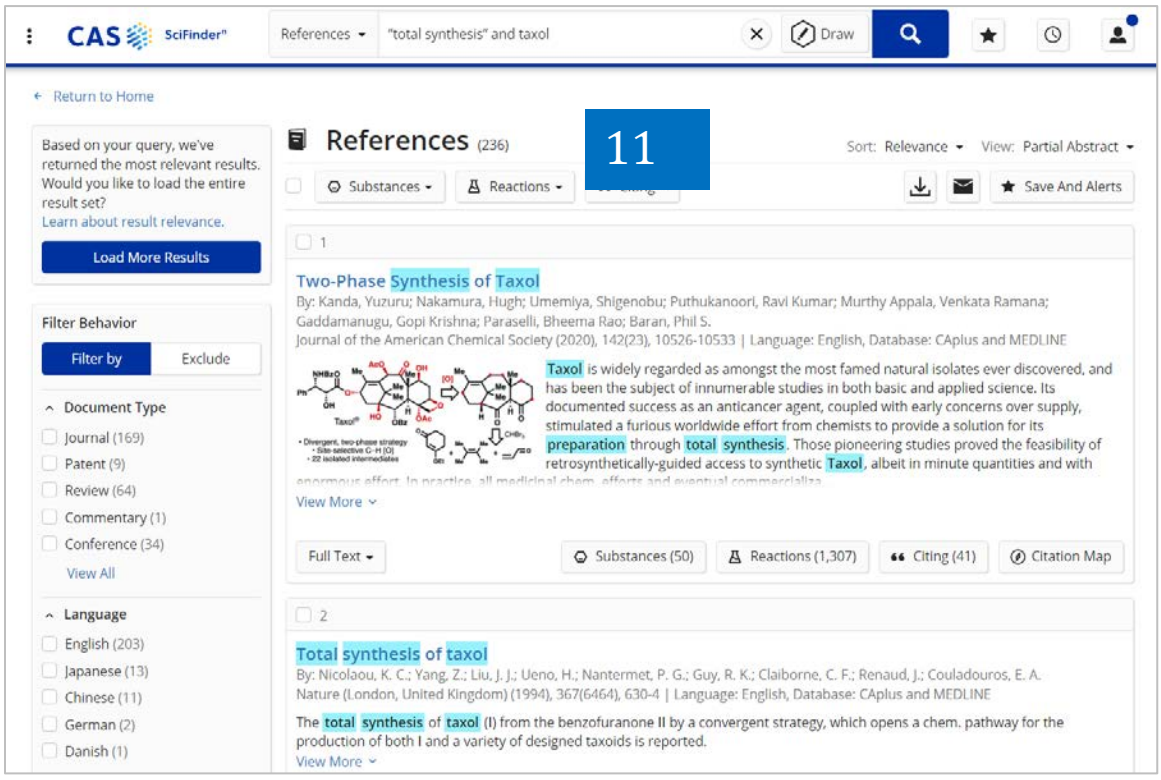
8. 当使用多个布尔逻辑运算符时，可使用括号( )，指定逻辑运算符的运算顺序。如 high efficiency and low toxicity and (pesticide or herbicide)，此时表示优先运算 pesticide or herbicide。



9. 所得结果集。



10. 引号“ ”，表示被检索的词（词组）为确定的，不能出现不同拼写或词组被拆分的情况，如 "total synthesis" and taxol。此时指 total synthesis 是一个固定词组。



11. 所得结果集。

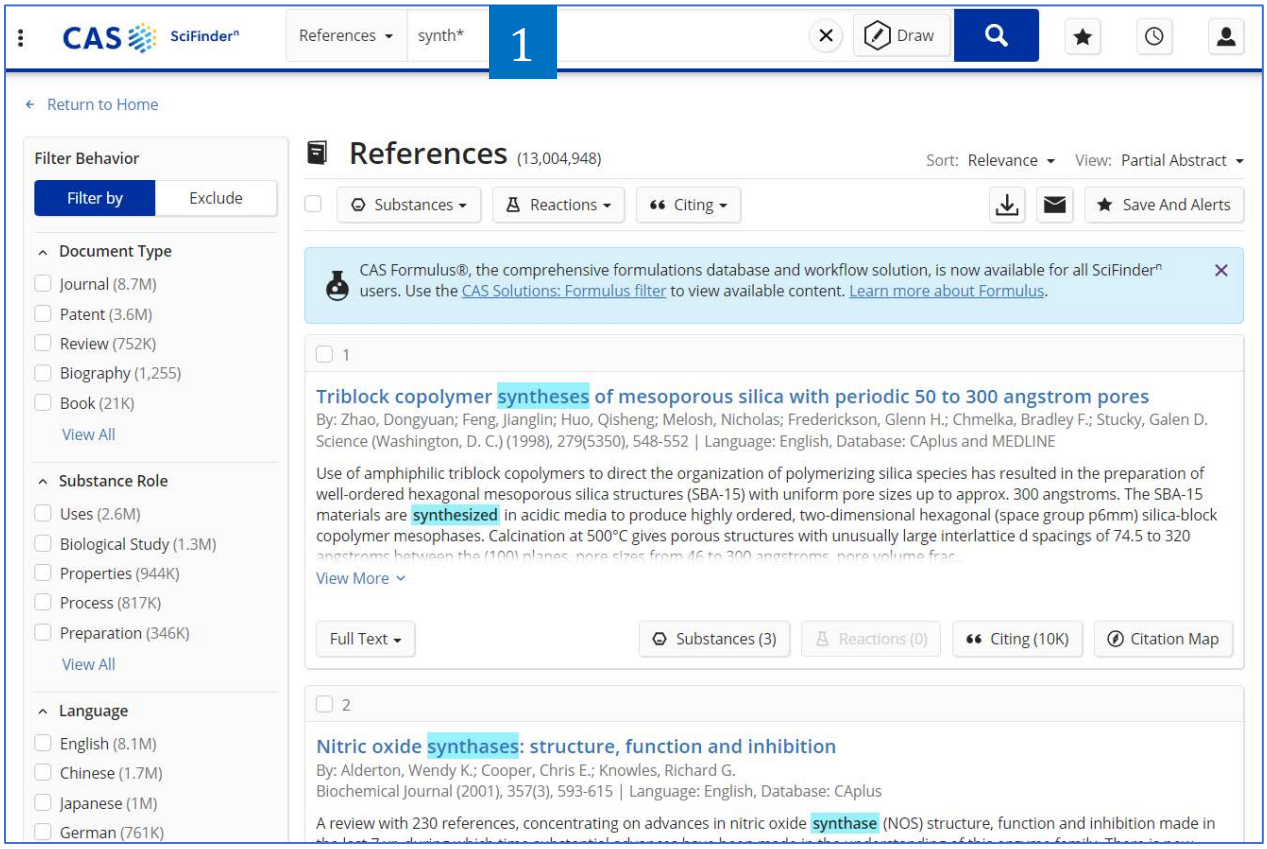
通配符的使用

在 CAS SciFinder[n] 中进行文献检索时，支持使用通配符进行更广泛的检索。可使用的通配符有*和？：

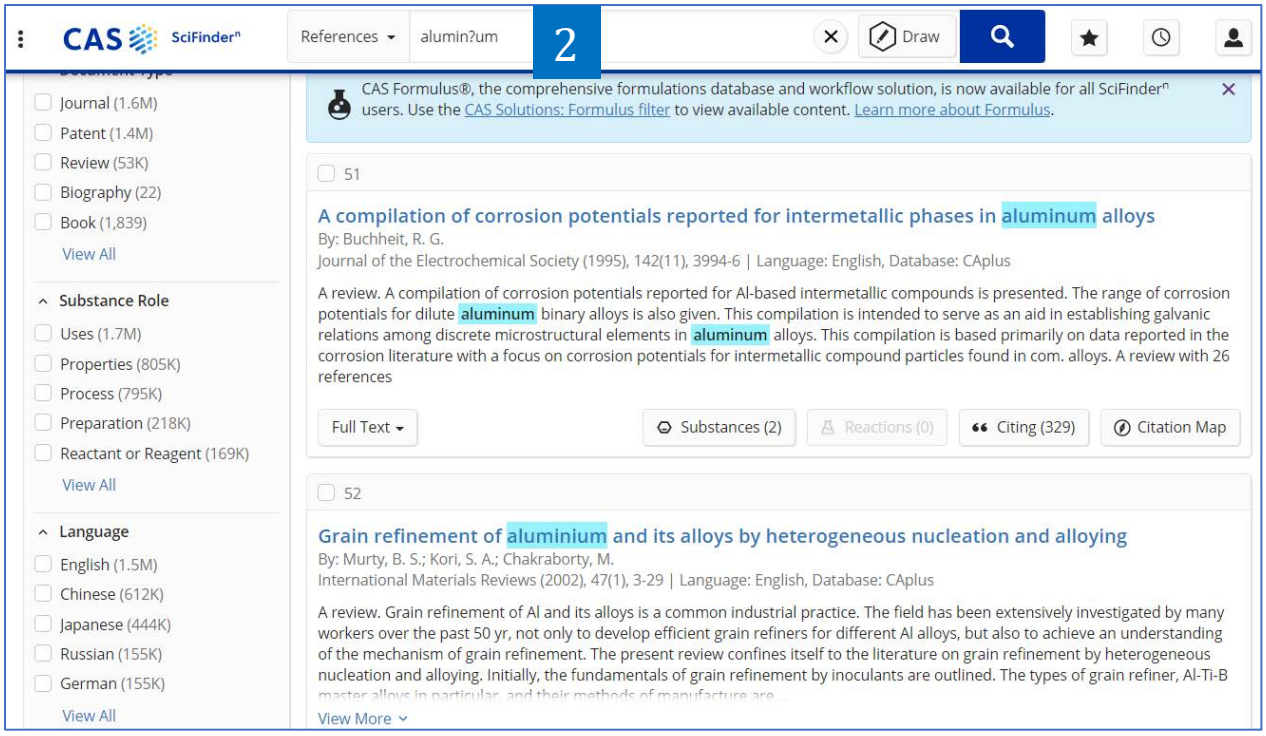
*代表 0 或多个字符；？ 代表 0 或一个字符。

通配符可位于词中间或词尾，不可位于词首。

使用通配符检索时，匹配到的词语可能位于文献的标题、摘要、关键词、CAplus Concept、Medline MeSH 或 Substances 中。



1. 输入 synth*，会匹配到 synthesis，syntheses，synthetic 和 synthesizing 等词。



2. 输入 alumin?um，会匹配到 aluminum 和 aluminium 等词。

注：

I. 一个检索词中至少含有 3 个非通配符字符，否则会检索到任何词语；

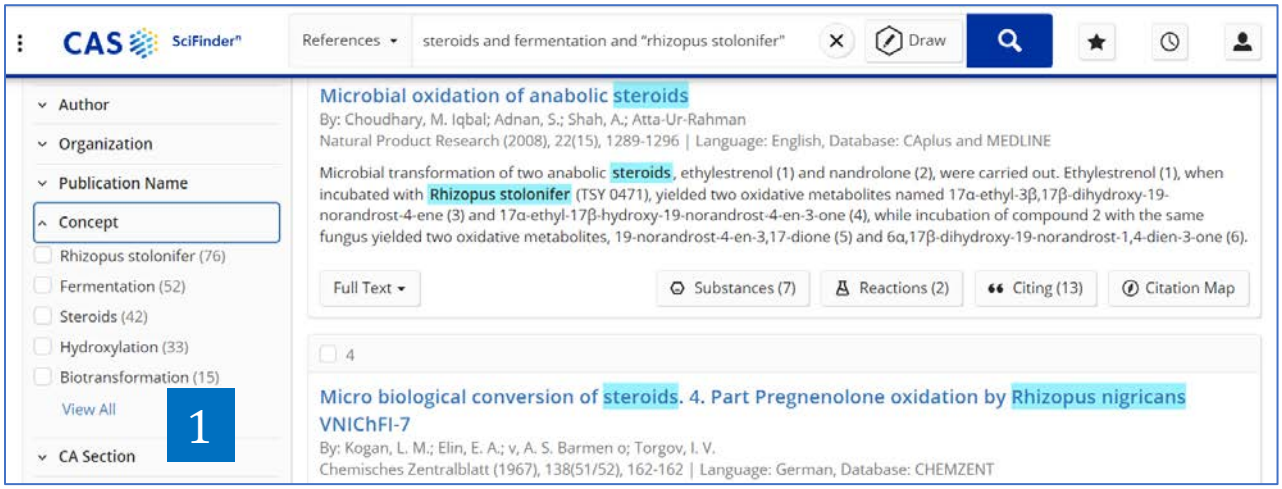
II. 一个检索词中最好只用一个通配符，否则 CAS SciFindern 会忽略通配符，如输入(R*,S*,R*,S*)-2,3,6,7-Tetrachlorooctane，则得到的检索结果则为(R*,S*,R*,S*)-2,3,6,7-Tetrachlorooctane；

III. 一个检索式中不可超过 5 个通配符, 否则会出错。

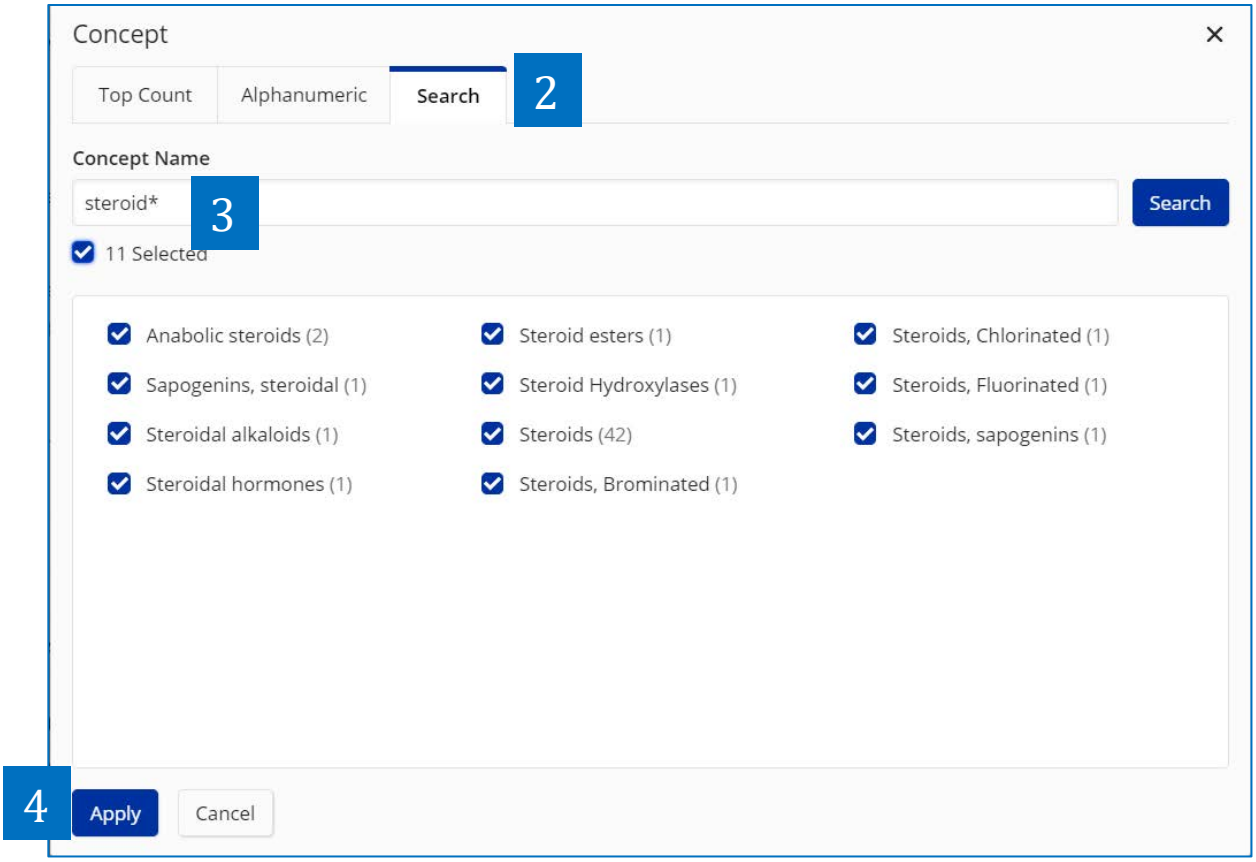
更详细说明可参考：https://scifinder-n.cas.org/help/#t=Searching_in_SciFinder-n%2FReferences_Search%2FReference_Wildcard_Searching_Rules.htm&rhsearch=wildcard&rhhlterm=wildcard&rhsyns=%20

Concept 筛选项中支持使用通配符 “*” 进行检索

注：通配符 “*” 代表 0 或多个字符；且可用于词中或者词尾。



1. 在文献结果集页面左侧，点击 Concept 选项下的 View All, 展开 Concept 列表。

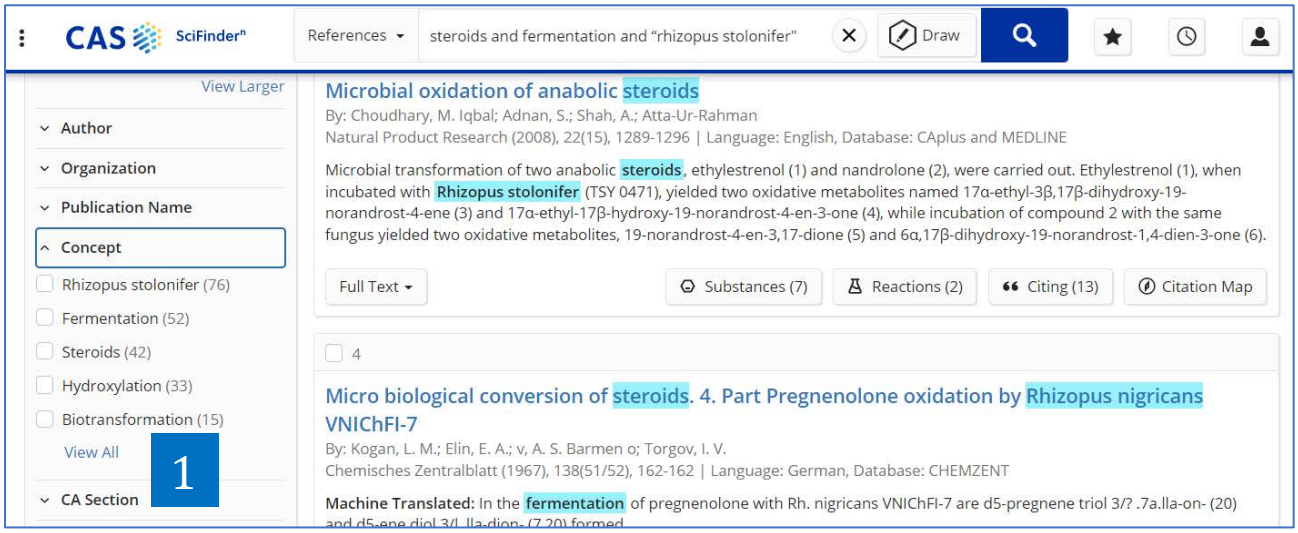


2. 点击 Search。
3. 输入检索词。可以添加星号（*）进行扩词，比如 steroid*，可以检索到 steroid, steroids, steroidal 等概念词，点击 Select All on Page。
4. 点击 Apply，获得含有此页面概念词的所有文献。

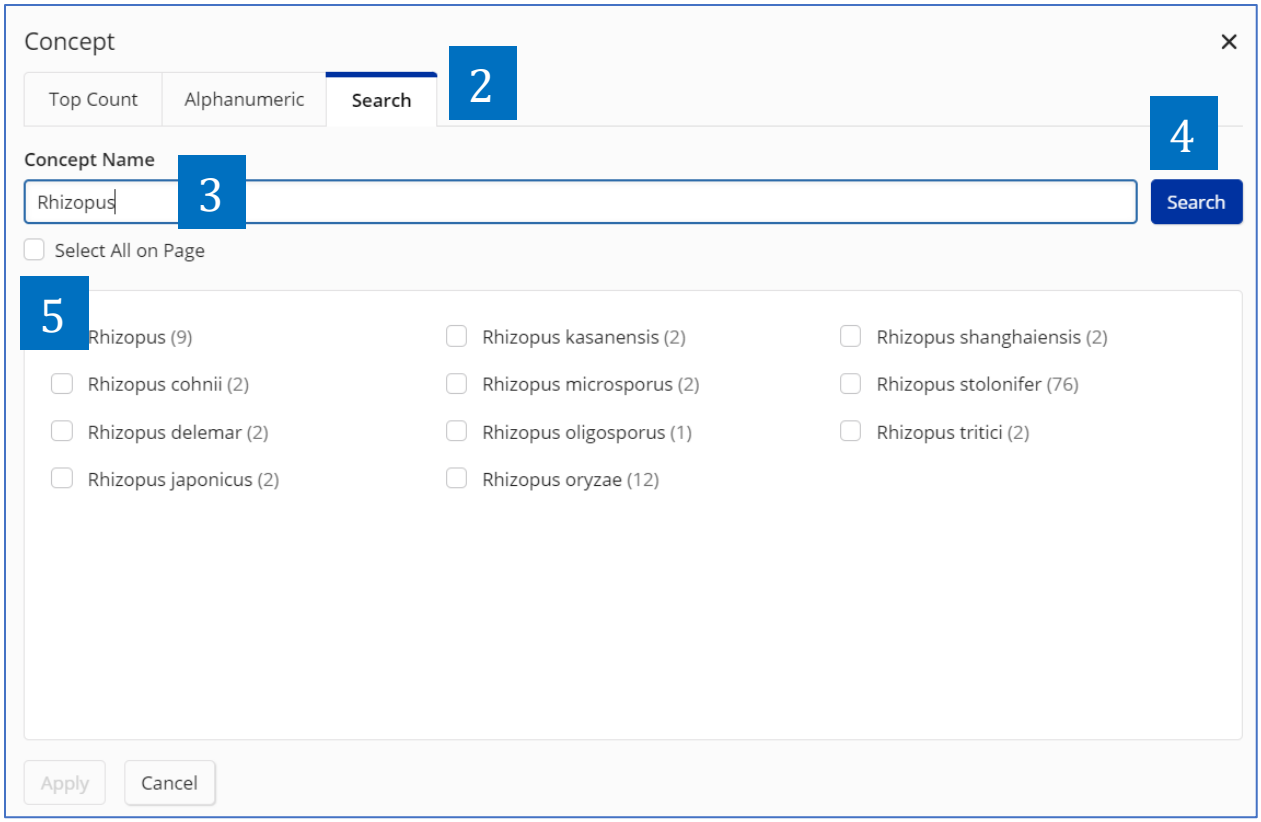
文献结果集的聚类筛选项中的全选功能

在文献检索结果集左侧的聚类筛选项里，点击 View All 展开所有的子项后，可以通过点击 Search 在所有子项中进行检索，同时可以通过 Select All on Page 全部选中检索到的子项。在 Concept, CA Section, Organization, Publication Name，Author 等分析项中都提供子项全选功能。

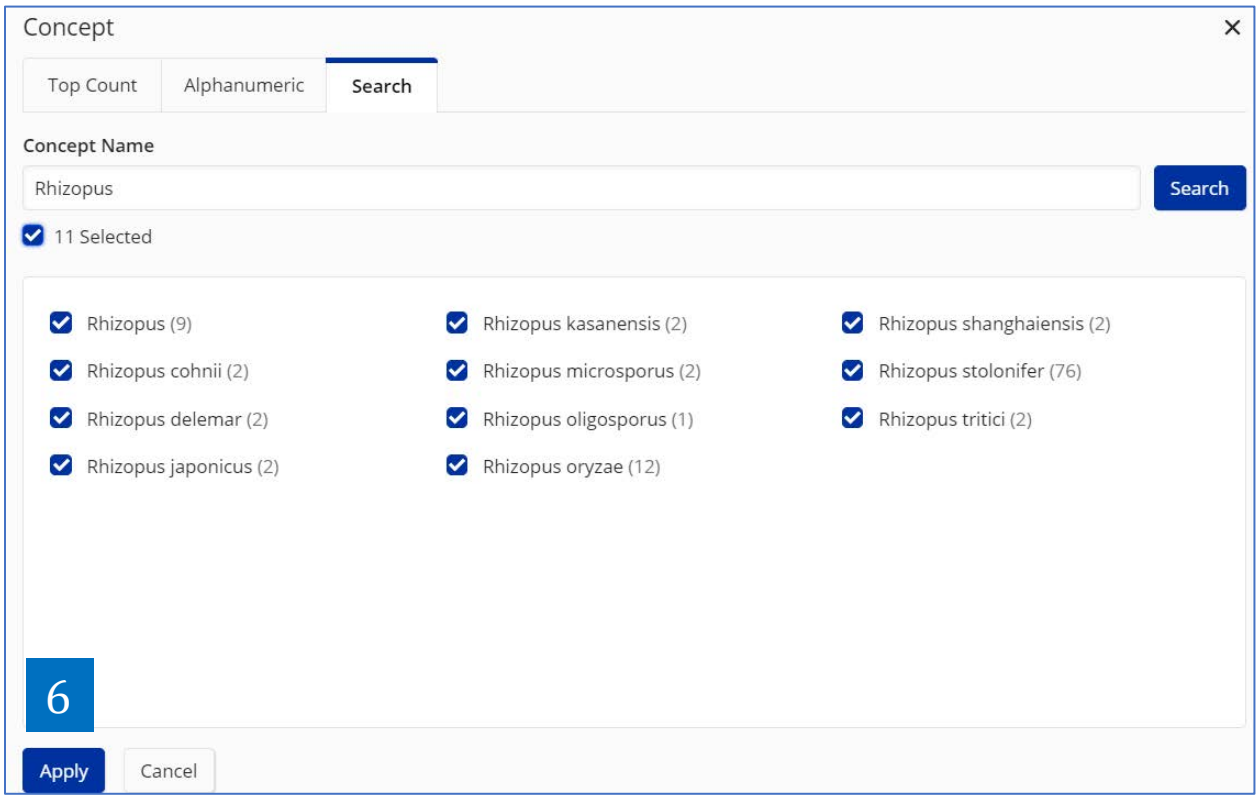
如下所示的是在 Concept 中对检索得到的子项进行全选的操作。



1. 点击 View All，展开所有的子项。

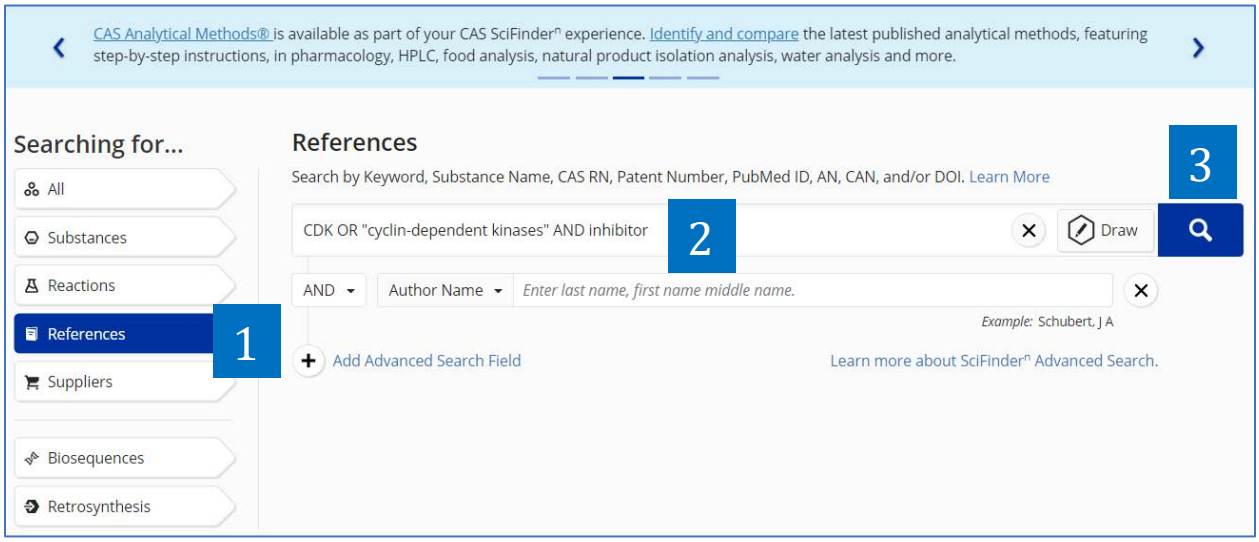


2. 点击 Search，在展开所有子项中进行检索。
3. 输入检索词。
4. 点击 Search 开始检索。
5. 勾选 Select All on Page，可以全部选中检索得到的子项。

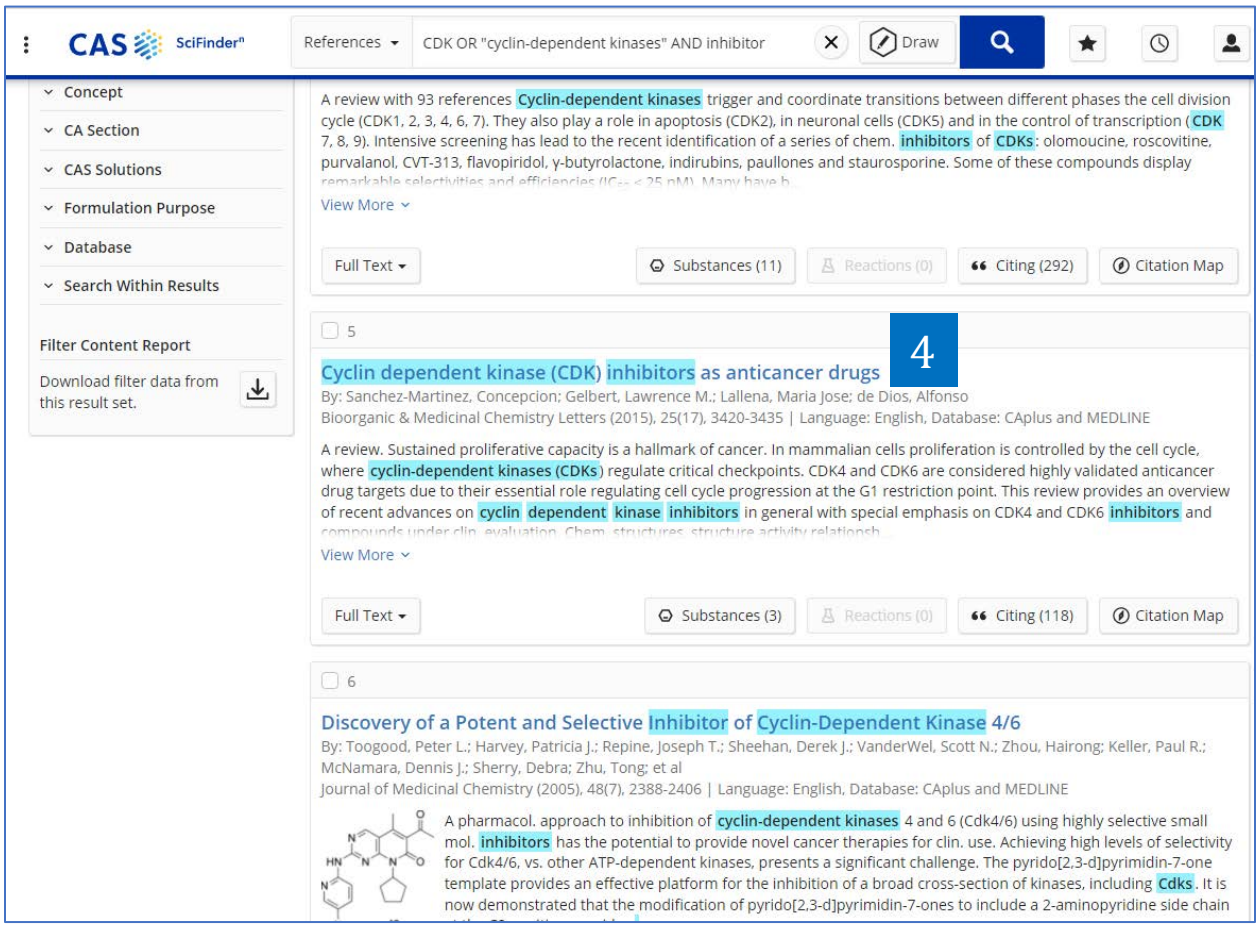


6. 选中全部子项后，点击 Apply 获得筛选后的结果集。

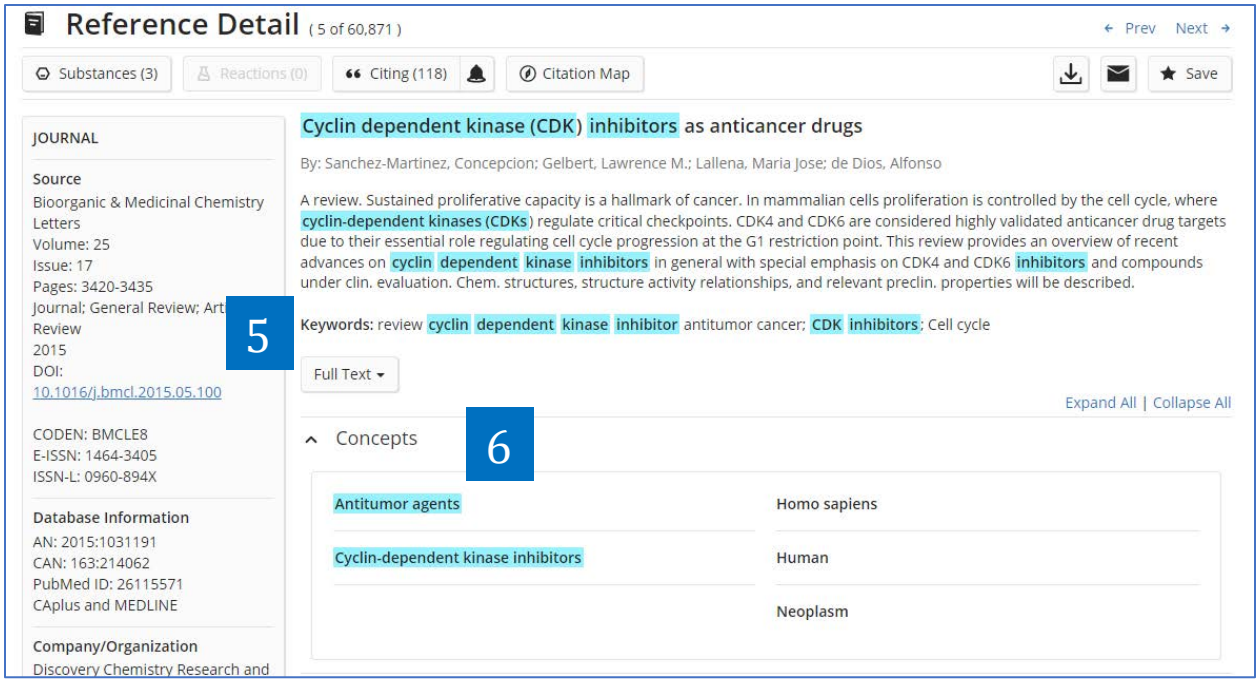
查看文献中的关键词

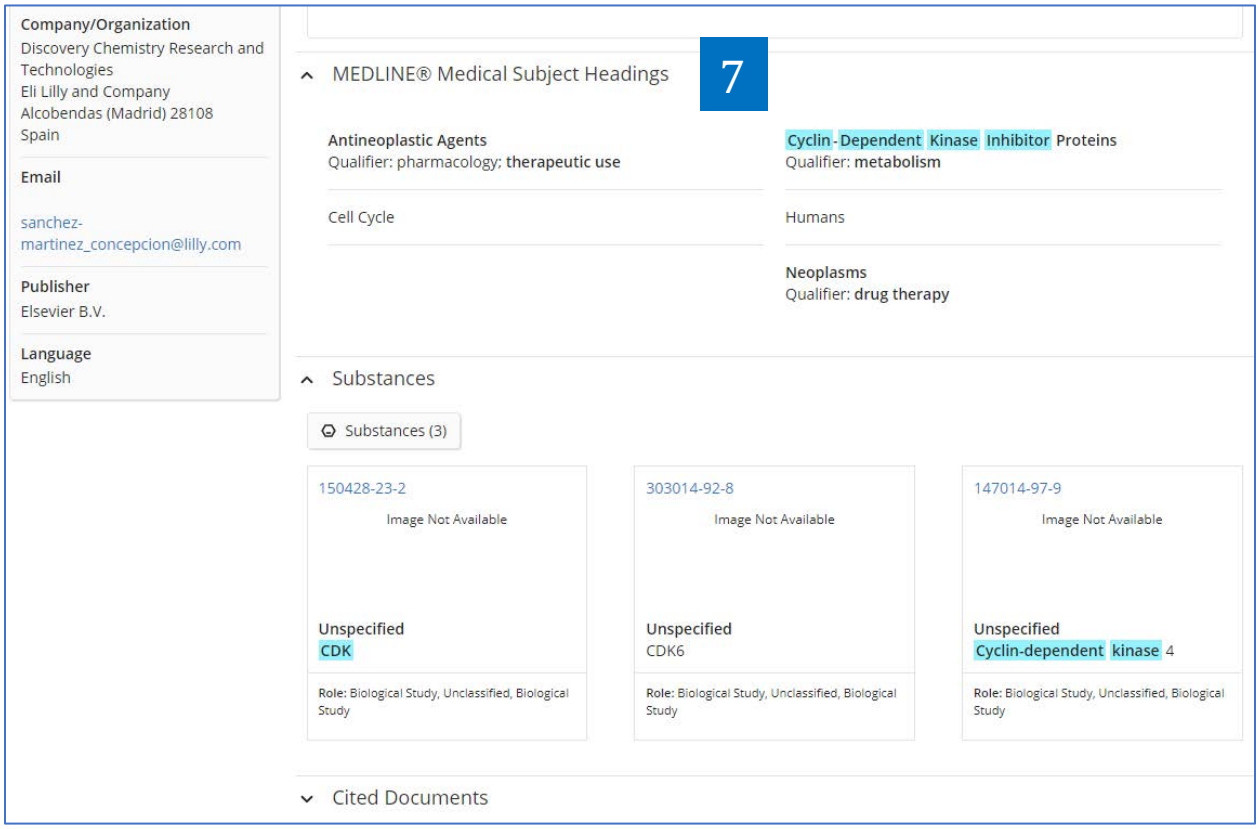


1. 选择 References
2. 输入检索式
3. 开始检索



4. 点击文献题名，查看文献详情





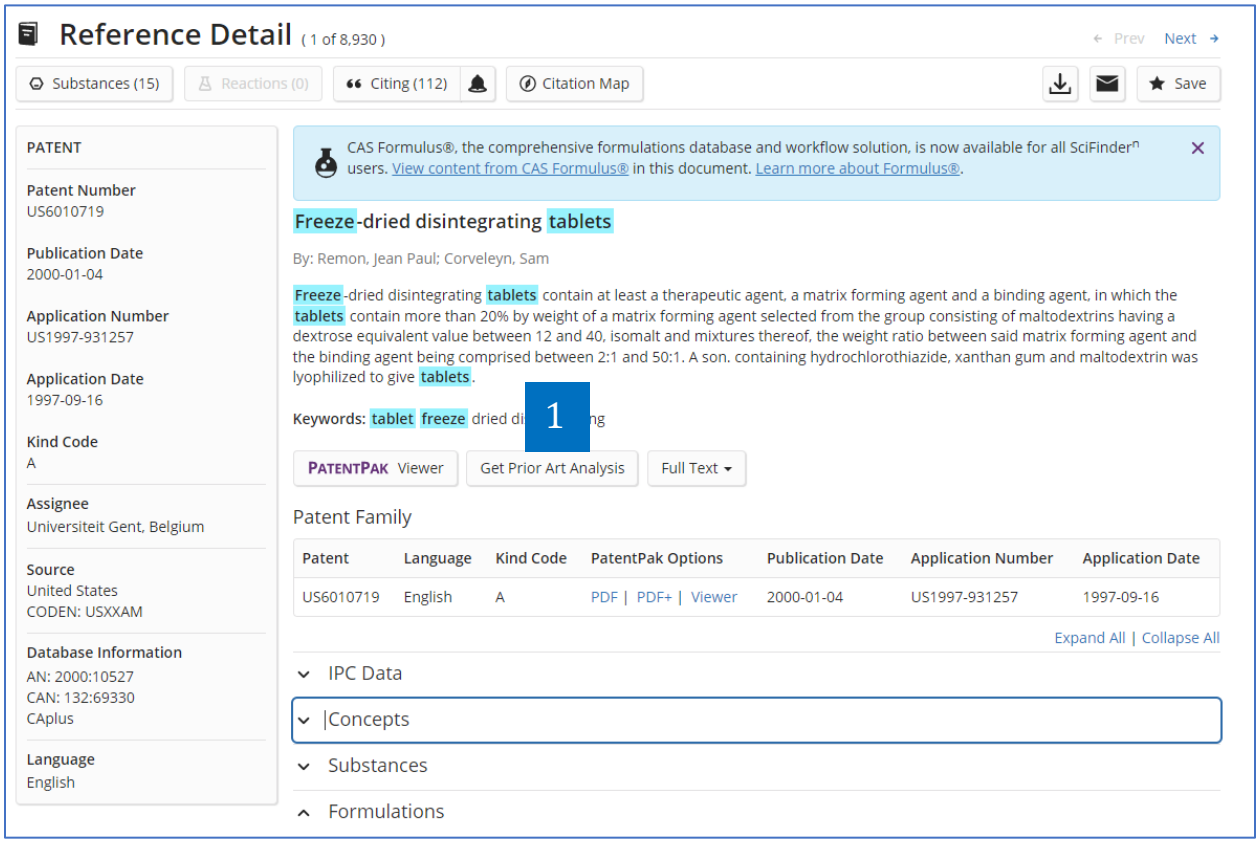
5. Keywords 即为该文献的关键词

6. Concepts 为 CAS 词库中的受控词，是 CAS 科学家人工解读后得出的信息

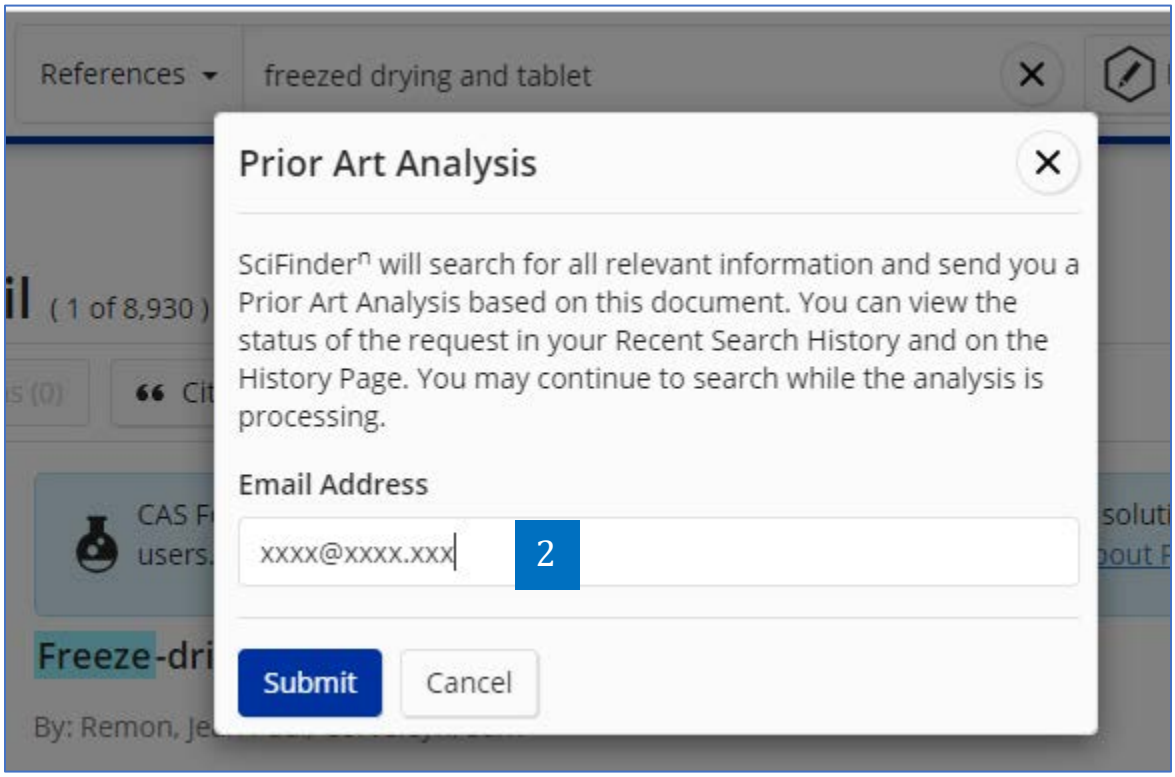
7. 如果该文献同时被 Medline 数据库收录，文献信息详情中也将展示医学主题词表（MeSH）中的词语

现有技术分析

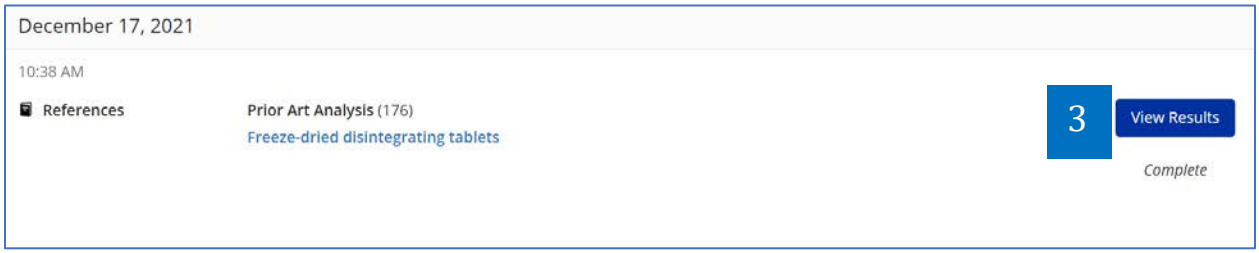
在 CAS SciFinder^n 中获取目标专利后，可点击 Get Prior Art Analysis 基于本专利的 Concept、Substances、IPC 等进行现有技术分析。



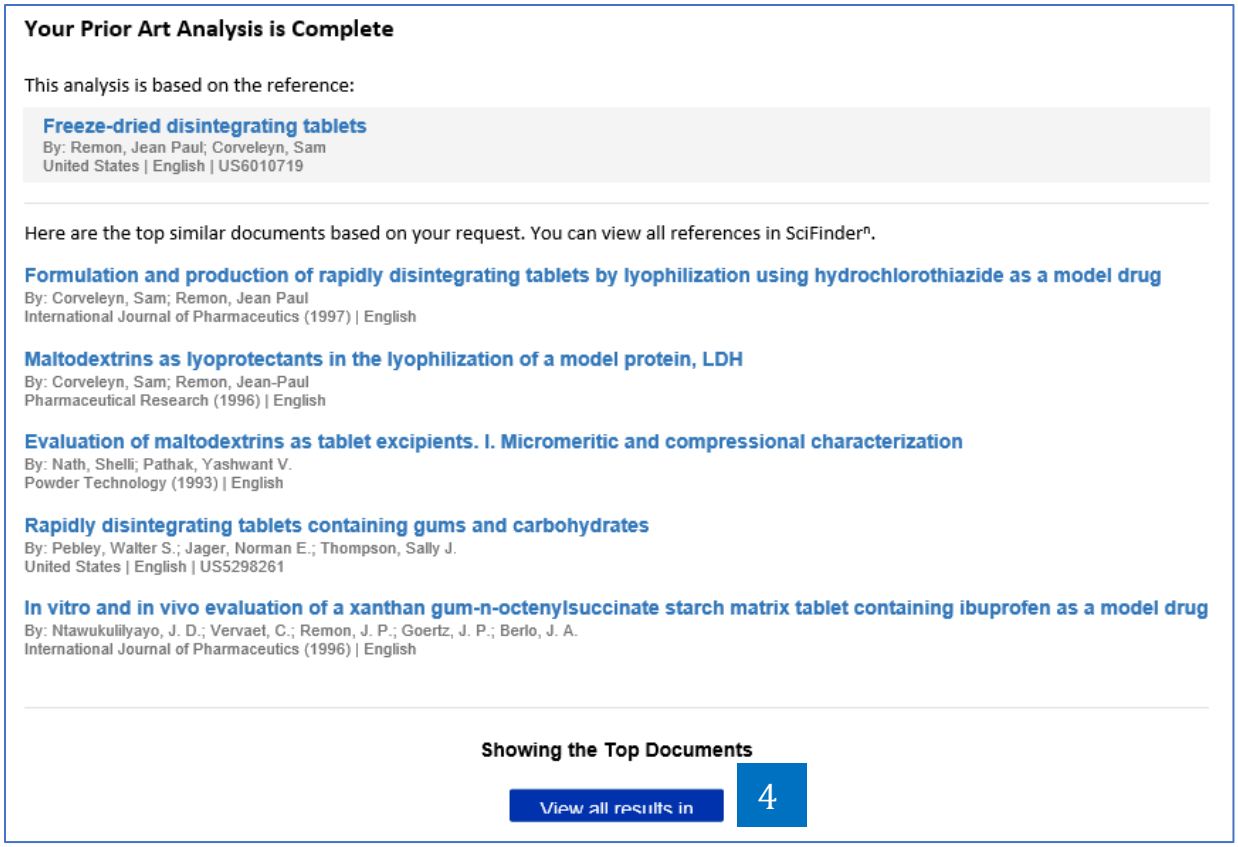
1. 点击专利文献标题，进入 Reference Detail 页面，点击“Get Prior Art Analysis”。



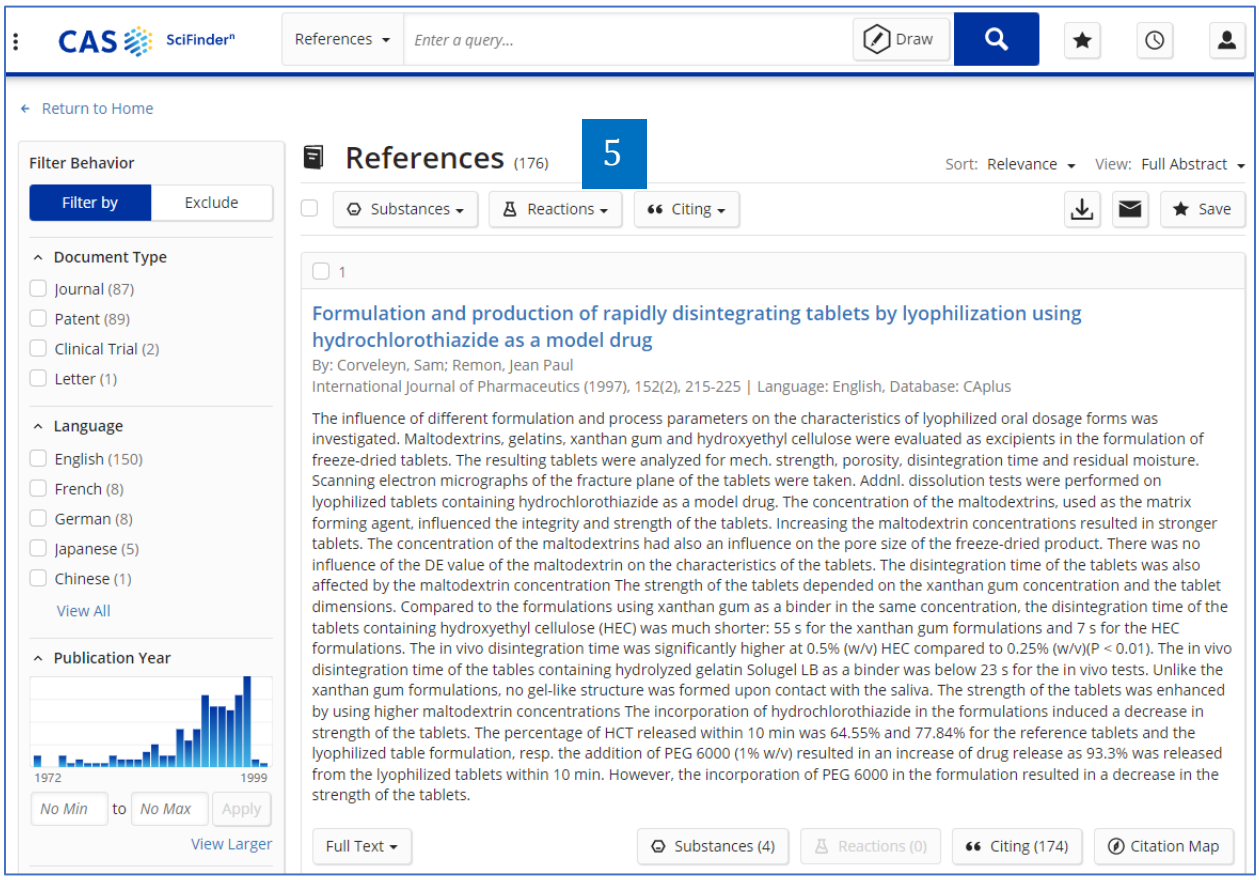
2. 在此处输入正确的邮箱，然后点击 Submit。



3. 提交现有技术分析后，可以在检索历史中查看。

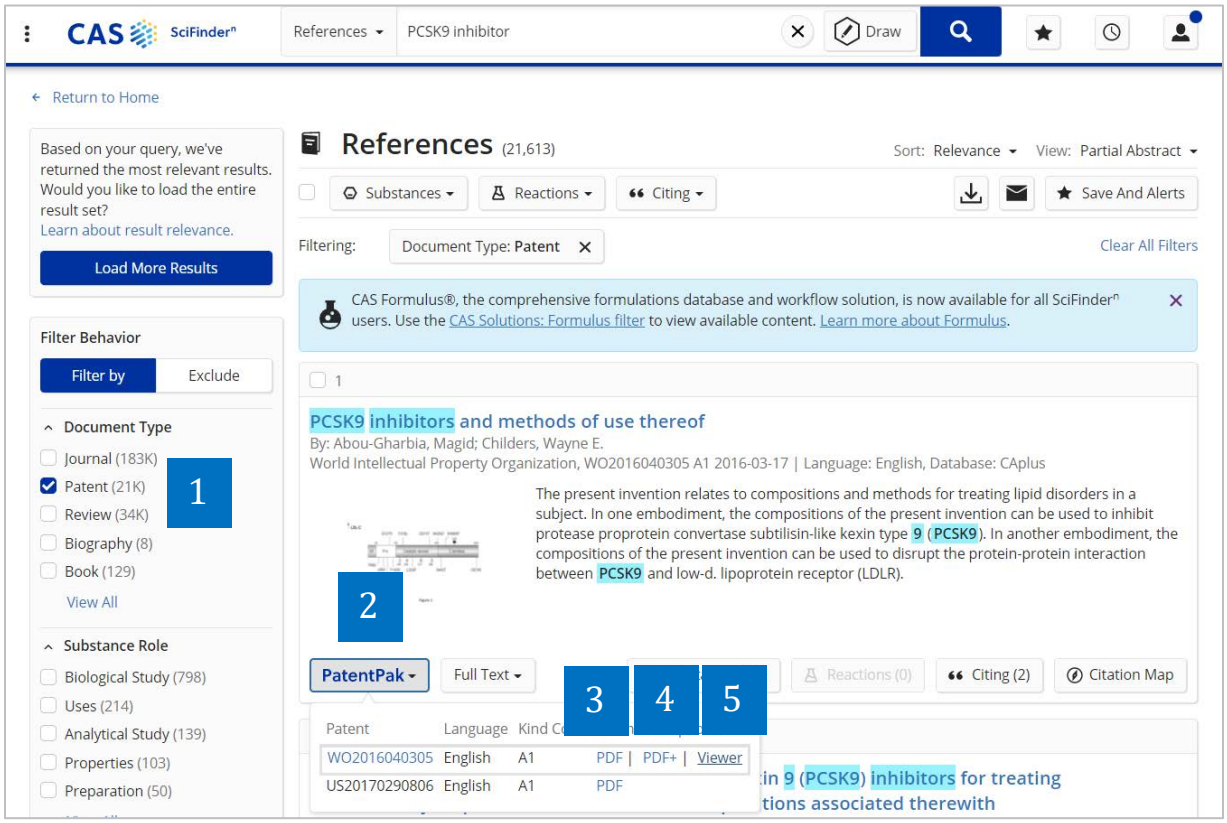


4. 同时您填写的邮件中将收到现有技术分析完成的邮件。在邮件中点击 View all results in，将跳转到 CAS SciFinderⁿ 浏览现有技术相关文献。



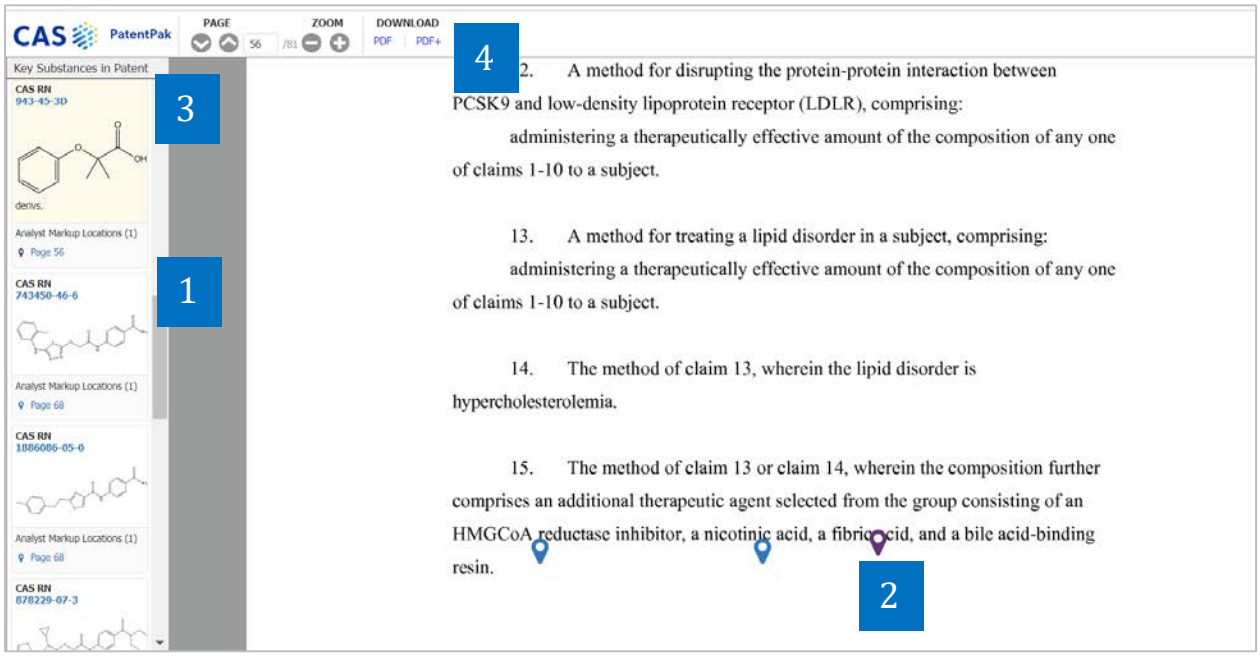
5. 获得现有技术相关文献集。

专利信息的获取——PatentPak 的使用



1. 在文献结果集中选择文献类型为 Patent
2. 点击 PatentPak 旁的小箭头，查看专利族列表
3. PDF: 获取专利 PDF 全文
4. PDF+: 获取附有物质标记信息的专利 PDF 全文
5. Viewer: PatentPak 浏览器，在线快速阅读专利全文

PatentPak 浏览器：

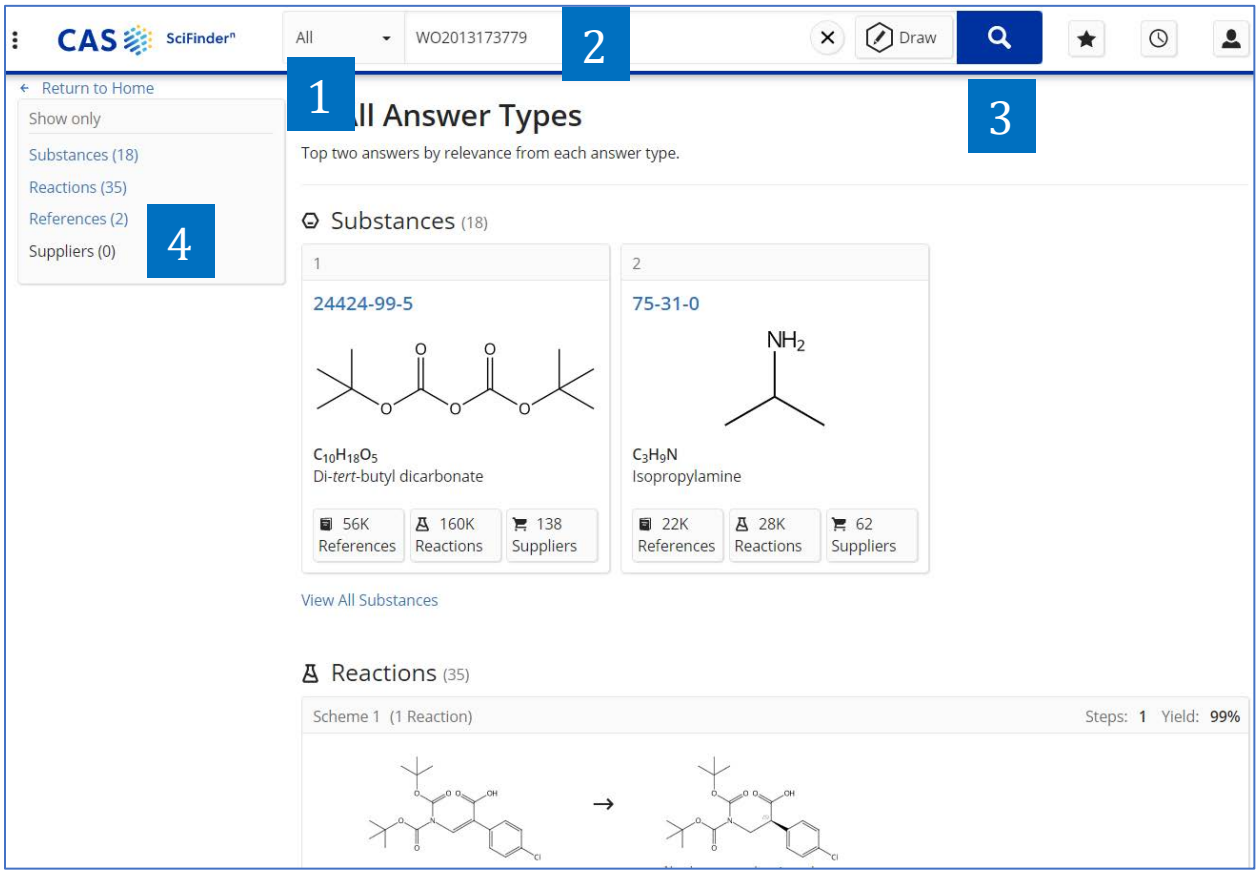


1. 物质位置信息：点击页码定位符号，右侧 PDF 全文快速跳转至该物质出现的页码处，同时对应物质的位置符号由蓝色变为紫色。
2. PDF 全文中对应的物质位置符号。
3. 点击 CAS 登记号，获取物质详情。
4. 下载专利全文：PDF: 获取专利 PDF 全文；PDF+: 获取附有物质标记信息的专利 PDF 全文。

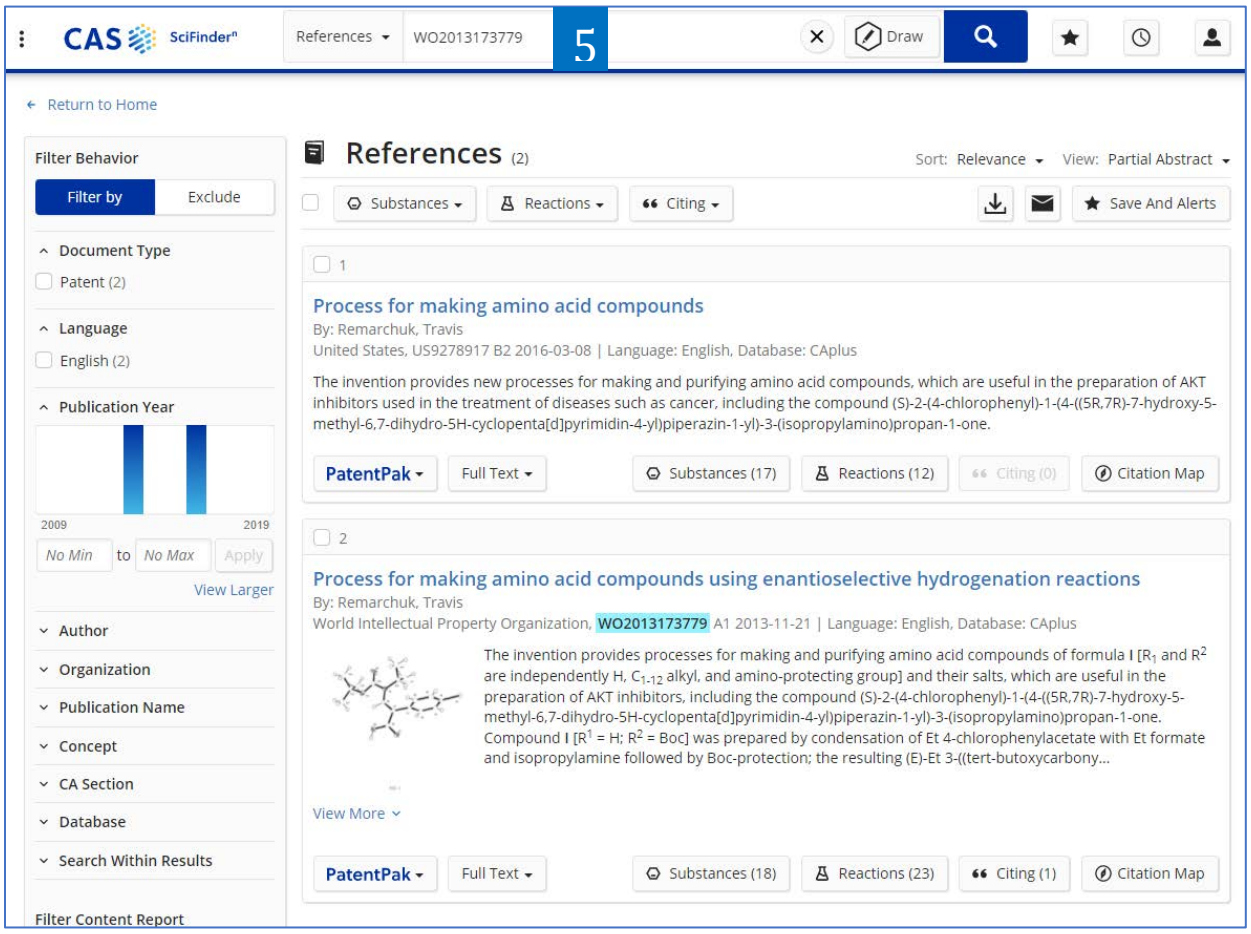
利用专利公开号或者申请号进行检索

当用专利公开号或者申请号进行检索时，可以选择 All 或分别选择 Substances、Reactions 或 References 进行检索。

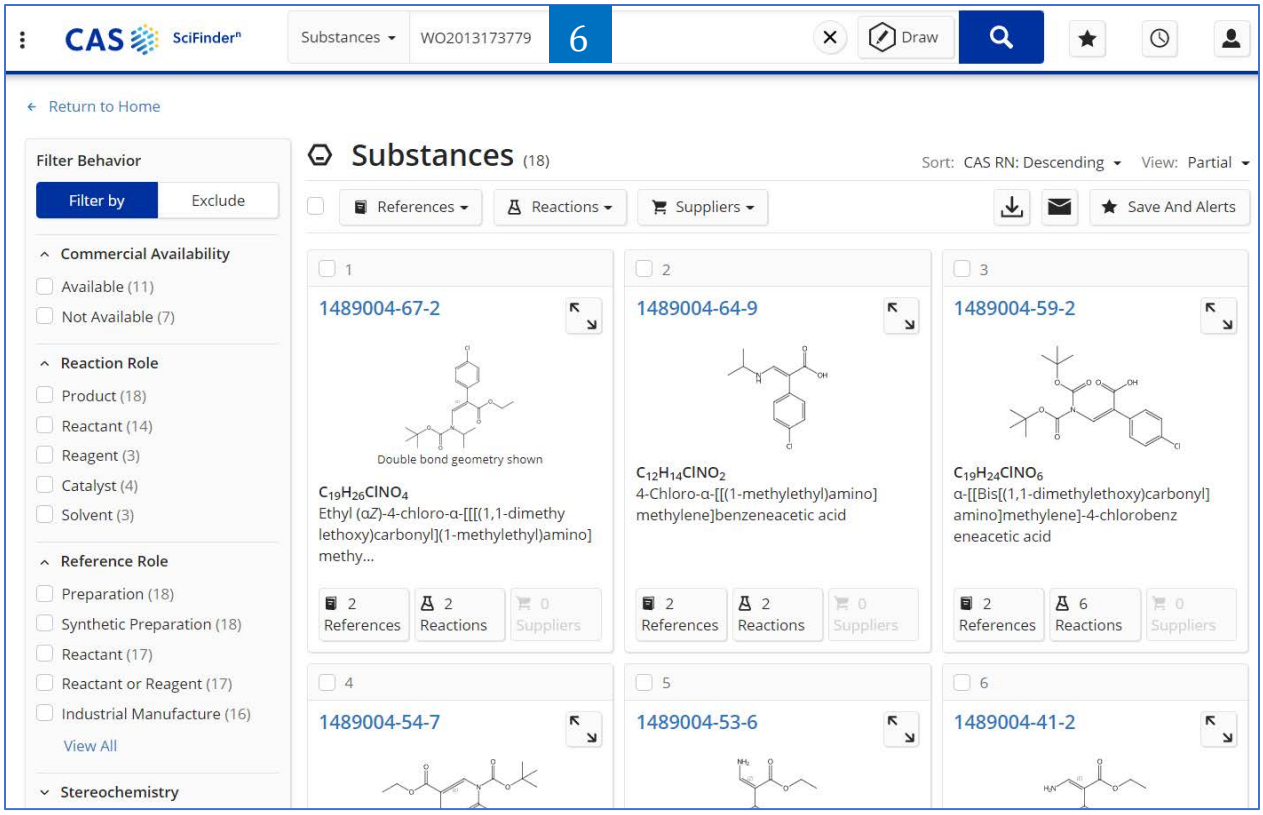
注：国家代码与数字间不能出现空格，如 WO2013173779



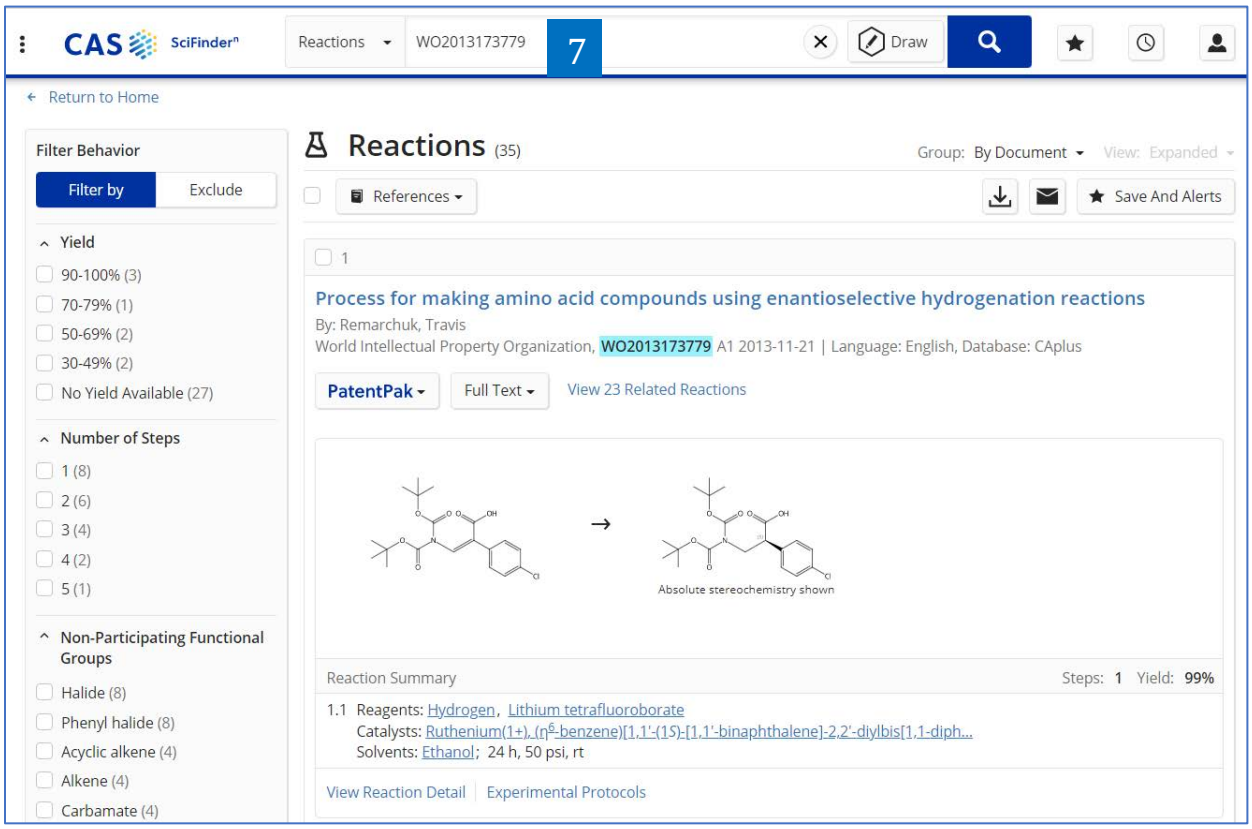
1. 选择 All，同时获取该专利中披露的反应、物质、专利中披露的物质的供应商及本专利的文献信息。
2. 输入专利号。
3. 开始检索。
4. 本专利披露的物质、反应、专利中披露的物质的供应商及本专利的文献信息。



5. 选择 References，获得该专利及其同族信息。

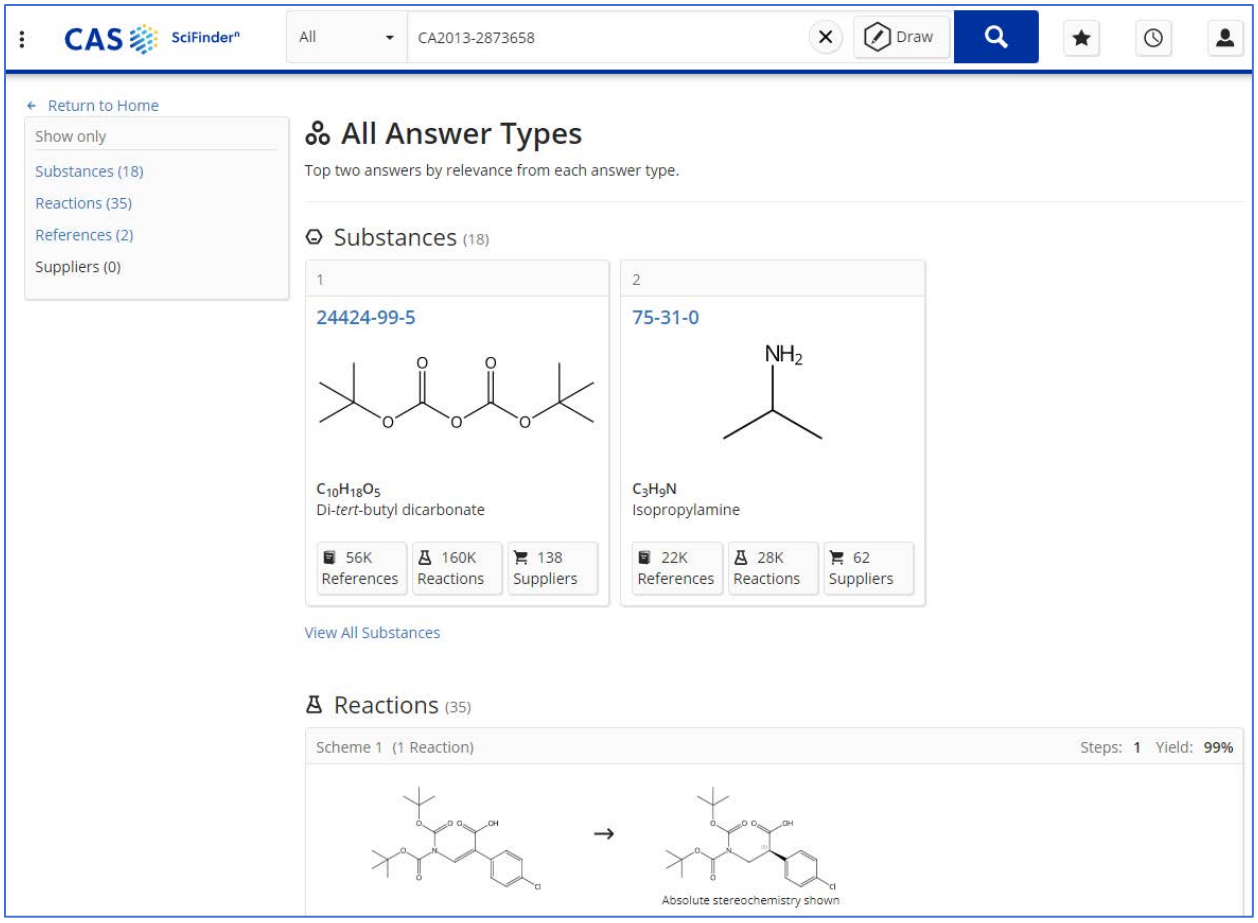


6. 选择 Substances，获得该专利披露的物质信息。



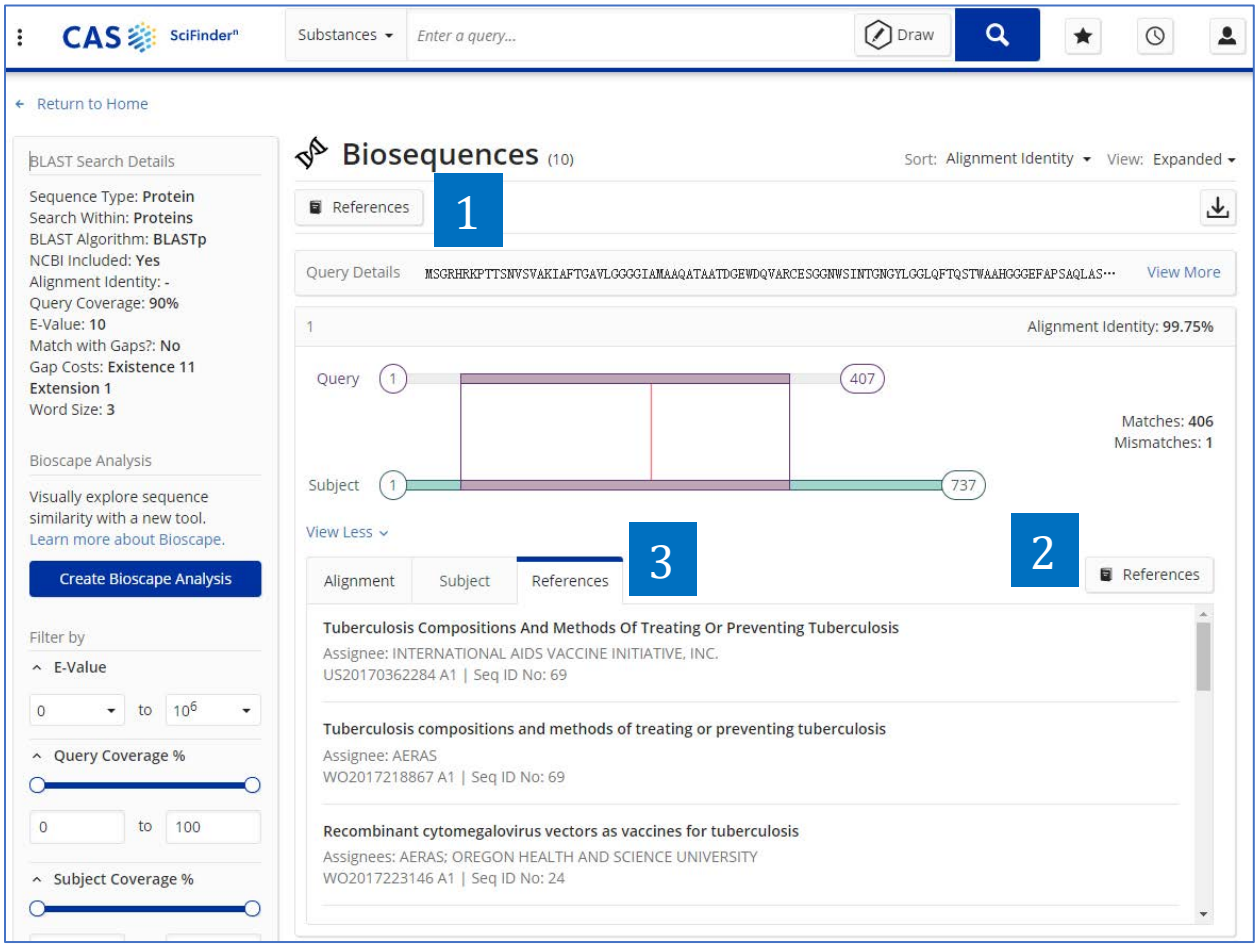
7. 选择 Reactions，获得该专利披露的反应信息。

使用专利申请号获得同样的结果，在此不一一赘述。


CAS SciFinder
All
CA2013-2873658
Draw
Return to Home
Show only
Substances (18)
Reactions (35)
References (2)
Suppliers (0)
All Answer Types
Top two answers by relevance from each answer type.
Substances (18)
1
24424-99-5
C10H18O5
Di-tert-butyl dicarbonate
56K References
160K Reactions
138 Suppliers
2
75-31-0
NH2
C3H9N
Isopropylamine
22K References
28K Reactions
62 Suppliers
View All Substances
Reactions (35)
Scheme 1 (1 Reaction)
Steps: 1 Yield: 99%
Absolute stereochemistry shown

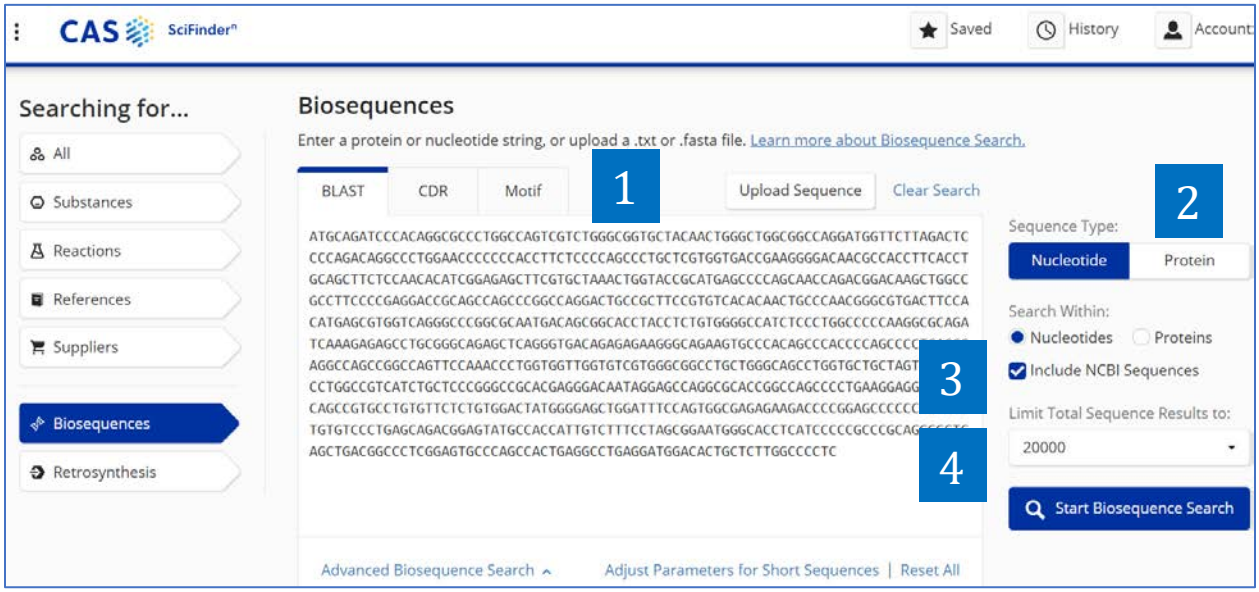
生物序列检索

通过生物序列检索结果获取研究文献

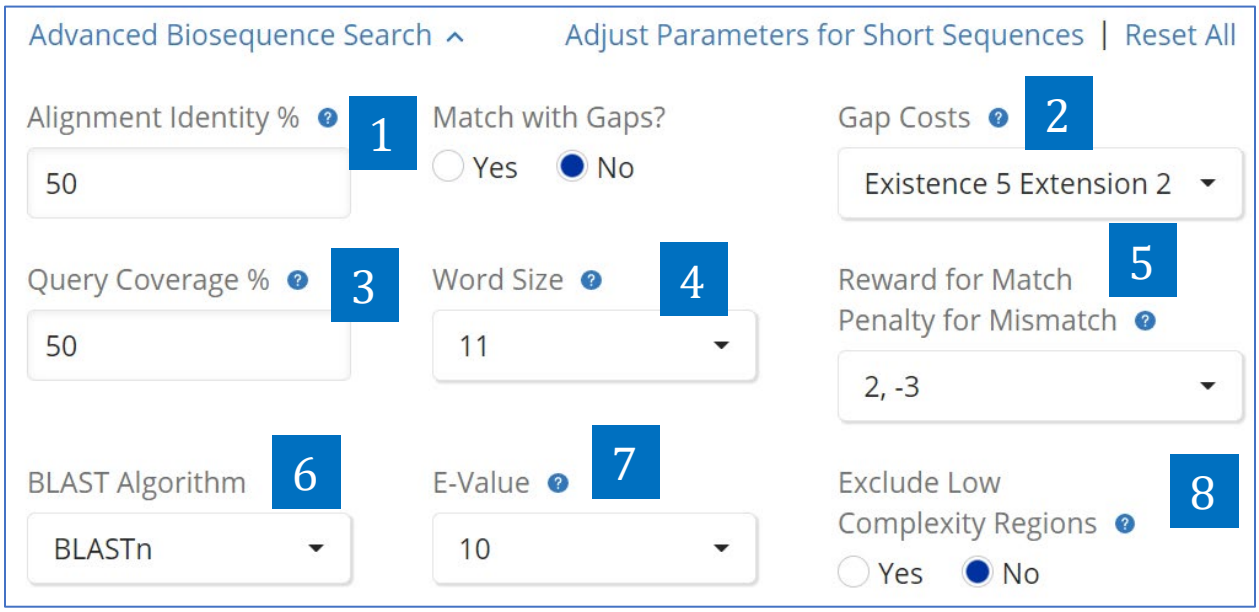


1. 获取 Biosequences 检索结果集中所有生物序列的研究文献。
2. 在 CAS SciFinder[n] 中获取此序列的研究文献。
3. 在 Biosequences 中，浏览此序列的研究文献。

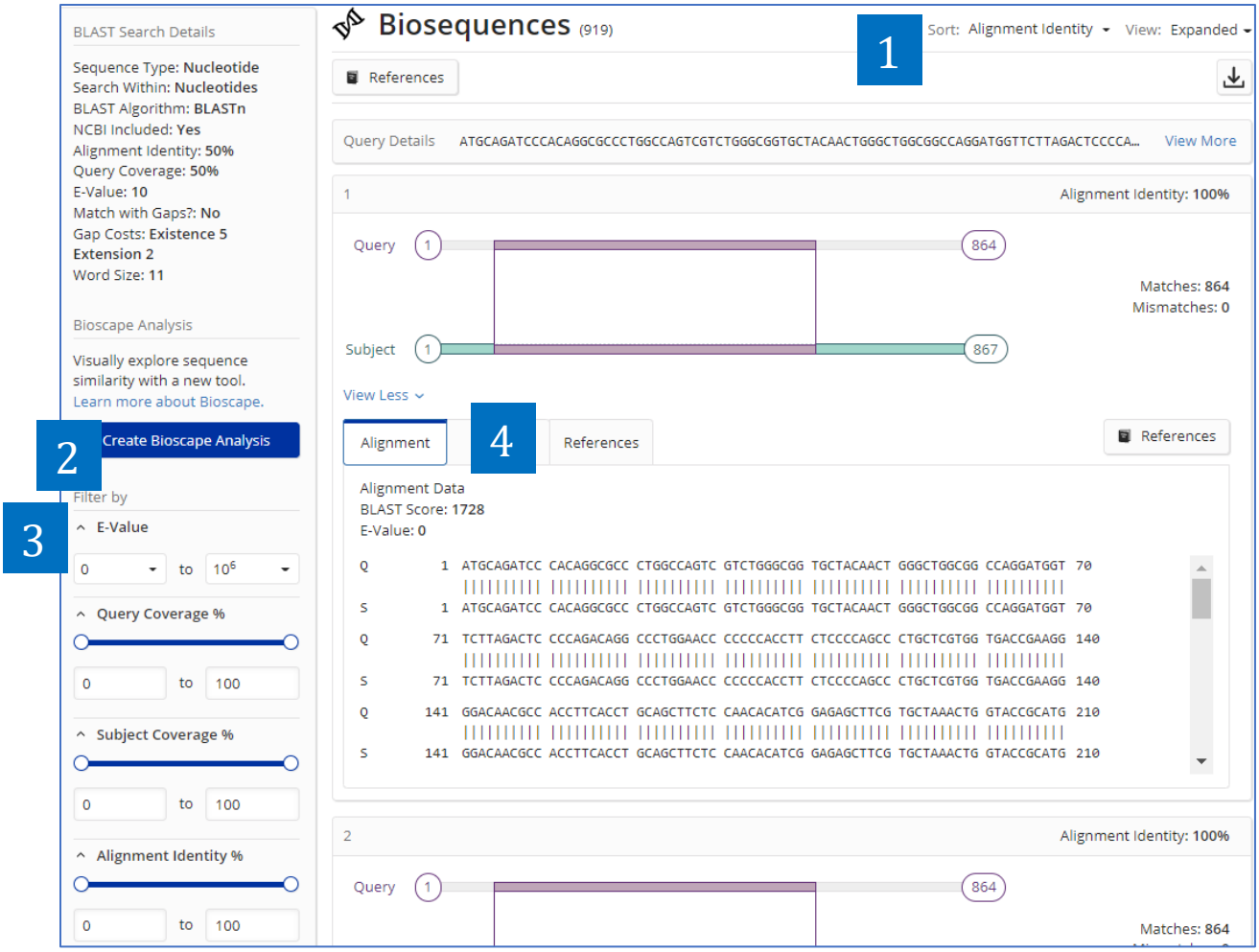
生物序列检索（BLAST）



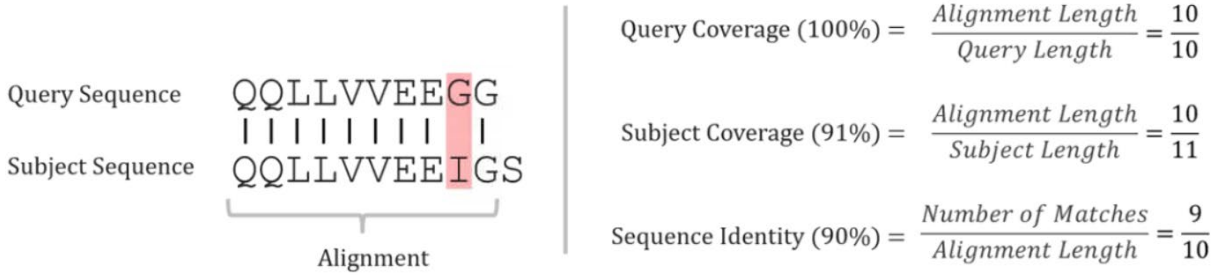
1. 选择 Biosequences 后及进入序列检索页面。此时，可以选择在检索框中手动输入或粘贴序列，也可以通过点击 Upload Sequence 上传文本或 FASTA 格式文件。如果以 FASTA 格式输入，则最多可以同时检索 100 条序列。可选择被检索序列的类型、要检索的域(核苷酸或蛋白质)，以及期望展示的检索结果数量。
2. 选择检索类型和检索域。
3. 选择是否包含 NCBI 中的序列。
4. 选择展示结果数量。

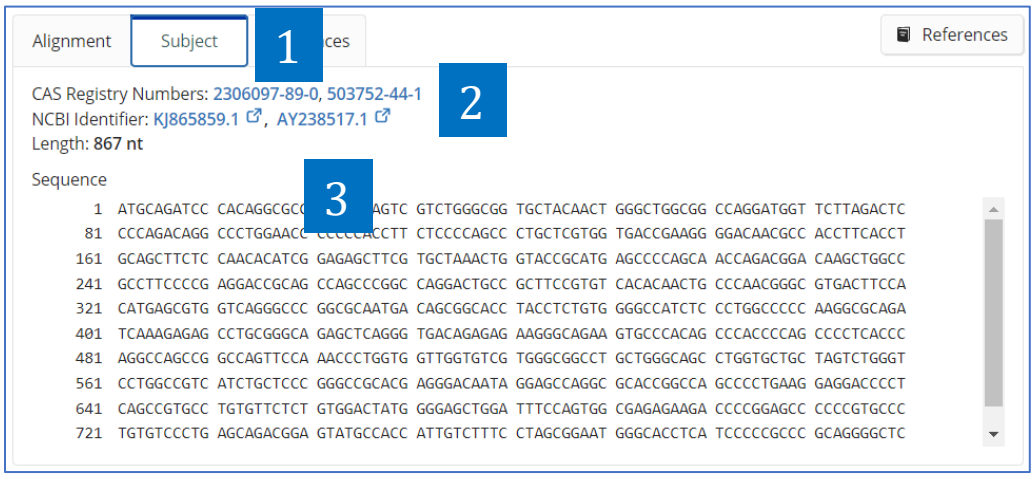


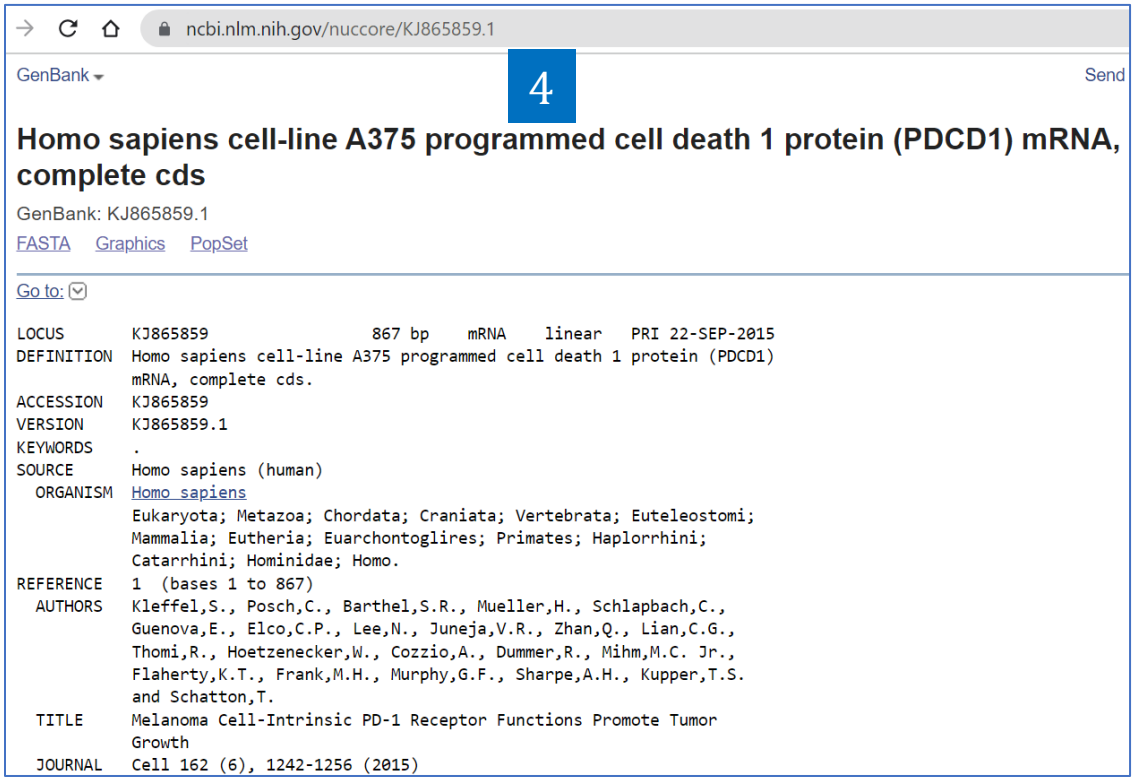
1. 值越高，目标序列与查询序列的一致性越高。
2. 较高的 Gap Costs 导致与含有较少空位的序列匹配。
3. 值越高，检索序列比对上的比例越高。
4. 起始相似性检索的最低匹配长度 word size 越大，匹配越严格。
5. 匹配奖励，错配罚分。
6. MegaBLAST 查找非常相似的序列；BLASTn 支持相似度较低的序列的查找；BLASTn-short 允许更短序列的比对（比如短到 7 个碱基的序列）。
7. E 值越小，匹配越严格。
8. LCR 如 AAATAAAAAAAATAAAAAAT，多个 A 会导致比对分数偏高，序列中有 LCR 时可考虑排除。



1. 序列结果排序标准。
2. 可视化分析序列结果。
3. 结果筛选。
4. 序列对比详情。

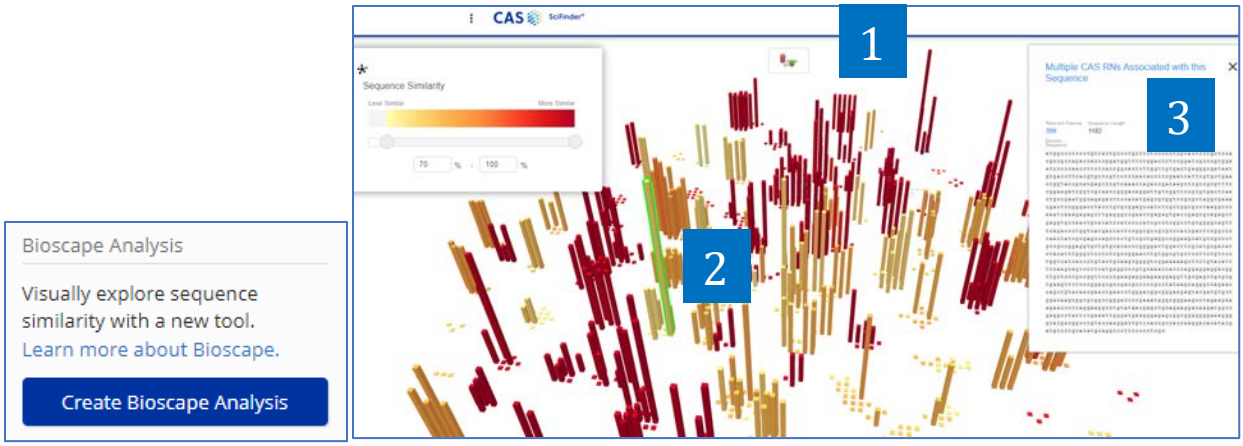






1. 目标序列信息。
2. 目标序列 CAS 登记号。
3. 目标序列的 NCBI 编号，点击 NCBI 编号，即可链接至 NCBI 页面。
4. NCBI 页面展示的目标序列详情。

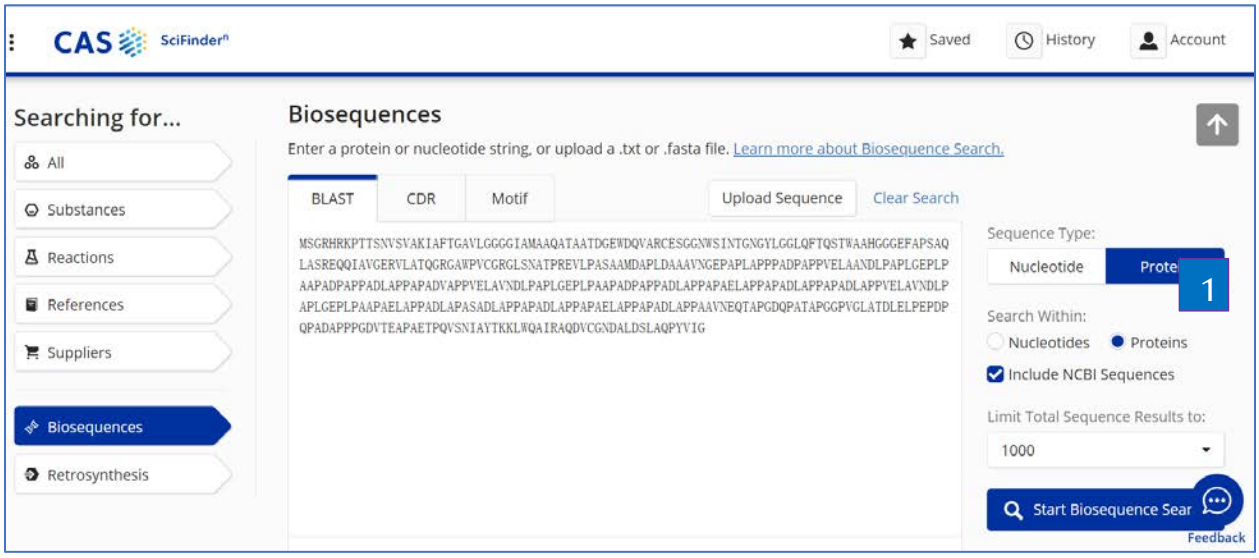
1. Biosequences 中目标序列的相关专利。
2. 在 CAS SciFinder^{n} 中获取目标序列的专利和非专利文献。



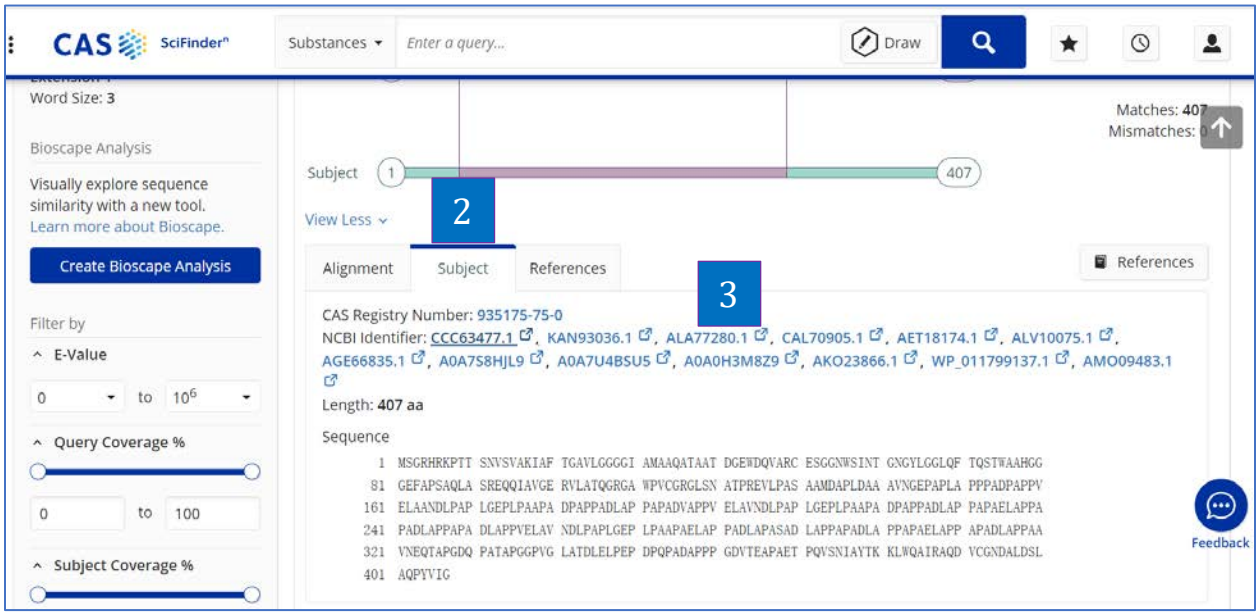
3. 点击 Create Bioscape Analysis 后，获得序列可视化分析页面。
4. 选中某序列。
5. 被选中序列的信息及其相关专利。

在 Biosequences 中检索时选择包含来自 NCBI 的序列

在选择 Biosequences 进行检索时，可勾选 Include NCBI Sequences, 以获取来自 NCBI 的序列。

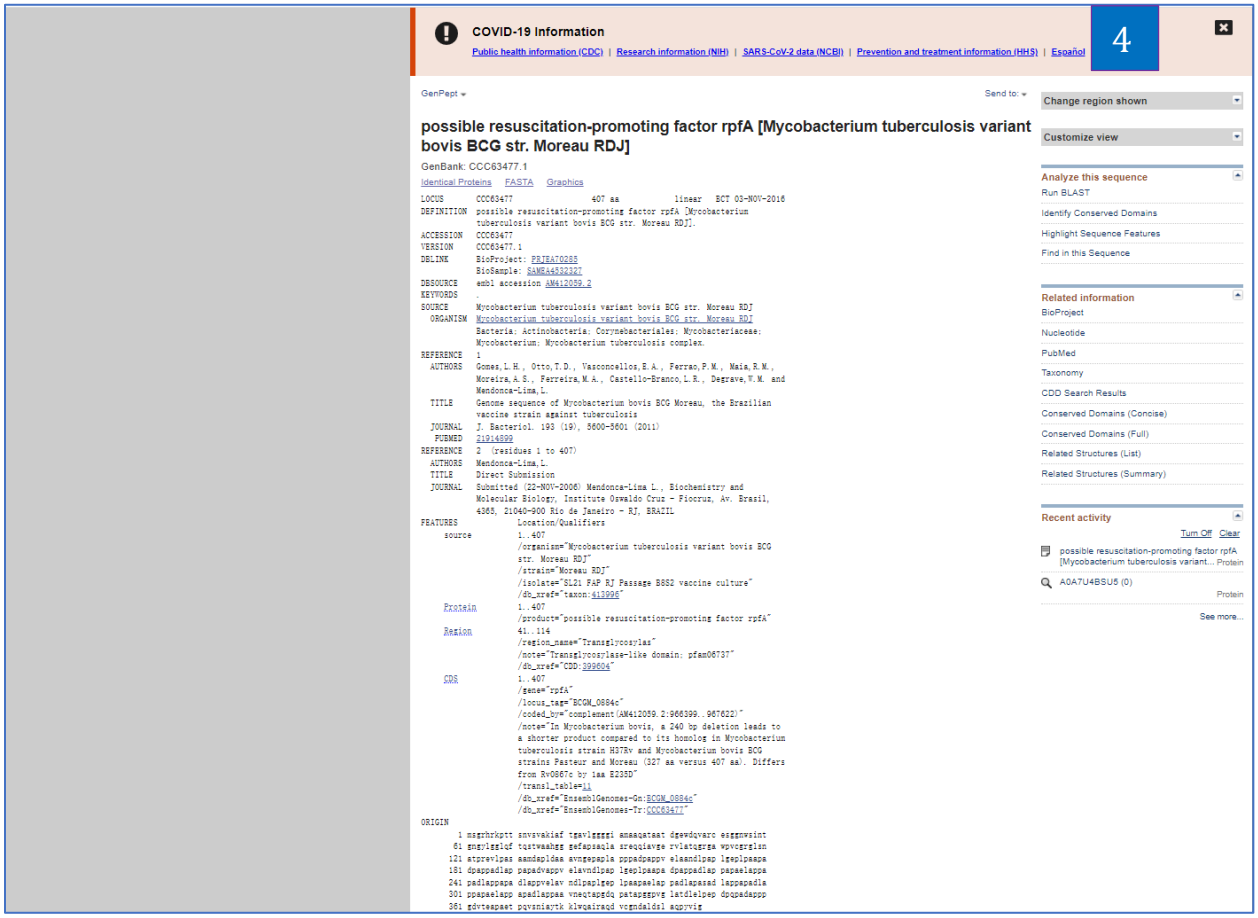


1. 输入序列信息后，勾选 Include NCBI Sequences。



2. 在结果集页面，点击 Subject，查看目标序列。如果该序列同时被 NCBI 收录，则将展示其 NCBI Identifier。

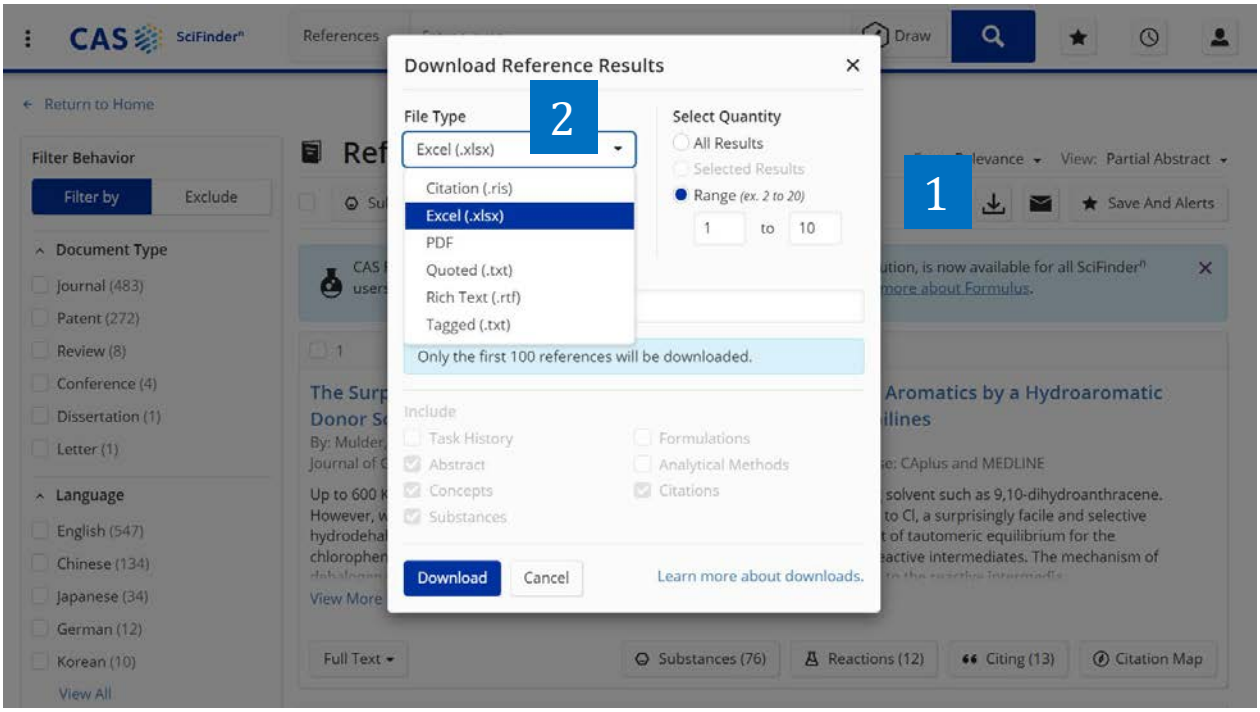
3. 点击 NCBI Identifier 超链接，则可直接打开 NCBI 中该序列信息页。



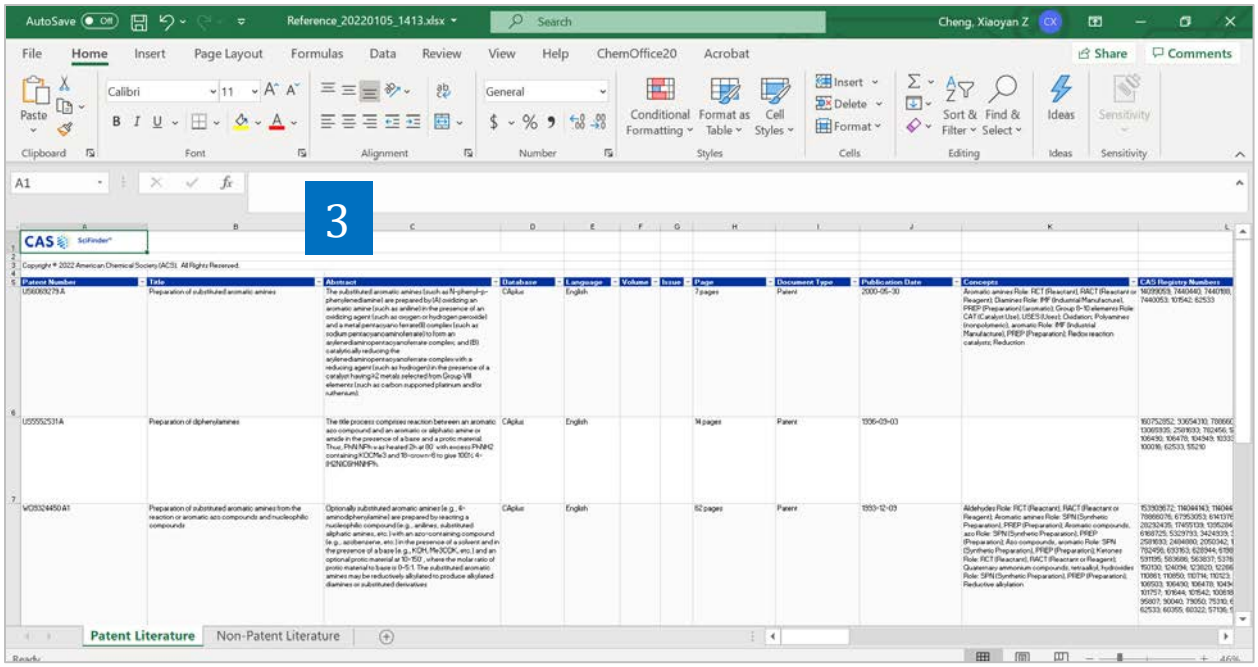
4. NCBI 中的目标序列详情。

检索结果后处理

使用 Excel 文件导出文献详情



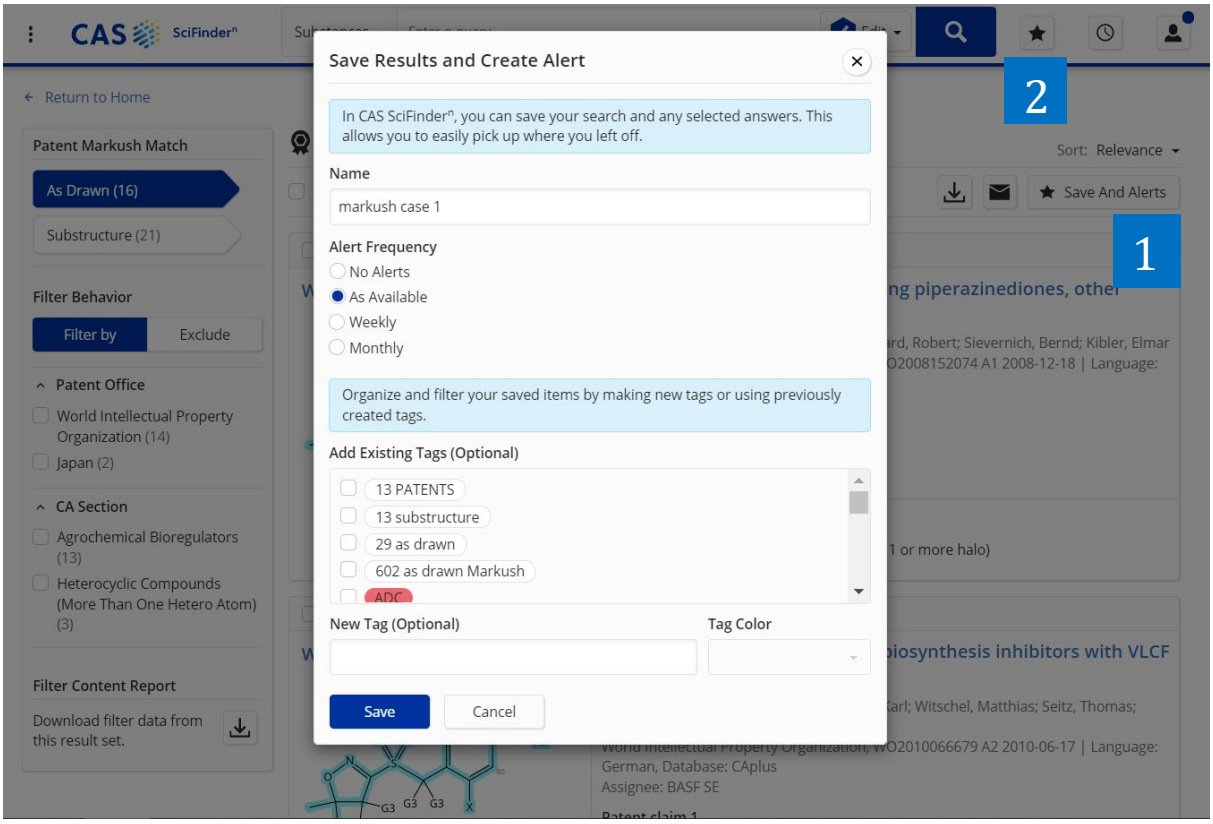
1. 在文献结果集页面，点击下载图标
2. 在弹出窗口中的 File Type 下选择 Excel(.xlsx)，即可使用 Excel 文件格式下载文献详情。



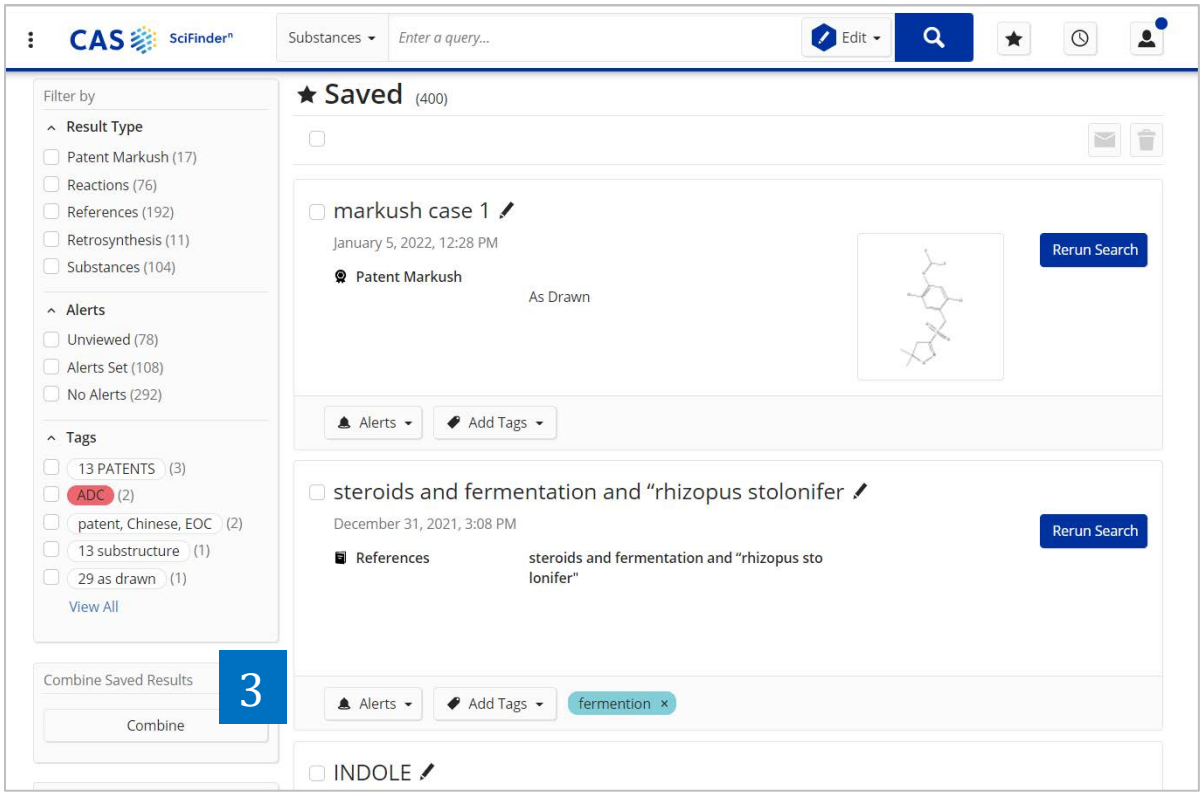
3. Excel 文件格式下载的文献详情。

Combine 的应用

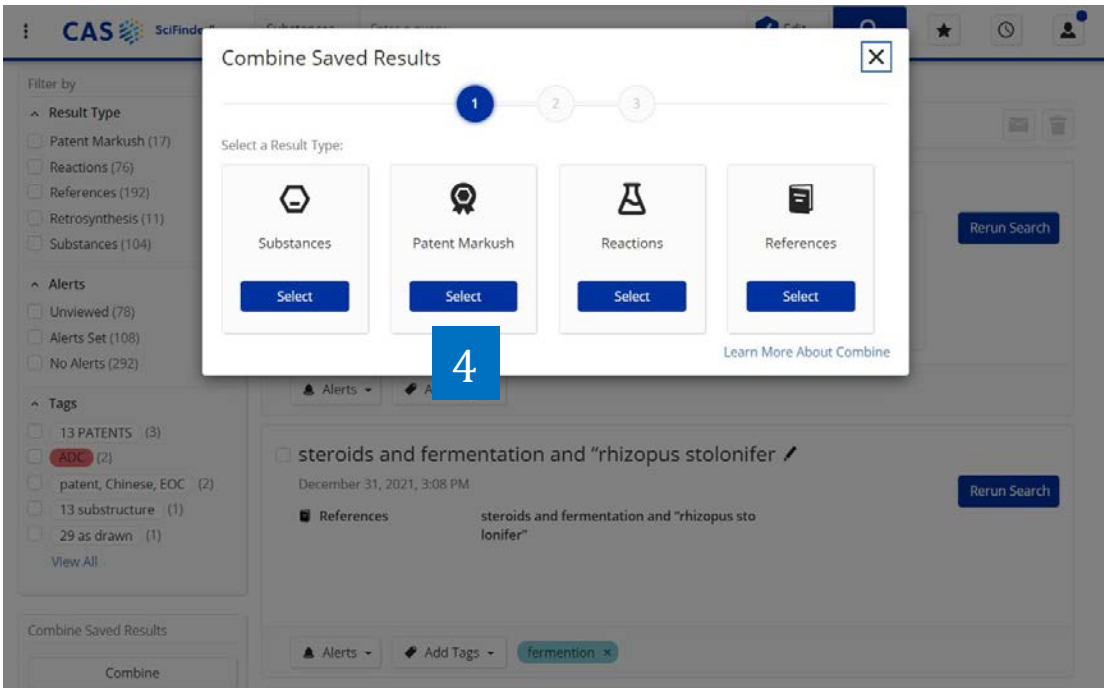
Combine 功能：可用于对多个检索结果集（包括文献、物质、Markush 和反应的检索结果集）进行逻辑处理（包括合并、取交集和排除）。



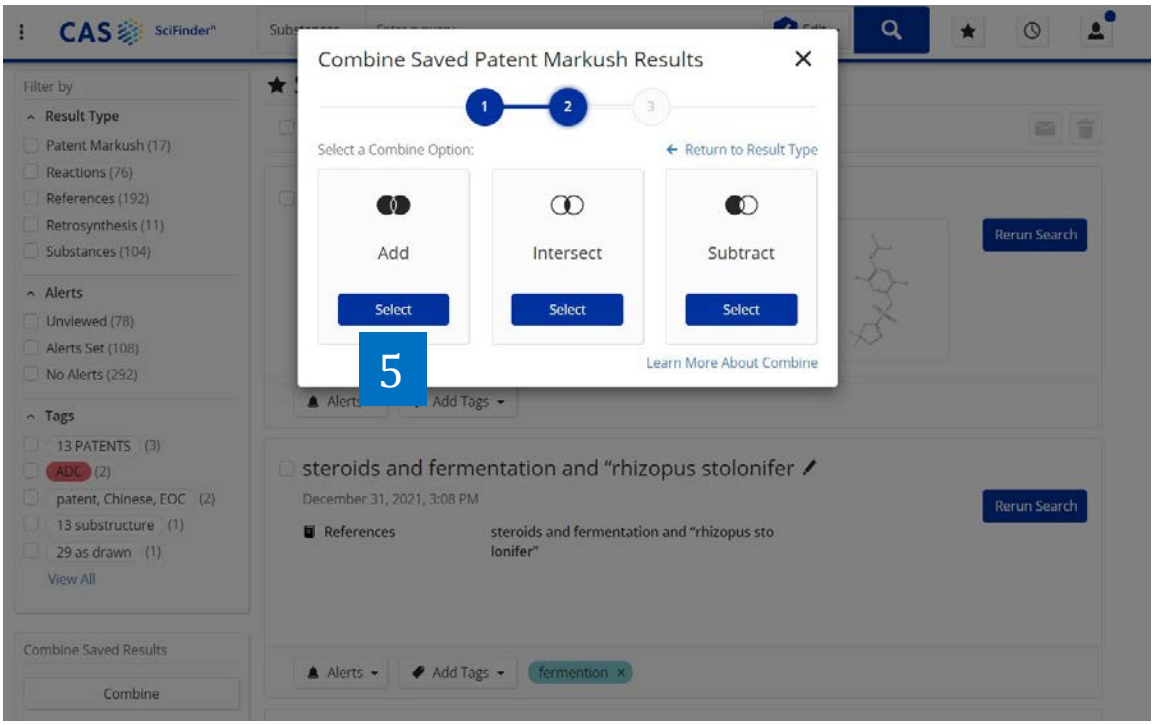
1. 点击 Save And Alerts，在弹出窗口中填写 Name，点击 Save，保存检索结果集。
2. 打开保存的检索结果集，进行 Combine 操作。



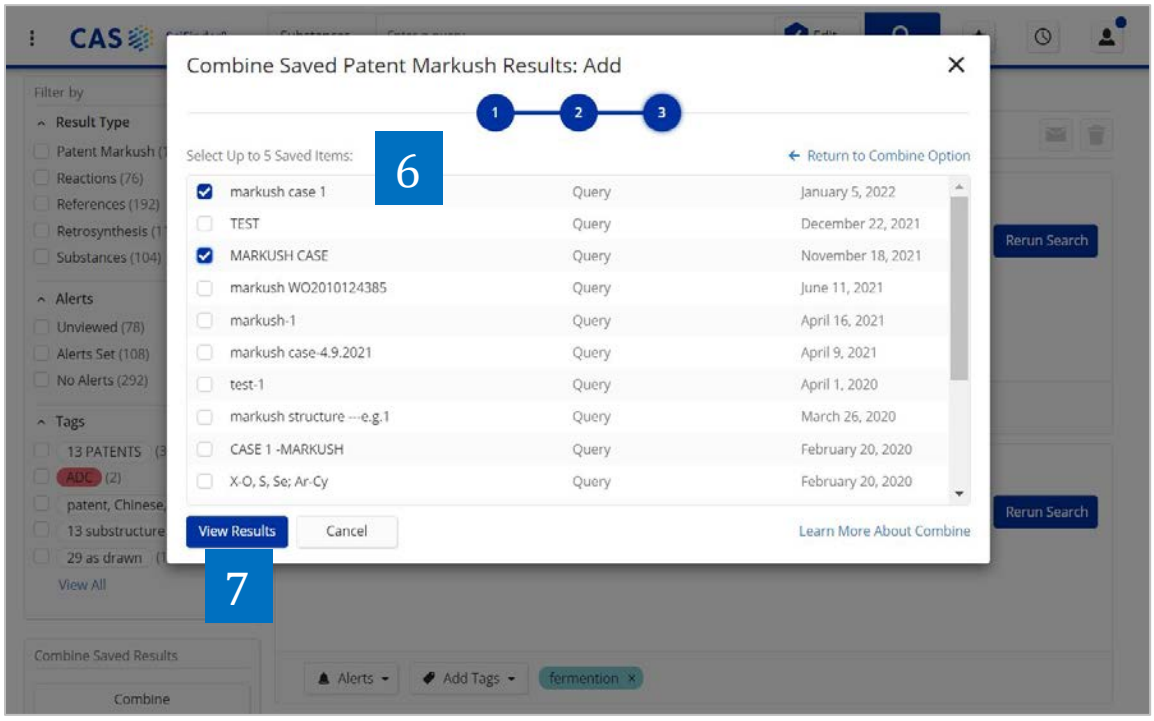
3. 点击 Combine, 进行多个结果集的逻辑处理。



4. 选择需要 combine 的检索结果集类型，例如 Patent Markush。

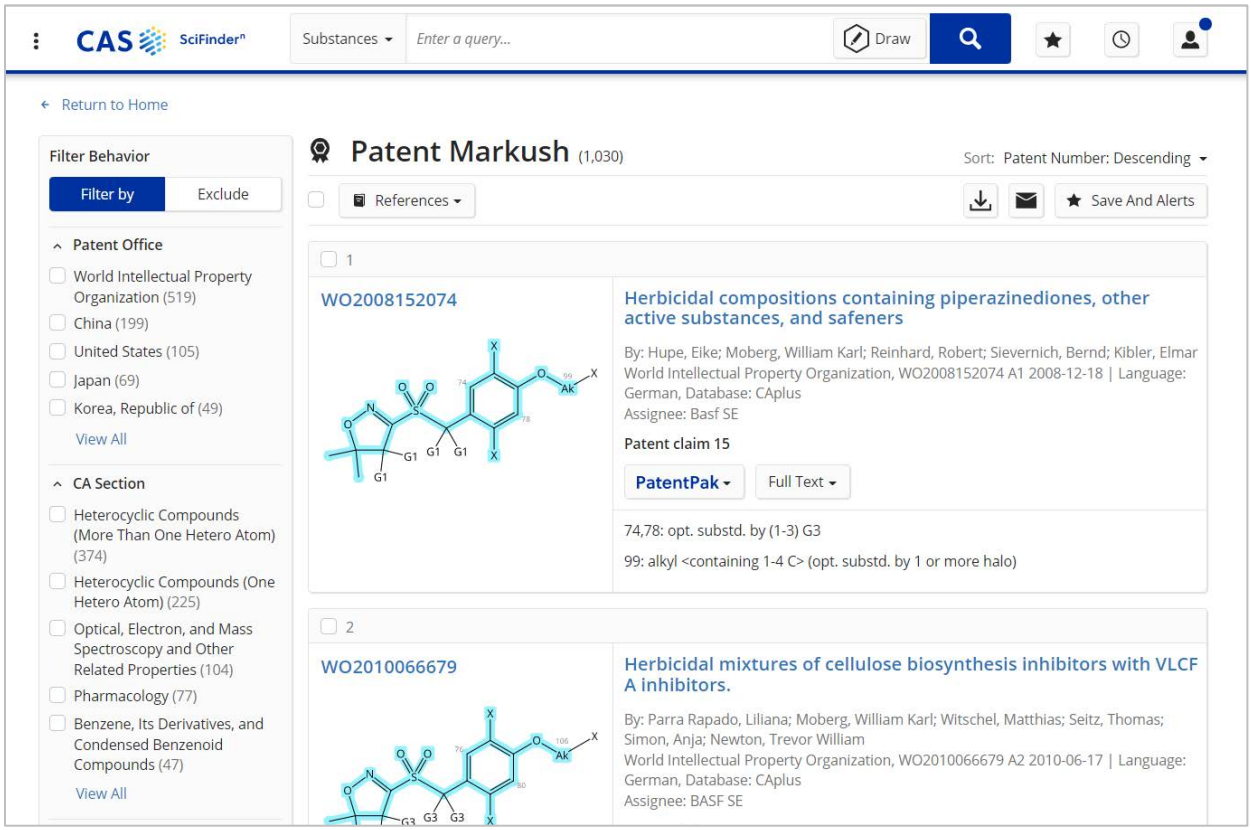


5. 选择需要进行的逻辑操作。



6. 选择需要 combine 的结果集。

7. 点击 View Results，获得 combine 后的结果集。



将物质结果导出为可以编辑的结构数据文件

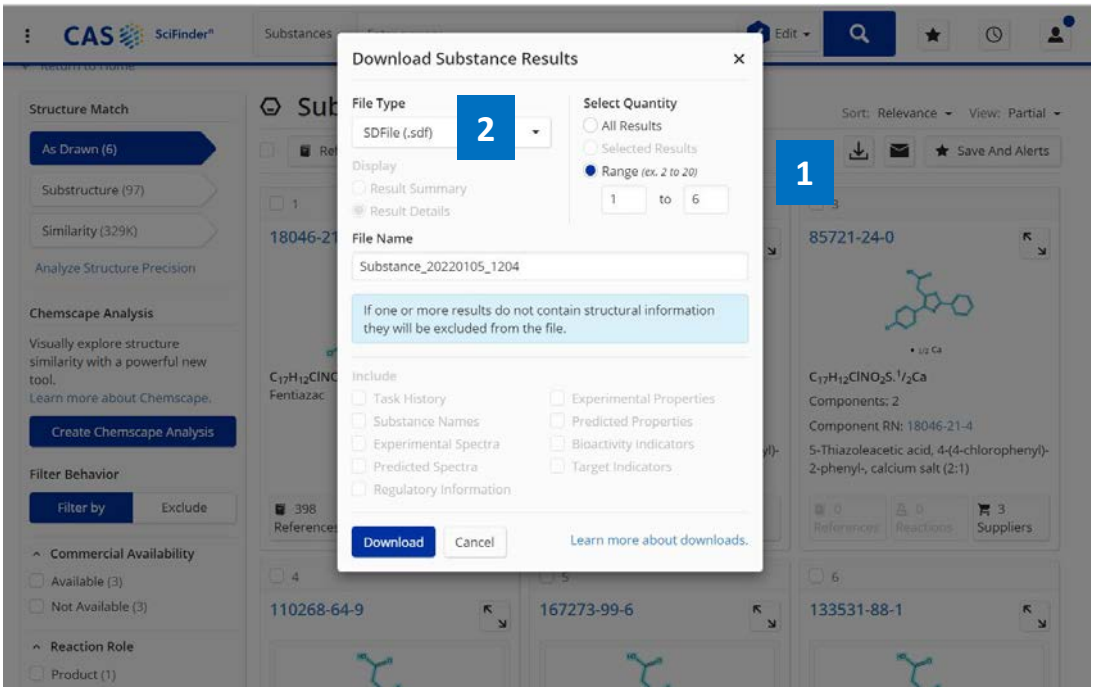
有以下三种方法可以将物质结果导出为可以编辑的结构数据文件：

I. 直接在物质结果集页面点击，选择 SDFile，可以批量导出可编辑的结构数据文件。

II. 若需要导出某一选定物质的结构数据文件，则可以点击该物质的结构，在打开的新窗口中点击，选择所需下载的结构数据文件格式(CXF, MOL, SDF)

III. 若需要导出某一选定物质的结构数据文件及其属性值，则可以在 substance detail 页面点击，同时下载结构数据文件(CXF, MOL, SDF)和属性值（EXCEL）文件。

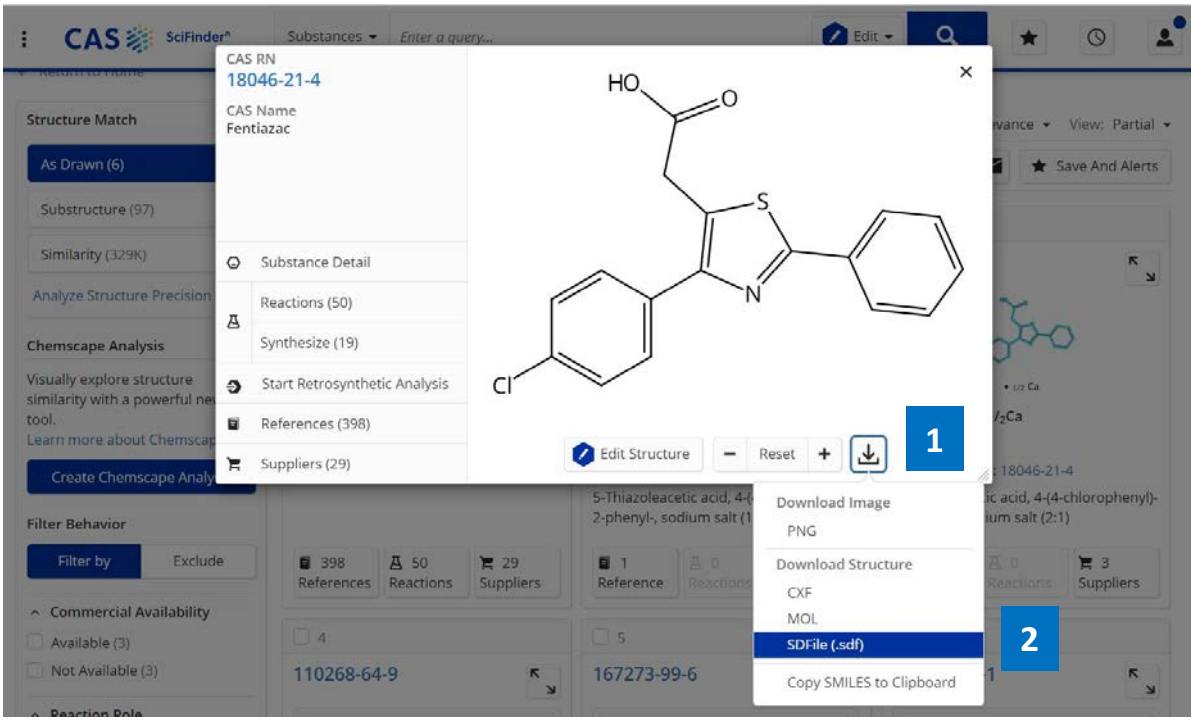
方法一：直接在物质结果集页面点击，选择 SDFile，可以批量导出可编辑的结构数据文件。



1. 点击按钮

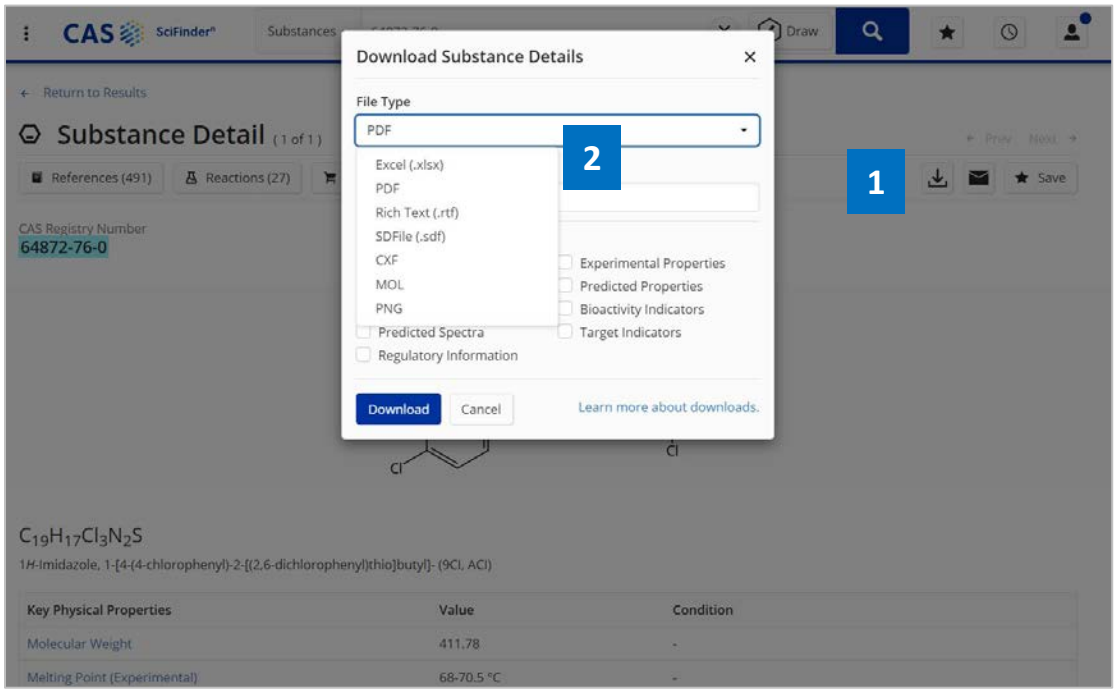
2. 选择 SDFile

方法二：若需要导出某一选定物质的结构数据文件，则可以点击该物质的结构，在打开的新窗口中点击  ，选择所需下载的结构数据文件格式（CXF, MOL, SDF）。



1. 点击  按钮
2. 选择所需下载的结构数据文件格式(CXF, MOL, SDF)

方法三：若需要导出某一选定物质的结构数据文件及其属性值，则可以在 substance detail 页面点击，同时下载结构数据文件(CXF, MOL, SDF)和属性值（EXCEL）文件。



1. 点击按钮
2. 选择所需下载的结构数据文件(CXF, MOL, SDF)和属性值文件 EXCEL

请注意：如果物质没有结构或无法建模，则将无法使用此下载选项。

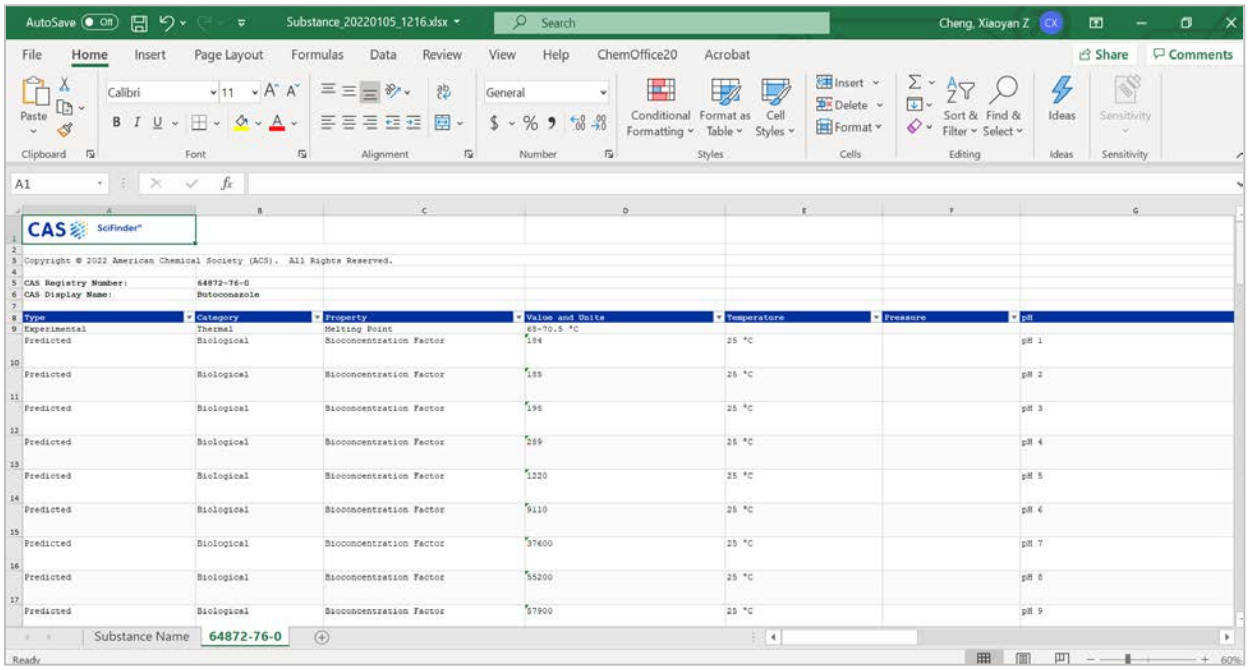
结构数据 SDF 文件下载示例：

865-21-4 (1).sdf - Notepad

File Edit Format View Help

```
Vincaleukoblastine
C46H58N4O9
865-21-4 Copyright (C) 2019 ACS
 62 70  0  0  1  0  0  0  0  0999 V2000
75193.548426691.5323    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
80891.129029975.8065    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
63326.612912592.7419    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
69024.1935 9308.4677    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
57629.0323 9308.4677    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
74721.774212592.7419    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
69024.193515895.1613    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
50969.7581    0.0000    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
75193.548419487.9032    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
84302.419424750.0000    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
90000.000021465.7258    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
84302.419431336.6935    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
26764.112919487.9032    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
19306.451623788.3065    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
20594.758136762.0968    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
14897.177440046.3710    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
20594.758130175.4032    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 8637.096836435.4839    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
60895.161354090.7258    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
66592.741950806.4516    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
59770.161346070.5645    0.0000 O   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
57157.258129975.8065    0.0000 C   0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0
63326.612933586.6935    0.0000 C   0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0
57157.258122772.1774    0.0000 C   0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0
44800.403229975.8065    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
50969.758133586.6935    0.0000 C   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0
69495.967729975.8065    0.0000 C   0  0  2  0  0  0  0  0  0  0  0  0
 57 58  2  0  0  0  0
M  END
> <cas.rn>
865-21-4

> <cas.index.name>
Vincaleukoblastine

> <molecular.formula>
C46H58N4O9

> <molecular.weight>
810.97

> <melting.point.experimental>
211-216 °C

> <density.predicted>
1.37±0.1 g/cm3    Temp: 20 °C; Press: 760 Torr

> <pka.predicted>
11.36±0.60    Most Acidic Temp: 25 °C

$$$$
```

属性值 EXCEL 文件下载示例：

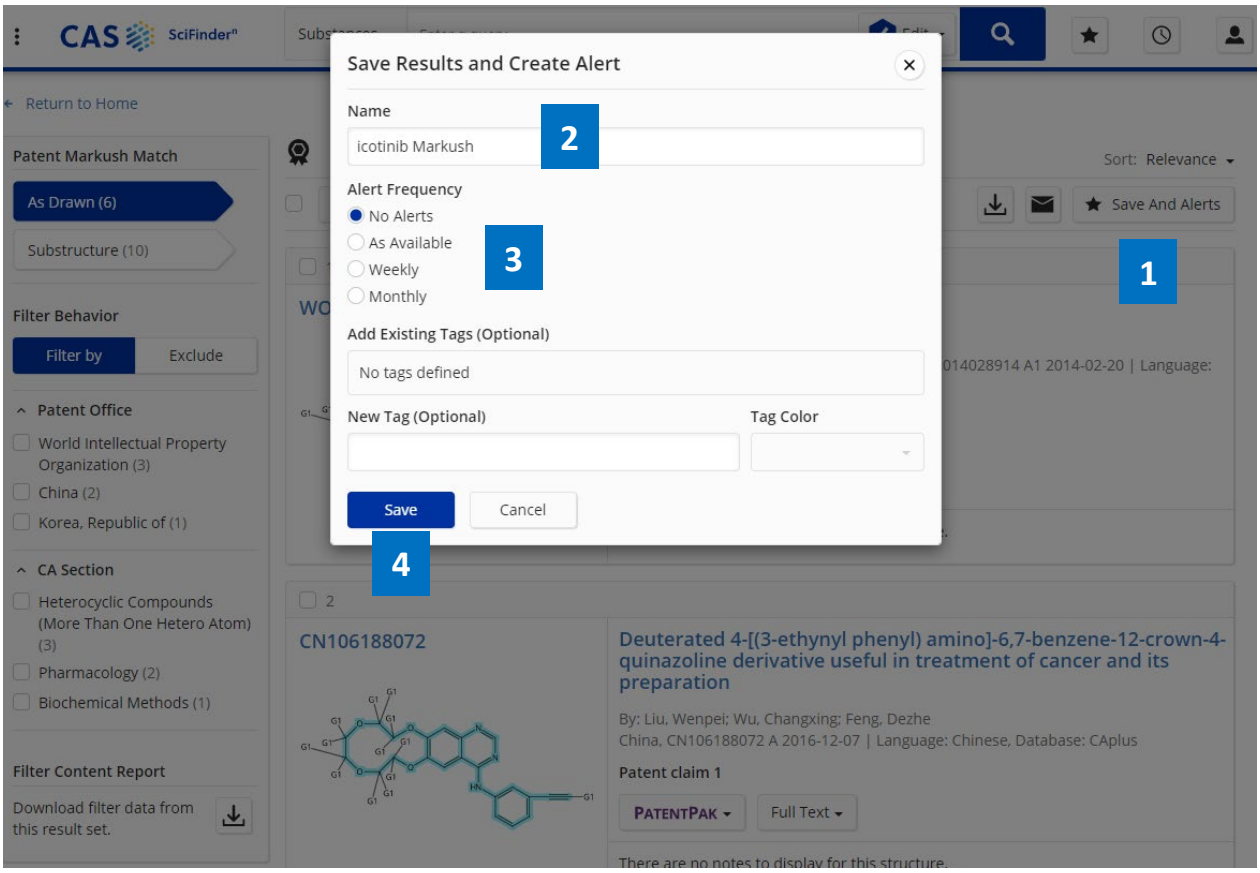


设置 Alert

在 CAS SciFinder^n 中，可对以下 4 种检索方式设置 Alert：

- 马库什结构检索
- 文献检索
- 物质检索
- 反应检索

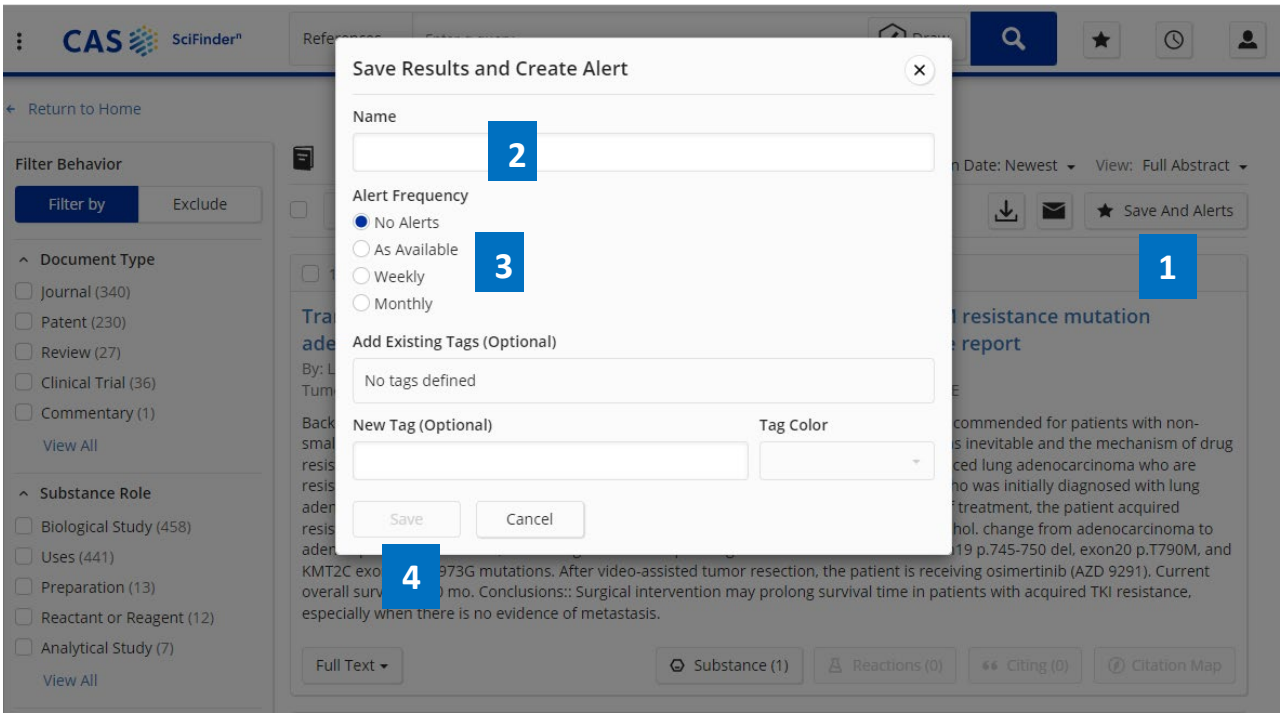
一. 马库什结构检索后，设置 Alert



1. 在马库什结构检索结果集页面点击 Save And Alerts。
2. 输入保存文件的名称。

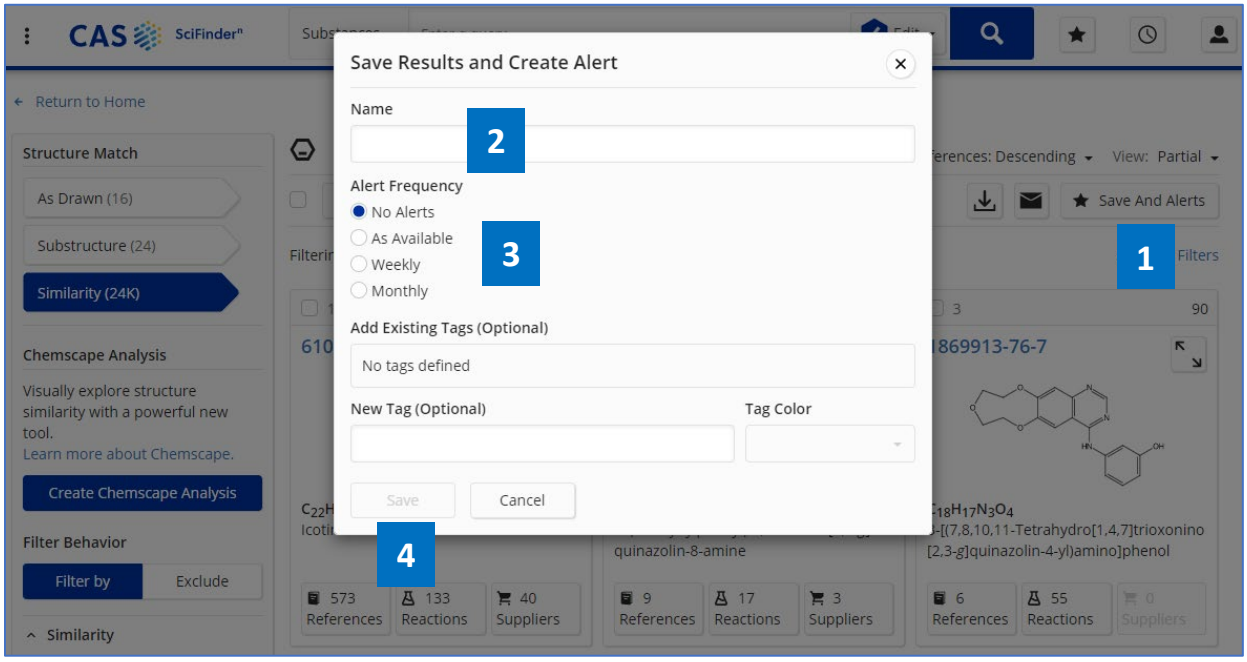
3. 选择 No Alerts 表示不设置提醒；选择 As Available、 Weekly 或 Monthly 表示设置提醒，并同时设置提醒频率。
4. 点击 Save 完成设置。

二. 文献检索后，设置 Alert



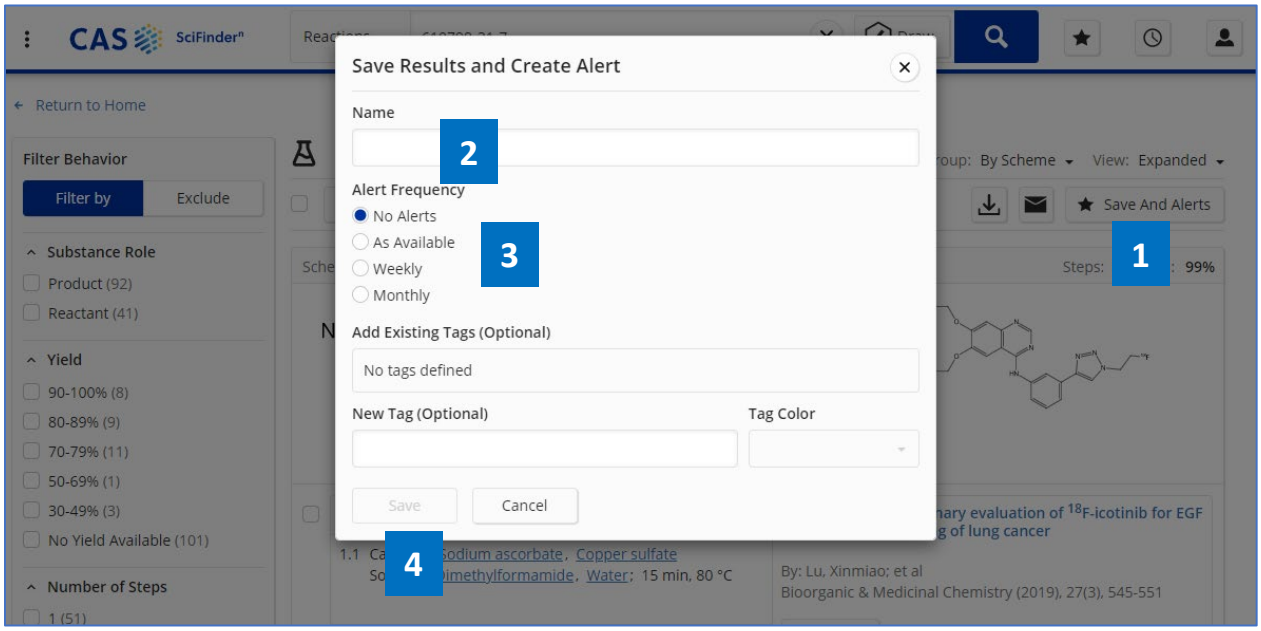
1. 在文献结果集页面点击 Save And Alerts。
2. 输入保存文件的名称。
3. 选择 No Alerts 表示不设置提醒；选择 As Available、 Weekly 或 Monthly 表示设置提醒，并同时设置提醒频率。
4. 点击 Save 完成设置。

三. 物质检索后，设置 Alert



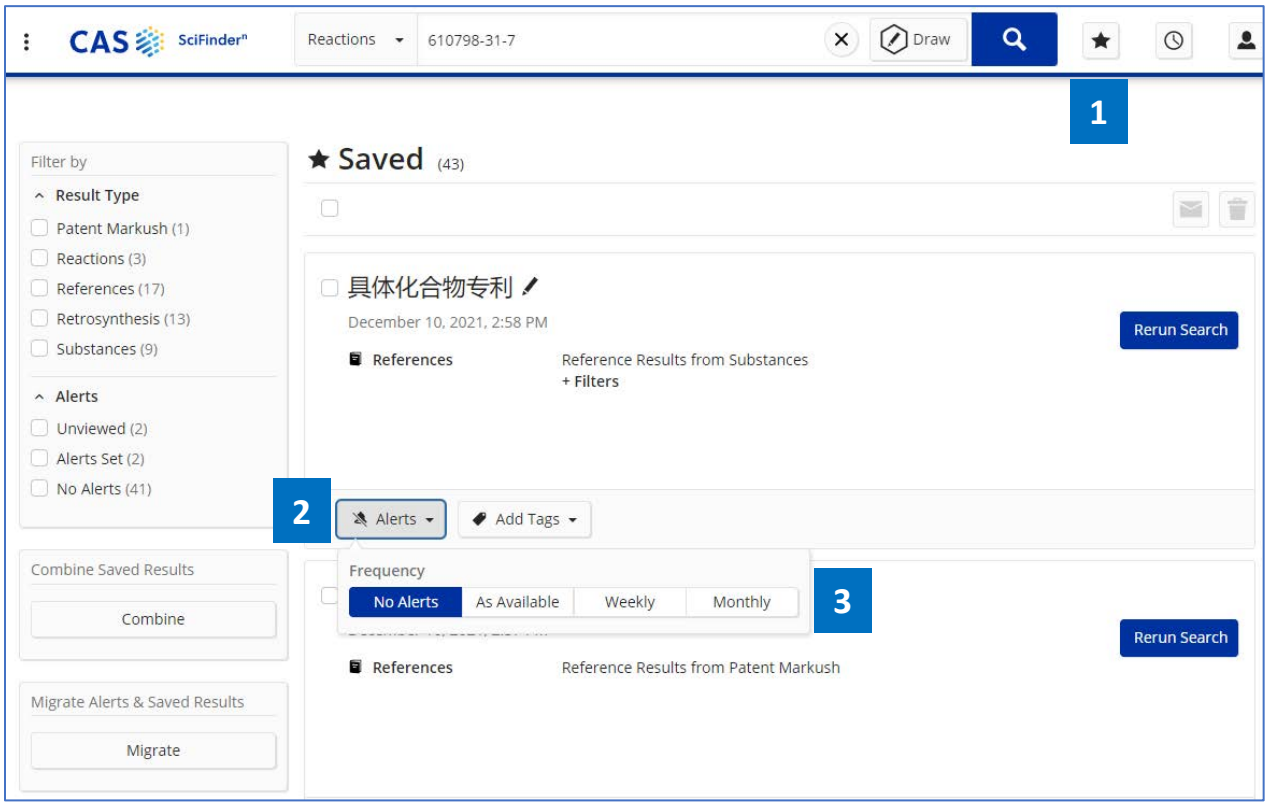
1. 在物质结果集页面点击 Save And Alerts。
2. 输入保存文件的名称。
3. 选择 No Alerts 表示不设置提醒；选择 As Available、 Weekly 或 Monthly 表示设置提醒，并同时设置提醒频率。
4. 点击 Save 完成设置。

四. 反应检索后，设置 Alert



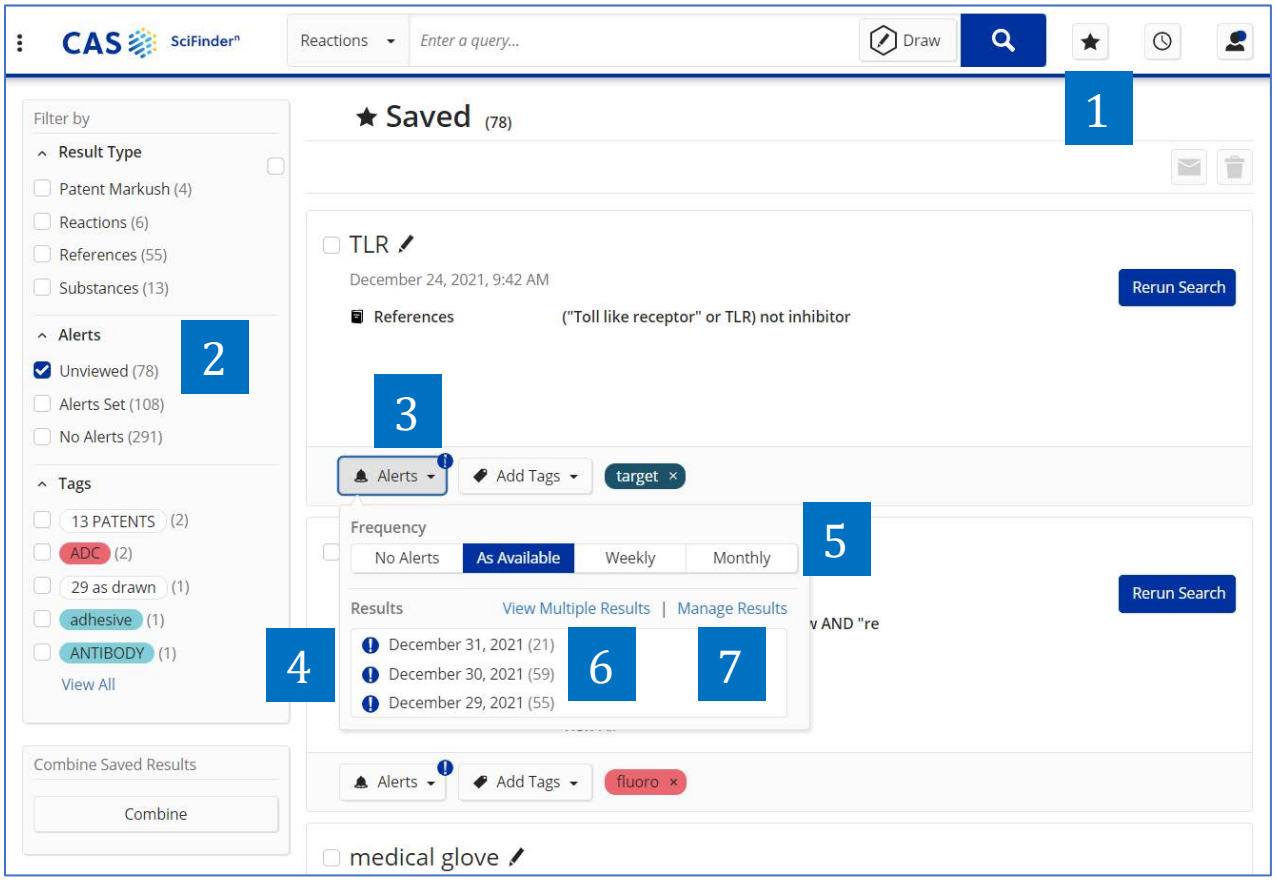
1. 在物质结果集页面点击 Save And Alerts。
2. 输入保存文件的名称。
3. 选择 No Alerts 表示不设置提醒；选择 As Available、 Weekly 或 Monthly 表示设置提醒，并同时设置提醒频率。
4. 点击 Save 完成设置。

如果在保存结果集（Markush 结构，文献，物质或者反应）的过程中未设置 Alert,则可以通过以下方法进行：



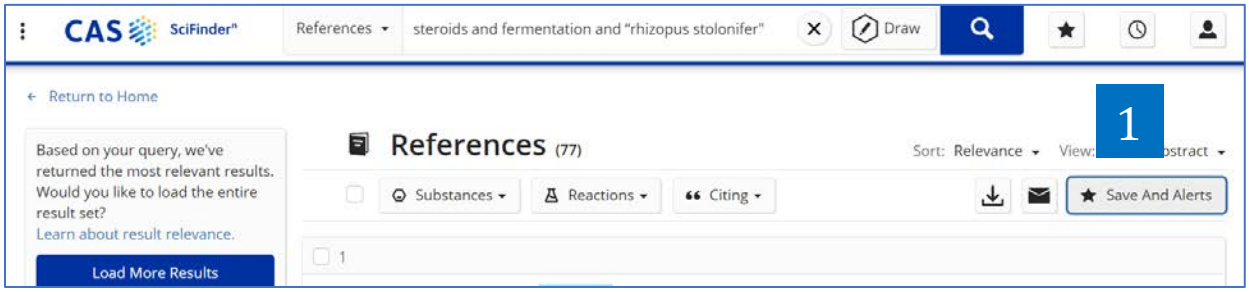
1. 点击 ★，查看保存结果集。
2. 点击 Alerts，进行设置。
3. 设置提醒频率。

Alerts 分类选项

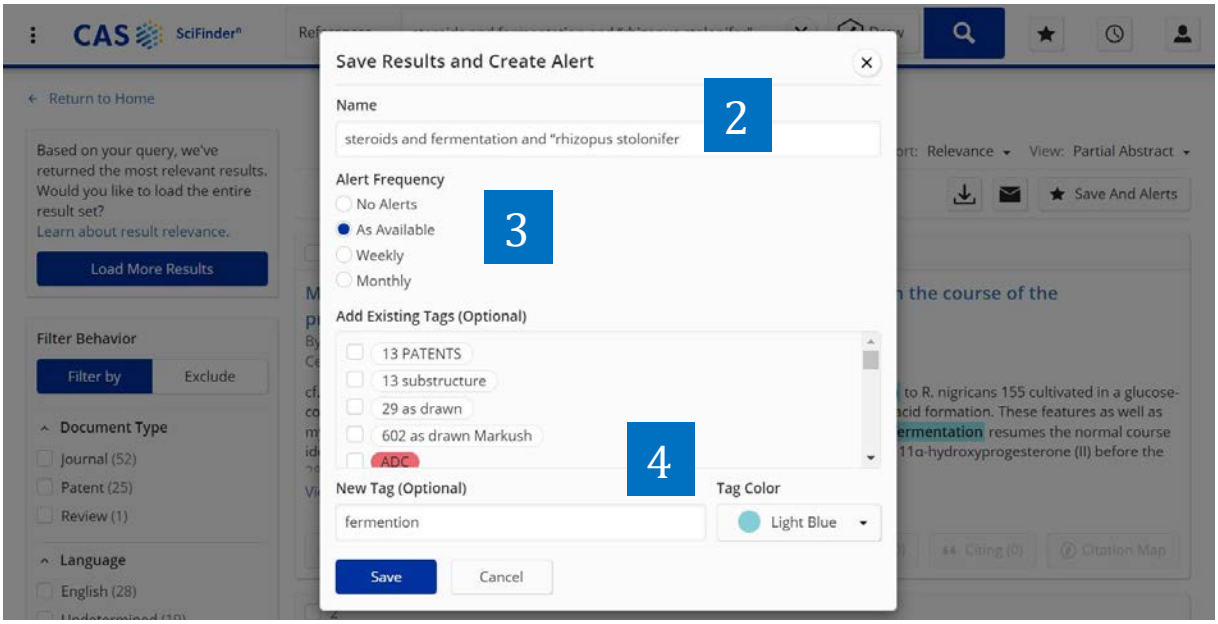


1. 点击 ★，查看保存的结果集。
2. Alerts 提供三个选项：Unviewed（未被阅读的新增信息）, Alerts Set（已设置 Alert）, No Alerts（未设置 Alert）。
3. 点击 Alerts 查看新增（更新）的信息。
4. 查看新增（更新）的信息。
5. 更改提醒设置。如：取消提醒(No Alerts)、即时提醒(As Available)、每周提醒(Weekly)或每月(Monthly)提醒。
6. 可以同时浏览多个提醒结果。
7. 可以对提醒结果设置已阅或删除提醒的结果。

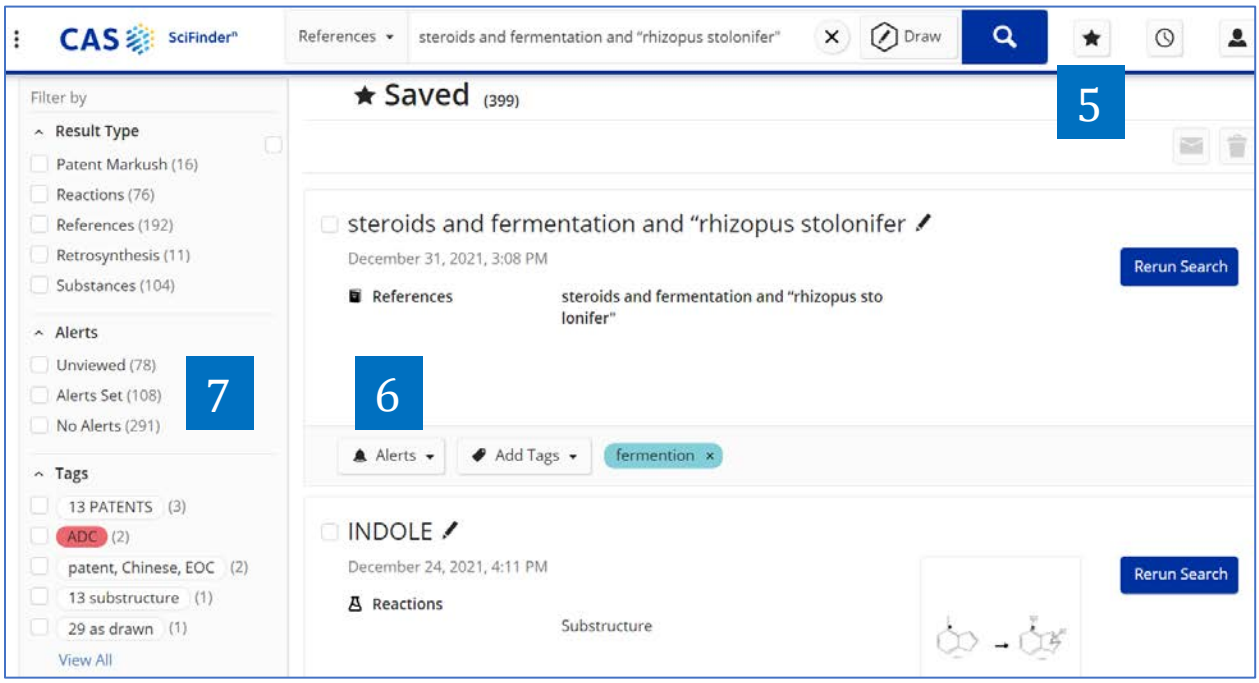
最新信息提醒



1. 在检索结果（文献、物质、反应或 Markush）页面，点击右侧 Save And Alerts，保存结果并设置提醒。

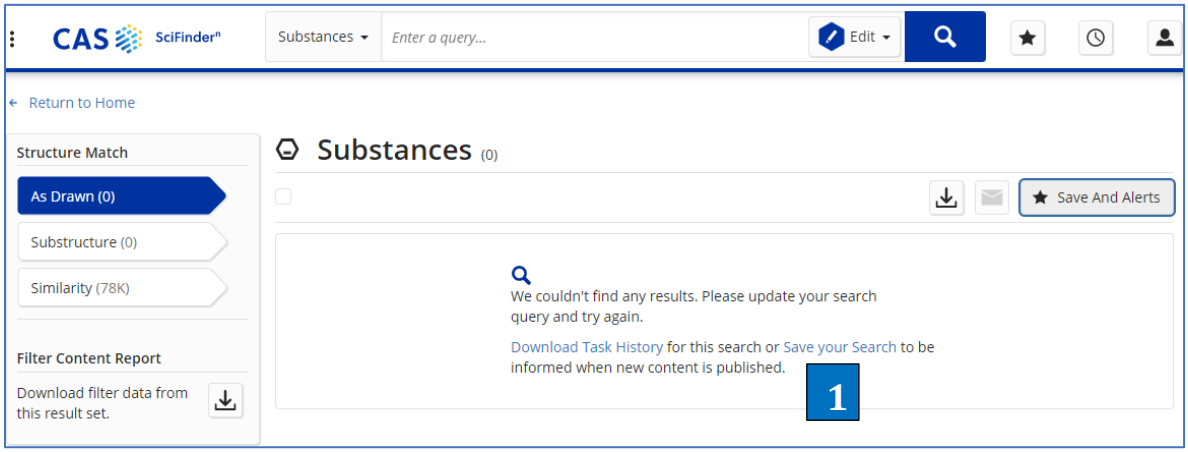


2. 输入本次保存&提醒的文件名。
3. 设置提醒频率：As Available 即时提醒、Weekly 每周提醒、Monthly 每月提醒。
4. 可根据需要标注标签(new tag)，并选择标签颜色(tag color)。

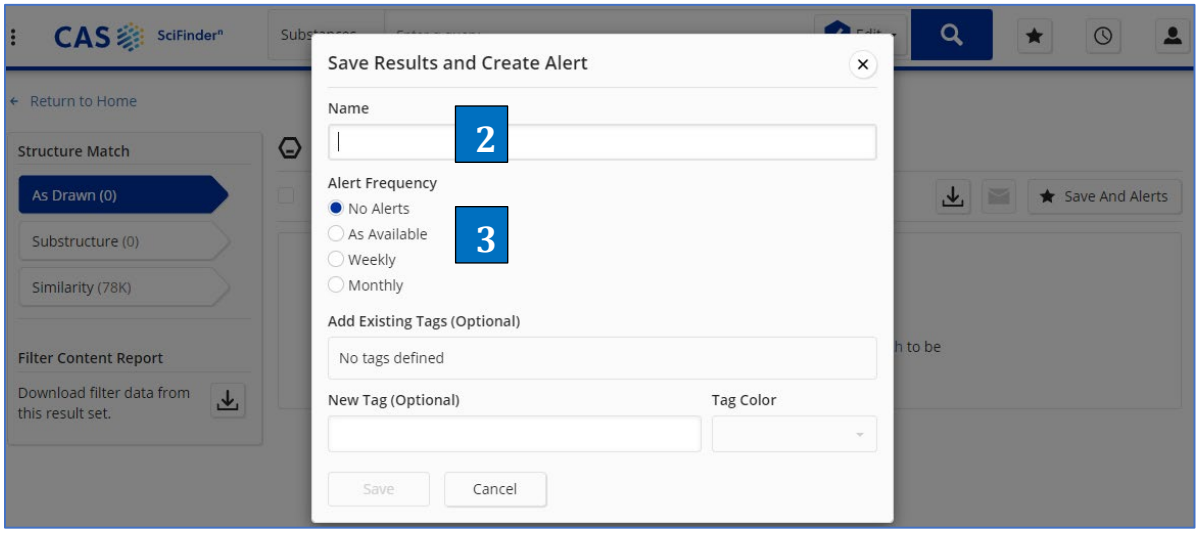


5. 点击保存的文件夹，查看设置提醒的保存项。
6. 当 Alerts 右上角出现叹号图标，表示已有更新的信息但还未被阅读。点击 Alerts，即可呈现更新信息列表，点击相应信息即可查看新信息。
7. 也可通过 Alerts: Unviewed 查看未阅读的提醒信息。

无检索结果时，如何设置 Alerts



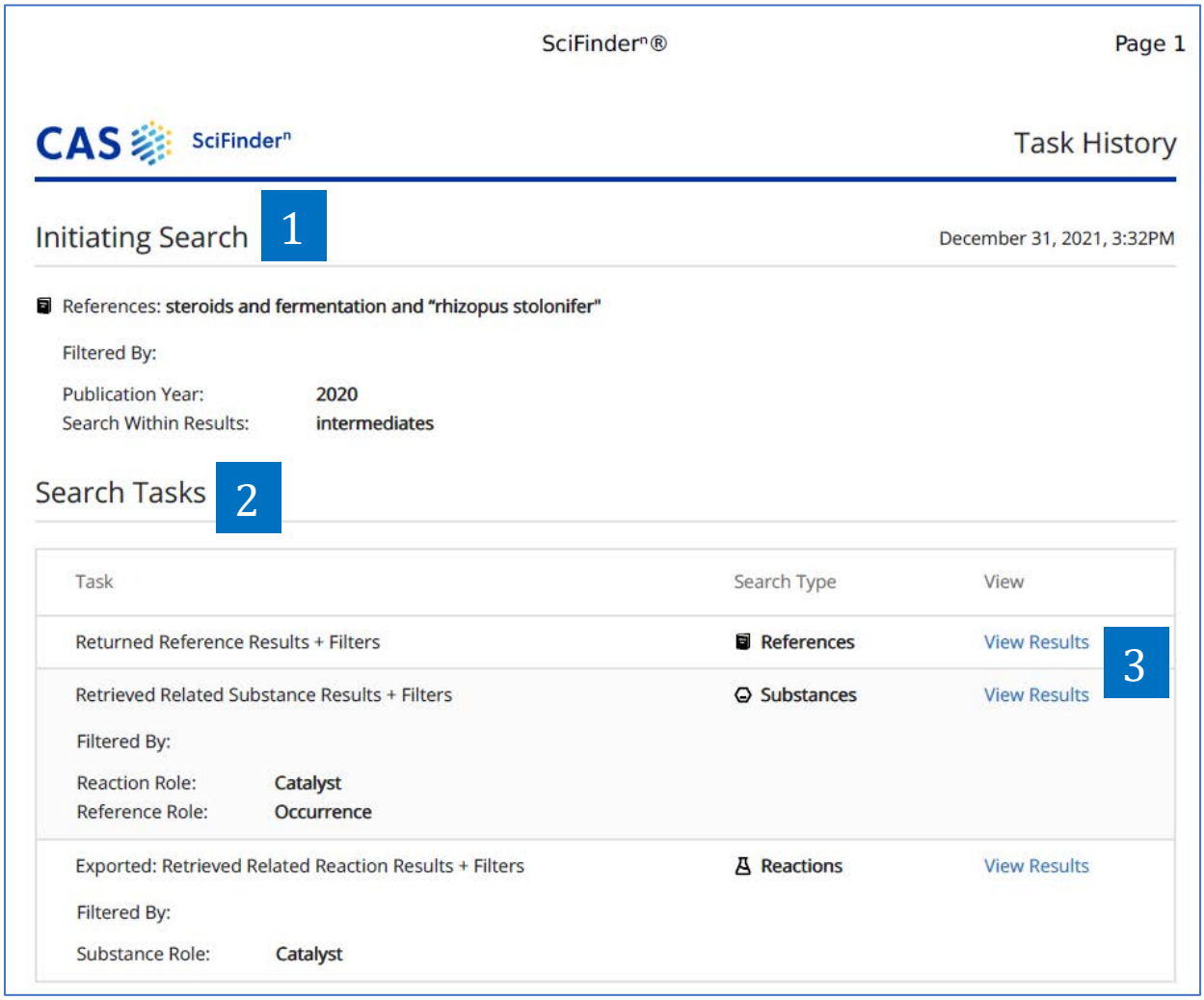
1. 当在 CAS SciFinder^{n} 中检索结果为 0 时，页面将显示“Save your Search”，点击 Save your Search，在弹出页面设置 Alerts。



2. 自定义文件名。
3. 可选择 As Available（有更新即提醒）、Weekly （如有更新，一周提醒一次）或 Monthly（如有更新，一月提醒一次）设置提醒频率。

注：文献，物质，反应检索结果为 0 时，均可采用上述方法设置 Alerts。

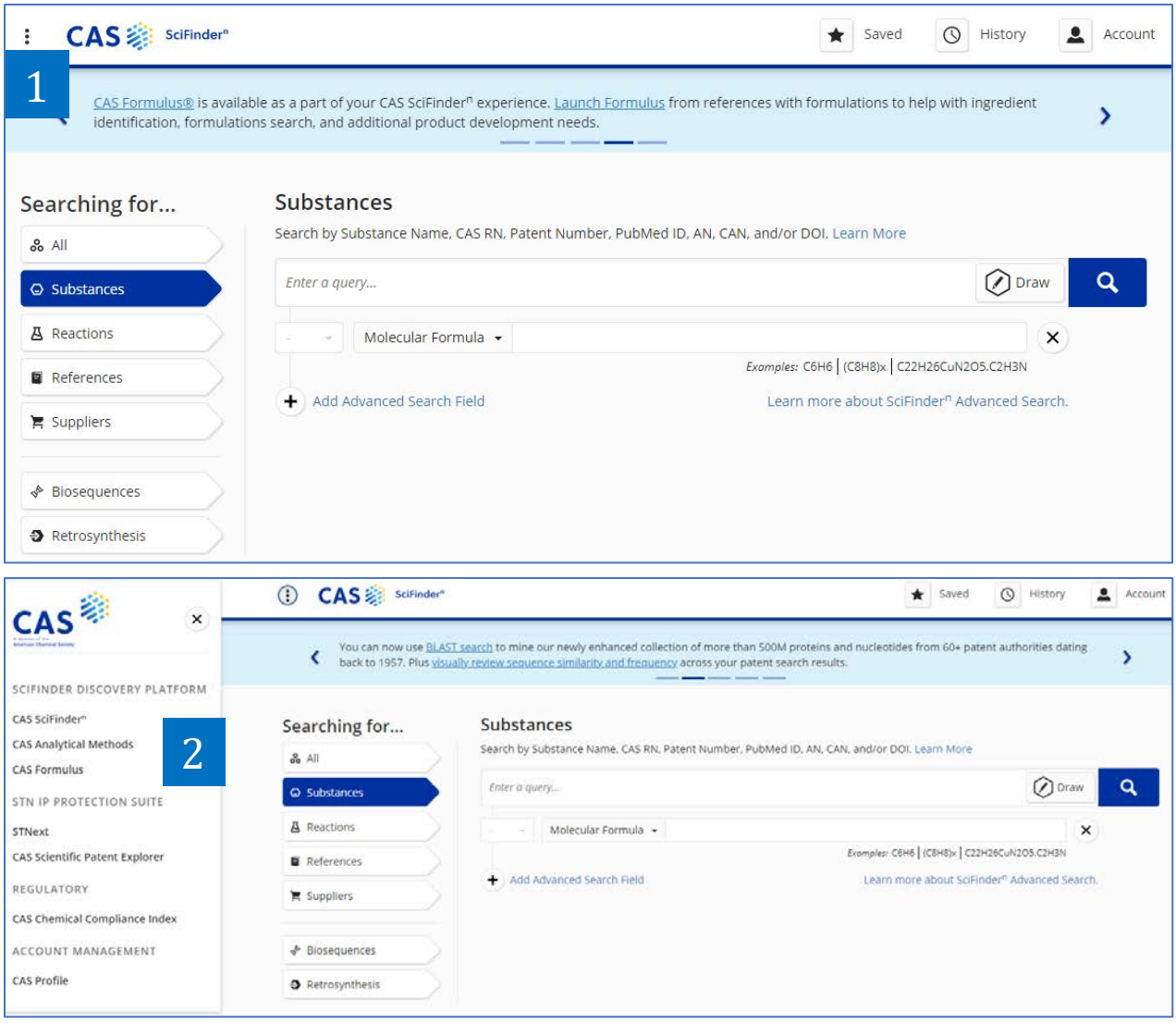
在导出的文件中查看检索过程



1. Initiating Search 即检索式。
2. 检索过程。
3. 点击 View Results 打开该步操作的结果集页面。

其他

从 CAS SciFinder^n 链接至其他 CAS 解决方案



1. 点击检索页面左上角三个点，打开 CAS App Switcher。
2. 授权用户选择任一选项，即可链接至相应平台：SciFinder Discovery Platform（除了 CAS SciFinder^n 外，还包括 CAS Analytical Methods 和 CAS Formulus）、 STN IP Suite（包括 STNext 和 CAS Scientific Patent Explorer）、 CAS Chemical Compliance Index，并可以通过 CAS Profile 进行账号管理等。