朱传娴

Hzhu@acs-i.org

SciFinder^n

A CAS SOLUTION

江南大学

2020.11

CAS®
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

提纲

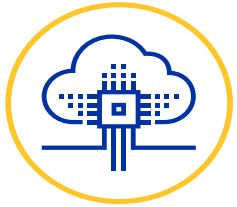
- 为什么需要美国化学文摘社
- SciFinder-n简介及检索方式
  - 文献检索
  - 物质检索
  - Markush检索
  - 反应检索
- 常见问题及解决

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

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

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

UNPARALLELED
SCIENTIFIC CONTENT



SPECIALIZED
TECHNOLOGY

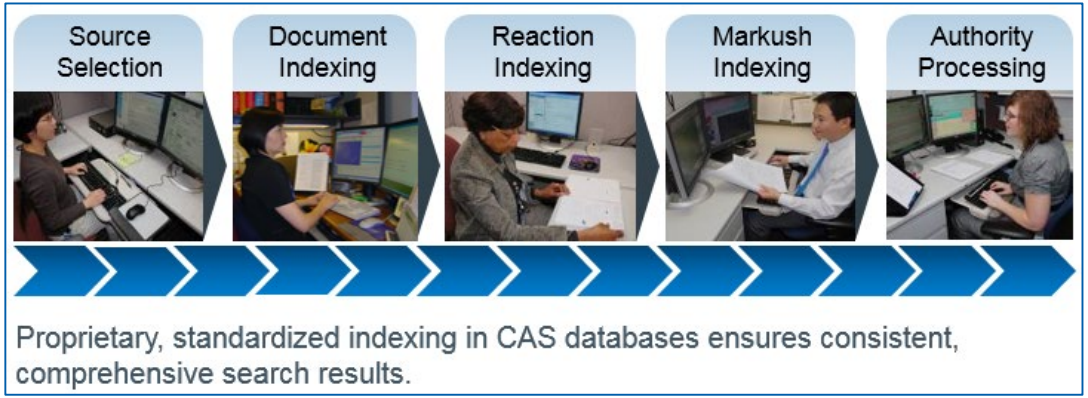
UNMATCHED
HUMAN EXPERTISE

CAS®
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

CAS数据覆盖学科

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

CAS科学家利用人类智慧对公开内容进行揭示，使相关信息更容易被挖掘



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

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

CAS各类科学信息研究工具

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

LIMITLESS POSSIBILITIES 无限可能

定制服务应对挑战.

CONTENT SERVICES 内容服务

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

TECHNOLOGY SERVICES 技术服务

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

KNOWLEDGE SERVICES 知识服务

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

PROFESSIONAL SERVICES 专业服务

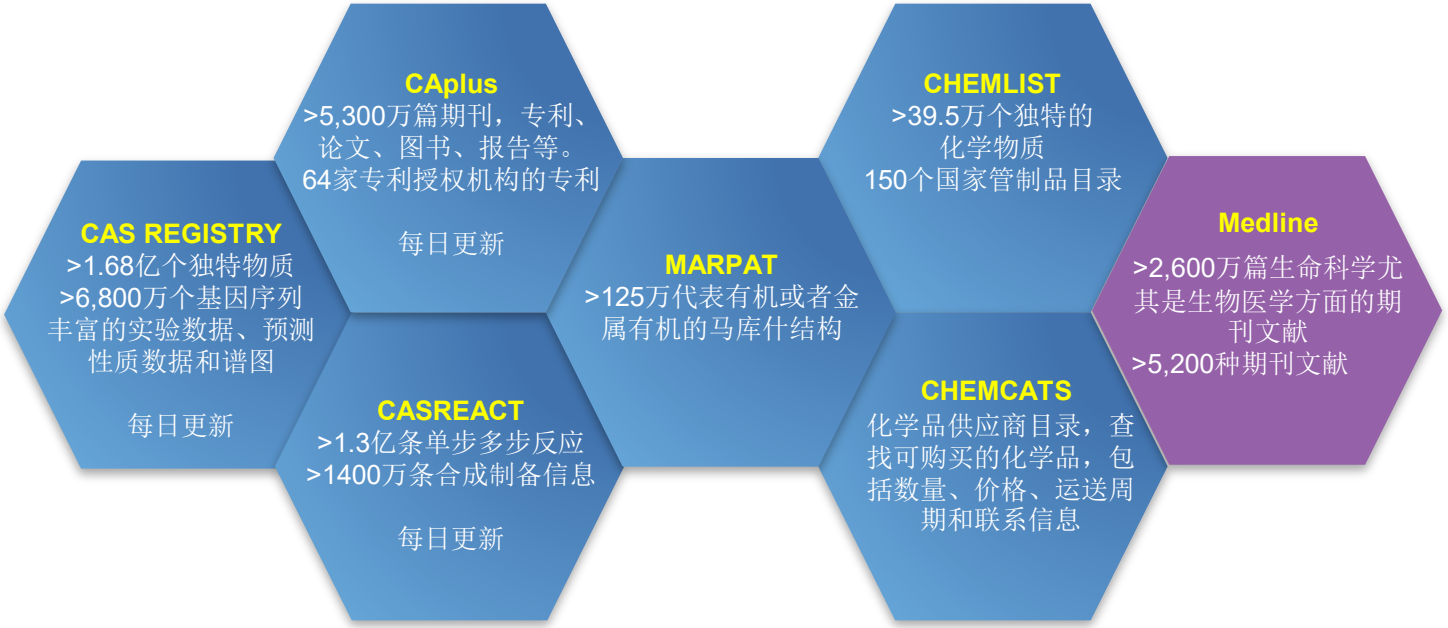
- 人员派遣
  Talent augmentation
- 咨询
  Consulting
- Technical writing
  科技写作
- Scientific analysis
  科研分析

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

提纲

- 美国化学文摘社简介
- SciFinder-n简介及检索方式
  - 文献检索
  - 物质检索
  - Markush检索
  - 反应检索
- 常见问题及解决

SciFinder-n覆盖的数据库



CAS®
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder-n登录网址： https://SciFinder-n.cas.org

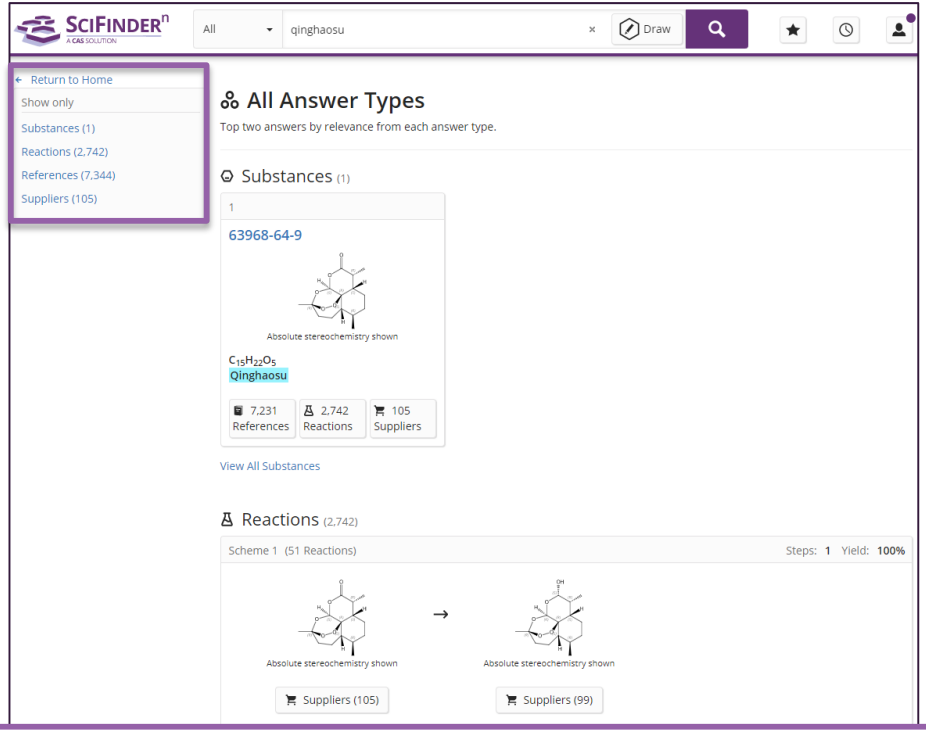
使用SciFinder账号登录

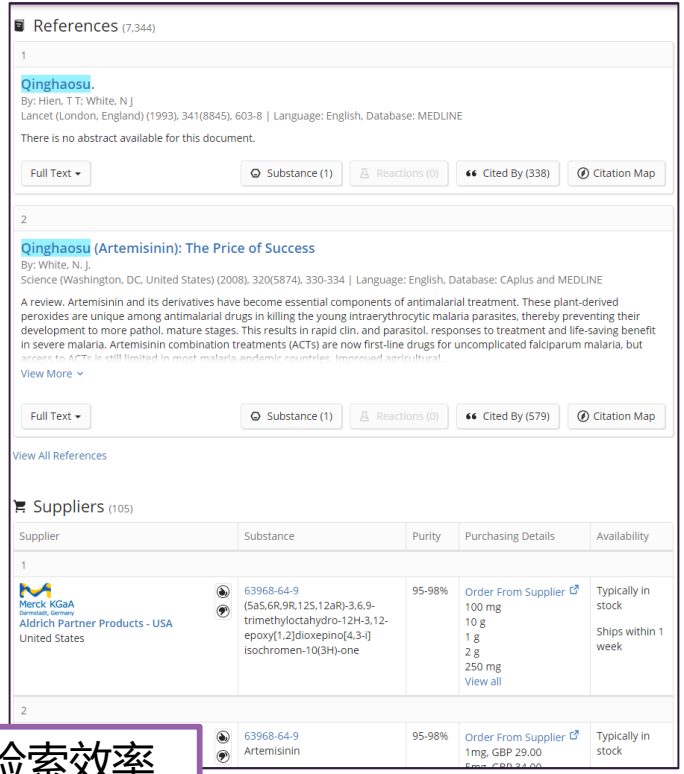
CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder-n主界面

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

一站检索：一次检索，获得所有信息





Search in All: 无需逐步在不同信息中检索，提高检索效率

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

提纲

- 美国化学文摘社简介
- SciFinder-n简介及检索方式
  - 文献检索
  - 物质检索
  - Markush检索
  - 反应检索
- 常见问题及解决

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

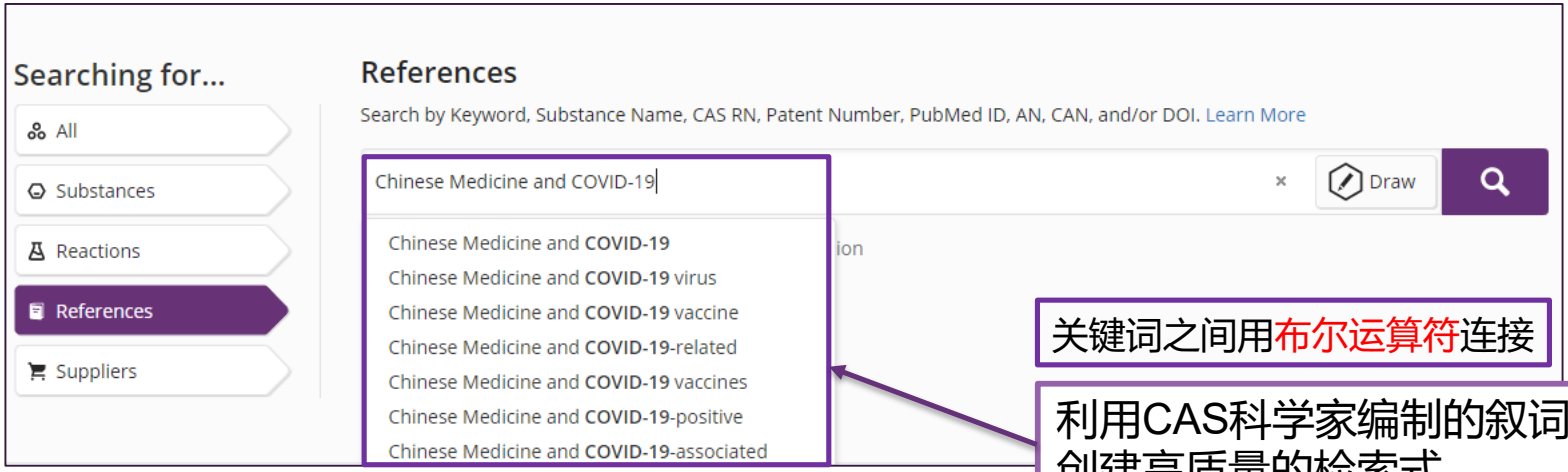
文献检索

- 文献检索方法
  - 主题检索
  - 作者名检索
  - 机构名检索
  - 文献标识符检索
  - 期刊名称和专利信息（公开号，申请号等）
  - 从物质，反应获得文献
- 检索策略推荐
  - 关注某特定领域的文献：主题检索
  - 关注物质有关的文献：先获得物质，再获得文献
  - 关注某科研人员的文献：作者名检索
  - 关注某机构科研进展：机构名检索

文献检索—主题词检索

主题检索： 中药治疗新冠肺炎

检索式：Chinese Medicine and COVID-19



关键词之间用布尔运算符连接

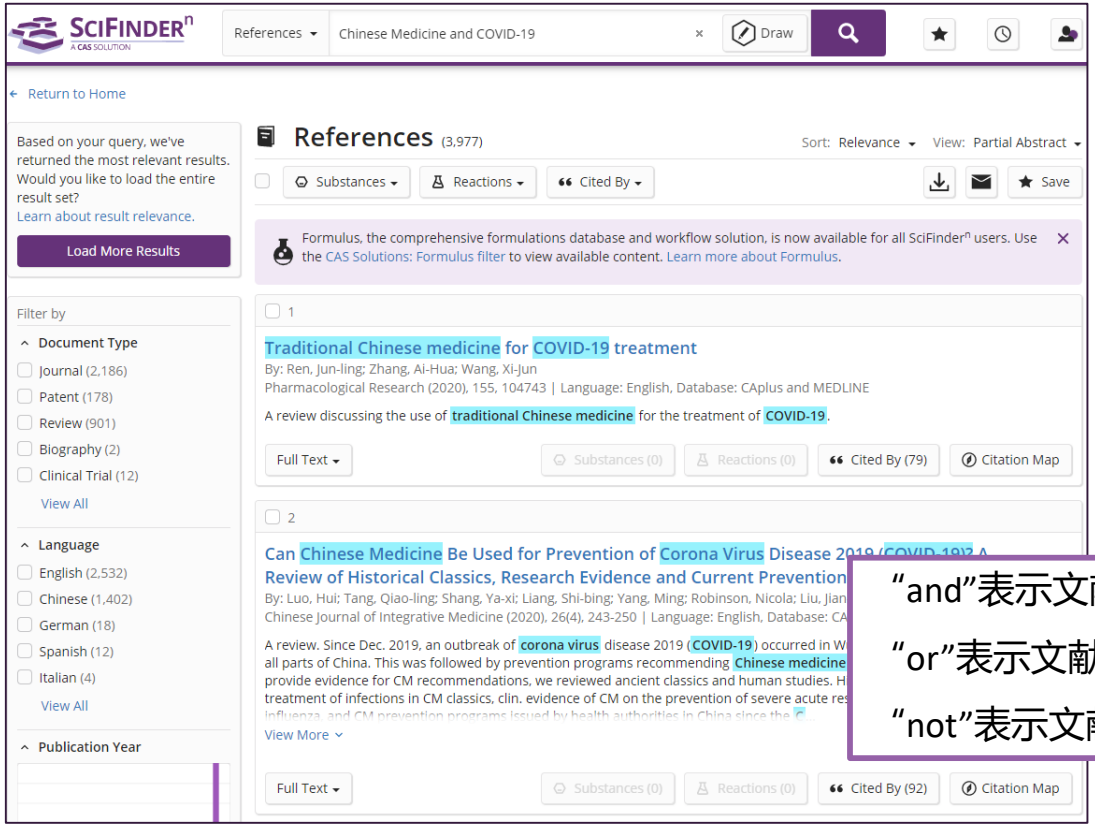
利用CAS科学家编制的叙词表，创建高质量的检索式

可用关键词、物质名称、CAS RN、入库号、PubMed编号、DOI号、专利号、专利申请号进行检索；

打开Advanced Search，可做作者名、机构名、期刊名检索

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

文献检索——布尔运算符：and，or，not



Chinese Medicine and COVID-19

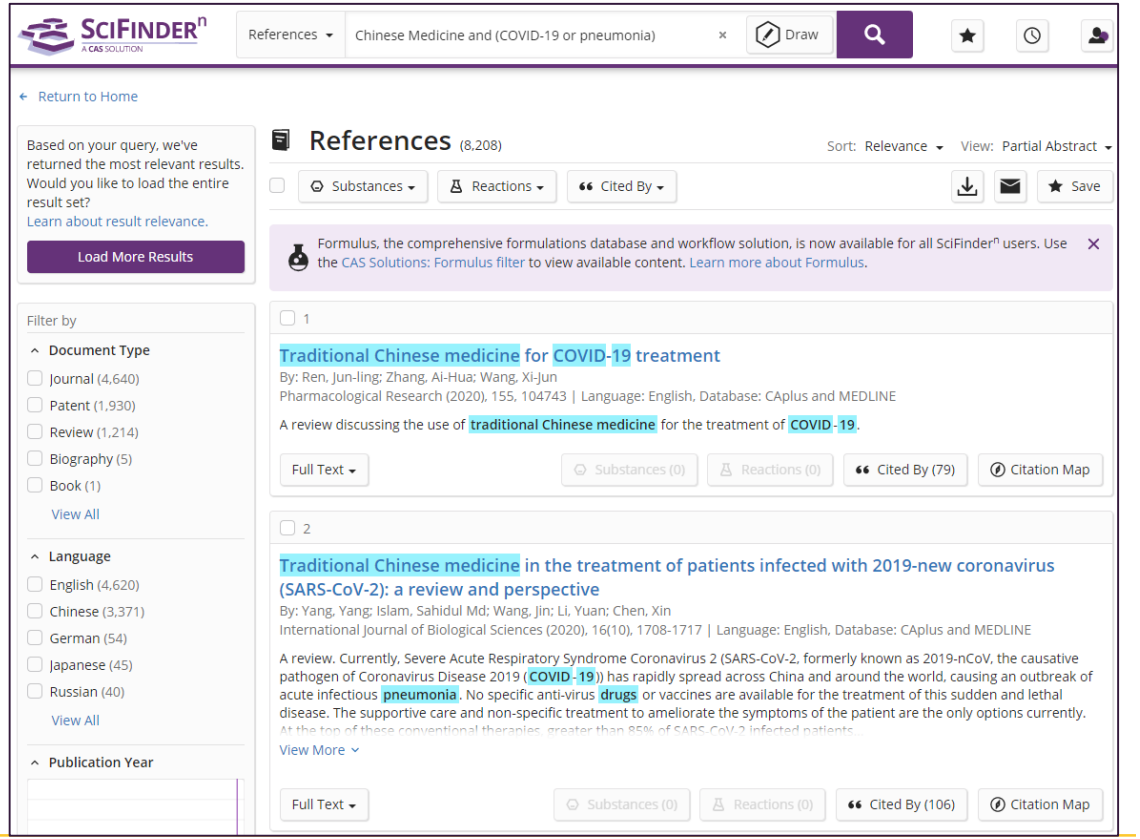
“and”表示文献中包含所有关键词

“or”表示文献中包含其中一个关键词即可

“not”表示文献包含一个关键词而没有另一个关键词

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

文献检索——检索式修饰符：括号 ( )

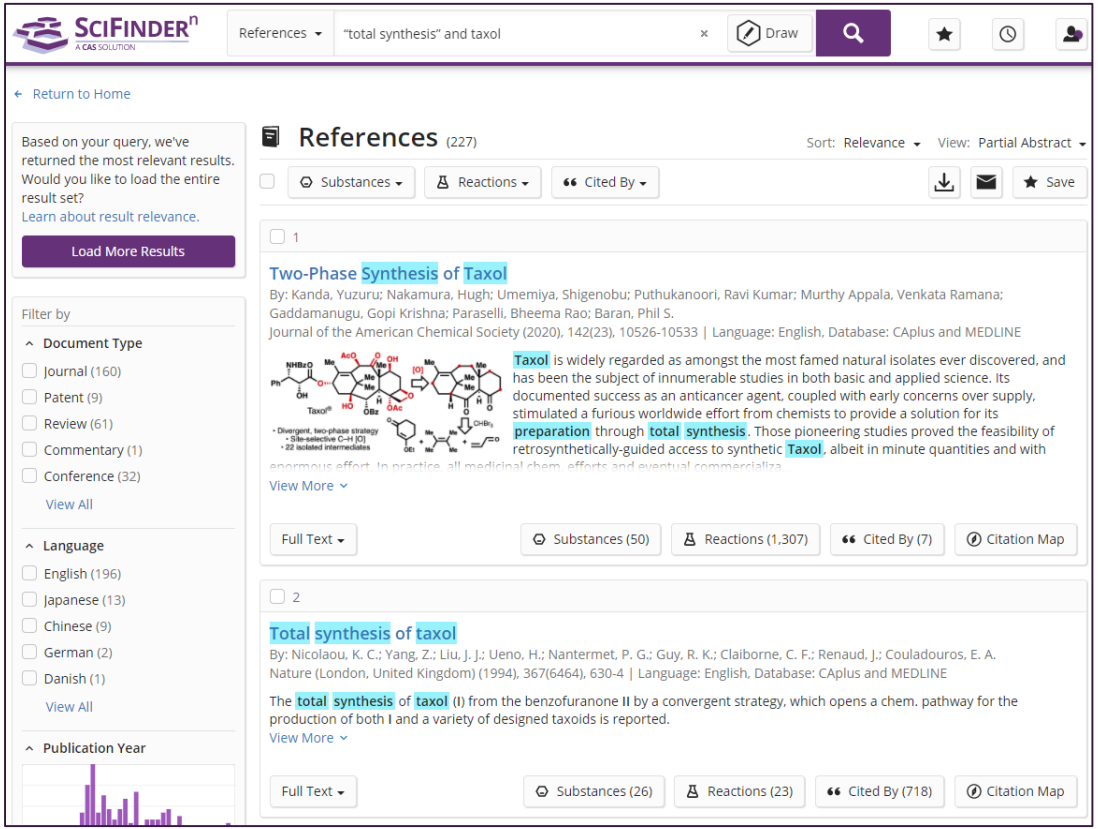


Chinese Medicine and
(COVID-19 or pneumonia)

括号中的检索式被当做是一个关键词参与检索

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

文献检索——检索式修饰符：引号“ “

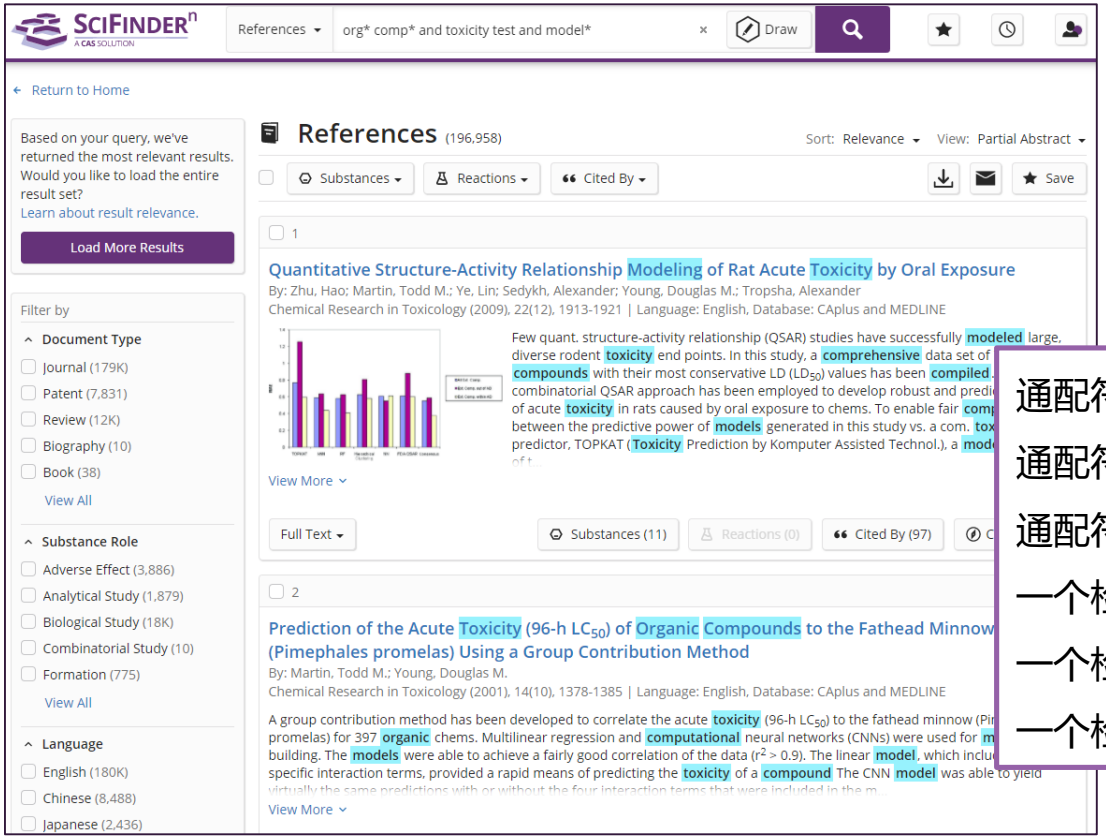


“total synthesis” and taxol

引号中的关键词仅扩展检索其单复数

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

文献检索——检索式通配符：*与?



org* comp* and toxicity test and model*

通配符星号(*)代表0或多个字符

通配符问号(?)代表0或1个字符

通配符可用于词中间或词尾，不可用于词首

一个检索词中至少包含3个非通配符的字符

一个检索词中只用一个通配符

一个检索式中不可超过五个通配符

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

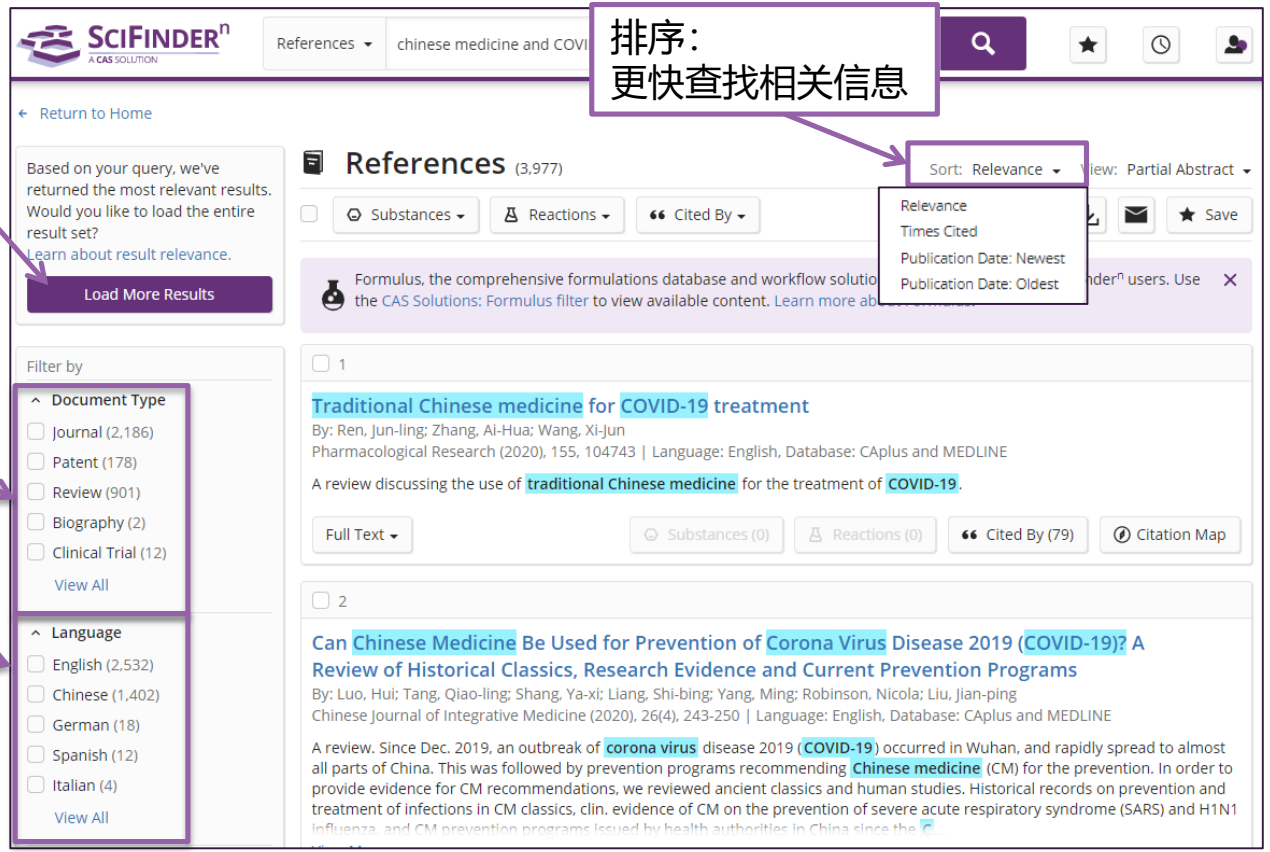
文献结果集

获得更多文献

文献类型

文献语言

排序：
更快查找相关信息



CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

文献结果集

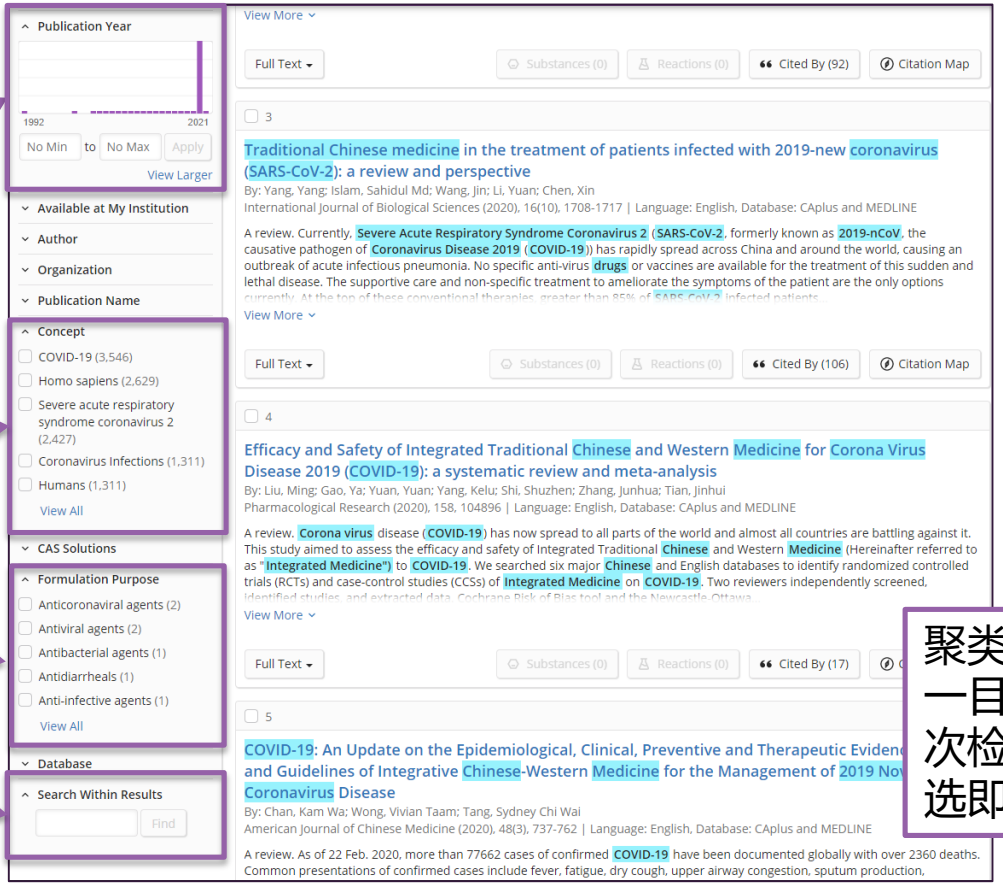
研究发展趋势

CAS标引的技术术语

制剂用途

二次检索

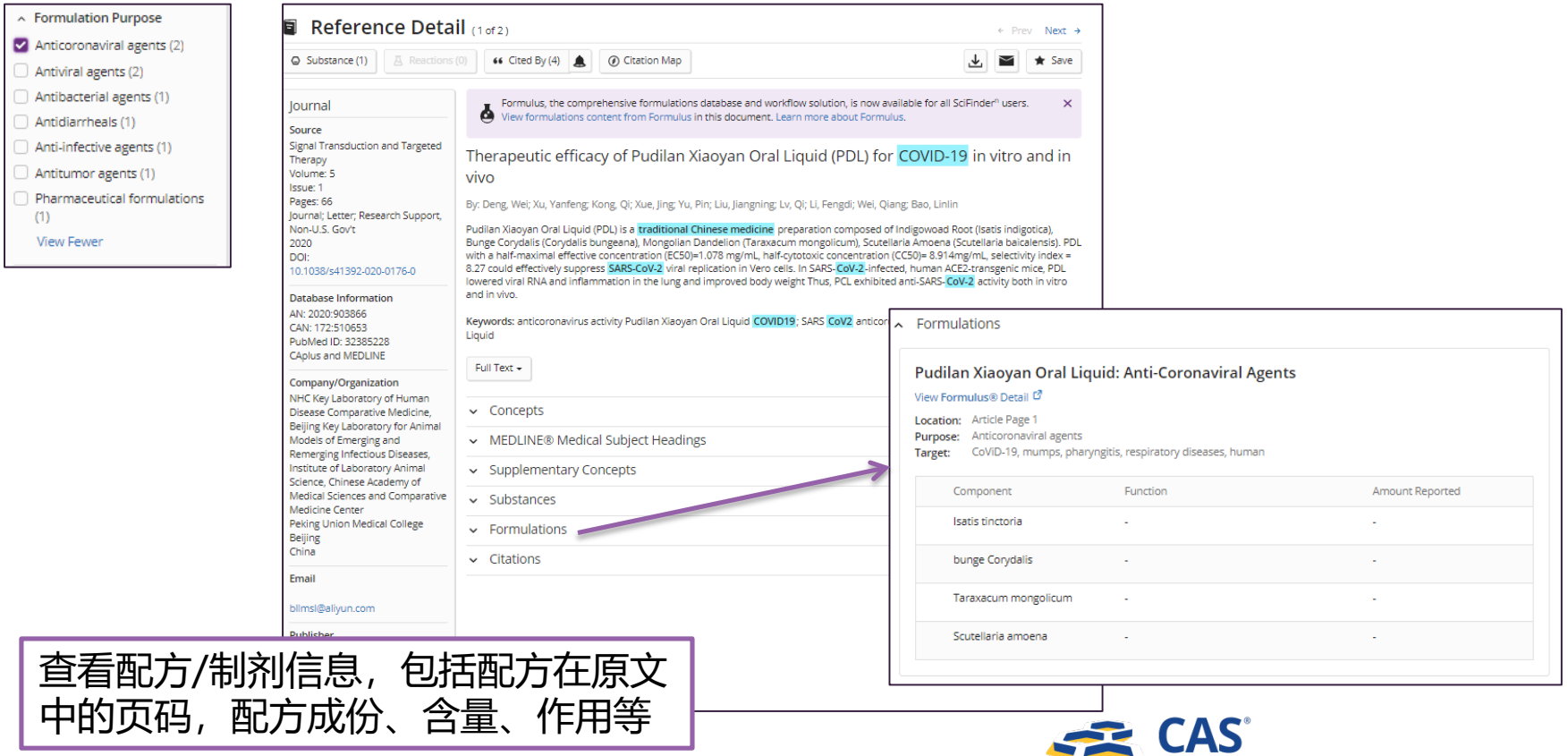
聚类筛选项因结果集而异



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

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

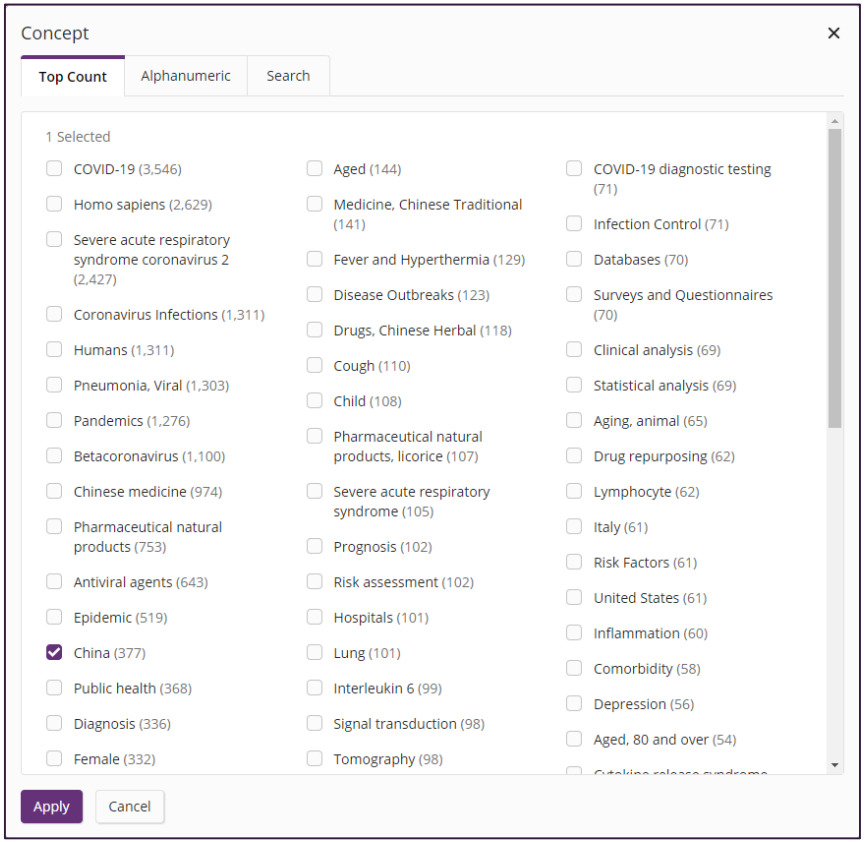
文献结果集—聚类筛选 Formulation Purpose

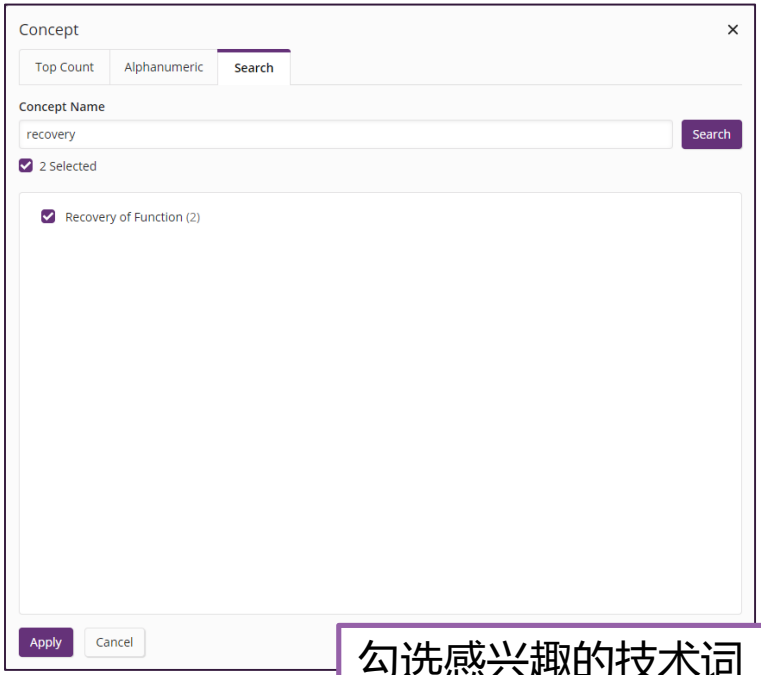


查看配方/制剂信息，包括配方在原文中的页码，配方成份、含量、作用等

CAS® A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

文献结果集—聚类筛选 Concept

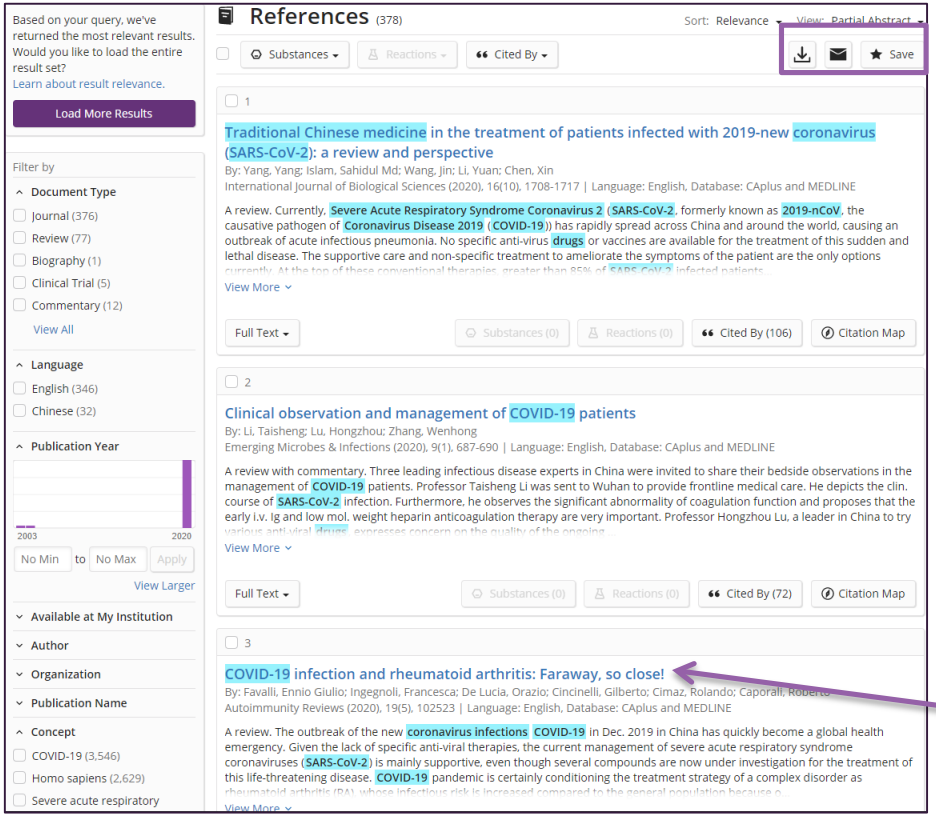


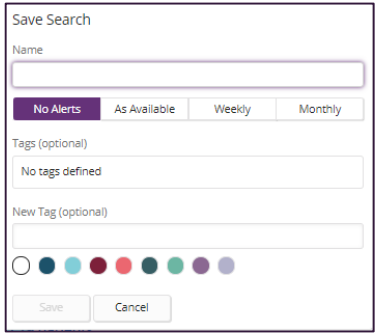


勾选感兴趣的技术词或直接检索

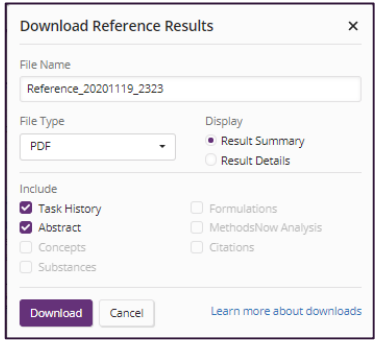
CAS® A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

文献结果集





Save：保存成结果集，并可设置更新时间；可保存2万条结果集

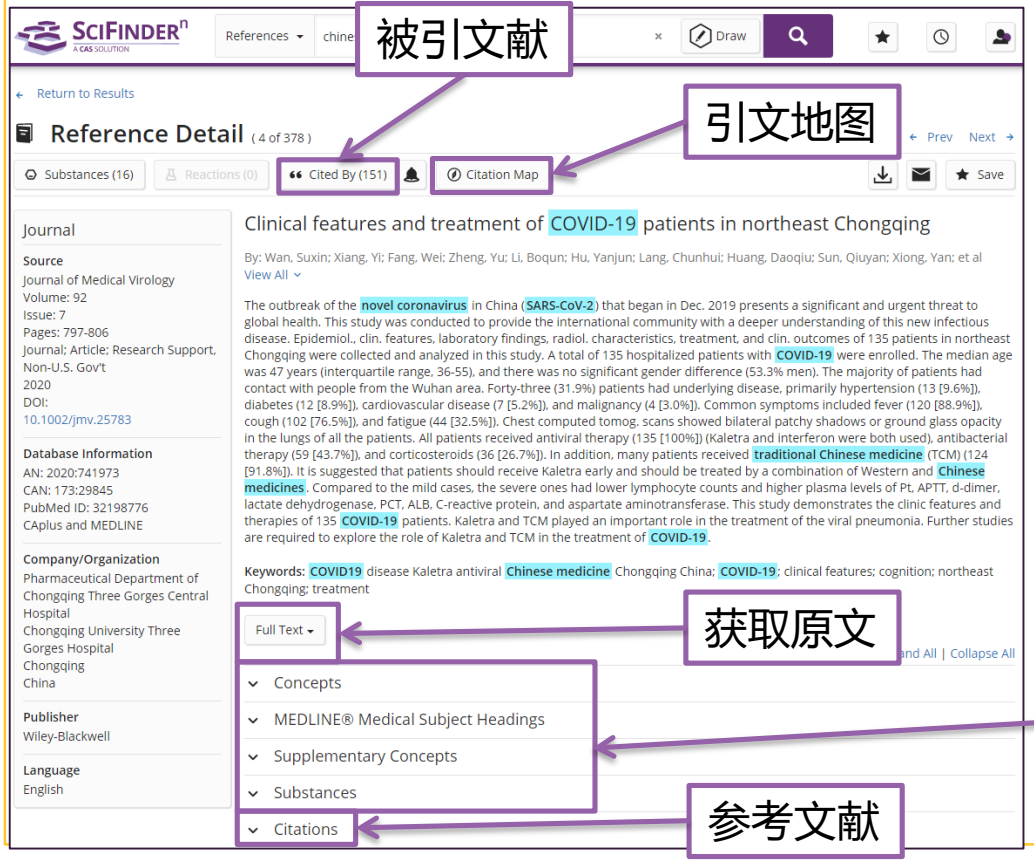


Download：可保存成ris、PDF、rtf、Excel格式

点击文献标题查看文献详情

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

文献详情

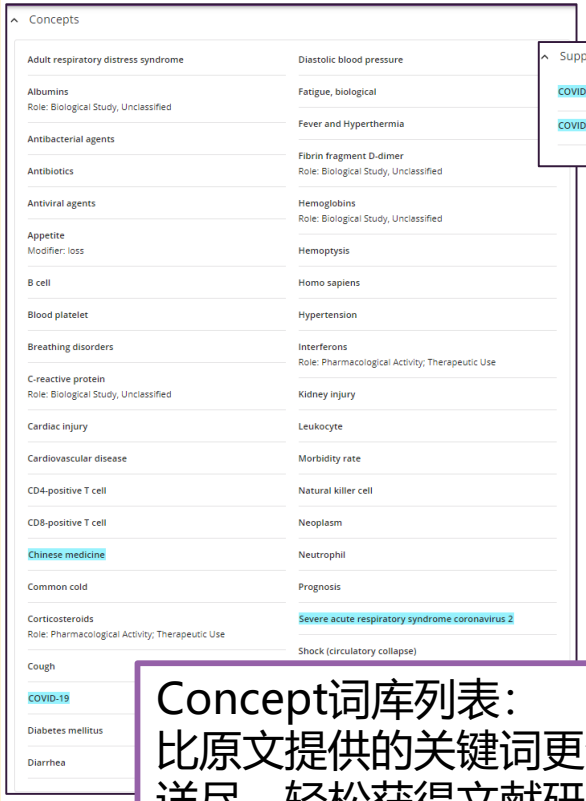


文献详情界面包括：

- 标题
- 摘要
- 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
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

文献详情



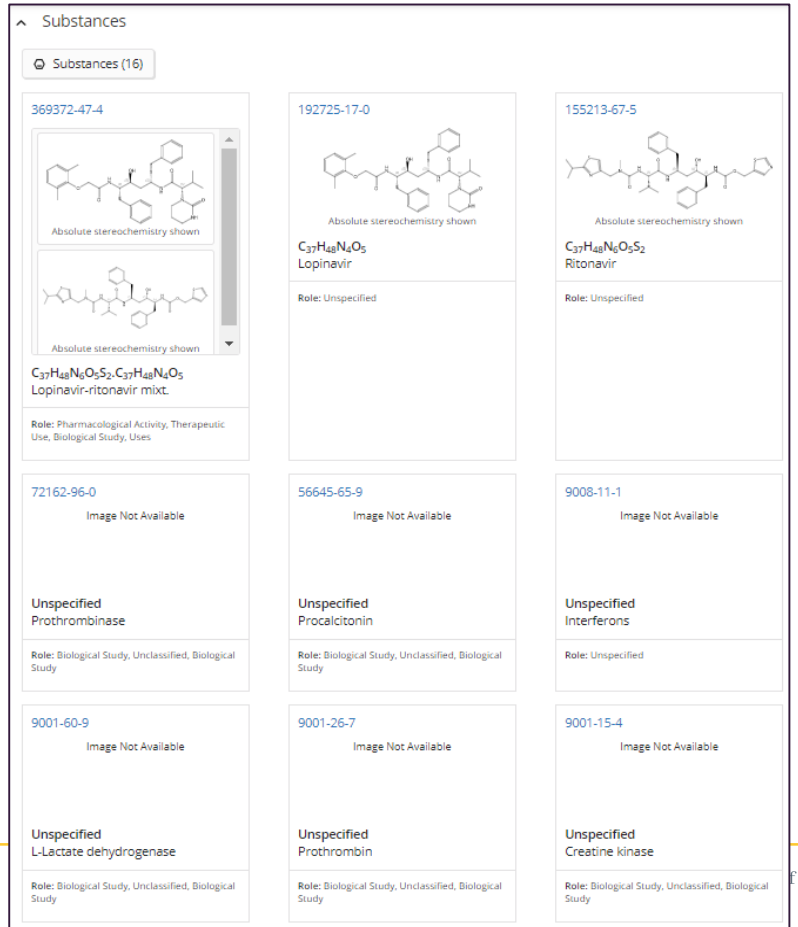
补充Concept列表：
收录最新的研究核心点

Concept词库列表：
比原文提供的关键词更全面、更详尽。轻松获得文献研究核心点

Medline词库列表：
从不同的专业角度将文献研究核心点标出，更全面了解文献

CAS®
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

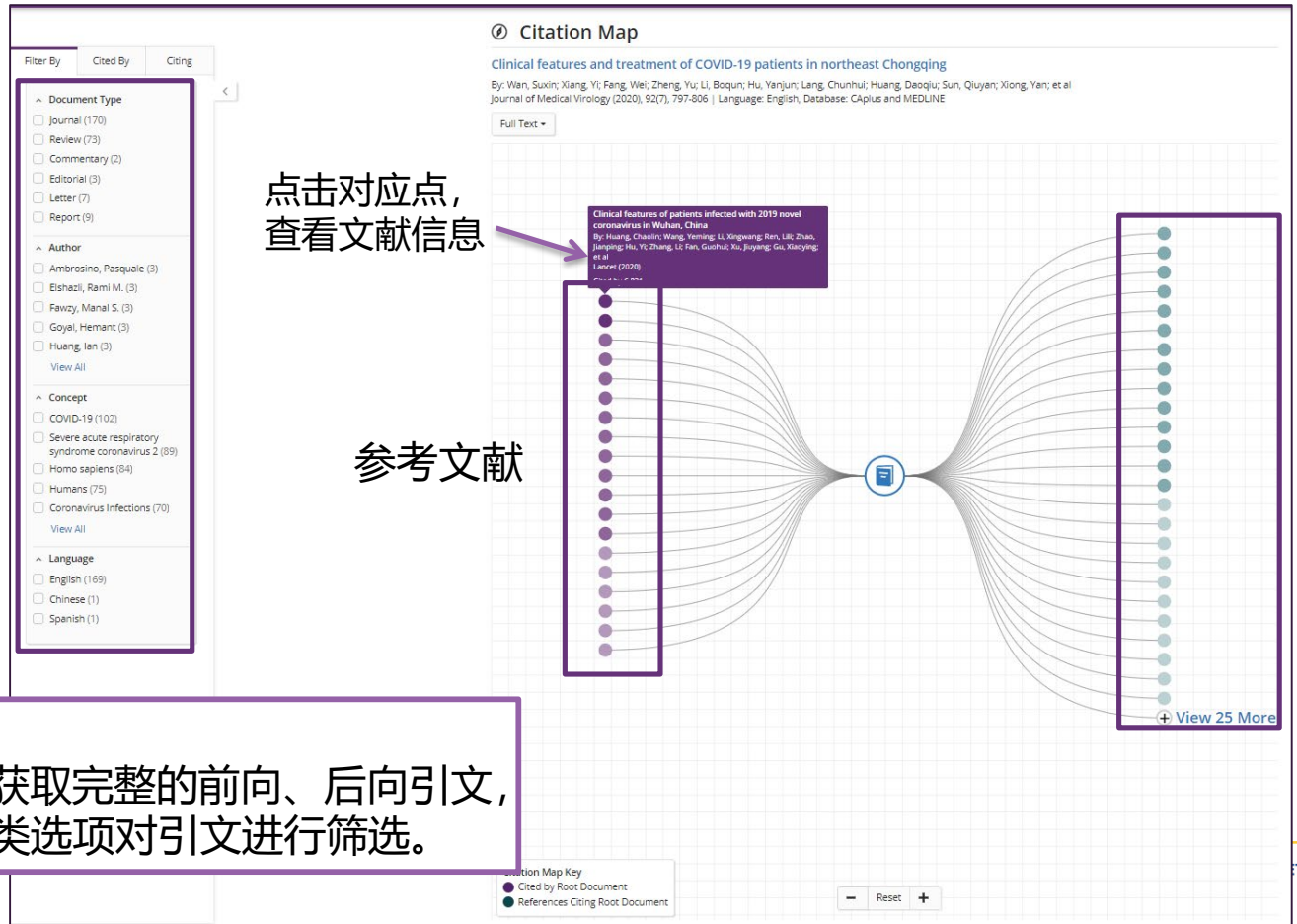
文献详情



物质列表：
对原文中重点研究的物质信息一目了然；
由Role了解文献对物质研究的学科方向

引文地图

对引文做筛选



点击对应点，查看文献信息

参考文献

被引文献

引文地图：
在一个页面获取完整的前向、后向引文，并有多个聚类选项对引文进行筛选。

专利文献

获得研究物质

Reference Detail

Substances (56) | Reactions (278) | Cited By (1) | Citation Map | Prev | Next | Save

Patent

Patent Information

Patent Number
WO9929704

Publication Date
1999-06-17

Application Number
WO1998-US26472

Application Date
1998-12-11

Kind Code
A1

Assignee
The Trustees of Columbia University in the City of New York, United States

Source
World Intellectual Property Organization

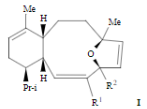
Database Information
AN: 1999:390407
CAN: 131:45046
CAplus

Language
English

Total synthesis of eleutherobin and its analogs as carcinoma inhibitors

By: Danishefsky, Samuel J.; Chen, Xiao-Tao; Gutteridge, Clare E.; Bhattacharya, Samit K.; Zhou, Bishan

This invention provides a process for the preparation of a eleutherobin I wherein R^1 is a hydrogen, ester, nitrile or CH_2-R^4 (I), wherein R^4 is a carbohydrate, an alc., an amine, an amide, an alkyne; or R^2 is a linear or branched alkyl moiety; R^3 is an ester, an amide, a carbamate, an acetal compound, an ether or a urethane; R^4 is a hydrogen or CH_2. Addnl., this experiment provides a method for inhibiting growth of cancerous cells comprising contracting an amount of Eleutherobin derivative effective to inhibit the growth of said cells. Further provided is a method for treating cancer in a subject which comprises administering to the subject a therapeutically effective amount of the eleutherobin derivative Thus, I (R^1 = H, R^2 = OMe, R^3 = N(1)-methyluronic acid ester) was prepared and tested for its antitumor activity for lung carcinoma (resistant, IC_{50} = 4000 nM) and for ovarian carcinoma (resistant, IC_{50} = 1350 NM).



I

Keywords: uronic acid synthesis carcinoma inhibitor; carcinoma inhibitor eleutherobin synthesis cytotoxicity; structure activity eleutherobin synthesis antitumor cytotoxicity

PatentPak Viewer | Full Text

Patent Family

Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
WO9929704	English	A1	PDF | PDF+ | Viewer	1999-06-17	WO1998-US26472	1998-12-11
		P			US1997-69248P	1997-12-11
AU9919122	Undetermined	A		1999-06-28	AU1999-19122	1998-12-11
US6172205	Undetermined	B1		2001-01-09	US1998-210290	1998-12-11

Expand All | Collapse All

Concepts

Substances

Citations

专利族信息

下载专利原文

SciFinder® Reference Detail | SciFinder® PatentPak | SciFinder® Reference Citation Ma

scifinder-n.cas.org/patent-viewer?docuri=0kWTtEw4wGQpcRf8Jqdsw8KFBKX9ZUD2-gVLI-lh...

PATENTPAK | PAGE 56 /84 | ZOOM | DOWNLOAD PDF | PDF+

Key Substances in Patent

CAS RN 33069-62-4
Analyst Markup Locations (3)
Page 53
Page 56
Page 72

CAS RN 174545-76-7
Analyst Markup Locations (1)
Page 56

CAS RN 32460-00-7
Analyst Markup Locations (2)
Page 63
Page 72

CAS RN 4221-98-1
Analyst Markup Locations (1)
Page 63

CAS RN 27490-33-1

WO 99/29704 PCT/US98/26472

-54-

Heterocycl. Chem. 1983, 13:129.

46. Nicolaou, K. C., J.-Y. Xu, S. Kim, T. Ohshima, S. Hosokawa, and J. Pfefferkorn. Synthesis of the Tricyclic Core of Eleutherobin and Sarcodictyins and Total Synthesis of Sarcodictyin A. J. Am. Che. Soc. 1997, 119, 11353-11354.

47. Nicolaou, K. C., et al., Total Synthesis of Eleutherobin. Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 1997, 36:22.

48. Nicolaou, K. C. Et al., Synthesis and Biological Activity of Sarcodictyins. Agnew. Chem. Int. Ed. 1998 37:10.

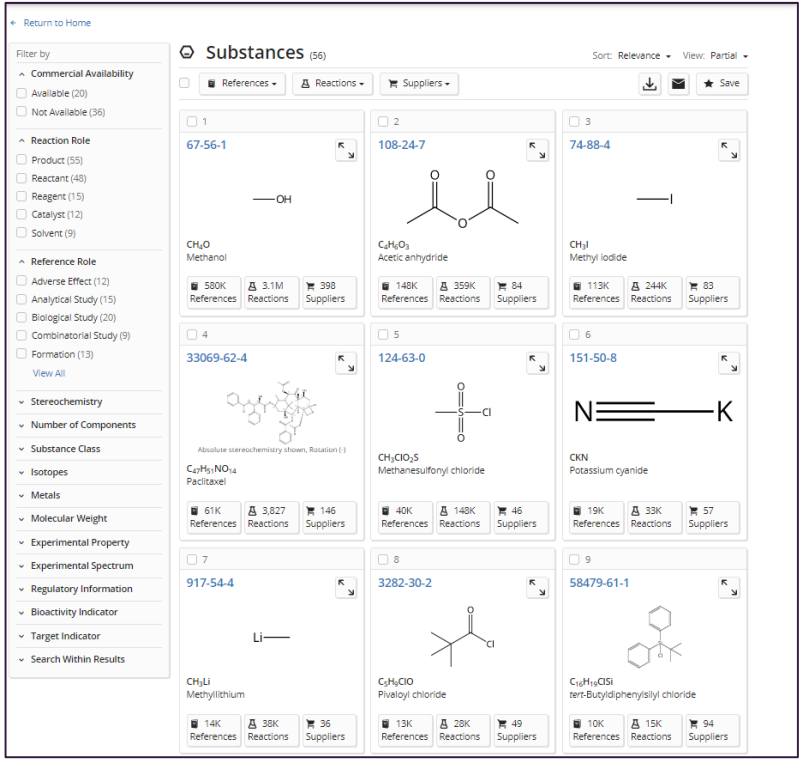
49. Long, Byron H., et al. Eleutherobin, A Novel Cytotoxic Agent That Induces Tubulin Polymerization Is Similar to Paclitaxel (Taxol). Cancer Reas. 1997, 53.

50. Nicolaou, K. C., Solid and Solution Phase Synthesis and Biological Evaluation of Combinatorial Sarcodictyin Libraries. J. Am. Chem. Soc. 1998, 120,

PatenPak:
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

由文献获得物质信息

对物质的聚类筛选



文献检索小结

1. 使用布尔运算符and, or, not连接关键词；
2. 利用通配符、检索修饰符提高检索的效率；
3. 通过聚类筛选工具快速获得目标文献
4. 从引文地图拓展检索，获得更多灵感

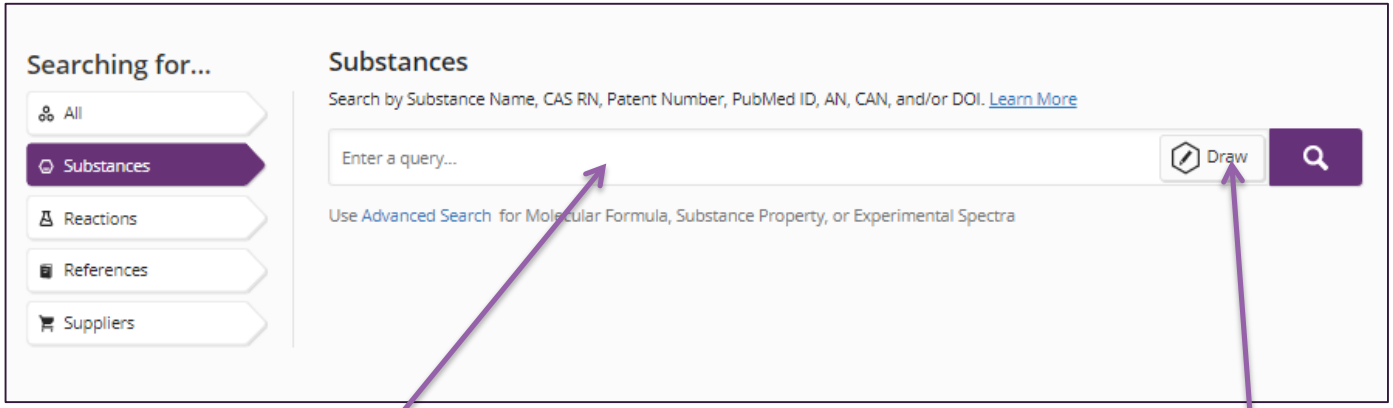
提纲

- 美国化学文摘社简介
- SciFinder-n简介及检索方式
  - 文献检索
  - 物质检索
  - Markush检索
  - 反应检索
- 常见问题及解决

物质检索

- 物质检索方法
  - —结构式检索
  - —分子式检索
  - —理化性质检索
  - —物质标识符检索：化学名称，CAS RN
  - —文献标识符检索
  - —谱图数据检索
- 物质检索策略推荐
  - —有机化合物，天然产物：结构检索
  - —无机物，合金：分子式检索
  - —高分子化合物：分子式检索和结构检索

物质检索

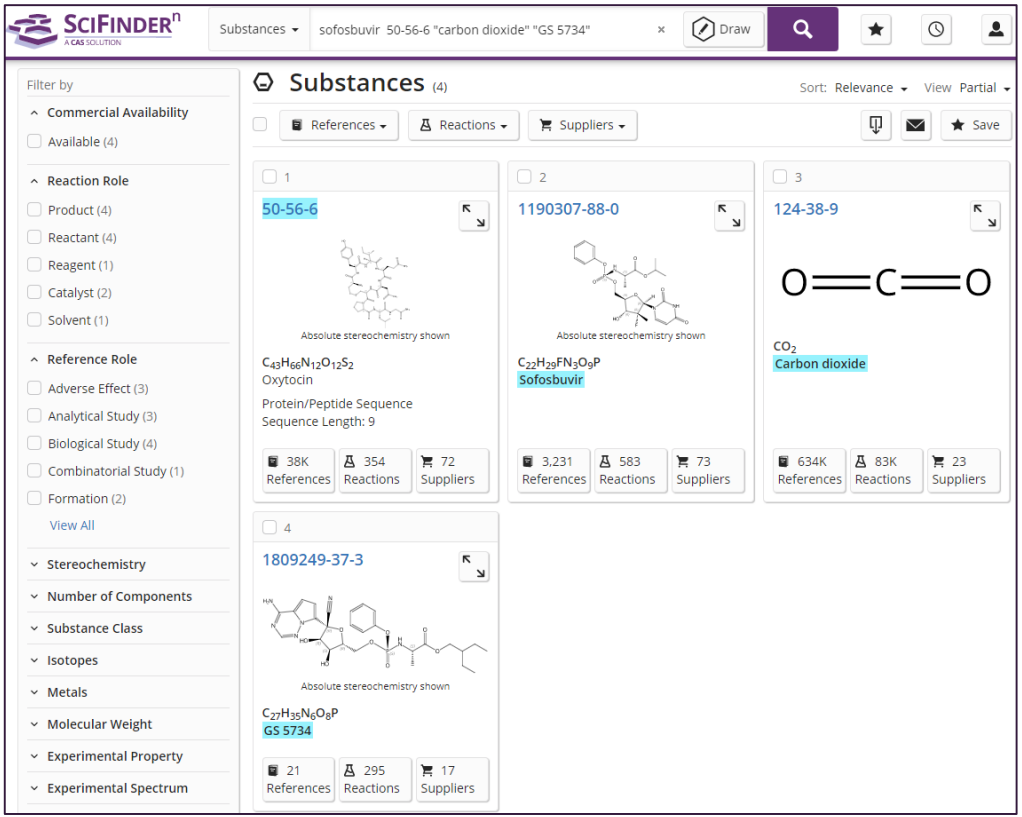


通过物质名称、CAS RN，文献标识符检索物质

打开结构绘制面板进行结构检索

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索—物质名称、CAS RN、代码

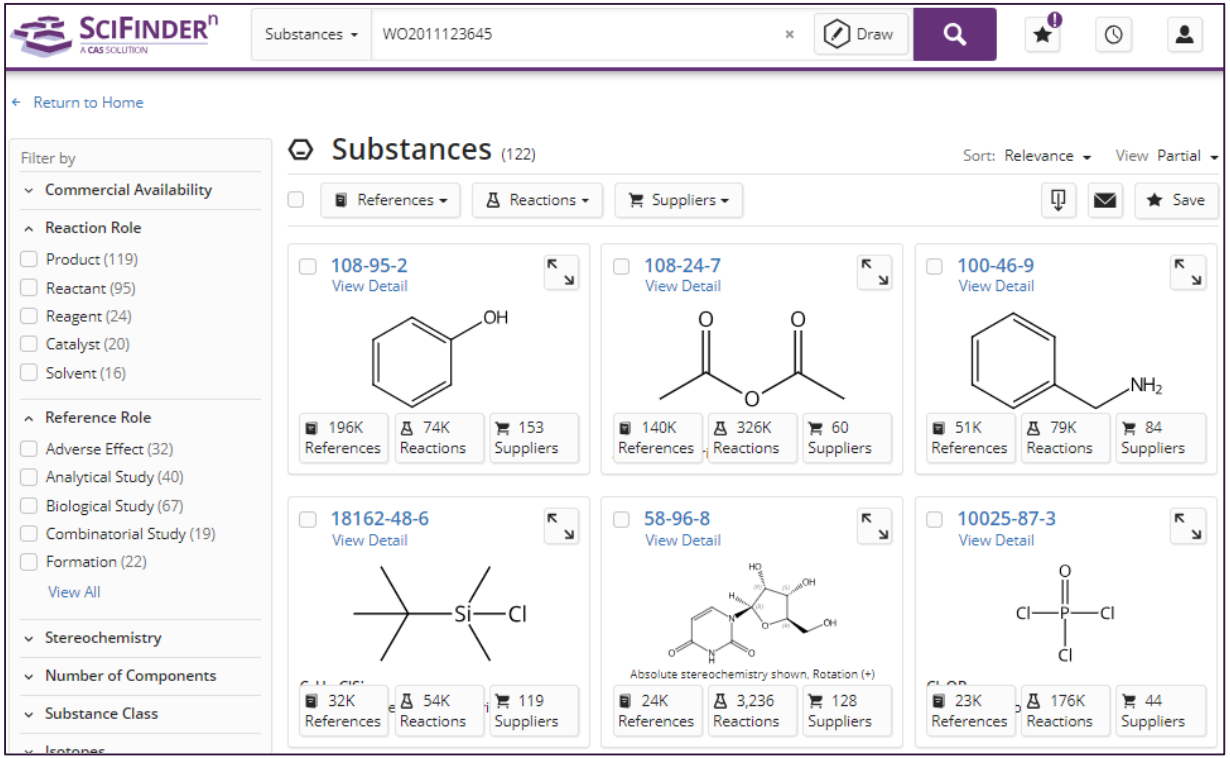


sofosbuvir
50-56-6
"carbon dioxide"
"GS 5734"

多个物质同时检索，
中间用空格隔开

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索—文献标识符

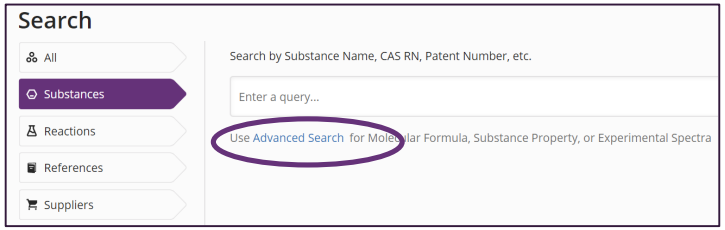


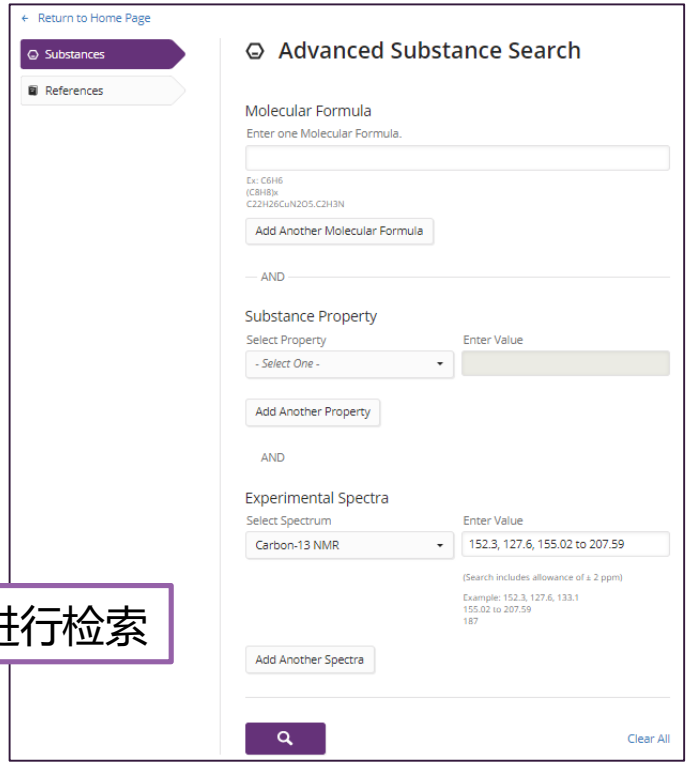
专利号
WO2011123645

帮助用户迅速获得关注文献中的所有物质

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索



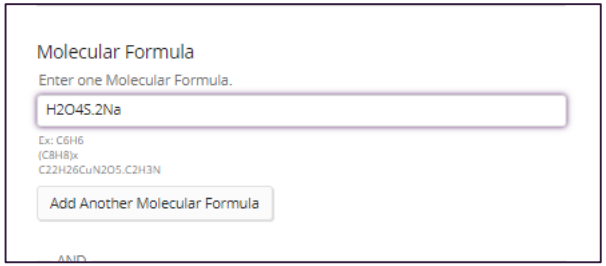


通过分子式、物性参数、谱图数据进行检索

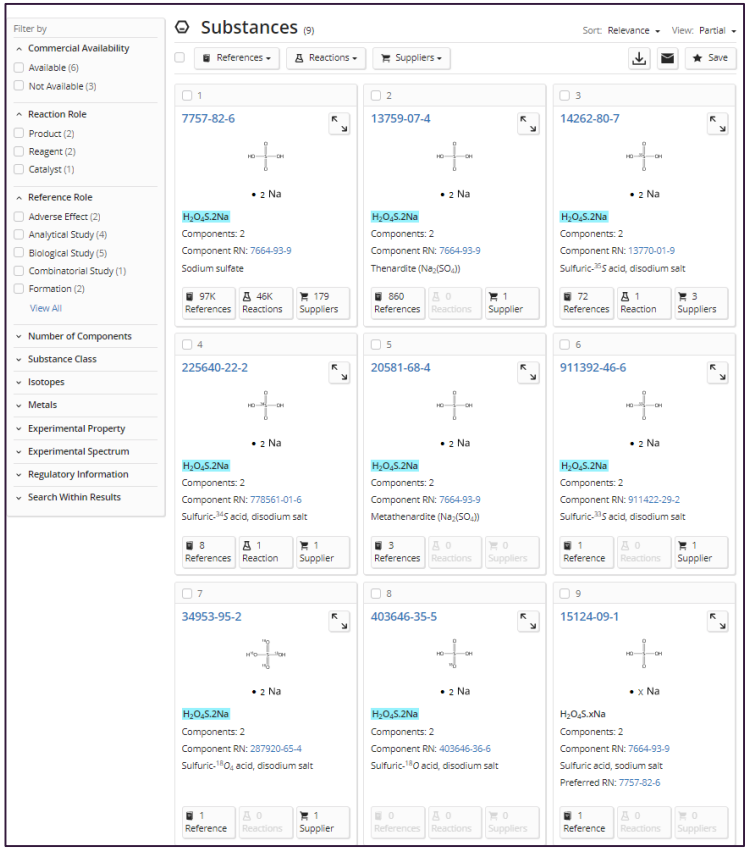
CAS®
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索—分子式

Na2SO4：H2O4S.2Na



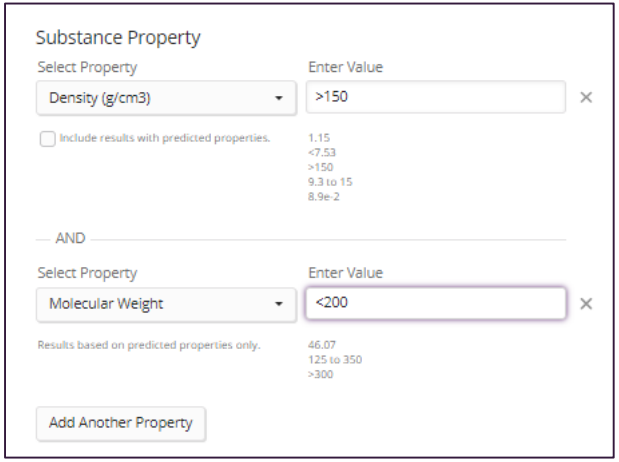
1. 金属盐：金属离子和阴离子间用点（.）分开
2. 不同组份之间用点（.）分开



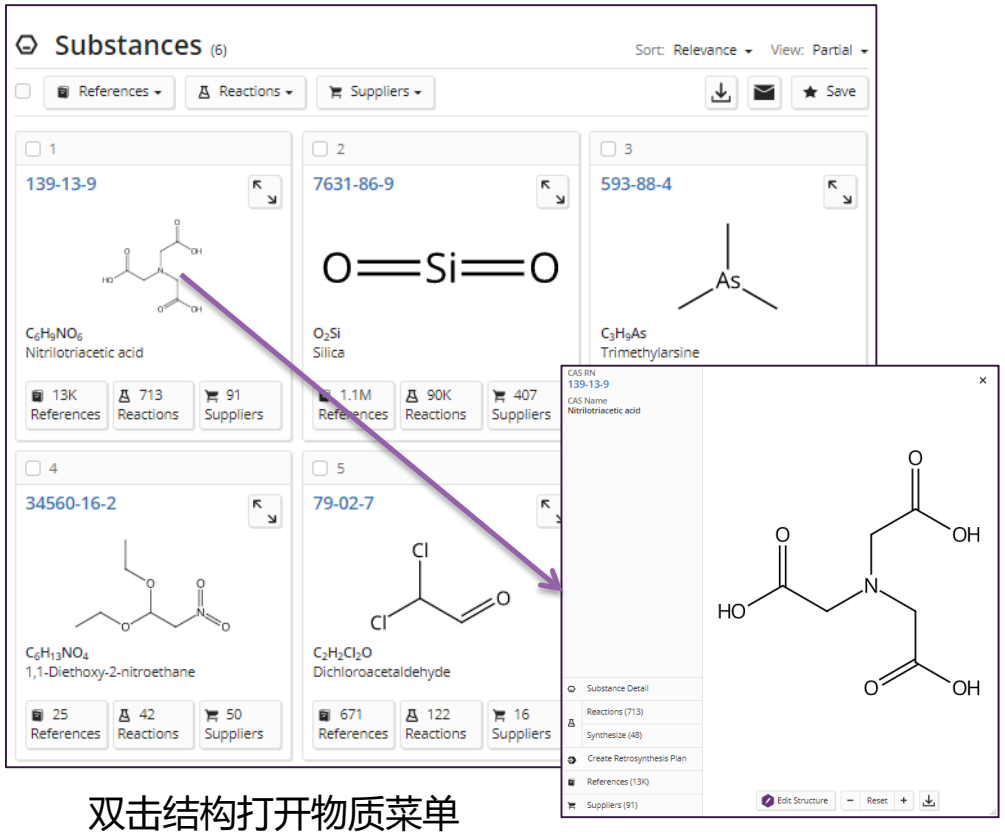
CAS® A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索—物性参数

密度>150g/cm^3
分子量<200



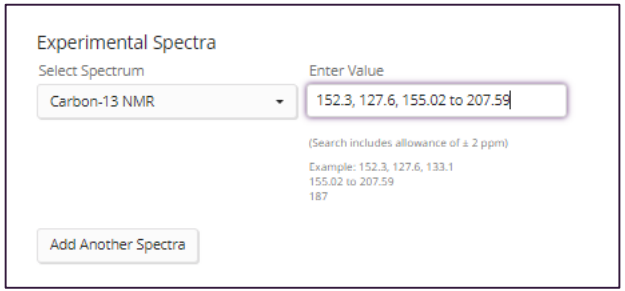
可多参数检索，提高检索效率

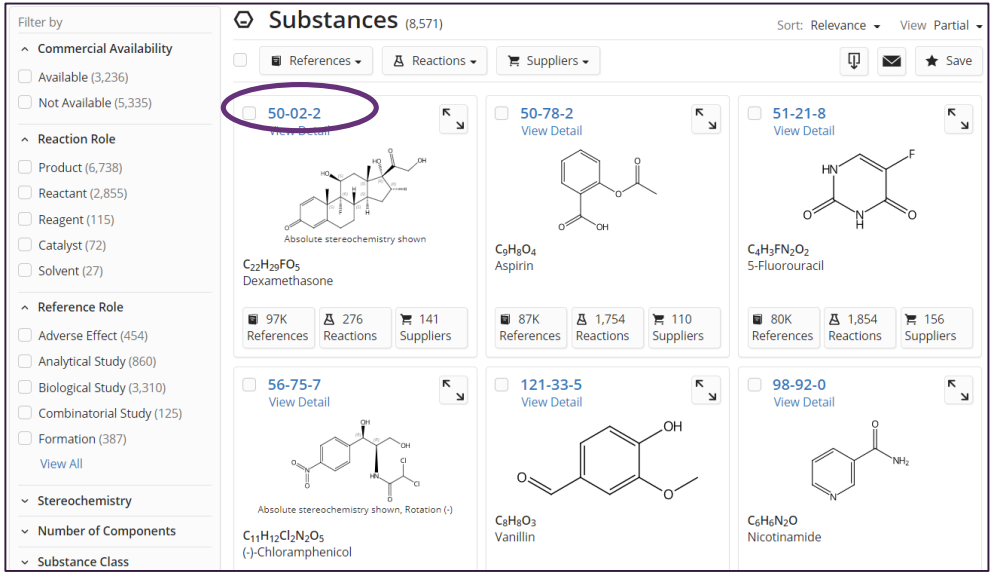


双击结构打开物质菜单

物质检索—谱图数据检索

碳谱特征峰保留时间：
152.3, 127.6, 155.02 to 207.59





通过谱图数据进行检索

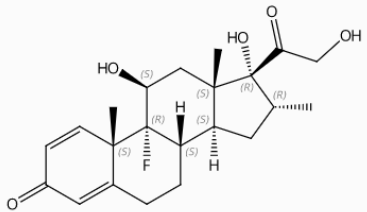
CAS® A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质详情

Substance Detail (1 of 1)

References (82K) | Reactions (412) | Suppliers (144)

CAS Registry Number
50-02-2



Absolute stereochemistry shown

$C_{22}H_{29}FO_5$

Pregna-1,4-diene-3,20-dione, 9-fluoro-11,17,21-trihydroxy-16-methyl-, (11β,16α)-

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	392.46	-
Melting Point (Experimental)	262-264 °C	-
Boiling Point (Predicted)	568.2±50.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.32±0.1 g/cm^3	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
pKa (Predicted)	12.13±0.70	Most Acidic Temp: 25 °C

Experimental Properties | Spectra

- Other Names and Identifiers
- Experimental Properties
- Experimental Spectra
- Predicted Properties
- Predicted Spectra
- Bioactivity Indicators
- Target Indicators
- Regulatory Information
- Additional Details

折叠菜单显示物质各类信息

CAS® A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质详情

Experimental Spectra

^{1}H NMR	^{13}C NMR	Hetero NMR	IR	Mass	Raman	UV and Visible

	Source
View Proton NMR Spectrum	(1) ENAMINE
View Proton NMR Spectrum	(1) ENAMINE
View Proton NMR Spectrum	(2) AIST
View Proton NMR Spectrum	(2) AIST
View Proton NMR Spectrum	(3) ACD-A
View Proton NMR Spectrum	(4) ACD
Proton NMR Spectrum - 3 Sources	(5,7) CAS

Sources

(1) Spectral data were obtained from Enamine Ltd.

(2) "Integrated Spectral Data Base System of Organic Compounds" data were obtained from the National Institute of Advanced Industrial Science and Tech

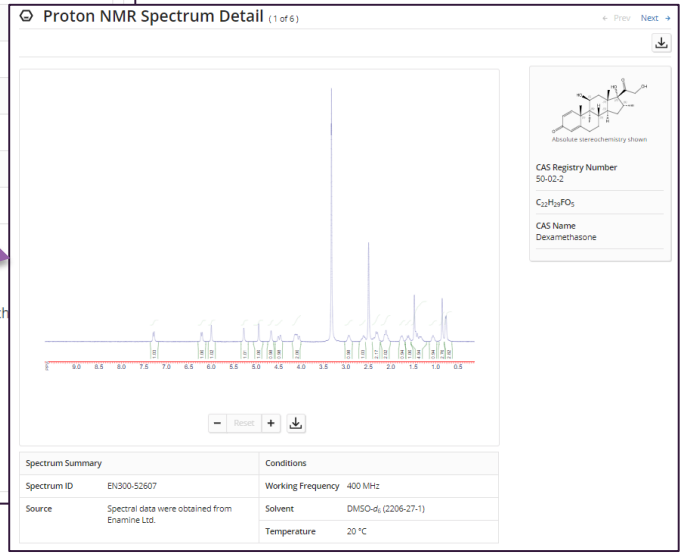
(3) Sigma-Aldrich (Spectral data were obtained from Advanced Chemistry Development, Inc.)

(4) Edmonds, John S.; Steroids, (2006), 71(1), 34-41, CAplus

(5) Zhai, Ying Lei; Chinese Science Bulletin, (2009), 54(17), 2918-2924, CAplus

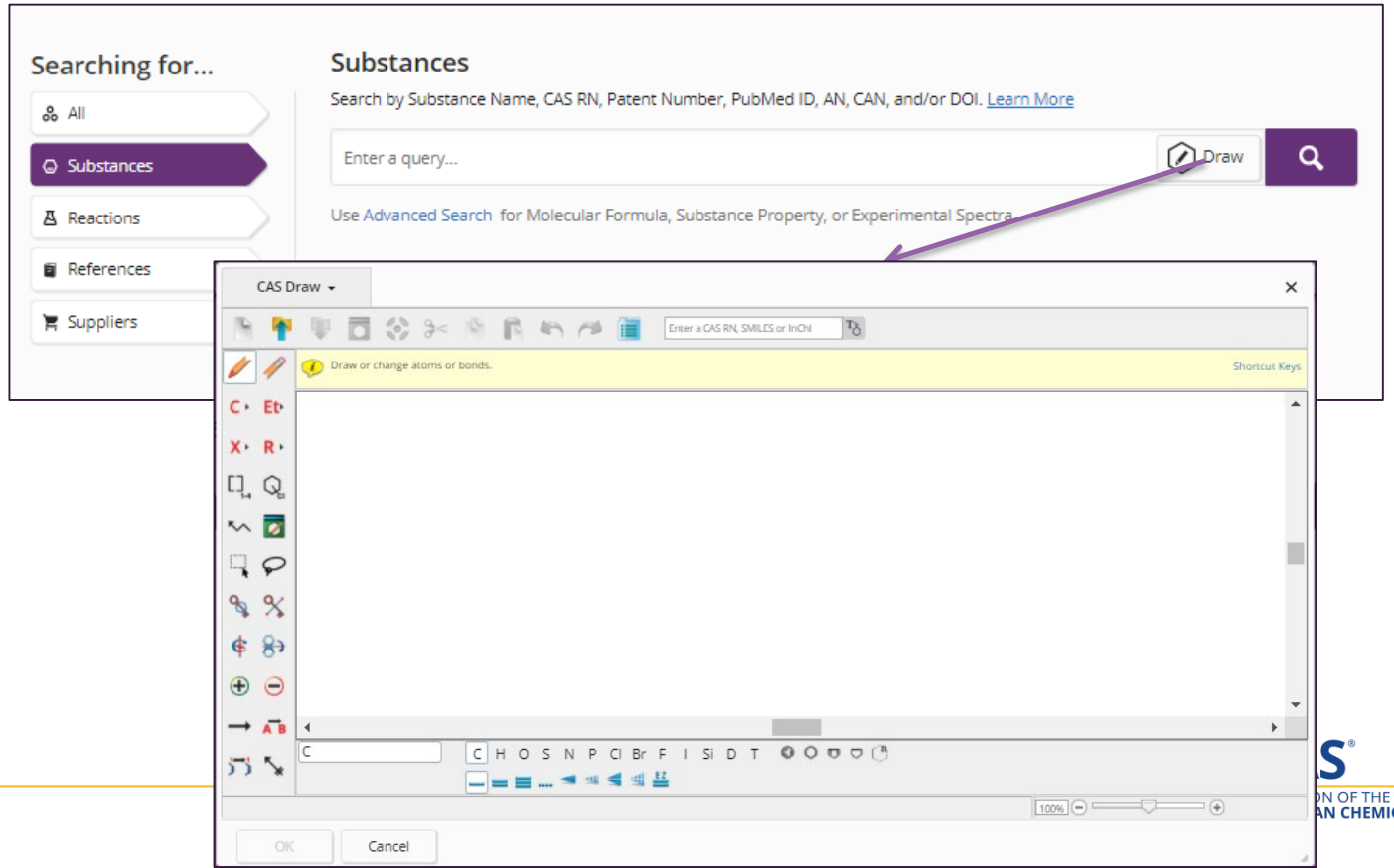
(6) Zhang, Zheng; Journal of Controlled Release, (2006), 111(3), 263-270, CAplus

(7) Zacchigna, M.; Journal of Drug Delivery Science and Technology, (2008), 18(3), 155-159, CAplus

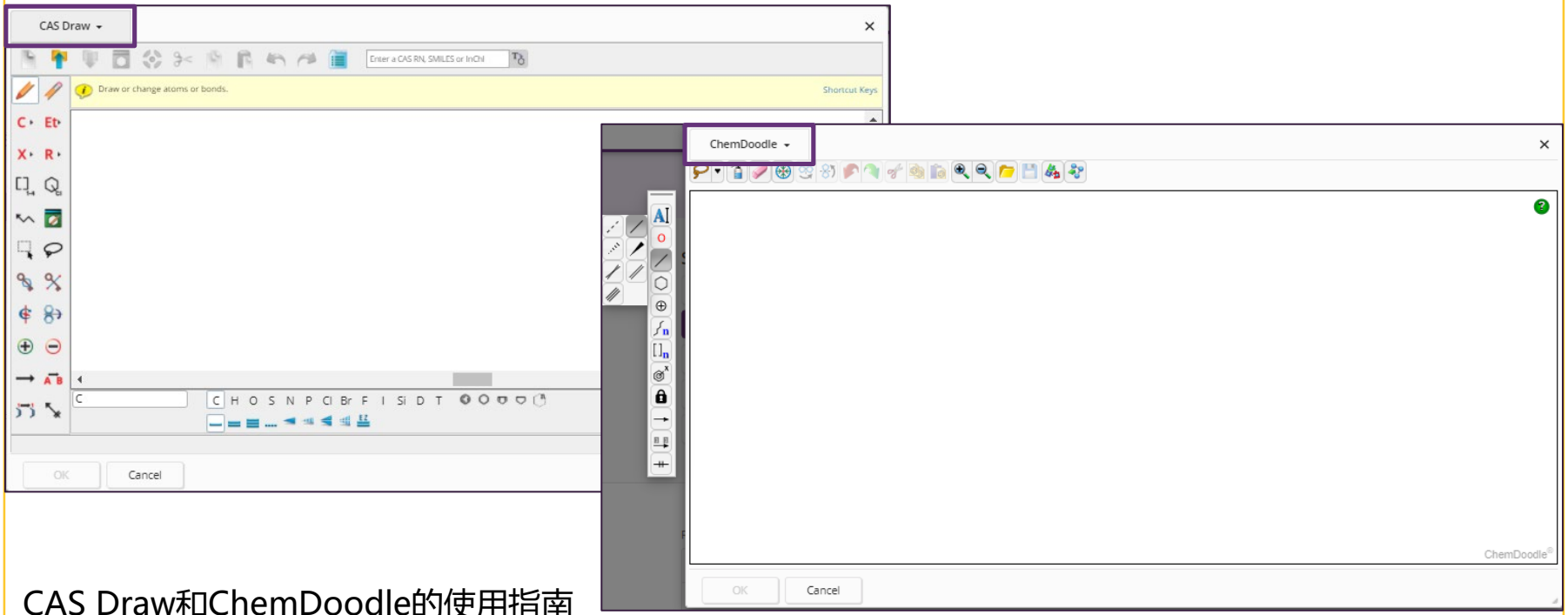


CAS® A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索—结构检索


Searching for...
All
Substances
Reactions
References
Suppliers
Substances
Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. Learn More
Enter a query...
Draw
Use Advanced Search for Molecular Formula, Substance Property, or Experimental Spectra
CAS Draw
Enter a CAS RN, SMILES or InChI
Draw or change atoms or bonds.
Shortcut Keys
C H O S N P Cl Br F I Si D T
100%
OK
Cancel

物质检索—结构检索



CAS Draw和ChemDoodle的使用指南

https://scifinder-n.cas.org/help/#t=Drawing_Search_Queries%2FDrawing_Structure_Queries.htm

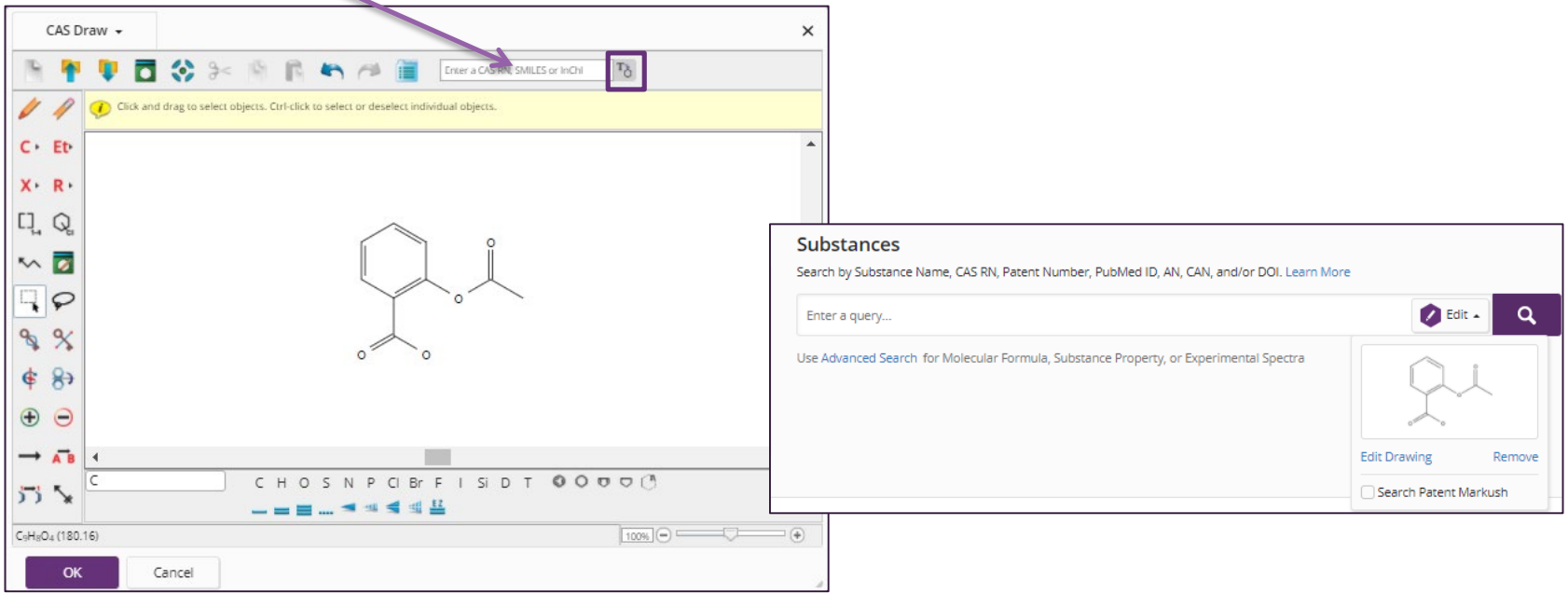
https://www.cas.org/support/training/scifinder-n/structure-search

https://www.cas.org/support/training/scifinder-n/chemdoodle-structure-search

CAS® A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索—结构检索

CAS RN：50-78-2



CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

物质检索—结构检索

结构检索类别：

精确结构检索

亚结构检索

相似结构检索

物质筛选类别：

反应角色

立体化学

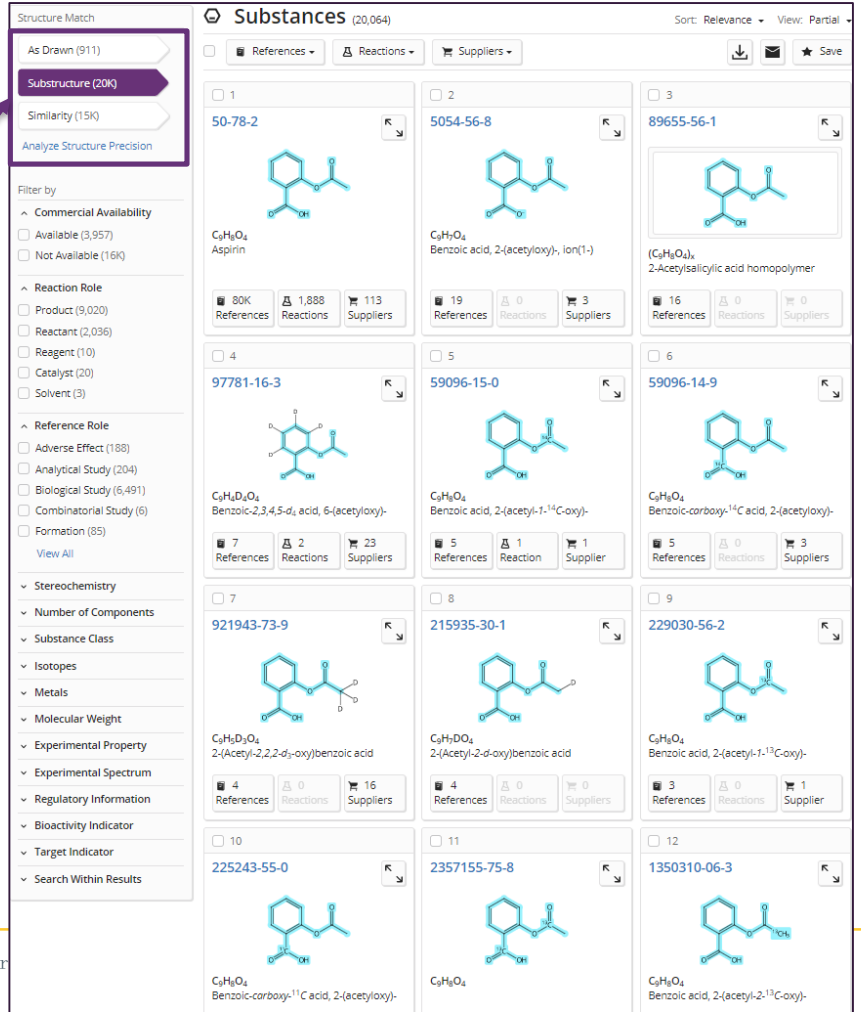
同位素

金属包含

实验物性数据

结构

……



物质检索—结构检索

结构检索类别：

- 精确结构检索

  获得被检索结构的盐、混合物、配合物、聚合物等，被检结构不能被取代

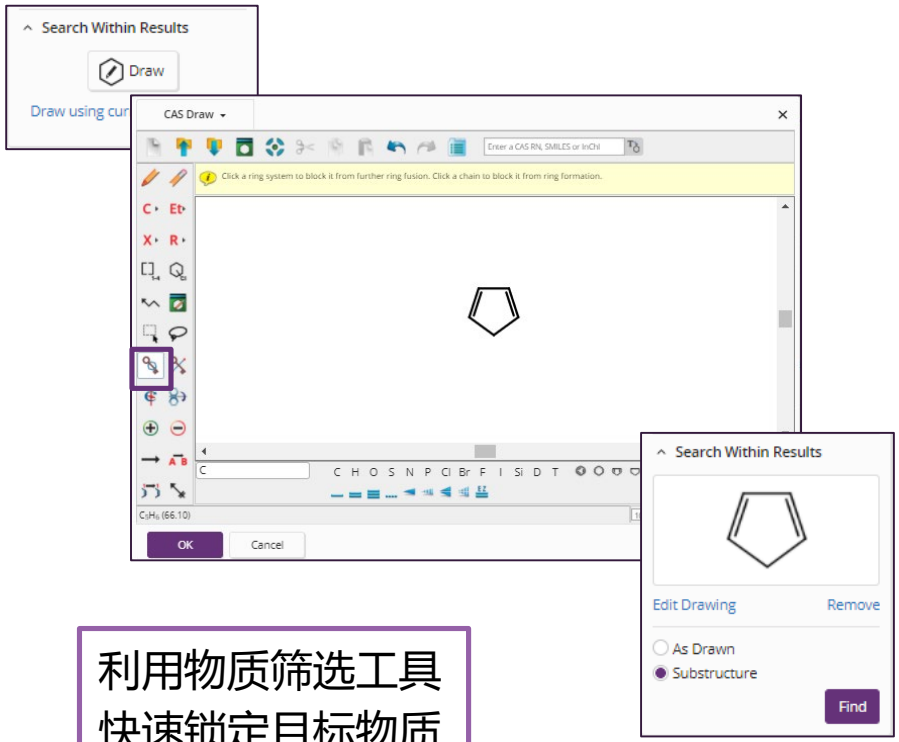
- 亚结构检索

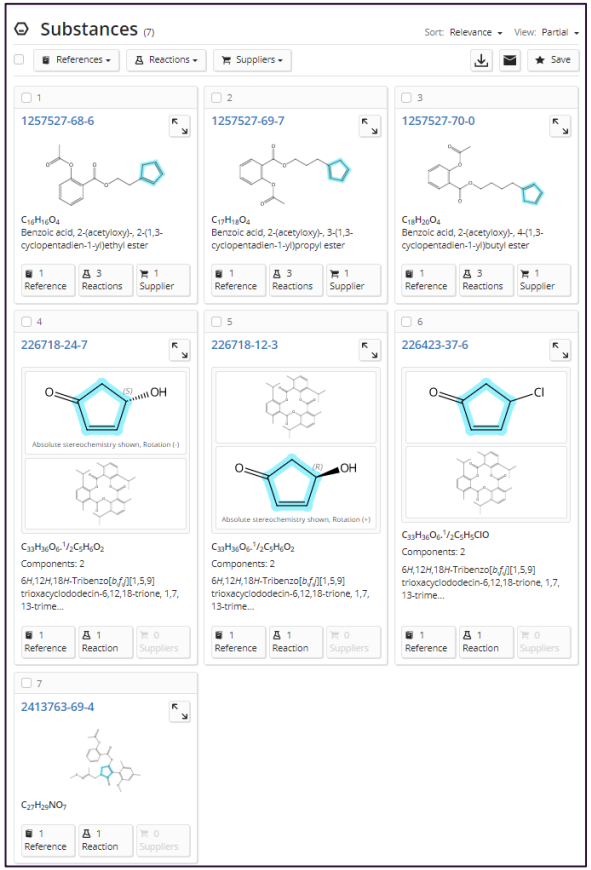
  包括精确结构检索结果，及被检索结构的修饰结构

- 相似结构检索

  获得片段或整体结构与被检索结构相似的结果，母体结构可以被取代，也可以被改变

物质检索—物质筛选：结构





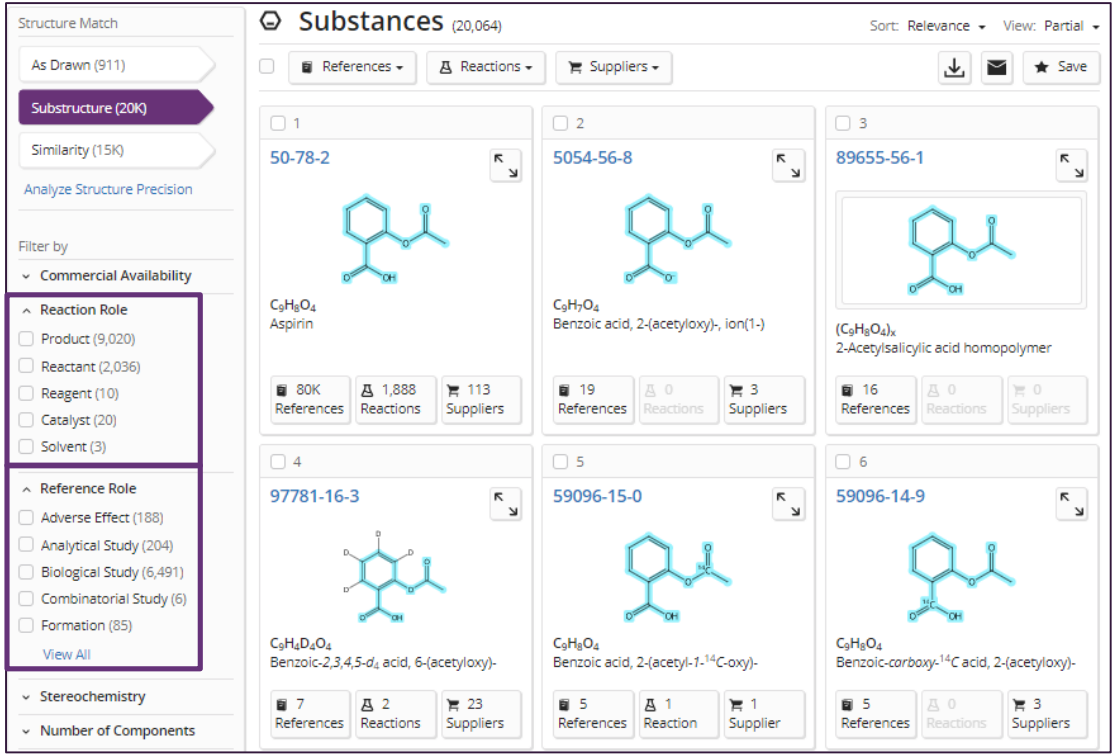
利用物质筛选工具
快速锁定目标物质

物质检索—物质筛选：Substance Role

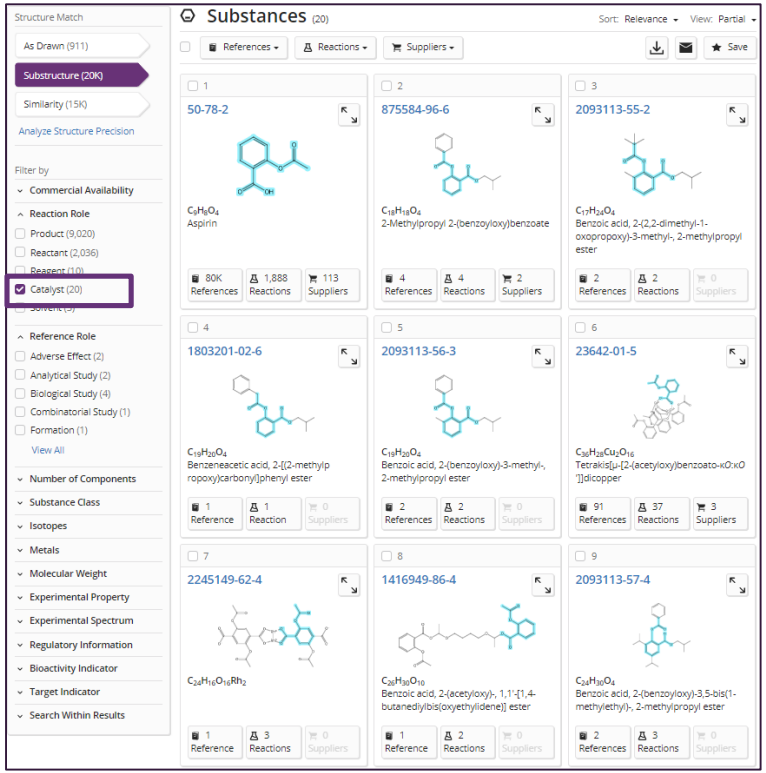
物质的反应角色

物质的文献角色

利用物质角色精准获得相应的物质



物质检索—物质筛选：Substance Role



利用物质反应角色获得做过催化剂研究的物质

物质检索—物质排序

利用物质排序快速查找目标物质：

相关度

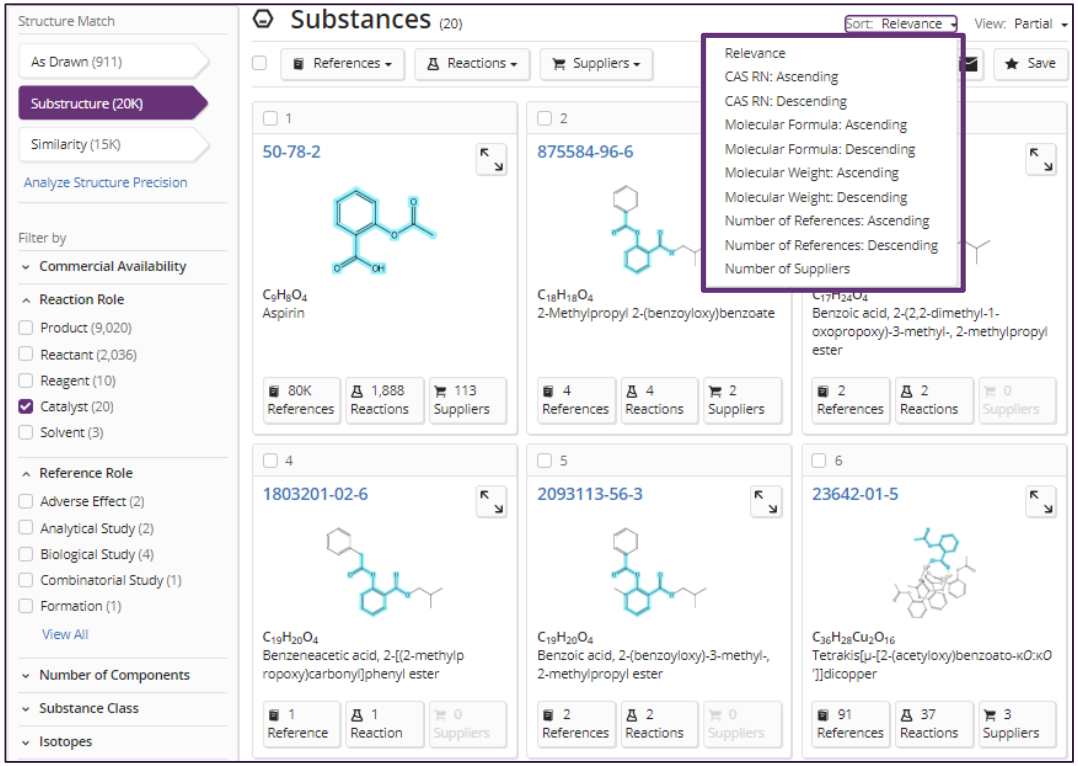
CAS RN

分子式

分子量

文献量

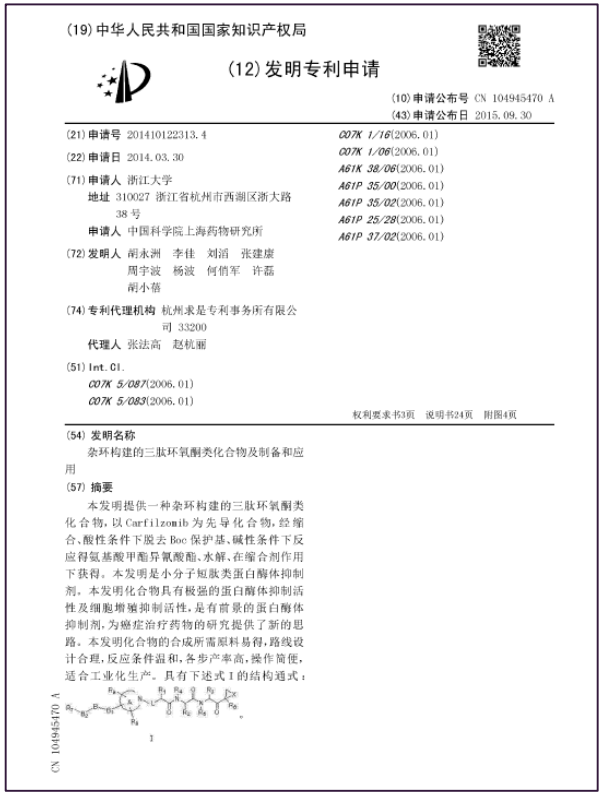
供应商数量



提纲

- 美国化学文摘社简介
- SciFinder-n简介及检索方式
  - 文献检索
  - 物质检索
  - Markush检索
  - 反应检索
- 常见问题及解决

Markush检索



(19)中华人民共和国国家知识产权局

(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 104945470 A
(43)申请公布日 2015.09.30

(21)申请号 201410122313.4
(22)申请日 2014.03.30
(71)申请人 浙江大学
地址 310027 浙江省杭州市西湖区浙大路38号
申请人 中国科学院上海药物研究所
(72)发明人 胡永洲 李佳 刘涓 张建康 周宇波 杨波 何倩军 许磊 胡小蓓
(74)专利代理机构 杭州求是专利事务所有限公司 33200
代理人 张法高 赵杭丽
(51)Int.Cl.
C07K 5/087(2006.01)
C07K 5/083(2006.01)
C07K 1/16(2006.01)
C07K 1/06(2006.01)
A61K 38/06(2006.01)
A61P 35/00(2006.01)
A61P 35/02(2006.01)
A61P 25/28(2006.01)
A61P 37/02(2006.01)

权利要求书3页 说明书24页 附图4页

(54)发明名称

杂环构建的三肽环氧酮类化合物及制备和应用

(57)摘要

本发明提供一种杂环构建的三肽环氧酮类化合物，以Carfilzomib为先导化合物，经缩合、酸性条件下脱去Boc保护基、碱性条件下反应得氨基酸甲酯异氰酸酯、水解、在缩合剂作用下获得。本发明是小分子短肽类蛋白酶体抑制剂。本发明化合物具有极强的蛋白酶体抑制活性及细胞增殖抑制活性，是有前景的蛋白酶体抑制剂，为癌症治疗药物的研究提供了新的思路。本发明化合物的合成所需原料易得，路线设计合理，反应条件温和，各步产率高，操作简便，适合工业化生产。具有下述式I的结构通式：

I

CN 104945470 A

具体实施方式

[0026] 本发明结合附图和实施例作进一步的说明，以下实施例仅是说明本发明，而不是以任何方式限制本发明。

[0027] 制备实施例1、4-(吡嗪-2-基氨甲酰基)哌啶-1-甲酸叔丁酯(1a,1b)

将1-(叔丁氧羰基)哌啶-4-甲酸(2.75g,12mmol)置于50mL三颈瓶中，N_2保护下加入25mL无水CH_2Cl_2，然后缓缓滴入吡啶(2.5mL,30mmol)和二氯亚砜(1.1mL,14mmol)，该反应液置于室温反应半小时。随后，2-氨基吡嗪(0.95g,10mmol)和三乙胺(5.7mL,40mmol)溶于15mL CH_2Cl_2后缓缓滴入上述反应液，室温反应6小时。反应液加30mL饱和食盐水稀释，分出有机层，水层CH_2Cl_2提取(15mL×3)，合并有机层，无水硫酸钠干燥后减压除去溶剂，柱层析分离得白色固体2.3g，收率74%。m.p.：134-136℃；^1H NMR (500MHz, $CDCl_3$): δ= 9.55 (s, 1H, pyrazine-H), 8.35 (d, 1H, J=2.0Hz, pyrazine-H), 8.23 (s, 1H, pyrazine-H), 7.97 (s, 1H, NH), 4.20 (m, 2H, CH_2), 2.81 (m, 2H, CH_2), 2.48 (m, 1H, CH), 1.93 (d, 2H, J=12.5Hz, CH_2), 1.76 (m, 2H, CH_2), 1.47 (s, 9H, CH_3) ppm; ESI-MS: m/z = 307$[M+H]^+$。

[0028] 制备实施例2、4-(吡嗪-2-酰基)哌嗪-1-甲酸叔丁酯(1c,1d)

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

具体物质[Specific Substance]：

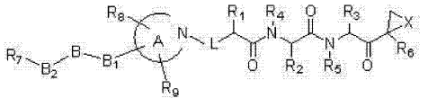
以具体化学结构陈述的特定物质，会被分配CAS RN

CAS® A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

Markush检索

CN 104945470 A　　权 利 要 求 书　　1/3 页

1. 一种杂环构建的三肽环氧酮类化合物，具有下述结构通式 I：



I

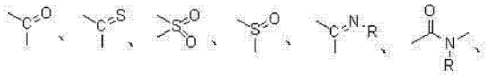
其中：

R_1，R_2，R_3 各自独立选自 H、C_{1-6} 烷基 -D、卤代的 C_{1-6} 烷基 -D、C_{1-6} 羟基烷基、C_{1-6} 巯基烷基、C_{1-6} 烷氧基烷基、芳基、芳烷基、杂芳基或杂芳烷基；其中 ;D 为 $N(R_a)(R_b)$ 或缺失，R_a，R_b 各自独立选自 H、OH、C_{1-6} 烷基、卤代的 C_{1-6} 烷基或 N 末端保护基；

R_4，R_5 各自独立选自 H、OH、C_{1-6} 烷基、卤代的 C_{1-6} 烷基或芳烷基；

R_6 选自 H，C_{1-6} 烷基，卤代的 C_{1-6} 烷基，C_{1-6} 羟基烷基，C_{1-6} 烷氧基，卤代的 C_{1-6} 烷氧基，$C(O)O-C_{1-6}$ 烷基，$C(O)NH-C_{1-6}$ 烷基，芳烷基；

X 为 O、S、NH、$N-C_{1-6}$ 烷基或 N- 卤代的 C_{1-6} 烷基；

L 为  或者缺失，

其中 R 选自 H、C_{1-6} 烷基或卤代的 C_{1-6} 烷基；

环 A 选自 5 ～ 7 元的饱和脂肪杂环、不饱和杂环、或者有取代的 5 ～ 7 元的饱和脂肪杂环、不饱和杂环，所述的杂环包含 0 ～ 3 个选自 O 、N 和 S 的杂原子并任选地被 R_8、R_9 和 B_1 基团取代；

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

预测性物质[Prophetic Substance]：

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

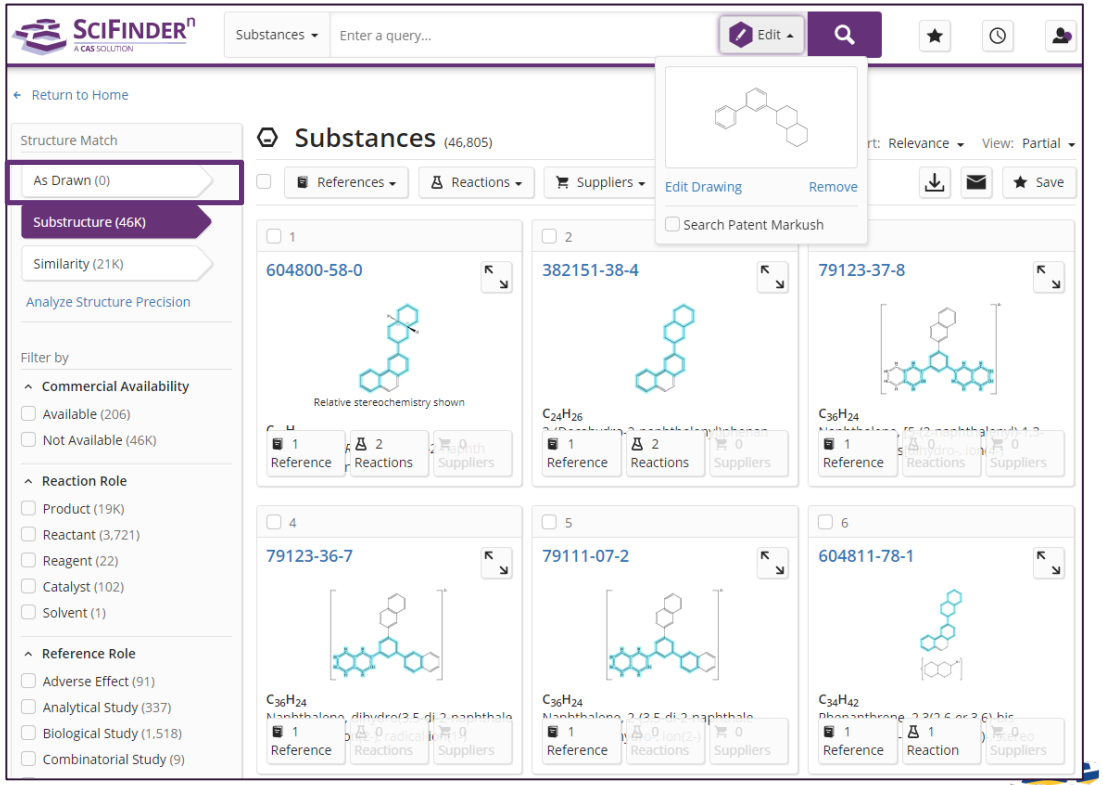
— 被Markush结构包含，但未被实施或呈现在表格、权利要求书或说明书中的结构，不会被CAS分配CAS Registry Number

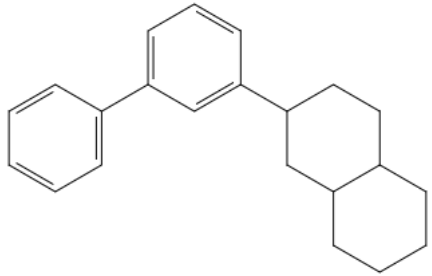
— Markush检索，能检索到通过结构检索检不到的专利

CAS A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

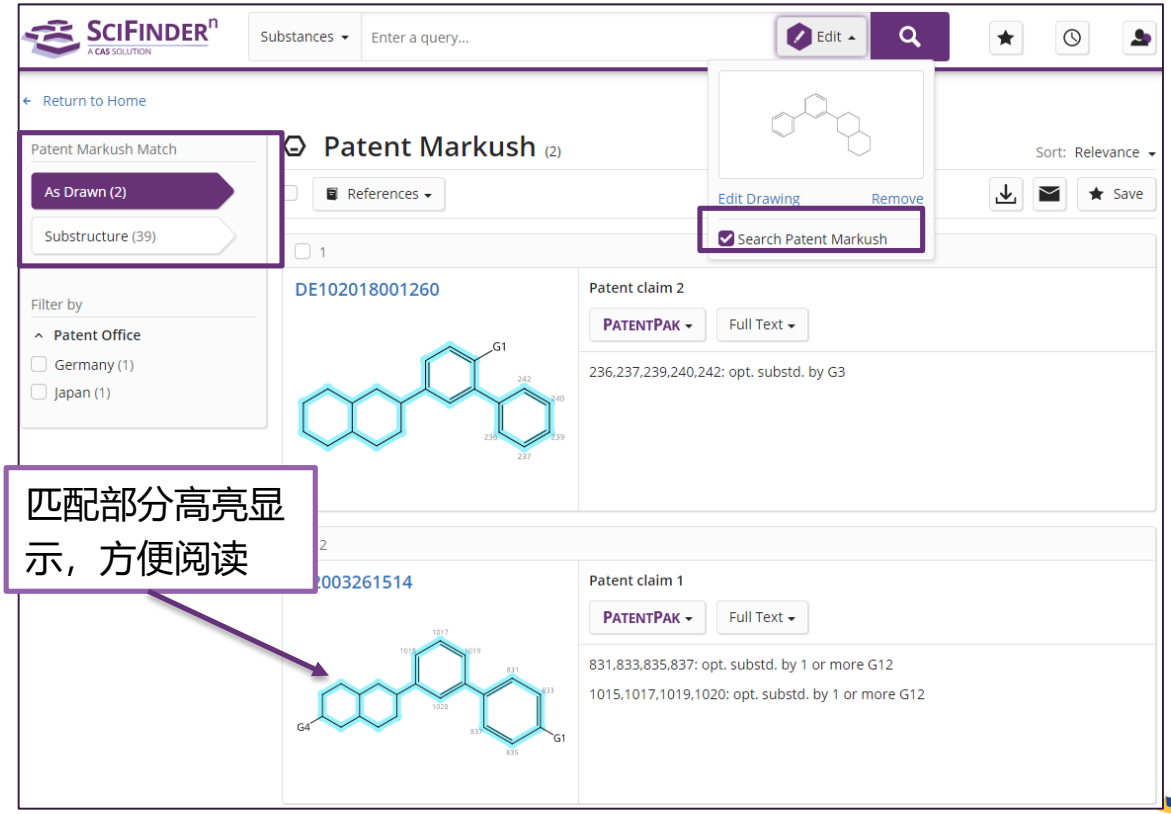
物质检索—检索的物质来自CAS Registry

该物质不存在

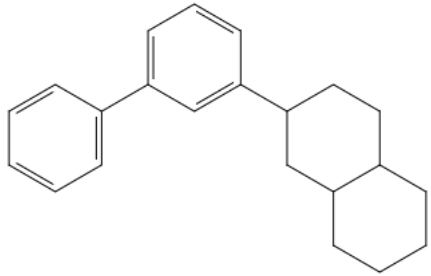




Markush检索—检索结果来自Marpat



匹配部分高亮显示，方便阅读



Markush检索：

帮助判定化合物的专利性，避免化合物专利风险

提纲

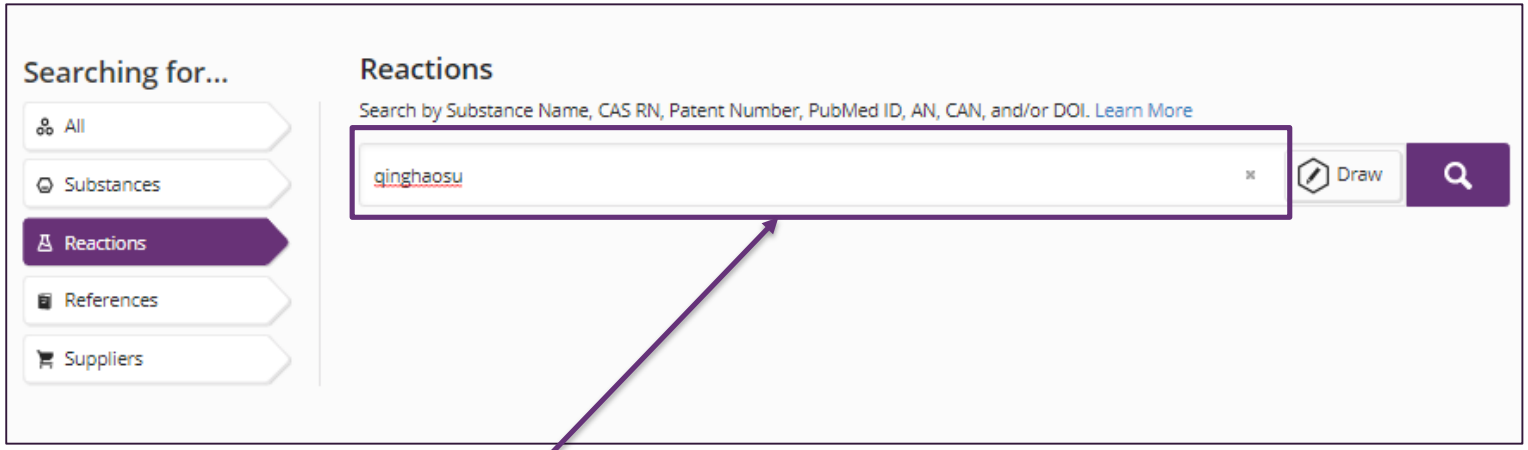
- 美国化学文摘社简介
- SciFinder-n简介及检索方式
  - 文献检索
  - 物质检索
  - Markush检索
  - 反应检索
- 常见问题及解决

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

反应检索

- 反应检索方法
  - 结构式
  - 关键词
  - 物质名称、登记号
  - 文献标识符：专利号、收录号、DOI号……
- 常用获取方法
  - 已知物质：由物质获取反应
  - 已知文献：从文献中获取反应
  - 精确结构反应检索
  - 亚结构反应检索

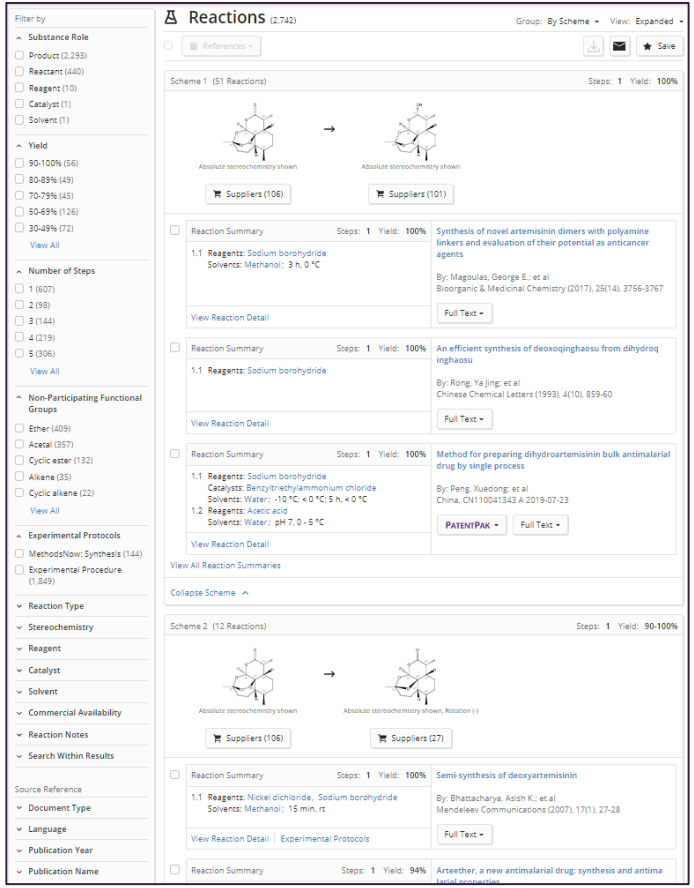
反应检索



通过物质标识符、文献标识符进行检索

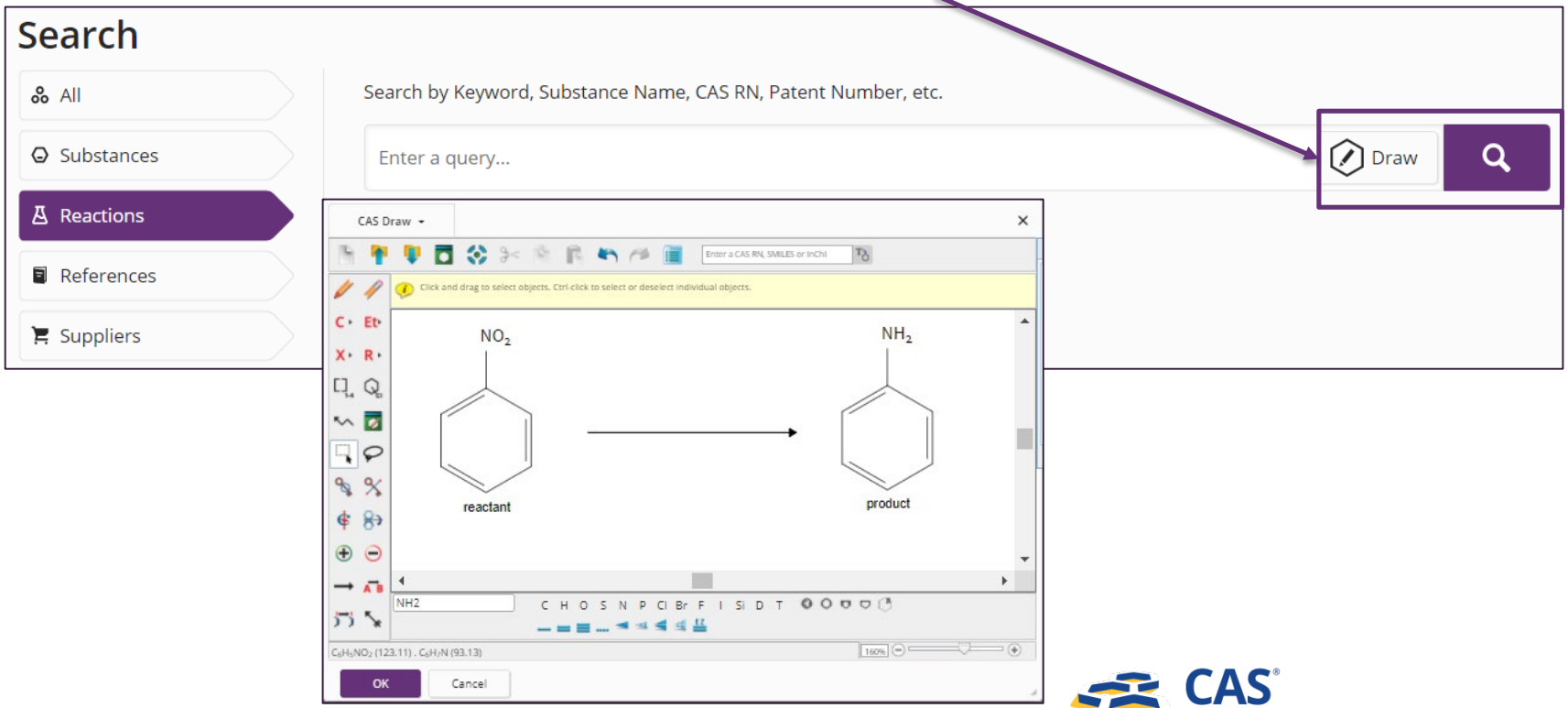
反应检索—标识符

一步由物质标识符或文献标识符获得反应信息



反应检索

通过结构式进行检索



反应检索——结果集筛选

反应检索类别：

精确反应检索

亚结构反应检索

相似反应检索

反应筛选类别：

产率

反应步数

不参与反应的官能团

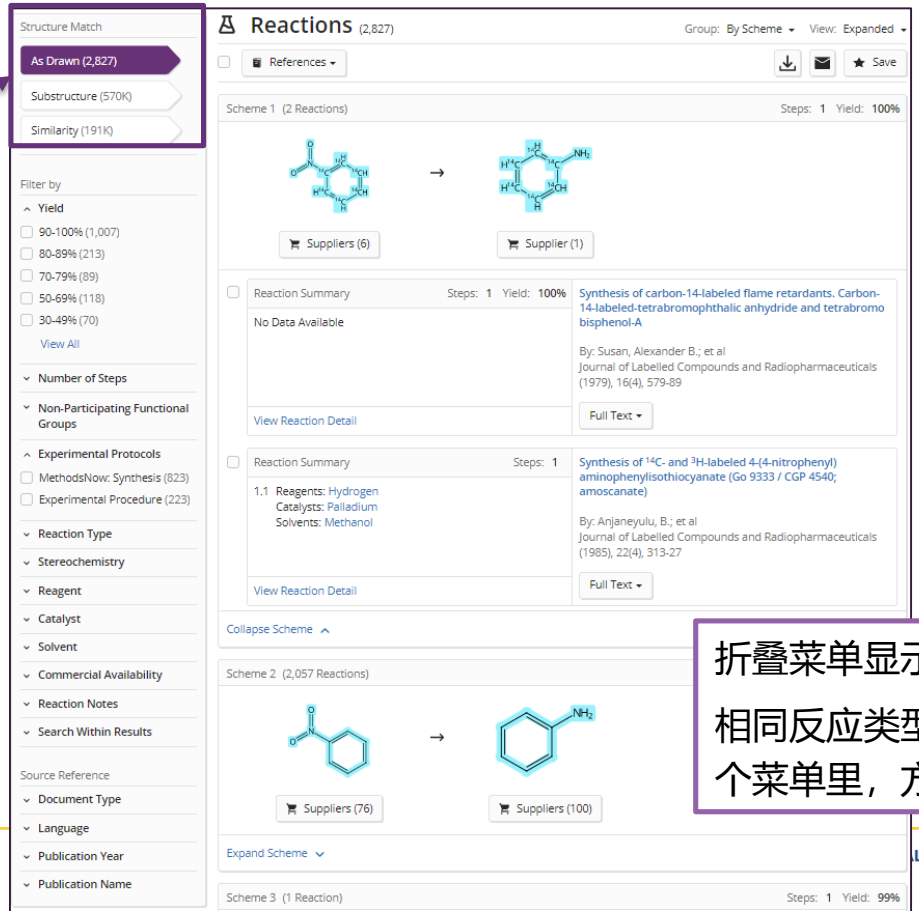
反应类型

立体化学

实验步骤

试剂、催化剂、溶剂、

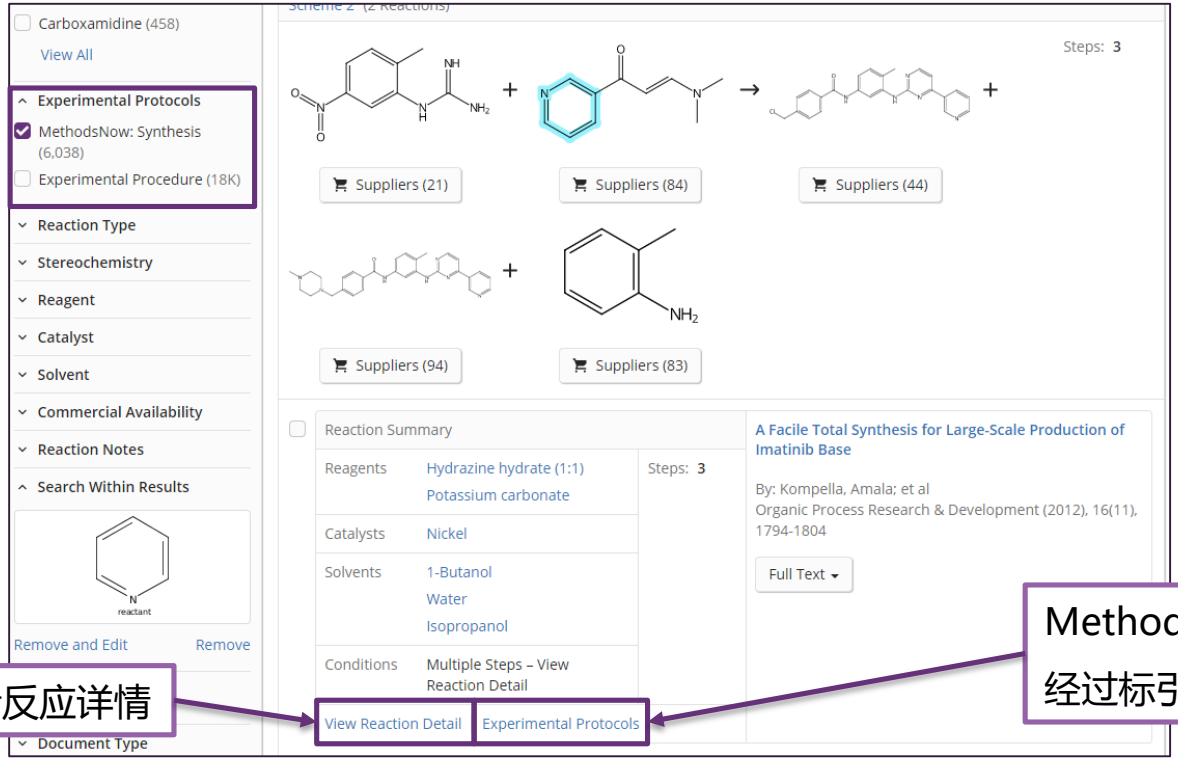
……



折叠菜单显示：

相同反应类型的反应放在一个菜单里，方便阅读和筛选

反应检索——结果集筛选：MethodsNow Synthesis

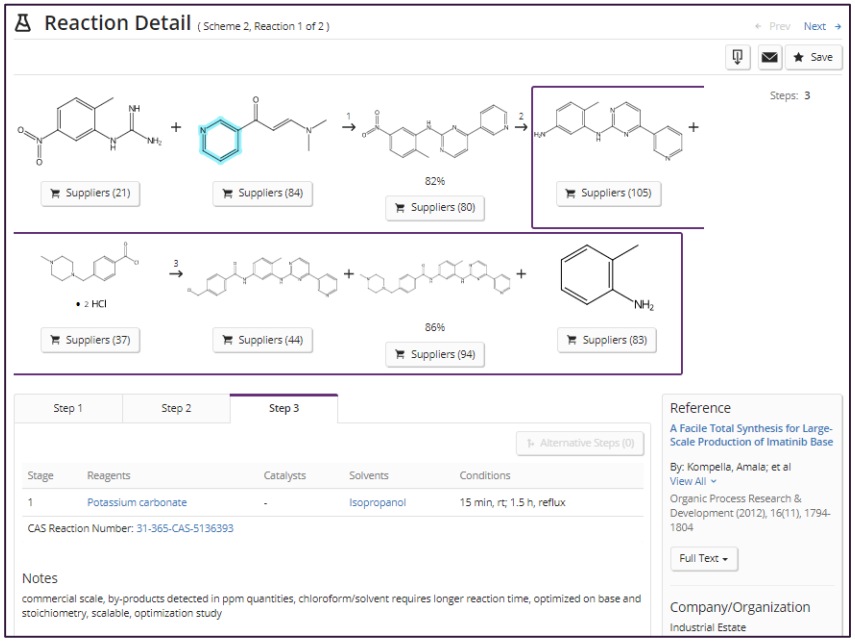


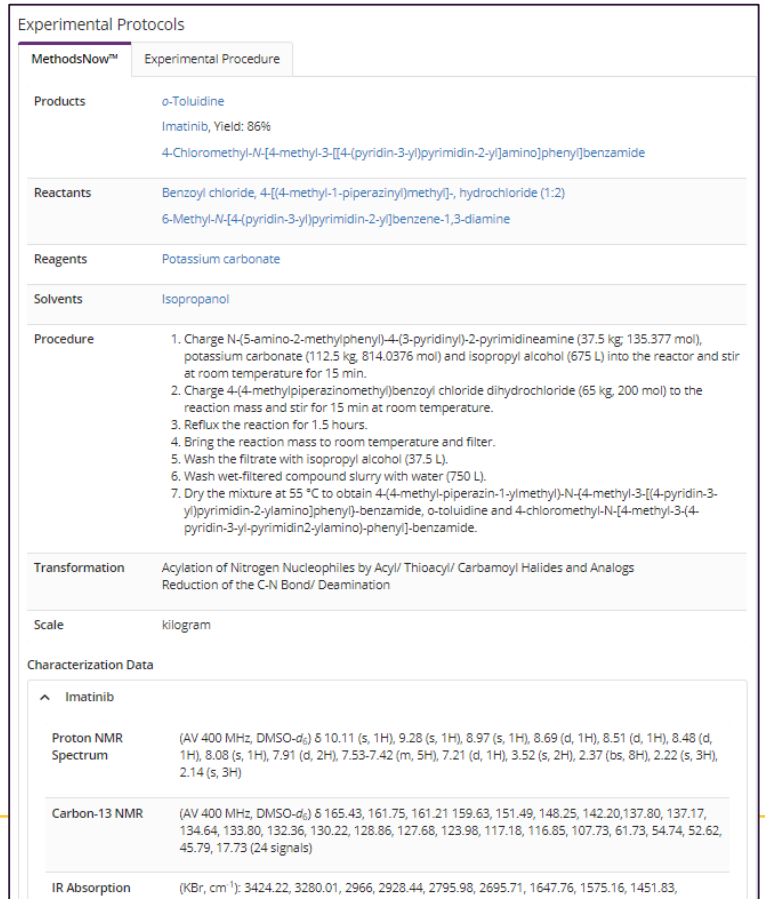
查看反应详情

MethodsNow Synthesis：

经过标引和编辑的完整的反应操作信息

反应检索——结果集筛选：MethodsNow Synthesis

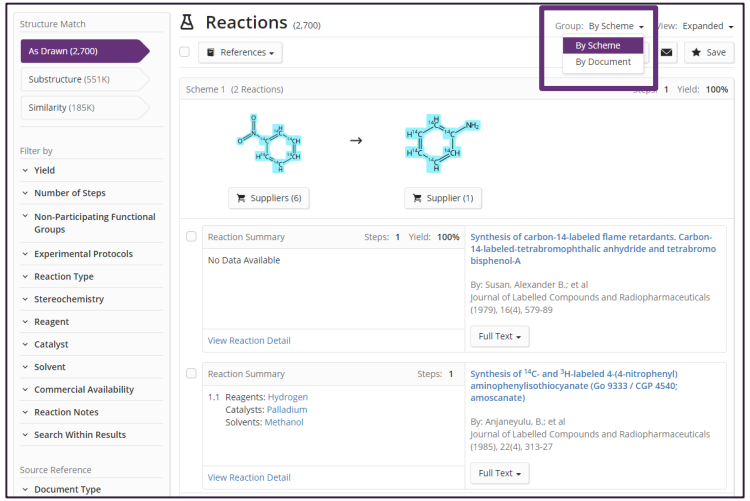




MethodsNow Synthesis：

分类显示详尽信息，方便操作

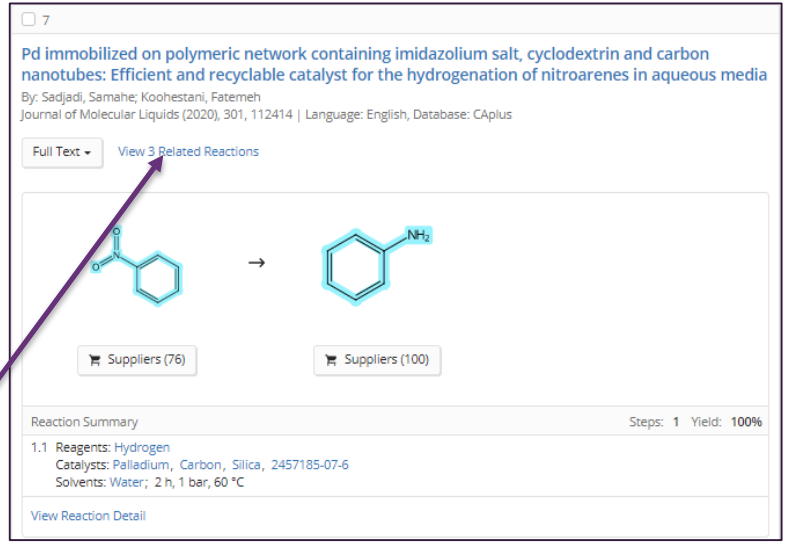
反应检索——结果集排序



反应排序：

按类型排序

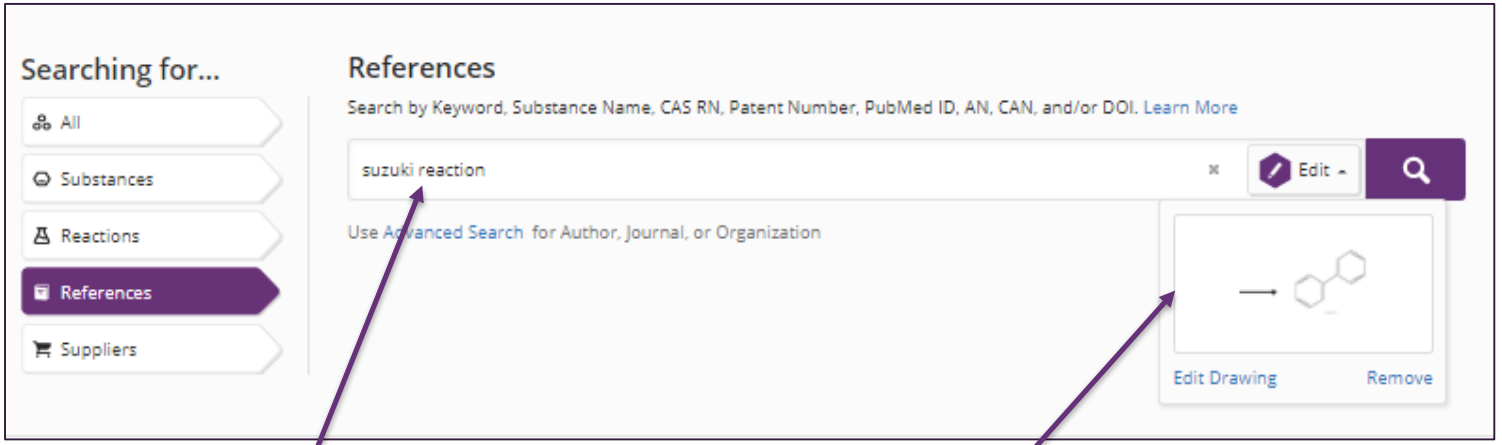
按文献排序



按文献分类：来自同一篇文献的反应收在一条记录里

CAS® A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

联合检索--反应式与关键词

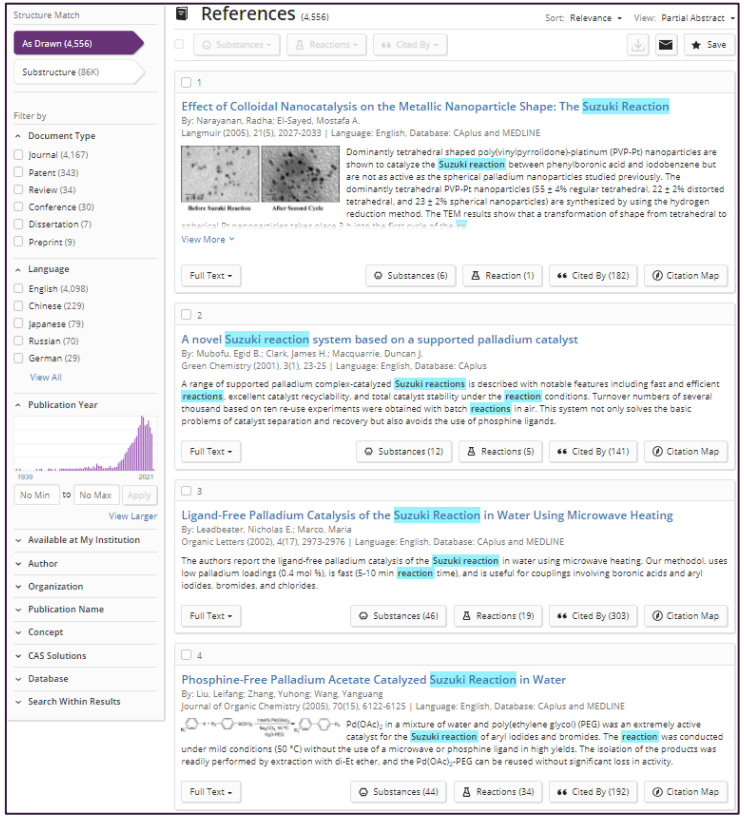


文献检索框里输入关键词

结构编辑器中绘制反应

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

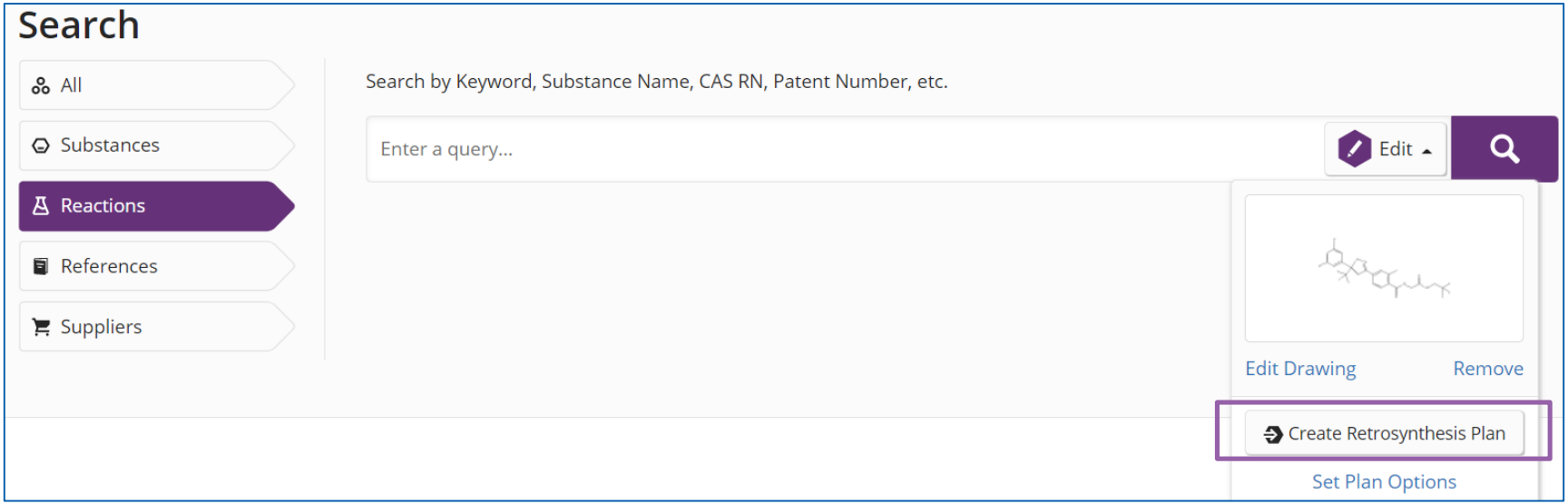
联合检索--反应式与关键词



联合检索提高了检索速度

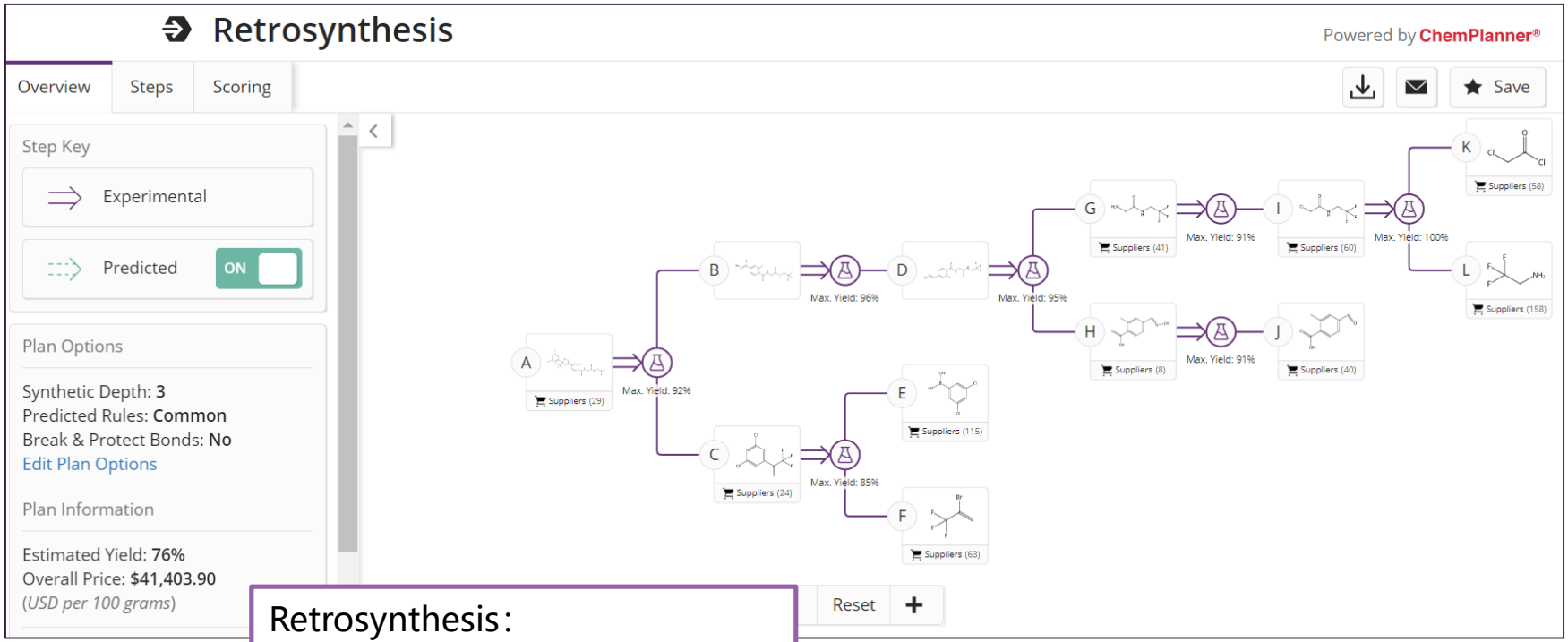
CAS® A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

反应检索—逆合成反应路线设计



CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

反应检索—逆合成反应路线设计

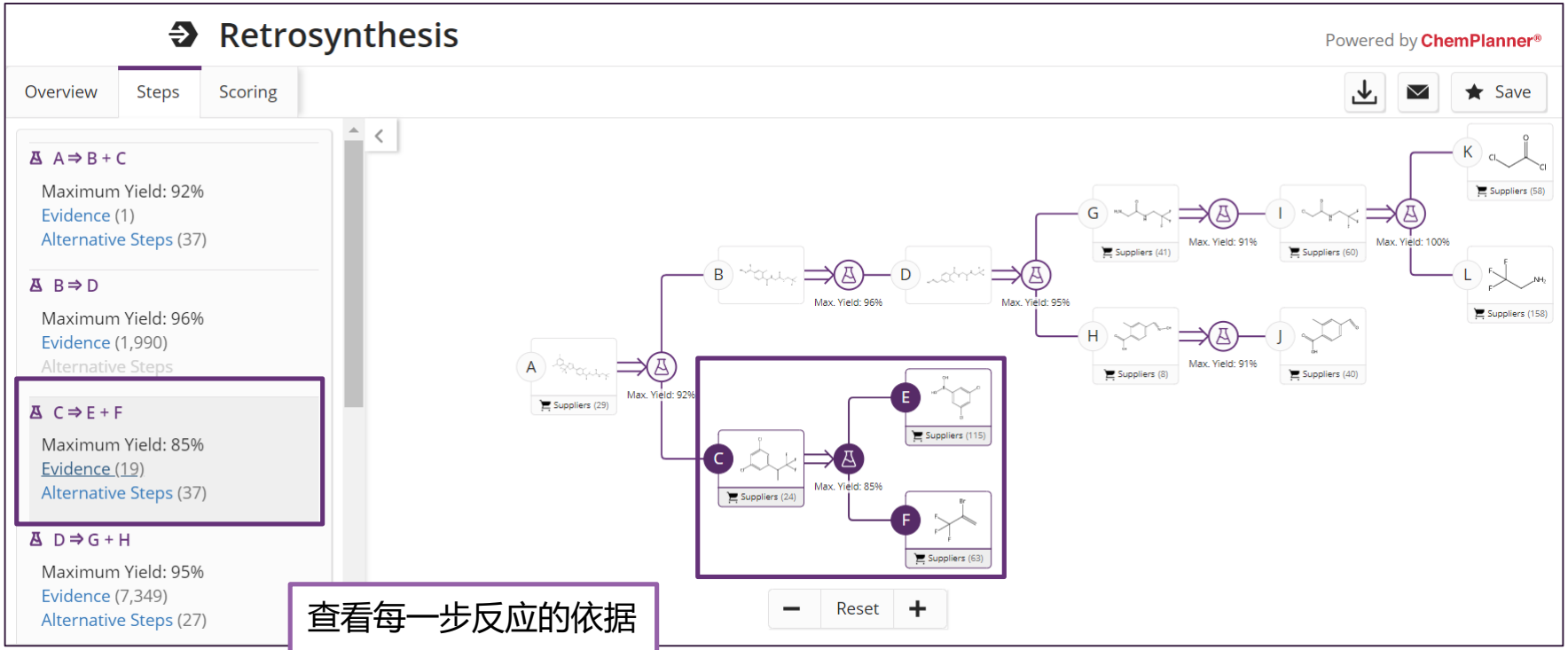


Retrosynthesis：

基于CASReact中的反应信息

路线显示每一步的底物与产物信息

反应检索—逆合成反应路线设计

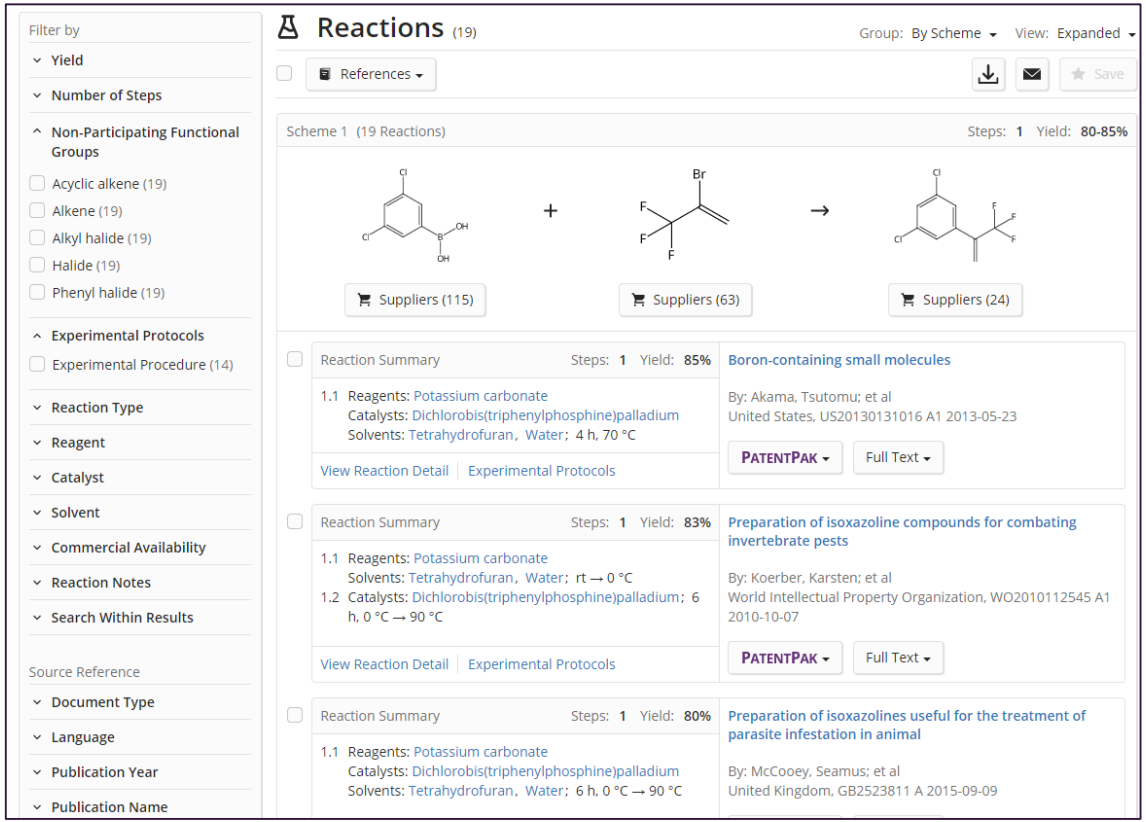


查看每一步反应的依据

挑选替换路线

CAS® A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

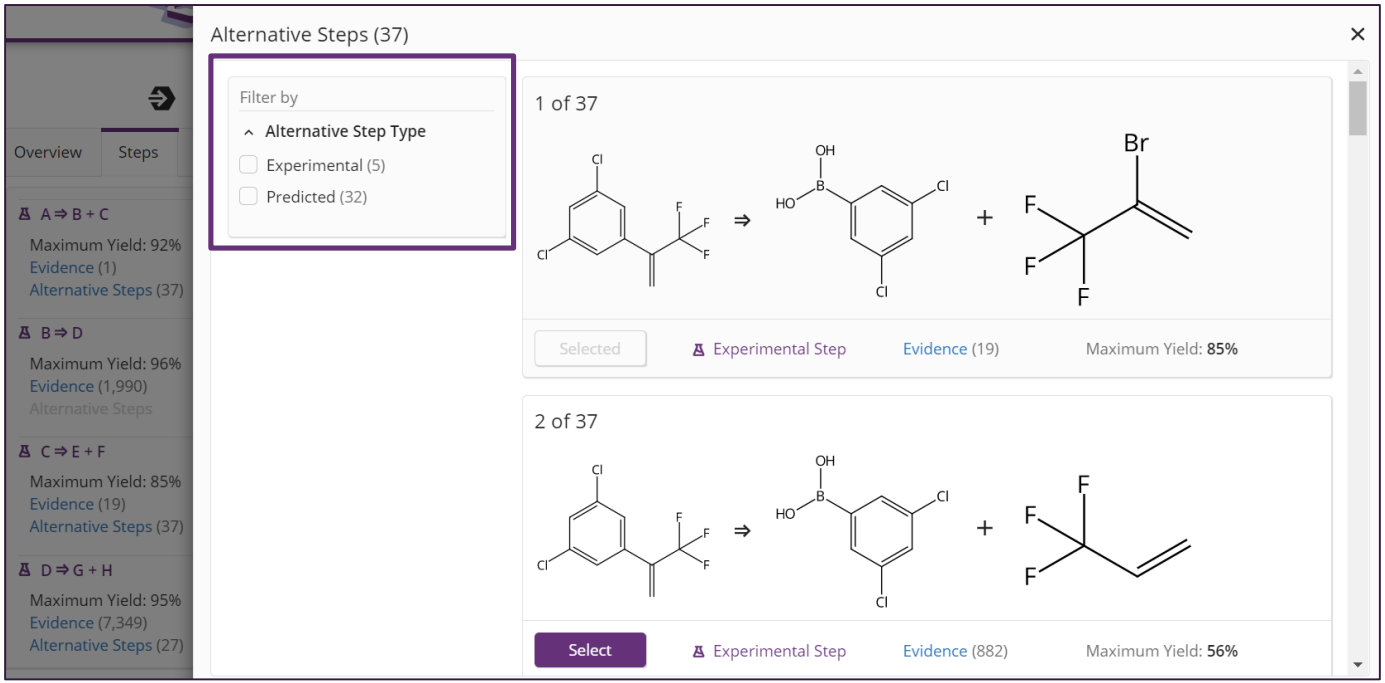
反应检索—逆合成反应路线设计



反应依据

CAS® A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

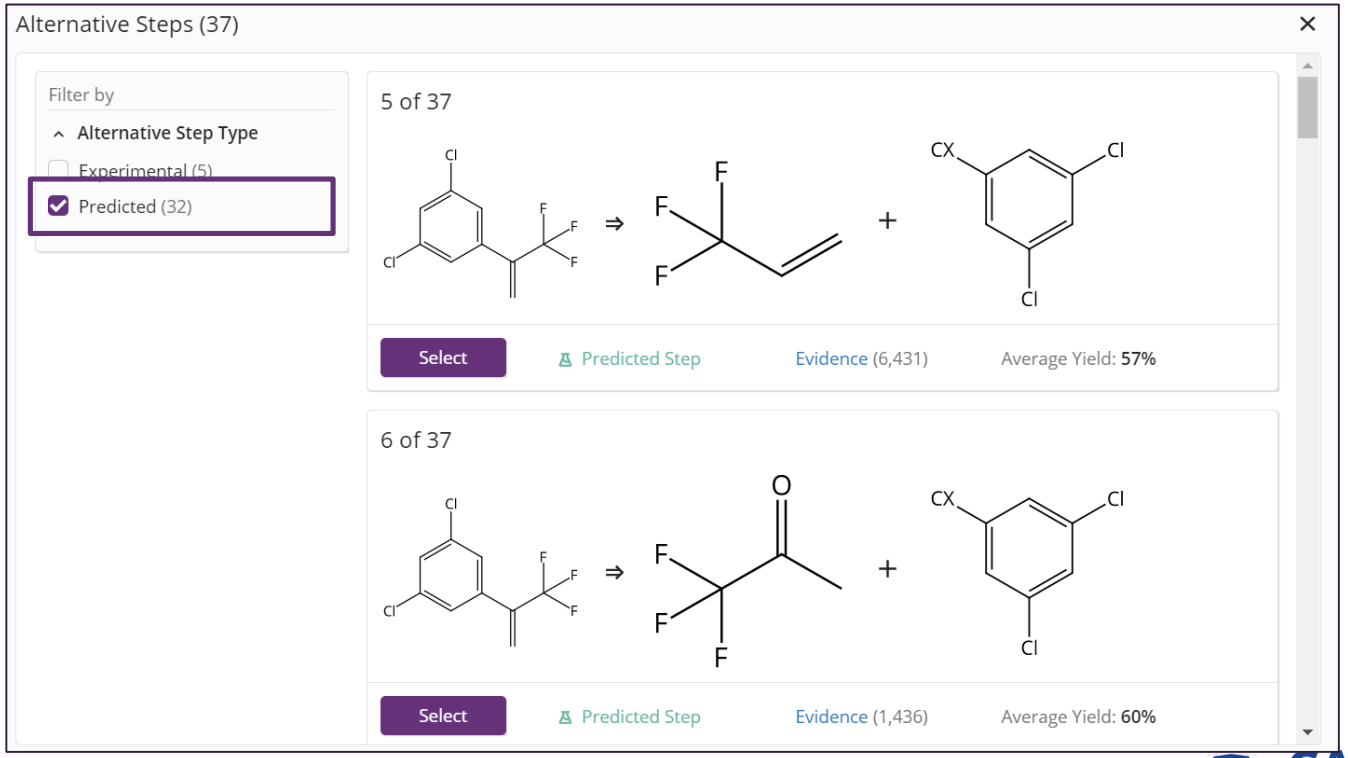
反应检索—逆合成反应路线设计



替换路线

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

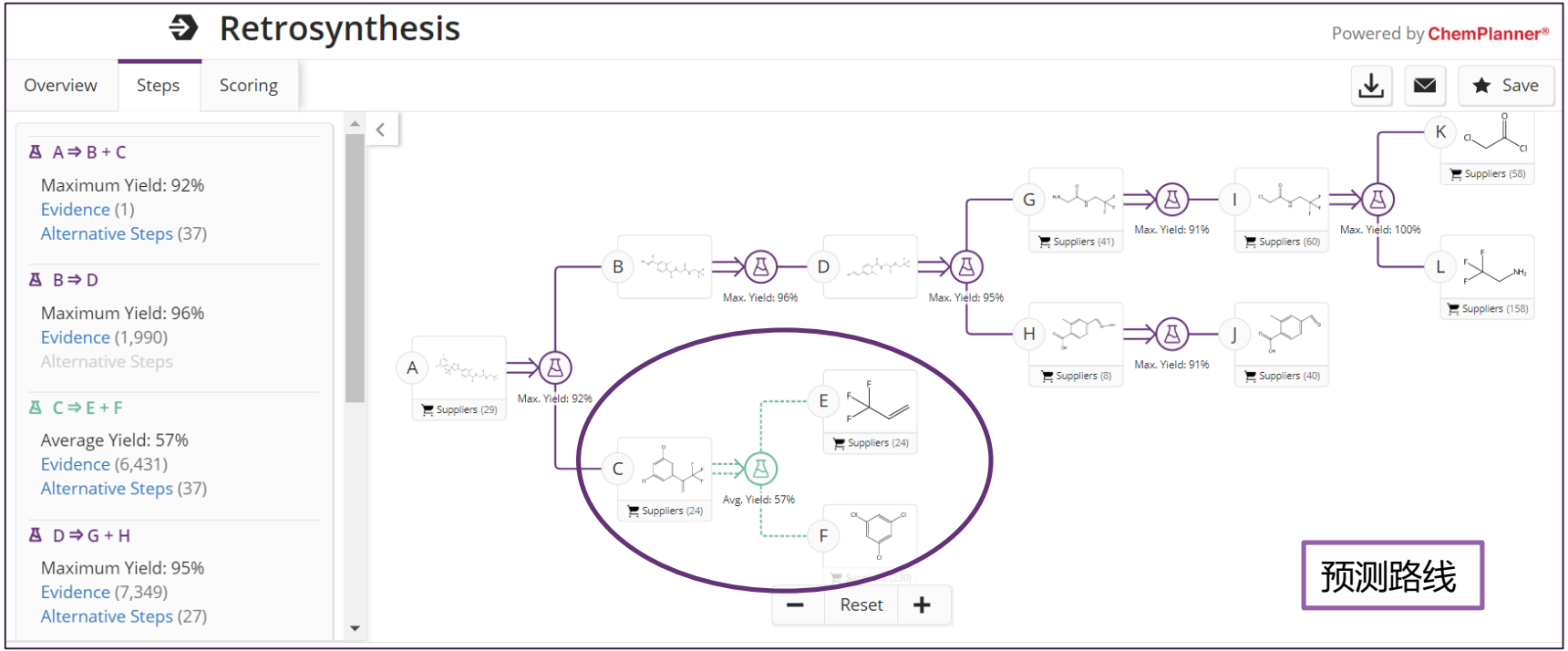
反应检索—逆合成反应路线设计



预测路线

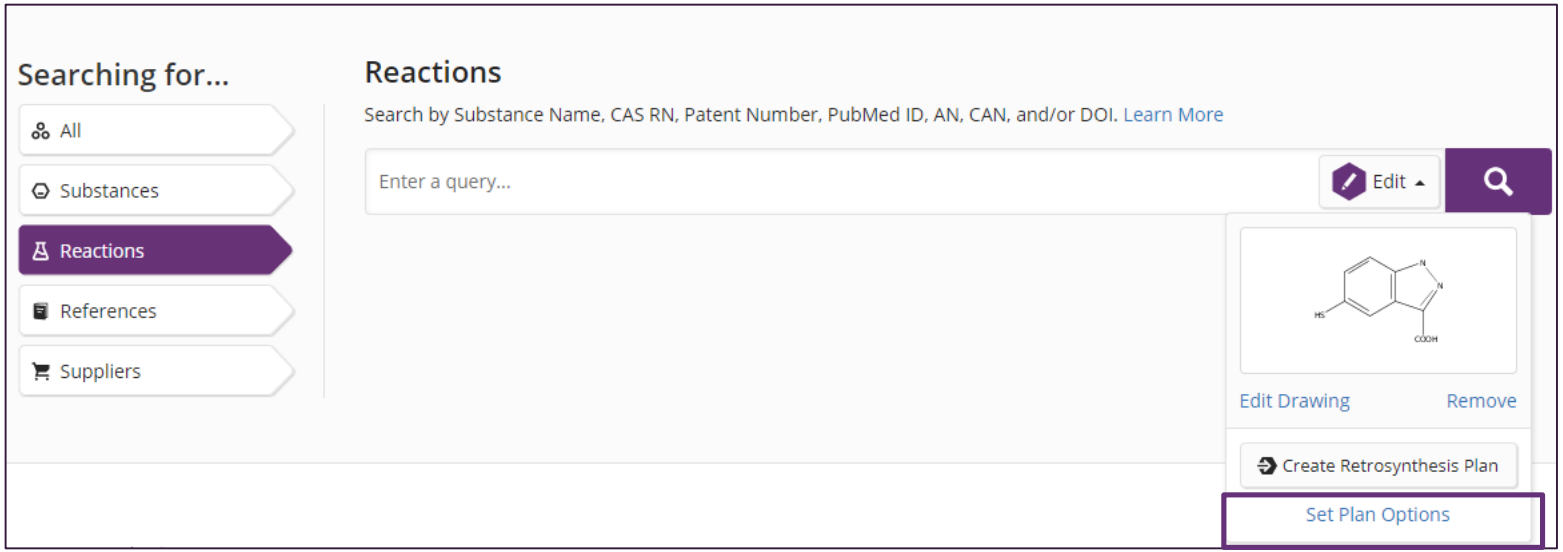
CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

反应检索—逆合成反应路线设计



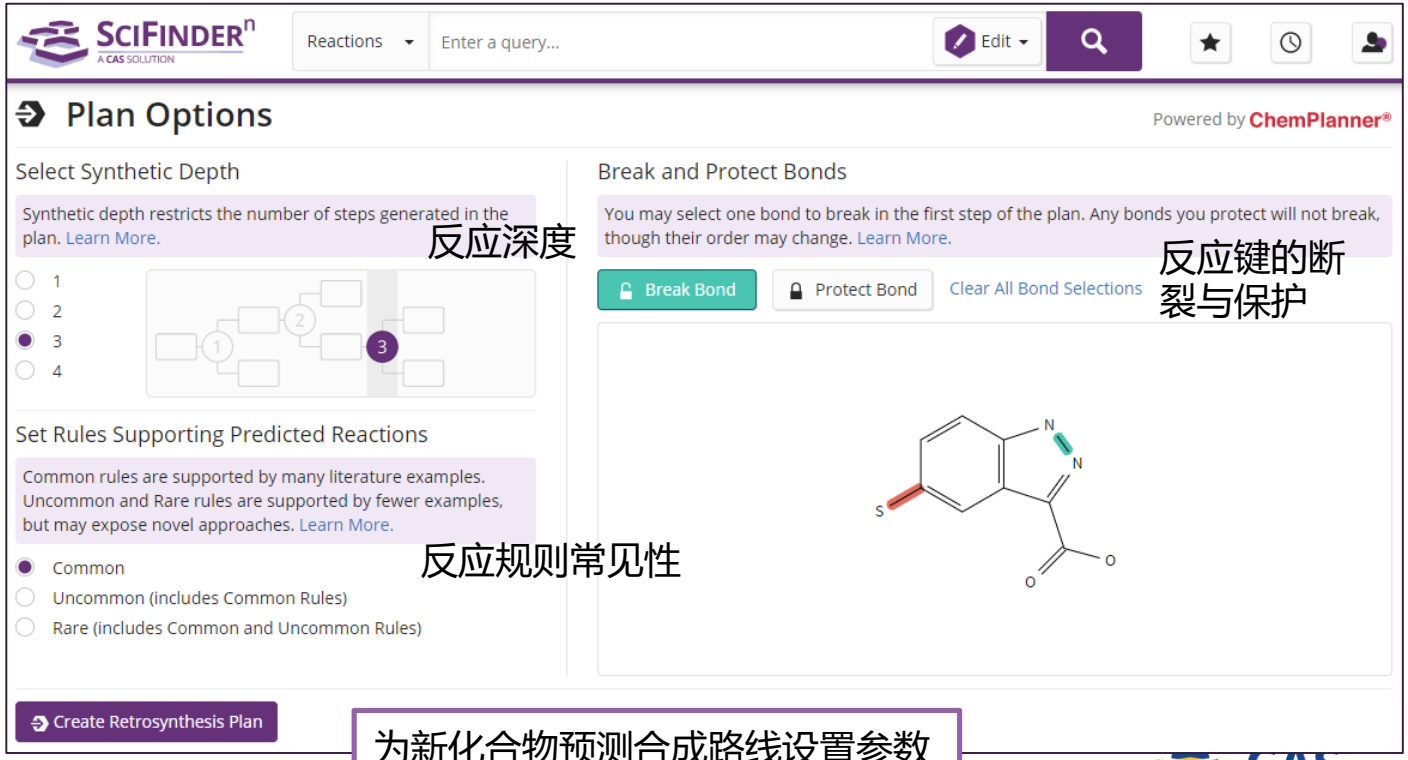
CAS® A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

反应检索—新结构的逆合成反应路线设计



CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

反应检索—新结构的逆合成反应路线设计



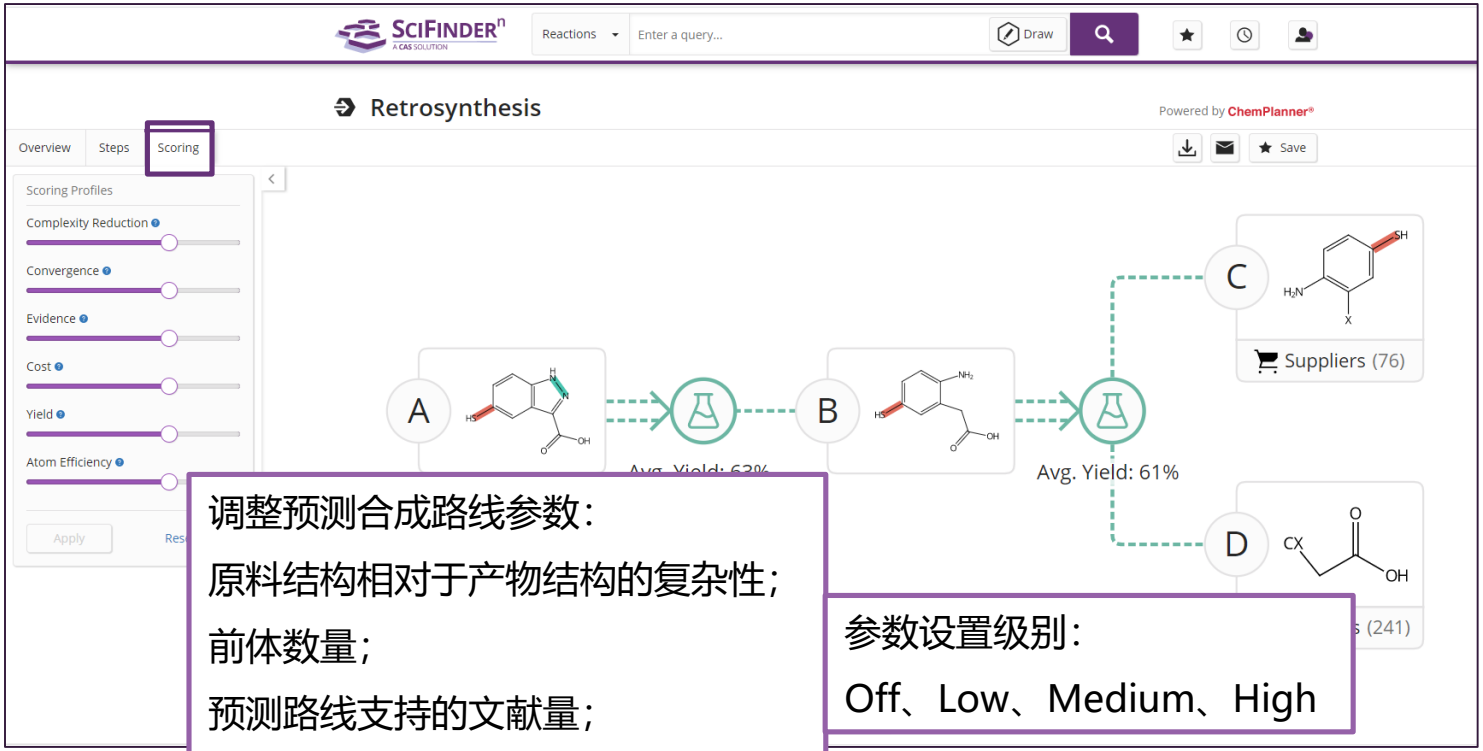
反应深度

反应键的断裂与保护

反应规则常见性

为新化合物预测合成路线设置参数

反应检索—新结构的逆合成反应路线设计



调整预测合成路线参数：

原料结构相对于产物结构的复杂性；

前体数量；

预测路线支持的文献量；

产率；

原子转化经济性。

参数设置级别：

Off、Low、Medium、High

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

提纲

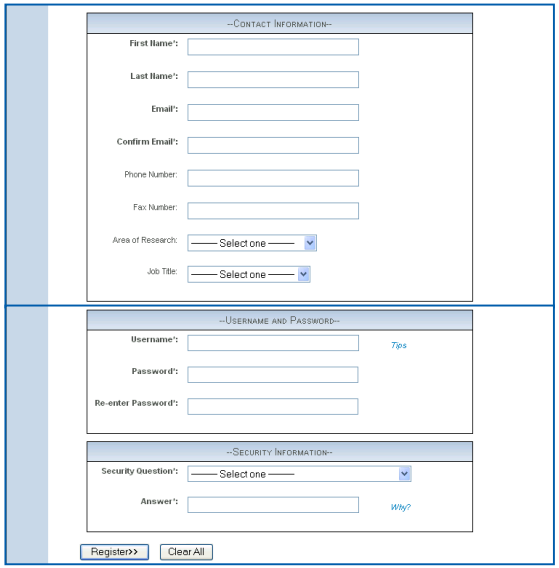
- 美国化学文摘社简介
- SciFinder-n简介及检索方式
  - 文献检索
  - 物质检索
  - Markush检索
  - 反应检索
- 常见问题及解决

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder浏览器选择建议

- Windows 7以上用户建议升级IE到10以上，不支持IE7、IE8
- Chrome和FireFox浏览器在所有系统上的表现都优于IE浏览器
- 不建议使用360浏览器检索SciFinder，会被自动拦截相关功能或插件

如何获取SciFinder账号



请注意：
1.必须输入真实姓名和学校邮箱。
2.用户名必须是唯一的，且包含 5-15 个字符。它可以只包含字母或字母组合、数字和/或以下特殊字符：
- -（破折号）
- _（下划线）
- .(句点)
- @（表示“at”的符号）

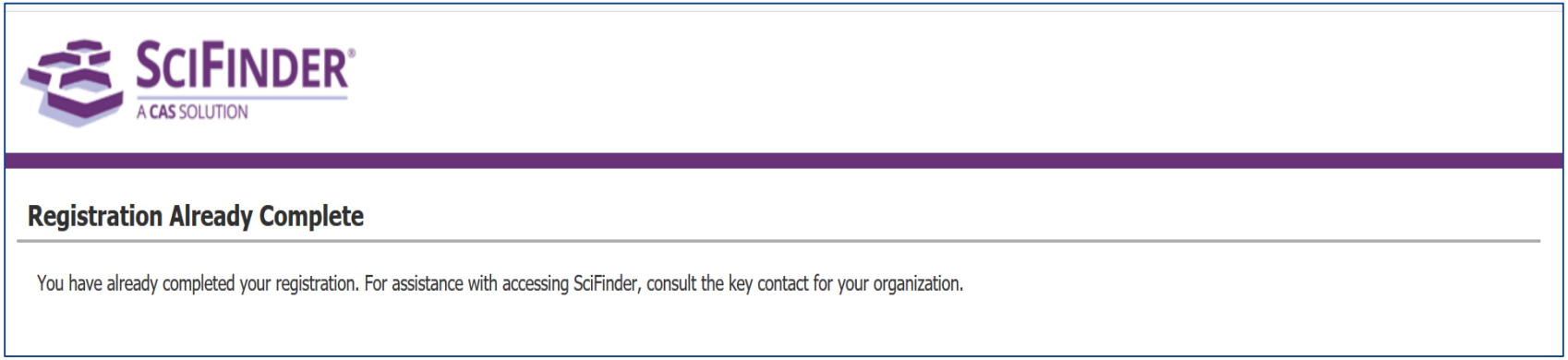
3.密码必须包含 7-15 个字符，并且至少包含三种以下字符：
- 字母
- 混合的大小写字母
- 数字
- 非字母数字的字符（例如 @、#、%、&、*）

例：abc@123
4.从下拉列表中选择一个密码提示问题并给出答案。
单击 Register（注册）。

- 登录学校图书馆网站找到SciFinder数据库说明页，按照提示进行注册

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

如何获取SciFinder账号



点击激活链接后注册成功。

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

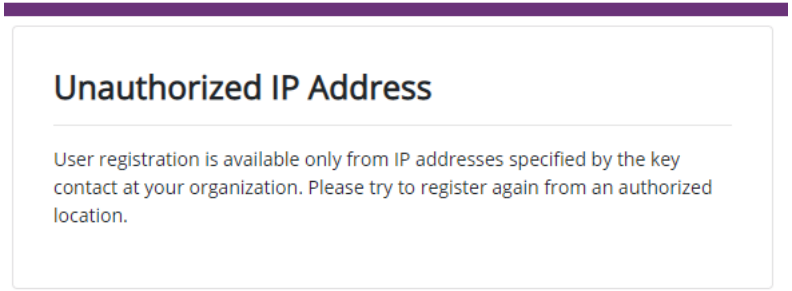
CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder使用注意事项

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

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

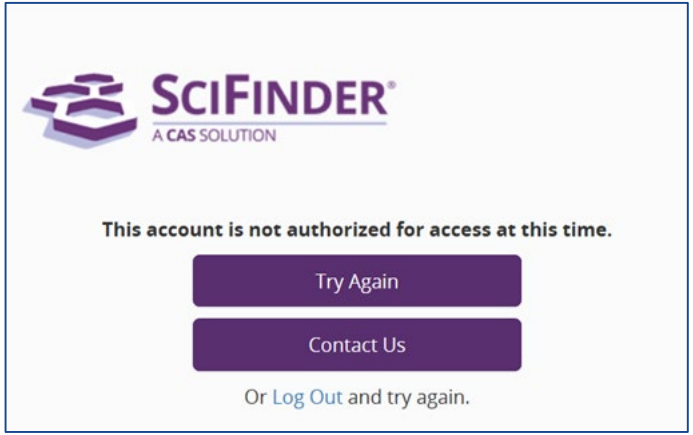
SciFinder常见问题



- 检查注册链接是否正确
- 确认连入校园网，且不是通过VPN连接
- 如果链接正确，且在校园网内，请联系图书馆或china@acs-i.org

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder常见问题



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

关注我们

ACS Chemistry for Life®

运用化学的力量改善人们的生活

谢　谢!

美国艾赛思国际有限公司北京代表处
(ACS International Ltd Beijing Rep Office)
china@acs-i.org
010-62508026/7

CAS® A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY