SciFinder Web

源于化学，超越化学的一站式检索平台

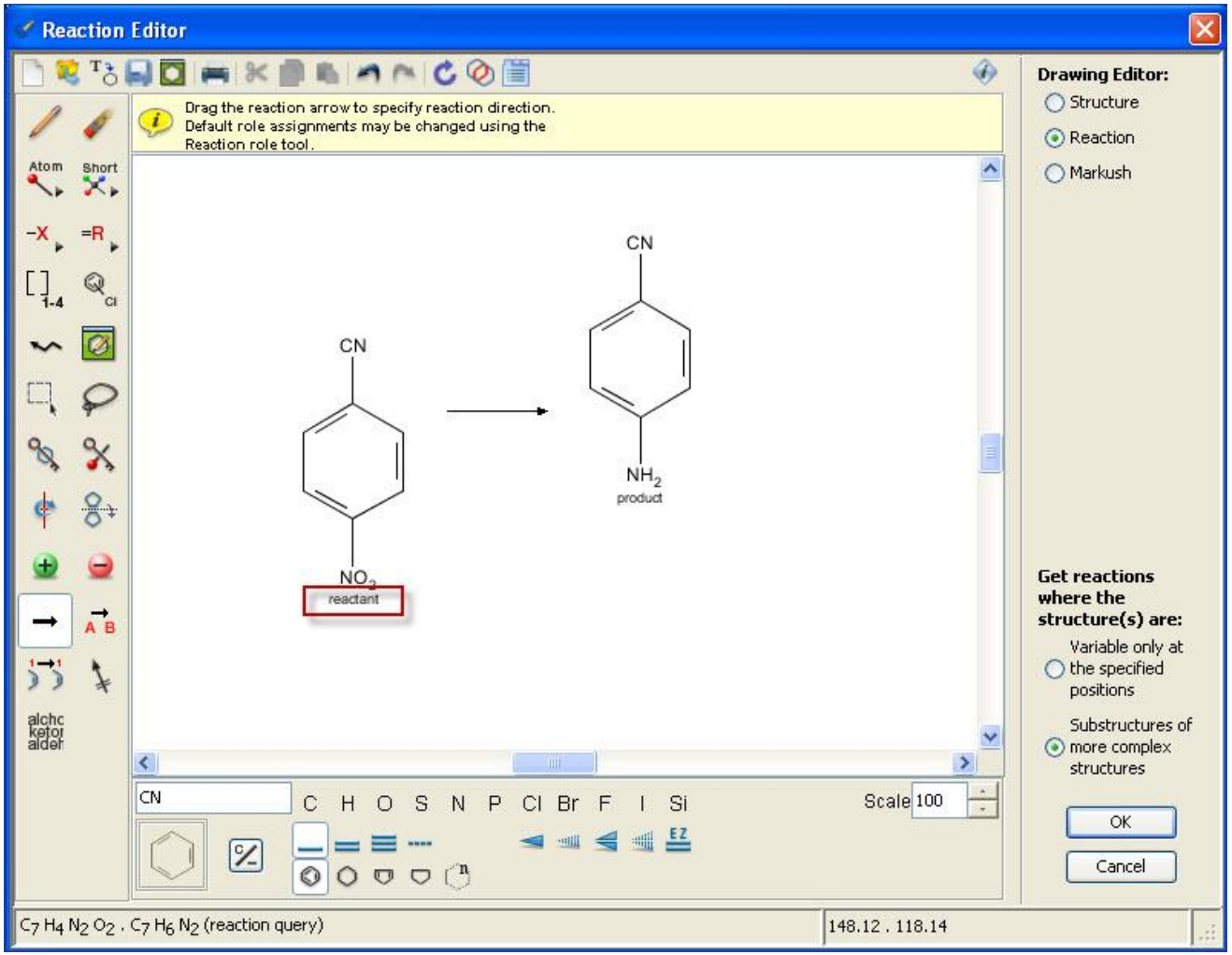
SciFinder Web 高级培训

俞靓
SciFinder培训专员
2013.6

提纲

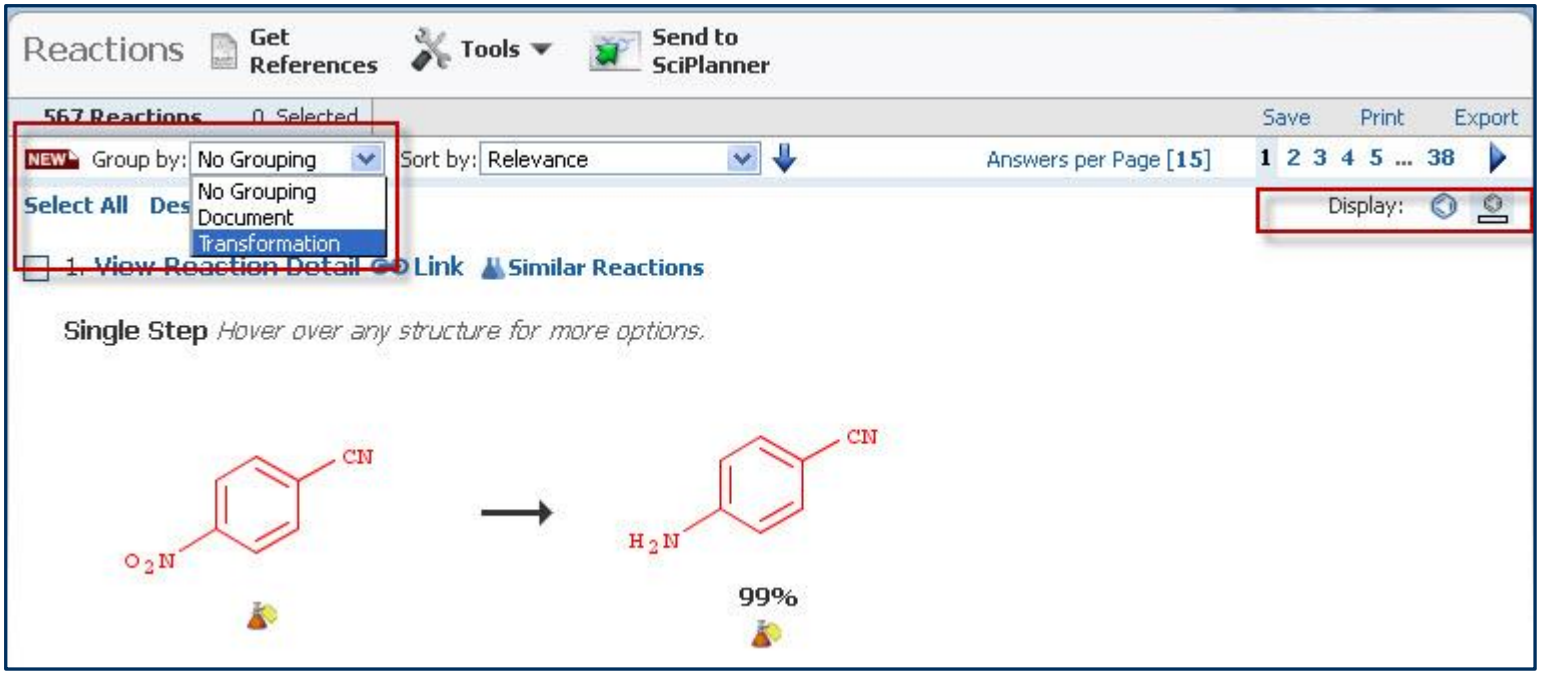
- 介绍
  - SciFinder Web新功能介绍
- **SciFinder Web中的检索**
  - SciFinder中的结构面板使用技巧
  - SciFinder中的SciPlanner的使用
  - SciFinder中的反应定义
  - SciFinder中的反应筛选
- **SciFinder Web检索注意事项**

反应检索精确定义



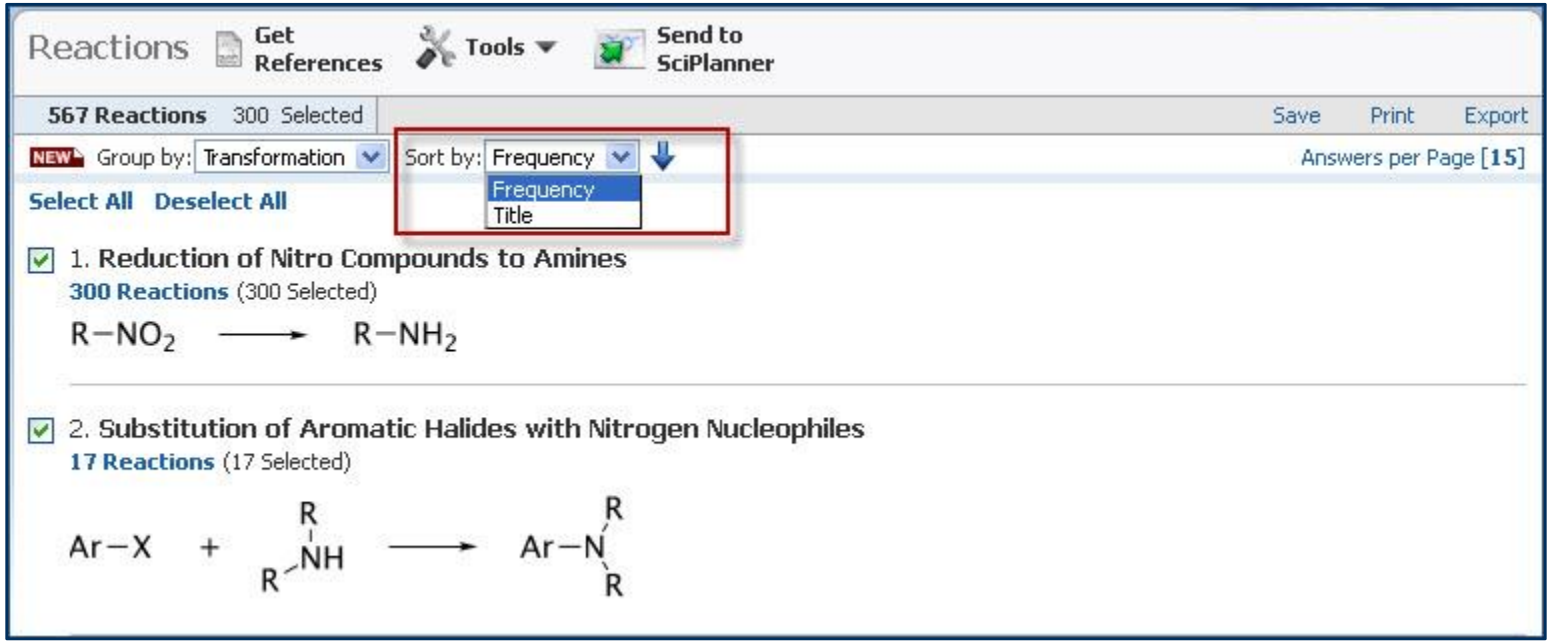
反应箭头左侧进定义为反应物（原先为反应物/试剂）

反应结果可依据反应类型进行分组



其中选择“Document”，即每篇文献只出现一条反应记录。相当于原先的

利用 transformations 进行反应分组

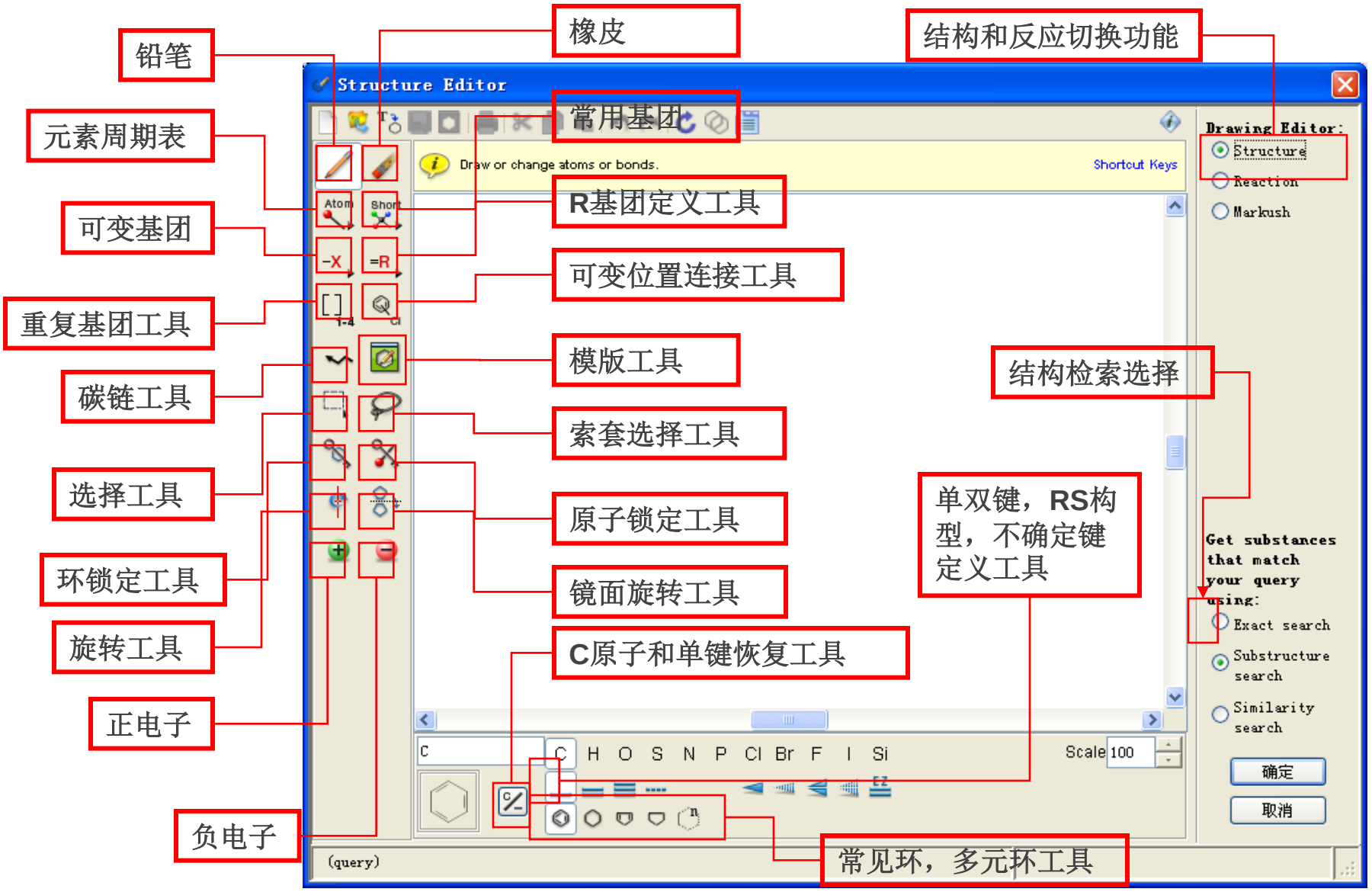


Transformation 帮助我们判断大部分的研究人员采用哪种合成方法，比如常用的是硝基还原为氨基的反应，也有部分研究人员利用醛/酸转化为氰基。

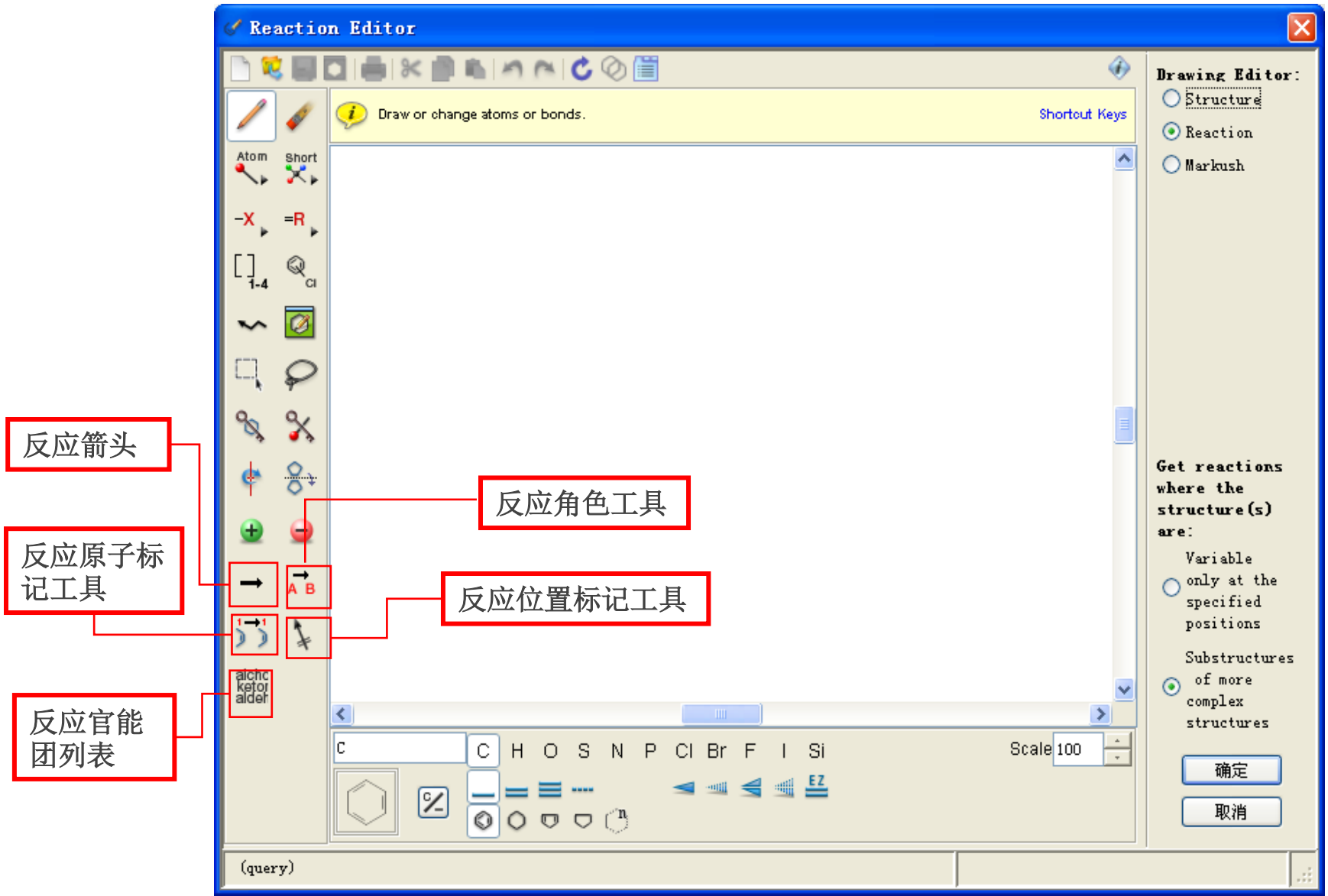
提纲

- 介绍
  - SciFinder Web新功能介绍
- **SciFinder Web中的检索**
  - SciFinder中的结构面板使用技巧
  - SciFinder中的SciPlanner的使用
  - SciFinder中的反应定义
  - SciFinder中的反应筛选
- **SciFinder Web检索注意事项**

SciFinder结构绘制工具



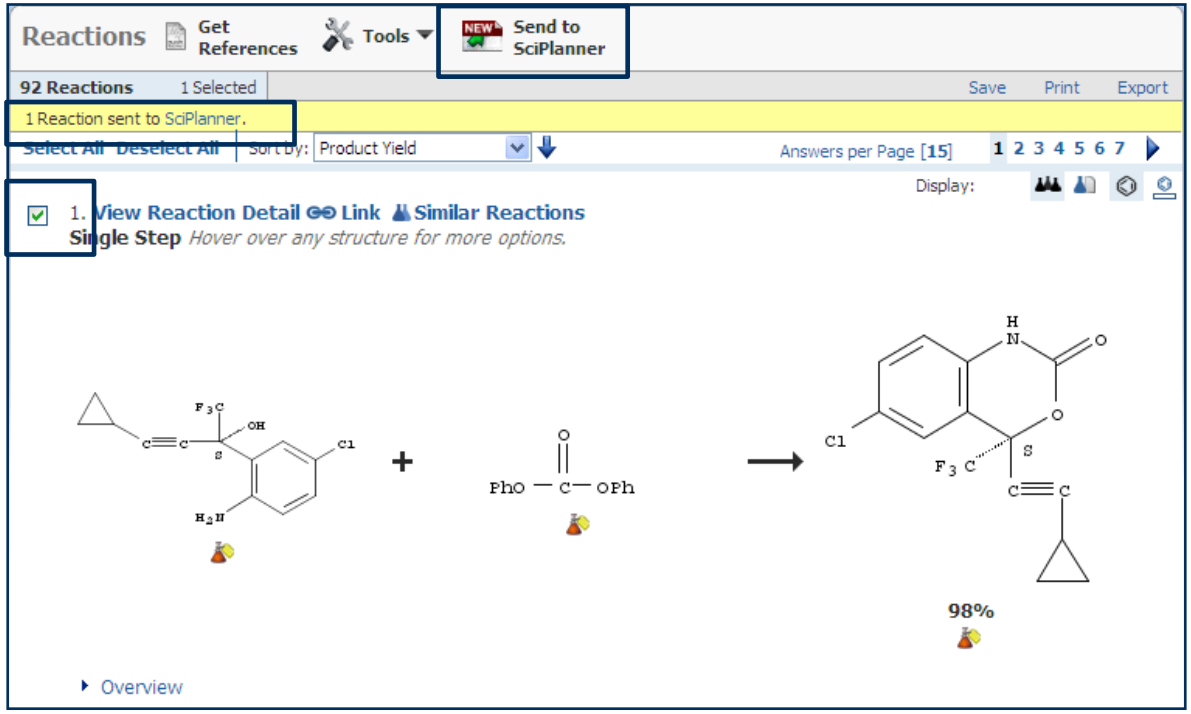
SciFinder中的反应定义工具



提纲

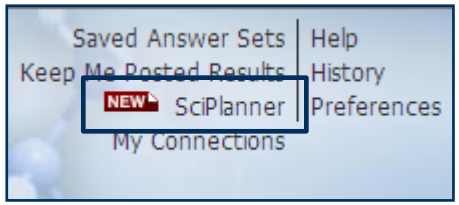
- 介绍
  - SciFinder Web新功能介绍
- **SciFinder Web中的检索**
  - SciFinder中的结构面板使用技巧
  - SciFinder中的SciPlanner的使用
  - SciFinder中的Markush检索与结构检索的区别
  - SciFinder中的反应筛选
- **SciFinder Web检索注意事项**

SciPlanner—更加直接的管理结果的方法



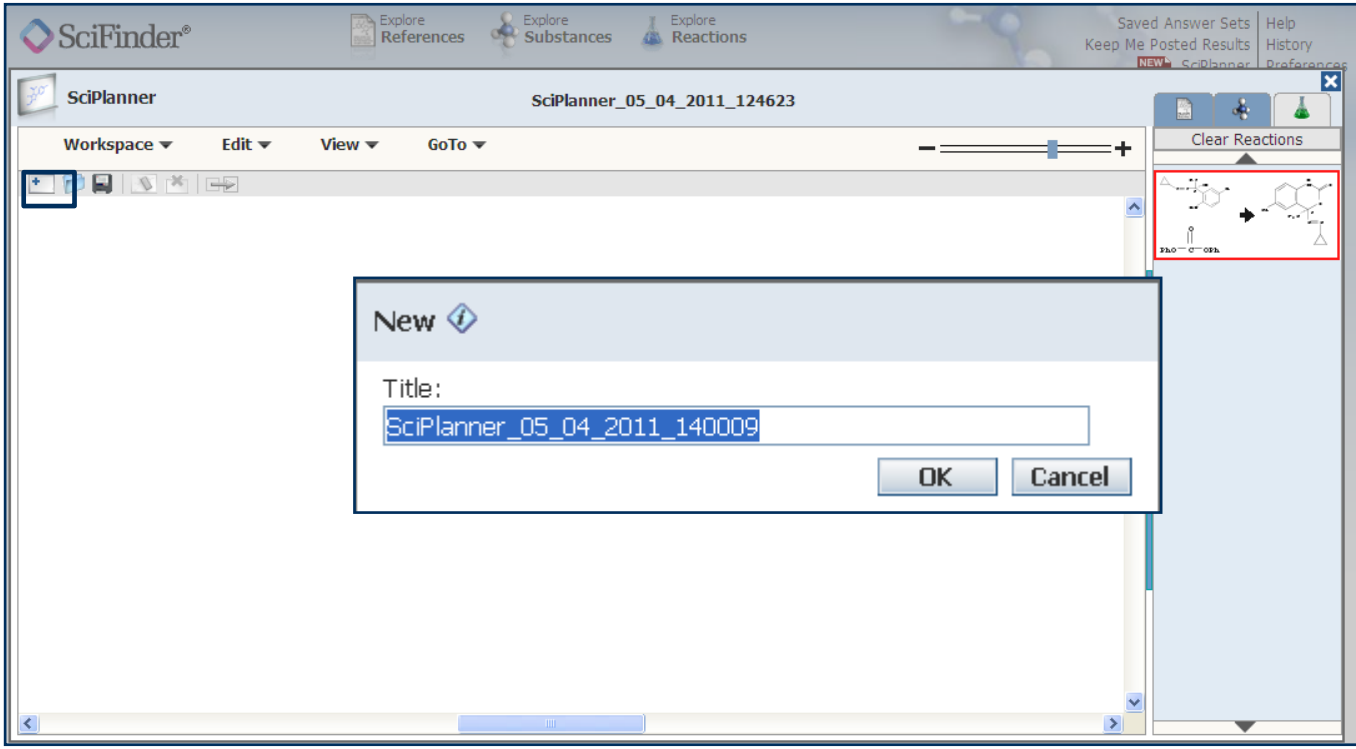
- 勾选感兴趣的反应
- 点击**Send to SciPlanner**
- 可以看到有**1**条反应推送到**SciPlanner**

SciPlanner—创建新的SciPlanner文件

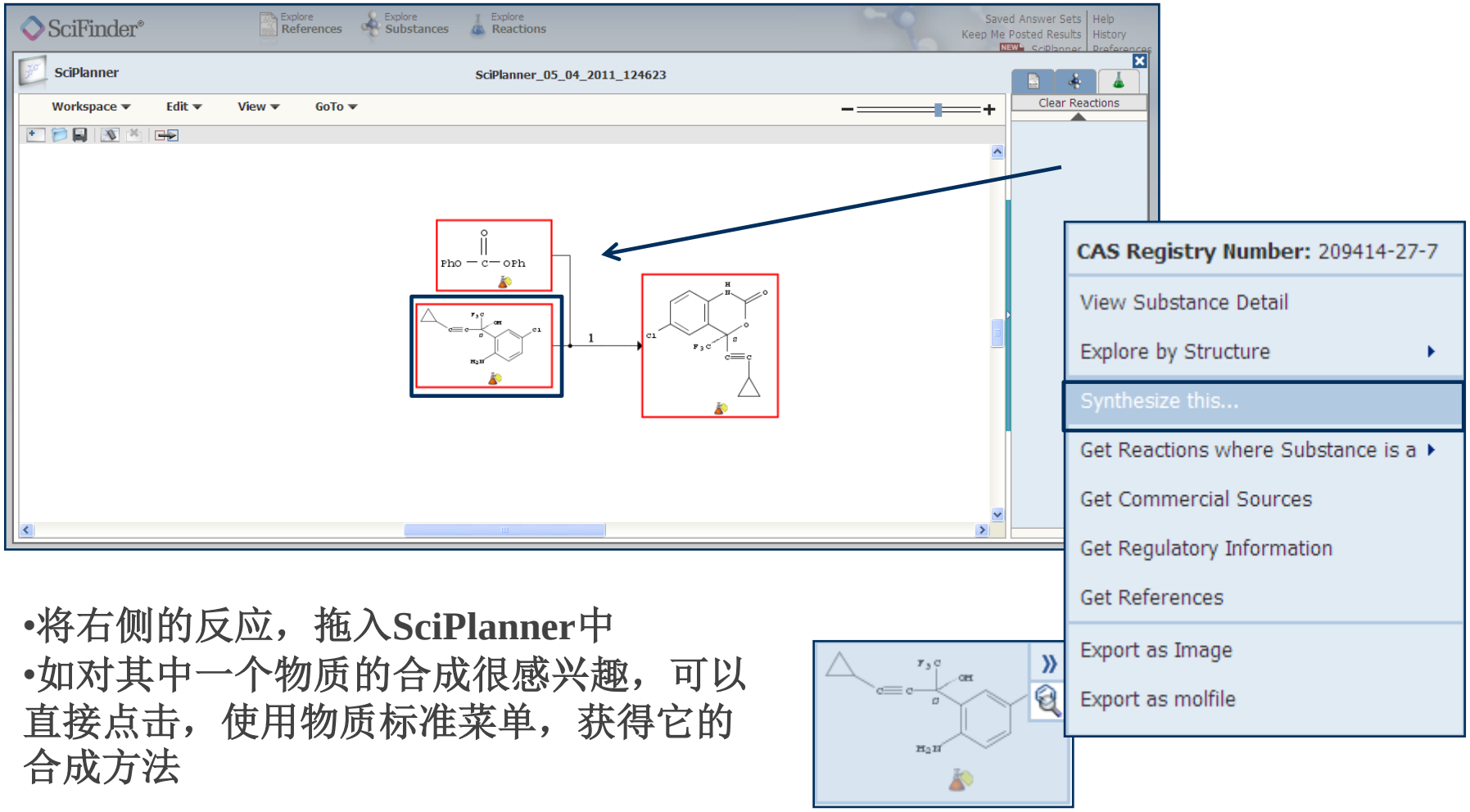


- 点击屏幕右上方的SciPlanner，可以看到SciPlanner的面板，刚才推送的反应，就在这里

- 创建一个新的SciPlanner文件

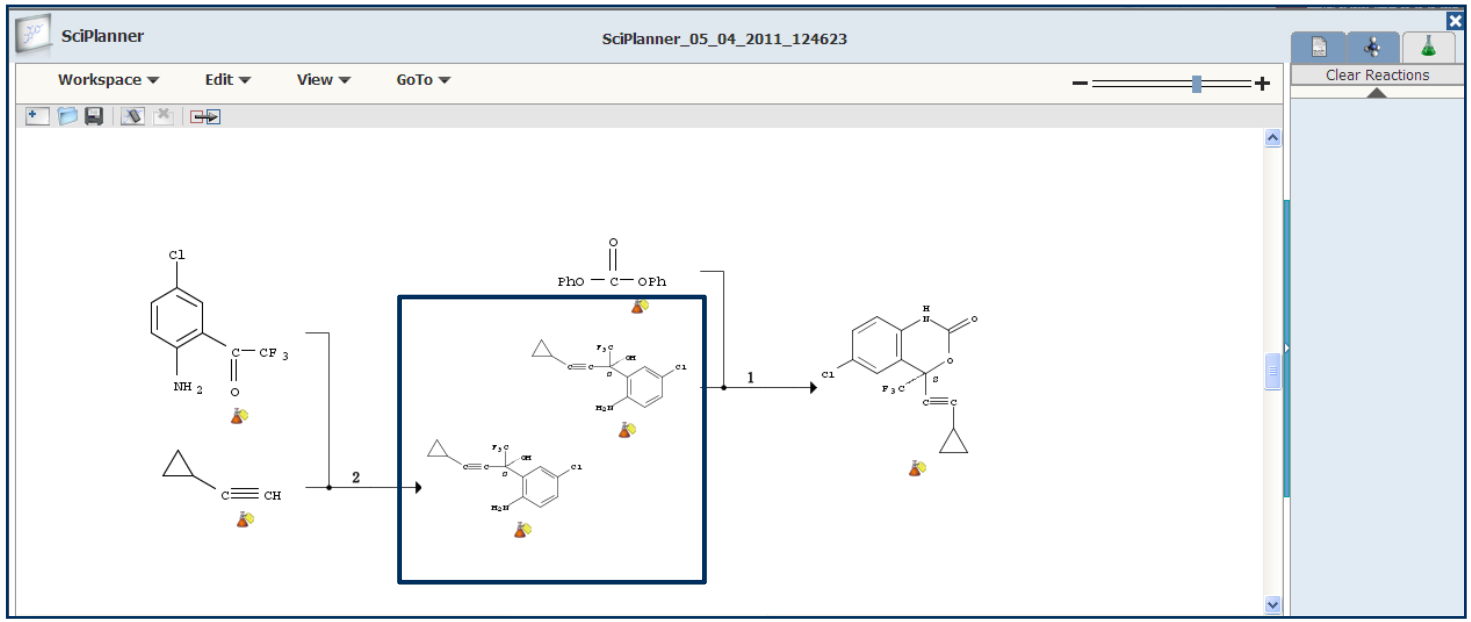


SciPlanner—拖入反应，并尝试中间体反应检索

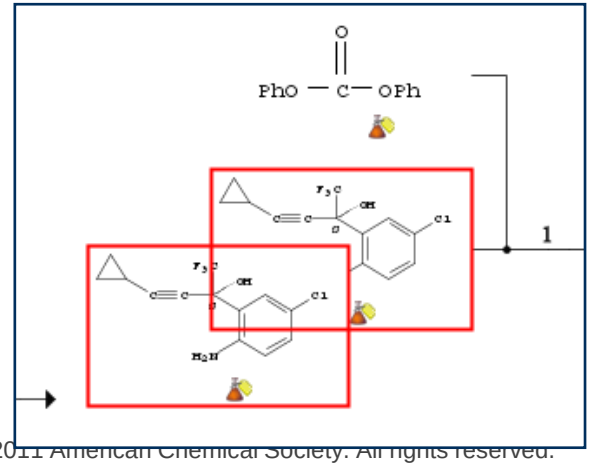


- 将右侧的反应，拖入SciPlanner中
- 如对其中一个物质的合成很感兴趣，可以直接点击，使用物质标准菜单，获得它的合成方法

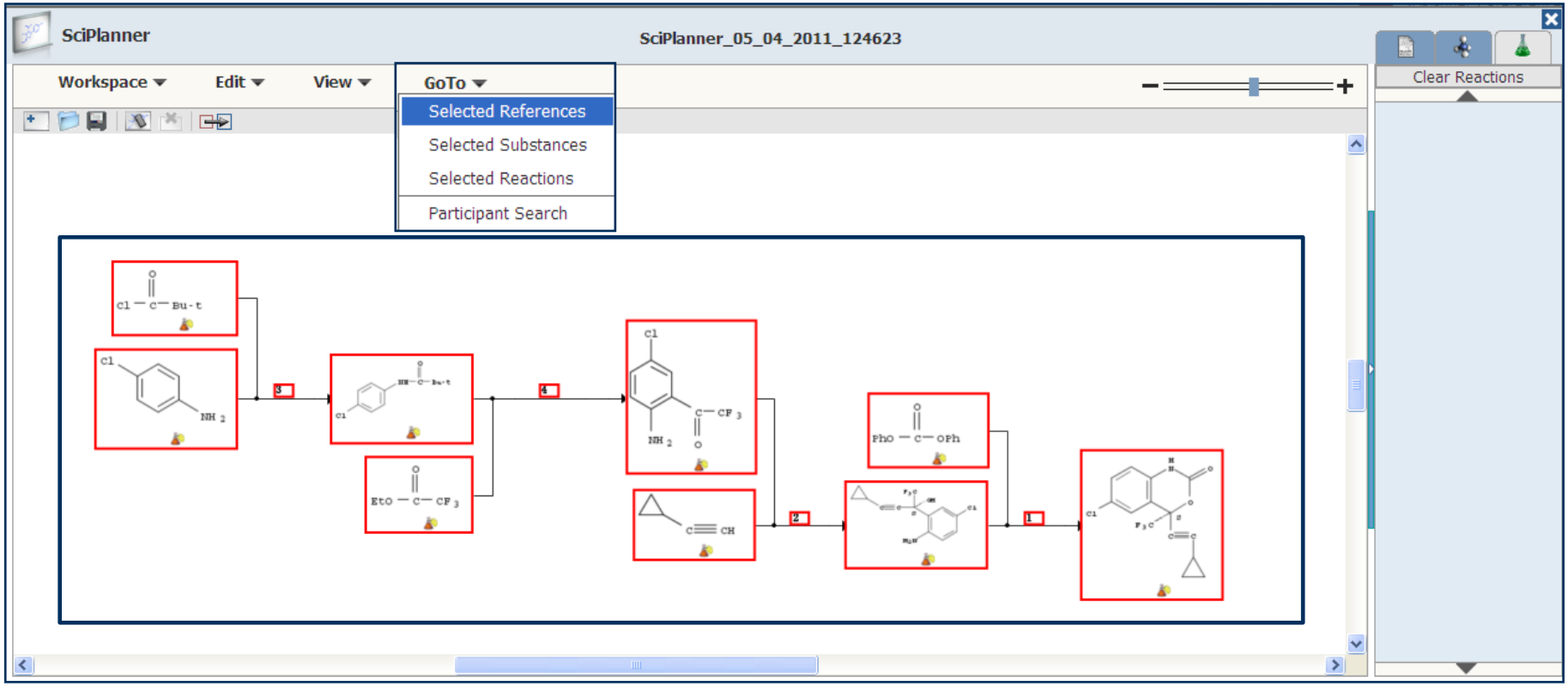
SciPlanner—拼合反应



- 类似上述的步骤，将中间体的反应拖至SciPlanner中
- 可以看到这两条反应的产物和反应物是同样的
- 用鼠标将这两个结构拖至重贴状态

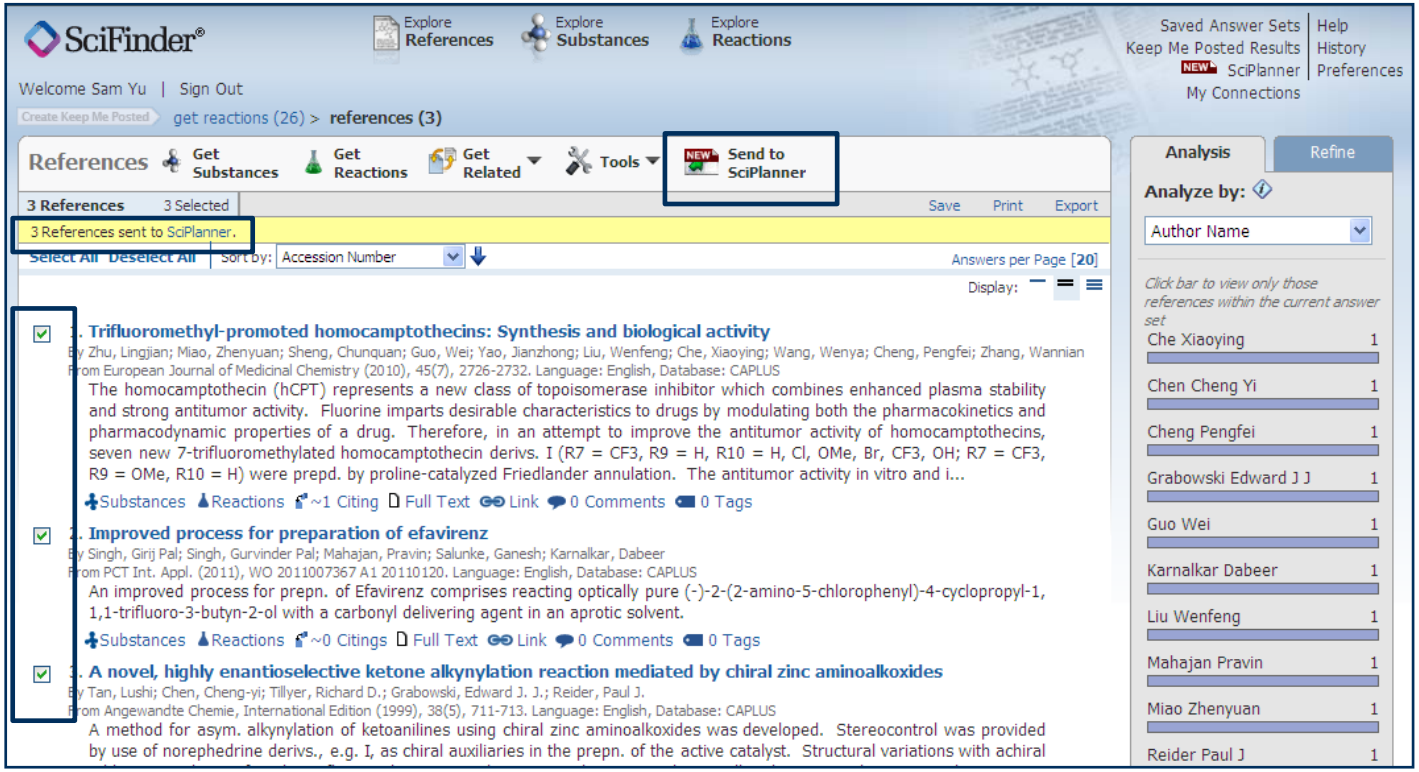


SciPlanner—重新获得文献



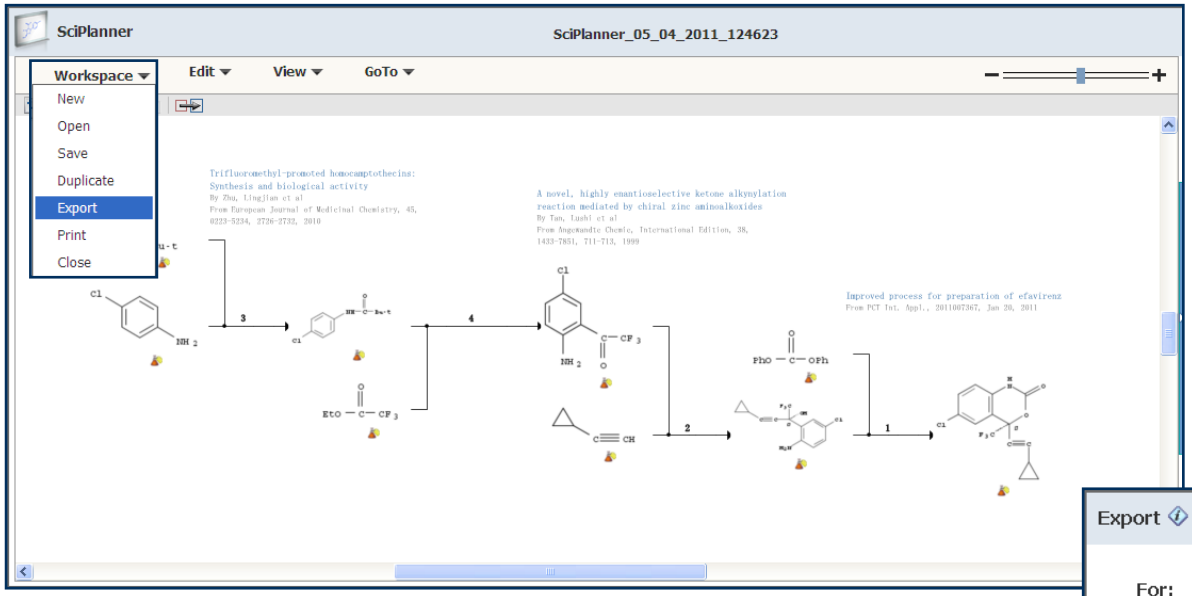
- 框选所有的反应，所有的结构都显示为红色
- 点击上面的Goto，选择Selected References

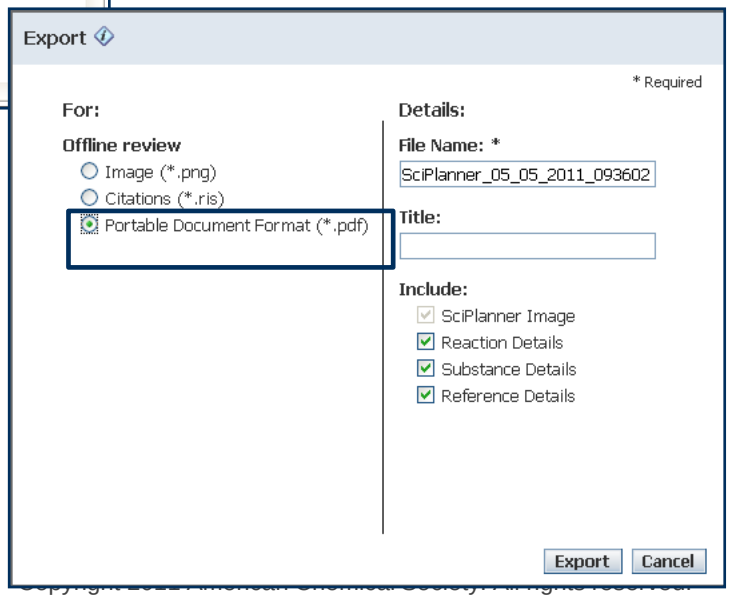
SciPlanner—将文献导入SciPlanner



- 勾选文献
- **Send to SciPlanner**
- **3篇文献推送到SciPlanner中**

SciPlanner—自由组合文献和反应的排列



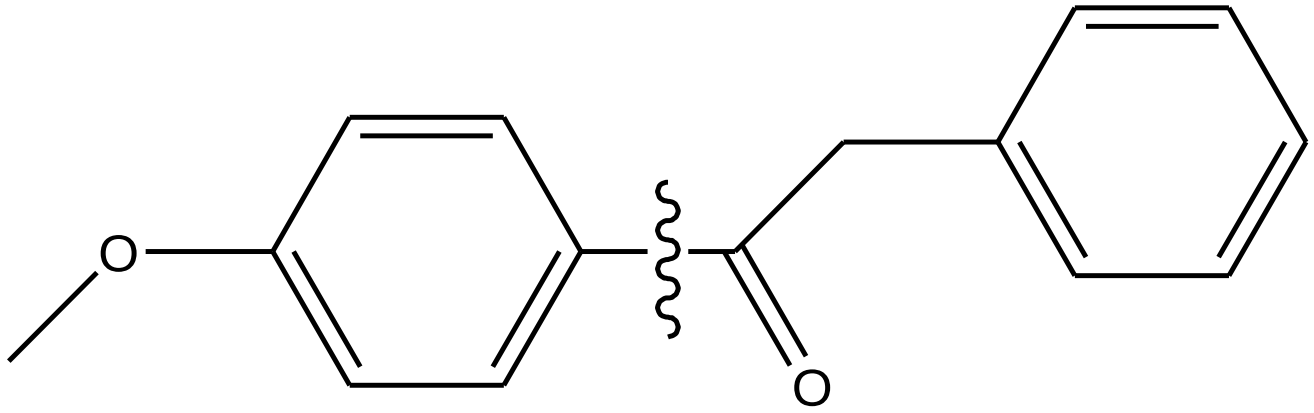


获得结果后，点击**WorkPlace**下的**Export**，将结果输出成**PDF**格式

提纲

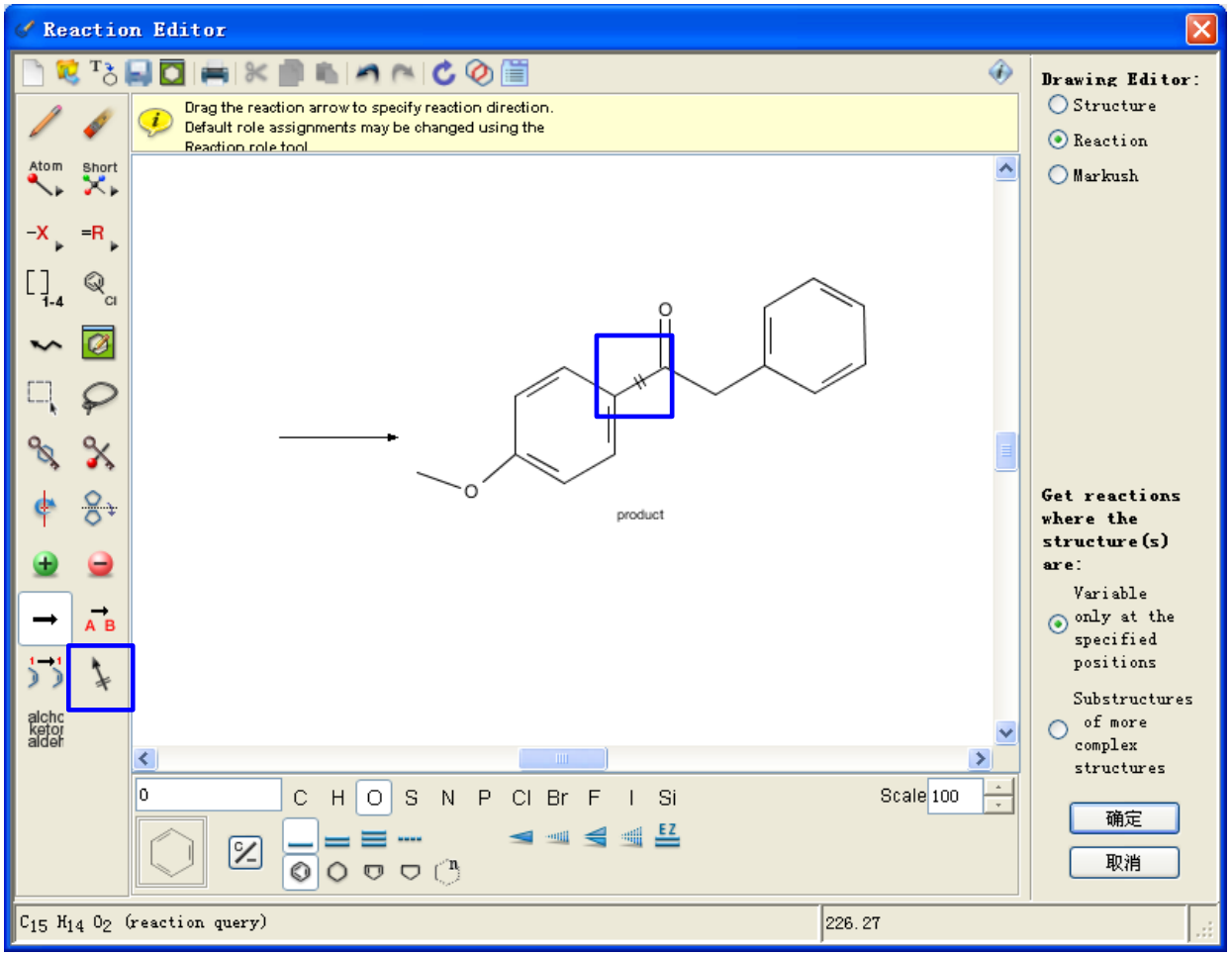
- 介绍
  - SciFinder Web新功能介绍
- **SciFinder Web中的检索**
  - SciFinder中的结构面板使用技巧
  - SciFinder中的SciPlanner的使用
  - SciFinder中的反应定义
  - SciFinder中的反应筛选
- **SciFinder Web检索注意事项**

检索符合以下条件的反应



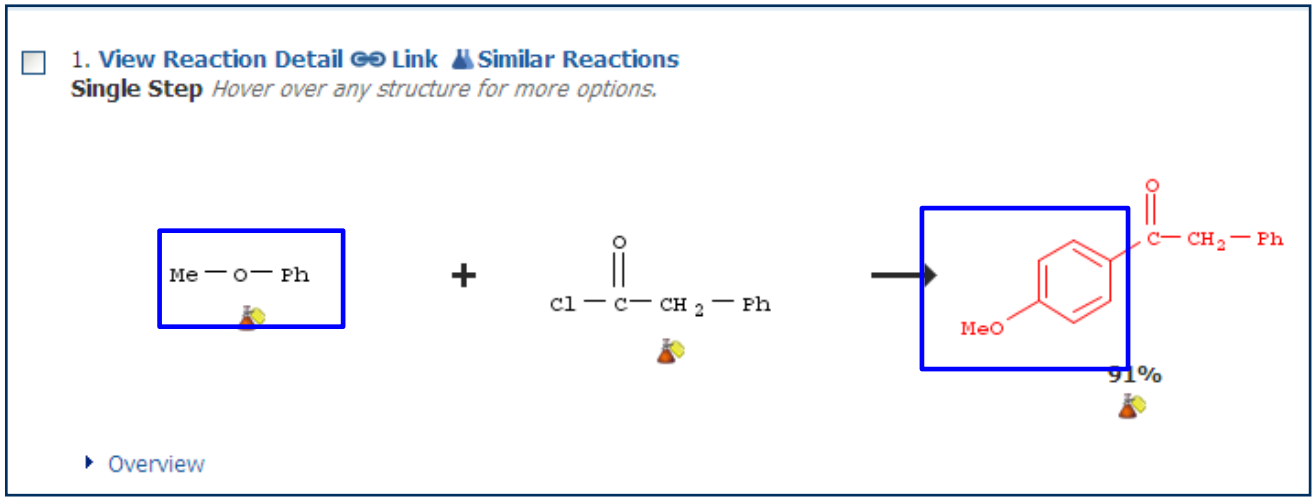
检索要求：
检索该物质的合成反应
要求
在结构中的曲线位置需要发生变化

定义反应结构

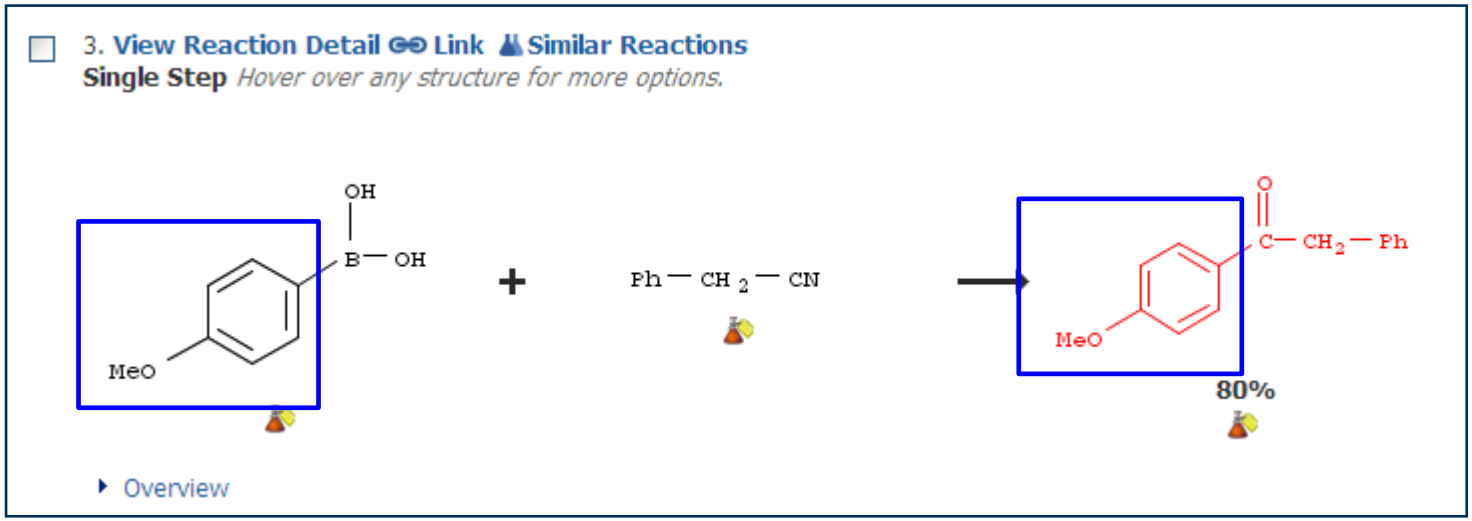


反应位置定义工具，要求定义的键，在反应过程中一定发生断裂或者生成

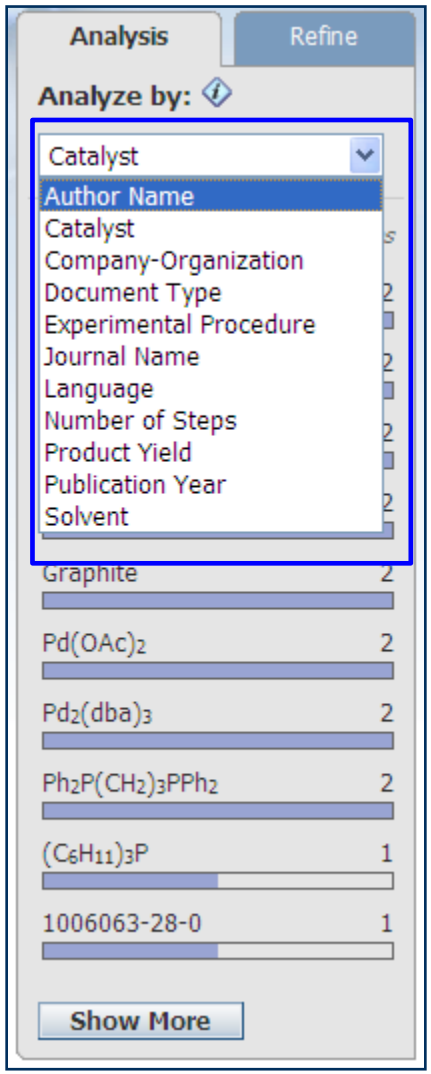
仅在特定位点上发生变化的反应

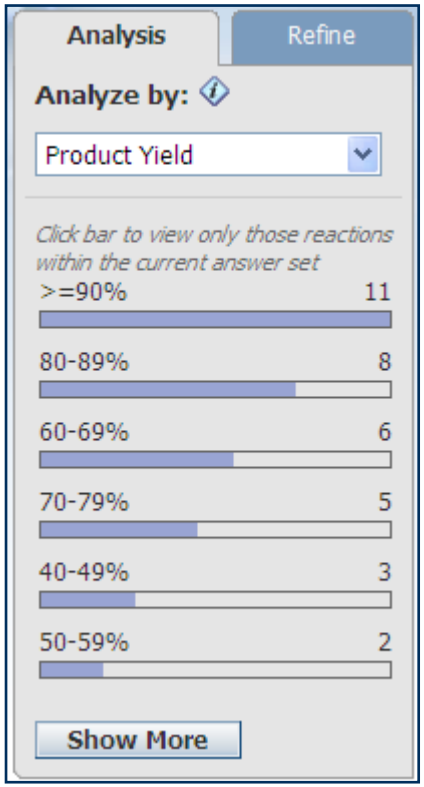


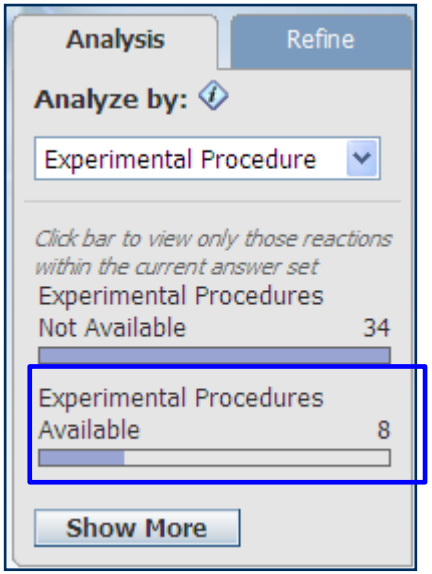
从结构中可以清晰的看到反应的位置在什么地方



SciFinder中的反应分析工具

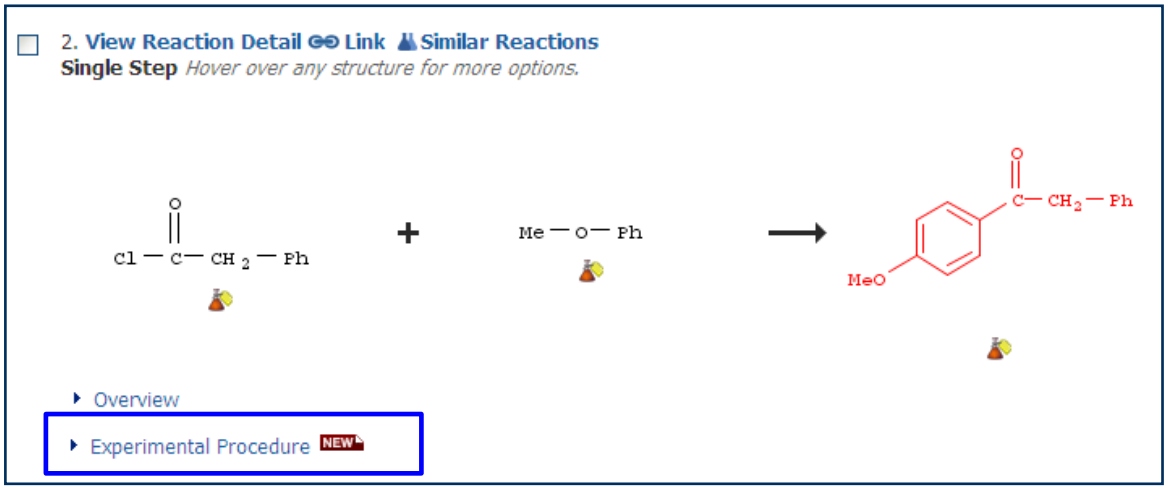




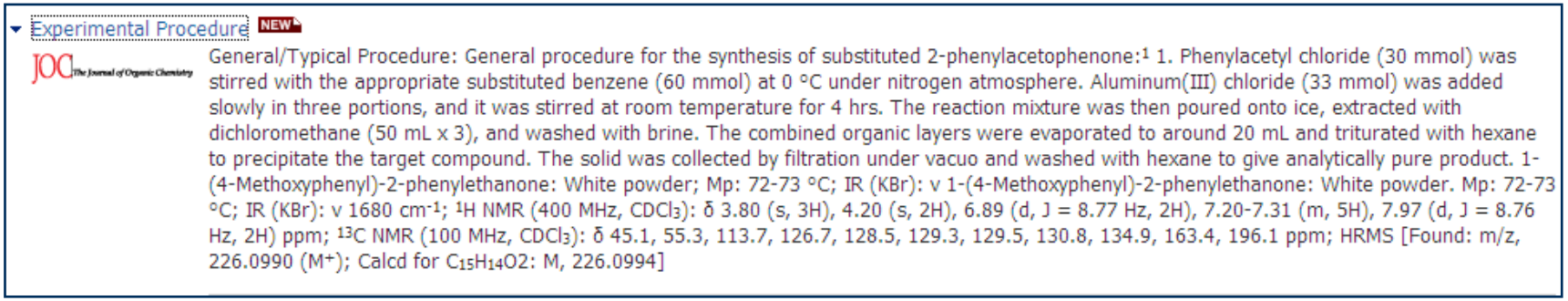


Analyze工具帮助分析反应中的溶剂，催化剂，产率等信息，特别是通过分析工具，可以获得存在实验过程信息的反应

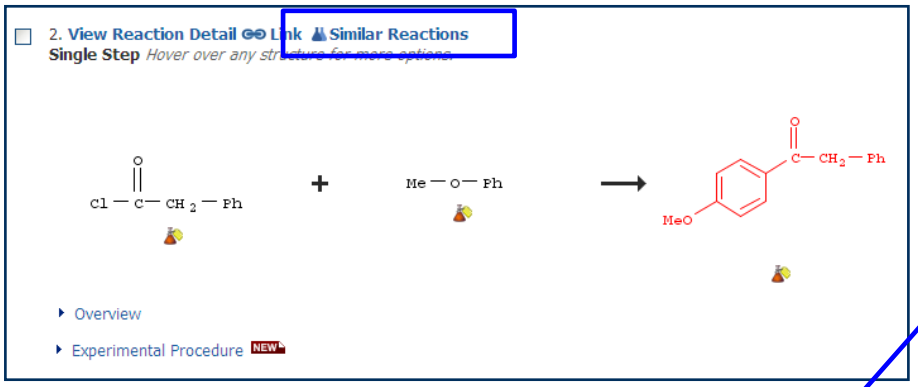
获得有实验过程信息的反应

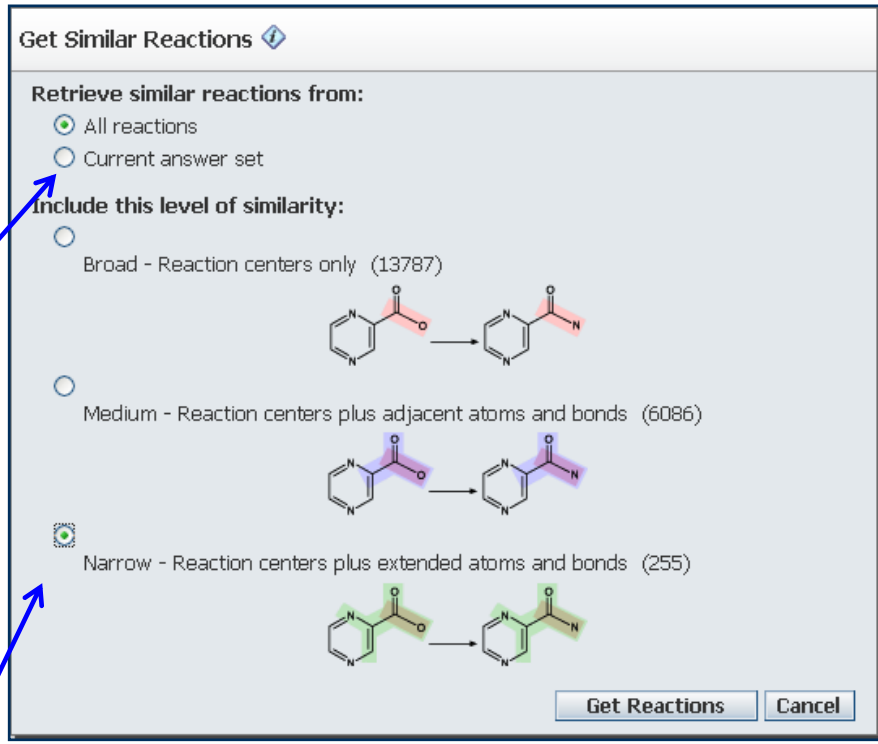


SciFinder中开始收录部分期刊和专利中的反应实验过程信息。



获得反应中心相似的反应





对于选择是全部反应中检索相似反应，
还是在当前结果集中检索相似反应

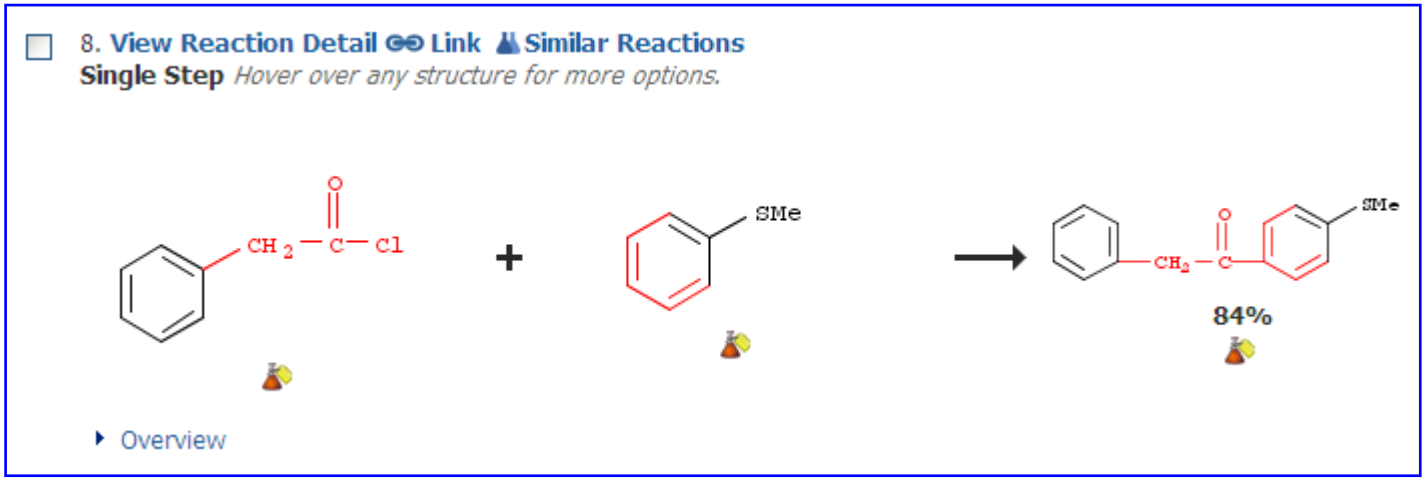
选择相似反应的相似限制

Broad：仅反应中心相似

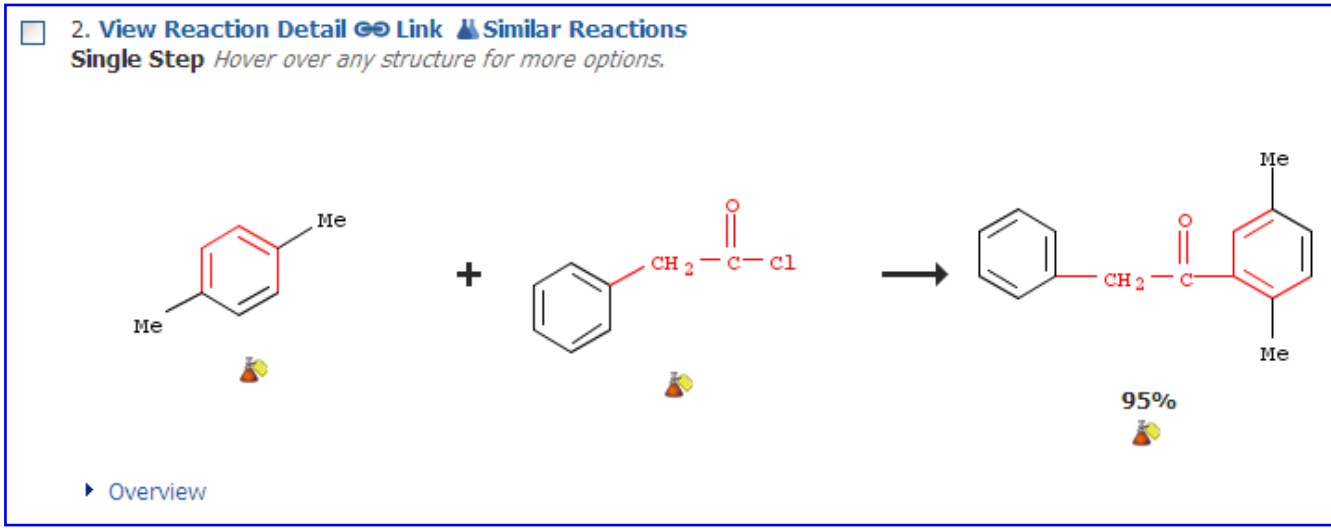
Miedum：反应中心及附属原子和健

Narrow：反应中心及扩展的原子和健

这些反应的反应中心

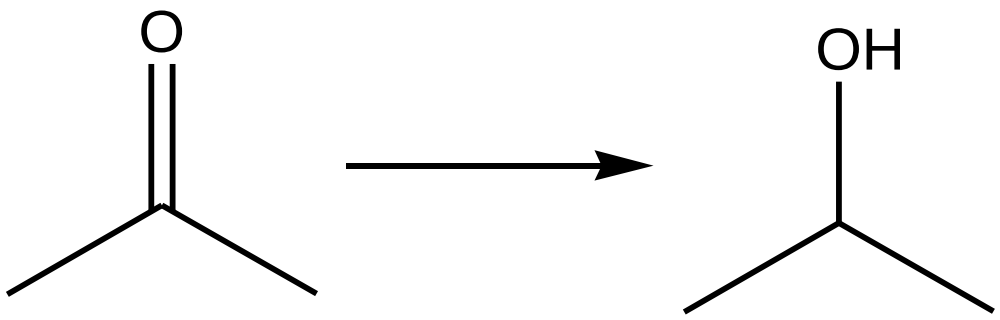


反应中心都用红色标记出来

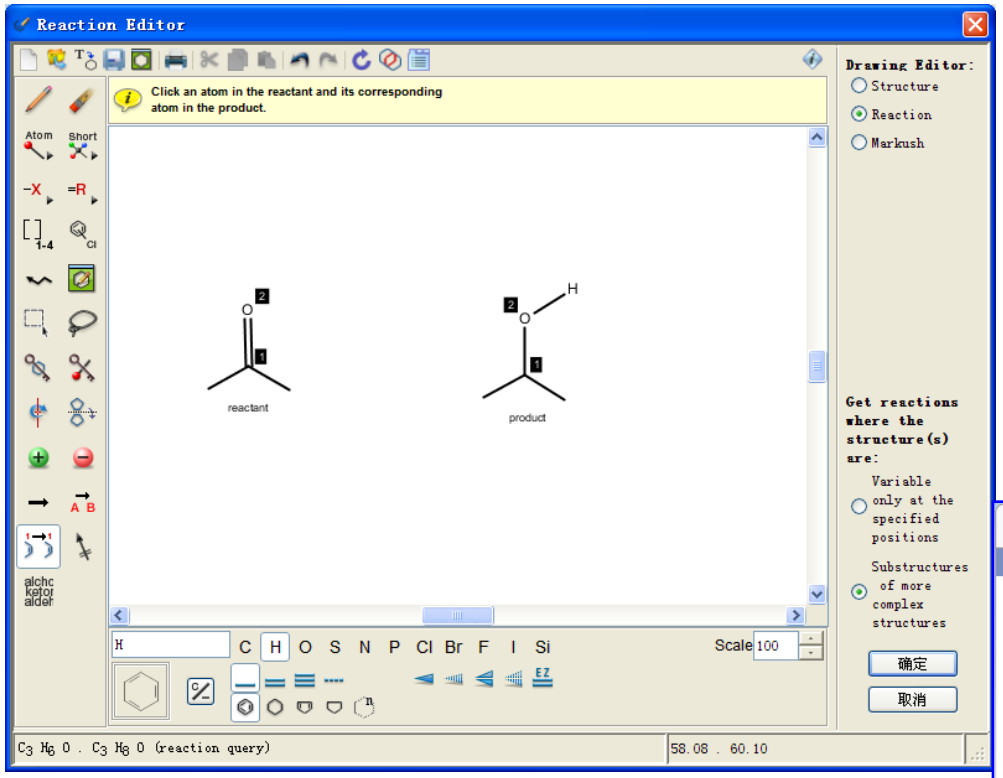


SciFinder中包含特定溶剂的反应检索

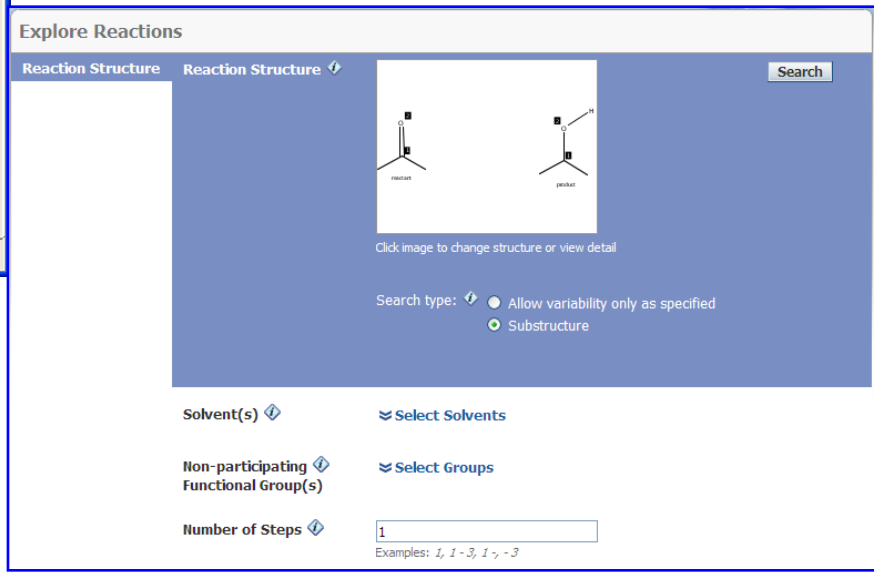
检索从羰基还原成羟基的1步变化，同时找到用LiAlH4做还原剂的反应



SciFinder中的定义



绘制反应结构，用亚结构反应检索



SciFinder中的检索结果

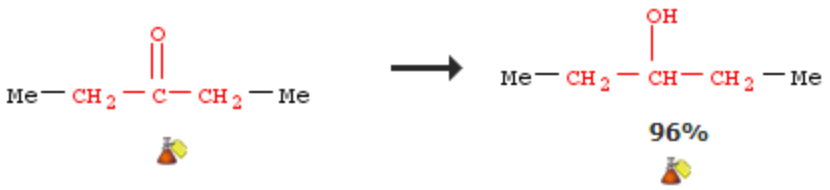
1. View Reaction Detail Link Similar Reactions
Single Step *Hover over any structure for more options.*

Overview

186. View Reaction Detail Link Similar Reactions
Single Step *Hover over any structure for more options.*

Overview

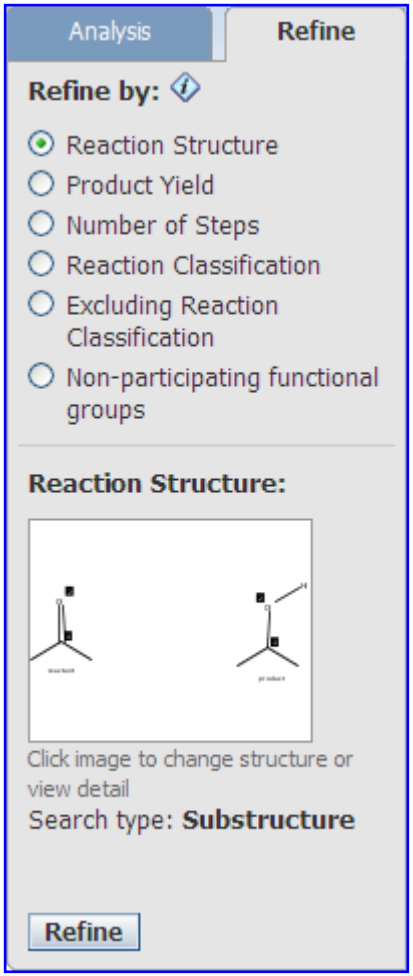
422. View Reaction Detail Link Similar Reactions
Single Step *Hover over any structure for more options.*

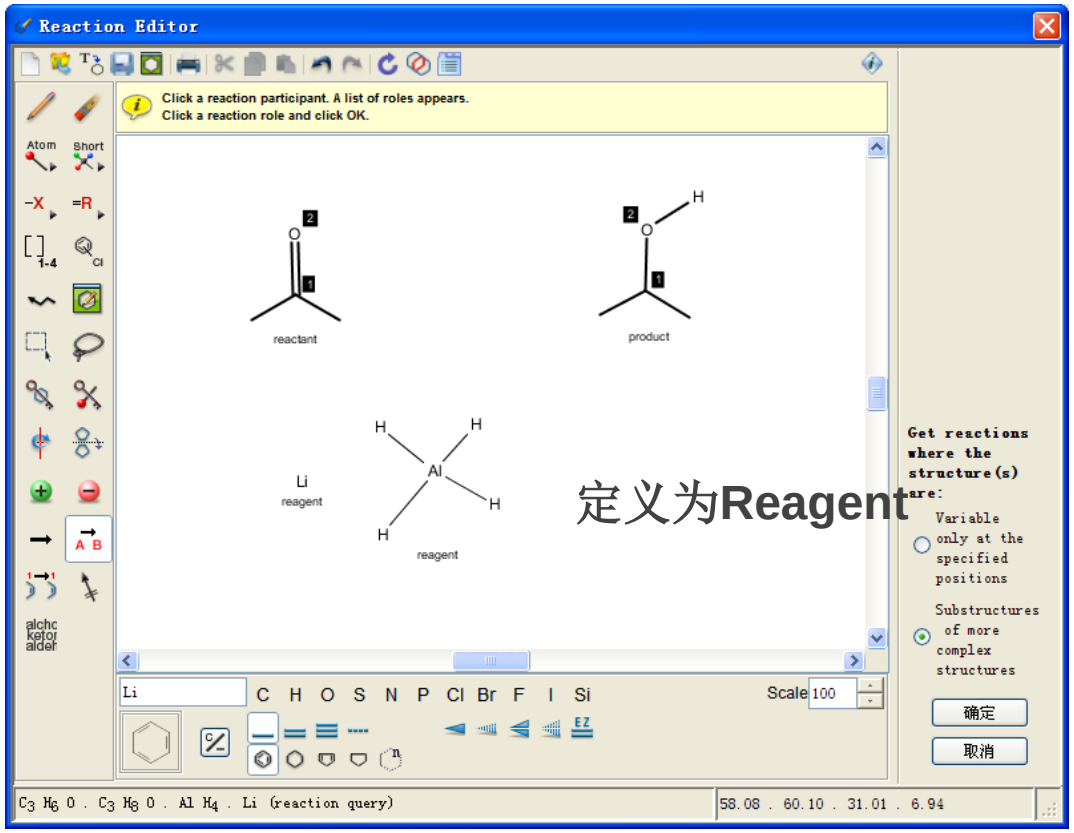


Overview

检索出来的反应，都符合羰基还原的反应要求

使用限定工具限定还原剂





如果要限定还原剂为**AlLiH4**，用限定工具绘制结构，如果不会画，**可以尝试用CAS No找到该物质，然后看看SciFinder中是如何描述该结构的。**

限定后的结果

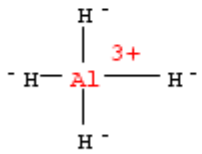
30. 1 Hits in this Reference Similar Reactions

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

Overview

Steps/Stages

1.1 R:



Notes

Reactants: 1, Reagents: 1, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1

References

Catalytic asymmetric cyclization of some bromohydrins with chiral cobalt complex

By Takeichi, Tsutomu et al

From Bulletin of the Chemical Society of Japan, 61(2), 603-5; 1988

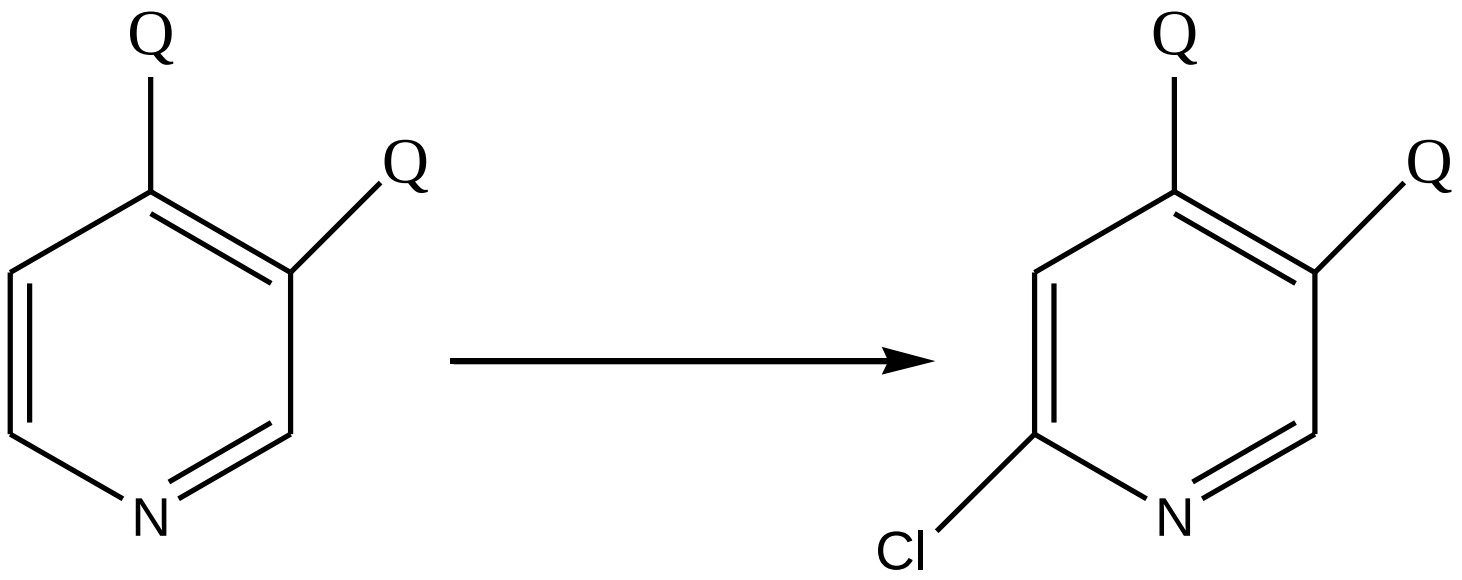
Full Text

提纲

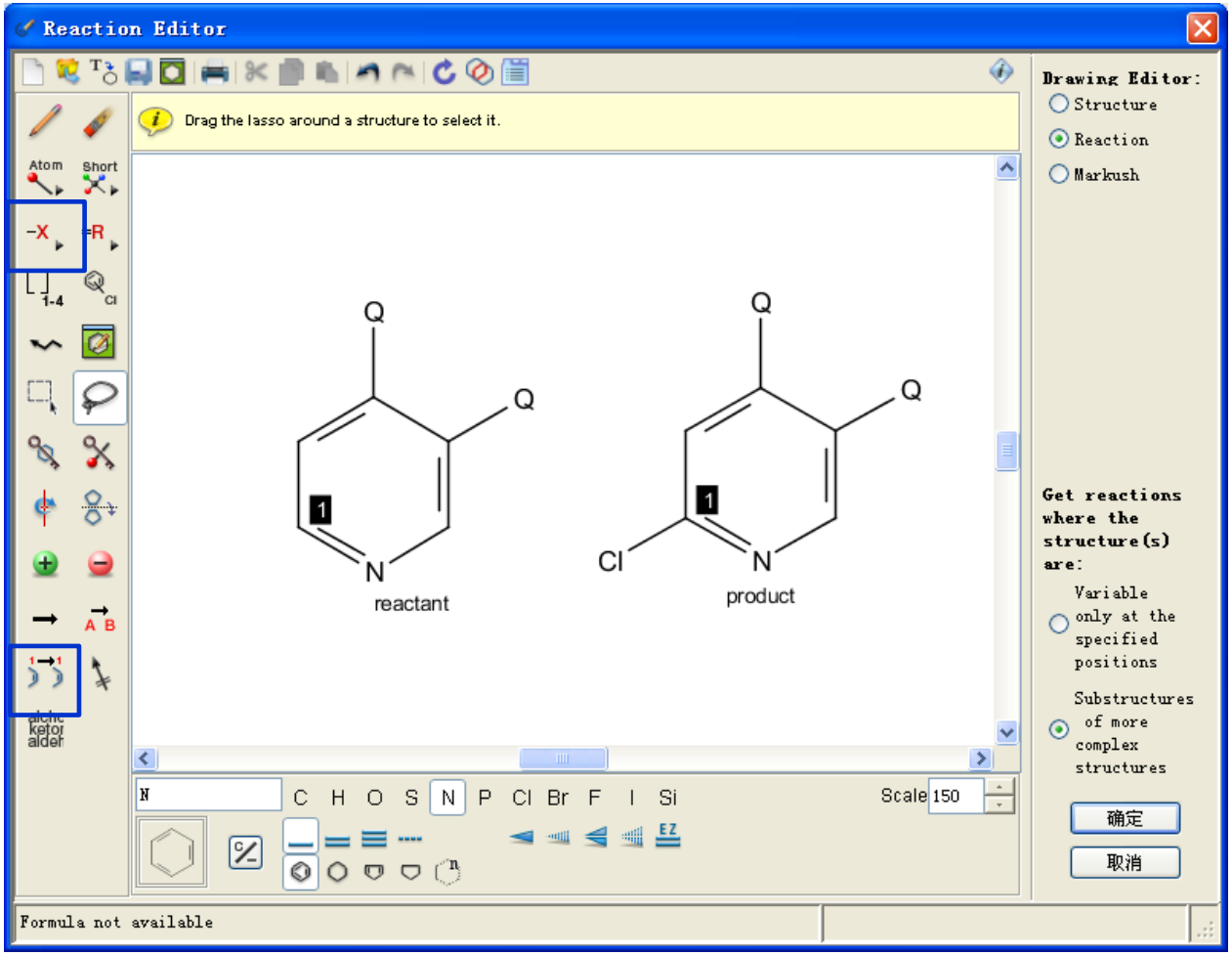
- 介绍
  - SciFinder Web新功能介绍
- **SciFinder Web中的检索**
  - SciFinder中的结构面板使用技巧
  - SciFinder中的SciPlanner的使用
  - SciFinder中的反应定义
  - SciFinder中的反应筛选
- **SciFinder Web检索注意事项**

SciFinder反应检索—检索中的筛选

- 吡啶环的3,4位存在任意的非C,H原子或基团
- 检索在6位引入Cl的反应



定义反应结构

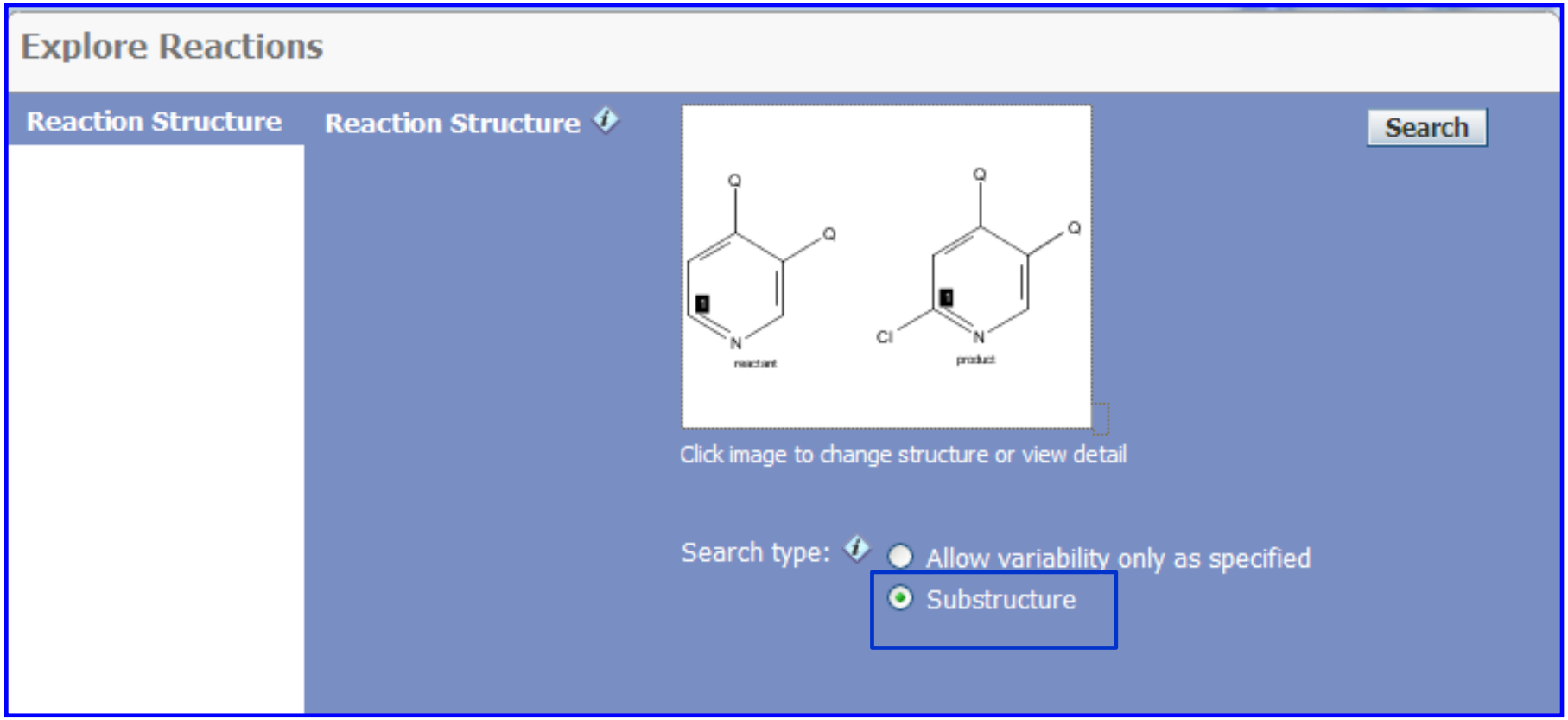


大多数科研工作者，刚开始都会画成这样。

但是，这样足够吗？

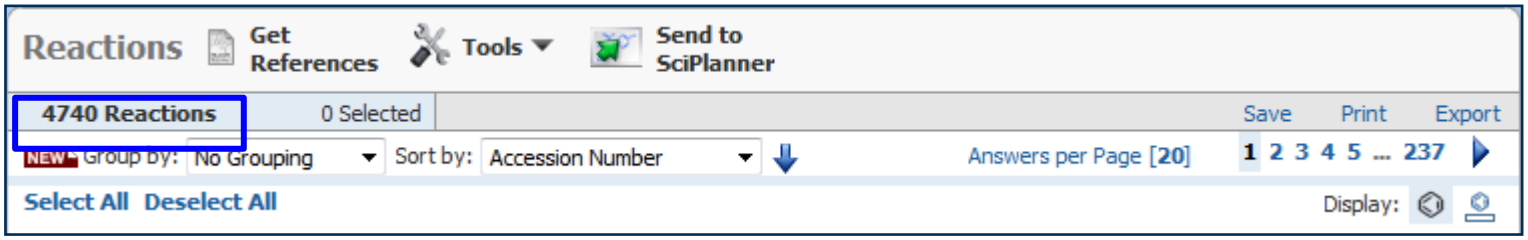
尝试SciFinder中的初步检索。

亚结构检索，帮助获得所有的相关反应



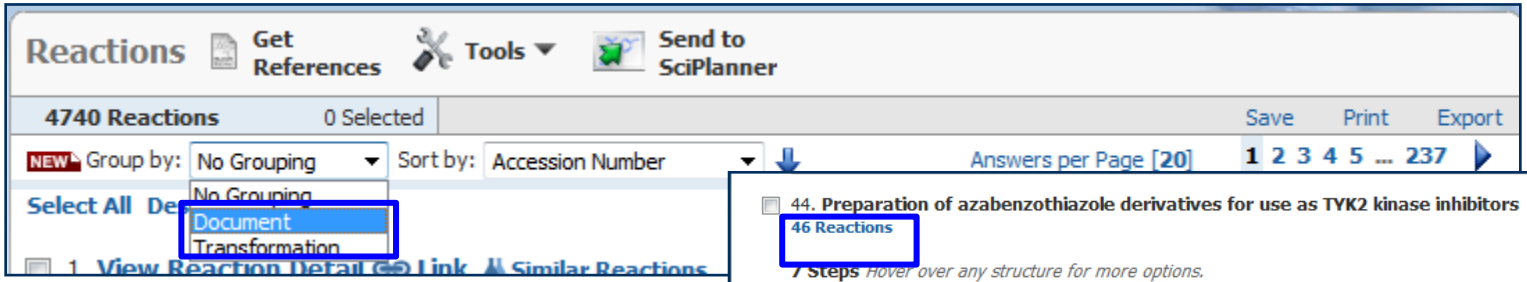
亚结构检索反应，帮助在最大范围内获得刚兴趣的内容

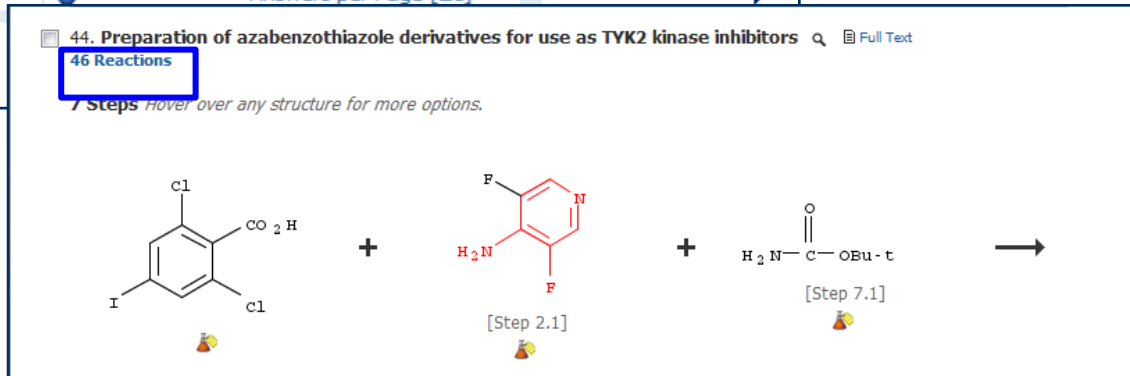
SciFinder中的反应筛选



我们获得4700+ 反应

反应筛选的第一步是Group By Document，让一篇文献出现一条反应

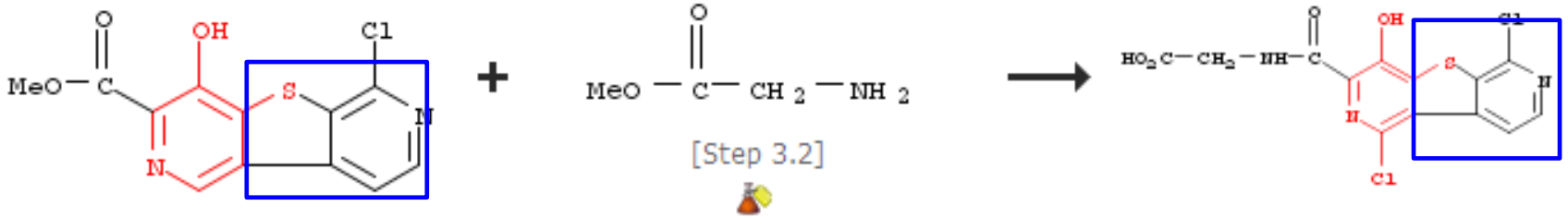




简单的浏览反应

2. View Reaction Detail Link

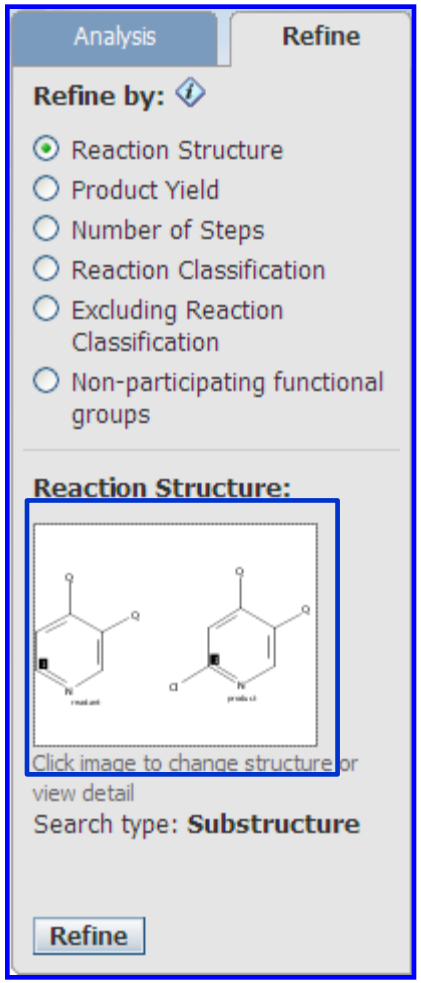
4 Steps *Hover over any structure for more options.*

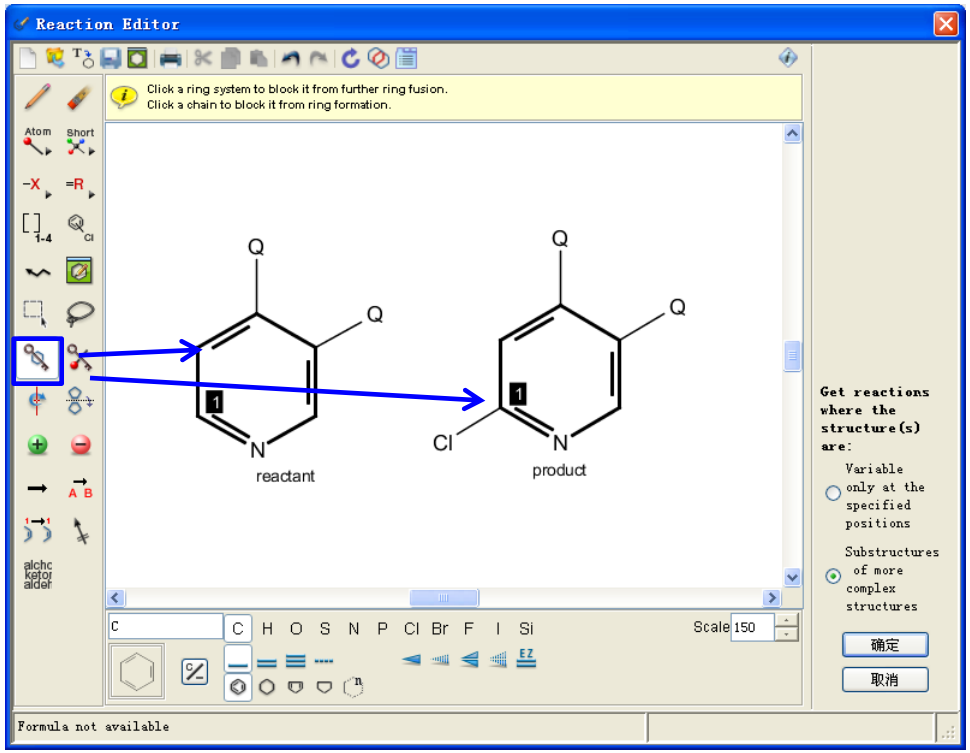


Overview

环系破坏，不是我们想要的反应

结构限定—添加环锁定



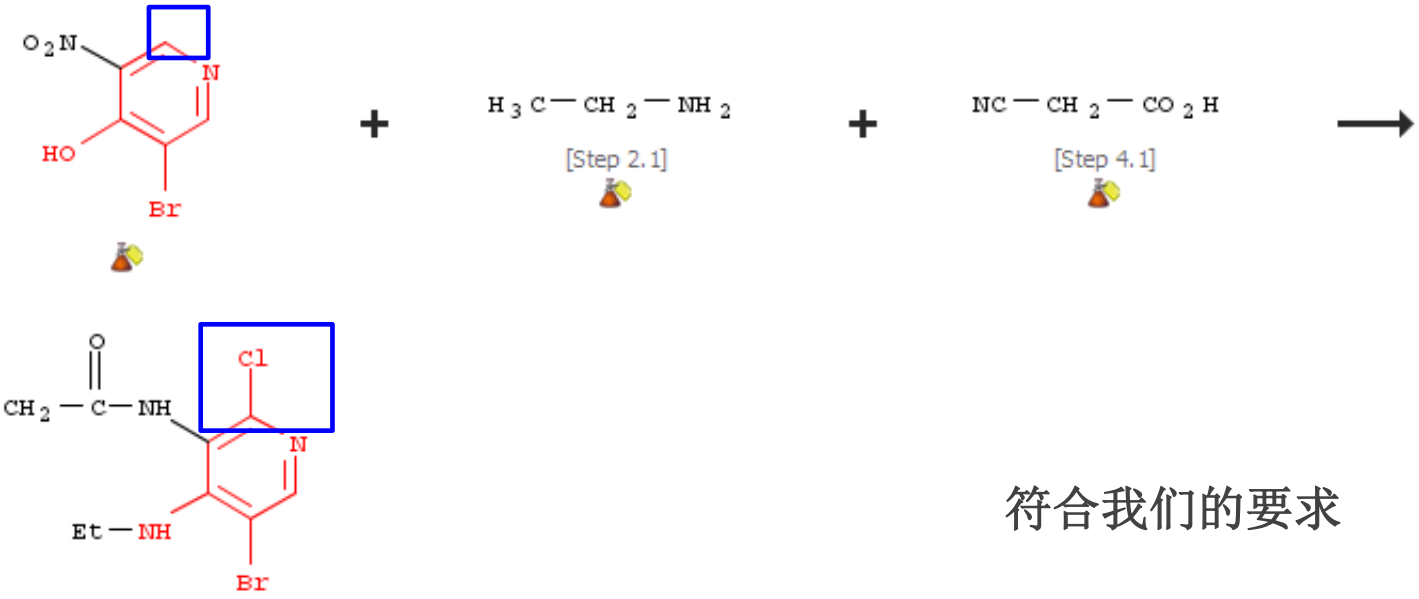


环锁定工具，保证在进行亚结构检索时，锁定的环系不发生破坏

继续浏览……

173. 7 Hits in this Reference

4 Steps *Hover over any structure for more options.*



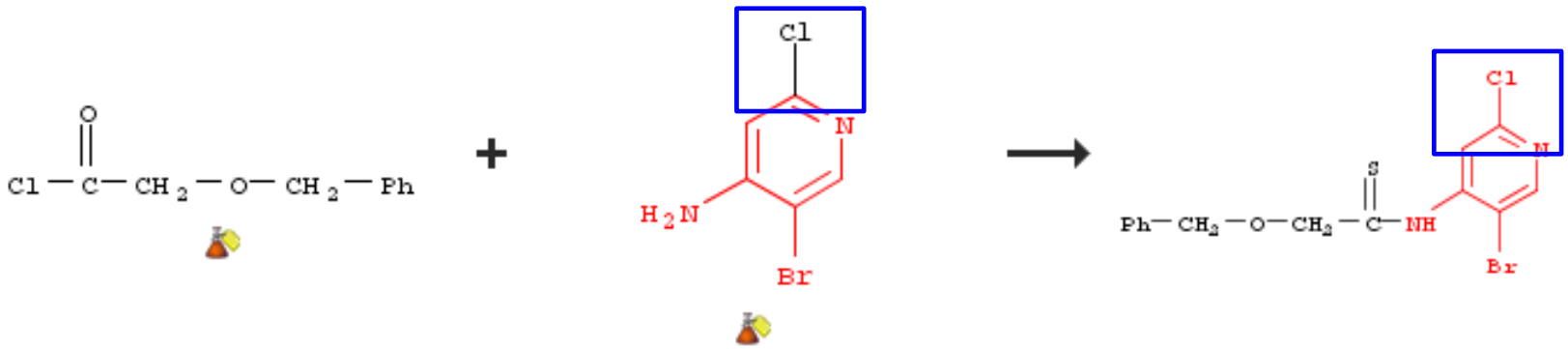
符合我们的要求

Overview

继续浏览……

85. 3 Hits in this Reference

2 Steps *Hover over any structure for more options.*



▸ Overview

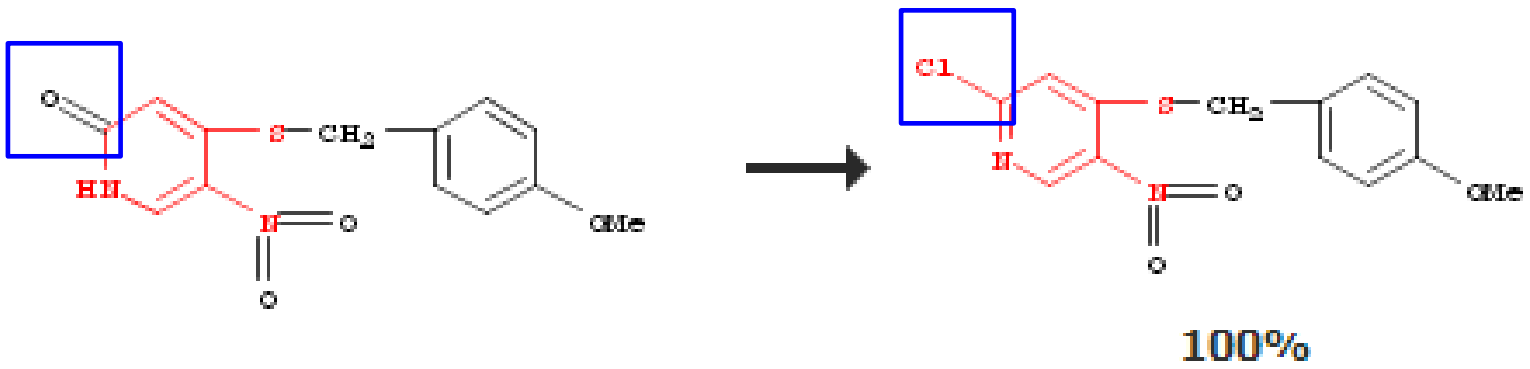
▸ Experimental Procedure

产物的Cl源自底物，不是我们想要的反应

继续浏览……

25. 17 Hits in this Reference Similar Reactions

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



Overview

产物的Cl由底物的OH转变过来，或许符合我们的要求

思考：什么样的反应是我们想要的

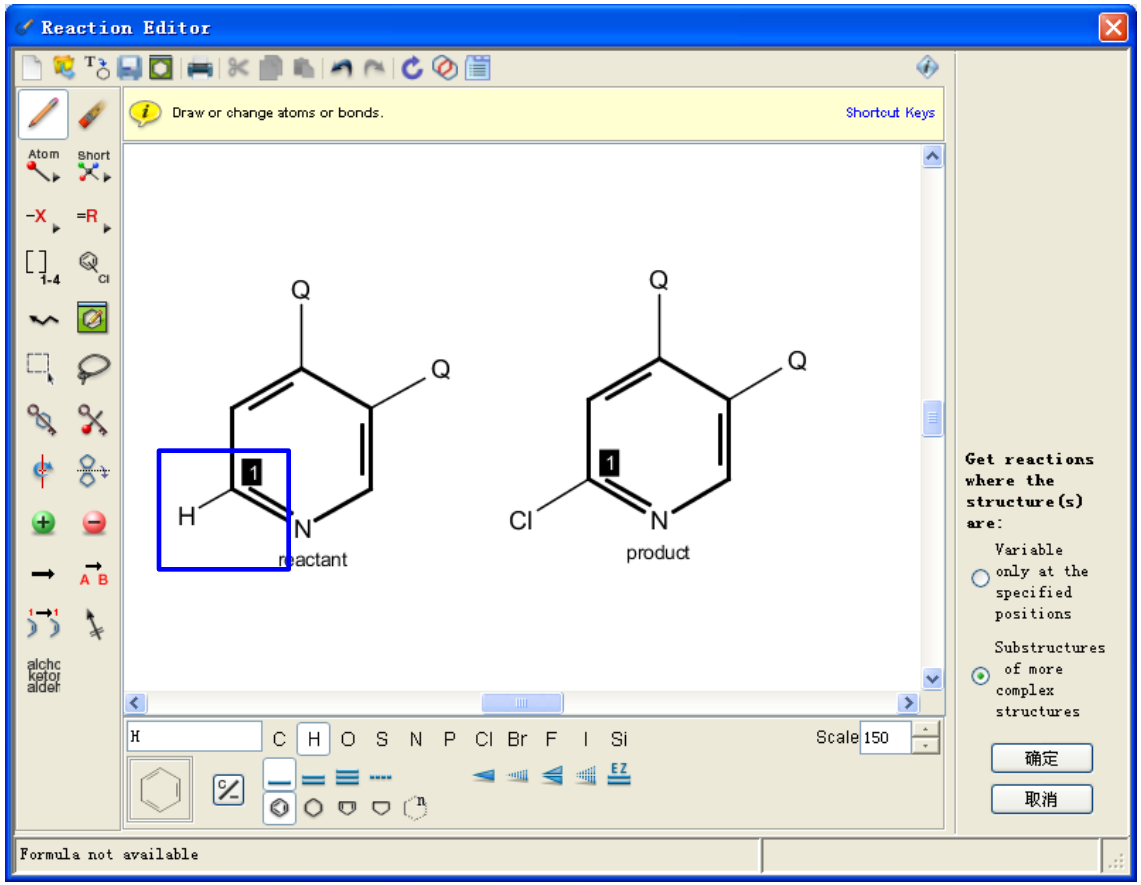
第一条反应：6位H变成6位Cl—肯定是我们想要的

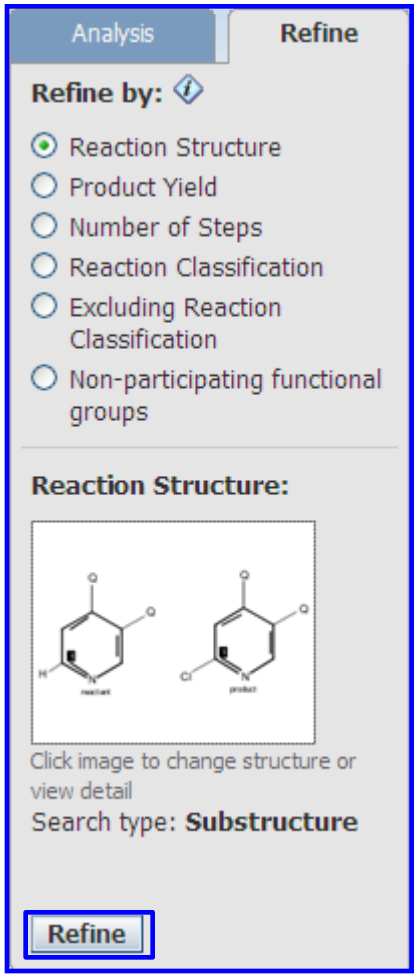
第二条反应：6位Cl变成6位Cl—肯定不是我们想要的

第三条反应：6位OH变成6位Cl—有可能是我们想要的

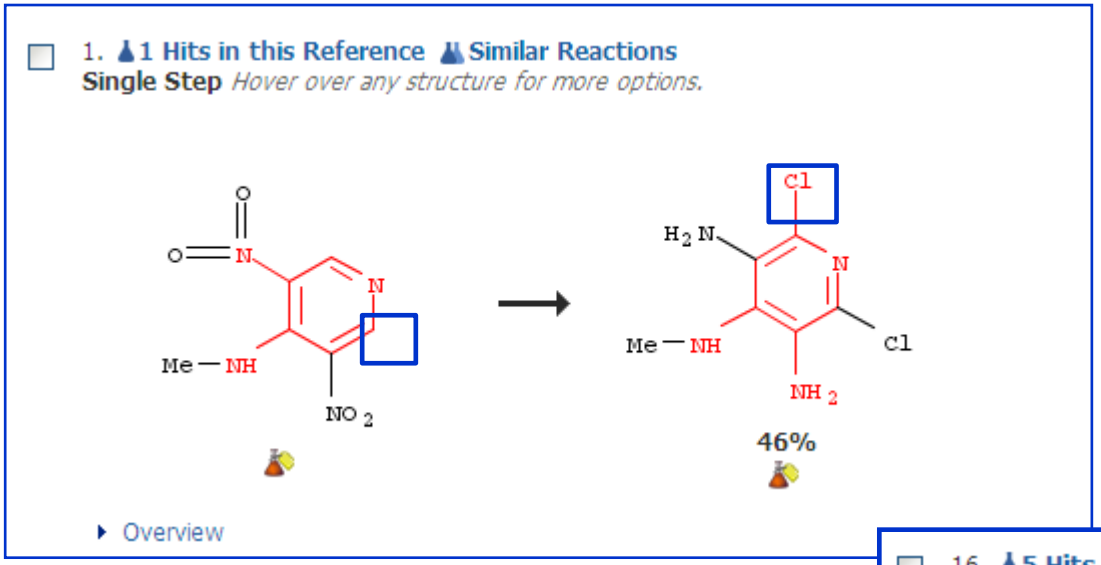
不同的人在这里的选择不一样，我们先假设只想获得第一类的反应。

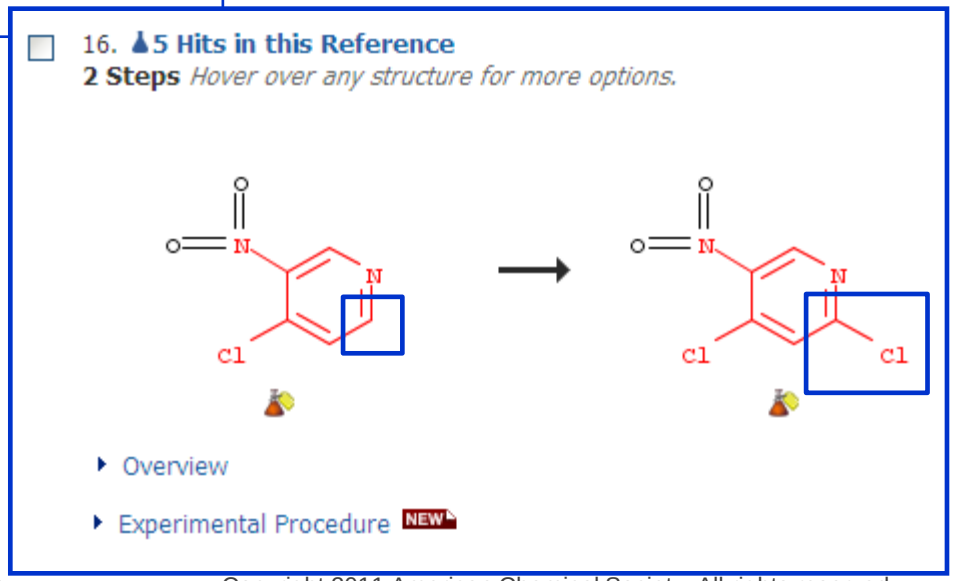
继续限定





这是我们想要的反应





所有的反应都符合我们的结构要求

在吡啶环的6位存在H到Cl的变化

一些值得思考的问题

- 并不是所有的科研工作者，一开始就能准确的定义反应结构。
- 建议先大致浏览下反应结果集，然后去思考如何去除我们不想要的反应。
- 使用**Analyze/Refine**工具，或其他的检索策略，去除不想要的反应.

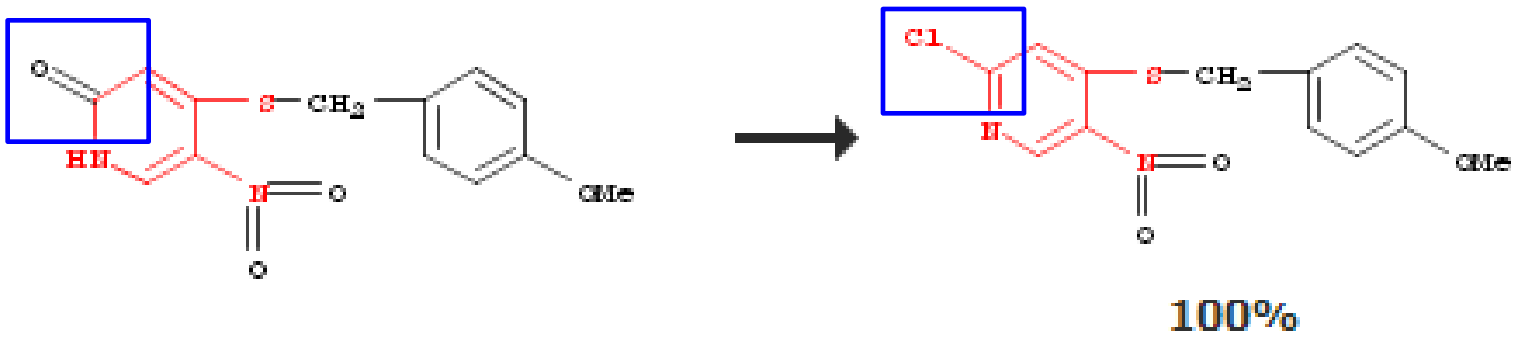
案例的延伸

在刚才的检索过程中，我们认为以下的反应不是我们想要的反应。

但是，如果我们认为，符合要求，那该如何处理？

25. 17 Hits in this Reference Similar Reactions

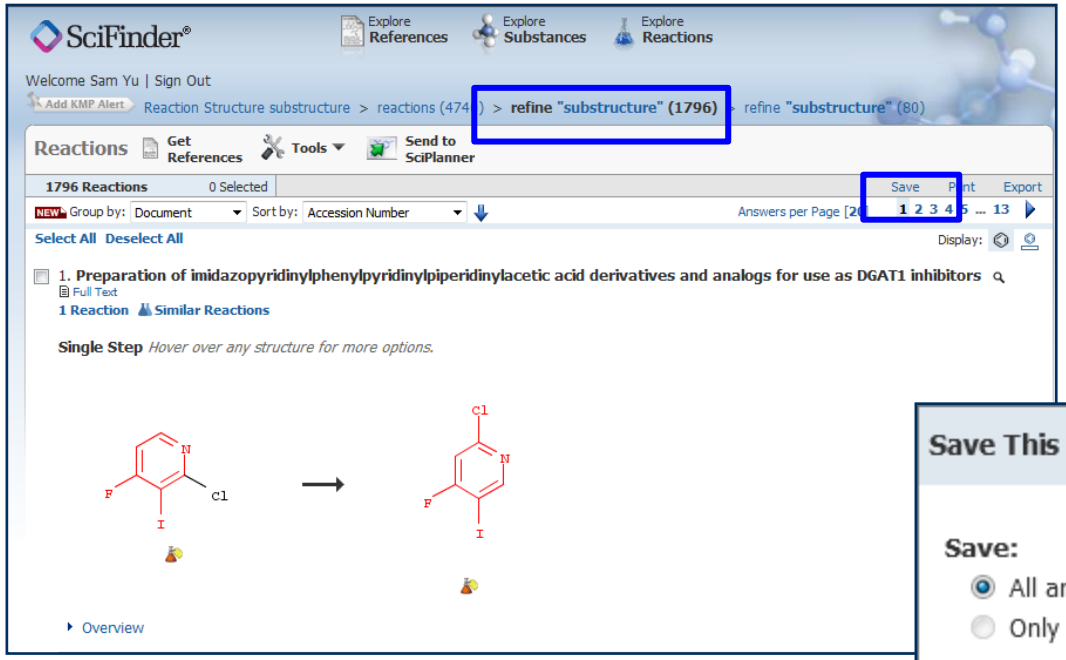
Single Step *Hover over any structure for more options.*



100%

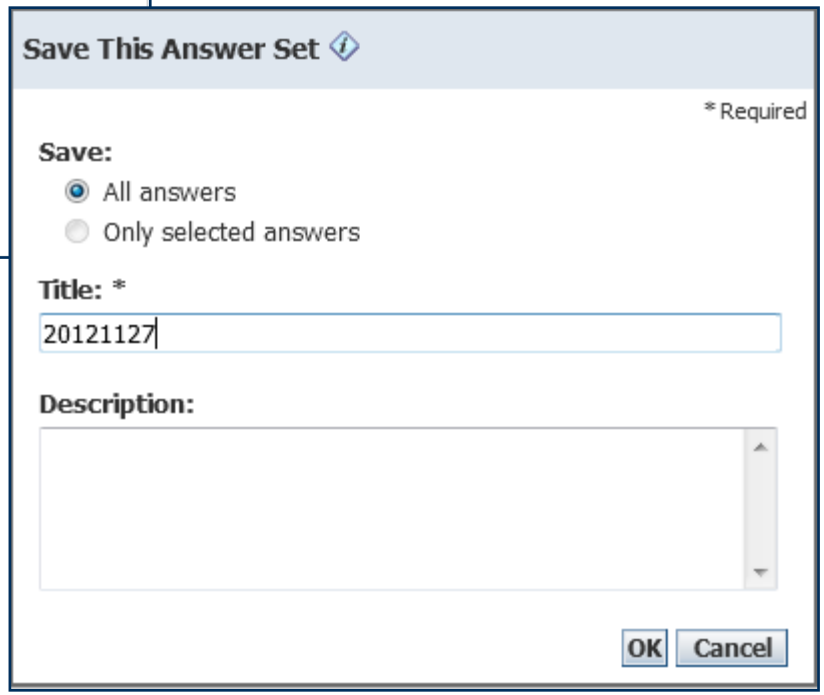
Overview

将结果保存在网络上

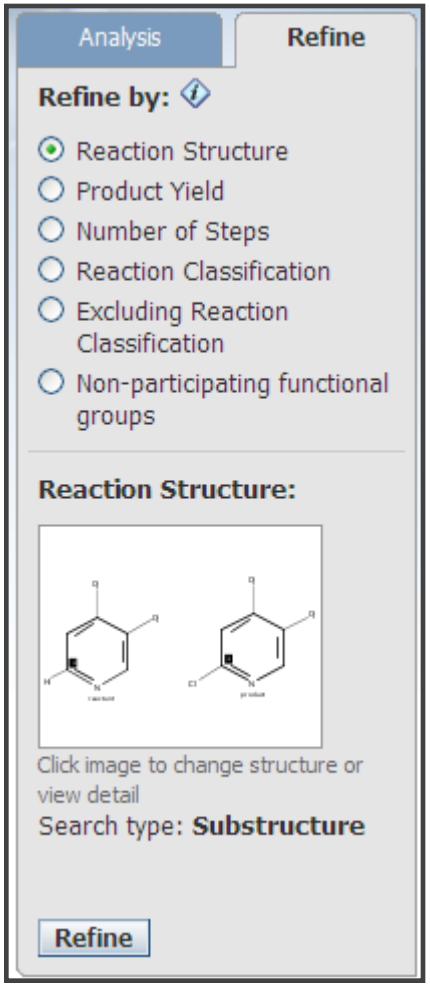


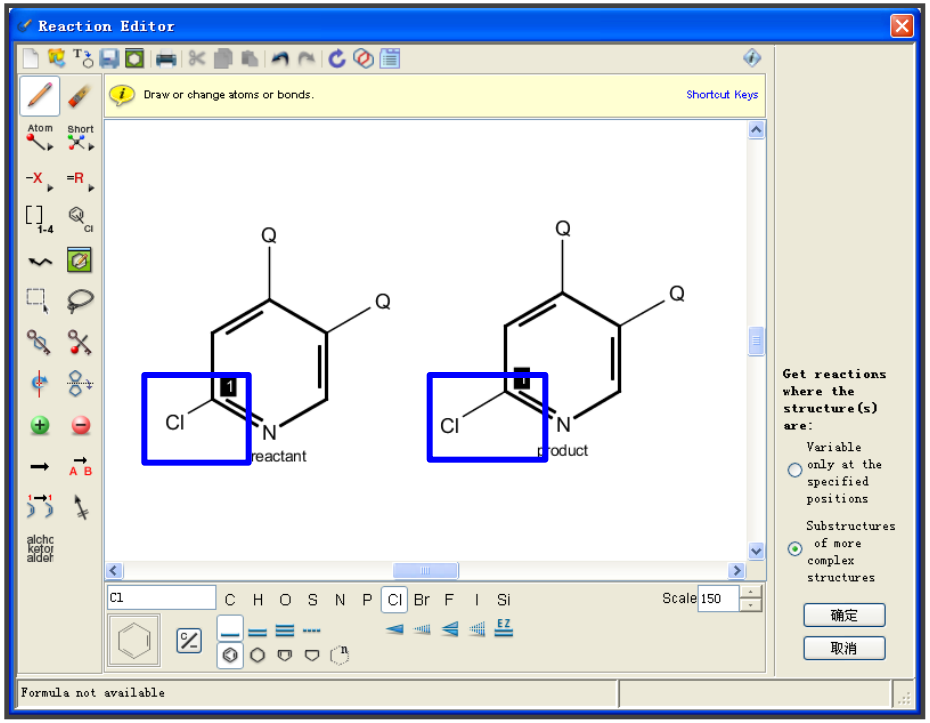
使用导航条返回曾经检索过的界面.

保存结果到网络上.



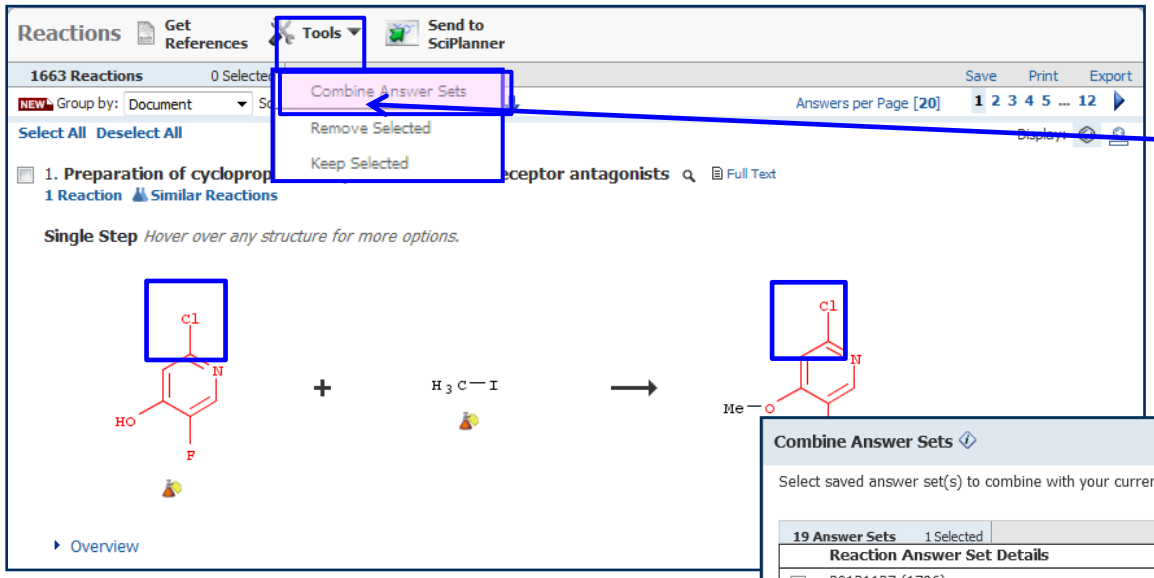
获得我们不想要的反应





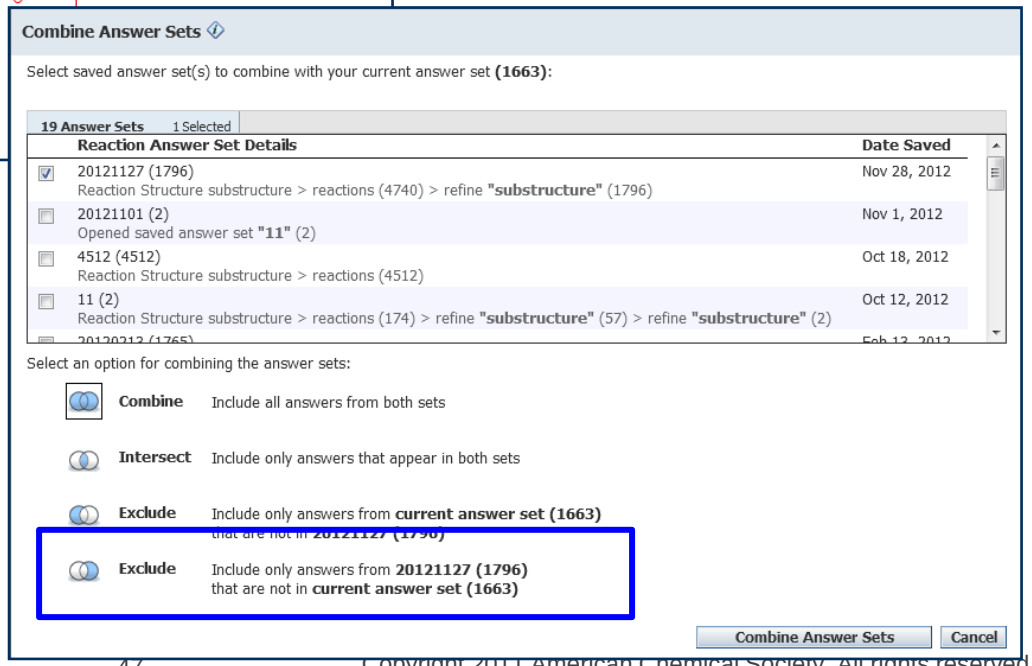
因为我们很明确的知道我们不需要什么，这里先获得不想要的反应，然后再考虑去除

使用Combine去除不想要的反应

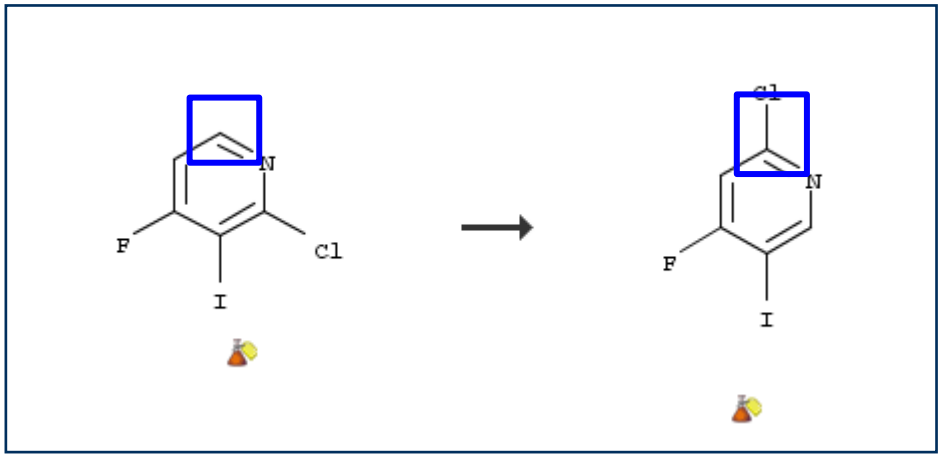


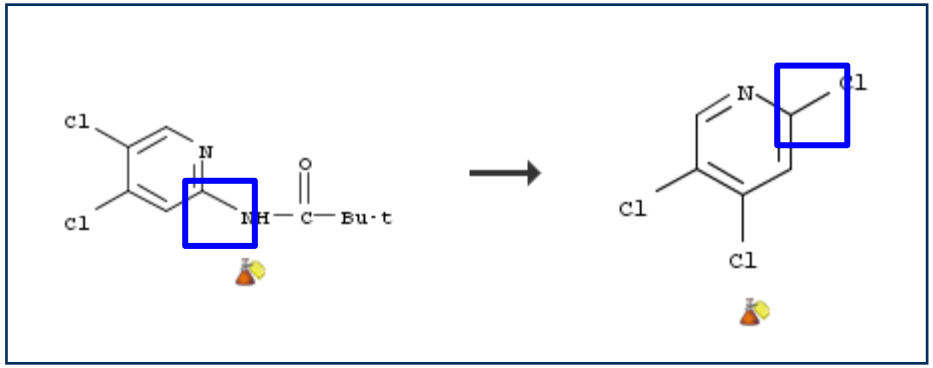
这些是我们不想要的

如果将这些反应去除掉，那么剩下的就是我们的目标反应

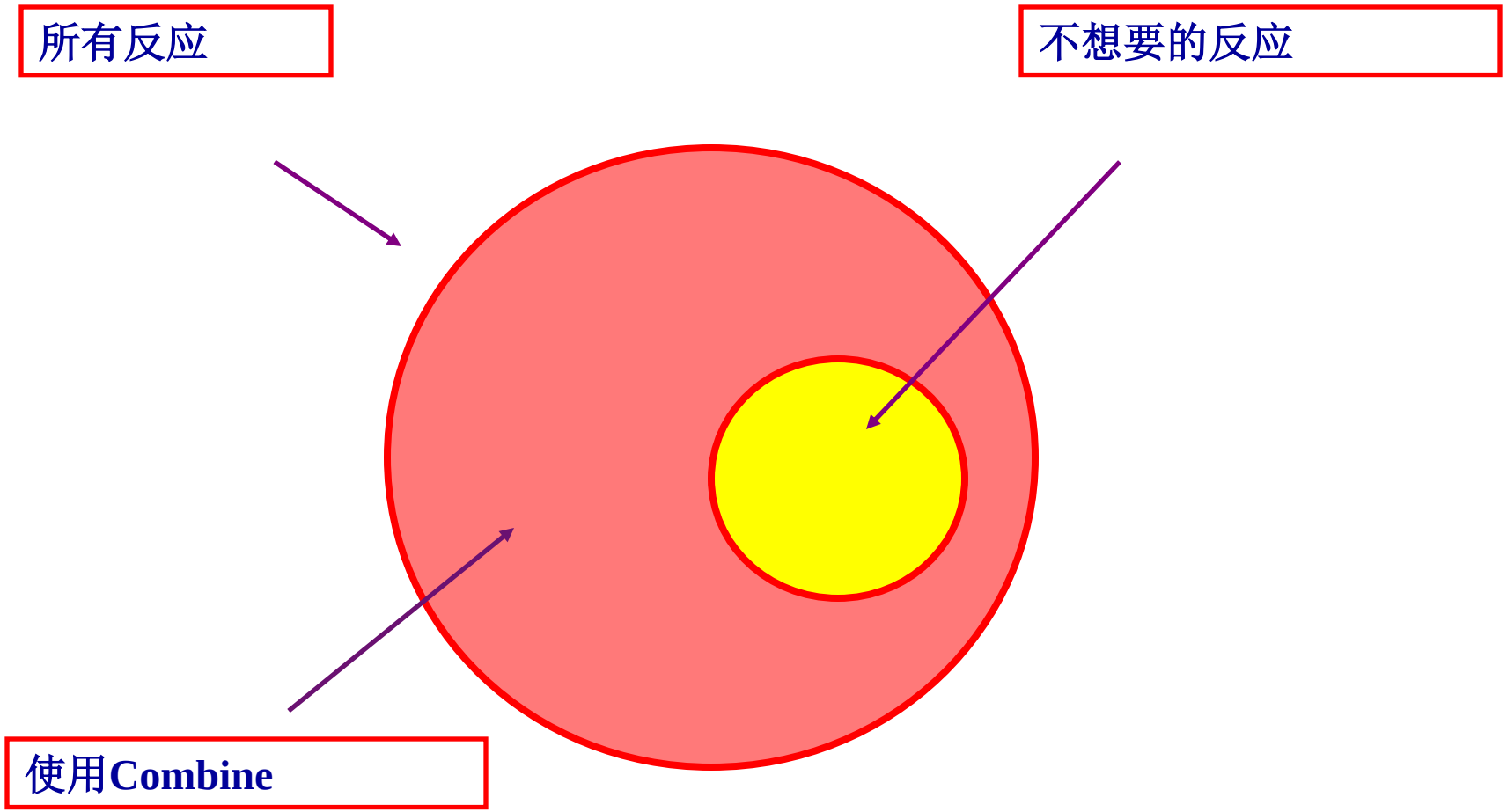


我们需要的反应结果集





检索策略



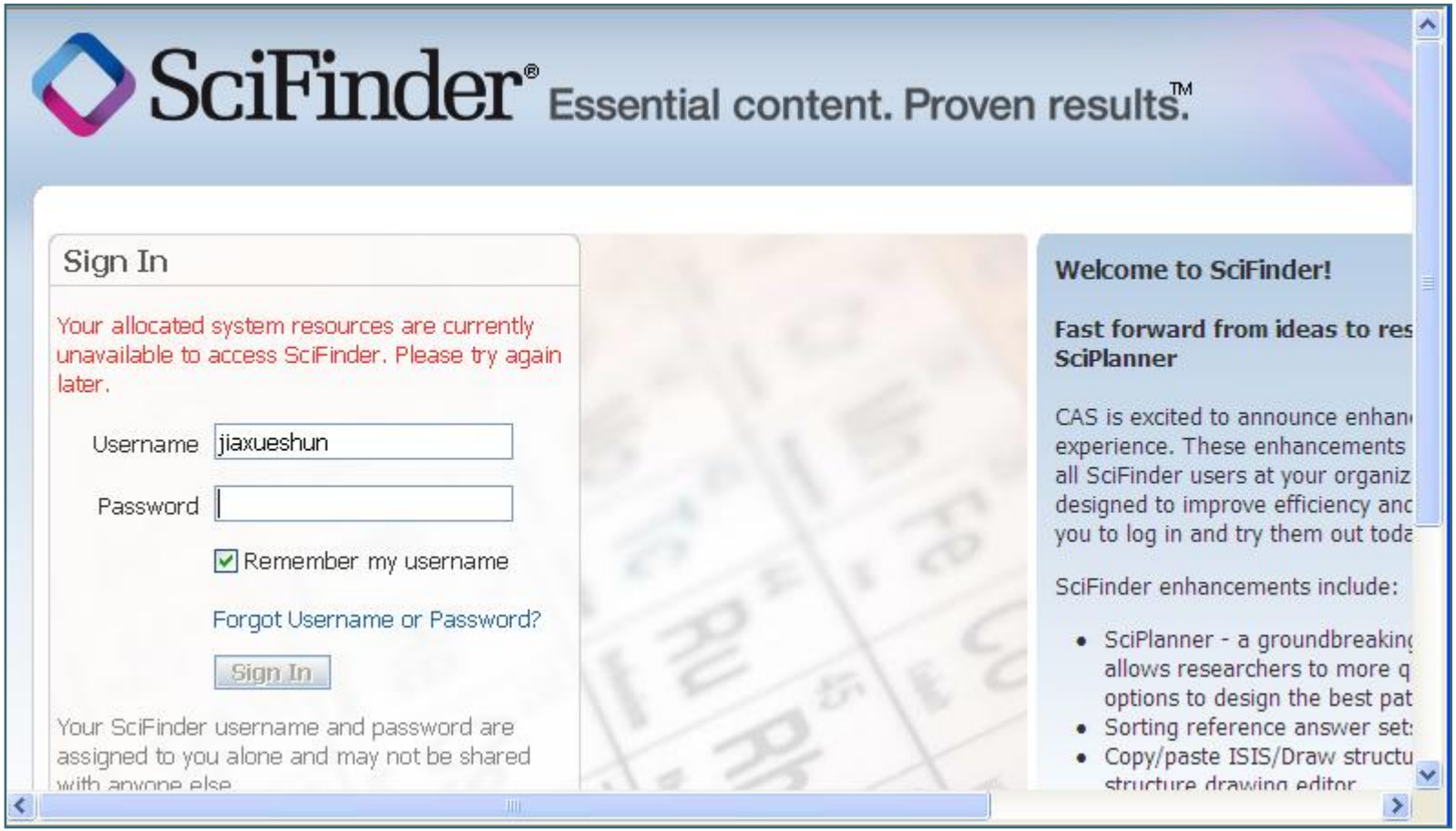
提纲

- 介绍
  - SciFinder Web新功能介绍
- **SciFinder Web中的检索**
  - SciFinder中的结构面板使用技巧
  - SciFinder中的SciPlanner的使用
  - SciFinder中的反应定义
  - SciFinder中的反应筛选
- **SciFinder Web检索注意事项**

SciFinder Web使用注意事项

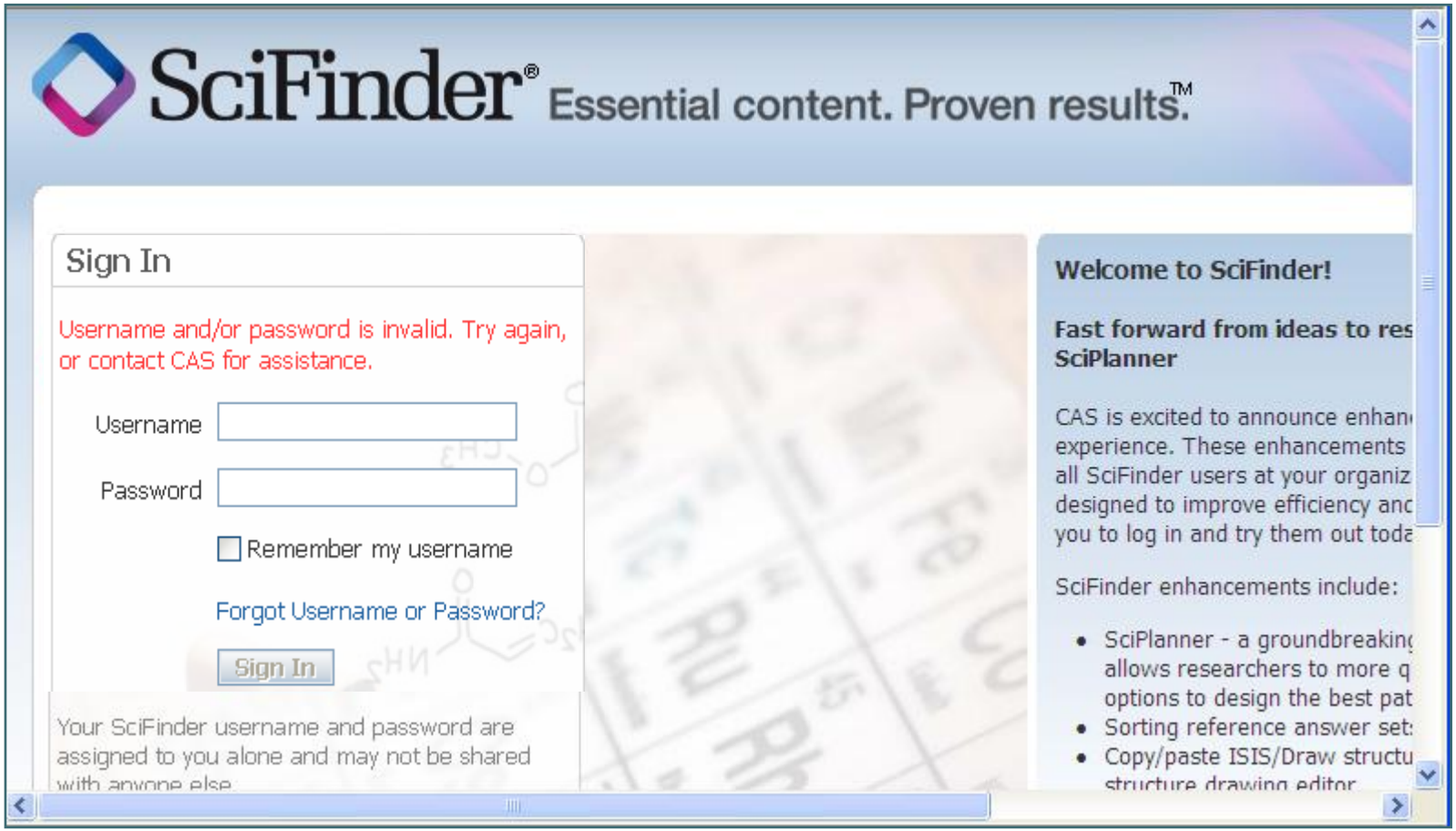
- 禁止过量下载
- 严禁账号分享
- 严禁将账号用于非学术研究

SciFinder Web 常见问题



并发用户数已满，请稍后再试

SciFinder Web 常见问题



账号或密码错误，请在**username**处填写，截图，并与图书馆联系

SciFinder Web 常见问题

任何需要反馈给图书馆的问题，都请点击测试IP地址的链接

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

将页面截图下来，一并发给图书馆

SciFinder Web网络在线资源平台

www.igroup.com.cn/cas

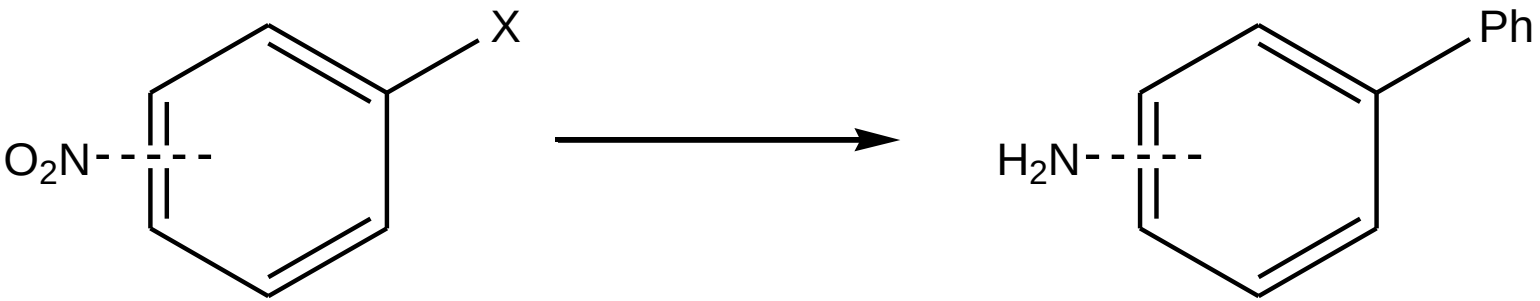
资源下载：**PDF文件**

在线演示：**Flash演示**

网络培训：不定期的网络专题培训

在线练习

- 检索符合以下要求的**SUZUKI**反应



最好能用1步反应实现，硝基还原的情况下，实现SUZUKI偶联
常见的催化剂，溶剂

Comprehensive Content

Sophisticated Analysis

Unprecedented Results

Thank You

俞靓
SciFinder 培训专员
Mail：Sam@igroup.com.cn
Tel:021-64453167-8013