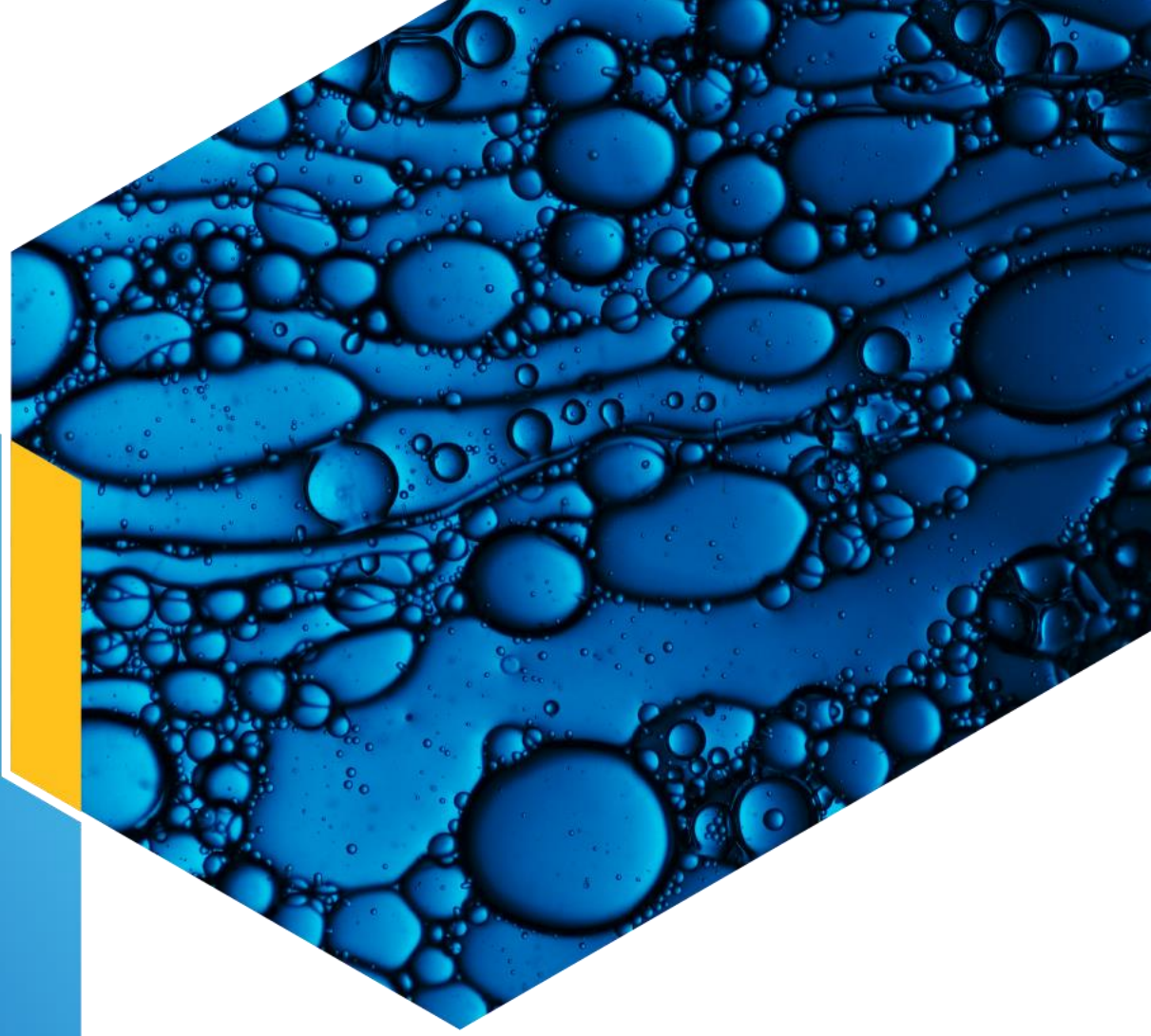


CALIS第二十届培训周

CAS SciFinder^{n}
新一代科研创新信息工具

朱传娴（学术市场经理）
2022年5月

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

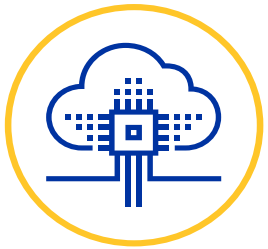
大纲

- CAS (美国化学文摘社)简介
- 新一代科研创新信息工具CAS SciFinder^{n}
- 分析方法解决方案CAS Analytical Methods^{TM}

美国化学文摘社 (CAS)隶属美国化学会(ACS)

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

UNPARALLELED
SCIENTIFIC CONTENT



SPECIALIZED
TECHNOLOGY

UNMATCHED
HUMAN EXPERTISE

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

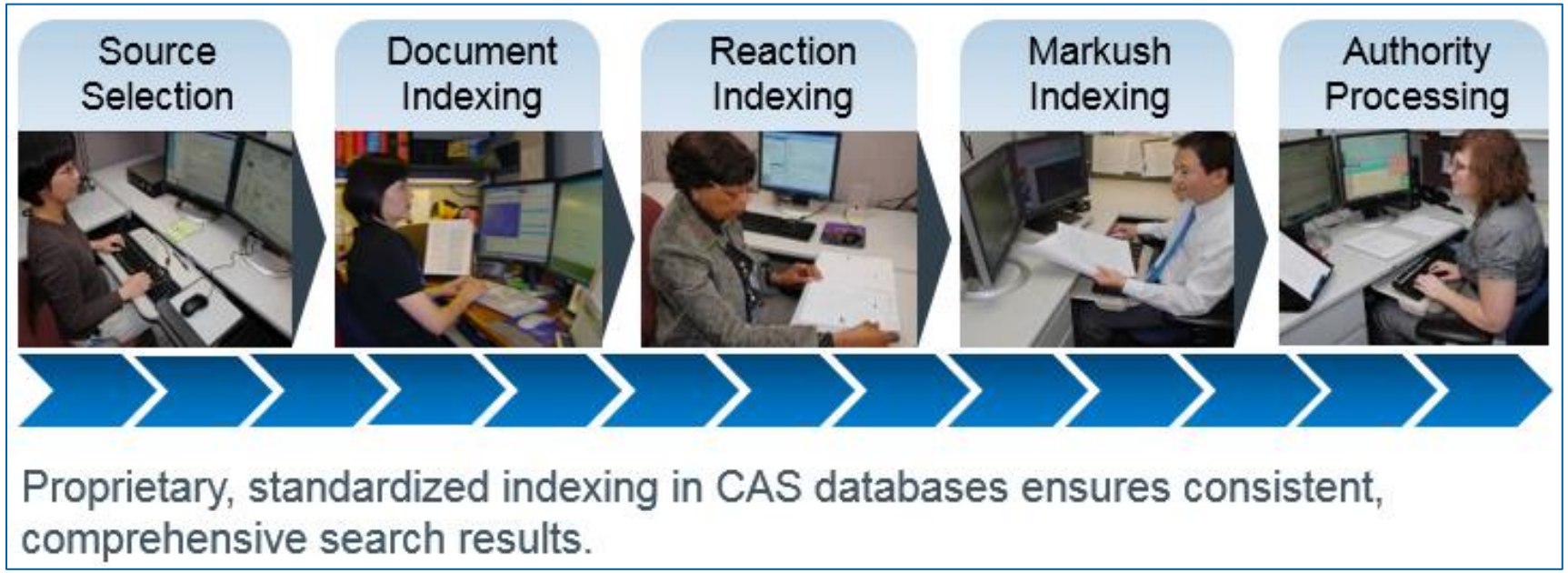
CAS数据覆盖学科

五大类80小类

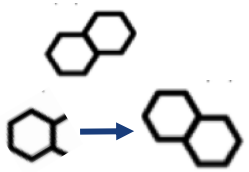
- **生物化学：**
  - 农化产品管控信息、生化遗传学、发酵、免疫化学、药理学
- **有机化学各领域：**
  - 氨基酸、生物分子、碳水化合物、有机金属化合物、类固醇
- **大分子化学各领域：**
  - 纤维素、木质素、造纸；涂料、墨水
  - 染料、有机颜料；合成橡胶；纺织品、纤维
- **应用化学各领域：**
  - 大气污染、陶瓷、精油、化妆品、化石燃料、黑色金属、合金
- **物理、无机、分析化学各领域：**
  - 表面化学、催化剂、相平衡、核现象、电化学

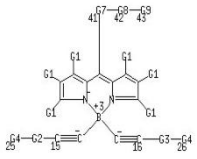
ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

CAS科学家利用人类智慧对公开内容进行揭示



1990
Smith, M.
anthracene





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

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

经过CAS科学家的揭示相关信息更易被挖掘

- 人工标引——精准揭示关键技术信息
- 数千名科学家组成的编辑团队深刻理解客户的实际需求
- 审阅、筛选、摘要、标引以覆盖并揭示全球所有已公开的化学及相关信息
- CAS登记号——物质的黄金标准
- CAS Roles (CAS物质角色)——生物研究、性能用途、分析检测、合成制备
- CAS Index Terms (CAS技术词语标准)——揭示技术词语相互间的关联
- CA Sections (CAS学科分类，80个类别)——精准定位具体研究领域

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

CAS解决方案与服务

DISCOVERY

CAS SciFinder^{n}

加速科研发现

INTELLECTUAL PROPERTY

STN IP Protection Suite™

保护科研成果，激发创新火花

CUSTOM SOLUTIONS

CAS Custom Services℠

CAS定制服务提供科研所需的数据、分析和洞察

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

大纲

- CAS (美国化学文摘社)简介
- 新一代科研创新信息工具CAS SciFinder^{n}
- 分析方法解决方案CAS Analytical Methods™

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

CAS SciFinder^{n}是来自CAS的全新产品

- 基于用户习惯、需求、检索策略和革新技术，采用新方法将CAS内容传递给研究人员
- 先进的平台不仅需要实现信息的获取，还要帮助用户发现最佳起点
- CAS的化学信息历史积累、系统知识和人工智力能够加速您的工作

用户需求的演进、内容的增长和广度的扩展推动

新的技术解决方案的出现！

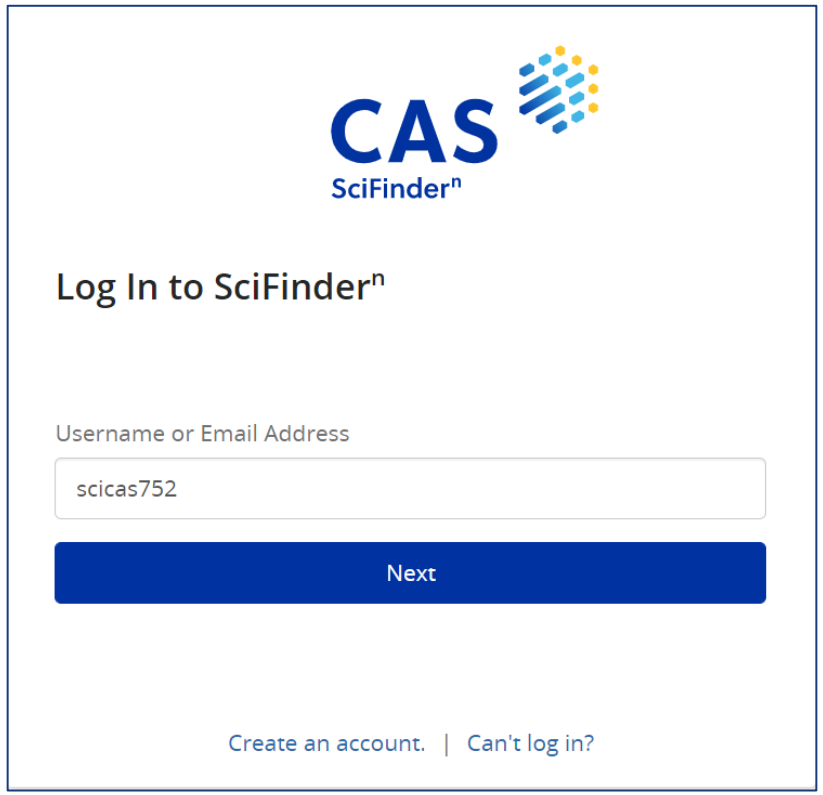
ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

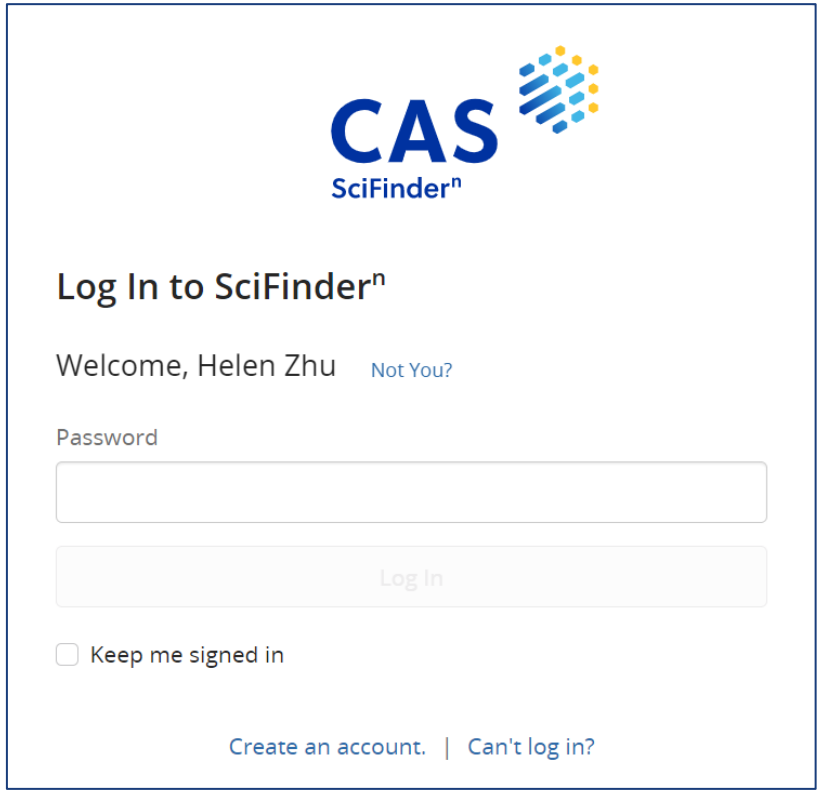
CAS SciFinder^{n}中覆盖的内容合集

来源：
https://www.cas.org/cas-data
https://www.cas.org/about/cas-content

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

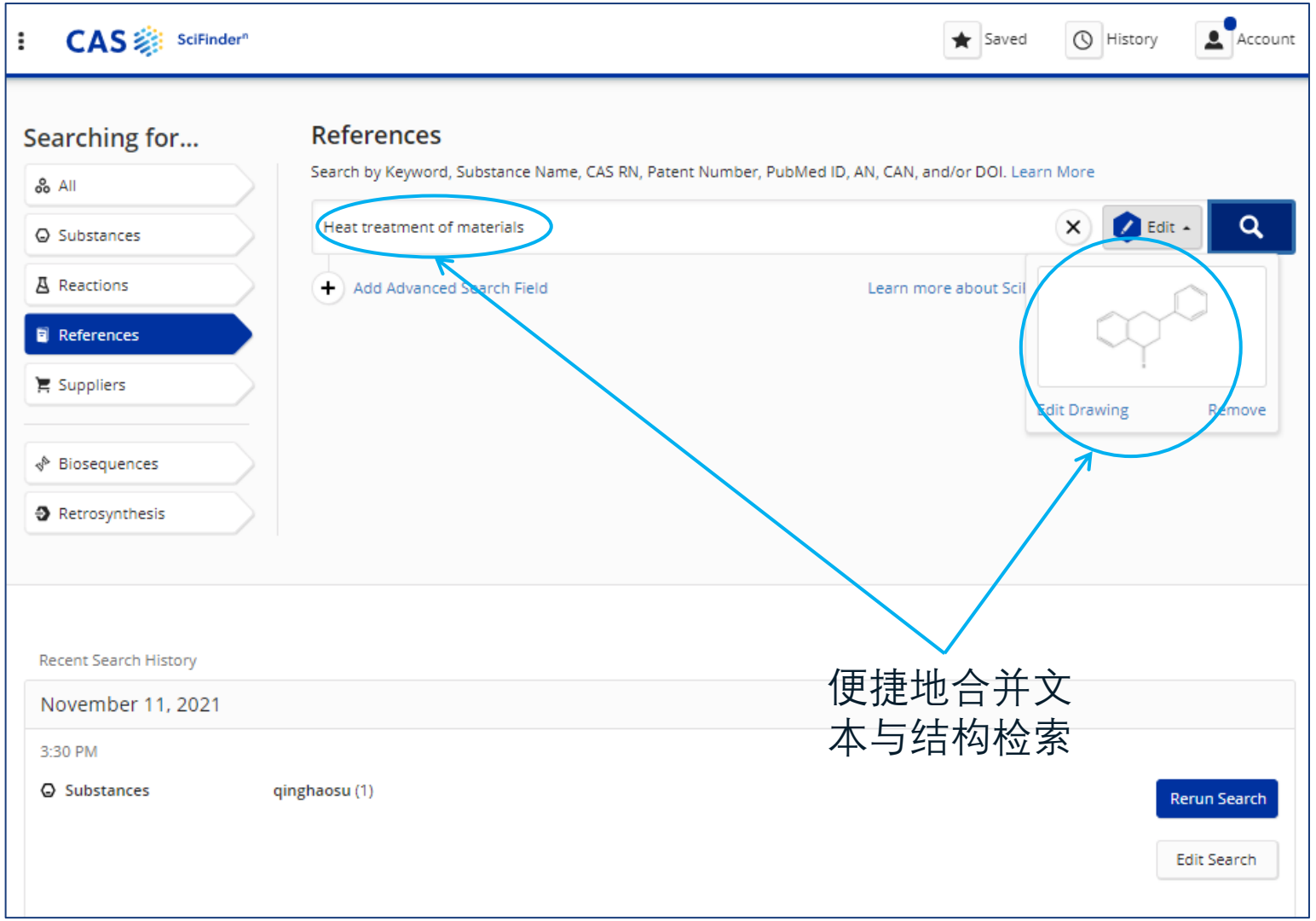
CAS SciFinder^{n}登录网址：https://SciFinder-n.cas.org





账号与CAS SciFinder相同

简洁的界面，快速执行检索

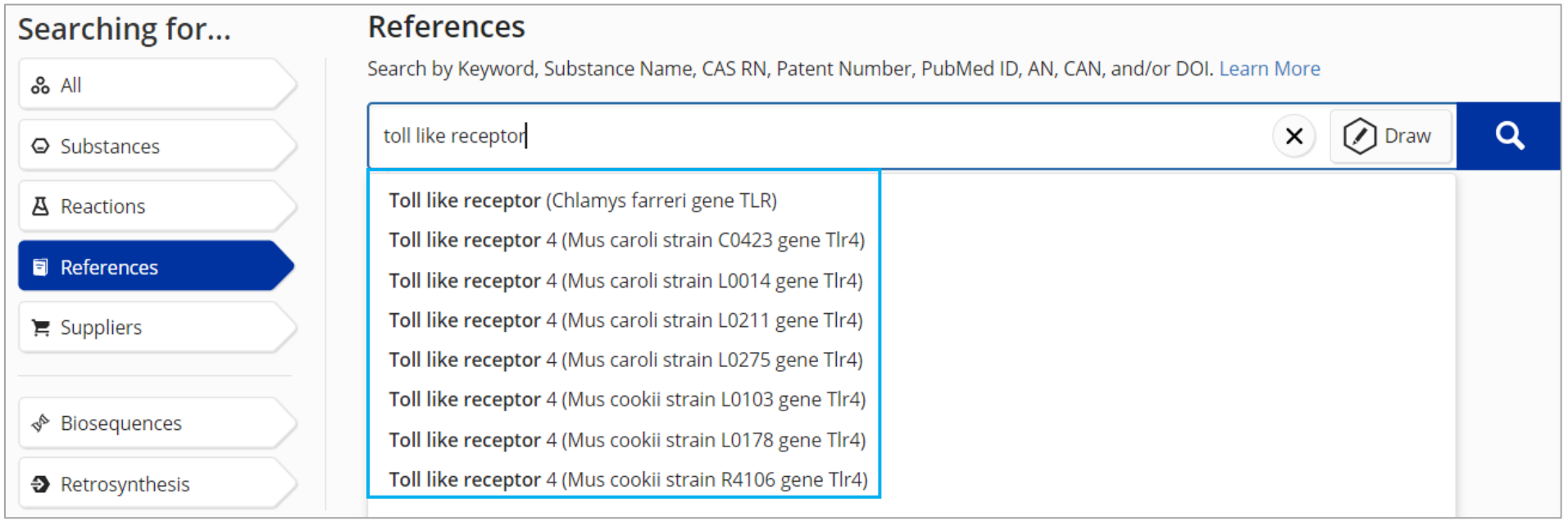


灵活的检索选项

快速运行之前的检索项目

便捷地合并文本与结构检索

文献检索—主题词



基于科学家创建的叙词表，充分利用自动提示检索词，启发检索思路;

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

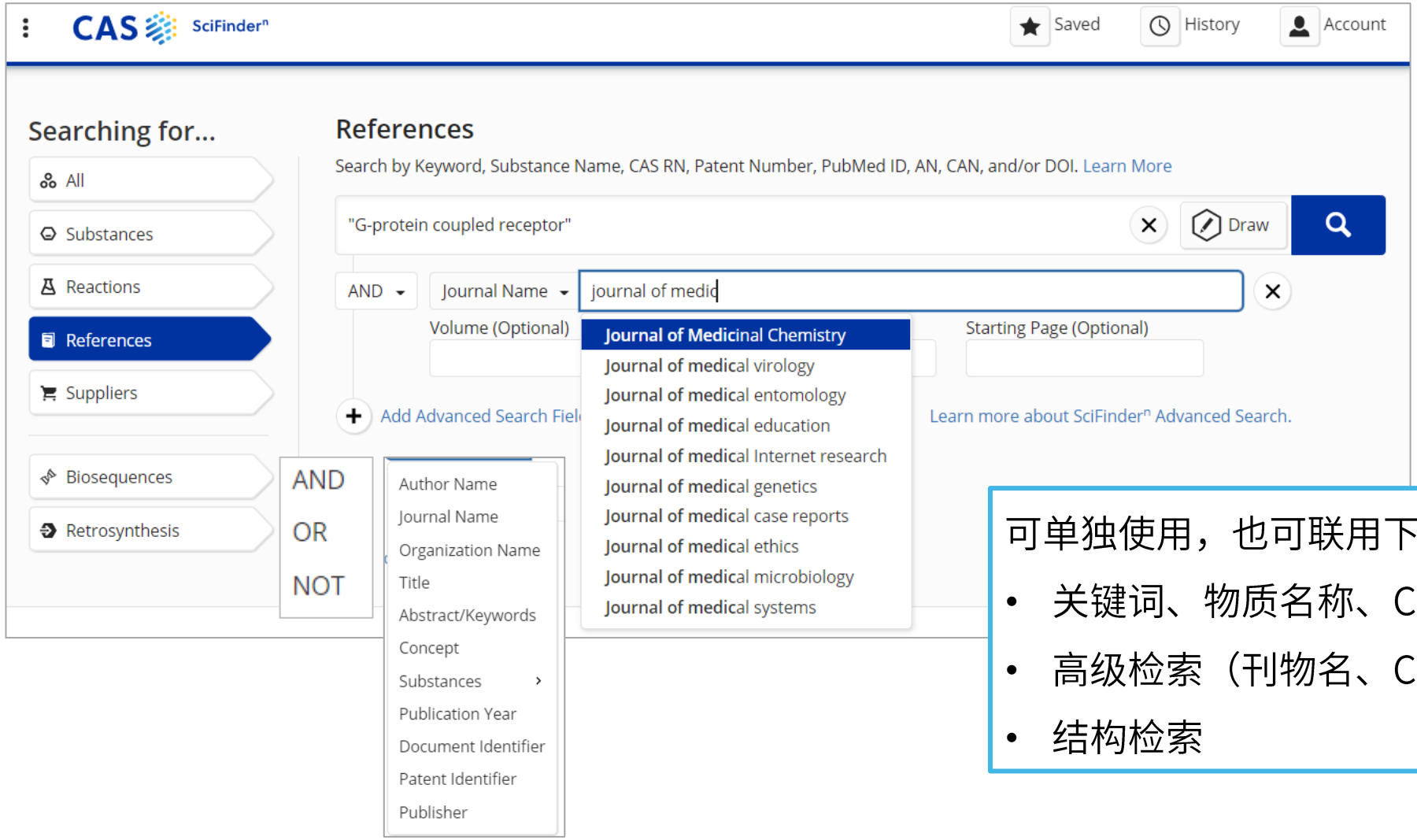
( ) 优先运算;

“ ”不允许词形变化，但可出现单数或复数;

支持通配符*或？（*代表0或多个字符；？代表0或1个字符）。

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

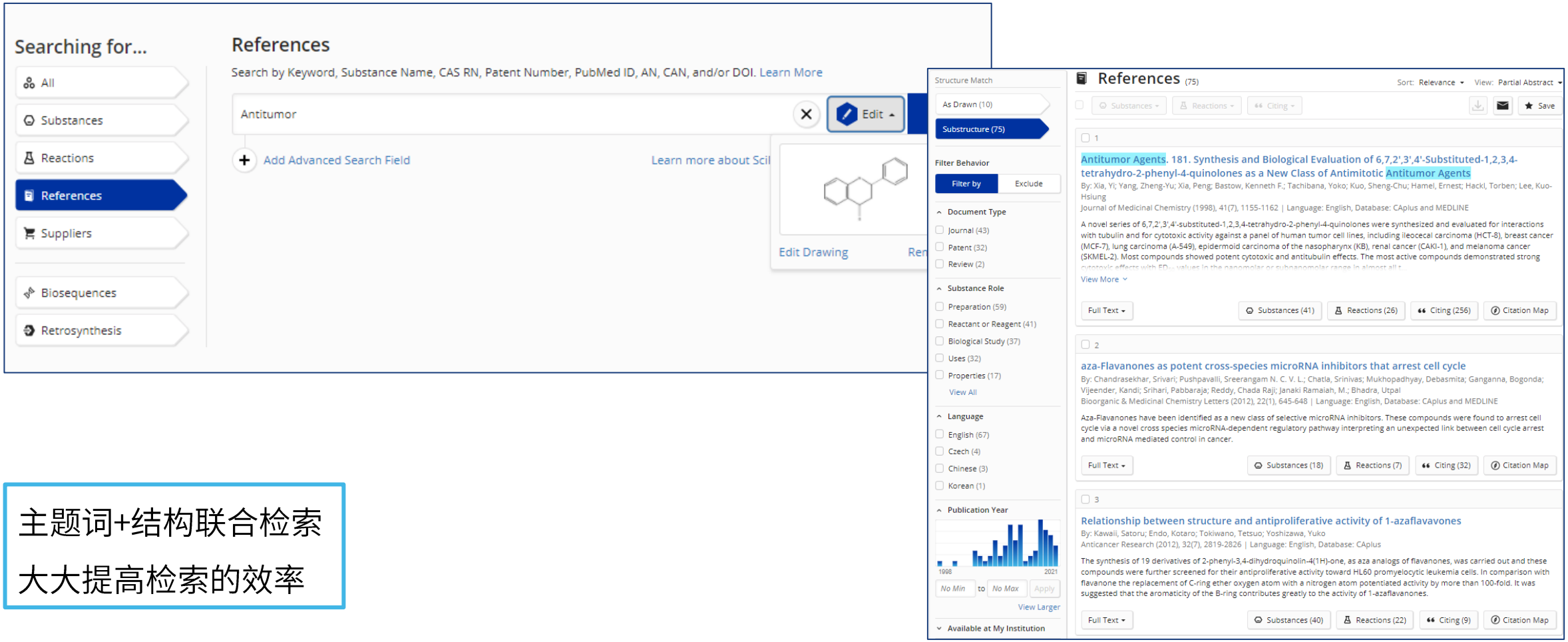
高级检索--高效实现多字段组合检索



可单独使用，也可联用下面的检索方法：

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

文献检索--主题词+结构联合检索



主题词+结构联合检索

大大提高检索的效率

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

直观的结果页面，丰富的聚类分析

文献类型语言

出版年份

作者

机构名

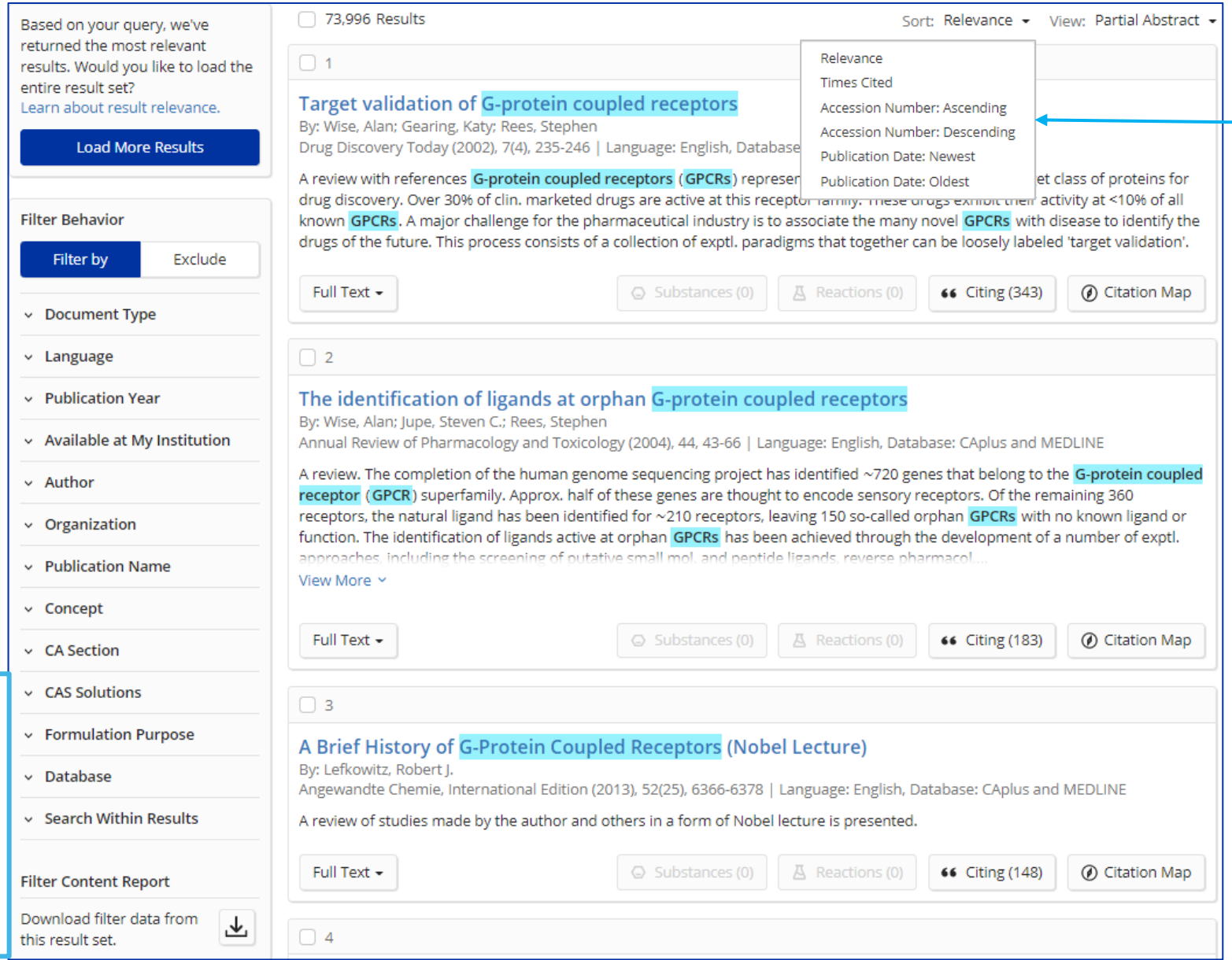
刊物名

Concept

CA Section

……

聚类筛选项节省时间，一目了然。无需逐步二次检索和限定，直接勾选即可定位所需信息



排序：

更快查找

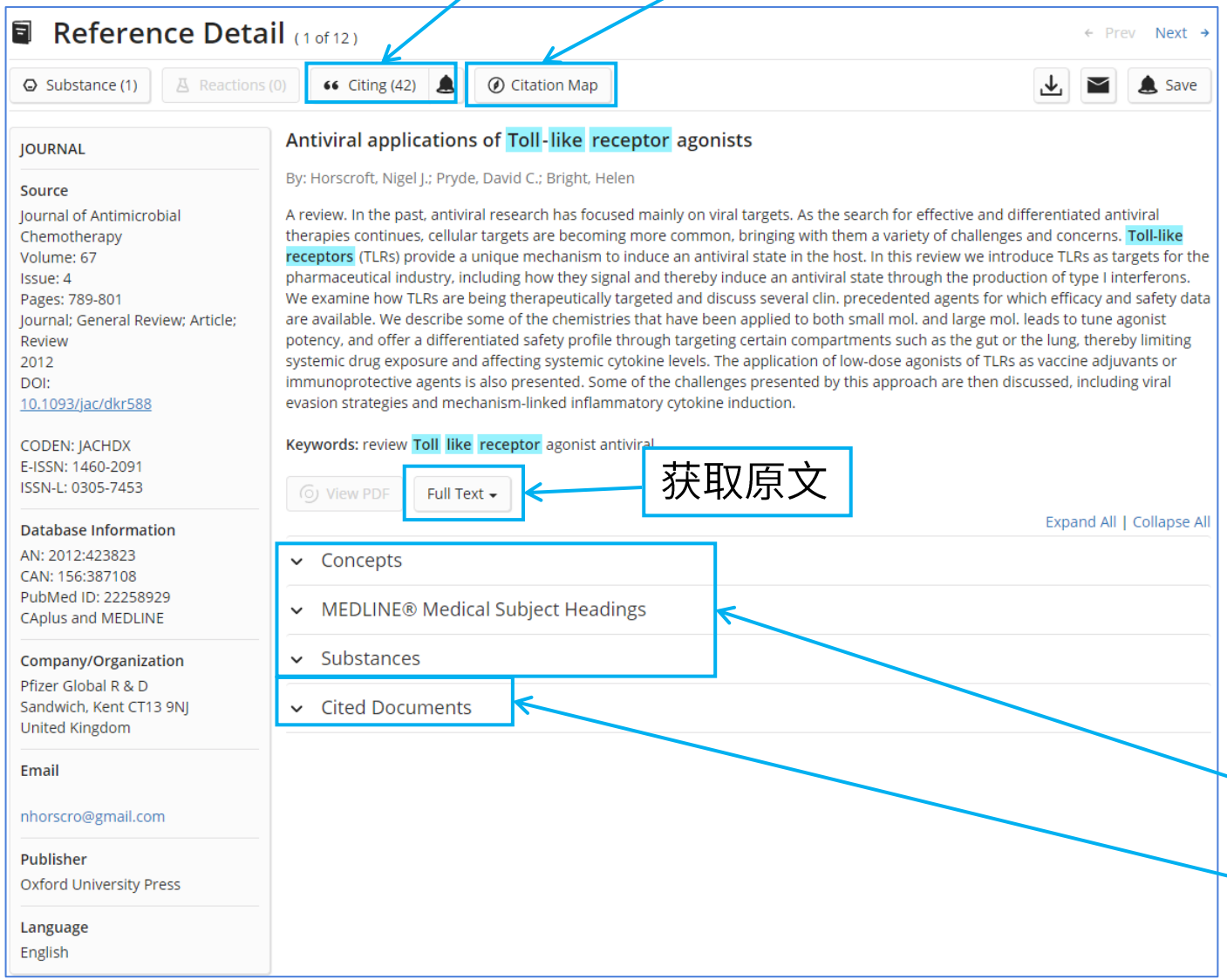
相关信息

CAS
A division of the American Chemical Society

文献详情

被引文献

引文地图



获取原文

文献详情界面包括：

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

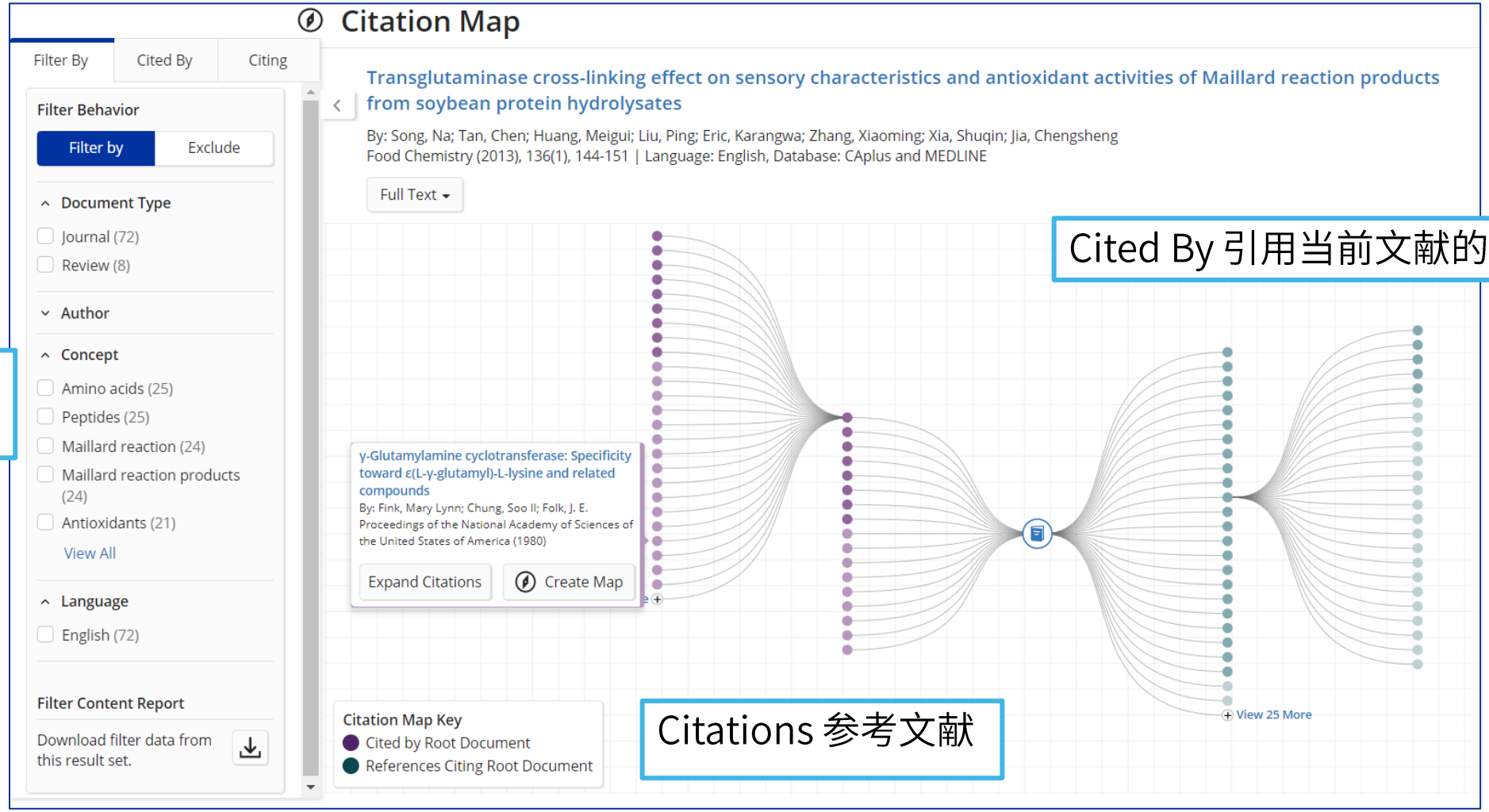
CAS科学家增值标引的信息

参考文献

ACS International

CAS A division of the American Chemical Society

Citation Map: 便捷地获取关联文献



对引文做筛选

Cited By 引用当前文献的文献

Citations 参考文献

CAS PatentPak™--专利流程解决方案

- 是唯一提供在专利中快速定位物质相关化学信息的工具
- 安全、快捷地获得来自全球46个专利授权机构的PDF格式专利文件
  - 无需在多个不同专利局网站上耗费时间
  - 可获得的专利数量是其他科学信息检索工具的7倍
  - 新的专利文件每日上传更新
- 通过PatentPak浏览器，快速定位专利PDF文件中的重要物质页码信息，迅速找到难以查找的化学信息，可为研究人员节省一半以上的时间
- 在CAS专利族文献中找到你所熟悉语言的专利

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

专利文献

PatentPak浏览器

下载专利原文

获取现有技术文献

专利族信息

优先权信息

PATENT

Patent Number
WO2015011254

Publication Date
2015-01-29

Application Number
WO2014-EP66007

Application Date
2014-07-25

Kind Code
A1

Assignee
INSERM (Institut National de la Sante et de la Recherche Medicale), France

Universite de Droit et de la Sante de Lille 2, France

Universite de Lille 1 Sciences et Technologies, France

ETH Zurich, France

Universidad de la Republica, France

Source
World Intellectual Property Organization

CAN: 162:266207
CAplus

Language
English

CAS Formulus®, the comprehensive formulations database and workflow solution, is now users. View content from CAS Formulus® in this document. Learn more about Formulus®

Methods using toll-like receptor (TLR) agonists in combination with antibi bacterial infections

By: Hardt, Wolf-Dietrich; Kaiser, Patrick; Sirard, Jean-Claude; Carnoy, Christophe; Fougeron, Delphi Munoz, Natalia

The invention relates to methods and pharmaceutical compositions for the treatment of bacterial relates to a toll-like receptor (TLR) agonist (e.g. flagellin polypeptide, biomols., peptides, antibodies for the treatment of a bacterial infection in a subject in need thereof wherein the TLR agonist is ad combination with at least one antibiotic. In another aspect of the invention the antibiotic is selecte aminoglycosides, beta-lactams, quinolones or fluoroquinolones, macrolides, sulfonamides, sulfam streptogramins, oxazolidinones, rifamyc s.

Keywords: antibacterial toll like recepto biotic TLR a therapy bacterial infection

PatentPak Viewer | Get Prior Art Analysis | Full Text

Patent Family

Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options	Publication Date	Appli
WO2015011254	English	A1	PDF | PDF+ | Viewer	2015-01-29	WO2
EP3024476	English	A1		2016-06-01	EP20
EP3632458	English	A1	PDF	2020-04-08	EP20
US20160151453	English	A1	PDF	2016-06-02	US20
US9919029	English	B2		2018-03-20	US20

Priority Application

Priority Application Number	Application Date
EP2013-306086	2013-07-26
EP2014-749736	2014-07-25
WO2014-EP66007	2014-07-25

IPC Data

CAS PatentPak | PAGE 34 /51 | ZOOM | DOWNLOAD PDF | PDF+

Key Substances in Patent

CAS RN 723-46-6D
derivs.
Analyst Markup Locations (1)
Page 34

CAS RN 11006-76-1D
Virginiamycin derivs.
Analyst Markup Locations (1)
Page 34

CAS RN 1406-11-7
Polymyxin
Analyst Markup Locations (1)
Page 34

CAS RN 57-62-5
Analyst Markup Locations (1)
Page 34

CAS RN 127-33-3
Analyst Markup Locations (1)
Page 34

CAS RN 564-25-0

Expand All | Collapse All

WO 2015/011254 PCT/EP2014/066007

sulfonamides, sulfamethaxozoles, tetracyclines, streptogramins, oxazolidinones, rifamycins, glycopeptides, polymixins, and lipo-peptide antibiotics.

18. The method of claim 1 wherein the antibiotic is a tetracycline selected from the group consisting of chlortetracycline, demeclocycline, doxycycline, minocycline, oxytetracycline, chlortetracycline, methacycline, mecocycline, tigecycline, limecycline, and tetracycline.

19. The method of claim 1 wherein the antibiotic is an aminoglycoside selected from the group consisting of amikacin (Amikin®), gentamicin (Garamycin®), kanamycin (Kantrex®), neomycin (Mycifradin®), netilmicin (Netromycin®), paromomycin (Humatin®), streptomycin, and tobramycin (TOBI Solution®, TobraDex®).

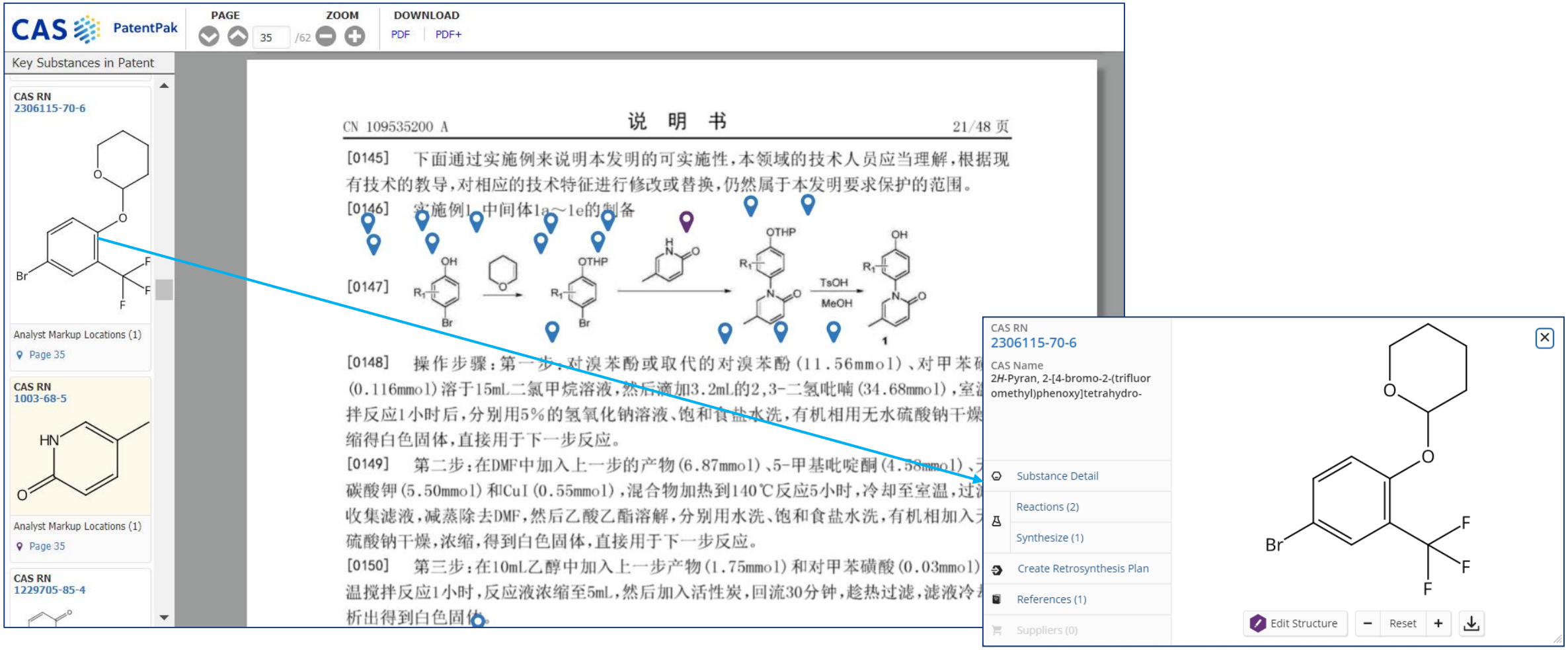
20. The method of claim 1 wherein the antibiotic is a macrolide selected from the group consisting of azithromycin (Zithromax®), clarithromycin (Biaxin®), dirithromycin (Dynabac®), erythromycin, clindamycin, josamycin, roxithromycin and lincomycin.

21. The method of claim 1 wherein the antibiotic is a fluoroquinolone selected from the group consisting of nalidixic acid, cinoxacin, oxolinic acid, flumequine, pipemidic acid, rosoxacin, norfloxacin, lomefloxacin, ofloxacin, enrofloxacin, ciprofloxacin, enoxacin, amifloxacin, fleroxacin, gatifloxacin, gemifloxacin, clinafloxacin, sitafloxacin, pefloxacin, rufloxacin, sparfloxacin, temafloxacin, tosufloxacin, grepafloxacin, levofloxacin, moxifloxacin, and trovafloxacin.

22. The method of claim 1 wherein the a consisting of mafenide, phtalylsul sulfadiazine, sulfadoxine, sulfa sulfametopirazine, sulfametoxypi sulfamylon, sulfanilamide, su

PatentPak:
直接下载专利原文
快速定位专利中的物质
快速理解专利
阅读熟悉语言撰写的等同专利

CAS PatentPak™--专利流程解决方案



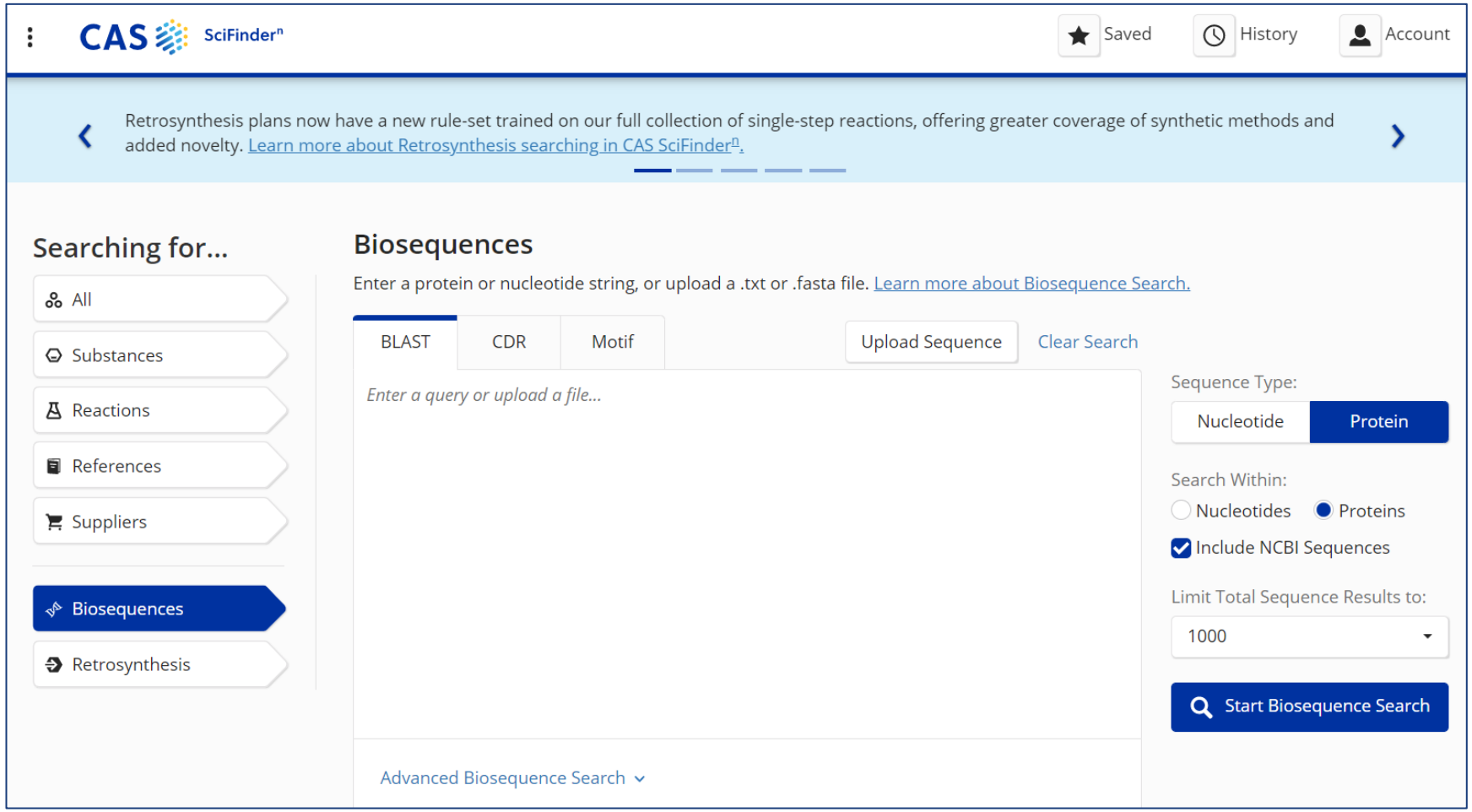
可在PatentPak浏览器中单击结构，打开物质菜单检索具体信息

Biosequences Search™—分子生物学解决方案

- 超过10亿条序列
- 涵盖专利、非专利文献披露的序列
- 专有的CAS人工标引的化学修饰序列
- NCBI中的序列
- 可实现新颖性、创造性检索
- 简洁直观的检索界面 & 便捷的筛选、可视化分析、相关信息获取和下载功能
- 三种检索方式：BLAST、CDR、Motif

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

Biosequences Search™--BLAST检索



BLAST：
用生物序列检索核酸或蛋白

四种检索选择：

Protein-Protein

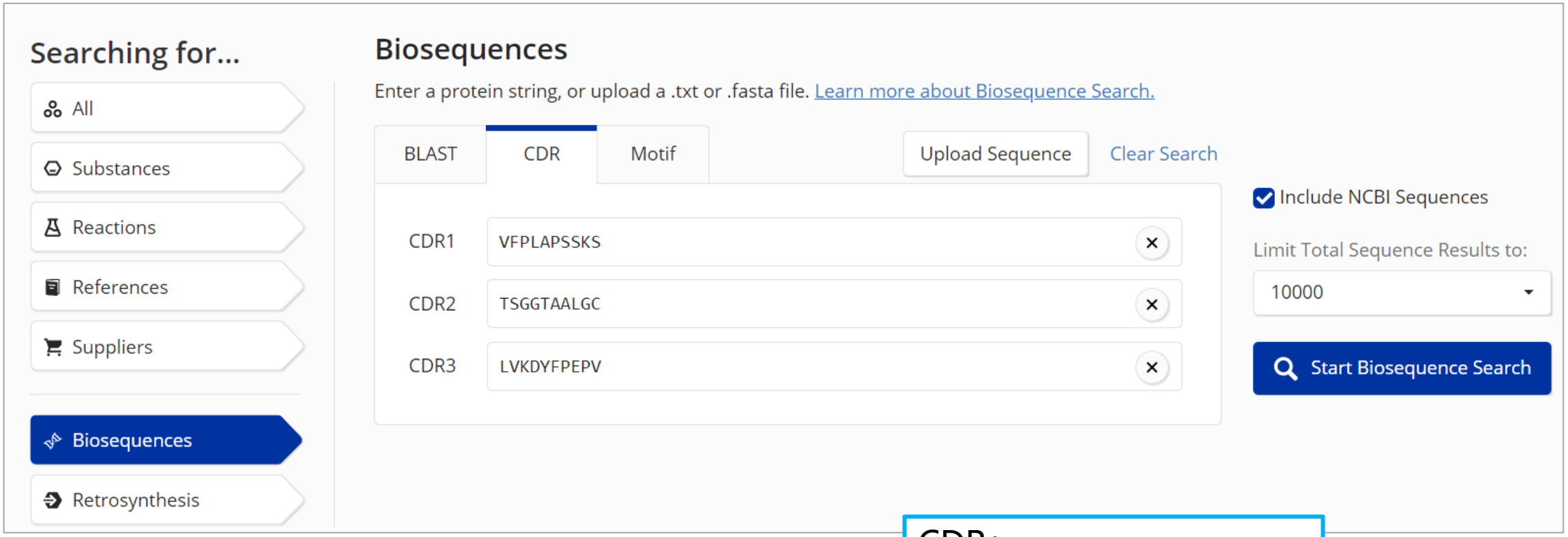
Protein-Nucleotides

Nucleotide-Nucleotides

Nucleotide-Proteins

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

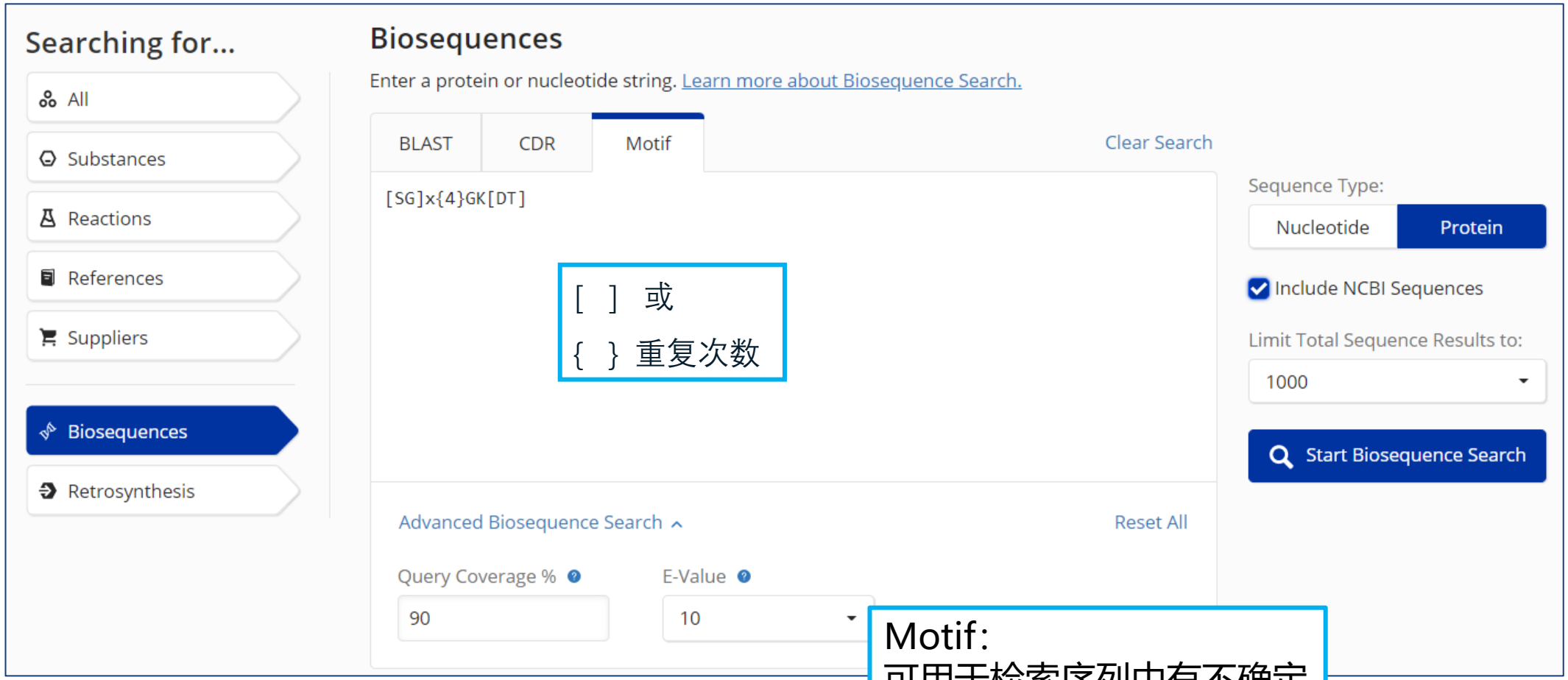
Biosequences Search™--CDR检索



CDR：
检索抗体或T细胞受体上的互补决定区的氨基酸序列

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

Biosequences Search™--Motif检索



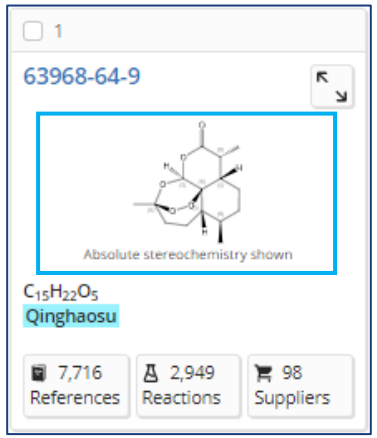
Motif:
可用于检索序列中有不确定位点的DNA、RNA或蛋白；
推荐检索短序列

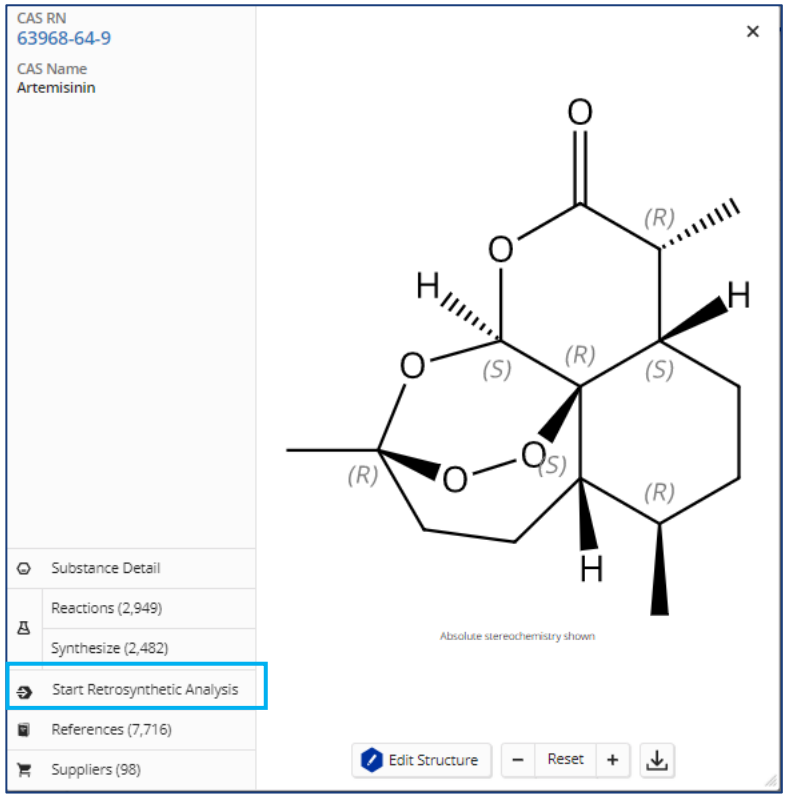
CAS SciFinder-n Help:
https://scifinder-n.cas.org/help/#t=Searching_in_SciFinder-n%2FBiosequence_Search%2FBiosequence_Search_-_Motif.htm&rhsearch=motif&rhhlterm=motif&rhsyns=%20

CAS Retrosynthesis Tool—逆合成工具

- 依据一个确定结构的物质进行设计
- 有报道且结构明确的物质，无论是否有反应信息报道
- 未有报道且结构明确的物质
- 节省设计、实施合成新方法所花费的时间

CAS Retrosynthesis Tool--由物质获得



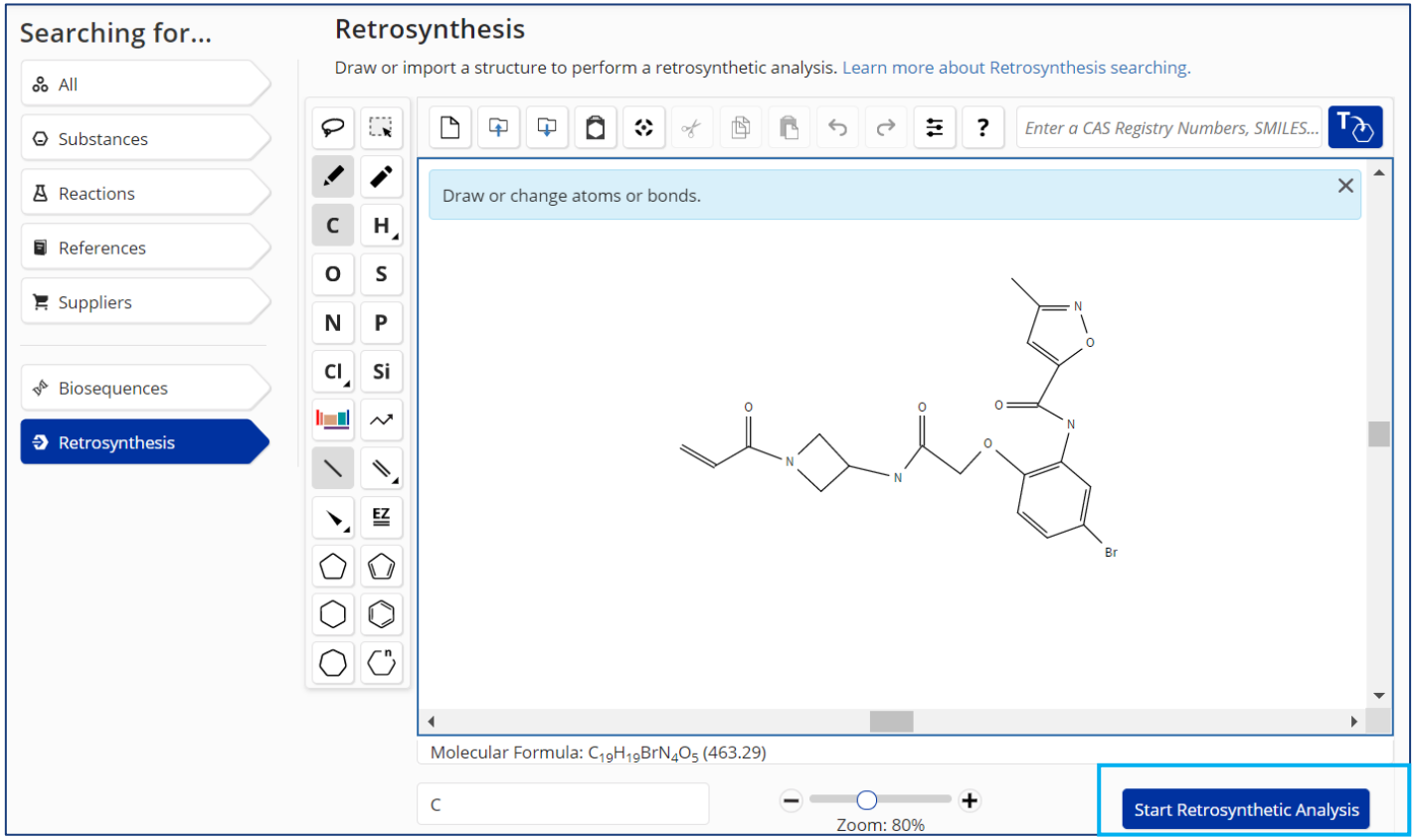


CAS Retrosynthesis Tool：
逆合成反应路线设计功能，
启发合成实验设计思路高效
获取逆合成反应路线

从已知化合物获得逆合成路线：

点击物质结构，弹出的物质菜单中点击Create Retrosynthesis

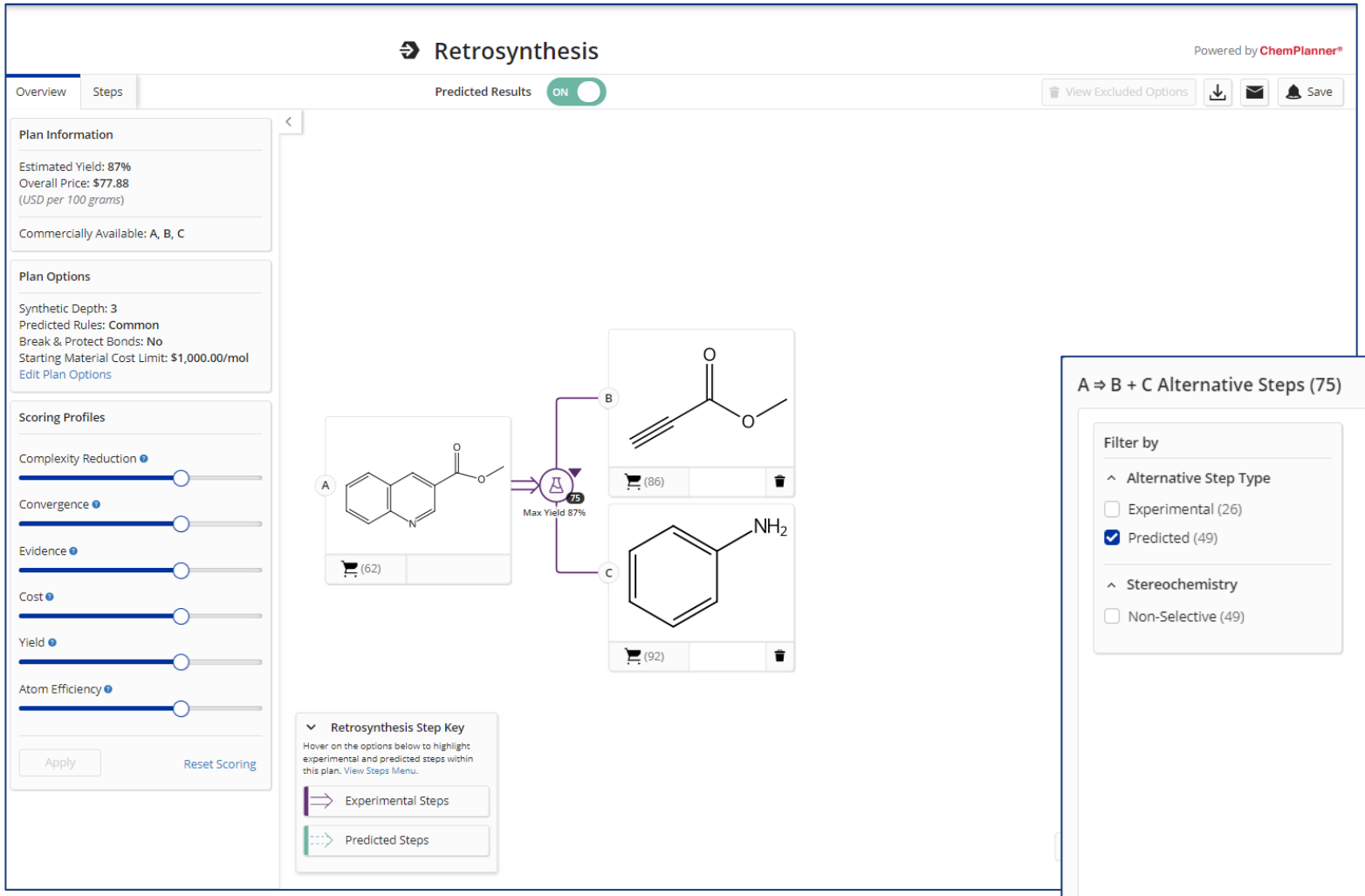
CAS Retrosynthesis Tool—直接绘制结构



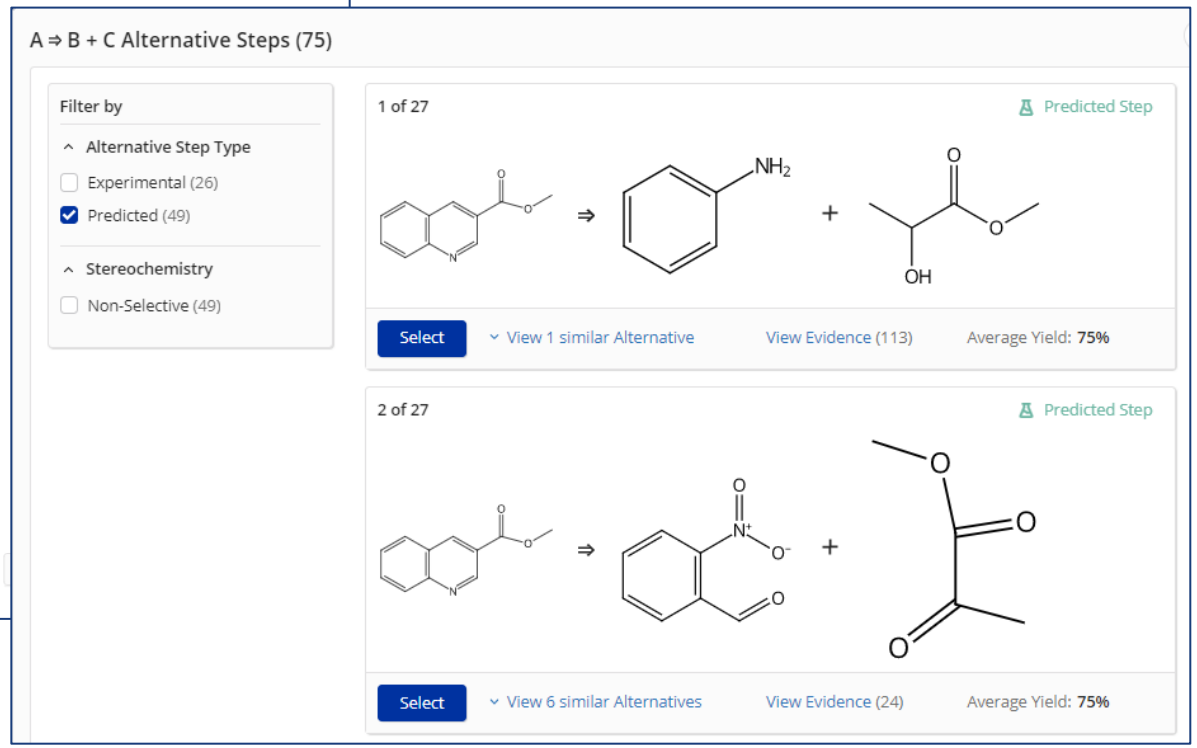
绘制目标化合物：

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

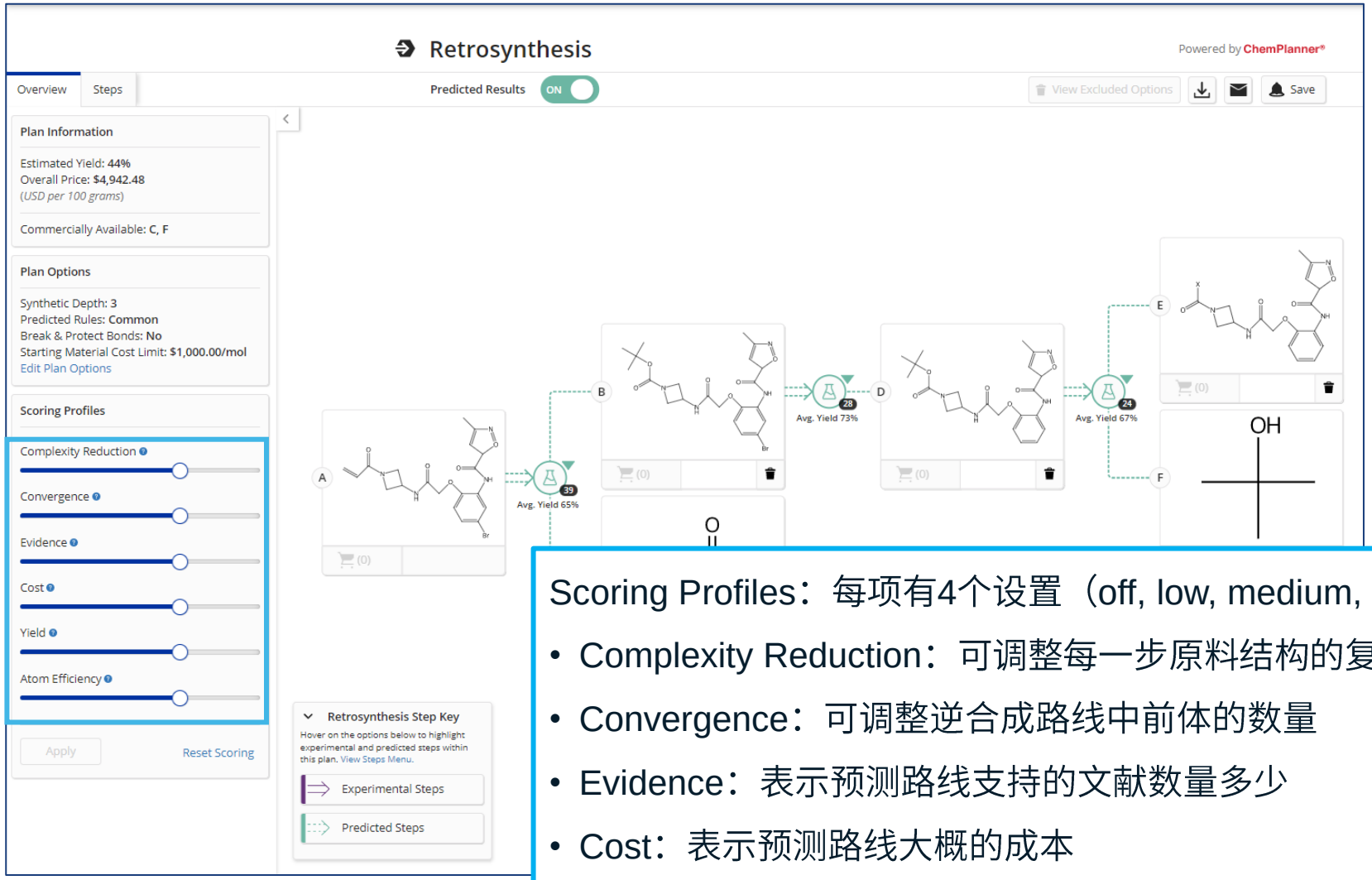
CAS Retrosynthesis Tool—对已知化合物



对已知化合物，CAS Retrosynthesis Tool既可以获取其已经报道的逆合成实验路线，也可以查看其预测的路线



CAS Retrosynthesis Tool—对未知化合物



预测新化合物的合成路线后，可继续通过Scoring灵活调整预测参数

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

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

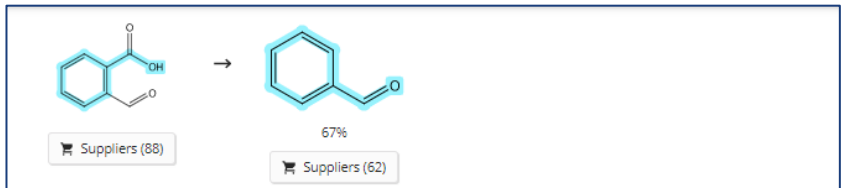
ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

Synthetic Methods™--合成方法详情解决方案

- 迄今为止全球最大的为合成科学家提供的实验方法详情解决方案
- CAS科学家通过分析大量的顶级科技期刊及专利原文，收集、整理、筛选出来的实验方法
- 无需下载阅读全文，即可获得合成实验所需的所有信息
- 极大节省在期刊全文中查找信息的时间

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

Synthetic Methods™--合成实验方法数据库



Step 1

Alternative Steps (1)

Stage	Reagents	Catalysts	Solvents	Conditions
1	-	1,10-Phenanthroline Copper oxide (Cu_2O) Potassium bromide	Quinoline *N*-Methyl-2-pyrrolidone	6 h, 170 °C

CAS Reaction Number: 31-109-CAS-15004422

Experimental Protocols

Synthetic Methods | Experimental Procedure

Products	Benzaldehyde, Yield: 67%
Reactants	2-Carboxybenzaldehyde
Catalysts	1,10-Phenanthroline Copper oxide (Cu_2O) Potassium bromide
Solvents	Quinoline *N*-Methyl-2-pyrrolidone
Procedure	1. Charge an oven-dried vessel with 2-carboxybenzaldehyde (1.00 mmol), Cu_2O (10.7 mg, 0.075 mmol), phenanthroline (27.0 mg, 0.15 mmol) and potassium bromide (0.015 mmol). 2. Flush the vessel with alternating vacuum and nitrogen purge cycles. 3. Add a degassed solution of *n*-tetradecane in a mixture of NMP (1.5 mL) and quinoline (0.5 mL) to the reaction mixture *via* syringe. 4. Stir the resulting mixture at 170 °C for 6 hours. 5. Allow the reaction mixture to cool to room temperature. 6. Dilute the reaction mixture with ethyl acetate (2 mL). 7. Dissolve a sample of the reaction mixture (0.25 mL) in ethyl acetate (2 mL). 8. Wash the reaction mixture with HCl (1 N, 2 mL). 9. Dry the reaction mixture over $MgSO_4$/$NaHCO_3$. 10. Analyze the product by GC.
Transformation	Decarboxylation of Aromatic Acids
Scale	milligram

CAS Method Number 3-109-CAS-15004422

物质信息
名称、角色

实验过程

Synthetic Methods中的实验详情不仅包含原文中描述的实验内容，还包括supporting information中涉及的实验内容

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

大纲

- CAS (美国化学文摘社)简介
- 新一代科研创新信息工具CAS SciFinder^{n}
- 分析方法解决方案CAS Analytical Methods™

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

CAS Analytical Methods™--分析实验方法数据库

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

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

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

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

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

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

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

Agricultural Applications / Analysis: 除草剂分析…

Food Analysis: 脂肪酸分析，脂肪酸酯分析，蛋白质分析…

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

Miscellaneous: 化妆品分析，爆炸物分析，纳米材料分析…

Water: 阴阳离子分析、环境分析、废水分析、微量元素分析…

Polymer: 聚合物分析…

分析方法的类别：

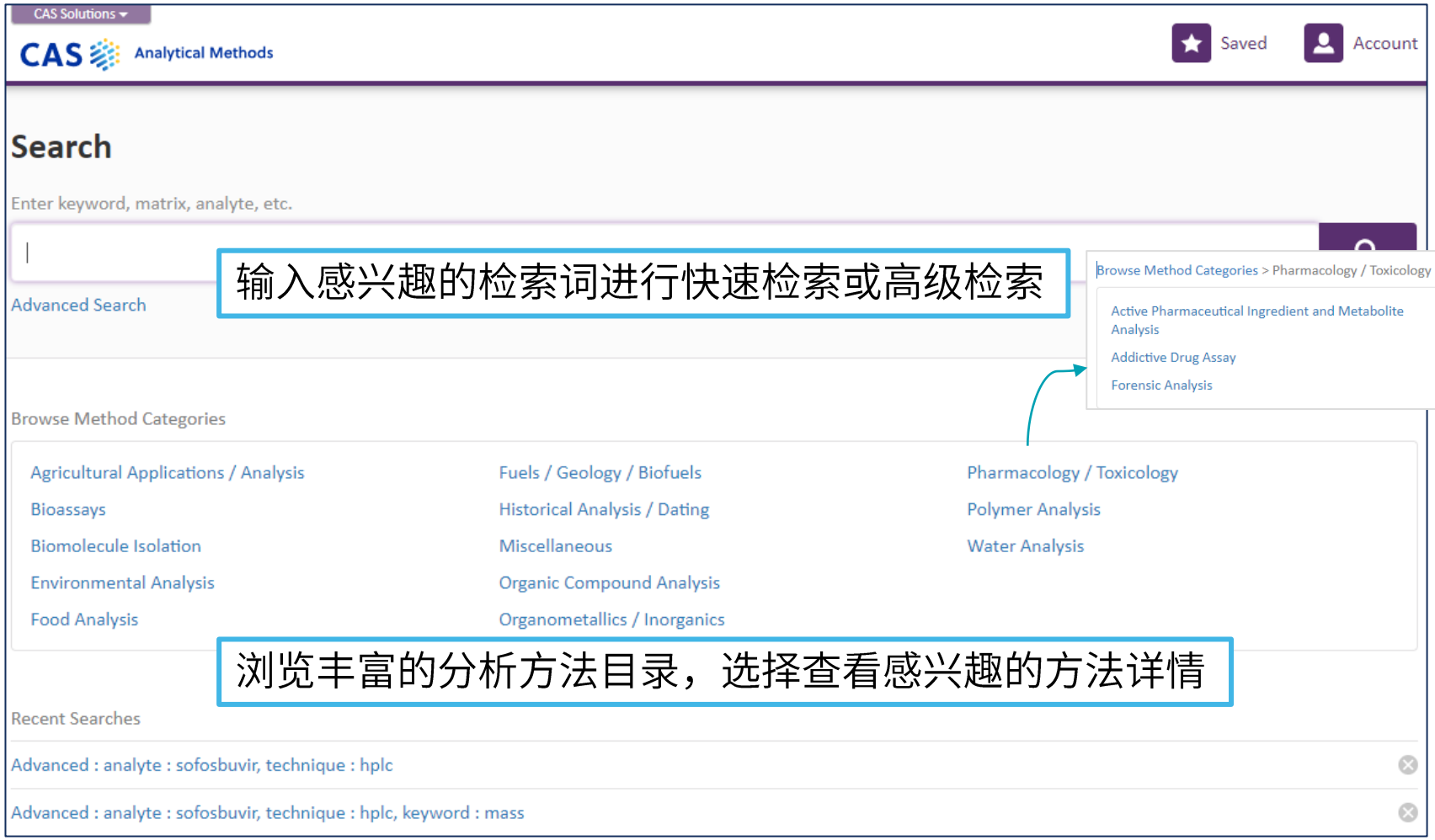
13大类45小类；

某些子类属多个大类

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

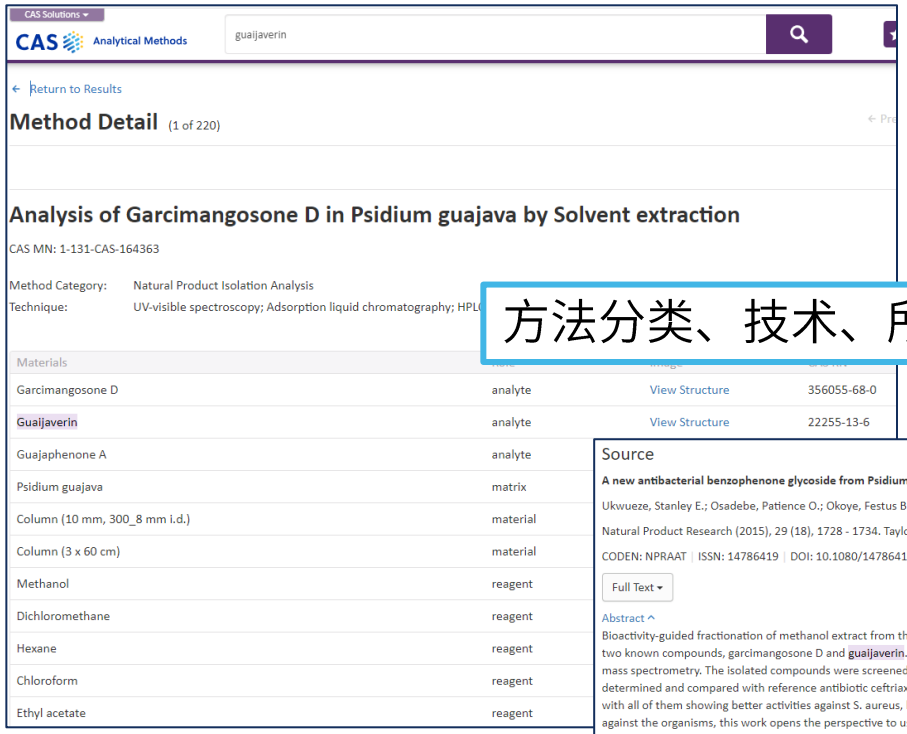
分析方法的获取—Analytical Methods

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

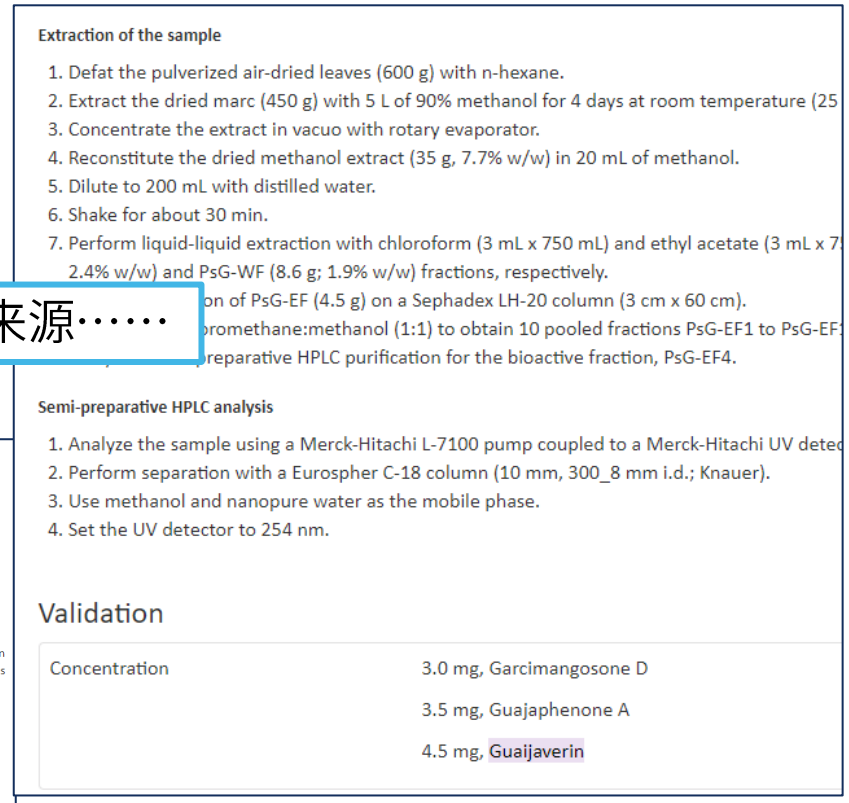


ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

分析方法详情



方法分类、技术、所用材料/物质、角色、文献来源……



实验条件、实验步骤和数据有效性验证…

ACS International

CAS
A division of the American Chemical Society

使用注意事项

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

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

2022年CAS SciFinder^{n}论坛直播日程表

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

直播时间：

18:00 – 19:00

关注公众号：ACS美国化学会
随时观看回放，了解直播信息

CAS
A division of the
American Chemical Society

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society

谢 谢！

关注我们

ACS Chemistry for Life®

运用化学的力量改善人们的生活

china@acs-i.org

+86-10-62508026/7

www.cas.org

美国艾赛思国际有限公司北京代表处

(ACS International Ltd Beijing Rep Office)

ACS International | CAS A division of the American Chemical Society