

SciFinder / SciFinder Scholar 使用者手冊

SciFinder 2007 / SciFinder Scholar 2007



SciFinder®



SciFinder®
SCHOLAR 

目錄

SciFinder新功能	5
組合檢索結果 (Combine)	6
輸出CHMECATS 供貨商品目錄資料至Microsoft Excel (Export to Microsoft Excel)	18
從物質進一步進行檢索 (Quick Explore of Substance)	22
列印物質檢索結果 (Substance Pint Grid Format)	23
以圖譜形式進行顯示和篩選 (Display and Refine by Spectra)	23
第一章 SciFinder 結構繪製 (Structure Drawing)	25
結構繪製視窗 (Structure Drawing Screen)	26
垂直工具板 (Vertical Tool Palette)	32
水平工具板 (Horizontal Tool Palette)	45
結構檢索 (The Structure Query Drawing)	47
結構的存檔與再使用 (Save and Reuse Structure)	50
檢索多個結構片段 (Search Multiple fragments)	50
第二章 精確化學結構檢索 (Exact Chemical Structure Search)	51
精確化學結構檢索 (Exact Chemical Structure Search)	52
實驗性質 (Experimental Properties)	56
系統演算推導性質 (Predicated Properties)	56
保留物質 (Keep Substances)	57
分析和篩選結果 (Analysis / Refine)	57
物質的相關文獻 (Reference Information related to Substances)	58
檢索更多的相關資料 (Get Related...)	59
物質立體結構模型 (3D Structure Model of Substances)	60
物質供應目錄資料 (Catalog Information of Substances)	61
物質管制資料 (Regulatory Information of Substances)	62
物質反應資料 (只限有次結構SSM的帳號) (Reaction Information of Substances)	63
第三章 結束精確化學結構檢索 (Ending Exact Chemical Structure Search)	64
次結構檢索 (Substructure Search)	65
次結構檢索 (Substructure Search)	66

預覽次結構檢索 (Preview of Substructure Search)	68
進行次結構檢索 (Performance of Substructure Search)	73
分析結果 (Analyzing Answer)	75
分析取代原子 (Analyzing Substitution Atom)	76
分析可變基團 (Analyzing Variable Group [A , Q , X , M])	77
分析R基團的組合原子 (Analyzing Composition Atoms of R Group)	78
分析檢索的準確性 (Analyze by Search Accuracy)	79
分析環結構 (Analyze by Ring Structure)	80
分析立體結構 (Analyze by Stereo)	85
篩選答案 (Refining Answers)	89
結束次結構檢索 (Finish Substructure Search)	92
第四章 相似結構檢索 (Similarity Search)	93
相似結構檢索簡介 (Introduction of Similarity Search)	94
進行相似結構檢索 (Performance of Similarity Search)	96
比較：精確結構檢索、次結構檢索和相似結構檢索 (Differences between Exact Chemical Structure Search, Substructure)	98
結束相似結構檢索 (Finish Similarity Search)	102
相似結構檢索的參考文獻 (Reference Data of Similarity Search)	102
第五章 化學反應檢索 (Reaction Search)	103
從結構檢索反應式 (Search from One Side of Reaction)	104
進行化學反應檢索 (Performance of Reaction Search)	105
多步驟反應顯示 (Display Multi-steps Reaction)	107
化學反應的文獻 (References of Reaction)	109
篩選反應結果 (Refine Reaction Result)	111
指定反應物/試劑和產物 (Define the Reactants/Reagents and Products)	115
以官能基檢索 (Search by Functional Group)	117
組合官能基和結構檢索 (Search by Combination of Functional Group and Structure)	121
進行反應檢索 (Performance of Reaction Search)	122
結束反應檢索 (Finish Reaction Search)	123
Appendix A 智能檢索：SciFinder怎樣去檢索結構	124
Appendix B CAS Registry：物質特性參考表	128

SciFinder 2007 新功能

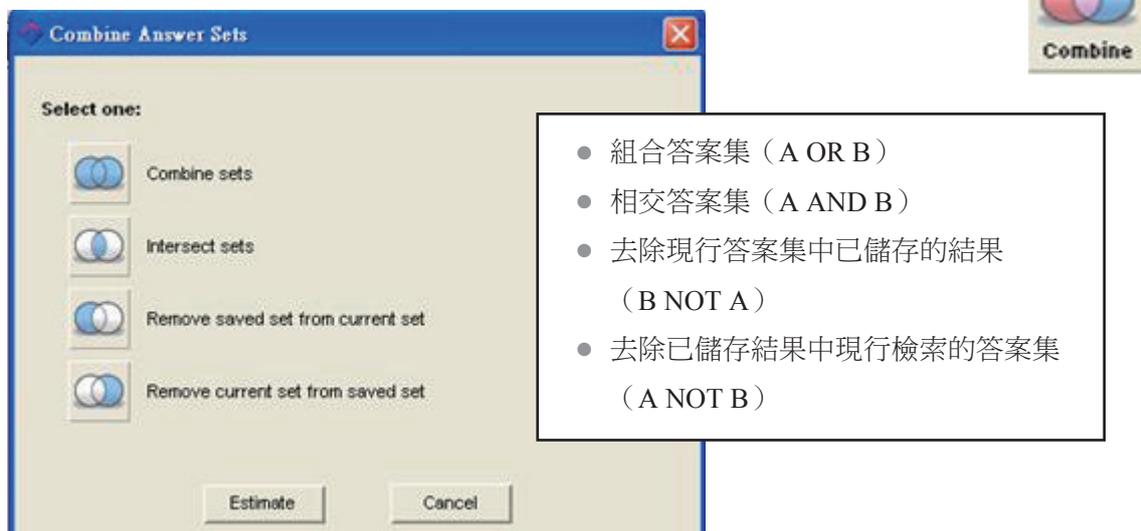
為了更大程度地滿足廣大SciFinder用戶的需要，SciFinder2007以SciFinder2006為基礎增加了以下更強大的功能。

- 組合檢索結果將使文獻、物質、反應等檢索的結果變得更加有系統性與次序性，您可以透過組合交叉或移出方法來獲得所需要的文獻
- 商業化學品記錄可以置入Excel表格中，以方便對檢索結果進行分類和操作
- 用戶可以快速地從物質檢索結果中獲取結構進行進一步檢索
- 各種結構可以縮印在一個頁面上，方便進行有效地比較
- 以圖譜形式進行顯示和篩選

本章節會說明SciFinder2007的新功能。

組合檢索結果 (combine)

SciFinder 可讓用戶以四種不同的模式進行組合檢索，用戶便能作出更多檢索策略和變化。這功能有以下的好處：



- 在進行各種組合變化後，用戶可以很容易地得到需要的檢索結果。
- 用戶可以組合不同作者和公司的研究，再用進階分析篩選功能進行分析。
- 用戶很容易就可以檢索出需要的合成途徑，不需要花時間細看和比較每筆合成途徑。
- 除去不需要的檢索答案，節省閱讀時間。

組合檢索結果的應用：

- 組合文獻檢索結果
- 組合物質檢索結果
- 組合反應檢索結果

功能要點：

- 用戶每次可以組合兩組參考文獻檢索結果（在一次SciFinder的查詢期間，可以進行多次的組合）。其中一組結果必須先儲存在電腦中（desktop answer），另一組便是在SciFinder當前視窗的檢索結果（active answer）。
- 只可組合兩組的參考文獻檢索結果（不可以是化合物或化學反應的檢索結果）
- 操作特色：
 - ◆ 沒有突顯功能（如關鍵詞突顯會消失）

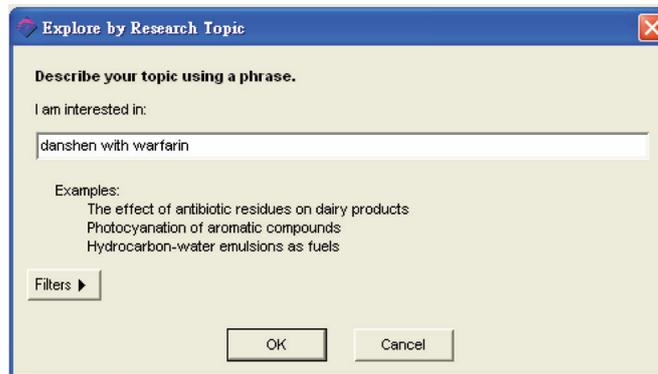
- ◆ 不可使用自動提示 (KMP Now) 和網路查詢相關資料 (eScience) 的功能
- ◆ 組合文獻結果排列和當前檢索結果 (active answer) 相同
- ◆ 可使用篩選 (refine) 分析 (analysis) 和取得相關訊息 (get related...) 功能
- ◆ 最多可顯示, 儲存和列印20,000個結果。
- ◆ 任務的使用記錄包括組合的進行, 例如: 組合類型、儲存結果組的檔名、文獻結果數目、和組合後的結果數目等。

注意: 組合功能並不需要開始一個新的任務, 所以組合前正在查詢的當前檢索結果記錄仍然保留。

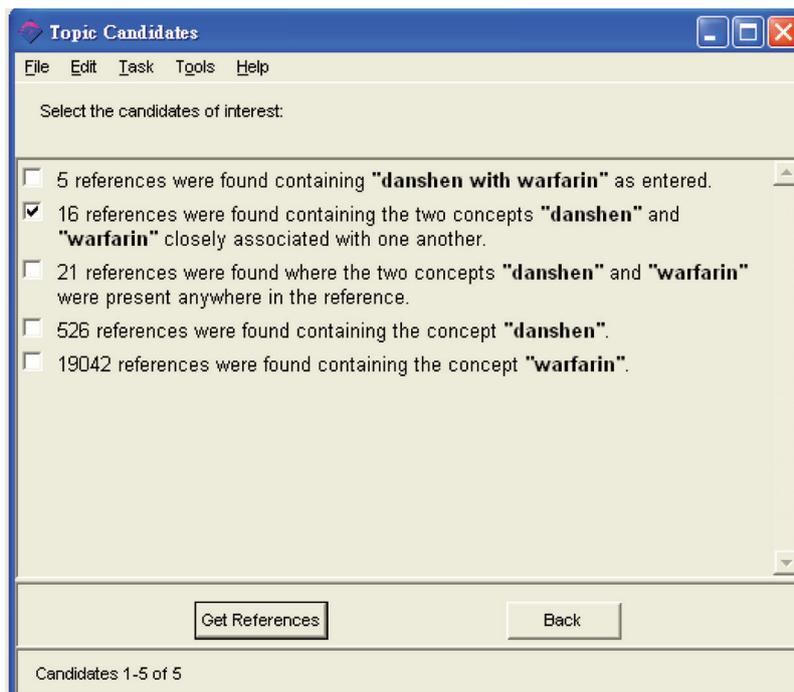
組合文獻的範例:

查詢華法林和草本植物的相互作用, 但不包括中藥丹參。

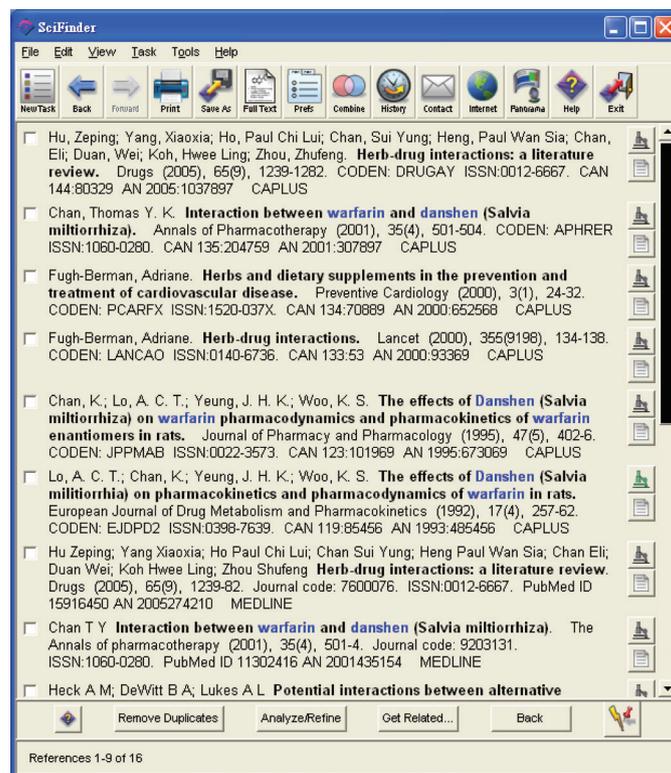
1. 開始新的任務, 點選研究主題, 便會出現以下的對話框。輸入“Danshen with warfarin”後, 按OK。



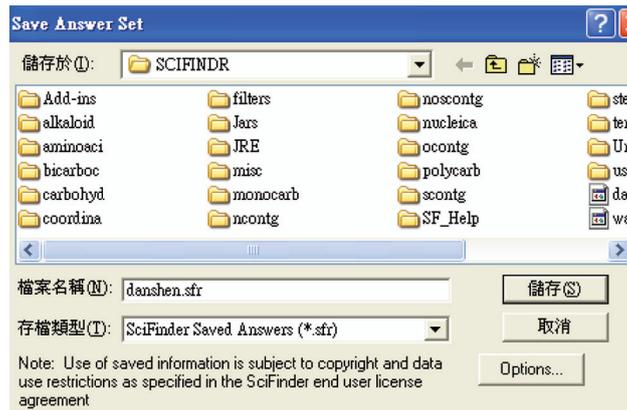
2. 以下的對話框會出現, 給用戶選擇不同的檢索結果組合, 選擇“closely associated”的檢索結果組合, 這是因為和輸入的主題關係較高, 之後點選Get Reference便可取得檢索結果。



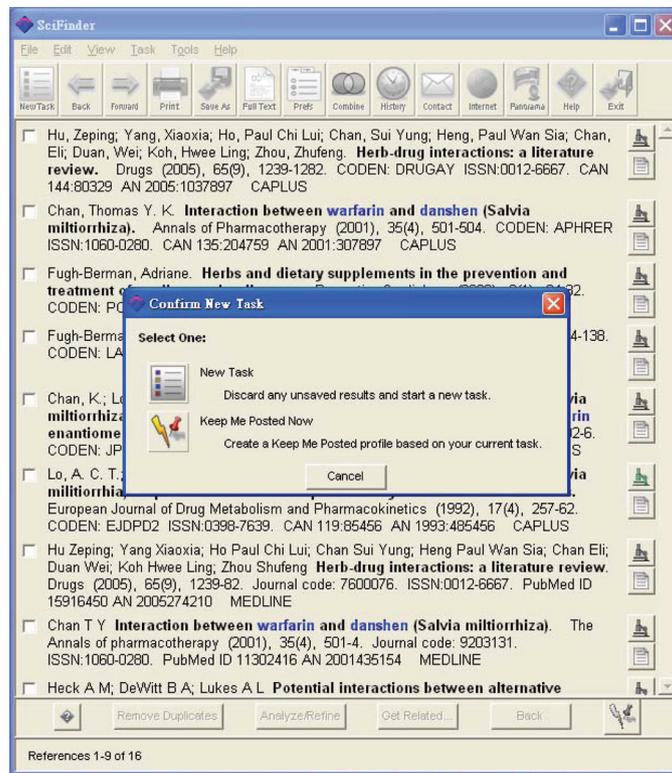
3. 結果顯示16筆檢索結果，按工具列的 File> Save Answer Set 儲存檢索結果。



4. 輸入文件名稱並選擇存檔類型為 (*.sfr)，最後按儲存。

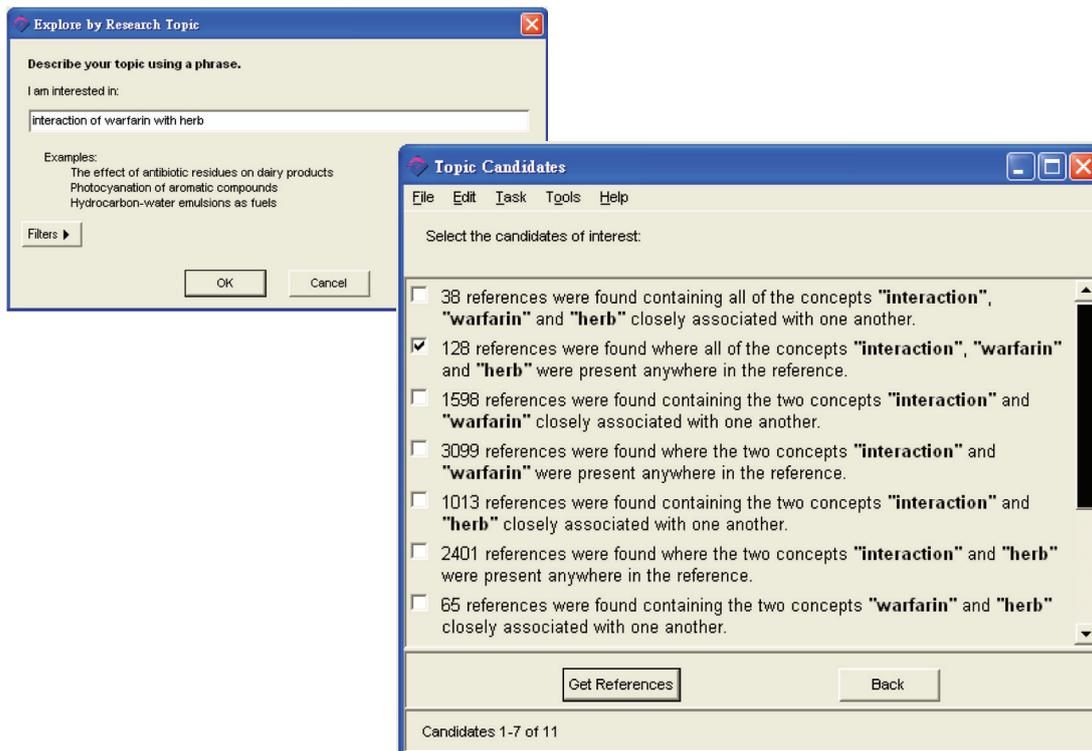


5. 開始新的任務，進行第二組的研究主題檢索。

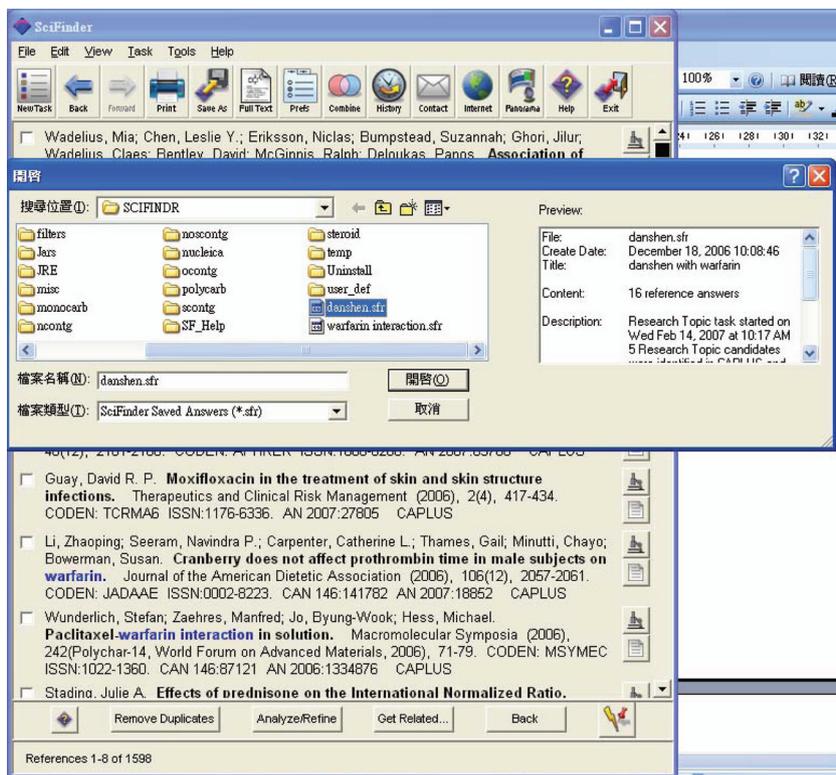


6. 輸入研究主題“Interaction of warfarin with herb”，之後按 OK。選擇“closely associated”的檢索結果組合，再點選 Get Reference 便可取得檢索結果。

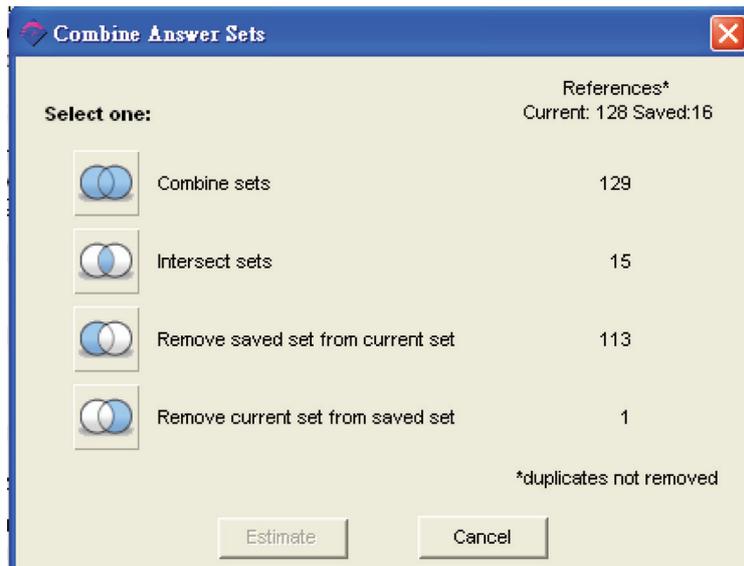
提示：用戶可以組合從不同檢索模式取得的文獻檢索結果（如由物質檢索取得的文獻 Get reference from structure search）



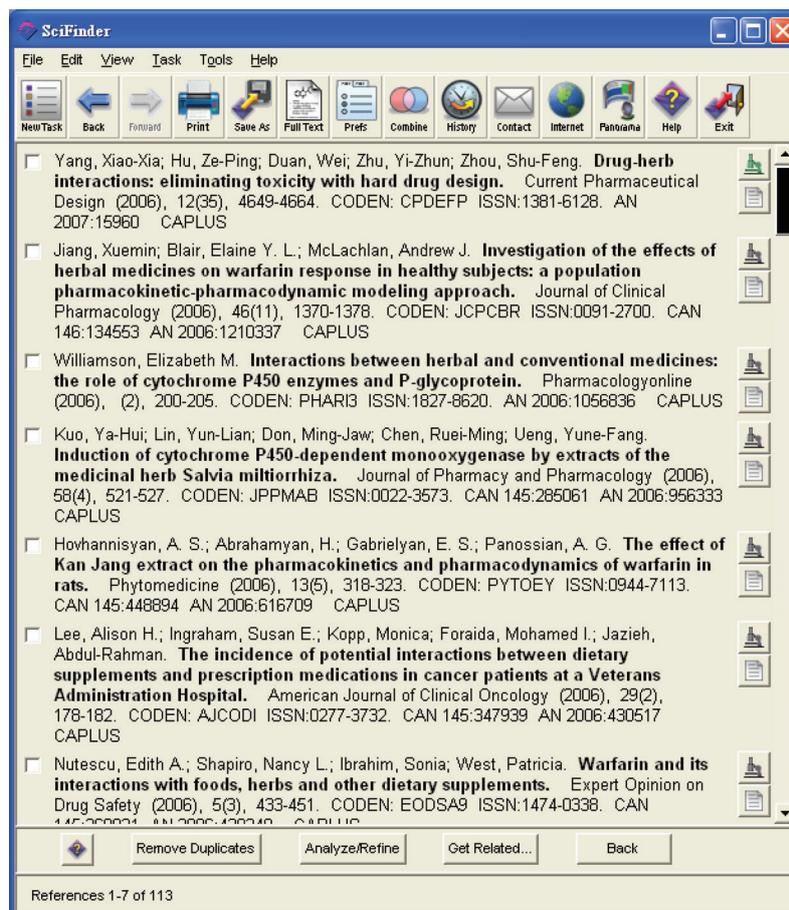
7. 此為當前文獻檢索檢索結果，按  圖像開始進行組合，會出現以下的視窗。選擇先前儲存的文獻檢索結果（Saved answer set），在右邊可預覽其詳細描述，如之前進行的檢索和結果數目，選好後按開啟。



8. 選擇其中一種組合模式，按 Estimate 便可看到預計的組合結果。



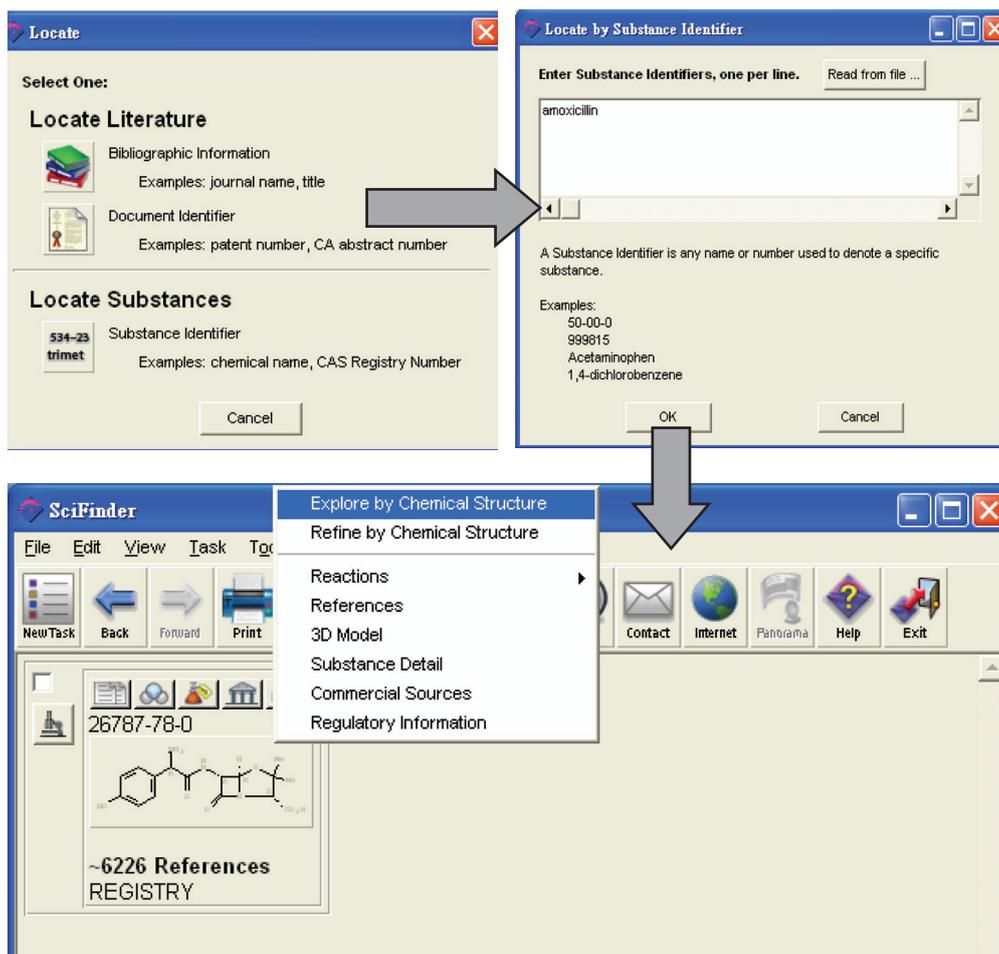
9. 現在去除華法林和中藥丹參已儲存的檢索文獻（Saved answer set），選擇“Remove saved set from current set”，便可成功地取得需要的文獻答案，共有113筆文獻。



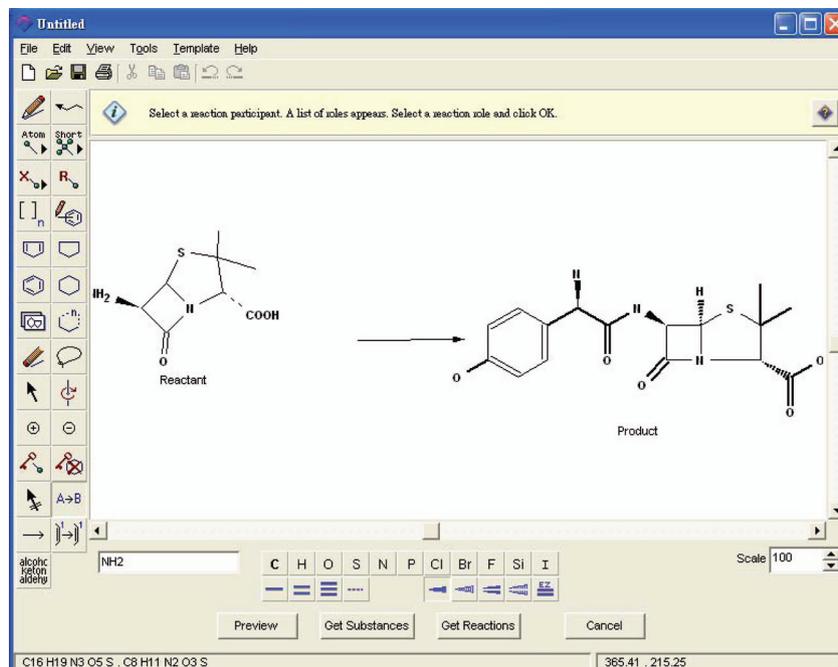
組合反應的示範例子：

1. 查詢阿莫西林（Amoxicillin）的合成，但不包括以6-氨基青霉烷酸（6-aminopenicillanic acid，6-APA）為原料的合成途徑。

用戶可以按Explore> Reaction開始反應檢索，並在繪圖視窗畫出反應式。此外，用戶可用Locate找出阿莫西林，再按Explore by chemical structure將阿莫西林的結構輸入繪圖視窗，這是SciFinder 2007的新功能。可以讓用戶快速地輸入結構再作查詢，也可以節省繪製複雜結構的時間。

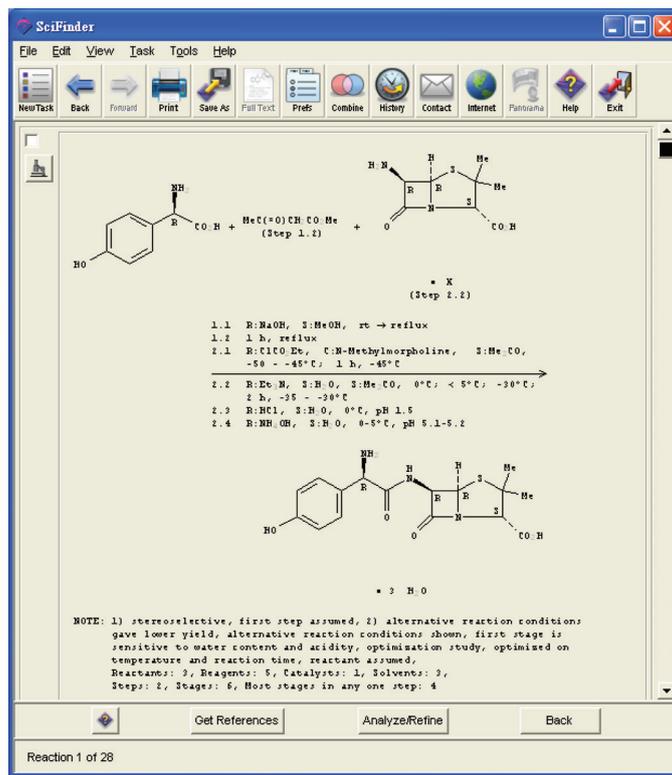


- 先檢索6-氨基青霉烷酸（6-aminopenicillanic acid, 6-APA）開始的阿莫西林合成。阿莫西林的結構已畫在右邊，用戶只需在左邊畫上6-氨基青霉烷酸，再點選反應箭頭工具，用滑鼠從左至右拖曳，設定反應物和產物。

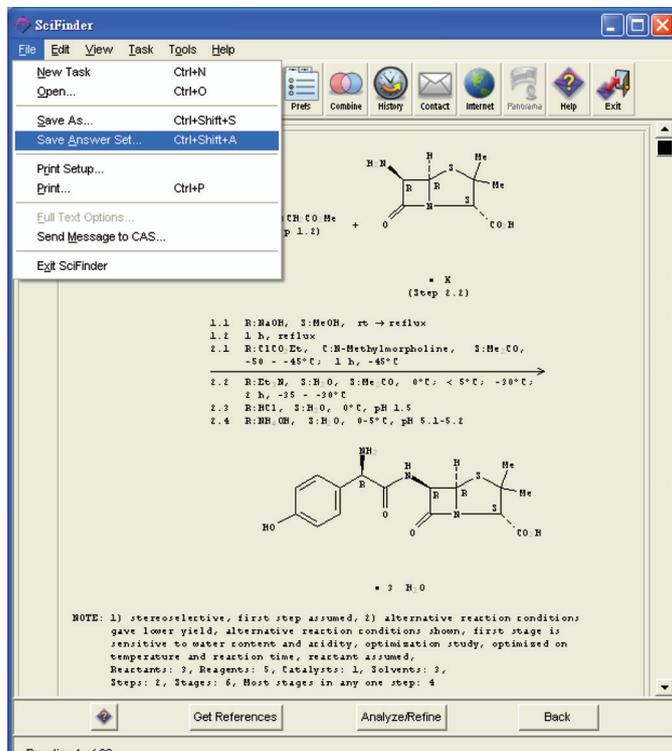


- 點選Get Reactions，開始查詢。
- 選擇“variable only at the specified positions”的檢索方法，即反應變化只適用於指定的結構位置。按 Filters過濾，可輸入更多的檢索條件。

5. 按 OK 進行查詢。共檢索出28筆反應。



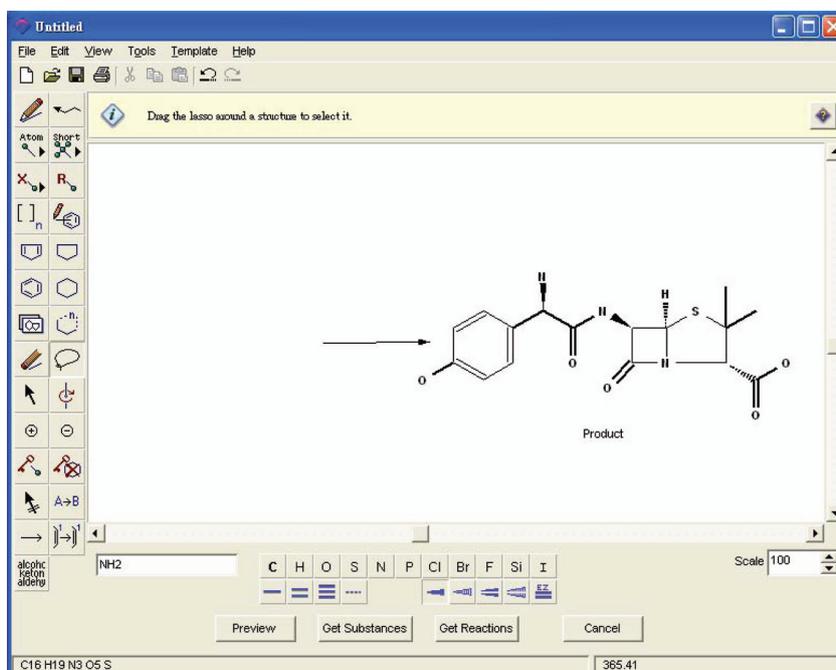
6. 按工具列的 File> Save Answer Set 儲存反應檢索結果。



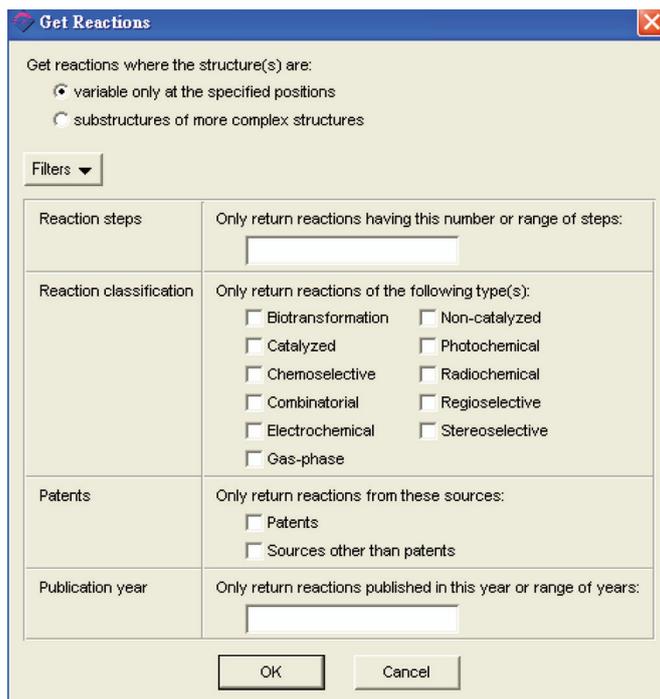
7. 輸入文件名稱並選擇存檔類型為 (*.sfr)，最後按儲存。此檔案便可運用在組合功能上。



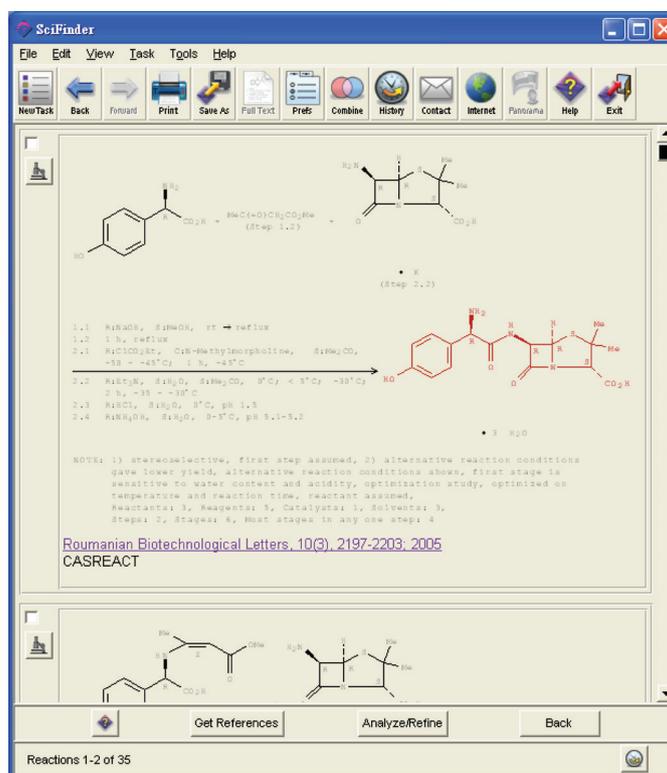
8. 欲檢索所有阿莫西林（Amoxicillin）的合成反應，點選反應箭頭工具，用滑鼠從左至右拖曳，阿莫西林會自動被指定為產物。



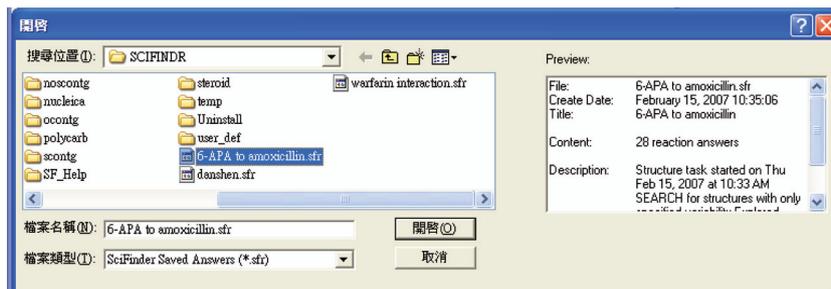
9. 點選 Get Reactions，開始查詢。
10. 選擇“variable only at the specified positions”的檢索方法，按 OK 進行查詢。



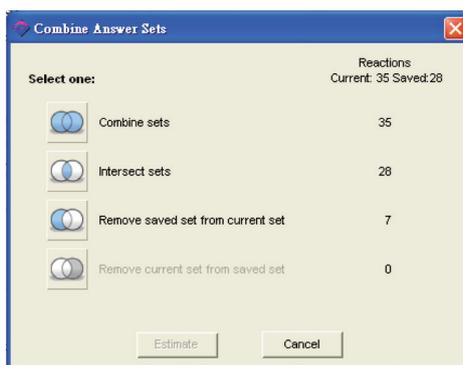
11. 結果顯示共檢索出35筆阿莫西林（Amoxicillin）的合成反應（Active answer set）。可以開始進行組合，按 Combine。



12. 選擇之前儲存的反應檢索結果（6-APA to amoxicillin.sfr），在右邊可預覽其詳細描述，例如進行的檢索和結果數目，選好後按開啟。

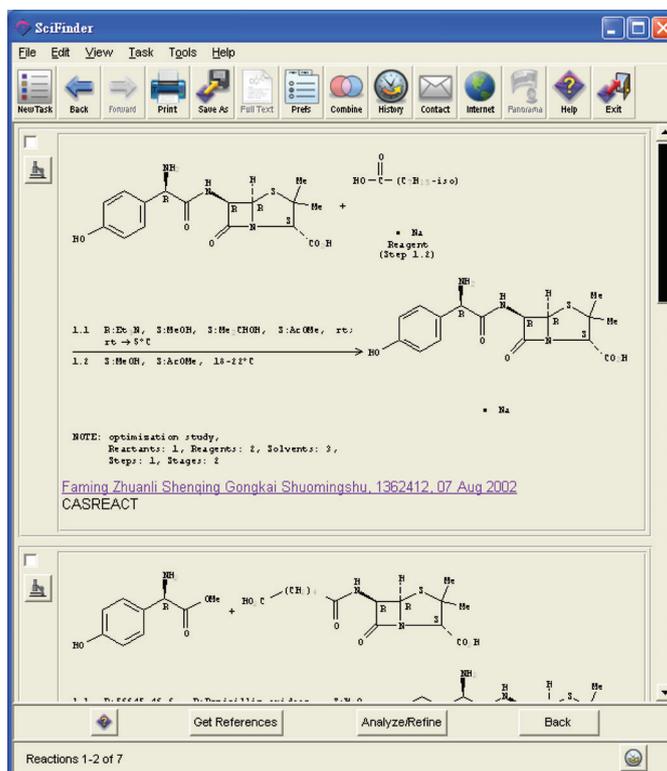


13. 選擇其中一種組合模式，按 Estimate 便可看到預計的組合結果。



14. 選擇 Remove saved set from current set，去除以 6-氨基青霉烷酸（6-aminopenicillanic acid，6-APA）開始的合成。

15. 最後檢索出 7 筆反應途徑。



輸出CHEMCATS 供貨商品目錄資料至Microsoft Excel (Export to Microsoft Excel)

此功能可以將CHEMCATS檢索資料輸出至Microsoft Excel 表格，方便處理、分類和過濾。用戶能更容易地找出合適的供貨商訊息。

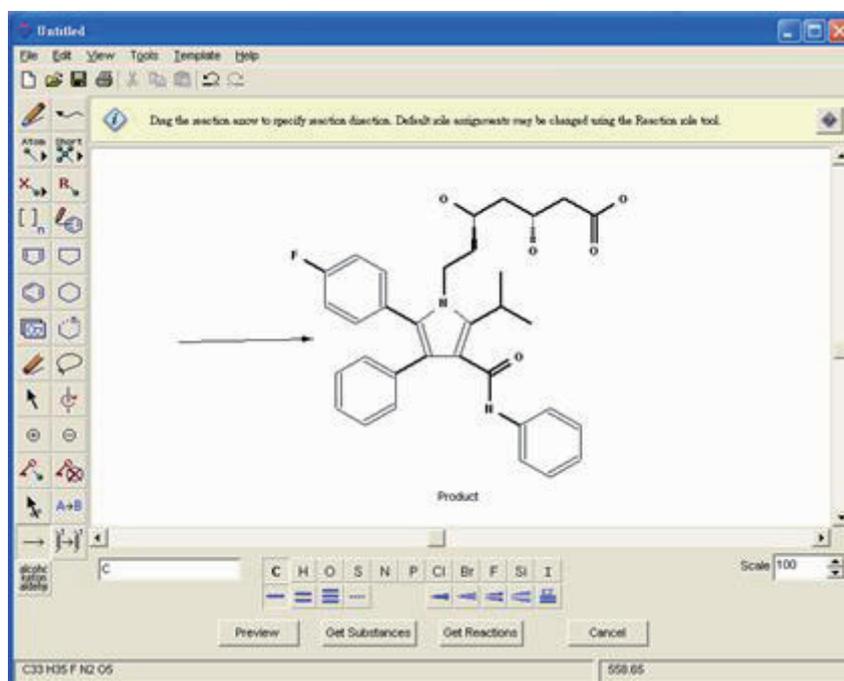
用戶電腦必須已裝好Microsoft Excel軟體。如果沒有，用戶可選擇以下格式儲存。

- ASCII (*.txt)
- Rich Text Format (*.rft)
- Quoted Format (*.txt)
- Tagged Format (*.txt)

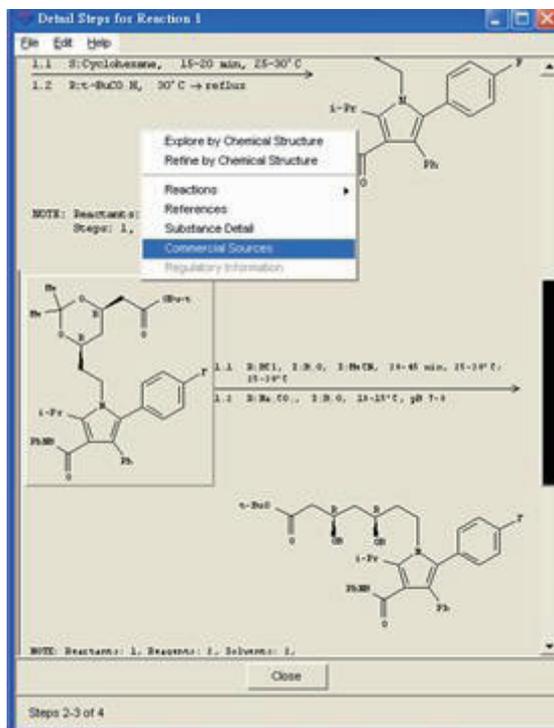
功能使用範例：

查詢降血脂藥阿托伐他汀（Atorvastatin）合成的中間體供應訊息

1. 開始SciFinder，選擇 Explore> Reaction，輸入阿托伐他汀的化學結構。
2. 點選反應箭頭工具，用滑鼠從左至右拖曳，阿托伐他汀會自動被指定為產物。
3. 點選Get Reactions，開始查詢阿托伐他汀（Atorvastatin）的合成。



7. 共檢索出57筆相關反應式。在每一個反應記錄中，用戶可查詢到反應物，詳細反應條件和重點等資料。按連結，則可查詢其文摘。
8. 點選顯微鏡圖像，即顯示多步驟反應式。



9. 如對任何一個物質或中間體有興趣，可用滑鼠右鍵點選反應式，便可繼續查詢該物質的資料。
10. 這個例子中，選擇查看其一個中間體的供貨商資料 (commercial source)。

The screenshot shows a window titled "Sources for 125971-95-1". It lists four different commercial sources for the compound. Each entry includes the catalog name, quantity, publication date, order number, and the full chemical name. The chemical name is: 1,3-Dioxane-4-acetic acid, 6-[2-[2-(4-fluorophenyl)-5-(1-methylethyl)-3-phenyl-4-[(phenylamino)carbonyl]-1H-pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-, 1,1-dimethylethyl ester, (4R,6R)-. The sources listed are Aurora Screening Library, Bosche Scientific Product List, AK Scientific Product Catalog, and ChemPacific Product List. At the bottom, there are buttons for "Export to Microsoft Excel" and "Close".

Catalog Name	Quantity	Publication Date	Order Number	Chemical Name
Aurora Screening Library	milligram quantities	1 Jan 2007	kaef-166650	1,3-Dioxane-4-acetic acid, 6-[2-[2-(4-fluorophenyl)-5-(1-methylethyl)-3-phenyl-4-[(phenylamino)carbonyl]-1H-pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-, 1,1-dimethylethyl ester, (4R,6R)-
Bosche Scientific Product List	N/A	1 Jan 2007	D3216	(4R-cis)-1,1-dimethylethyl-6-[2-[2-(4-fluorophenyl)-5-(1-isopropyl)-3-phenyl-4-[(phenylamino)carbonyl]-1H-pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-1,3-dioxane-4-acetate
AK Scientific Product Catalog	various quantities	19 Dec 2006	835	(4R-cis)-6-[2-[2-(4-fluorophenyl)-5-(1-methylethyl)-3-phenyl-4-[(phenylamino)carbonyl]-1H-pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-1,3-Dioxane-4-acetic acid, 1,1-dimethylethyl ester
ChemPacific Product List				

11. 供貨商資料便會顯示在視窗中。用戶可按顯微鏡圖像查閱詳細的資料。
12. 或選擇 Export to Microsoft Excel，將CHEMCATS資料輸出至Microsoft Excel 表格作整理。用戶可選擇輸出全部資料，也可只輸出選擇的資料。



13. 輸出資料可依 Company Name 公司名 或 Country 國家排列。
14. 最後按 OK，資料便輸出至Microsoft Excel中，用戶便可輕易查看和找出供貨商的相關訊息。點選Excel表中的供貨商連結，便可連結到供貨商網站。

SciFinder								Zip
Chemical Name	Catalog Name	Company Name	Street Address	City	State or Province	Country	Zip	
(4R-Cis)-1,1-Dimethylethyl-6-[2-Fluorophenyl]-5-(1-Methylethyl)-3-Phenyl-4-[(Phenylamino) carbonyl]-1H-Pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-Dimethyl-1,3-Dioxane-4-Acetate	Hongda Group Product List	Hongda Group Limited	29 Dongshu Road Rm A12 5F Ningbo World Trade Centre Bldg	Ningbo		People's Republic of China	31500	
(4R-cis)-6-[2-[2-(4-fluorophenyl)-5-(1-methylethyl)-3-phenyl-4-[(phenylamino)carbonyl]-1H-pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-1,3-Dioxane-4-acetic acid, 1,1-dimethylethyl ester	AK Scientific Product Catalog	AK Scientific, Inc	897-4G Independence Ave.	Mountain View	CA	USA	94043	
(4R-cis)-1,1-dimethylethyl-6-[2-[2-(4-fluorophenyl)-5-(1-isopropyl)-3-phenyl-4-[(phenylamino)carbonyl]-1H-pyrrol-1-yl]ethyl]-2,2-dimethyl-1,3-dioxane-4-acetate	Agno Pharma Product List	Agno Pharma	683 N. Mountain Road	Newington	CT	USA	06111	
1,2-Dioxane-4-acetic acid	The Top Company Product	The Top Co	100 Lehigh Ave	Mount	DE	USA	19071	

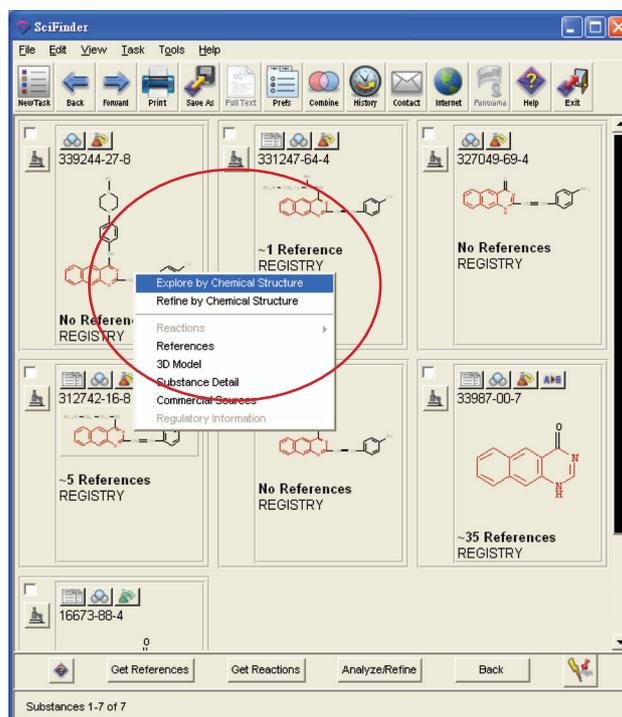
從物質進一步進行檢索（Quick Explore of Substance）

SciFinder 提供兩種方法從物質開始作進一步的檢索：

1. 複製（Copy）和貼上（Paste）CAS登錄號到繪圖視窗，便可將該結構輸入。
2. 按結構圖像，SciFinder 便會開啟繪圖視窗並自動粘貼結構（這是SciFinder 2007 的新功能！）此功能的好處是可以用物質結構答案作新的檢索或篩選。此外，可以節省繪製複雜結構的時間。

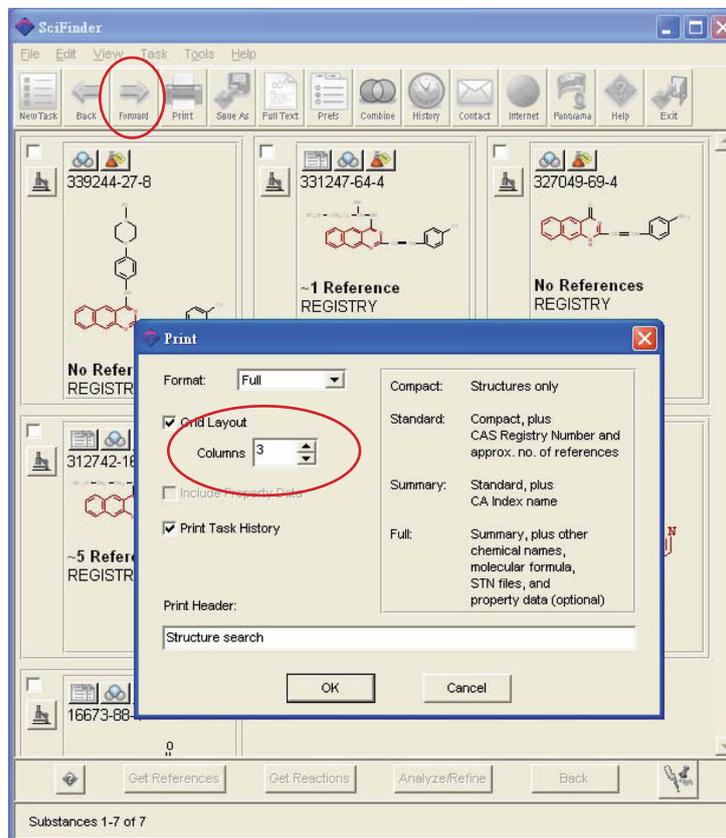
從結構圖像作進一步的檢索

1. 點選任何一個結構圖像顯示（在物質，文獻或反應檢索得到的結構），SciFinder 便會顯示內容清單。如果點選結構是多成份物質的其中一種成份，用戶可選擇查詢那種成份或整個物質。
2. 選擇 Explore by chemical structure，開啟繪圖視窗並自動粘貼結構，進行新的結構檢索。
3. 選擇 Refine by chemical structure，開啟繪圖視窗並自動粘貼結構，以使該結構再作篩選。



列印物質檢索結果 (Substance Pint Grid Format)

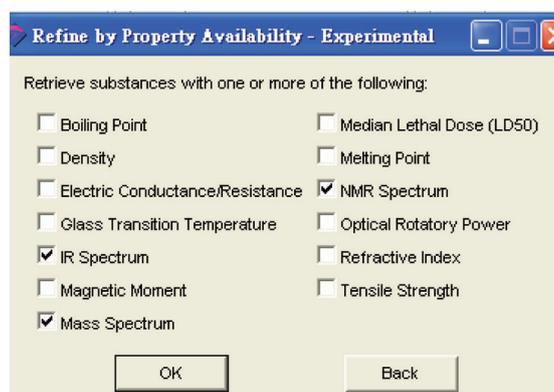
以表格形式列印物質檢索結果，方便查看。點選 Print > Grid Layout，也可選擇列印欄的數目。每次最多可印四列。



以圖譜形式進行顯示和篩選 (Display and Refine by Spectra)

從物質記錄中，按實驗物性，便可取得物質圖譜或資料。

透過含有圖譜的資料來篩選物質結果，選取 Analyze/Refine > Refine > Property availability > Any selected experimental property



第一章 SciFinder 結構繪製 (Structure Drawing)

用戶可以化學結構繪製來檢索化學物質和化學反應，找出有關化學物質的特性、文件、供貨商、管制品名單和化學反應等資料。

使用SciFinder可以從以下不同的模式進行檢索。

- 精確結構檢索 (Chapter 2)
- 次結構檢索 (Chapter 3)
- 相似結構檢索 (Chapter 4)
- 化學反應檢索 (Chapter 5)

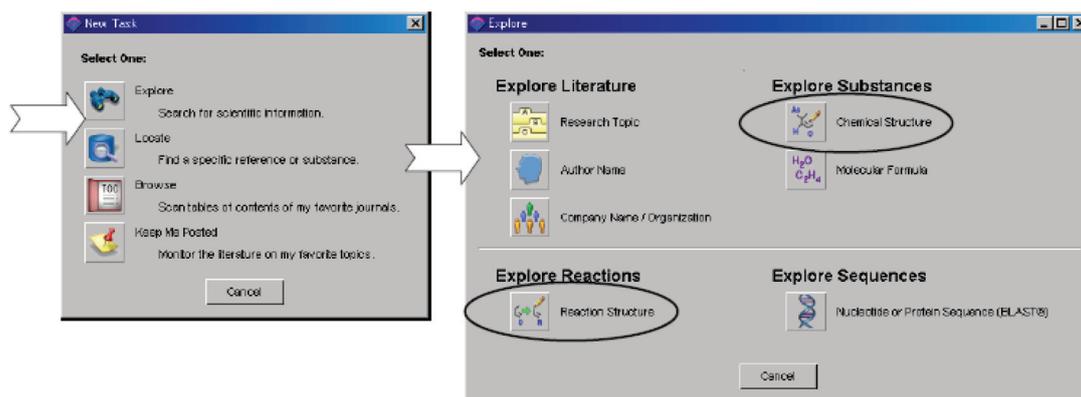
本章節會說明怎麼使用SciFinder的結構繪製。

- 結構繪製視窗
- 結構繪製選單
- 結構繪製工具

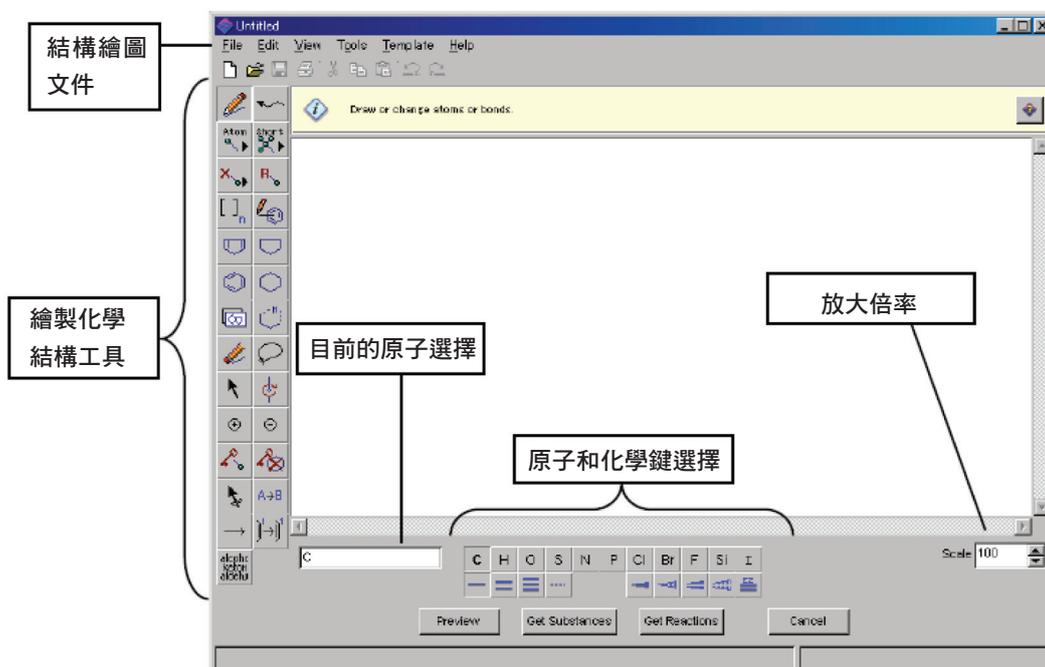
結構繪製視窗 (Structure Drawing Screen)

■ 啟動結構繪製視窗

1. 按下New Task對話框中的Explore，然後選擇Chemical Structure（物質結構）或Reaction Structure（反應結構）。



2. 結構繪製視窗Untitled（未命名）開啟。



■ 結構繪製選單顯示繪製結構所需的工具。



■ 文件選單 (Menu)

文件選單 (File Menu) 有以下基本的結構繪製和視窗控制指令。

選單標題	定義
New	開啟新的結構繪製視窗
Open	打開已保存之結構
Close	關閉結構繪製視窗，並開始新的任務 (New Task) 視窗
Save	保存正在開啟的結構繪製 (不會顯示對話框)
Save as	另存結構，以不同的格式或文件名字保存 (如: MDL molfile)
Revert	取消所有改變，並回復到最後所保存的狀況
Get Substances	搜尋已繪製的化學結構及其相關的物質，包括互變異構體和離子
Get Reactions 	搜尋化學反應
Preview 	預覽結構檢索所得的答案
Print Setup (Windows) Page setup (Macintosh)	設定列印
Print	列印所顯示的結構
Exit SciFinder (windows) Quit (Macintosh)	退出SciFinder

 只適用於反應檢索。

 只適用於有次結構檢索的帳號。

■ 編輯選單 (Edit Menu)

SciFinder的編輯選單擁有標準的編輯功能。

選單標題	定義
Undo	復原之前的編輯情況，能使用多次
Redo	復原到Undo之前的情況
Cut	剪下已選的結構或文件，並保存到剪貼簿
Copy	複製已選的結構或文件到剪貼簿上
Paste	將剪貼簿的內容剪貼到滑鼠所指示的位置
Clear	清除已選的圖或文件
Select All	選擇所有在結構繪製視窗中的資料
Unselect All	不選擇所有在結構繪製視窗中的資料
Clear All	清除在結構繪製視窗中的所有資料
Repaint	更新結構繪製視窗
Delete All Mappings 	刪除所有化學反應中的原子繪圖

■ 看圖選單 (View Menu)

可以在瀏覽選單中選擇不同模式去瀏覽原子結構圖和工具列。

選單標題	定義	原始設定
Dot Atoms	顯示 (或不顯示) 原子	不顯示
Position Number	顯示 (或不顯示) 原子位置數字	不顯示
Status Bar	顯示 (或不顯示) 狀態區的分子式和分子量	不顯示
Show variable attachment positions	顯示 (或不顯示) 可變的原子附加位置	不顯示
Toolbars - Standard	顯示 (或不顯示) 標準工具列	不顯示

注意：Dot Atoms和Position Number不能同時使用。選取其中一項功能會使另外一項功能無效。

可以用SciFinder工具列的Tool> Edit Preference Editor>Drawing選項改變預設值。

■ 工具選單 (Tool Menu) 原子

可以從結構繪製視窗的工具選單 (Tool) 選擇改變SciFinder 的最初設定。可以選擇三大項目：Valency Checking (原子價檢查)，Fix Drawing Angles (固定鍵的角度)，和Fix Drawing Length (固定鍵的長度)。也可以用Edit Preference (編輯選擇) 中的Drawing選項改變這些預設值。

選單標題	定義
Valency Checking	檢查已繪製結構中的原子價
Fix Drawing Angles	固定或改變鍵的角度，可以改變原始設定，只適用於分開繪製的角度
Fix Drawing Length	固定或改變鍵的長度，可以改變原始設定，只適用於繪製鏈或環
Check Overlaps	檢查交疊的鍵結點和鍵
Unlock All Positions	解除所有已被鎖定原子或環取代的鍵結點
Lock All Positions	鎖定所有結構繪製的鍵結點取代
Reverse Shortcut	倒轉已選的快捷模式表示 (如：COOH \longleftrightarrow HOOC)
Flip Horizontal	水平翻轉已選的結構圖
Flip Vertical	垂直翻轉已選的結構圖
Fuse Fragments	融合兩個已選的鍵結點或片段
Edit Preferences...	開啟Preference Editor
Database Settings...	開啟Preference Editor的資料庫 (Database) 設定

■ 模板選單 (Template Menu)

當你從選單中選取模板，便能夠在結構繪製視窗中輕易繪圖。

選單標題	定義
Monocarbocyclic...	由碳原子組成的單環結構
Bicarbocyclic...	由碳原子組成的雙環結構
Polycarbocyclic...	由碳原子組成的多環結構
N-containing...	含有氮 (N) 原子的結構
O-containing...	含有氧 (O) 原子的結構
S-containing...	含有硫 (S) 原子的結構
NOS-containing...	含有氮 (N)、氧 (O) 和硫 (S) 成分的結構
Alkaloid...	生物鹼
Amino Acid...	氨基酸結構
Carbohydrate...	碳水化合物結構
Nucleic Acid...	核酸結構
Steroid...	類固醇結構
Coordination...	配位化合物
Misc...	其它各種各樣的結構
User Defined...	使用者設定的結構模板

如果要設立使用者設定的模板 (User Defined Template)，請將已繪製的結構保存於User_Def活頁夾中。可以從Preference Editor的Drawing選項選擇已保存的活頁夾。

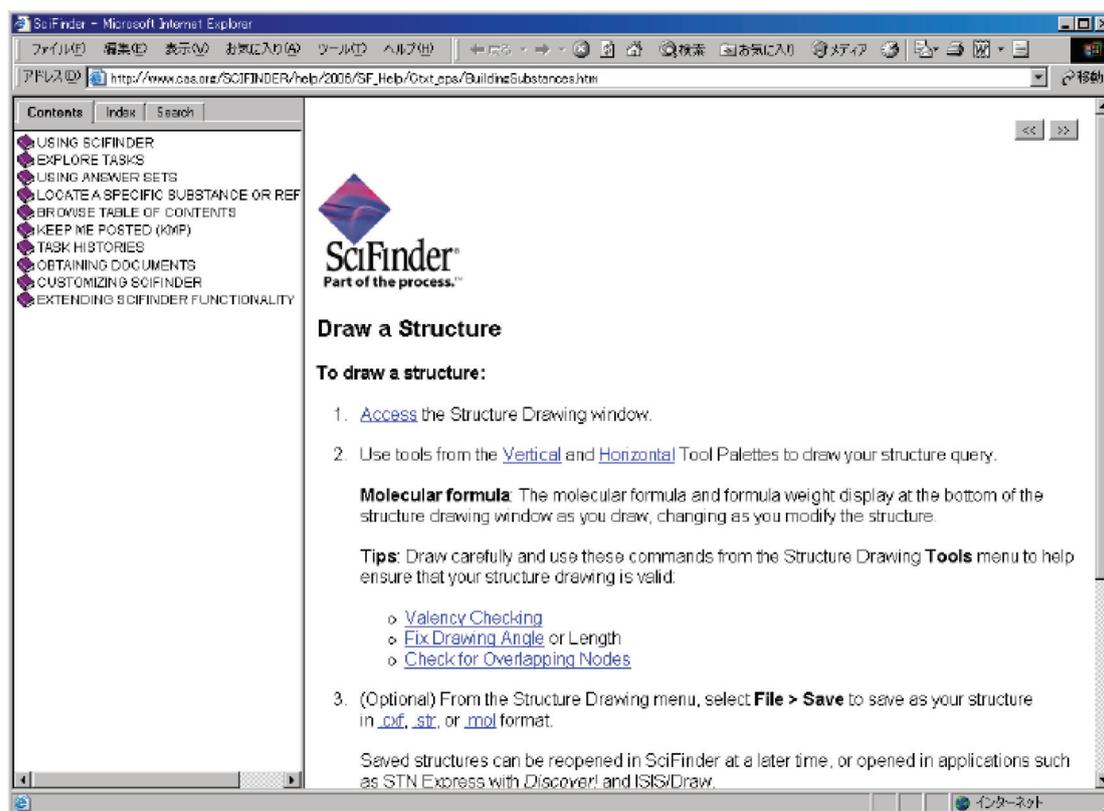
使用「使用者設定模板」的方法與其它模板一樣，從工具列的Template Menu中選取User Defined，並選出你想要繪製的模板，然後按結構繪製視窗。

■ 説明 (Help)

此選單顯示怎樣使用SciFinder和其它訊息。

選單標題	定義
SciFinder Help	開啟SciFinder 使用說明文件
Contents and Index	開啟SciFinder 使用說明內容和索引
Message of the Day	顯示CAS的 "每日消息"
About SciFinder	顯示版權和版本訊息

使用說明的視窗



垂直工具板 (Vertical Tool Palette)

■ 垂直工具板提供繪製和修改化學結構的工具。

要使用工具，先點擊圖標。再點擊結構繪製視窗，繪製內容便會自動顯示。

鉛筆工具			鏈工具
原子選單工具			快捷模式選單工具
X選單工具 ◎			R基團設定工具 ◎
重複單元工具 ○			可變的取代位置工具 ○
環戊二烯環工具			環戊烷環工具
苯環工具			環己烷工具
模板工具			n環工具
橡皮擦工具			套索工具
選擇工具			旋轉工具
正離子工具			負離子工具
鎖定原子取代工具 ◎			鎖定環取代工具 ◎
反應位置工具 ▲			轉換反應角色工具 ▲
反應箭頭工具 ▲			原子配對工具 ▲
官能基工具 ▲			

◎：只可用於次結構檢索或反應檢索

○：只有次結構檢索帳號才能使用

▲：只可用於反應檢索

■ 鉛筆工具 (Pencil Tool)



這是用來繪製鍵結點和鍵。先選擇原子和鍵，點擊鉛筆工具繪製，游標會變成鉛筆形狀，就可以開始繪製。

繪製方法：

1. 將游標按在你想開始繪製的位置。
2. 按下滑鼠左鍵並將游標拖曳至適當的位置，然後放開滑鼠左鍵。



鍵結點和鍵可以從水平的工具板、原子選單、快捷模式選單和X選單工具中選取。也能將原子輸入當前原子框 (Atom Box) (這將在之後解釋)。

更改已繪製的鍵結點和鍵的步驟非常簡單。首先，選擇新的鍵結點或鍵，並且將游標移向你想要更改的鍵結點或鍵，然後按下即完成。

■ 鍵工具 (Chain Tool)



這是用於繪製化學鍵。當你點擊鍵工具繪製，游標會變成鍵形狀。

要繪製化學鍵，先將游標點移至欲開始繪製的位置，然後接著滑鼠左鍵並拖曳滑鼠至你想要的長度。當拖曳化學鍵時，你能從游標旁的顯示中，得知化學鍵的原子數量。完成後放開滑鼠左鍵，此時，化學鍵中所顯示的原子數量將會消失。



注：要改變化學鍵的方向，在繪製時請按Shift鍵。

■ 原子選單工具 (Atom Menu Tool)



Atom	Short																	
H																		He
Li	Be											B	C	N	O	F		Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl		Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br		Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I		Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At		Rn
Fr	Ra	Ac																
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

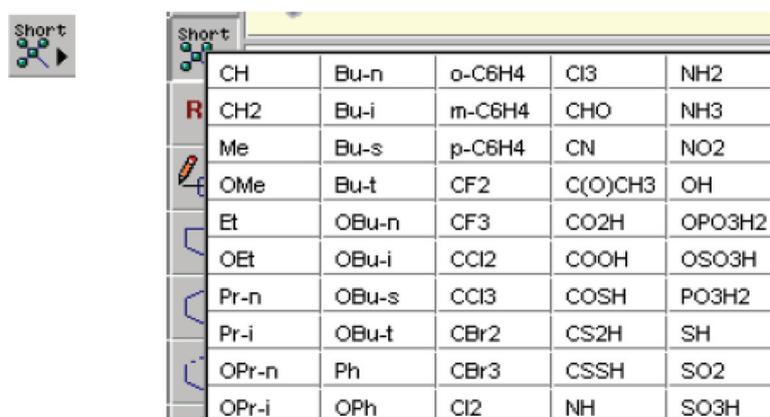
這是用來選擇原子的工具。當點選一個原子後，SciFinder 便會將它設定為預設值 (default)，直到用戶點選其它的原子、短鏈 (shortcut)、R 基團 (R groups)、或官能基 (Functional Group)。當你選取這個工具時，游標會自動的變成鉛筆工具。

當你按下原子選單圖標並持續按著滑鼠左鍵，化學元素週期表將會從原子選單工具中出現。

要選擇原子，先在週期表上拖曳游標到目標原子，然後放開滑鼠的左鍵。被選取的原子將顯示在水平工具板的當前原子框 (Atom Box) 裡。

當你使用鉛筆工具點擊結構繪製視窗或現有的鍵結點時，便會繪製出所選原子。

■ 短鏈選單工具 (Shortcut Menu Tool)



短鏈選單工具可令用戶簡單快捷地繪製結構。SciFinder 會將選取的短鏈設定為預設值 (default)，直到用戶點選不同的原子 (atom)、短鏈 (shortcut)、R 基團 (R groups)、或官能基 (Functional Group)。當你選擇這個工具時，游標會自動地變成鉛筆工具。

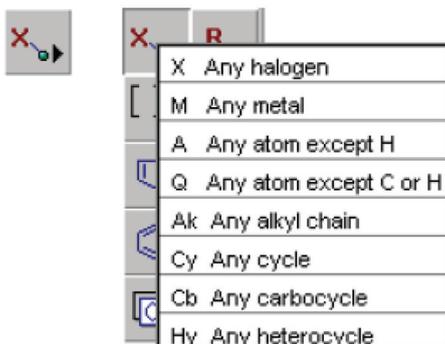
當你按下短鏈選單工具圖標，並持續按著滑鼠左鍵，短鏈選單工具將會出現。

要選取捷徑，先在短鏈選單上拖曳游標到目標短鏈，然後放開滑鼠左鍵。被選取的短鏈將顯示在水平工具板的當前原子框 (Atom Box) 裡。

每當你使用鉛筆工具點擊結構繪製視窗或現有的鍵結點，便會繪製出所選的短鏈。

繪製短鏈後，你可以改變它的方向 (如： $\text{MeO} \longleftrightarrow \text{OMe}$)。先點選在垂直工具板的選擇工具 (Selection tool)，再點選螢幕上的短鏈模式繪製 (這將在以後解釋)，然後從工具選單中選取 Reverse Shortcut (反向短鏈)，短鏈方向便會倒過來。

■ X 選單工具 (X Menu Tool)



用戶可選取X 選單工具內的可變原子，繪製結構作為次結構或反應檢索。SciFinder 會將選取的可變原子設定為預設值 (default)，直到用戶點選不同的原子 (atom)、短鏈 (shortcut)、R基團 (R groups)、或官能基 (Functional Group)。當你選擇這個工具時，滑鼠會自動地變成鉛筆工具。

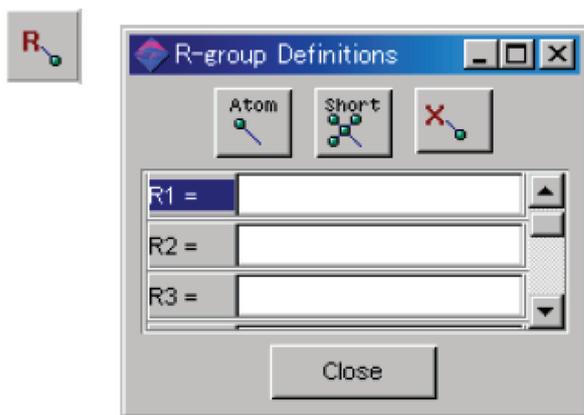
當你按下X選單圖標，並持續按著滑鼠左鍵，可變原子選單將會顯示。

要選擇可變原子，先在選單上拖曳游標到目標可變原子，然後放開滑鼠左鍵，被選取的可變原子將顯示在水平工具板的當前原子框 (Atom Box) 裡。

每當你使用鉛筆工具點擊結構繪製視窗或現有的鍵結點，便可繪製出可變原子。

在SciFinder預設值 (default) 中，Ak被正方格鎖著，表示Ak已被鎖定不能取代。在這情況下，Ak的檢索只適用於直、分支、或不飽和的碳鏈。如想解除Ak的取代鎖定，只需按下鎖定原子取代工具 (Lock Out Substitution) 並移動滑鼠選取Ak，鎖著Ak的正方格便會消失，此時使用者可查詢Ak在結構中是否有不同的取代基。(鎖定和解除取代作用的詳情，請參閱Lock Out Substitution的部份)。

■ R基團工具 (R Group Tool)



用戶可選取R基團工具，並設定R基團，繪製結構作為次結構或反應檢索。在同一次R基團設定中，最少輸入兩個項目 (最多是10個)。

當你點擊R基團工具 (R Group Tool)，R-group Definitions Box (R基團設定框) 便會出現。SciFinder 會將R1設定為預設值 (default) 直到不同的原子、短鏈 (shortcut)、R基團 (R groups)、或官能基 (Functional Group) 被選擇。

先點擊在R基團設定框 (R-group Definitions dialog box) 中原子 (atom)，短鏈 (Short) 或 X選單 (X) 的圖像，並選取要設定為R基團的項目，如選擇多個項目，可用逗號將項目分開。

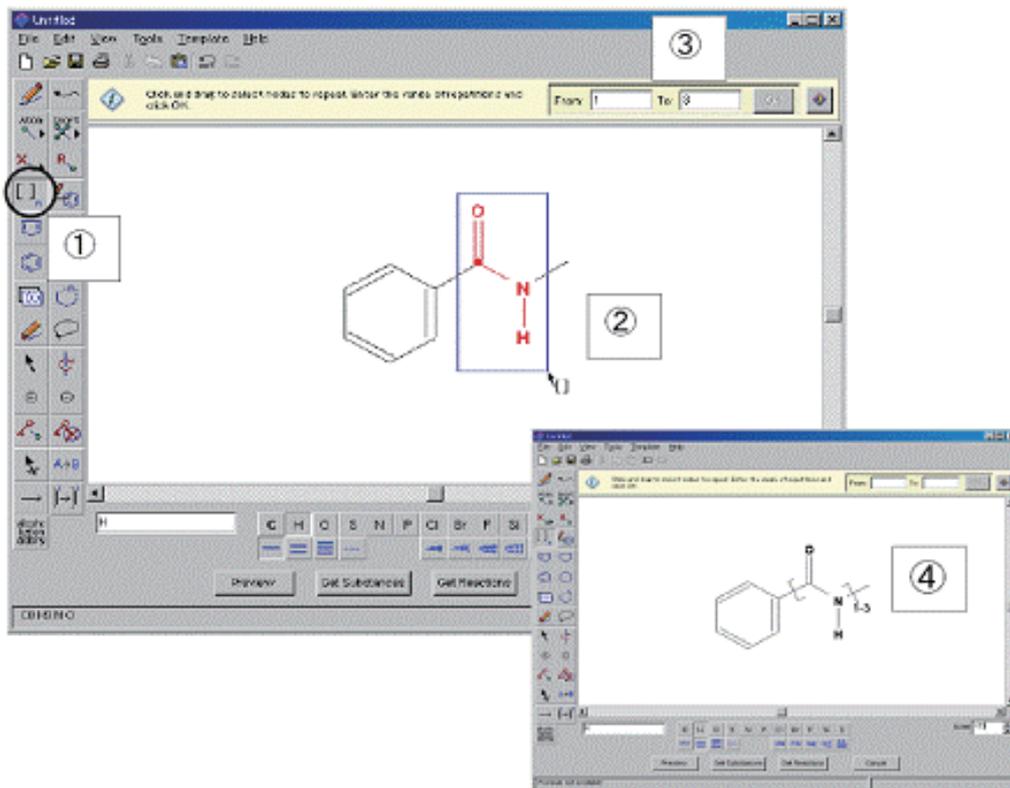
當你需設定其它R基團，移動滑鼠至R2、R3等。最多可設定10個R基團。

如要將R基團繪製到結構中，必須在R基團設定框內選取R基團，並且用鉛筆工具將它加到結構中。

■ 重複單元工具 (Repeat Group Tool) (只適用於有次結構檢索的帳號)

 本工具是用來繪製重複的單元結構。

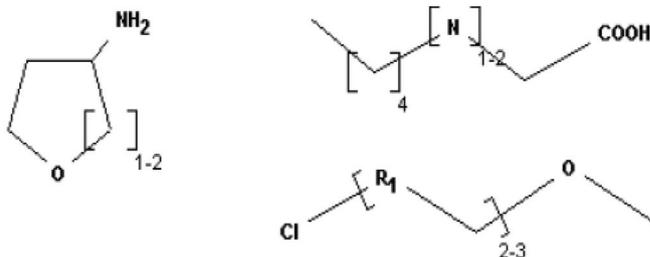
1. 在繪製基本的結構之後 (包括重複的部份)，點選重複單元工具圖標 (Repeat Group Tool)。
2. 拖曳游標並圈選重複的部份。選取的部份會顯示為紅色。
3. 在位於繪製螢幕上方的From: To: 框中輸入需重複單元的數目，然後按OK。
4. 括號會在重複單元中出現，並在括號下顯示重複單元的數目。



注意：重複單元工具的限制

- 重複單元的數目需在0至20之內
- 不適用於Ak 單元
- 不適用於立體鍵
- 只用於反應檢索在重複單元內，不能包括原子定位atom mapping和反應位置reaction site的設定
- 作精確結構Exact Structure或次結構Substructures檢索時，需在From: 和To: 框中輸入一樣的數值，如From: 2, To: 2)。

圖例



■ 可變的取代位置工具 (Variable Attachment Position Tool) (只適用於有次結構檢索的帳號)



本工具是用於定義取代基與環上多個點中的任何一個鍵。

1. 在繪製基本的結構和取代基之後，點選可變的取代位置工具圖標 (Variable Attachment Position Tool)。
2. 點擊及拖曳取代基至取代位置，可取代之位置或點將顯示為紅色，在取代基和取代位置之間會出現一筆虛線。
3. 當放開滑鼠左鍵，一筆實線將出現在環中間和取代基團之間，即標示出可變的取代位置。
4. 要標示多個取代位置，重複步驟②和③，執行此工具至少須要2個取代位置被設定。

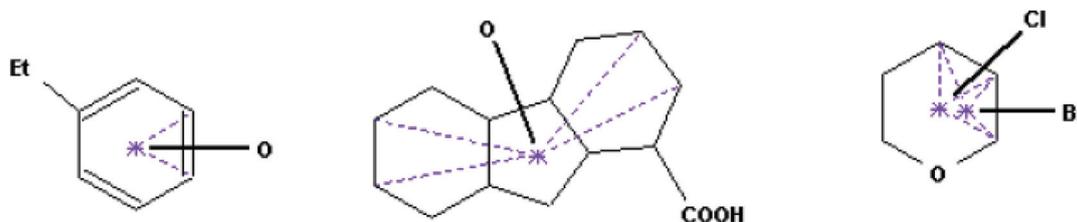
The figure consists of three overlapping screenshots of the SciFiner software interface, illustrating the steps to use the Variable Attachment Position Tool on a benzamide structure.

- Screenshot 1:** The software window shows the toolbar with the Variable Attachment Position Tool icon (a pencil and a hexagon with a red dot) circled and labeled with a circled '1'.
- Screenshot 2:** The tool is used to click on the carbonyl carbon of the benzamide structure. A red dot appears at the carbon atom, and a dashed line connects it to the ring. This step is labeled with a circled '2'.
- Screenshot 3:** The final result shows a solid line connecting the carbonyl carbon to the ring, indicating a variable attachment position. This step is labeled with a circled '3'.
- Screenshot 4:** The tool is used to click on another position on the benzene ring. A red dot appears at that position, and a dashed line connects it to the ring. This step is labeled with a circled '4'.

使用可變的取代位置工具需注意事項：

- 取代基最多為20個。
- 只能選擇環系統中的其中一個環或一個鍵結點，作為取代基的鍵結點。如鍵結點在鏈、連環或環系即無法被選擇。
- 可繪製多個取代基，然後個別地指定出它可變的取代位置。
- 可使用鎖定取代工具（Lock Out Substitution）鎖定取代。
- 取代位置必須為非金屬原子、X（鹵素原子）、Q（除了碳和氫原子）和A（除了氫原子）。
- 可鎖定可變的取代位置（Lock Out Substitution）。
- 不能指定環和取代基之間的立體鍵（但能指定單鍵、雙鍵、三鍵、或未指明的鍵）。
- 在反應檢索中，可將環和取代基之間的鍵設定為反應位置。

圖例



■ 環戊二烯環工具（Cyclopentadien ring Tool）



本工具用以繪製環戊二烯環。

先按工具圖標，並在結構繪製視窗中移動及按滑鼠。

若要在現有的鍵結點或鍵加上環結構，只需將游標移至該鍵結點或鍵，並按一下即可。

按滑鼠左鍵拖曳，便能夠轉動環。當你放開滑鼠左鍵，環的方向將被固定。

■ 環戊烷環工具（Cyclopentane ring Tool）



這是用來繪製環戊烷環。使用說明與繪製環戊二烯環工具一樣。

■ 苯環工具（Benzene ring Tool）



這是用來繪製苯環。使用說明與繪製環戊二烯環工具一樣。

■ 環己烷環工具 (Cyclohexane ring Tool)



這是用來繪製環己烷環。使用說明與繪製環戊二烯環工具一樣。

■ 模板工具 (Template Tool)



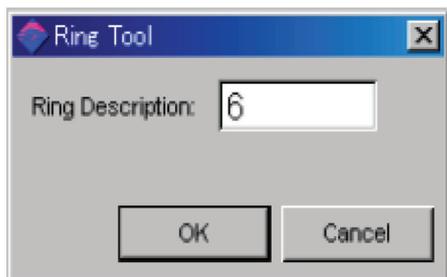
這是用來繪製從模板選單 (Template) 中選取的模板。在選取模板之後，此功能才會有效。

在工具列的模板選單 (Template) 中選取任何模板結構，模板表將會顯示出來，點選所需的結構，模板表便會消失。

在結構繪製視窗中點擊，便會加入選擇的模板結構。

不能將模板結構與現有的鍵結點或鍵連接起來。

■ n 環工具 (n ring Tool)



這是用來繪製一個由 3 至 15 個碳原子所組成的單環。只要點選圖標，n 環工具對話框便會出現。

單環的預設為 6，可輸入 3 至 15 之間任何一個數字，並按 OK，游標的形狀將變成 n 環工具。

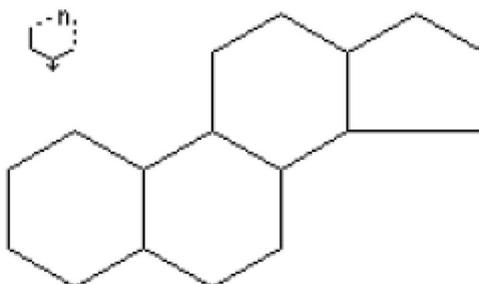
要繪製環，先將滑鼠移動至結構繪製視窗及點擊。

若要將環與現有的鍵結點或鍵連起，只需將游標移動至該鍵結點或鍵，並按一下即可。

按著滑鼠左鍵拖曳，便能夠轉動環。當你放開滑鼠鍵，環的方向將被固定。

使用 n 環工具，可容易地繪製一個由 4 -、5 -、6 - 環構成的環系。在對話框中加入 U (向上) 或 D (向下) 可以選擇改變環系的方向，預設值的方向是從左到右。

例如，繪製一個類固醇環系統，在對話框中輸入“66U6D5”，並在結構繪製視窗上移動滑鼠及點擊，以下的結構便繪製出來。



■ 橡皮擦工具 (Eraser Tool)



這是用來刪除在結構中的鍵結點或鍵。當按下橡皮擦工具圖標，游標會變成橡皮擦形狀。

要刪除鍵結點，先將游標移動至鍵結點及顯示它們，再按滑鼠左鍵，之後此鍵結點與其連接的鍵將被刪除。

要刪除鍵，先將游標移動至鍵的中心位置，顯示然後按下滑鼠左鍵，便可以刪除。

■ 套索工具 (Lasso Tool)



這是用來選擇結構和結構片段。能移動 (Move)、剪下 (Cut)、複製 (Copy)、或刪除 (Delete)，並可從工具選單 (Tools) 中選取 Reverse Shortcut (反向短鍵)，短鍵方向便會倒過來。

選擇並按下套索工具圖標，游標就會變成套索形狀。

在結構附近按著滑鼠左鍵，拖曳游標包圍著結構，之後放開滑鼠左鍵。

要移動已選取的部份，在已選擇的範圍之內移動游標，此時游標會變成手的形狀。按著滑鼠左鍵並拖曳結構至適當位置。

要刪除已選取的部份，從編輯選單 (Edit Menu) 中選取剪下 (Cut) 或清除 (Clear)，或按 <Delete> 鍵。若選擇剪下，被刪除的結構會先被複製到剪貼簿 (Clipboard) 上。要貼上已選取的結構，在編輯選單中選取 Paste (貼上)。

要選擇鍵結點，可在鍵結點的末端作點擊，所選取的鍵結點將被突出顯示成正方形。

■ 選擇工具 (Selection Tool)



這是用來選擇鍵結點、鍵、片段和整個結構。能移動 (Move)、剪下 (Cut)、複製 (Copy) 或刪除 (Delete)。並可從工具選單中選取反向短鍵 (Reverse Shortcut)，短鍵方向便會倒過來。

要使用選擇工具，首先點選選擇工具圖標，游標會變成箭頭的形狀。在鍵結點或鍵上移動箭頭，並按下突出顯示已選取的項目。

如要選擇多個鍵結點和鍵，可按著 Shift 鍵同時點選，每個點選的項目將被突出顯示。

若要快捷地選取多個鍵結點和鍵，先按著滑鼠左鍵，並拖曳至需選取的部分。當放開滑鼠左鍵時，方形框中的所有項目將被選取。

想要選擇整個結構，在結構的任何部份按兩下。

若要移動被突出顯示的部份結構，將箭頭的尖端移向此部份，按下滑鼠左鍵並拖曳所選項目至適當位置，然後放開滑鼠左鍵，被突出顯示的部份將被移動。

移動整個結構的方法同上。突出顯示整個結構，並在結構的任何部份上按下滑鼠左鍵並拖曳所選項目至適當位置，然後才放開滑鼠左鍵。

從編輯選單中選取剪下 (Cut)，便可剪下所選取的項目，被剪下的項目會貼到剪貼簿上。

從編輯選單中選取複製 (Copy)，便可複製所選取的項目，被選取的項目會貼到剪貼簿上。

若要刪除選擇的項目，只要按 <Delete> 鍵便可。

想要反轉短鏈 (如： $\text{MeO} \longleftrightarrow \text{OMe}$)，先突出顯示短鏈，並從工具選單中 (Tools) 選取 Reverse shortcut。

要取消突出顯示，在結構繪製視窗中，點選已選取項目以外的任何一個地方便可。

■ 旋轉工具 (Rotation Tool)



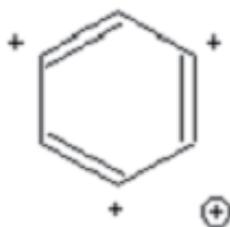
以某特定的鍵結點為中心點，順時針或逆時針地轉動結構。

要轉動結構，首先點選旋轉工具圖標。滑鼠會變成像繪製的形狀。選擇轉動的鍵結點中心並按下滑鼠左鍵，之後拖曳轉動。

■ 正離子工具 (Positive Ion Tool)



正離子工具是用來放置正離子 (+) 在鍵結點上。當選擇圖標，游標會變成如圖標的形狀。



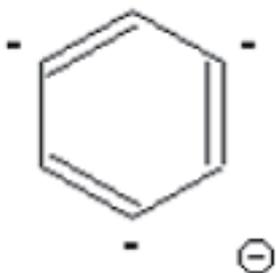
想要在鍵結點加上一個正離子，先按下正離子工具圖標及鍵結點。持續點擊便可增加正離子的數量。

若要減少正離子的數量，請使用負離子工具。

■ 負離子工具 (Negative Ion Tool)



負離子工具是用來放置一個負離子 (-) 在鍵結點上。當選擇圖標，游標會變成如圖標的形狀。



想要在鍵結點加上一個負離子，先點選負離子工具圖標及鍵結點。持續點選便可增加負離子的數量。

若要減少負離子的數量，請使用正離子工具。

■ 鎖定原子取代工具 (Lock Out Atoms Tool)

SSM

RXN



在結構檢索或反應檢索中，鎖定原子取代工具能禁止原子取代。

想禁止原子取代，首先按鎖定原子取代工具圖標，游標會變成如圖標的形狀。

用游標的尖端點選鍵結點，該鍵結點便會被正方形包圍，可鎖定多個鍵結點。

■ 鎖定環取代工具 (Lock Out Rings Tool)

SSM

RXN



在次結構檢索或反應檢索中，此工具禁止環取代，同時可以禁止鍵變成為環的一部份。

要禁止環取代，首先點選鎖定環工具圖標。游標會變成如圖標的形狀。

將游標的尖端對準鍵結點，點選並且突出顯示它

■ 反應位置工具 (Reaction Site Tool)

RXN



在反應檢索中，反應位置工具把反應位置的鍵進行標記。當按下圖標，游標會變成如圖標的形狀。

先按下反應位置工具圖標，點選並且突出顯示反應位置的鍵，鍵會被畫上垂直的雙重線以作標記。

你可以在反應式中標出多個反應位置，這可以縮小答案數量，作更準確的檢索。

■ 反應角色工具 (Reaction Role Tool)



在反應檢索中，反應角色工具用來設定反應物／試劑、產物、或任何一個在反應中的角色。

設定角色，先按反應角色工具圖標，並使游標對著結構，然後點選。當反應角色對話框出現，選擇角色並按OK，反應角色將會在結構之下顯示。

想要轉換指定角色，再點選反應角色工具圖標，並移動滑鼠至欲轉換角色的結構。按下滑鼠後反應角色對話框將會出現，然後選擇不同的角色並點選OK，新角色將會在結構之下顯示。

用箭頭工具，可以自動地設定角色為反應物／試劑、產物。

如果你不想設定任何角色，請選取任何一個角色 (Any Role)。

■ 箭頭工具 (Arrow Tool)



箭頭工具用於反應檢索，和指定在結構繪製視窗中的化學反應角色。

按箭頭工具圖標來繪製反應箭頭，游標會變成對水平線的箭頭。在適當位置按下滑鼠左鍵，並將游標拖至反應的方向。

如果在結構繪製視窗中已有一個結構，在加上箭頭的位置後，反應角色會自動地被指定，現有的角色也將被重寫。若要改變自動設定角色，請使用之前介紹的反應角色工具。

■ 原子配對工具 (Atom Mapping Tool)



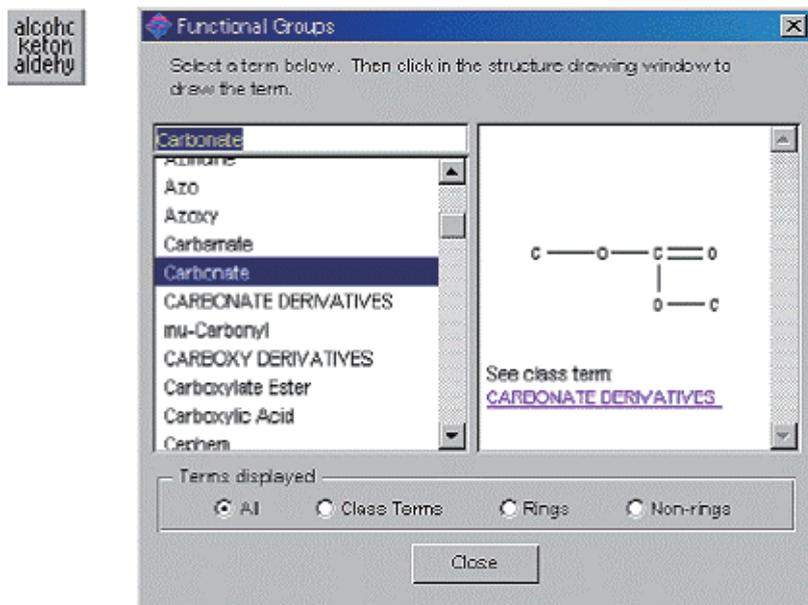
在反應檢索中，原子配對工具使用於指定反應物和產物的原子配對位置。反應物和產物的原子配對數將由1開始。

想要指定原子配對，首先繪製反應物和產物，然後按原子配對工具圖標。當點選圖標後，游標會變成如圖標的形狀。將游標尖端對著和點選反應物的鍵結點，便能指定配對位置，相同的數字將會被標記在產物的鍵結點上。

要改變或刪除配對，先選擇橡皮擦工具。

你可以在反應式中標出多個原子配對，這可縮小答案數量，作更準確的檢索。

■ 官能基工具 (Functional Group Tool)



使用官能基工具，你能以官能基名字來繪製反應。當按下官能基工具圖標時，官能基的對話框將會出現，然後選取你想要搜尋的官能基。當選取官能基時，它的結構將會出現下右邊。

你能使用反應角色工具和箭頭工具將角色設定到官能基。還有，你可選取「沒有反應」(non-reacting) 作為角色。

你也能以官能基和結構作檢索組合。請參考第五章有關官能基反應檢索。

水平工具板 (Horizontal Tool Palette)

水平工具板提供一般原子和鍵的結構繪製。繪製結構的分子式和分子量也顯示在指示框內。



■ 當前原子框 (Present Atom Box)

當前原子框顯示目前選擇的原子、短鍵、可變原子、R 基團或官能基。當在結構繪製視窗上繪圖，表示在當前原子框中的標誌將會出現。C (碳) 為預設值。

想要改變在結構繪製視窗中的原子：

1. 使用原子選單、短鍵選單、X選單工具或在當前原子框中輸入原子。
2. 使用鉛筆工具在你想改變的鍵結點上點選，鍵結點會變為在當前原子框中的原子。

■ 常用原子板 (Common Atom Palette)

常用原子板包括結構繪製中時常被使用的原子。當點選原子繪製，此原子將會變成預設值，並顯示在當前原子框中。

■ 鍵板 (Bonding Palette)

鍵的類型有：單鍵、雙鍵、三鍵和任何鍵。預設值為單鍵。

當在板中按鍵圖標，鍵會成為預設值。選擇“任何鍵”表示所有可能的鍵類型。

在結構繪製視窗中改變鍵類型：

1. 從鍵板中選取你想要的鍵。
2. 移動滑鼠，按下突出顯示鍵，鍵將會改變。

■ 立體鍵板 (Stereo Bond Palette)

這是用來指定鍵結構中的立體異構或不對稱碳原子的構像。鍵的類型包括：向前的立體單鍵、向後的立體單鍵、向前的立體雙鍵、向後的立體雙鍵和“E、Z 幾何雙鍵”。

當點擊板上的圖標，鍵會設定為預設值並被突出顯示。使用 Get Substances 搜尋含有立體鍵的結構時，SciFinder 會自動分析立體結果 (Stereo Analysis) 如下：

The screenshot shows the SciFinder interface with a chemical structure of a substituted alcohol. Below it, the 'Stereo Analysis' dialog box is open, displaying a histogram of results. The dialog box has a title bar 'Stereo Analysis' and a menu bar 'File Edit Task Tools Help'. A text box at the top right says 'SciFinder 會自動分析立體結果'. Below this is a section 'Select Histogram Entries of interest:' with a list of categories and their counts, each with a blue bar representing the count. The categories are: 'Absolute stereo match' (237), 'Absolute stereo mirror image' (30), 'Relative stereo match' (48), 'Stereo that doesn't match query' (47), and 'No stereo in answer structure' (252). At the bottom of the dialog are 'Get Substances' and 'Back' buttons. On the left side of the dialog, there are four Chinese labels with arrows pointing to the corresponding histogram bars: '相同立體結構' (Same stereo structure) points to 'Absolute stereo match'; '完全鏡像的立體結構' (Completely mirrored stereo structure) points to 'Absolute stereo mirror image'; '部分立體結構相配' (Partially matching stereo structure) points to 'Relative stereo match'; and '沒有立體結構相配' (No matching stereo structure) points to 'Stereo that doesn't match query'. The bottom of the dialog shows 'Histogram Entries 1-5 of 5'.

Category	Count
Absolute stereo match	237
Absolute stereo mirror image	30
Relative stereo match	48
Stereo that doesn't match query	47
No stereo in answer structure	252

■ 指示放大框 (Indicated Magnification Box)

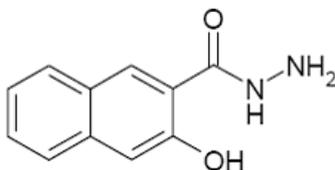
指示放大框能夠把結構繪製視窗放大縮小。預設值是100%，要改變指示的放大率，只要在指示放大框中按下Enter，然後輸入新的放大率，您可以改變指示的放大率從25% 至400% 之間。

■ 分子式／分子量 (Molecular Formula / Molecular Weight)

目前繪製的結構分子式和分子量將會顯示在水平工具板底部。

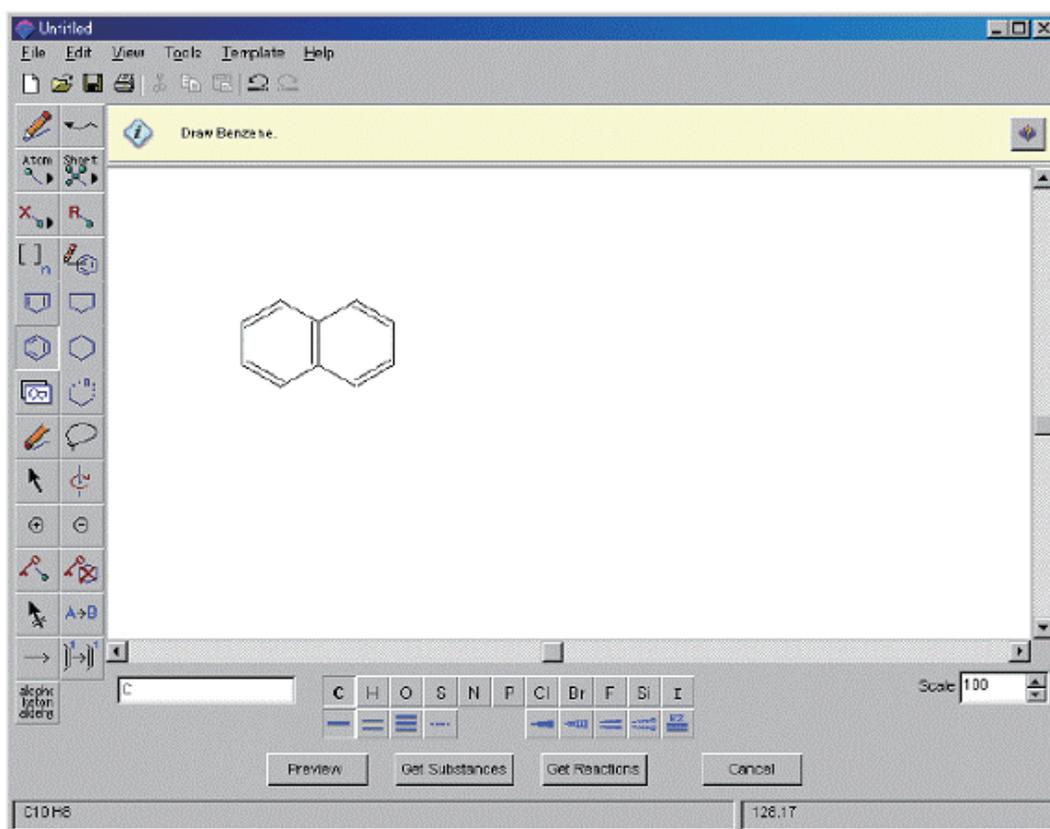
結構檢索 (The Structure Query Drawing)

圖例



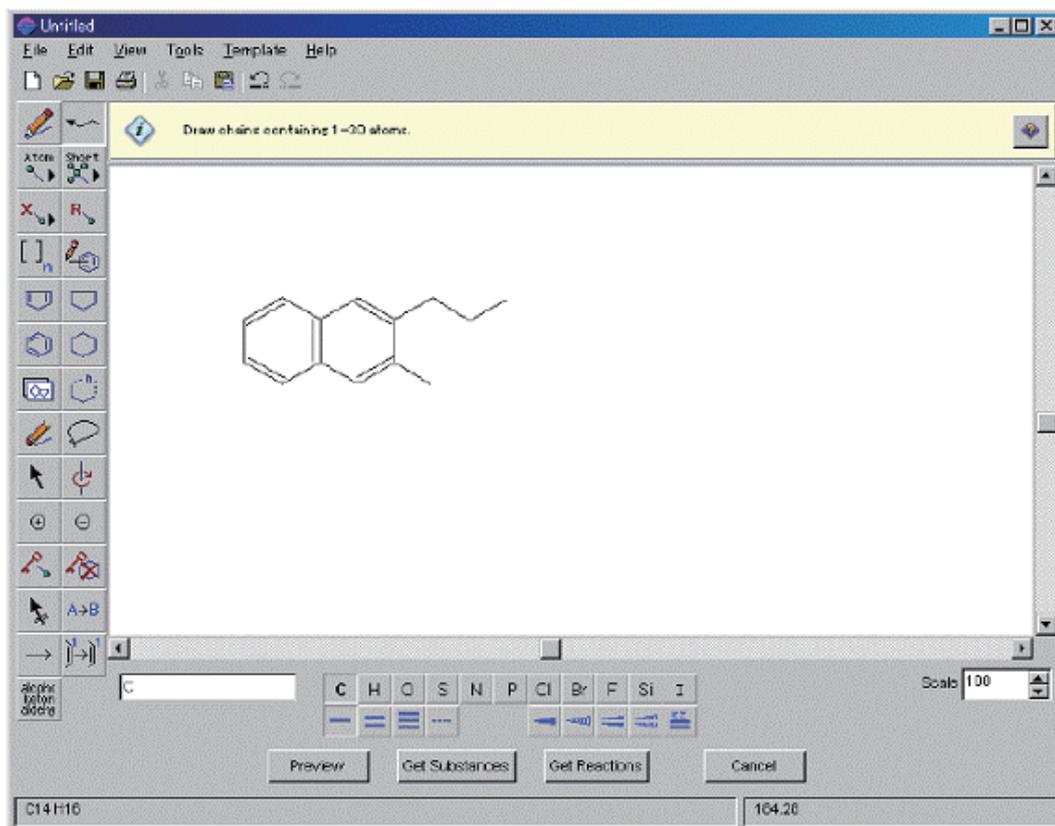
■ 步驟1 — 使用苯環工具繪製環結構

- 從垂直工具板選取苯環工具繪製。
- 在結構繪製視窗中繪製苯。
- 若要繪製雙環，先將游標移至已繪製的苯環右邊之垂直雙鍵並加以點擊，將苯環連合。



■ 步驟2 — 使用鍵工具

- 點選鍵工具圖標。
- 拖曳游標至右邊，直至鏈的長度達至3個碳原子，放開滑鼠左鍵，碳原子將被單鍵所連接。
- 將鏈狀游標放在右下邊的鍵結點上，並拖曳至右邊直到鏈長度達至1個碳原子，然後放開滑鼠左鍵。



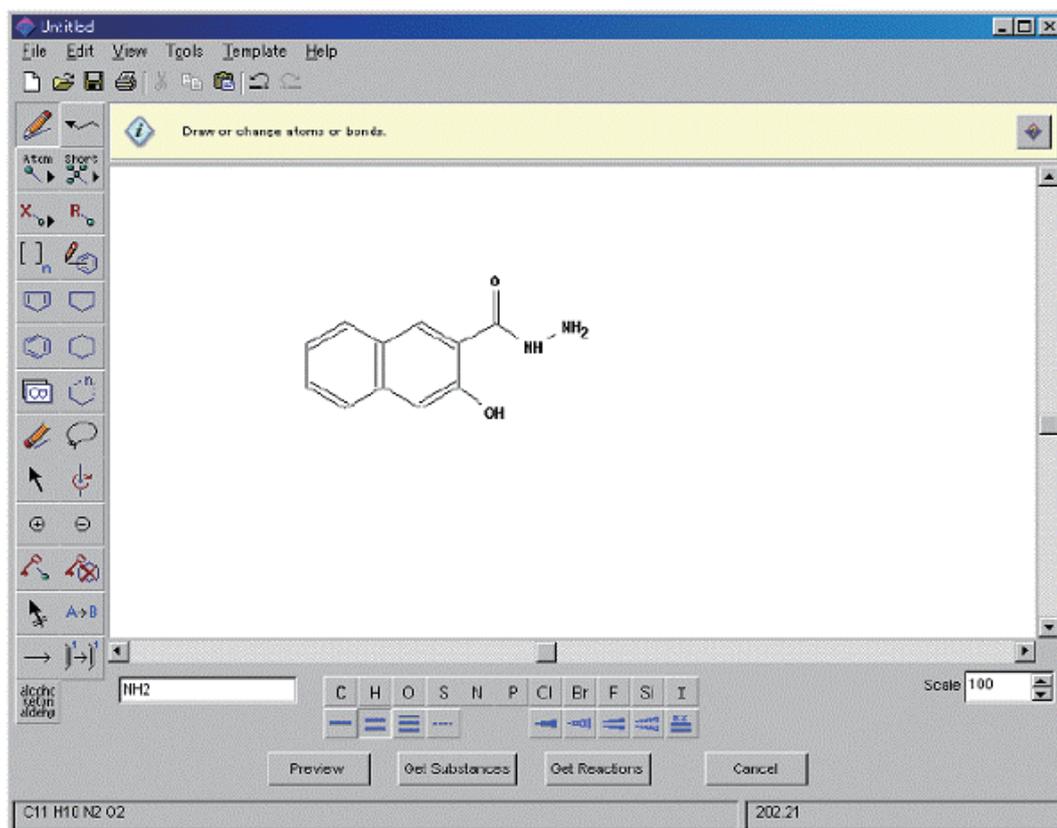
■ 步驟3 — 繪製一個雙鍵

- 在水平工具板點擊雙鍵圖標，游標變成鉛筆工具。
- 將鉛筆狀游標的尖端對著丙基基團中（苯環旁邊）的鍵結點，拖曳游標直至鏈的長度達至1個碳原子，一個雙鍵將被增加。

第二個方法是根據上述再多繪製一個單鍵，單鍵將變成一個雙鍵。

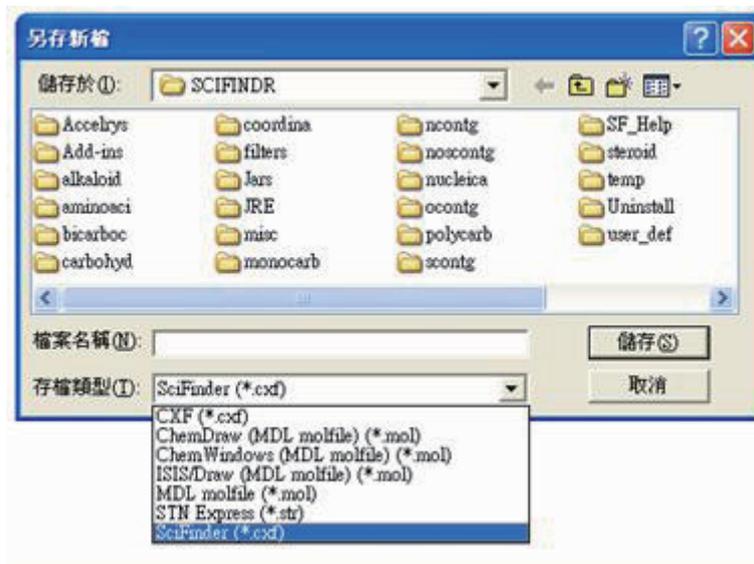
■ 步驟4 — 繪製原子

- 在當前原子框輸入符號“NH₂”以表明氨基，氨基將成為新的預設值。
- 將鉛筆圖標尖端放在丙基基團的末端並點擊，原子將被NH₂取代。（若在垂直工具板裡點選短鏈選單工具，你也能選取NH₂。詳情請參見短鏈選單工具。）
- 可運用同樣方法取代丙基基團鍵結點為NH，和取代甲醇基的末端鍵結點為OH。



結構的存檔與再使用 (Save and Reuse Structure)

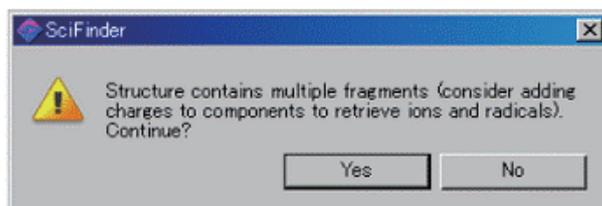
你能存檔由SciFinder所繪製的結構，並在SciFinder或其它應用系統中使用它。從繪製視窗中的文件選單中選取Save或Save As...時，對話框將會出現。從視窗下方的「存檔類型」拉下選單，選取文件格式，輸入指定名稱並按保存。



當存檔後，你可以在SciFinder 或透過其它應用系統中開啟並再使用此結構文件。

檢索多個結構片段 (Search Multiple Fragments)

當檢索多個結構片段和元素時，只需在繪製視窗一次繪製多個結構片段。當按下Get Substances，如下圖所示的警告將會出現（詳情請參閱下個單元）。如果你希望繼續搜尋，請按「Yes」。



第二章 精確化學結構檢索 (Exact Chemical Structure Search)

當畫好結構後，用戶可用精確化學結構檢查查詢有關物質，並且分析其結構結果。使用這個檢查查詢可搜尋以下的物質：

與已繪製的化學結構相同：

- 構造異構體
- 互變異構體（包括酮-烯醇互變異構體）
- 配位化合物
- 離子化合物
- 原子基和離子基
- 含同位素的物質
- 單體組成之聚合物

用戶可從物質記錄文件中，取得以下的資料。

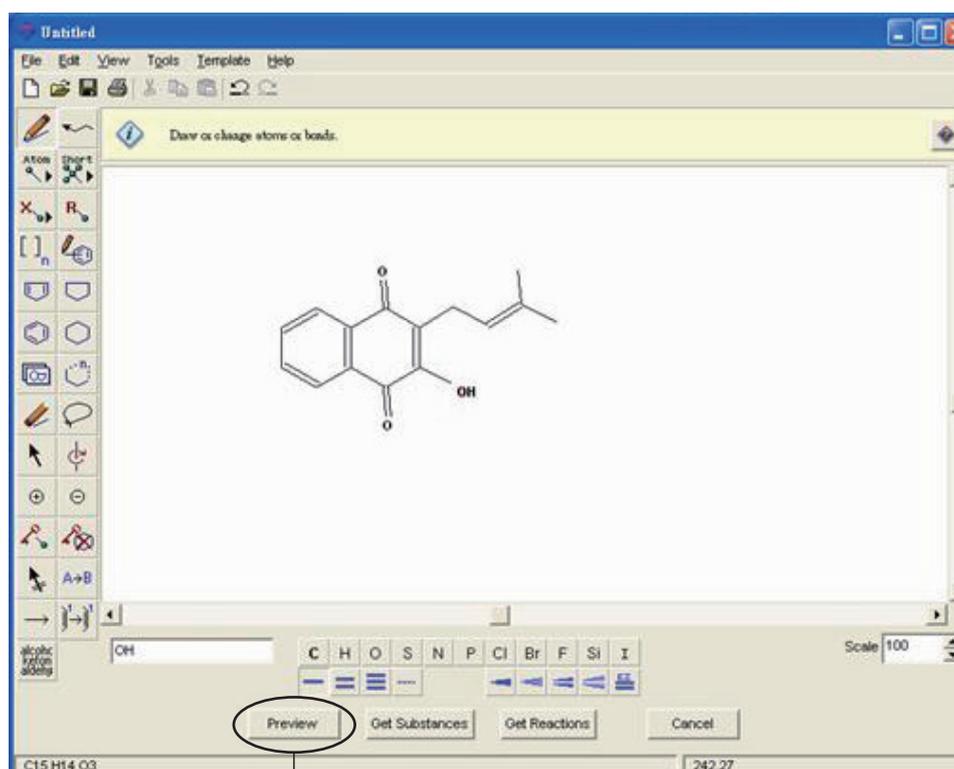
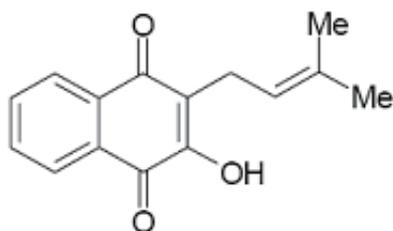
- 物質基本資料（如名稱、結構、CAS登錄號）
- 物質的實驗性質和系統演算推導性質
- 摘要、相關參考和書目資料
- 供貨商目錄資料
- 物質管制和註冊資料
- 物質的反應資料

精確化學結構檢索 (Exact Chemical Structure Search)

畫好化學結構後，便可以隨時開始結構檢索。你能使用SciFinder 工具中的繪製功能或引用其它應用程式所製備的結構文件。

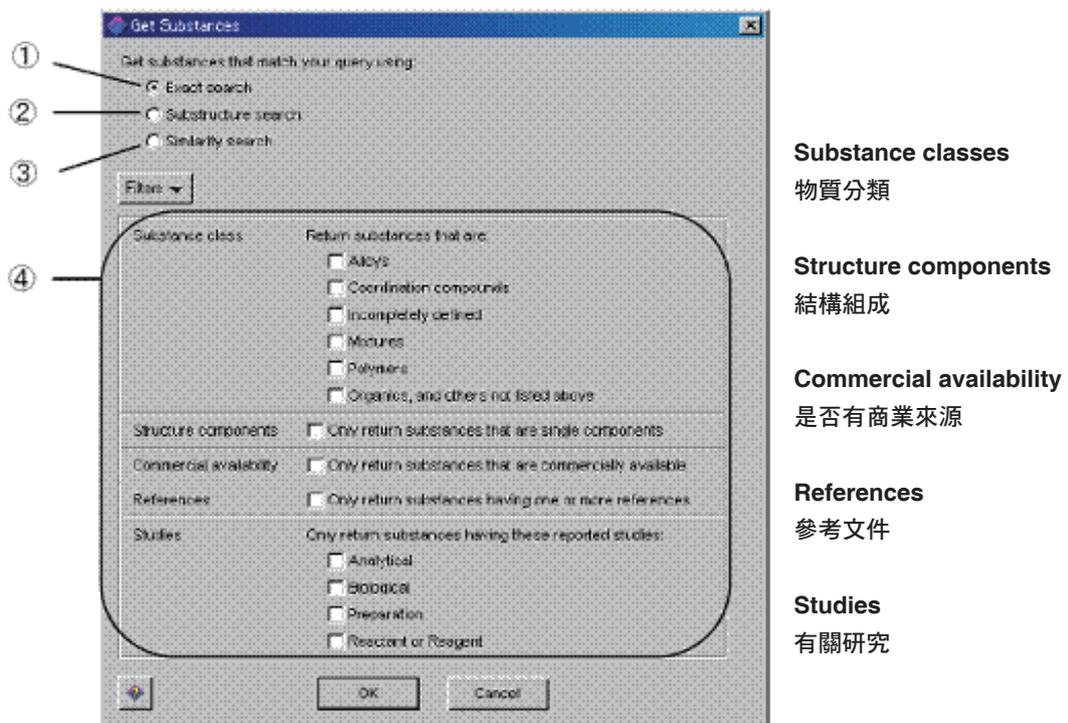
■ 檢索例子

檢索結構如下



預覽功能只限於有次結構檢索的SSM帳號

按下Get Substances開始檢索。如果你的帳號有SSM次結構檢索，會看到以下的對話框出現。
 (* 如果你的帳號沒有包括SSM次結構檢索，請參考結構檢索過濾設定。)



選擇以下其中一項。

- (1) 精確化學結構檢索。
- (2) 次結構檢索 (參見第三章)。
- (3) 相似結構檢索 (參考第四章)。

在此，選擇(1)的Exact Search。

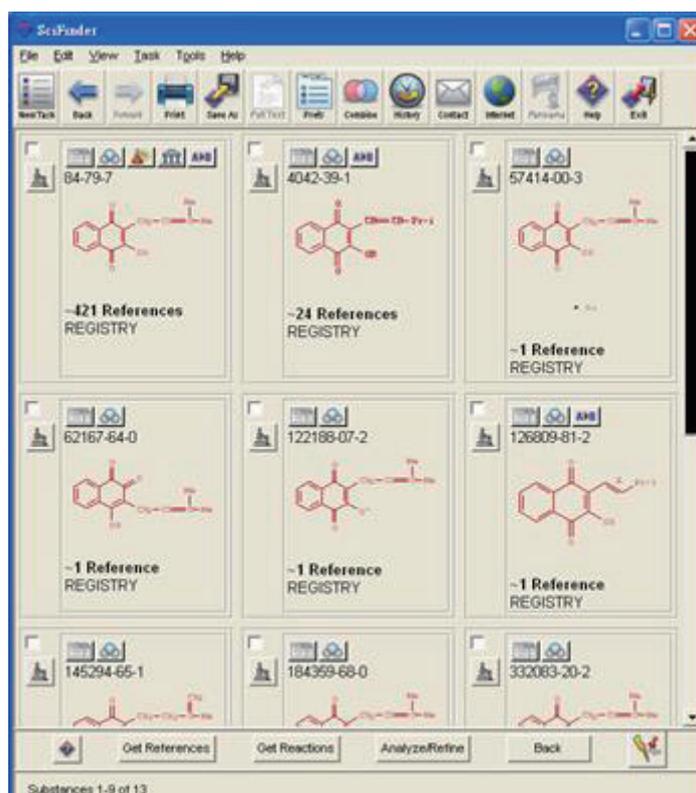
檢索已繪製的結構，找出相同物質。得出的結果會包含以下各類型的化合物。

- 與已繪製的結構完全相同的物質
- 同位素化合物
- 配位化合物
- 單體組成的聚合物
- 離子化合物
- 原子基和離子基
- 異構體
- 互變異構體 (包括酮-烯醇)

若要縮小檢索範圍至特定類型，可改變過濾選項【(4)Filters】的設定。按OK繼續檢索。

SciFinder 檢索的結果，是以智能檢索 Smartsearch 為基礎，一個由 CAS 建立的檢索方法，且通常會將「精確化學結構檢索」的結果數目擴張至最大，讓用戶得到最全面的檢索結果以減少遺漏。例如，酮-烯醇互變異構體、同位素、和單體組成的聚合物也被包括在檢索結果中。用戶可按個人的研究方向和興趣改變過濾選項的設定，以便縮小結果範圍至理想結果。有關智能檢索 Smartsearch 的詳細資料，請參考附錄 A。

按下視窗的右下方的停止鍵取消檢索，結果將在 SciFinder 的視窗上顯示出來。



在檢索結果中，與檢索相符的結構部分會被突出顯示成紅色，讓用戶很容易就能辨認出所檢索結構的部分。要改變結果的顯示格式，選擇工具列中的 Option（簡單 Compact、標準 Standard、摘要 Summary、全部 Full）或用選單 Preference Editor 中的 Display 鍵改變預設值。

當按下物質檢索結果左上方的顯微鏡圖像 ，你可以看到物質的詳細資料。

還有，按下物質檢索結果上方任何一個圖像，便會顯示相關的資料。

 顯示與物質相關的參考文獻（也可以使用 Get References 取得文獻）。

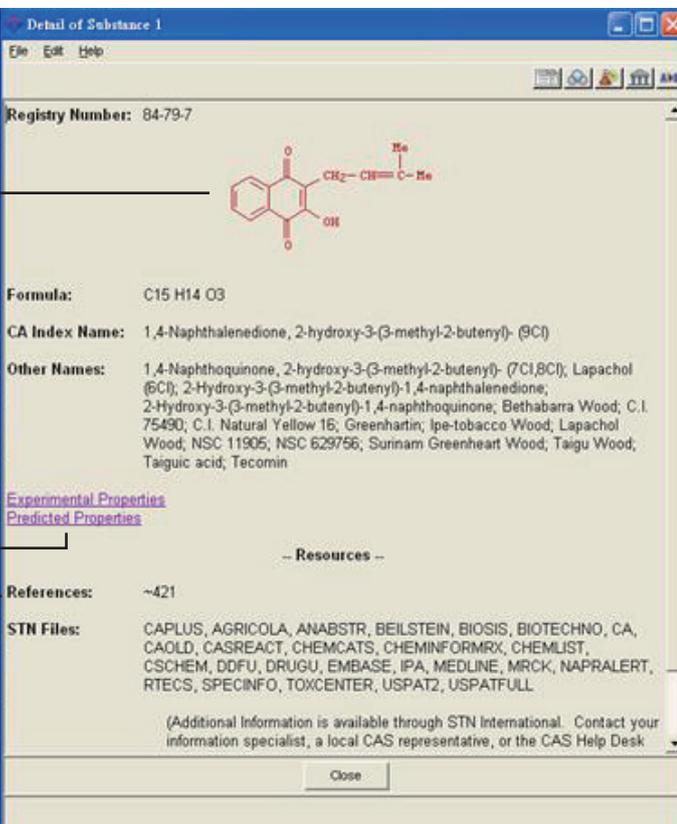
 顯示物質的立體結構模型。

 顯示物質的供貨商資料。

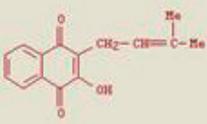
 顯示物質管制和註冊資料。

 顯示物質的反應資料（也可以使用 Get Reactions）（只限於有次結構 SSM 的帳號）。

先按下物質檢索結果左上方的顯微鏡圖像 ，物質的詳細資料 (Detail of Substance) 的視窗將會出現。物質記錄資料通常包括了CAS登錄號、化學結構、分子式、名稱、物質物性、和相關資料。



CAS登錄號 — Registry Number: 84-79-7

化學結構 — 

分子式 — Formula: C15 H14 O3

CA索引名稱 — CA Index Name: 1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)- (9CI)

其他名稱 — Other Names: 1,4-Naphthoquinone, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)- (7CI,8CI); Lapachol (6CI); 2-Hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-1,4-naphthalenedione; 2-Hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-1,4-naphthoquinone; Bethabarra Wood; C.I. 75490; C.I. Natural Yellow 16; Greenhartin; Ipe-tobacco Wood; Lapachol Wood; NSC 11905; NSC 629756; Surinam Greenheart Wood; Taigu Wood; Taiguic acid; Tecomin

實驗性質 — [Experimental Properties](#)

系統演算推導性質 — [Predicted Properties](#)

相關資料 — **References:** ~421

STN相關檔案 — **STN Files:** CAPLUS, AGRICOLA, ANABSTR, BEILSTEIN, BIOSIS, BIOTECHNO, CA, CAOLD, CASREACT, CHEMCATS, CHEMINFORMRX, CHEMLIST, CSCHEM, DDFU, DRUGU, EMBASE, IPA, MEDLINE, MRCK, NAPRALERT, RTECS, SPECINFO, TOXCENTER, USPAT2, USPATFULL

(Additional information is available through STN International. Contact your information specialist, a local CAS representative, or the CAS Help Desk)

Close

物質的詳細資料會以預設值的格式排列顯示，可以用Preference Editor的Display 鍵改變設定。

當按下Experimental Properties和Predicted Properties，其實驗性質和系統演算推導性質將被顯示在新的視窗上。

使用文件的Print...印出所顯示的記錄，也可以用Save As... 做文件存檔。

若要返回到SciFinder的視窗，按Close。

實驗性質 (Experimental Properties)

點選Experimental Properties，便會顯示其物質的實驗性質。在這裡可以看到CAS的登錄號、化學結構、分子式、名稱、物性和相關資料。由2005年11月起，用戶可以看到大約27萬筆的實驗性質資料。另外，用戶可在參考文獻的原文中，找到大約180種特性資料（如以光譜、計算圖、圖表、數值等來顯示），500多萬筆參考文獻資料。從前這些資料包含在原文內，用戶很難檢索得到，但現在只需檢索SciFinder的物質記錄資料，便能很快地找到其實驗性質資料（詳情請參考附錄B）。

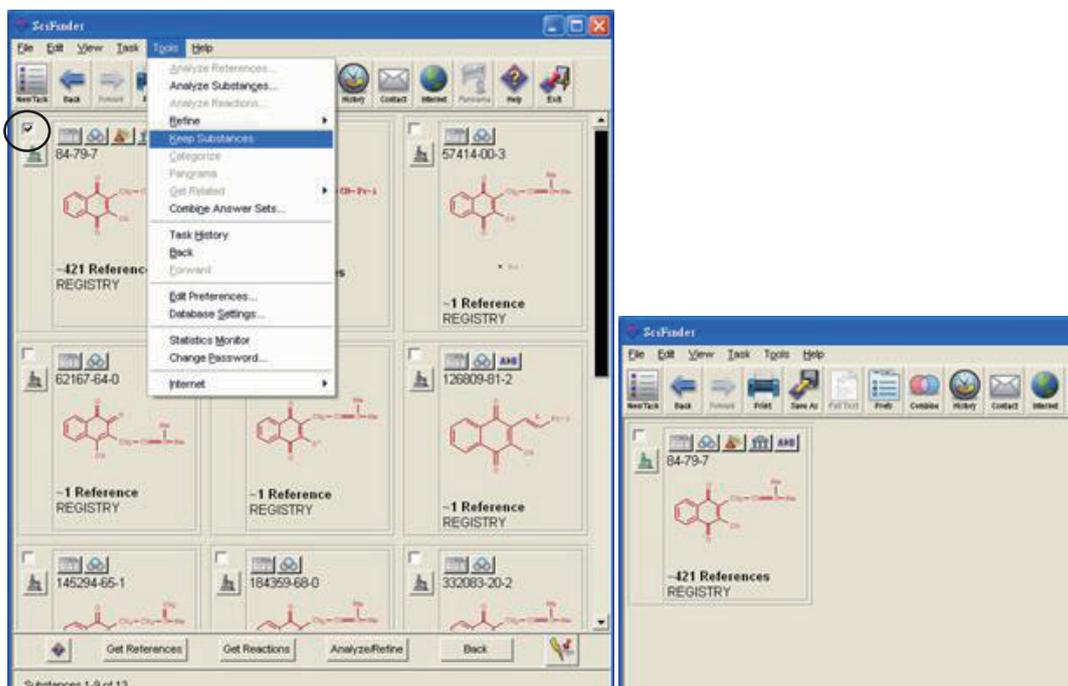
系統演算推導性質 (Predicted Properties)

點擊Predicted Properties，便會顯示由Advanced Chemistry Development Inc. 所建立的ACD/Labs軟體演算推導出的物性資料。如圖顯示，本演算法只適用於不含金屬原子的單一物質（除了聚合物）。

請到以下的網站，參考更多ACD/Labs的詳細資料<http://www.acdlabs.com>

保留物質 (Keep Substances)

用戶可使用Keep Substances選項，選擇留下有興趣之物質，作進一步的查閱或檢索。勾選位於在顯微鏡上方的選框。然後，從工具選單中選擇Keep Substances，保留的物質便會出現在視窗中。



分類和篩選結果 (Analysis / Refine)

當檢索結果出現後，用戶可用SciFinder的進階分析篩選功能去分析和篩選結果。分析結果讓用戶了解檢索結果的結構，而分析其環構造、原子取代位置和鍵等，有助於找出理想的結構。篩選功能讓用戶有效地縮小結果範圍，可限定其結構、同位素、文件類等資料（請參考第3章）。

物質的相關文獻 (Reference Information related to Substances)

選擇了一個或多個物質後，點擊在視窗下方的Get References鍵，取得相關文獻。另外，按下物質檢索結果上方的圖像， Get References對話框便會出現，用戶可選取所有文獻，或是只限定於某一類的研究課題。

(1) All substances Selected substances

(2) All references References associated with:

- Adverse Effect, including Toxicity
- Analytical Study
- Biological Study
- Combinatorial Study
- Crystal Structure
- Formation, nonpreparative
- Miscellaneous
- Occurrence
- Preparation
- Process
- Properties
- Reactant or Reagent
- Spectral Properties
- Uses

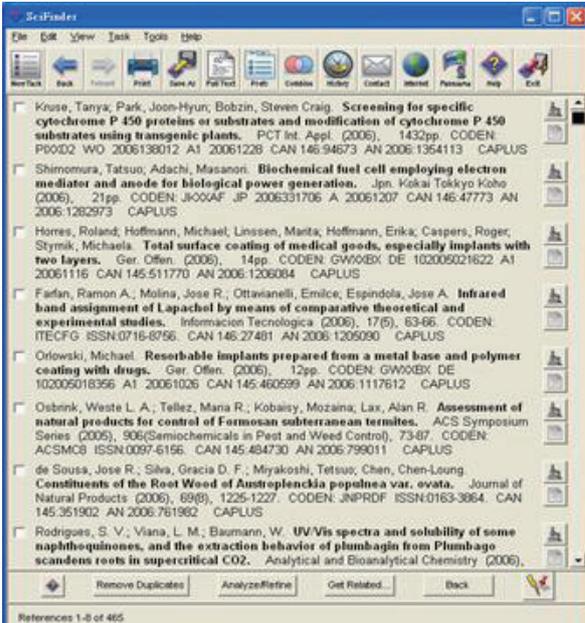
For each sequence, retrieve:

Additional related references, e.g., activity studies, disease studies.

OK Back

Adverse Effect, including Toxicity	副作用, 包括毒性
Analytical Study	分析研究
Biological Study	生物研究
Combinatorial Study	複合研究
Crystal Structure	晶體結構
Formation, nonpreparative	形成
Miscellaneous	其它
Occurrence	發生
Preparation	製備
Process	過程
Reactant or Reagent	反應物或試劑
Spectral Properties	光譜
Uses	應用

在 (1)，選擇取得所有物質 (All substances) 的文獻資料或只選取已選物質 (Selected substances) 的文獻資料。在 (2)，勾選References associated with，指定文獻資料的檢索範圍 (如：Preparation)，按OK。



The screenshot shows the SciFinder interface with a list of search results. The results include titles such as "Screening for specific cytochrome P 450 proteins or substrates and modification of cytochrome P 450 substrates using transgenic plants", "Biochemical fuel cell employing electron mediator and anode for biological power generation", "Total surface coating of medical goods, especially implants with two layers", "Infrared band assignment of Lapachol by means of comparative theoretical and experimental studies", "Resorbable implants prepared from a metal base and polymer coating with drugs", "Assessment of natural products for control of Formosan subterranean termites", "Constituents of the Root Wood of *Austroplenckia populnea* var. *ovata*", and "UV-Vis spectra and solubility of some naphthoquinones, and the extraction behavior of plumbagin from Plumbago scandens roots in supercritical CO₂".

所選的物質文獻資料會在SciFinder的視窗上顯示。

可以使用Preference Editor中的 Display 鍵改變字體和排列顯示。

你可以使用文件中的Save As...或 Save As Answer Set...去存檔檢索結果，並且選擇Print...以不同的格式列印。

檢索更多的相關資料 (Get Related...)

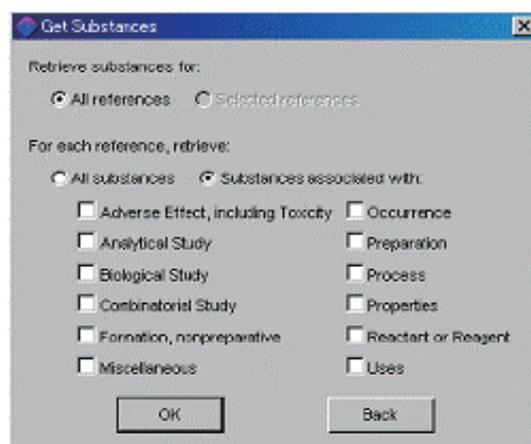
用戶可以檢索更多的相關資料。先點選結果頁中的Get Related…。然後，Get Related Information對話框便會出現，便可以開始檢索以下的資料。



SciFinder最多只能顯示500筆的引用和被引用的文獻，1000個有關的物質和反應式。如果數目太多，會出現以下的訊息。此時請按OK，先回到結果頁減少結果數目，然後再點選Get Related…。



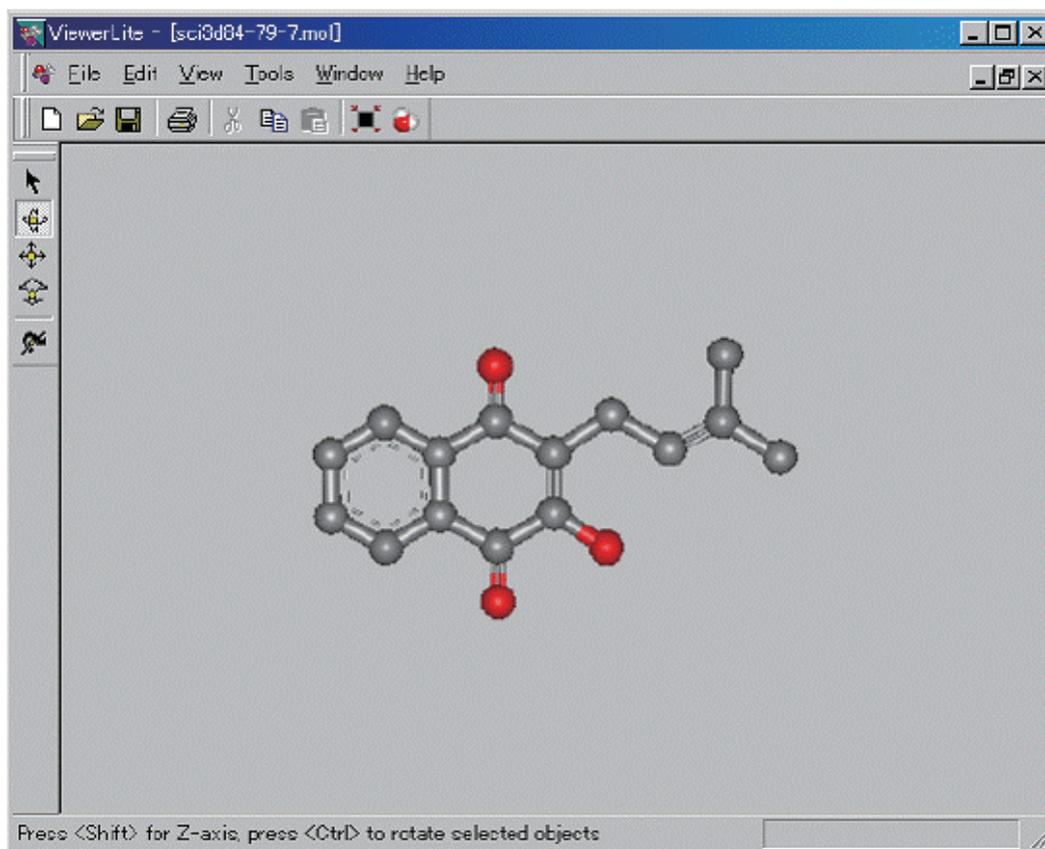
要限制物質現有的參考資料，先在Get Substances對話框中，點擊Substances associated with：鍵，然後選擇研究課題，按OK。



物質立體結構模型（3D Structure Model of Substances）

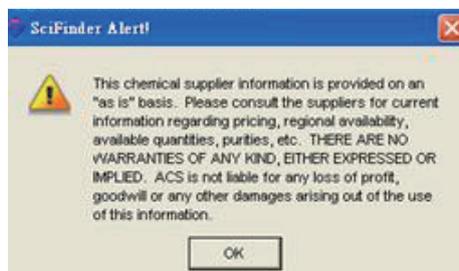
要顯示立體結構，必先安裝Discovery Studio Viewer Pro或Viewer Lite（只適用於Windows）。

在安裝完畢後，立體結構的繪製  會在物質檢索結果中出現。點擊  便可以看見物質的立體結構。



物質供應目錄資料 (Catalog Information of Substances)

按下物質檢索結果的燒瓶圖像，便能看到物質供貨商和價格資料。以下的警告訊息會出現，但無須理會，按下OK就會顯示供貨商目錄。



在記錄中，可以找出世界各地供貨商所提供的化學物質供應資料，例如目錄名稱、目錄日期、化學品名稱、商品名稱、和CAS登錄號等。

此外，按下顯微鏡圖像便會顯示價格、結構、供貨商名稱、位址、聯絡資訊和網址。資料會因不同的供貨商而有所不同。

Sources for 84-79-7

- Catalog Name:** ChromaDex Product List
Quantity: 10mg
Publication Date: 22 Aug 2006
Order Number: ASB-00012065
Chemical Name: LAPACHOL
Registry Number: 84-79-7
CHEMCATS
- Catalog Name:** Aurora Screening Library
Quantity: milligram quantities
Publication Date: 10 May 2006
Order Number: kbsa-0145993
Chemical Name: 1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-
Registry Number: 84-79-7
CHEMCATS
- Catalog Name:** ALDRICH
Quantity: 250 MG
Publication Date: 15 Sep 2006
Order Number: 142905
Chemical Name: Lapachol
Registry Number: 84-79-7
CHEMCATS
- Catalog Name:** TimTec Overseas Stock
Quantity: milligram quantities
Publication Date: 1 Aug 2005
Order Number: OVS2484920
Chemical Name: 1,4-Naphthalenedione, 2-hydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)-
Registry Number: 84-79-7
CHEMCATS
- Catalog Name:** Extrasynthese Product List
Quantity: 10 mg
Publication Date: 28 Nov 2006

Detail of Source 1

Catalog Name: ChromaDex Product List
Publication Date: 22 Aug 2006
Order Number: ASB-00012065
Chemical Name: LAPACHOL
Registry Number: 84-79-7

Chemical Structure: O=C1C=CC(=O)C=C1C=C(C)C

Pricing: Quantity: 10mg, Price: \$79.5
Company Info: ChromaDex, Inc. 2962 S. Diamond St. Santa Ana, CA, 92706 USA. Phone: 949-419-0208. Fax: 949-419-0294. Email: sales@chromadex.com. Web: http://www.chromadex.com
Database: CHEMCATS

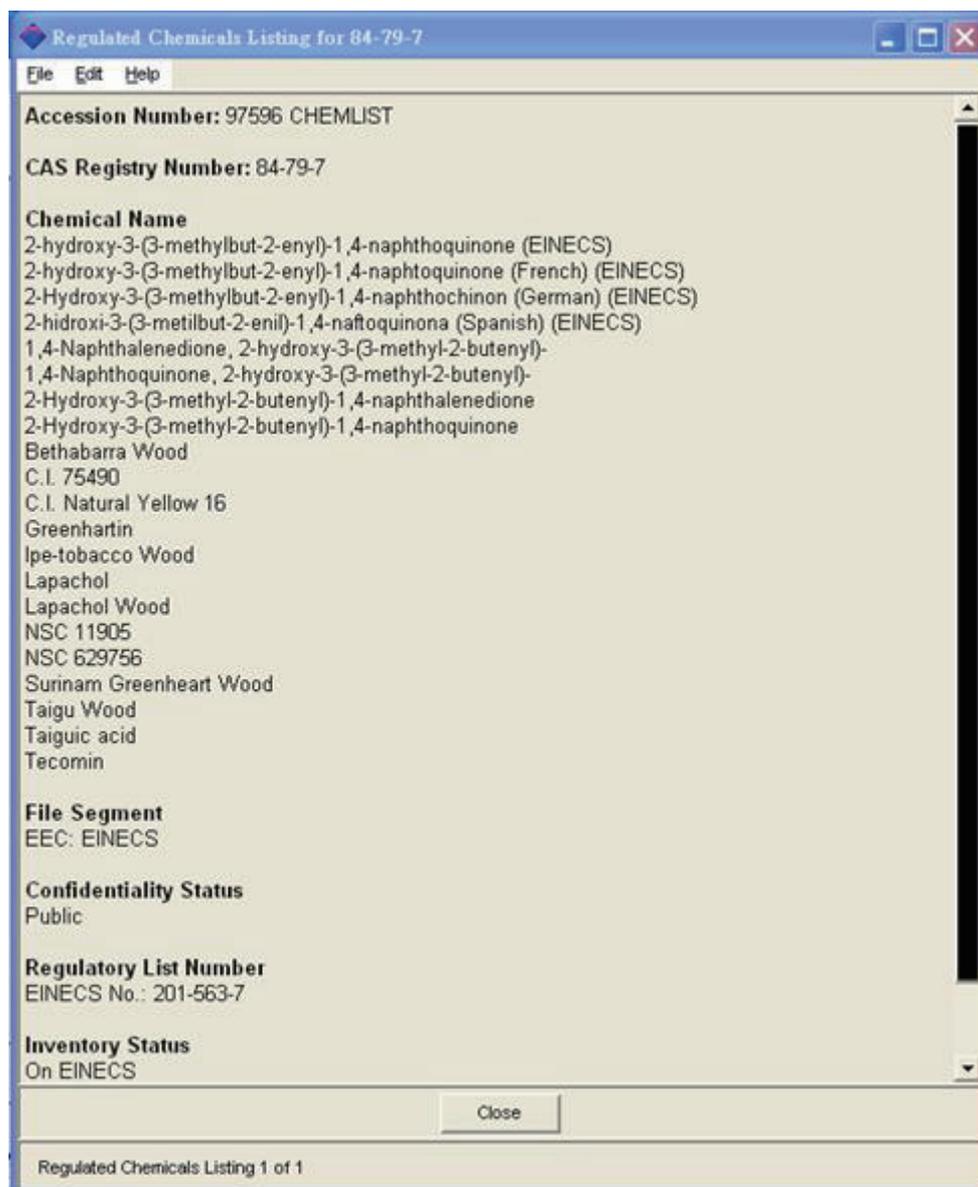
Export to Microsoft Excel

匯出至電子表格

Source Name	Catalog Name	Quantity	Price	Company Name	Address	City	State	Country	Phone	Fax	Web
ChromaDex	ChromaDex Product List	10mg	\$79.5	ChromaDex, Inc.	2962 S. Diamond St.	Santa Ana	CA	USA	949-419-0208	949-419-0294	http://www.chromadex.com
Aurora Screening Library	Aurora Screening Library	milligram quantities									
ALDRICH	ALDRICH	250 MG									
TimTec Overseas Stock	TimTec Overseas Stock	milligram quantities									
Extrasynthese Product List	Extrasynthese Product List	10 mg									

物質管制資料 (Regulatory Information of Substances)

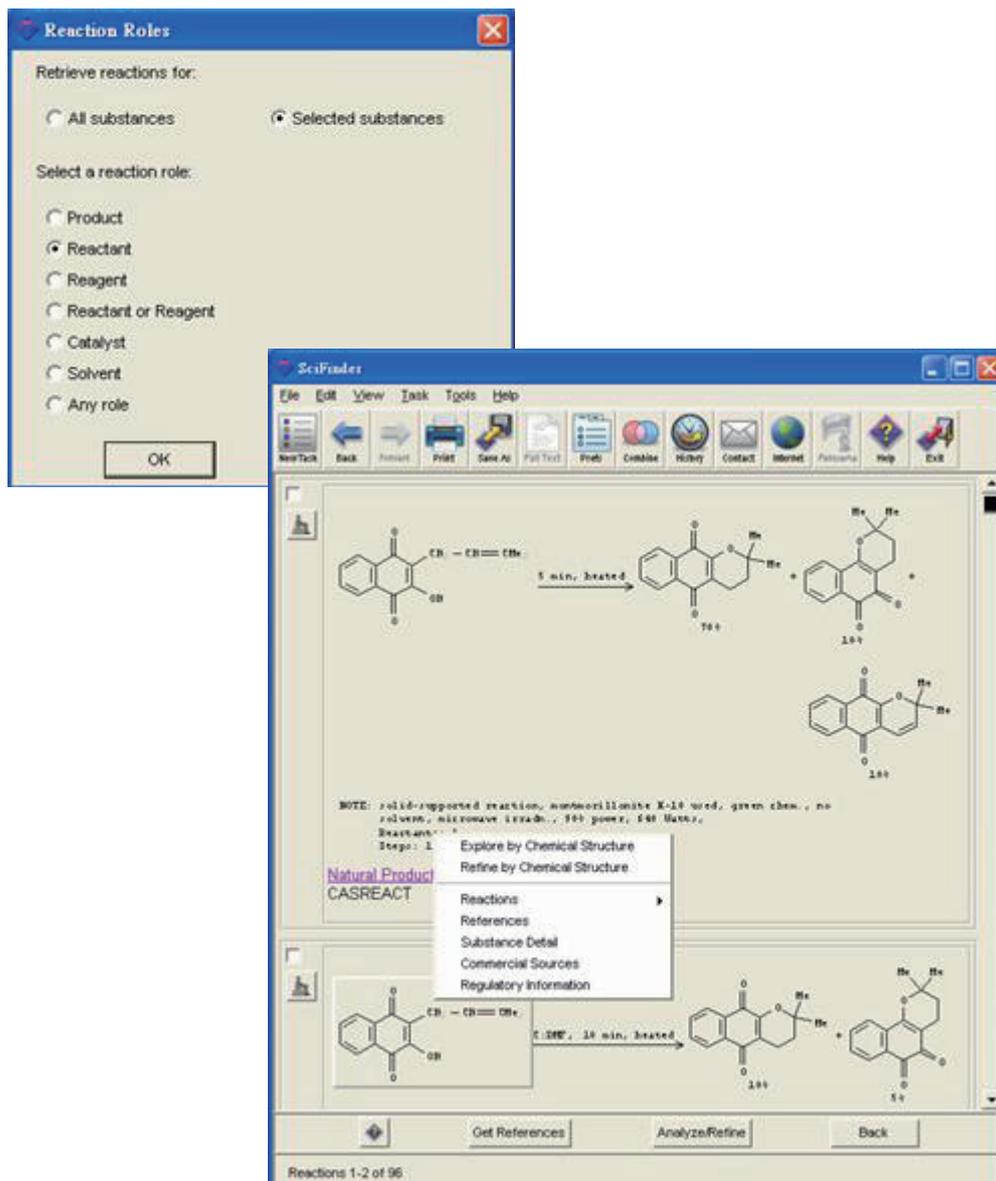
點選物質檢索結果的圖像，用戶可以參考不同國家的物質管制資料，如日本、美國、歐盟各國、加拿大、韓國、澳洲、瑞士、菲律賓、以色列之法規資料。但是，這些資料只限於那些有CAS登錄號之化學物質。



物質反應資料 (Reaction Information of Substances) (只限可檢索次結構SSM的帳號)

若要顯示一個或多個物質反應資料，點擊Get Reactions鍵。也可點擊在任何一個物質檢索結果上方的  圖標。

在此選擇Reactant並點擊OK，反應式便會顯示出來。



The image shows two overlapping windows from the SciFinder software. The top window is a 'Reaction Roles' dialog box with the following options:

- Retrieve reactions for:
 - All substances
 - Selected substances
- Select a reaction role:
 - Product
 - Reactant
 - Reagent
 - Reactant or Reagent
 - Catalyst
 - Solvent
 - Any role
- OK button

The bottom window is the main SciFinder interface. It displays a chemical reaction scheme where a reactant (a substituted naphthoquinone) reacts with $\text{CH}_2=\text{CHMe}$ under the conditions '5 min, heated' to produce two products (labeled 184 and 185). Below the reaction, there is a 'NOTE' section and a context menu with the following options:

- Natural Product
- CASREACT
- Explore by Chemical Structure
- Refine by Chemical Structure
- Reactions
- References
- Substance Detail
- Commercial Sources
- Regulatory Information

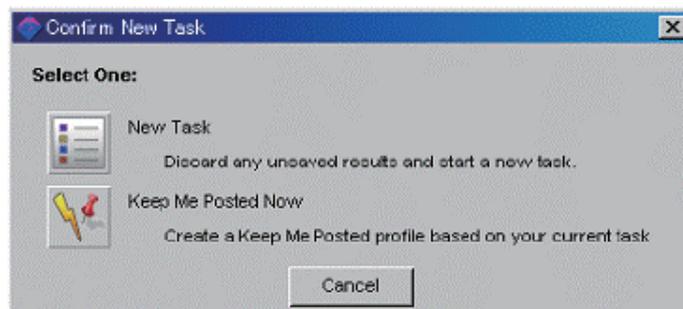
At the bottom of the SciFinder window, there are buttons for 'Get References', 'Analyze/Refine', and 'Back'. The status bar at the very bottom indicates 'Reactions 1-2 of 96'.

當你點擊Get References，這些反應式的文獻亦會被顯示。

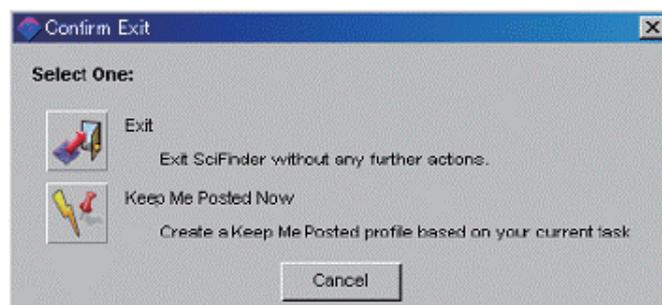
有關反應檢索的詳情，請參見第五章。

結束精確化學結構檢索（Ending Exact Chemical Structure Search）

若要開始新的檢索，點選工具列的New Task，或從文件選單中選擇New Task。在Confirm New Task對話框中按下New Task即可，此時要小心未儲存的答案結果會被刪除。



從工具列中點選Exit，或選擇File選單中的Exit SciFinder以結束SciFinder。在Confirm Exit對話框中點選Exit。



第三章 次結構檢索 (Substructure Search)

SciFinder Substructure Module (SSM) 是SciFinder產品中可選擇加購的檢索功能，你可以利用此功能檢索以下物質。

- 與已繪製的結構完全相同（跟第二章的精確結構檢索相同）
- 包含檢索結構的多元物質，例如：聚合物、化合物和鹽類等
- 在指定位置有取代基和包含檢索結構的物質
- 檢索結構之環系為結果物質環系的一部分

檢索的結果包括以下的資料。

- 物質基本資料（如名稱、結構、CAS登錄號）
- 實驗性質和系統演算推導性質
- 摘要、相關參考和書目資料
- 供貨商目錄資料
- 物質管制和註冊資料
- 物質的反應資料（只適用於有SSM帳號的用戶）

SciFinder Substructure Search提供以下的功能和特點。

- 作精確、次結構檢索和相似結構檢索
- 可變的取代位置工具指定取代基與環結構上多個點中的任何一點鍵結位置
- 重複單元工具，可節省繪製重複鍵結點的時間
- 鎖定取代工具能禁止取代基附加在鍵結點上，可作指定結構檢索
- 設定R基團為不同原子或組合，便能檢索相關結構變化
- 預覽結果功能讓用戶預知大概有多少個檢索結果，並對檢索結構作出適當的修改，節省檢索時間。
- 強大的分析功能，可分析在點選鍵結點的真正原子、可變原子（A, Q, X, M）或R基團的結構成分和相關結果數目。

次結構檢索 (Substructure Search)

■ 結構圖像的預設值

SciFinder會以以下的設定檢索次結構。

結構	可檢索的結果
環	含有取代基的結構
	與檢索環相同結構
	與檢索環有稠合的結構
鏈	含有取代基的結構
	是結構鏈或環的其中一部份
短鏈結尾	除了烷基 (Alkyl group) 外，所有取代都被禁止

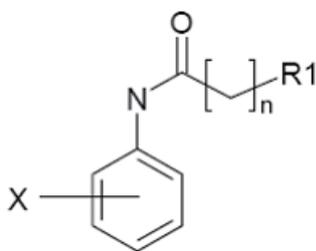
■ 變更結構圖像的預設值

可以使用繪製工具去變更結構圖像的預設值。

結構	變更目的	變更方法
環	與其它環隔離或禁止稠合	用鎖定環取代工具Lock Out Rings工具去鎖定環
鏈	禁止鏈變成環	用鎖定環取代工具Lock Out Rings工具去鎖定鏈
原子	禁止取代基	用鎖定原子取代工具Lock Out Atom工具去鎖定鏈原子

■ 檢索例子

用次結構檢索以下的結構。



- R1 基團= S, P, NH2
- 重複單元 n = 2-5
- 氮原子 (N) 不能被取代
- 只有一個鹵原子 (X) 連在苯環
- 結構不能再作稠合

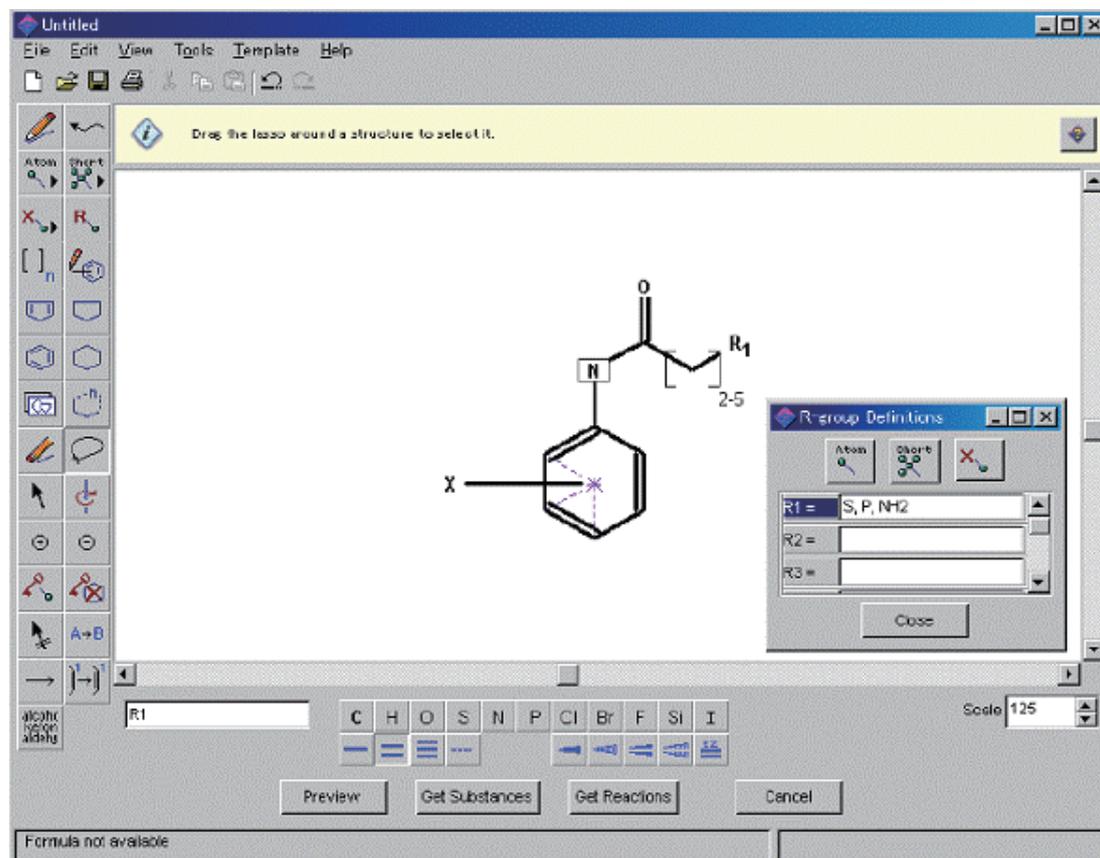
有關繪製結構圖的詳情，請參閱第一章，繪製工具的使用及解釋也可在第一章找到。

要使用已預備好的結構檔案，可從工具列選取Open，也可以使用複製及貼上Copy & Paste將結構圖輸入。

繪製方法

1. 用苯環工具繪製苯環。
2. 在苯環外圍繪製X（鹵素原子）後，選取可變的取代位置工具。在點選X後，拖曳游標至可變的取代位置。
3. 在水平工具板上點選N（氮原子）圖標，拖曳至苯環。
4. 使用鏈工具從N開始加上三個碳的鏈。
5. 點選R基團工具，定義R1基團為S, P, NH₂，並把R1加置於碳鏈的最末端。
6. 點選在原子繪製板中的O（氧原子）圖標和雙鍵繪製。將鉛筆工具移至碳鏈的鏈結點，並拖曳一個長度單位，繪出氧的雙鍵。
7. 選取重複單元工具，選取你想要重複的單元，選取的部份會顯示為紅色。在結構繪製視窗上的文字框 From To 輸入重複單元的數目，並按OK。
8. 選取Lock Out Substitution工具後按N，N的取代將會被禁止。
9. 選取Lock Out Rings工具後按苯環，環的稠合將會被禁止。
10. 點選碳鏈，便只會限於鏈。

當你完成繪圖，便會如下圖所顯示的一樣。

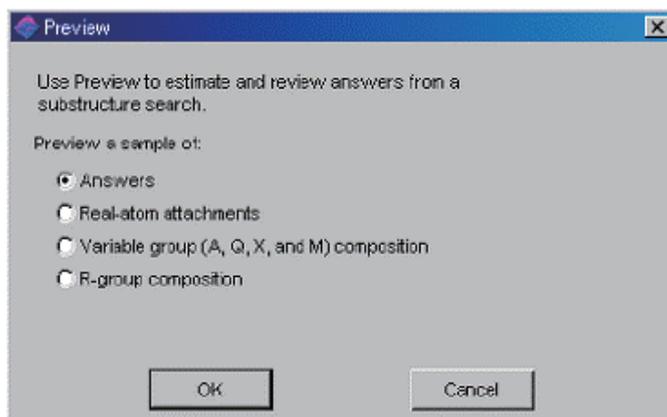


預覽次結構檢索 (Preview of Substructure Search)

用戶在進行真正檢索前，可以取得預覽結果。

當繪製結構後，點選Preview鍵。

Preview對話框便會被開啟。

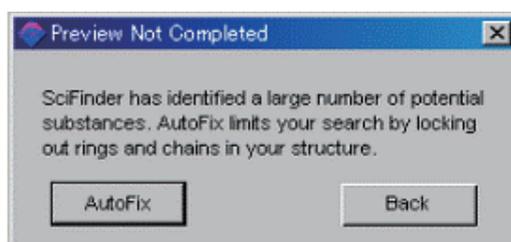


以下是Preview選項及其顯示。

選項	顯示
結果	<ul style="list-style-type: none"> • 典型的檢索答案 • 在Get Substances上預計得到的結果數目
真實原子取代	<ul style="list-style-type: none"> • 原子上的取代基 • 在Get Substances上預計得到的結果數目
可變基團 (A, Q, X, and M) 成分	<ul style="list-style-type: none"> • 可變基團的結構原子 • 在Get Substances上預計得到的結果數目
R基團成分	<ul style="list-style-type: none"> • R基團包括的原子 • 在Get Substances上預計得到的結果數目

■ 當不能完成預覽之情況

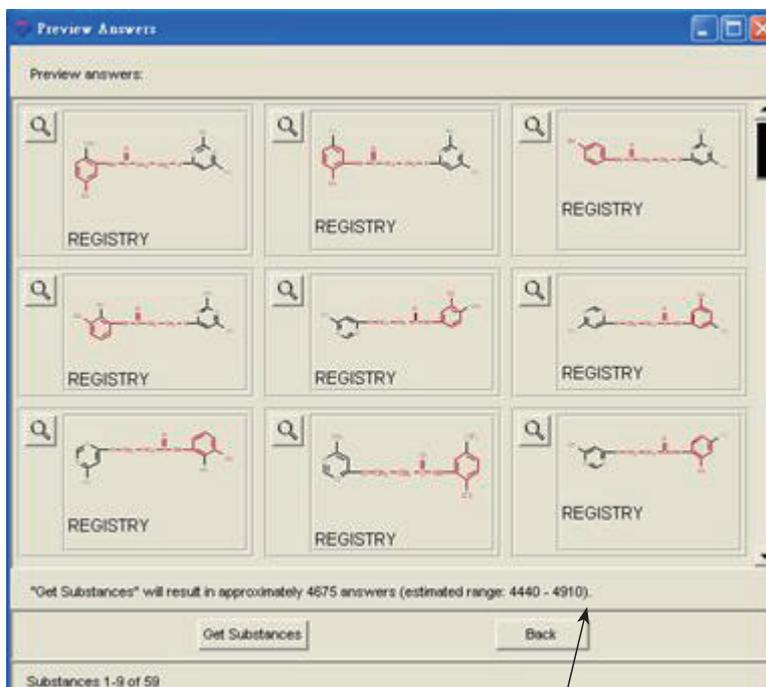
如有太多的檢索結果，Preview Not Completed 對話框就會出現。



按下Autofix鍵，鎖定環和鏈的取代，此結果與使用Lock Out Rings工具一樣。在設定後，再按一次Preview。

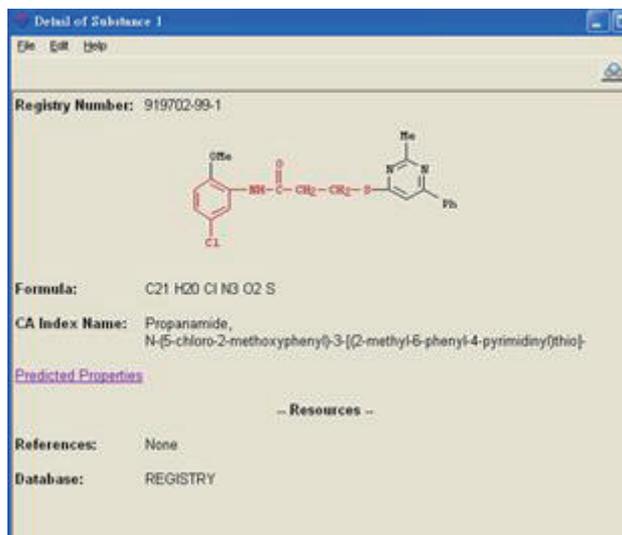
預覽結果

要預覽結果，選取Answers並按OK。當Preview Answers對話框開啟，結果及其預計得到的結果數目都會被顯示出來。



預計得到的結果數目

當你按下放大鏡圖標 ，你可以放大觀看其結構。

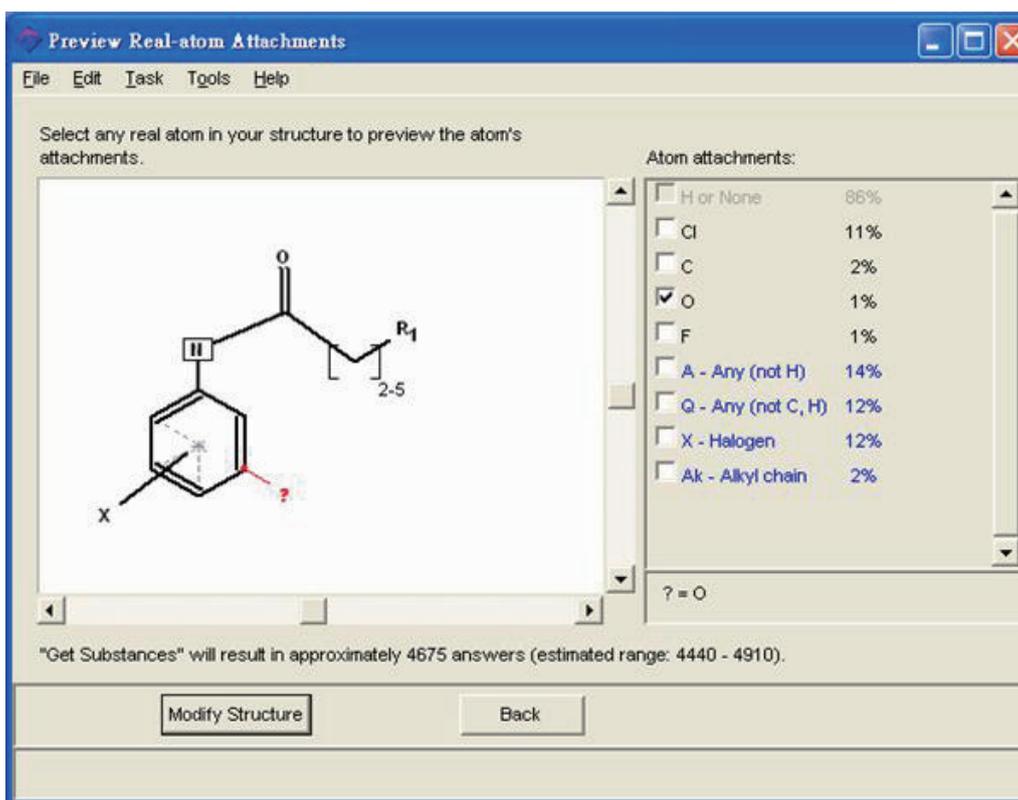


按下Close返回Preview Answers的對話框。你可以點選Back以返回Preview對話框，並選擇其它Preview選項。

■ 預覽取代原子

若要預覽取代原子的結果，先選取真實原子取代Real-atom Attachments選項並按OK，Preview Real-atom Attachment對話框會被開啟，輸入的結構也會顯示出來。

移動游標至你想要確認的取代原子鍵結點上並按下，此原子將會被突出顯示，在它旁邊會有問號出現。在對話框內的Atom Attachments部份便會看到在這位置有可能出現的取代原子，會以黑色或藍色原子來顯示。



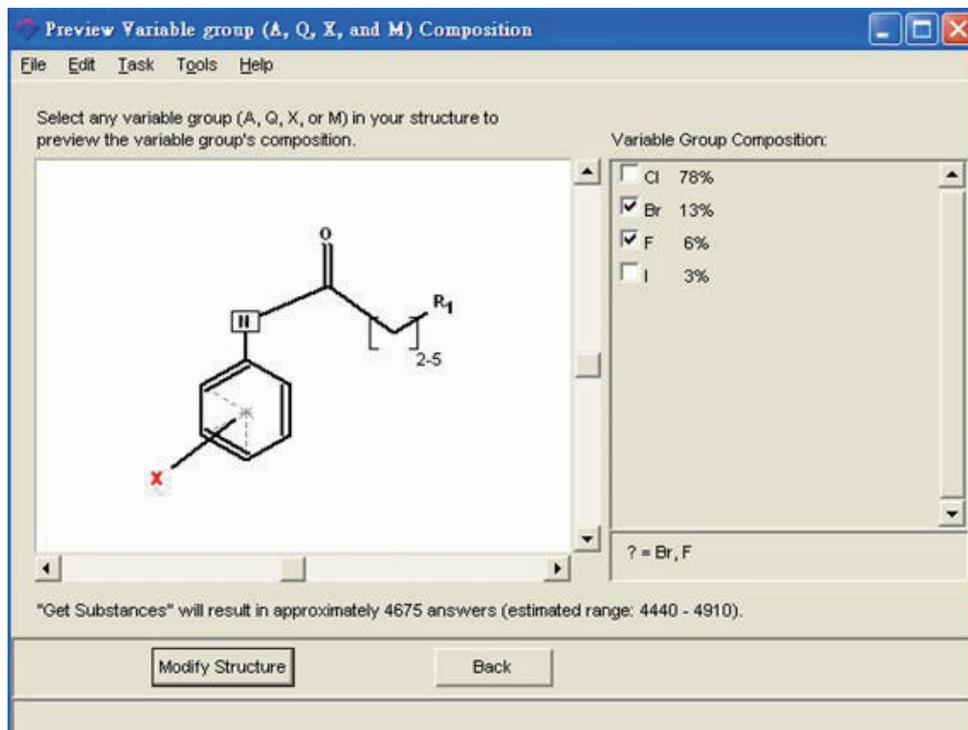
要減少結果數目，只要輸入更多檢索限制條件。先勾選原子旁的方框，並按下Modify Structure，已繪製的結構將會修正，並包含在指定鍵結點中的取代原子。

用戶也可以點選Back以便返回Preview對話框和選擇其它Preview選項。

■ 預覽可變原子 (A, Q, X, M)

要預覽可變原子，選取Variable Group (A, Q, X, and M) Composition選項，該對話框會被開啟，並可看到檢索結構和可變原子選項。

將滑鼠移至你想預覽的可變原子上並按下，被選取的可變原子將會被突顯成紅色。



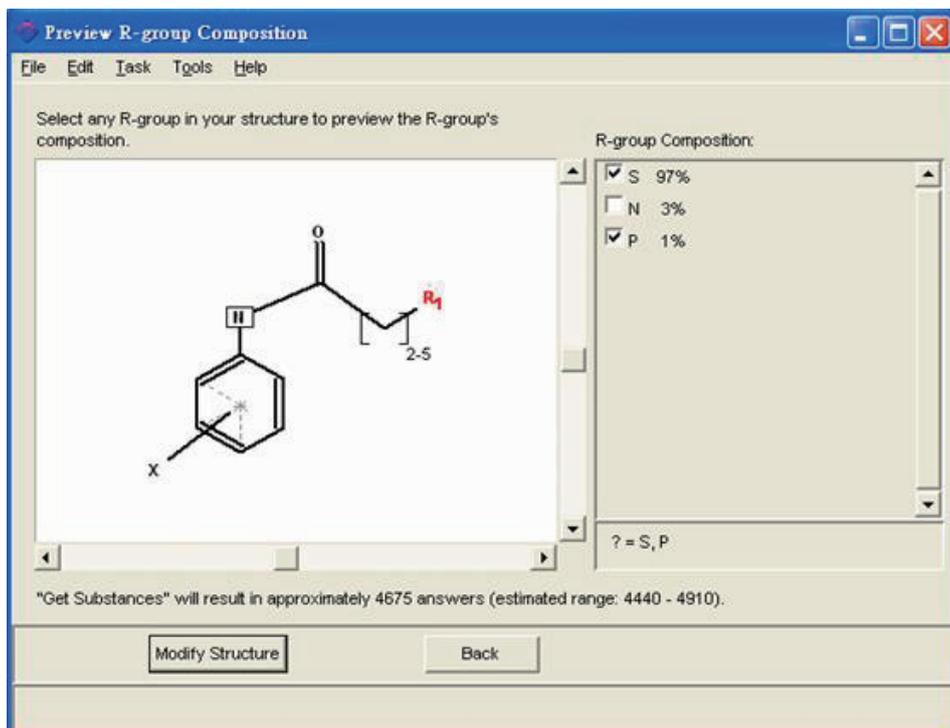
要減少結果數目，只要輸入更多檢索限制條件。先勾選可變原子旁的方框，並按下Modify Structure，已繪製的結構將會被修正，並包含所選的可變原子。

用戶也可以按Back以便返回Preview對話框和選擇其它Preview選項。

■ 預覽R基團

要預覽R基團的結果，選取R-group Composition選項，Preview R-group Composition對話框會被開啟，以及出現檢索結構選項。

將游標移至你想預覽的R基團上並且按下，被選取的R基團將會被突出顯示成紅色，在結果中的可能R基團會顯示在R-group Composition部份。

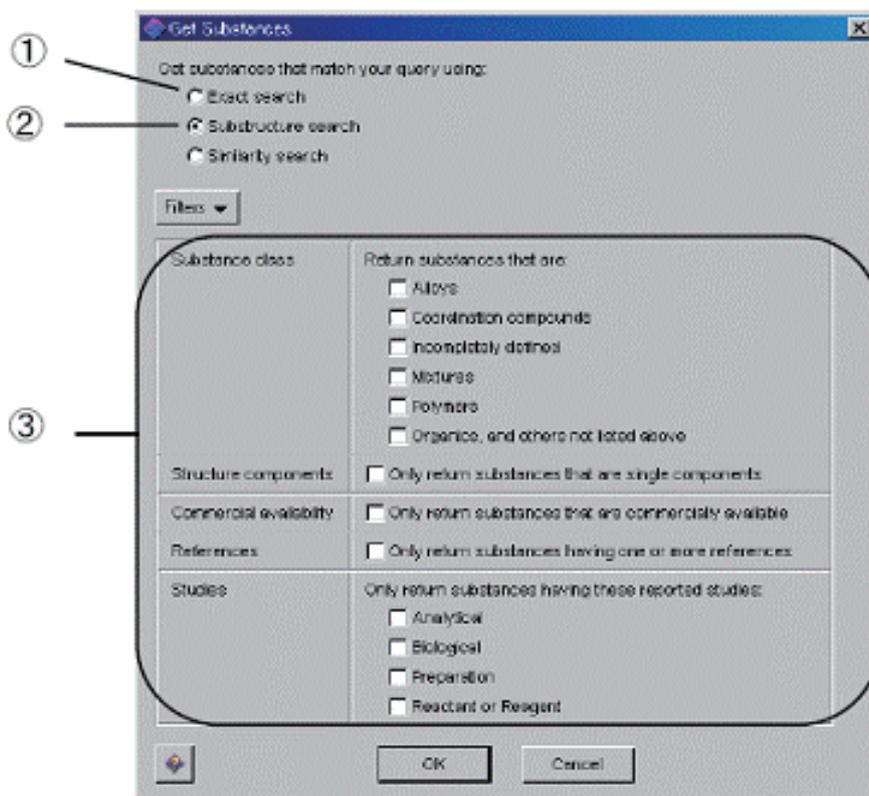


要減少結果數目，只要輸入更多檢索限制條件。先勾選R基團的方框，並按下Modify Structure，已繪製的結構將會被修正，並包含所選的R基團。

用戶也可以點選Back以便返回Preview對話框和選擇其它Preview選項。

進行次結構檢索 (Performance of Substructure Search)

在繪製結構後，按下Get Substances，Get Substances的對話框便會出現。

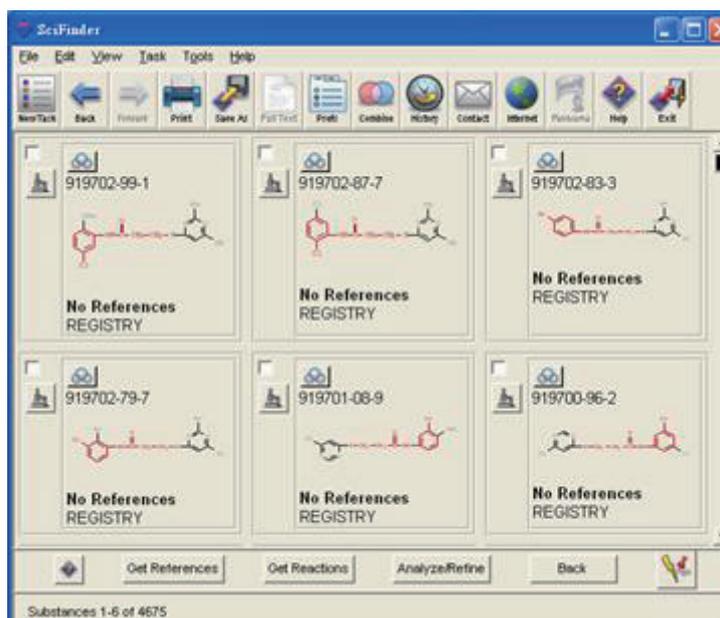


①此處的預設值是Substructure Search。

如果檢索結構含有R基團或可變原子(X, Ak, 等...)，選取②並執行，Structure Drawing Error錯誤視窗便會出現。

改變③過濾選項(Filters)的設定，便可以限制檢索結果至指定類型。

按下OK，便能看到次結構的檢索結果，包括物質的結構、CAS的登錄號和其文獻數目，都會顯示在SciFinder的視窗上。

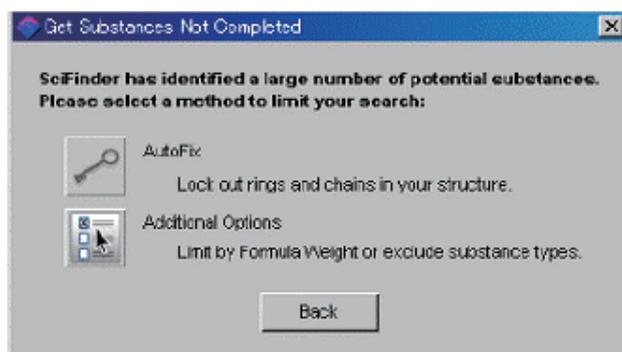


與檢索相符的結構部分會被突出顯示成紅色，結果會以預設值之格式來排列。要改變顯示格式，選取瀏覽選單或從Preference Editor之Display鍵改變預設值。

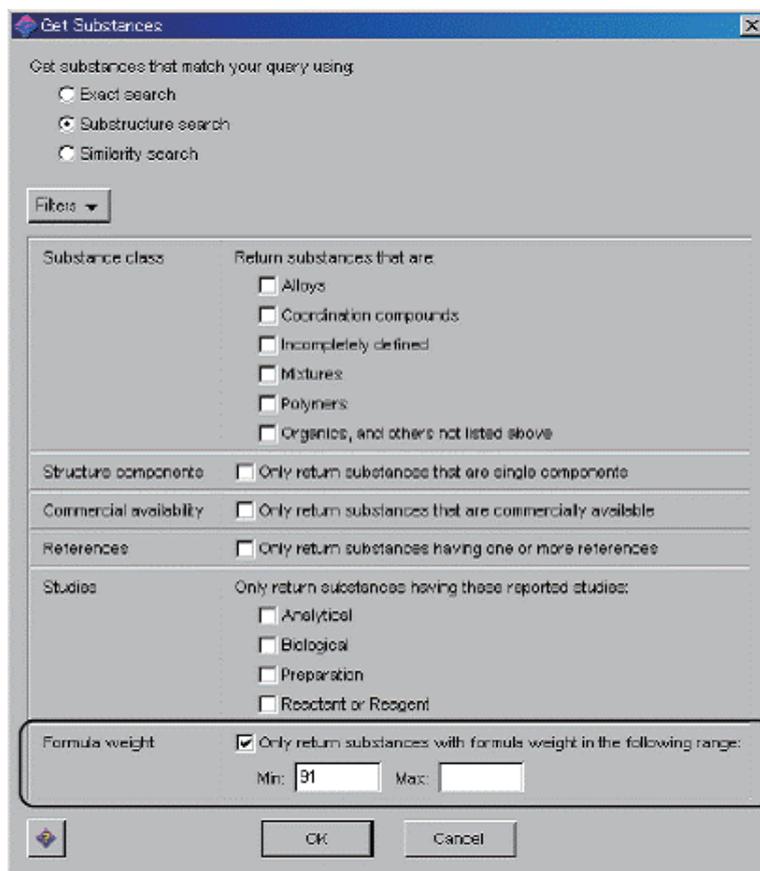
要查閱物質的詳細資料，點選放大鏡之圖標。你也可以使用Get References去查詢相關物質的文獻資料。詳情請參閱第二章。

■ 當不能完成檢索之情況

當執行Get Substances，如果檢索結構太過簡單，Get Substances Not Completed對話框便會出現。



按下Autofix鍵，鎖定環和鏈的取代，此結果與使用Lock Out Rings工具一樣。在設定後，再一次試用Preview，或按Additional Option，以下的視窗便會出現。

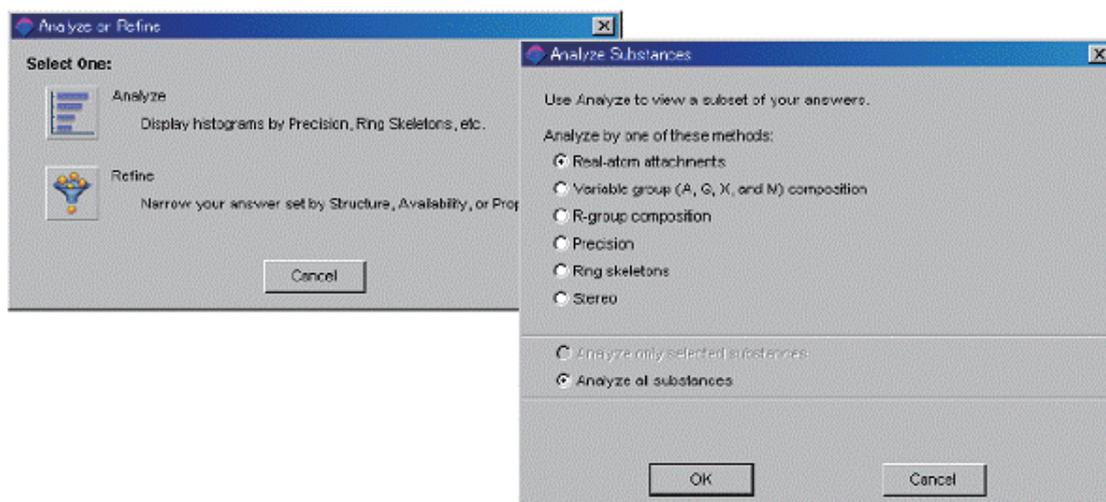


用戶可輸入分子量 (Formula Weight)，限制結果物質的分子量至特定範圍內。在Min框中，檢索結構的分子量已被輸入，用戶也可以自行輸入Min (最少) 和Max (最大) 的分子量至想要的結果。如多元物質的其中一個物質符合分子量的要求，此多元物質也會顯示出來。

在輸入分子量範圍後，按OK。

分析結果 (Analyzing Answer)

要分析和篩選結果，可按下Analyze/Refine圖標。當你點選Analyze後，Analyze對話框便會出現。



以下是每一個選項的作用。

選項	作用
Real-atom Attachments SSM	分類／篩選取代原子
Variable group (A, Q, X, and M) composition SSM	分類／篩選可變基團
R-group composition SSM	分類／篩選R基團
Precision	分類／篩選結構的精確性
Ring skeletons	分類／篩選結構的基本骨架、原子、和鍵
Stereo SSM	分類／篩選立體結構

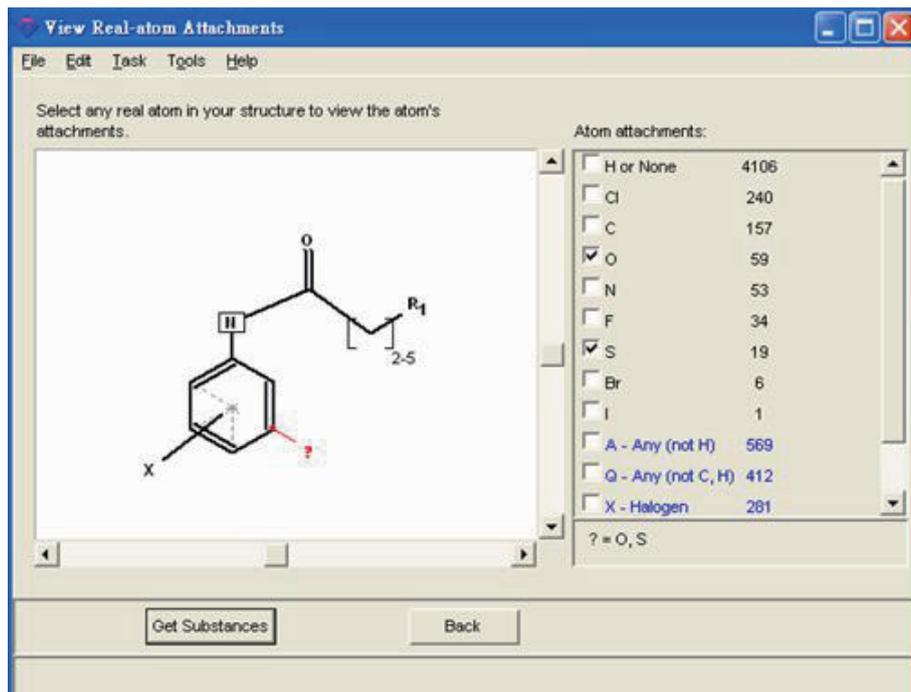
SSM (只適用於有次結構SSM檢索的帳號)

用戶可以分析所有結果或部份答案，若只分析某一部份，要先返回檢索結果的視窗，並且點選想要分析物質旁的方框。再一次按下Analyze/Refine中的Analyze，確定只分析已選物質 Analyze only selected substances，然後按OK。

分析取代原子 (Analyzing Substitution Atom)

欲分析結果中指定原子的取代原子，選取Analyze 中的Real-atom attachments選項，並按OK。View Real-atom Attachments對話框會被開啟，檢索結構也會被顯示出來。

將游標放在你想要確認的取代原子鍵結點上並按下，這個原子將會被突顯，在它旁邊會有問號出現。在對話框內的Atom Attachments部份，會看到在此位置的取代原子，以黑色或藍色原子來顯示。

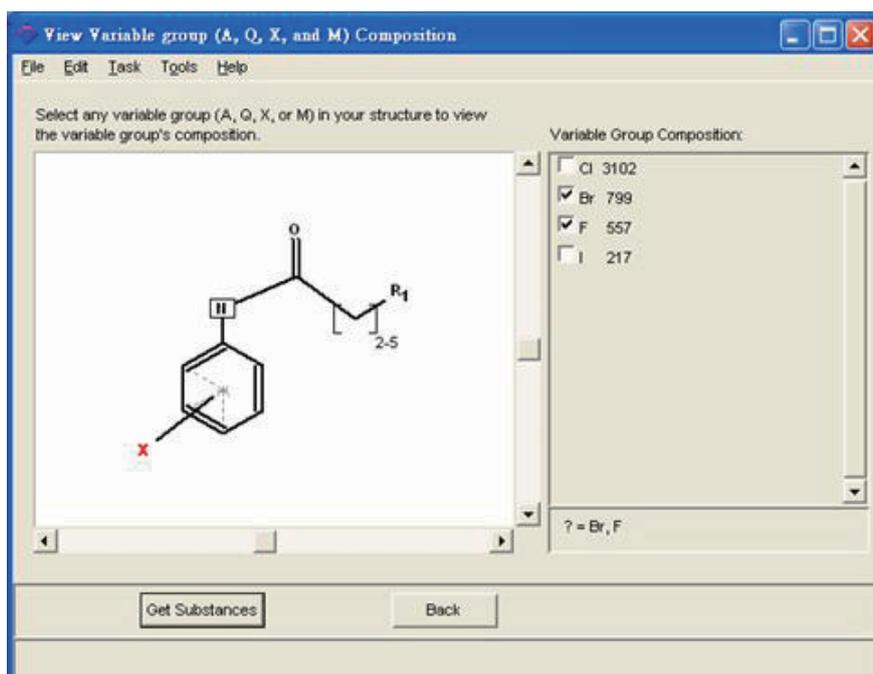


要限制和選擇指定取代原子，可從Atom Attachments表列中選取，並按下Get Substances。按Back以便返回Analyze對話框和選擇其它Analyze選項。

分析可變基團 (Analyzing Variable Group [A, Q, X, M])

欲分析結果中指定原子的可變基團，選取Analyze 中的Variable Group (A, Q, X, and M) Composition選項，並按OK。View Variable Group (A, Q, X, and M) Composition 對話框會被開啟，檢索結構也會被顯示出來。

將游標放置於你想要確認的可變原子鍵結點上並按下，這個原子將會被突顯成紅色。在對話框內的Variable Group Composition部份，會看到在此位置的可變原子。



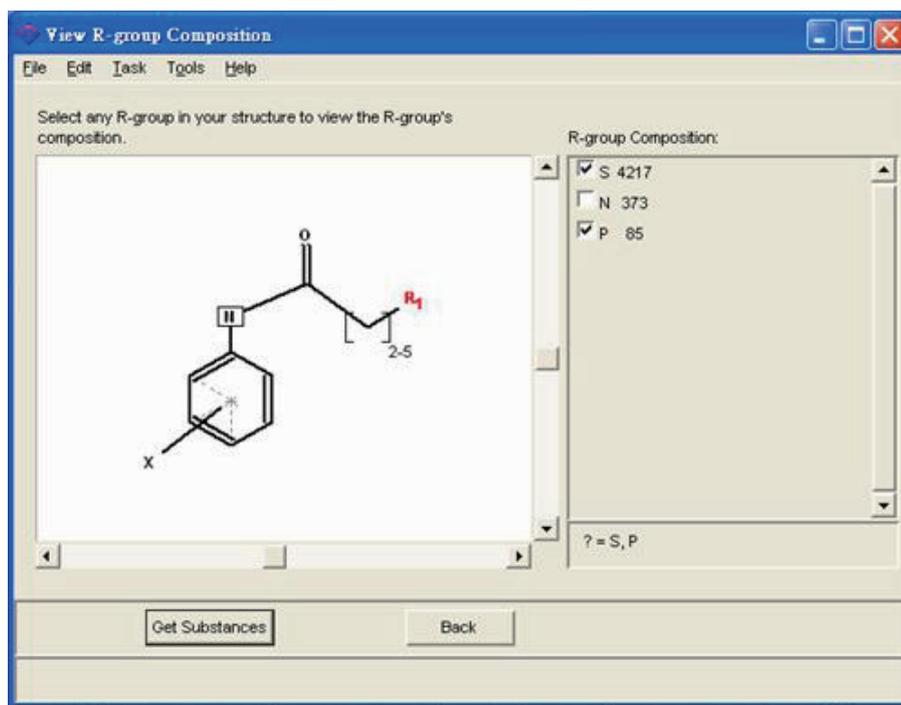
要限制和選擇指定可變基團的物質，可從Variable Group Composition表列中選取，並且按下Get Substances。

按Back以便返回Analyze對話框和選擇其它Analyze選項。

分析R基團 (Analyzing Composition Atoms of R Group)

欲分析結果中的R基團，選取Analyze 中的R-group Composition選項，並按OK。View R-group Composition對話框會被開啟，檢索結構也會被顯示出來。

將游標放置於你想要確認的R-group的鍵結點上並按下，R-group將會被突顯成紅色。在對話框內的R-group Composition部份，會看到在此位置R-group的原子。



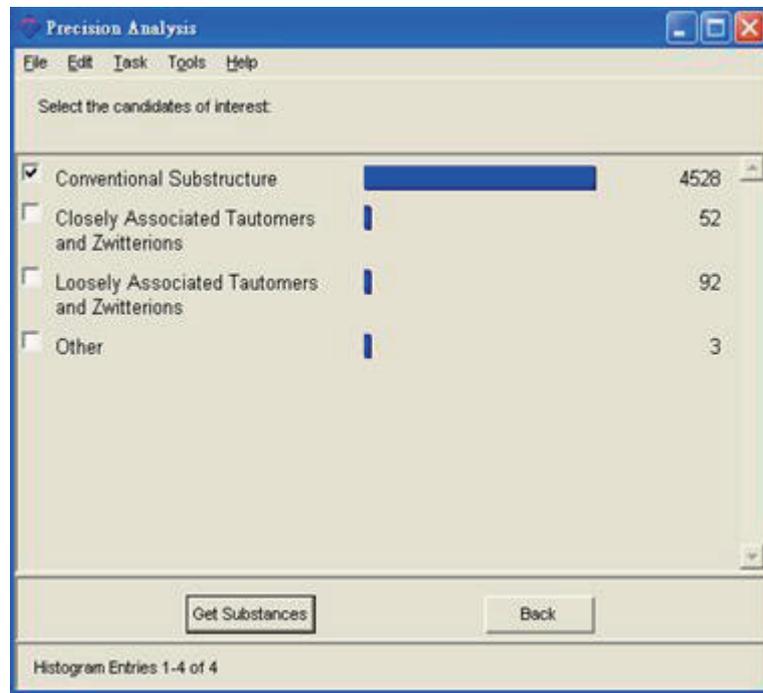
要限制和選擇指定R基團的物質，可從R-group Composition表列中選取，並按下Get Substances。

按Back返回Analyze對話框和選擇其它Analyze選項。

分析檢索的準確性 (Analyze by Search Accuracy)

分析檢索的準確性可知道與結果有關的結構。選取在Analyze對話框內的Precision選項，Precision Analysis對話框會被開啟。

普通的次結構
 相關的互變異構體和離子
 不太相關的互變異構體和離子
 其它



要限制與選擇結構，按下Get Substances。

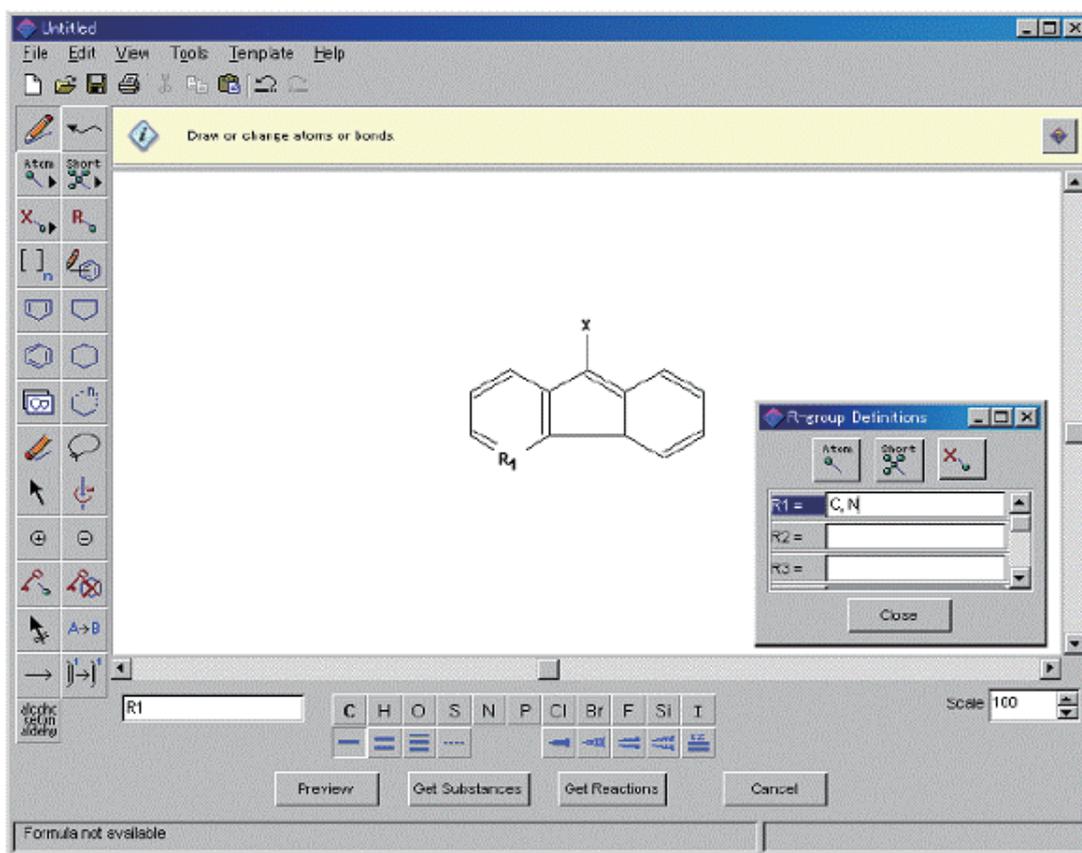
按Back返回Analyze對話框和選擇其它Analyze選項。

分析環結構 (Analyze by Ring Structure)

可以分析和限制結構中的環骨架。

- 只有基本骨架
- 基本骨架和組成元素
- 基本骨架、組成元素、和鍵

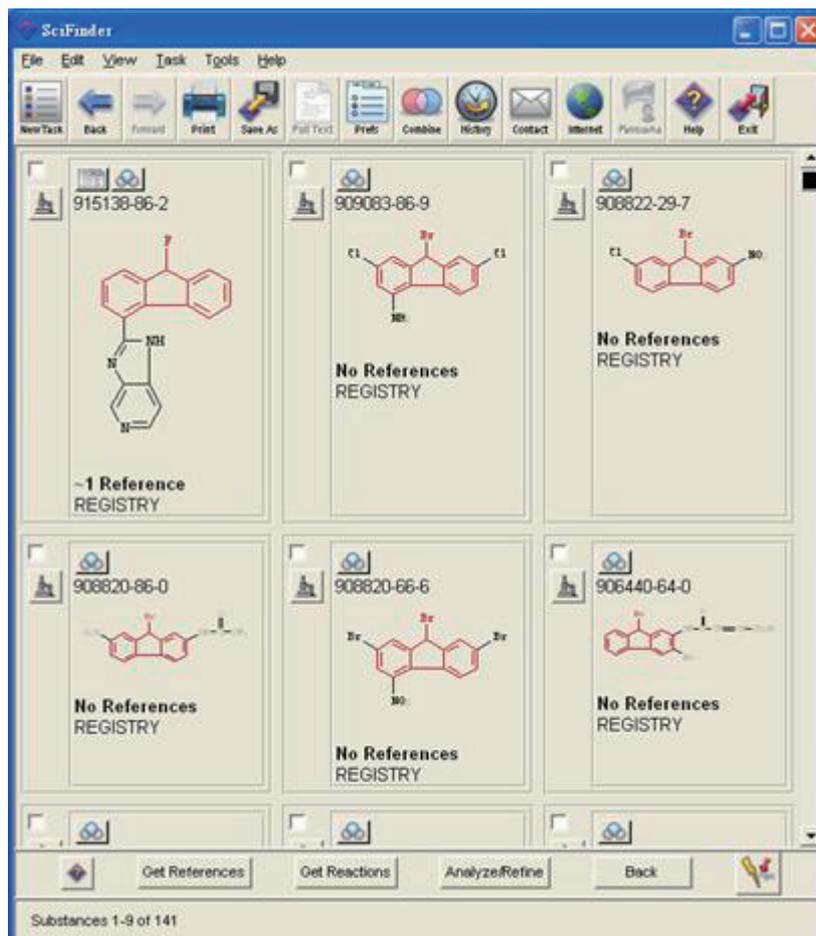
■ 檢索例子



可以在次結構檢索取得取代基和與其它環稠合的物質，使用Lock Out Rings工具或Lock Out Substitution 工具，便可以禁止取代和稠合。

要進行Substructure Search，在按下Get Substances後選取Substructure Search，並按OK。

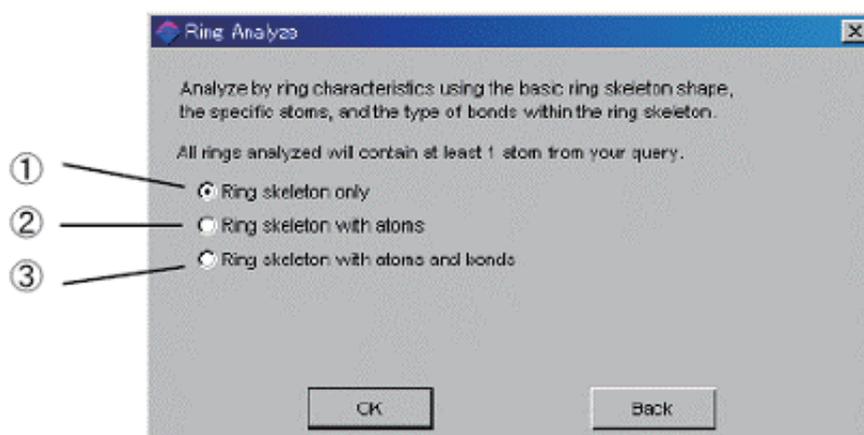
注意：以環結構分析的目的是分析次結構的基本骨架，並不可以用於分析整個骨架。



在結果中，與檢索相符的結構部份會被突顯成紅色。依據環結構的分析，結果會以不同的基本環骨架來分類。

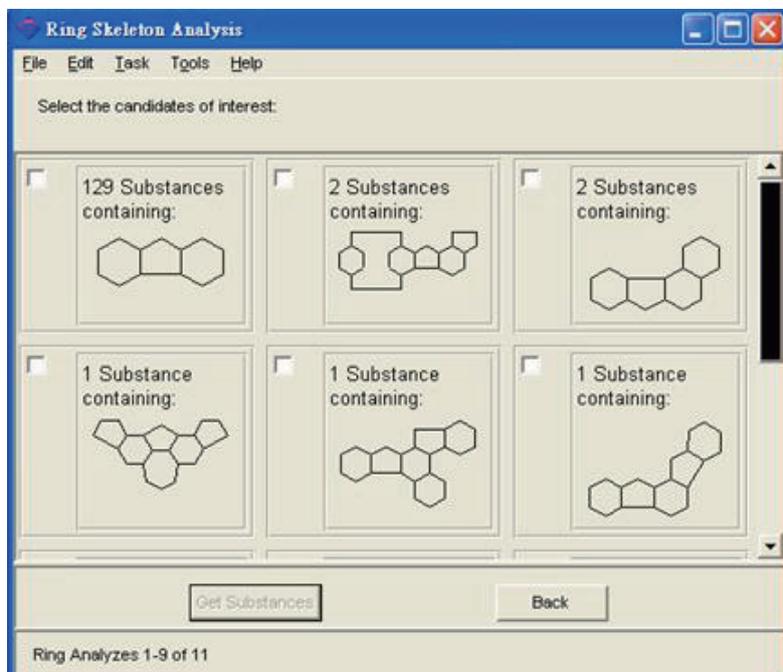
點擊Analyze/Refine圖標的Analyze，若要分析，要先返回檢索結果的視窗，Analyze對話框會出現，然後選取Ring Skeletons 選項，及選取分析所有答案或部份答案，按OK。

Ring Analyze對話框會被開啟，然後選取選項（1）-（3）並按OK。



(1) 依據環結構進行分類 (Classification by ring structure only)

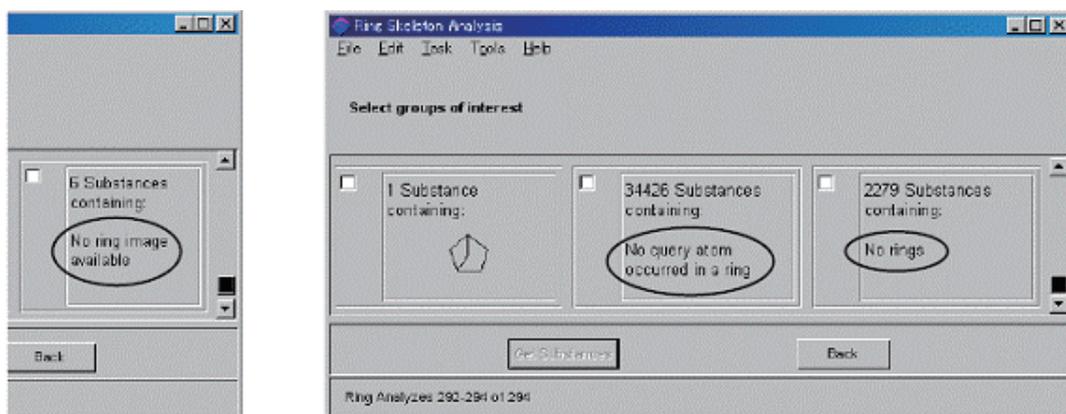
當以環結構進行分類時，只會以基本骨架去分類，並不會考慮其成分和鍵。在Ring Analyze對話框中選取Ring skeleton only並按OK，Ring Skeleton Analysis 對話框會出現，至少有一個基本骨架顯示，並可知道有多少種結構有此基本骨架。



要限制指定基本骨架，在按下Get Substances後，點選核對選框。

按下Back以便返回Analyze對話框，選擇其它Analyze選項。

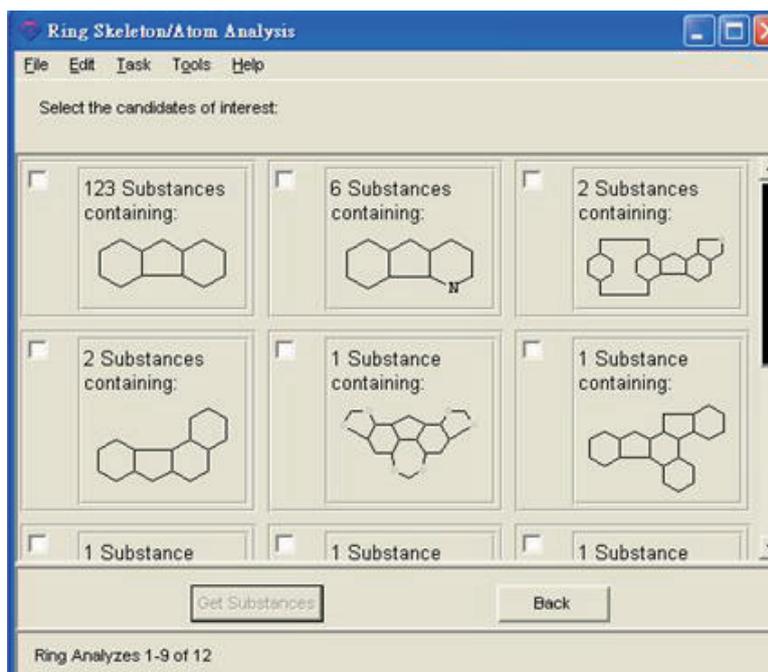
補充：很少出現不能顯示基本骨架之情況，若此情況出現，“no ring image available”將會顯示。可參考以下圖示。



- No query atom occurred in a ring：結果雖然有環結構存在，但環中並沒有欲查詢的原子
- No Rings：沒有環的物質
- Other：不能完成環的基本骨架分析

(2) 分析環的基本骨架和組成元素 (Classification by ring skeleton and composition element)

當以環的基本骨架和組成元素進行分類時，只會以基本骨架去分類，並不考慮其成分和鍵。在Ring Analyze對話框中選取Ring skeleton with atoms並按OK，Ring Skeleton Analysis 對話框會出現，至少一個基本骨架和組成元素會一起顯示，並可知道有多少種結構有此基本骨架和組成元素。

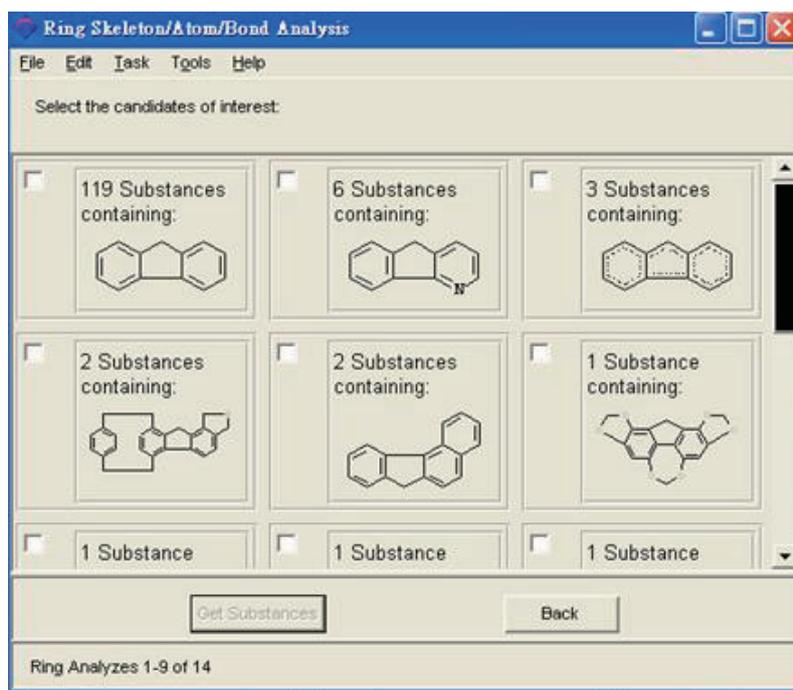


要限制指定基本骨架和組成元素，在按下Get Substances後，點選核對選框。

按下Back以便返回Analyze對話框和選擇其它Analyze選項。

(3) 分析環的基本骨架、組成元素、和鍵的分類 (Classification by ring skeleton, composition element, and bond)

在Ring Analyze對話框中選取Ring skeleton with atoms and bonds並按OK，以環的基本骨架、組成元素、和鍵進行分類。Ring Skeleton/Atoms/Bond Analysis 對話框會出現，至少一個基本骨架、組成元素和鍵會一起顯示，並可知道有多少種結構有此基本骨架、組成元素和鍵。



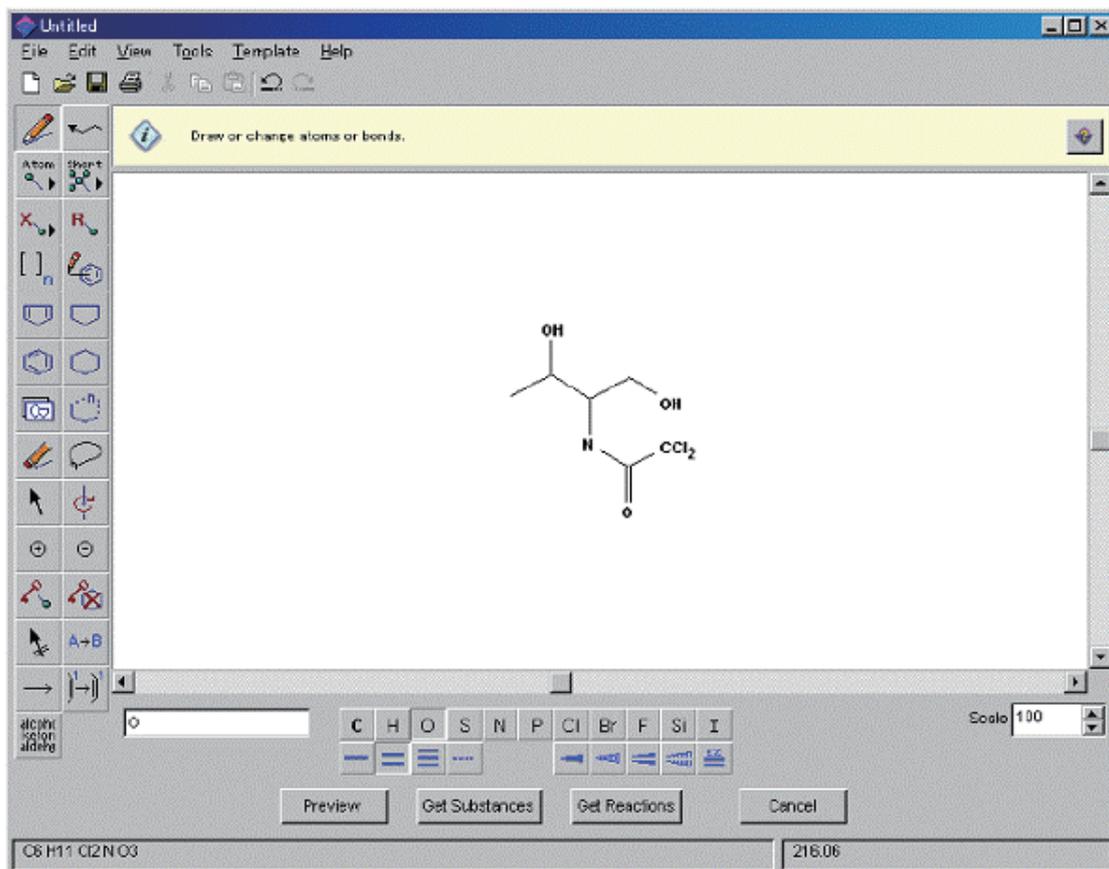
要限制特定組成元素或鍵構成之基本骨架，在按下Get Substances後，點選核對選框。按Back以便返回Analyze對話框和選擇其它Analyze選項。

分析立體結構 (Analyze by Stereo)

SciFinder 可以分析以下的立體結構。

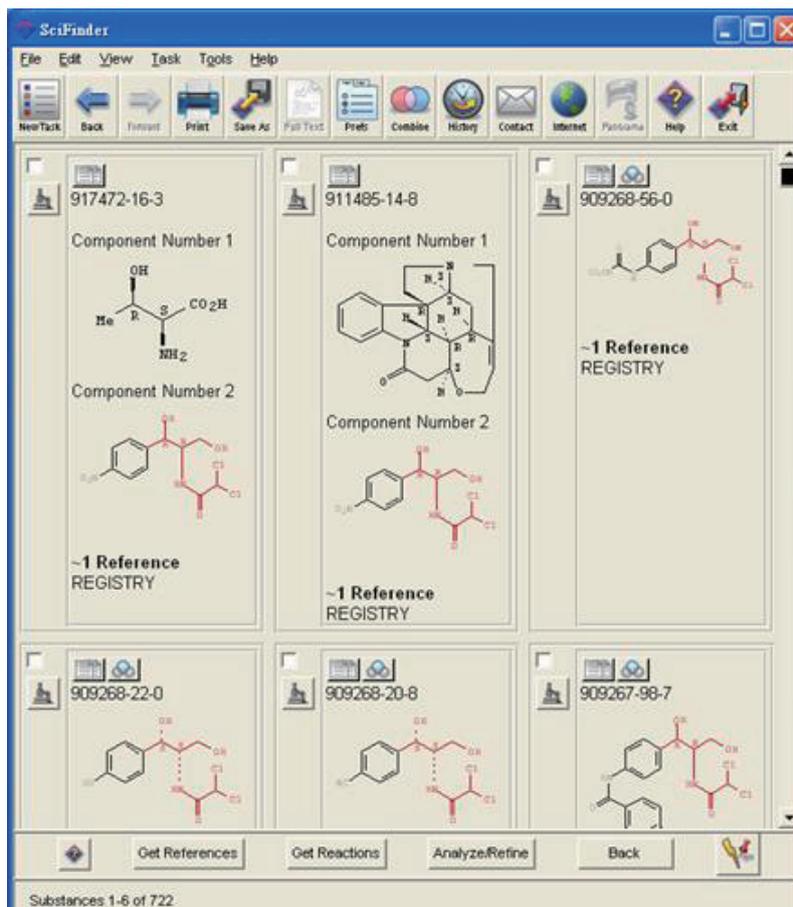
- 含立體鍵之結構
 - 完全相同的立體結構
 - 完全鏡像的立體結構
 - 部份立體結構相符
 - 沒有立體結構相符
 - 沒有立體結構
- 不含立體鍵之結構

■ 檢索例子 - 1



作次結構檢索，會查出有取代基和與其它環稠合的物質。使用Lock Out Rings工具或Lock Out Substitution 工具，便可以禁止取代和稠合。

要進行Substructure Search，在按下Get Substances後選取Substructure Search，並按OK。

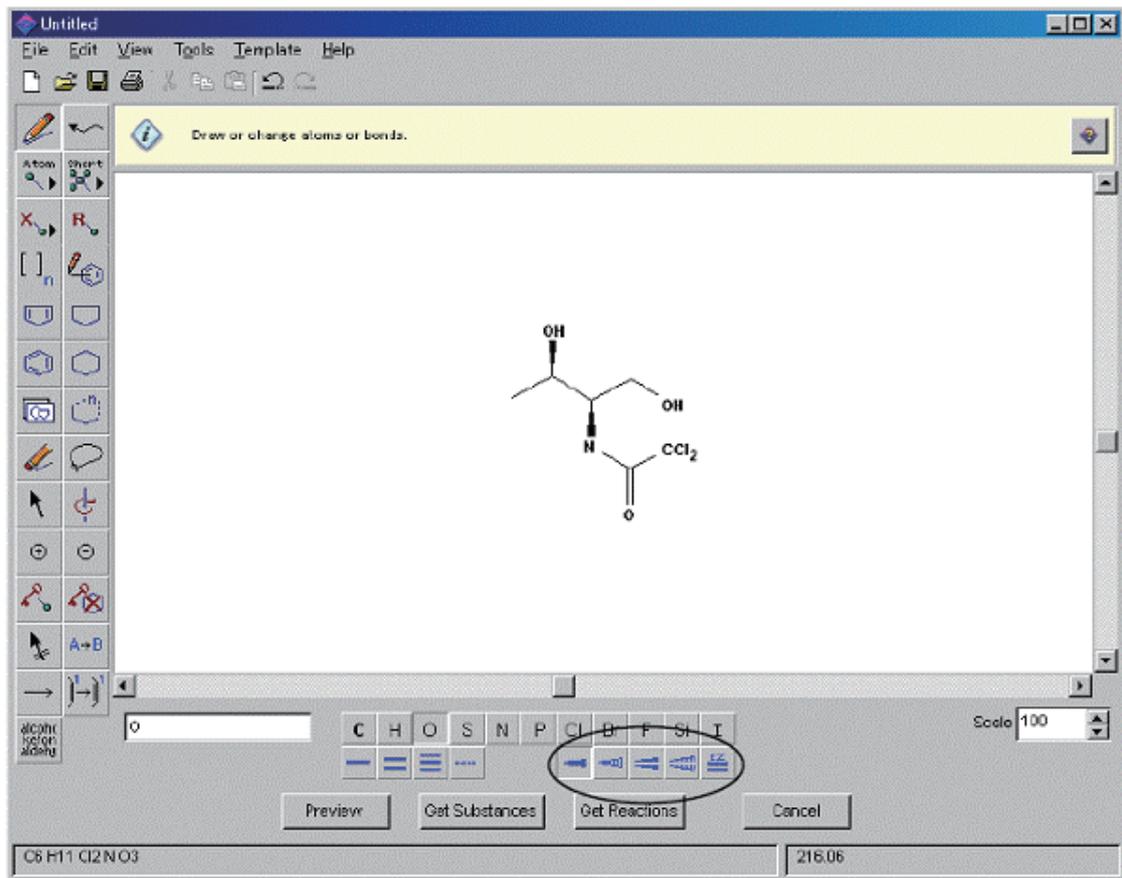


在結果中，與檢索相符的部份會被突出顯示成紅色。若要以立體結構分析，按下Analyze/Refine圖標的Analyze。若只分析某一部份的答案，要先返回檢索結果的畫面，並按下你想要分析的物質旁的核對選框，Analyze對話框會出現，然後選取Stereo選項並按OK，Stereo Analysis對話框就會出現。

Select the candidates of interest:		
<input type="checkbox"/>	Stereo in answer structure	460
<input type="checkbox"/>	No stereo in answer structure	262

物質會被分類成「有」或「沒有」立體結構兩類，選擇方框，並按下Get Substances選取物質。

■ 檢索例子 - 2

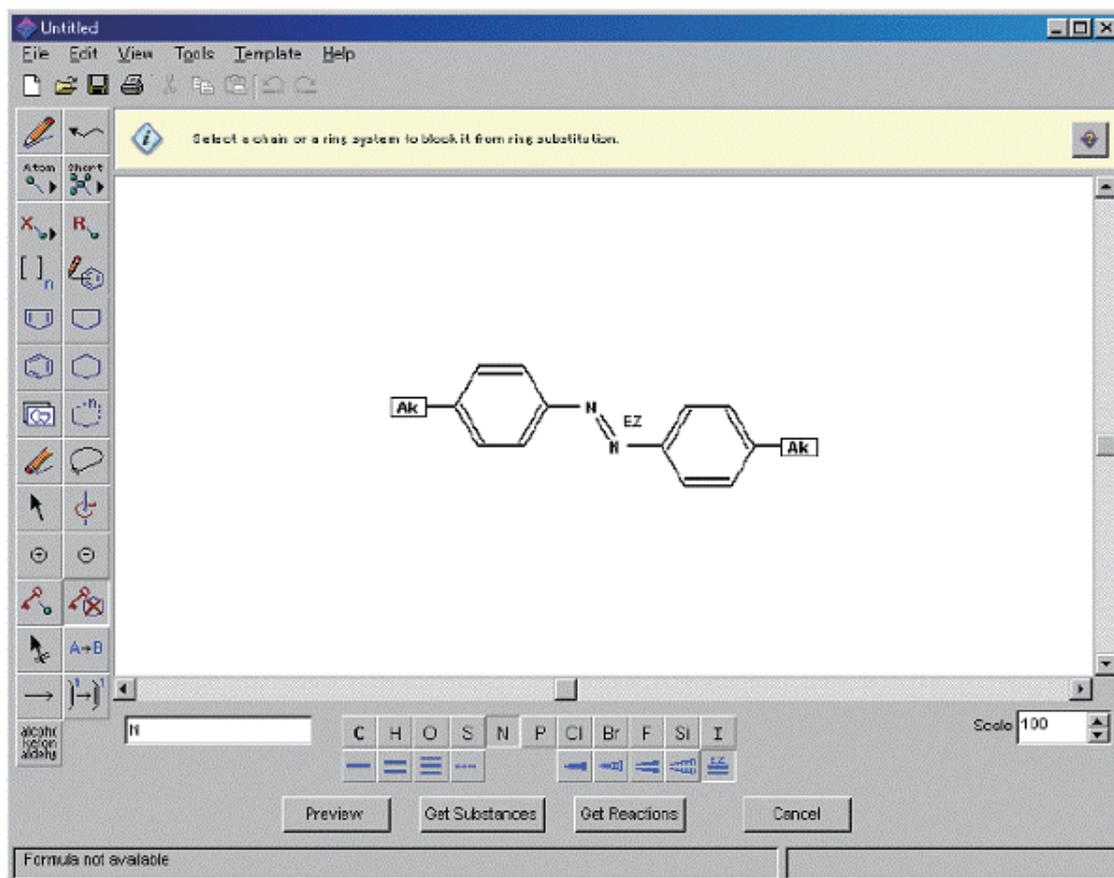


按下Get Substances並進行次結構檢索，立體分析（Stereo Analysis）對話框會從開始檢索時出現。分類的模式如下。

Category	Count
完全相同的立體結構	287
鏡像異構的立體結構	30
部份立體結構相符	48
沒有立體結構相符	47
沒有立體結構	252

欲檢索立體異構體時，點選繪製選項繪製一個雙鍵，此雙鍵旁便會被加上字母「E，Z」，以註明是立體部分。

■ 檢索例子-3



按下Get Substances並進行次結構檢索，Stereo Analysis對話框會從開始檢索時出現。此時，分類的模式顯示如下。

Select Histogram Entries of interest:	Count
<input checked="" type="checkbox"/> Double bond geometry as drawn	105
<input type="checkbox"/> Stereo that doesn't match query	39
<input type="checkbox"/> No stereo in answer structure	403

和檢索結構一樣的幾何雙鍵

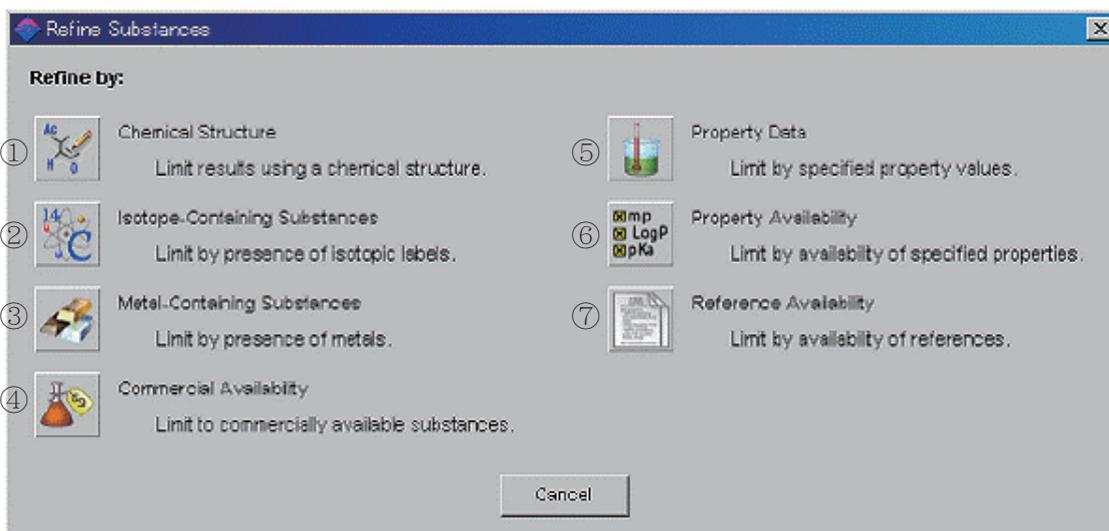
不相符的立體鍵

無立體鍵的結構

篩選答案 (Refining Answers)

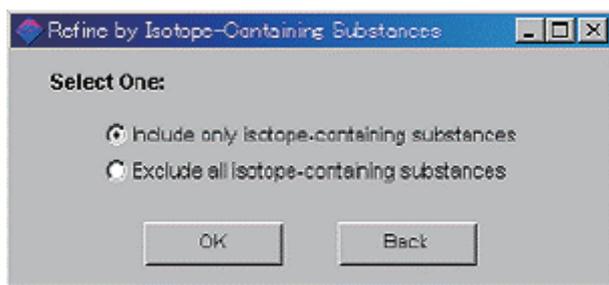
當有太多答案出現時，你可以使用篩選功能去限制並簡化這些答案。

進行篩選時按下 Analyze/Refine 鍵，並選擇 Refine。Refine Substances 對話框會出現。

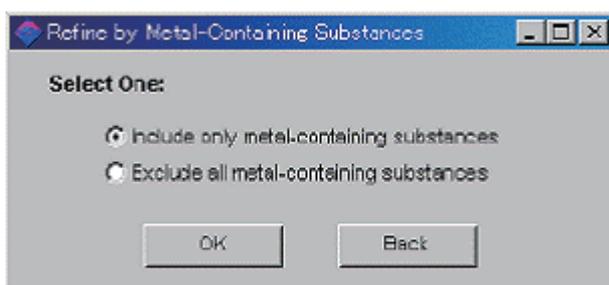


① 當你選取化學結構 (Chemical Structure)，繪製板便會出現。這裡請在已檢索的結構旁繪製取代基團或其它片段結構，按下 Get Substances。結果會以篩選條件進行檢索，用戶可以看到其篩選的結構並含有繪製前輸入的兩個結構。

② 當你點選 Isotope-Containing Substances，可以從同位素物質篩選。

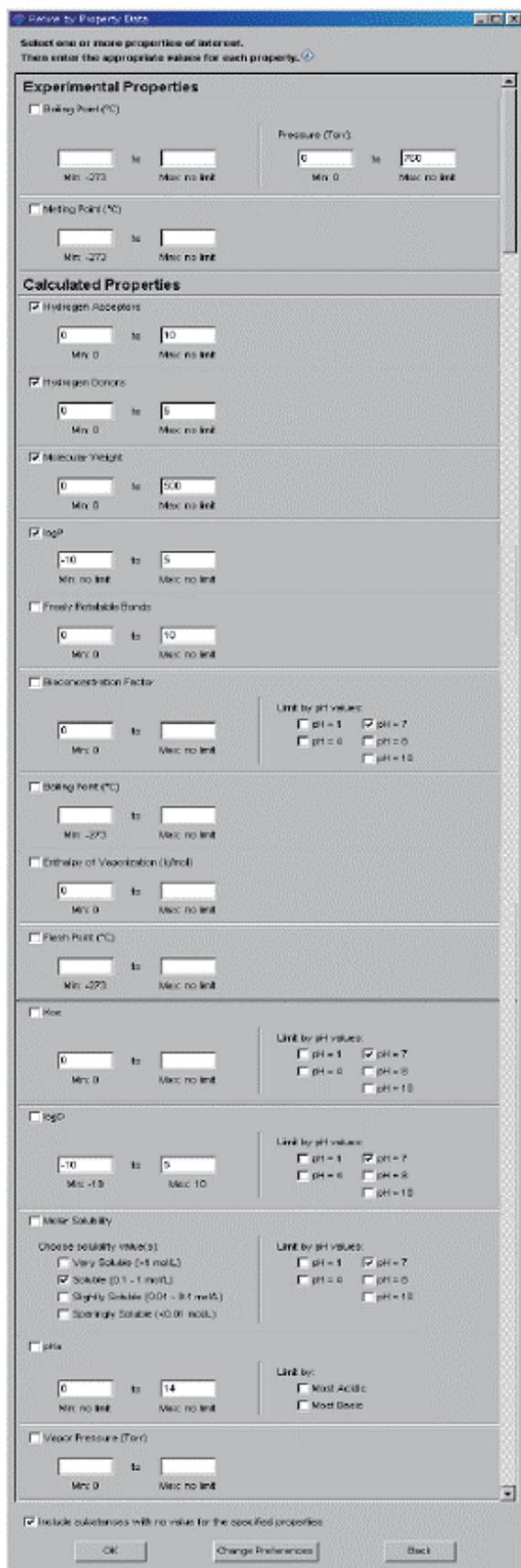


③ 當選取 Metal-Containing Substances，只選取含金屬原子的物質。



④ 當選取 Commercial Availability，只選有供貨商目錄記錄的物質。

- ⑤ 選取Property Data, Refine by Property data對話框便會出現，可以從物質性質資料來篩選。（只限有次結構SSM檢索的帳號）



Hydrogen Acceptors	氫受體
Hydrogen Donors	氫供體
Molecular Weight	分子量
LogP	分配係數（辛醇/水）
Freely Rotatable Bonds	自由轉動鍵
Bioconcentration Factor	生物濃縮因子
Boiling Point	沸點
Enthalpy of Vaporization (*1)	蒸發焓
Flash point	閃點
Koc	有機物質吸收常數
LogD	離子化合物的分配係數（辛醇/水）
Molar Solubility (*2)	莫爾溶解度
PKa (= -Log Ka) (*2)	-Log（酸鹼離解常數）
Vapor Pressure	氣壓
Melting Point	溶點

*1 以 760 Torr 計算

*2 以 25 °C 計算

選取需限制的性質，並且輸入或選取數值，亦可以同時選定多項性質。

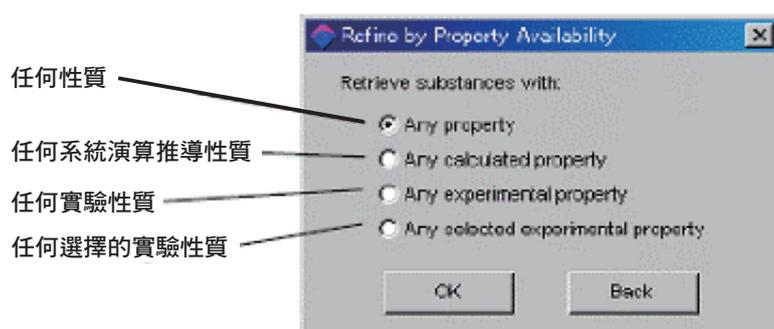
若在方框中選取Include substances with no value for the specified properties，結果中沒有已選性質資料提供的物質亦會被顯示出來。用戶不選擇此方框，則只會顯示有其性質資料的物質。

在選取篩選by Property Data對話框時，用戶會發現有4種性質已被選擇（Hydrogen acceptors和donors，molecular weight，和LogP value）。這些性質是由Pfizer公司的Dr. Christopher A. Lipinski提議的參數（*），並廣泛用於製藥行業中，作為口服藥物的基本特性，這些數值都包含在Preference Editor之Analyze tab的預設值裡。

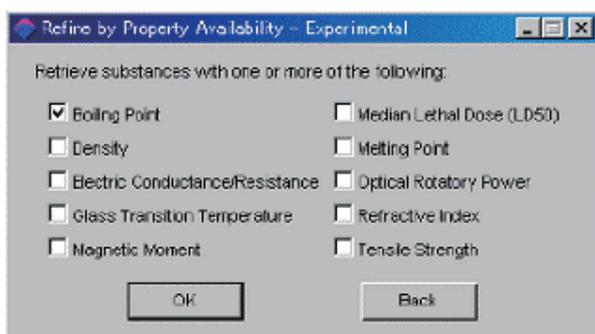
* C.A. Lipinski; F. Lombardo; B.W. Dominy; P.J. Feeney, Adv. Drug Delivery Rev., 23, 3-25 (1997)。

要改變這些預設值，按Change Preference鍵，輸入所有條件，並以真實的性質資料篩選後，按OK。

⑥選取Property Availability，以現有的性質資料去篩選。

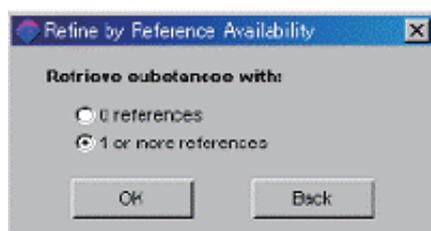


當選擇Any selected experimental property，便可檢索出該物質之性質資料，如選擇沸點，那結果全都是其沸點的資料提供。



Boiling Point 沸點	(°C)
Density 密度	(g/cm-3)
Electric Conductance/電導度	(S)
Electric Resistance/電阻率	(Ω)
Glass Transition Temperature 玻璃轉移溫度	(°C)
Magnetic Moment 磁矩	(μB)
Median Lethal Dose (LD50) 半致死劑量	(mg/kg)
Melting Point 溶點	(°C)
Optical Rotatory Power 旋光度	
Refractive Index 折射率	
Tensile Strength 拉力強度	(MPa)

⑦選取Reference Availability，便可選擇有相關文獻的物質。



結束次結構檢索 (Finish Substructure Search)

按下文件選單的 New Task (新任務) 或工具列的 New Task (新任務) 圖標，結束次結構檢索。

如想退出SciFinder，請選擇文件選單的Exit (退出) 或工具列的 Exit (退出) 圖標即可。

第四章 相似結構檢索 (Similarity Search)

若用戶的帳號附有SciFinder Substructure Module (SSM) 的功能，就能用相似結構檢索以下的物質。

- 與已繪製的結構完全相同 (跟第二章的精確結構檢索相同)
- 包含檢索結構的多元物質，例如：聚合物，配合物等
- 結構相似的物質，但元素成份、取代基和其位置有所不同
- 結構相似的物質，但只有少部分與檢索結構互相符合
- 與檢索結構相似，但有不同大小的環結構

檢索的結果包括以下的資料。

- 物質基本資料 (如名稱、結構、CAS登錄號)
- 實驗性質和系統演算推導性質
- 摘要、相關參考和書目資料
- 供貨商目錄資料
- 物質管制和註冊資料
- 物質的反應資料 (只適用於有SSM帳號的用戶)

用戶可以用篩選 (Refine) 的功能使檢索的結果更加精確，而只有在以結構進行篩選後，才能使用分析 (Analyze) 的功能。

預覽 (Preview) 和自動提示 (Keep me posted ，只適用於SciFinder的用戶) 的功能在不能此使用。

相似結構檢索簡介 (Introduction of Similarity Search)

在相似結構的檢索中，SciFinder會用Tanimoto程式來進行檢索與查詢物質相似的結構，並給予相似評分。

■ 相似結構評分

相似結構檢索能找出與查詢結構最為相似的結構，其2-D小分子的相似度會以Tanimoto程式來計算。

■ 以下是Tanimoto的計算公式，評分是以CAS的結構描述子為基本：

$$\text{Tanimoto Score} = \frac{100 \times C}{(QS + FS)}$$

- C = 代表檢索結構和結果結構相同的描述子數目
- QS = 代表在檢索結構中的描述子數目
- FS = 代表在結果結構中的描述子數目

■ 結構描述子的介紹

- 原子數
- 環數
- 原子排列
- 鍵排列
- 周邊原子
- 相連原子數
- 元素成份
- 環類型

■ 相似性的計算中並不考慮以下因素

- 氫原子的數目
- 離子
- 同位素標識
- 立體結構

■ 多元物質的處理

- 每一個多元物質的成份，都會被給予相似評分 (Tanimoto score)。最高評分的成份物質，將會在分析相似的結果中顯示。
- 用戶檢索單一物質時，按下Get Substance後，勾選Filter中的Structure components即可。

■ 注意事項

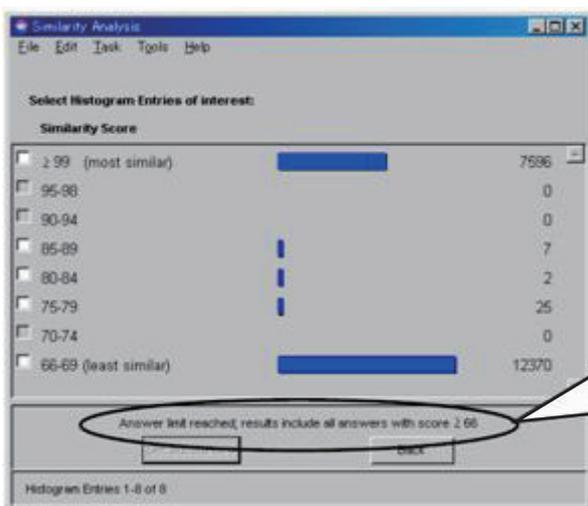
- 相似結構檢索並不適用於R 基團、可變原子、重複單元和可變的取代位置工具。
- 分析和篩選不適用於相似結構檢索。
- 在篩選結果時，相似評分將不會顯示。
- 相似評分不能以sfr 形式保存（只適用於SciFinder）

■ 相似評分的顯示

- 以整數顯示，不設小數點。

■ 系統限制

- 只會顯示60分以上的相似結構結果。
- 最多只能顯示20,000 個相似結果。

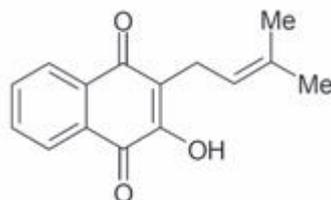


系統只能顯示相似評分60分以上，最多20000個相似結構結果。

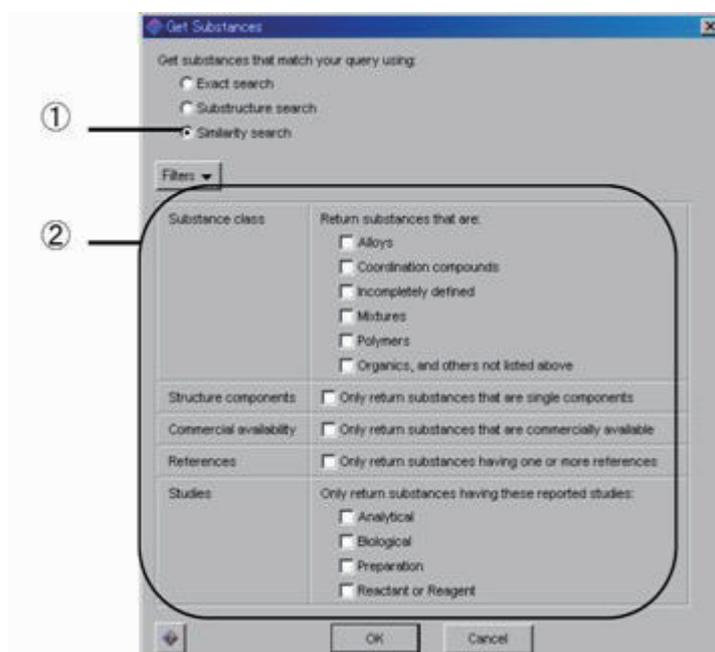
進行相似結構檢索 (Performance of similarity search)

■ 例子：

檢索以下的相似結構

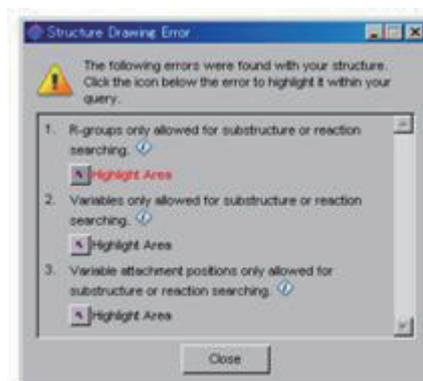


當繪製結構後，按下Get Substance，Get Substance對話框將會出現。

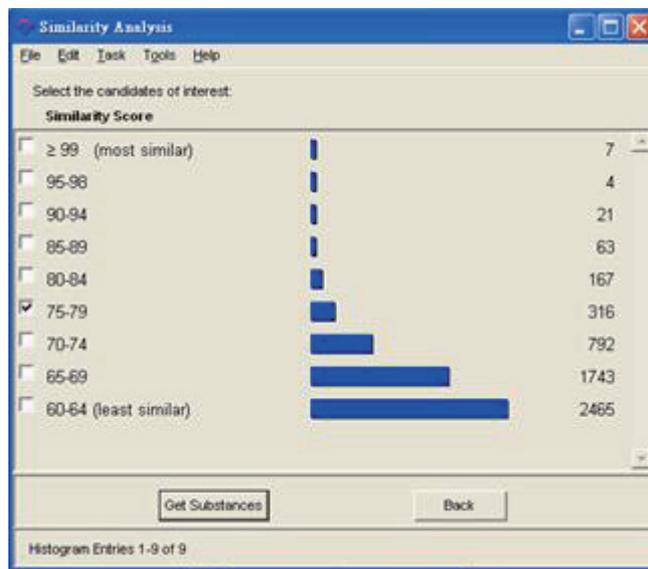


①選擇Similarity Search開始進行相似結構檢索。

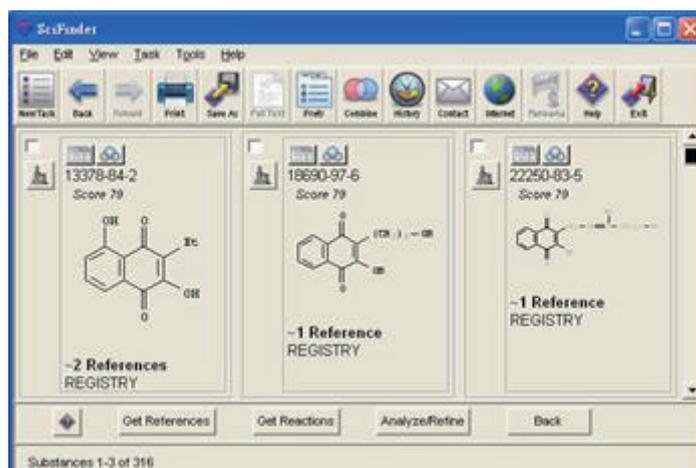
若繪製的結構含有R基團或可變原子 (X, Ak)，按下OK後，便會出現以下的結構繪圖錯誤視窗。



②可點選Filters，來限制檢索結果到指定選項。按下OK後，Tanimoto的相似評分會以統計圖表來顯示。



選擇合適的評分，然後按Get Substances查看相似之結構。



相似評分會於CAS登錄號下顯示。

用戶可作篩選，按下Analyze/Refine中的篩選（Refine），篩選對話框便會出現結果。

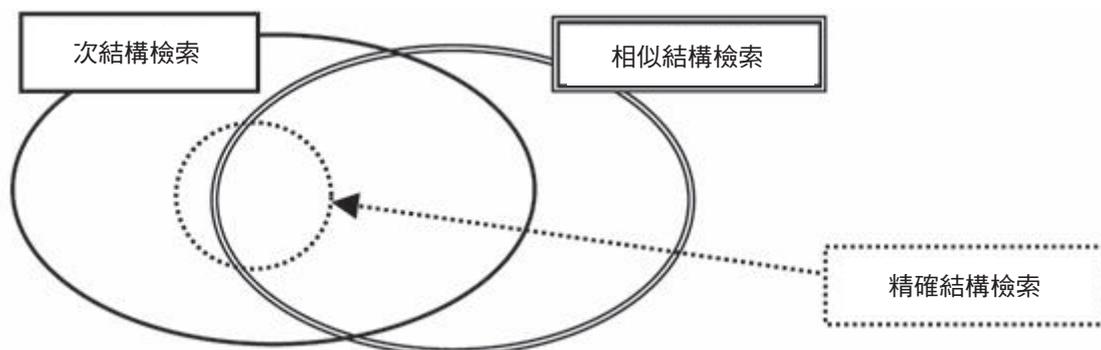
注意：相似結構檢索不能直接使用分析功能（Analyze），用戶必須先以結構進行篩選（Refine）

比較：精確結構檢索、次結構檢索和相似結構檢索 (Differences between Exact Chemical structure search, substructure)

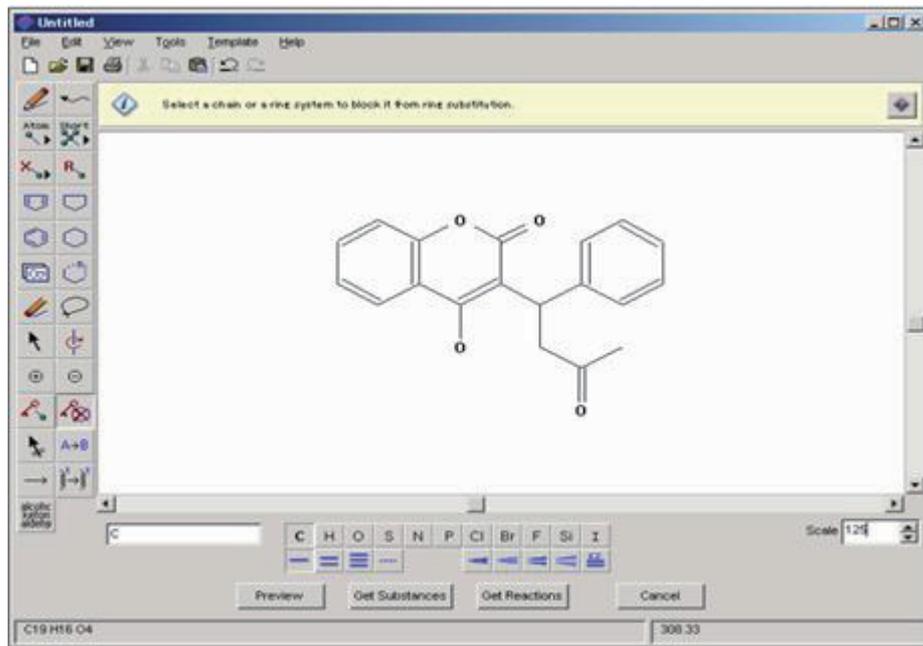
不同類型的檢索、會得到不同的結果

檢索類型	能檢索得到的結果	不能檢索得到的結果
Exact Search 精確結構檢索	<ul style="list-style-type: none"> 與檢索的結構完全相同，以及其多元物質（鹽、聚合物、化合物） 互變異構體（Tautomers） 	<ul style="list-style-type: none"> 含取代基的物質
Substructure Search 次結構檢索	<ul style="list-style-type: none"> 與檢索的結構完全相同，以及其多元物質（鹽、聚合物、化合物） 互變異構體（Tautomers） 含取代基的物質 	<ul style="list-style-type: none"> 兩者的結構相似，但並不是其次結構，如乙烷基（甲基的結果便不會出現）
Similarity Search 相似結構檢索	<ul style="list-style-type: none"> 與檢索的結構完全相同，以及其多元物質（鹽、聚合物、化合物）。或有相似結構的物質，但其元素成份、取代基和其位置與檢索的結構不同 兩者的結構相似，但並不是其次結構，如乙烷基（甲基的結果便不會出現） 物質含有的環數目和檢索的結構不同（輸入6-5環時，有可能獲得6-6環的結果） 	<ul style="list-style-type: none"> 結果的結構有較大的取代基（相似程度低）

三種檢索的相互關係



■ 具體例子：利用不同的檢索方法來查詢華法林（Warfarin）的結構



■ 檢索結果的數目

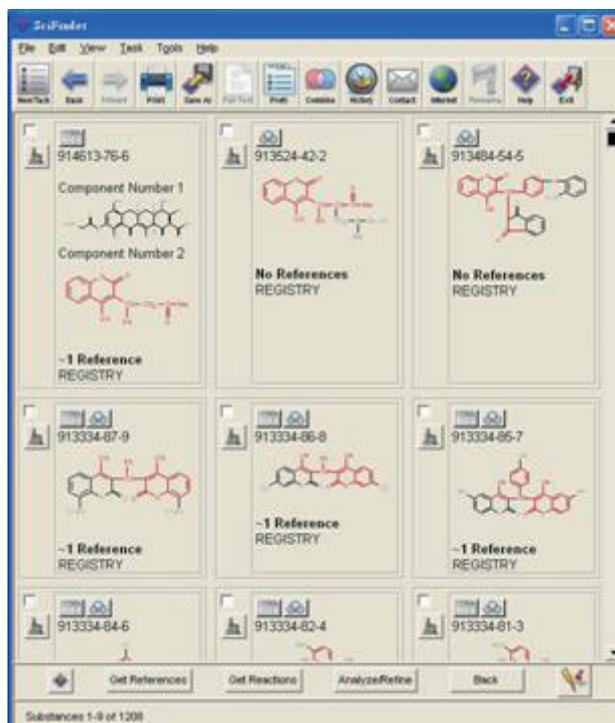
精確結構檢索（137項）

可檢索得到的結果：華法林和其鹽類、離子、立體異構體、互變異構體、含氬的標識化合物

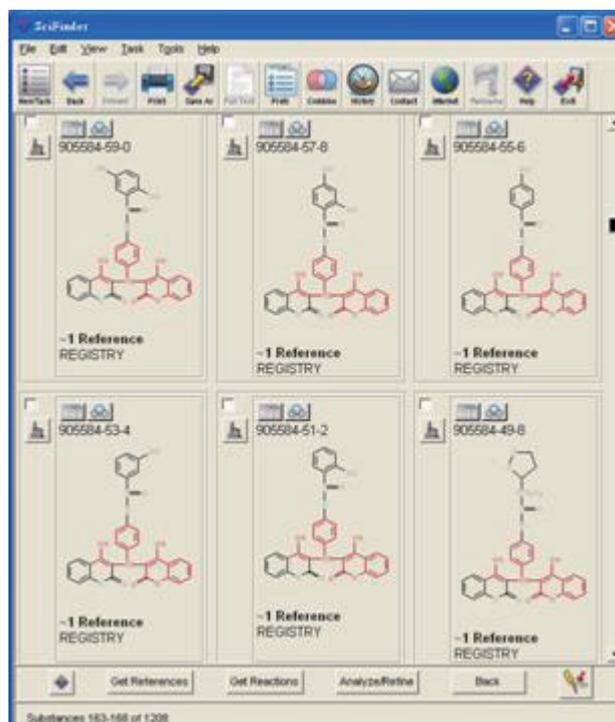
以上環形結構亦會被檢索出來

次結構檢索 (1208項)

可檢索得到的結果：包括結構相同物質，以華法林為取代基的物質，以及其多元物質（鹽、化合物、附加物）



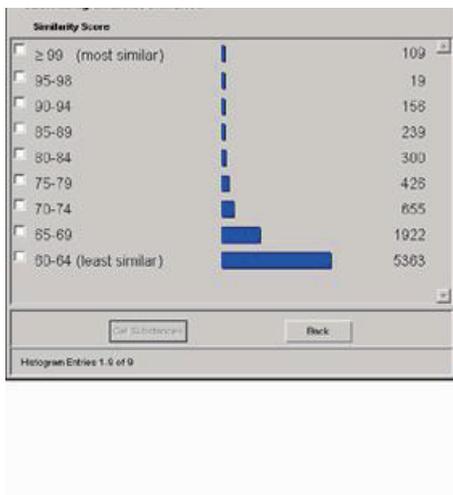
亦可同時查出以下的異構體



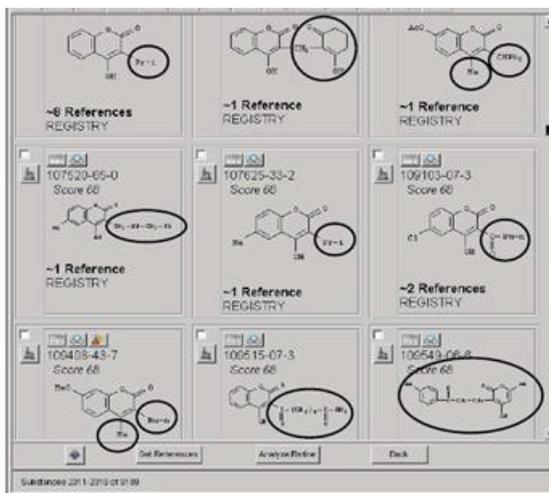
相似結構檢索

可檢索得到的結果：包括結構相同物質，以及用Tanimoto方法計算相似評分值超過60分者。

相似度分佈

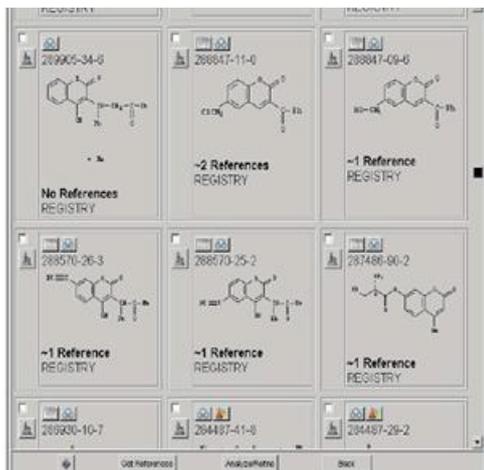


只有用相似結構檢索才能取得的結果



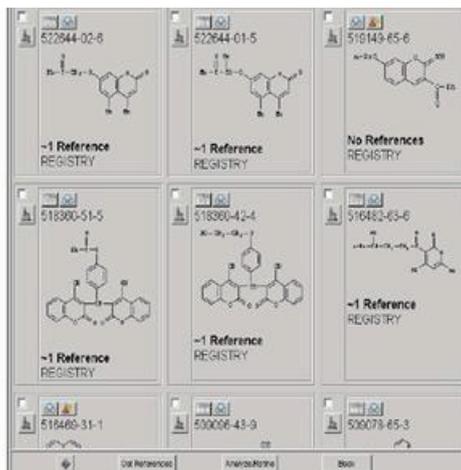
相似結構檢索與其它檢索方法的比較

與精確結構檢索比較



不能在精確結構檢索中得到
288570-06-9和288570-07-0

與次結構檢索比較



不能在次結構檢索中得到
518360-49-1，518360-50-4和518360-52-6

結束相似結構檢索 (finish similarity search)

完成相似結構檢索後，從文件選單 (File Menu) 中選擇新任務 (New Task)，或在主選單中按下New Task的圖標。

結束SciFinder，從文件選單 (File Menu) 中選擇離開 (Exit SciFinder)，或在主選單中按下Exit的圖標。

相似結構檢索的參考文件 (Reference Date of Similarity)

- SciFinder Scholar的Help
(按下Index和進入Similarity Searching)
- P. Willett, J.M. Barnard, and G.M. Downs, "Chemical Similarity Searching", J. Chem. Inf. Comput. Sci. , 38, 983-996 (1998) .
- P. Willett, "Similarity-based approaches to virtual screening." Biochem. Soc. Trans. , 31, 603-606. (2003) .

第五章 化學反應檢索 (Reaction Search)

在SciFinder 中，用戶可用化學結構繪製來檢索化學反應，並設定物質在反應式中的角色（反應物、試劑、產物或任何角色）。用戶也可以用反應位置工具和原子繪圖工具作精確的反應檢索。

這個章節會說明怎麼檢索化學反應：

化學結構

- 只指定反應物或產物
- 不指定反應物和產物

官能基

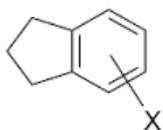
- 只用官能基作檢索
- 將官能基和結構一起作檢索

在檢索化學反應的結果中，用戶可以得到以下資料：

- 含有繪製結構和官能基的化學反應式
- 合成物質的方法
- 供貨商的資料
- 管制化學品目錄及其法規
- 文摘、目錄資料等和反應式相關的資料

從結構去檢索反應式 (Search from One Side of Reaction)

■ 檢索例子



檢索左方結構的相關反應

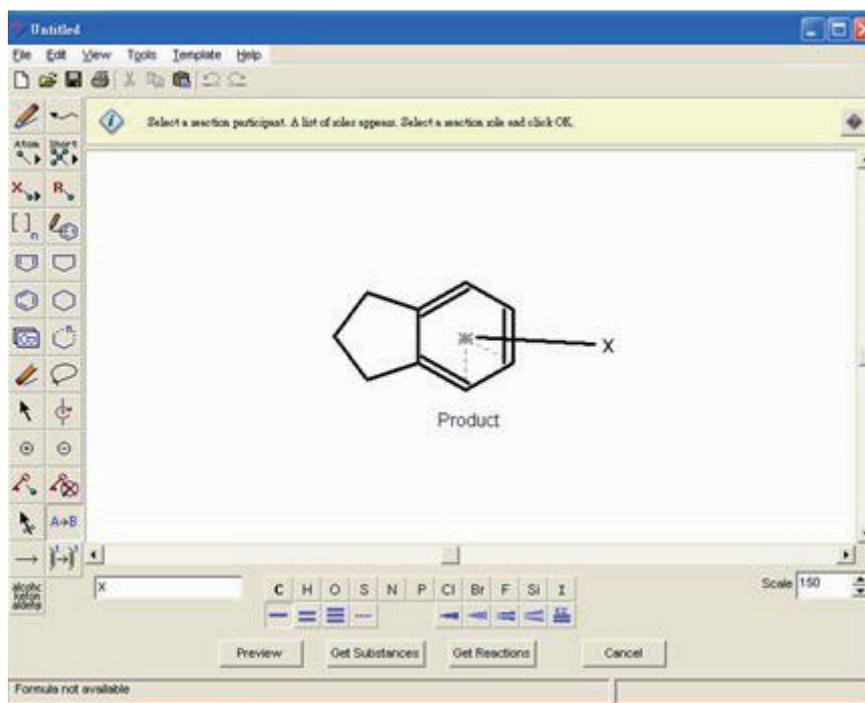
- 產物
- 有一個鹵原子連接苯環
- 沒有環取代

請參考第一章的說明，有關怎樣繪製結構和繪製結構工具的功能。

用戶可從文件選單中開啟舊檔，開啟之前保存的結構文件。

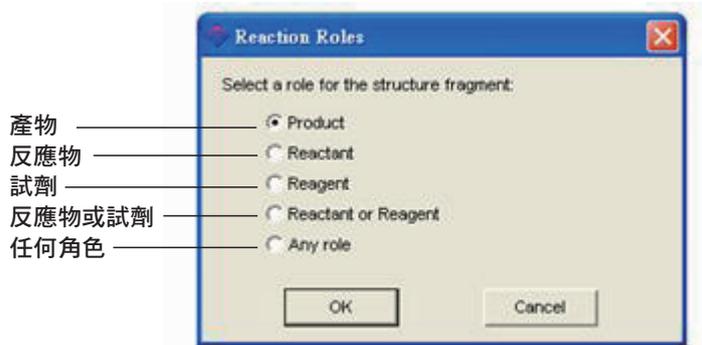
繪圖方法：

- 用苯環工具繪製苯環。
- 點選環戊烷環工具，將游標移至已繪製的苯環左邊並放開滑鼠，將苯環和環戊烷結合。
- 點選X選單工具（選擇X：任何鹵原子），在環結構以外的地方按滑鼠放置X。
- 點選可變的取代位置工具。
- 點選及拖曳X取代基至取代位置，取代基和其位置將顯示為紅色，設定完成後在取代基和取代位置之間會出現一筆虛線。
- 最後，點選鎖定環取代工具。

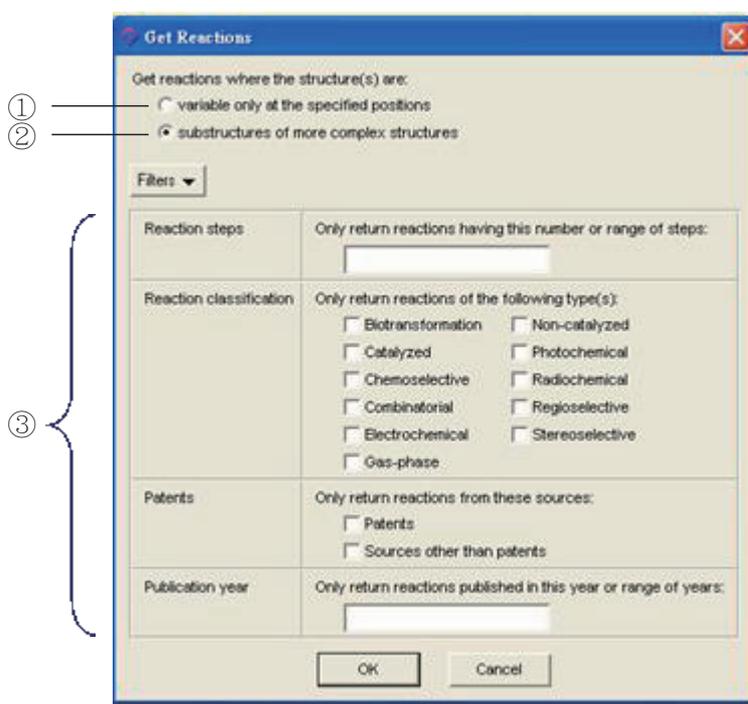


進行化學反應檢索 (Performance of Reaction Search)

在繪製結構之後，點選反應角色工具，反應角色對話框將會出現，請設定物質在反應式中的角色。



選取產物按OK，然後在繪製板中按下Get Reaction，反應檢索視窗會出現如下。



Reaction Steps 反應步驟

限制反應步驟

Reaction classification 反應分類

限制反應類型

- Biotransformation 生物轉化
- Catalyzed 催化
- Chemoselective 化學選擇
- Combinatorial 組合
- Electrochemical 電氣化學
- Gas-phase 氣相
- Non-catalyzed 無催化
- Photochemical 光化學
- Radiochemical 放射化學
- Regioselective 區域選擇性
- Stereoselective 立體選擇性

Patents 專利

限制專利文件

Publication year 出版年份

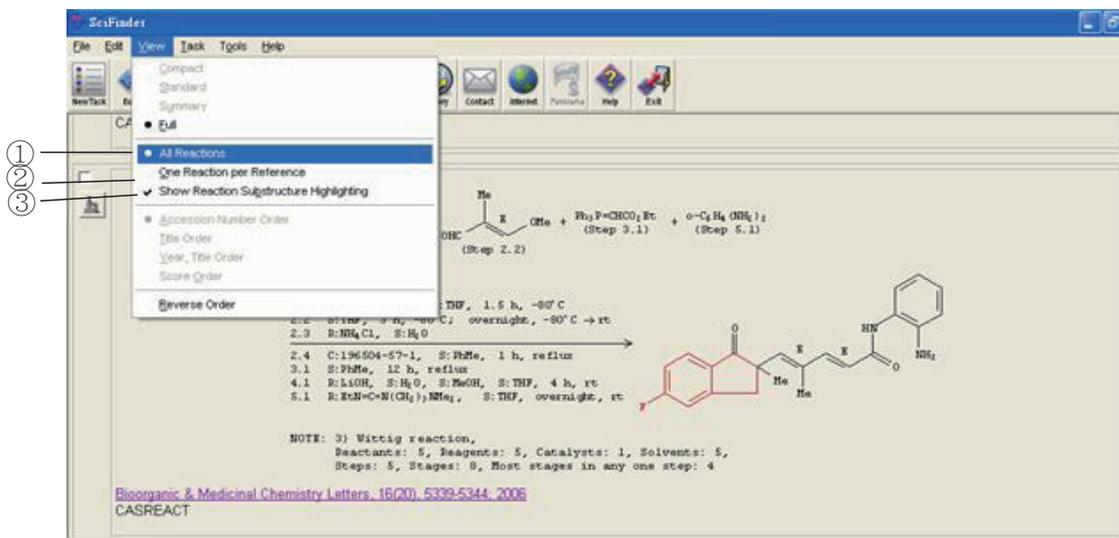
限制出版年份

請選擇任何一個檢索方法：

- ① 變化只適用於指定的結構位置
- ② 為複雜結構中的次結構

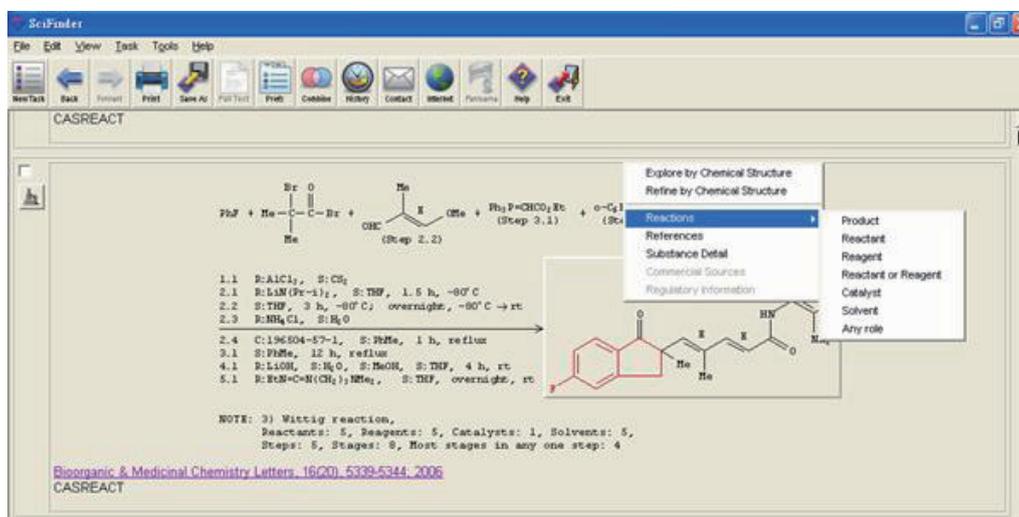
在這個例子中選擇②substructures of more complex structures，按下OK。如想限制檢索範圍，可點選③Filters選擇。

檢索結果會出現在SciFinder的視窗中，用戶可從工具列中的瀏覽，選擇顯示所有反應式①或以文摘做單位②。



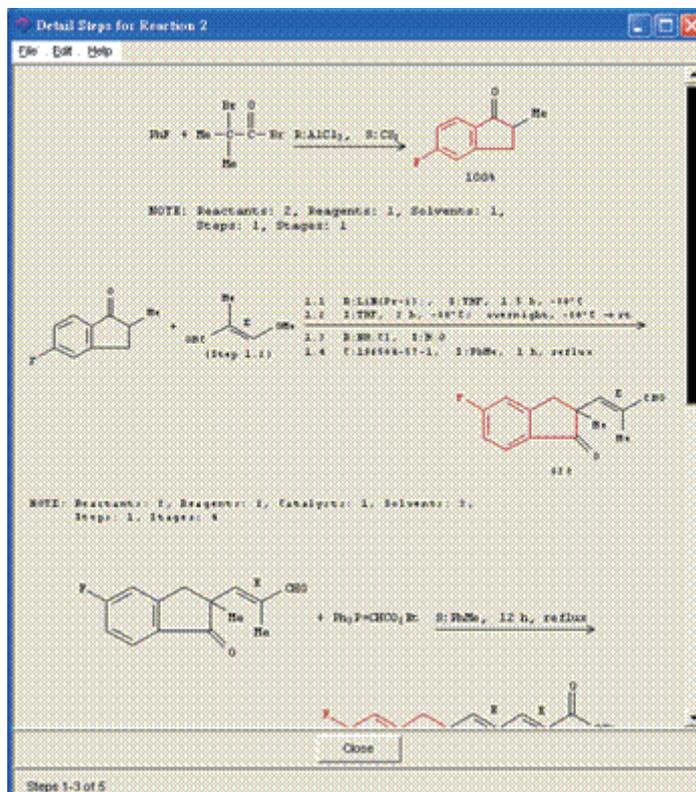
檢索的次結構部份顯示為紅色③，方便查看。檢索結果是按文獻收藏號順序來排列（最新文獻開始），用戶可在工具列的瀏覽中選擇反序排列。

用戶可以從結果中看到反應式、詳細反應條件、CAS編者寫下的重點（NOTE）和文摘連結。此外，以滑鼠右鍵點擊反應式中的任何物質，便可輕易取得有關資料。用戶亦可以列印（Print）和保存（Save As）檢索結果。



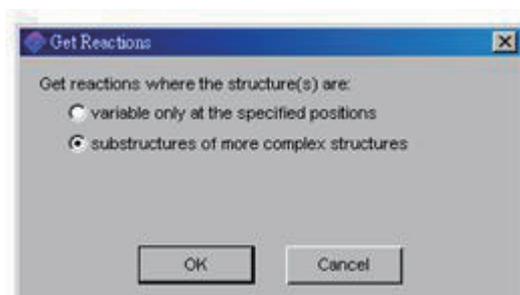
多步驟反應顯示 (Display Multi-steps Reaction)

按下顯微鏡圖像，便可看到多步驟反應式。

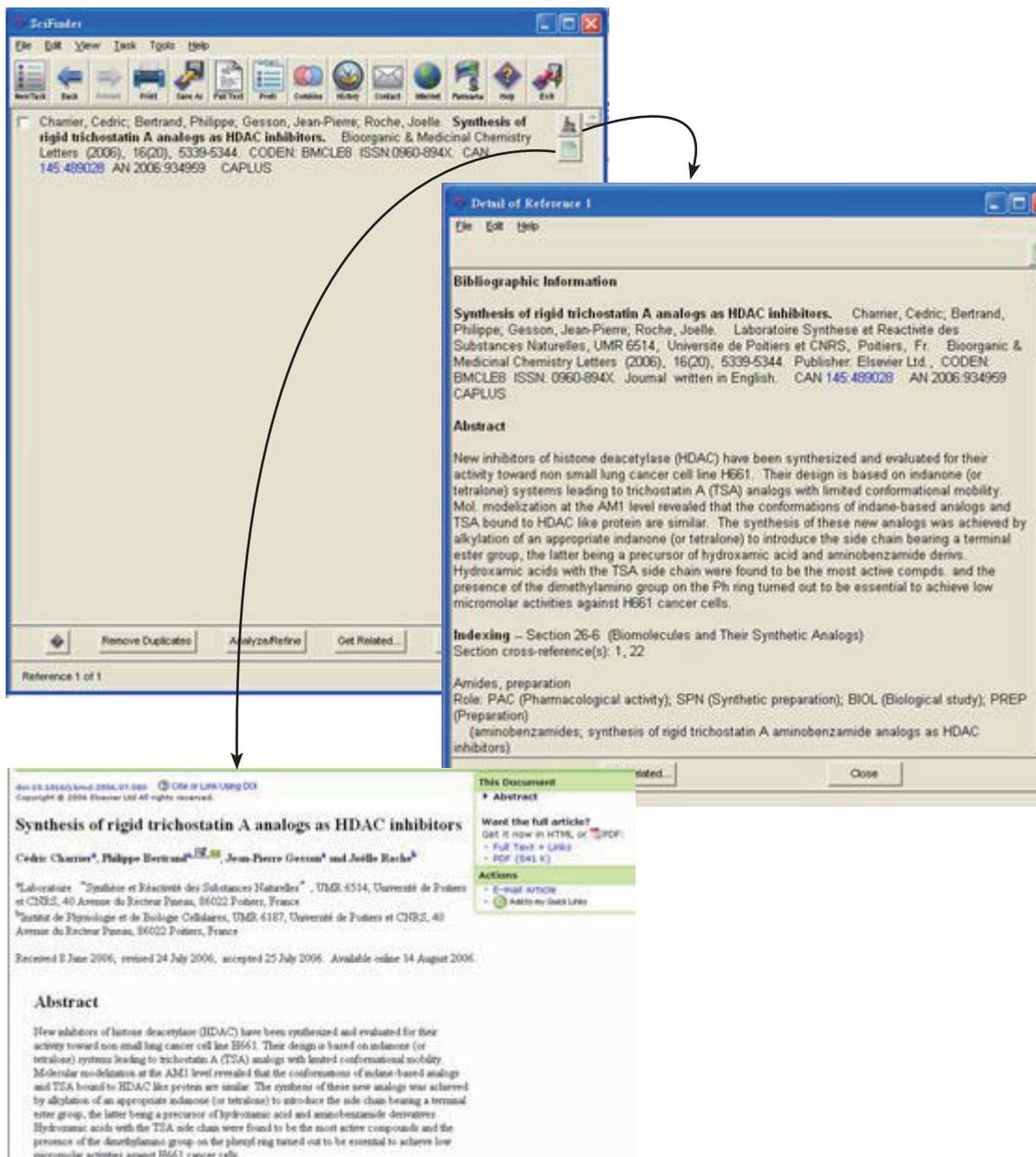


有關化學反應之文獻 (References of Reaction)

用戶可選擇顯示全部或已選取之化學反應的相關文獻，按OK。

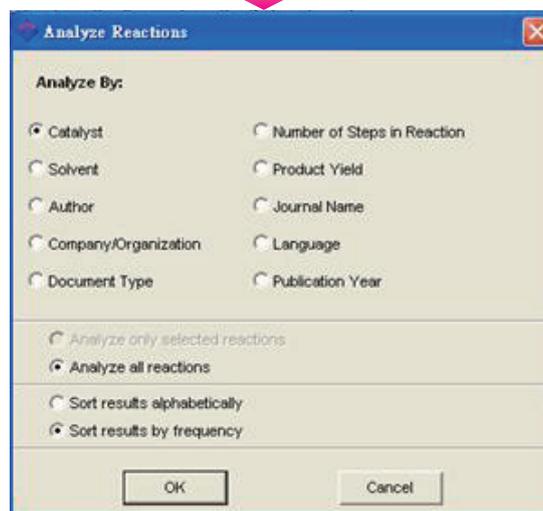
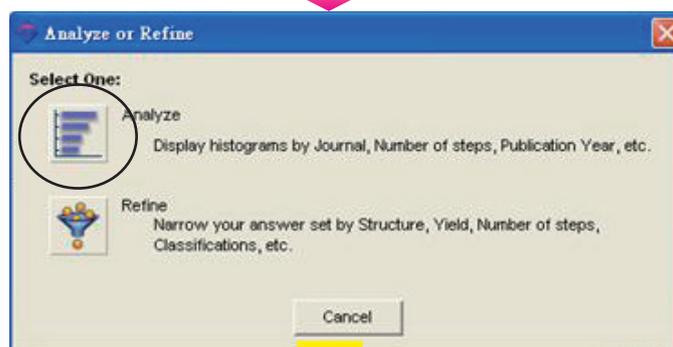
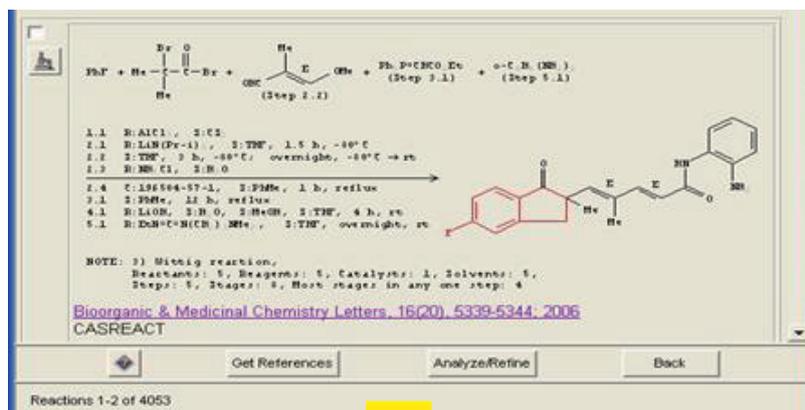


相關的文獻結果會顯示出來，按下顯微鏡閱讀文摘或文獻圖標連結全文。可以按Back回到前一頁的反應結果。



分析反應結果 (Analyze Reaction Result)

共有十個反應分析的功能，幫助縮小檢索結果範圍，取得更精確和合適的結果。點選分類/篩選 (Analyze/Refine) 中的分類 (Analyze)，分析反應對話框便會出現，用戶可選擇以下不同的選項作反應分析。



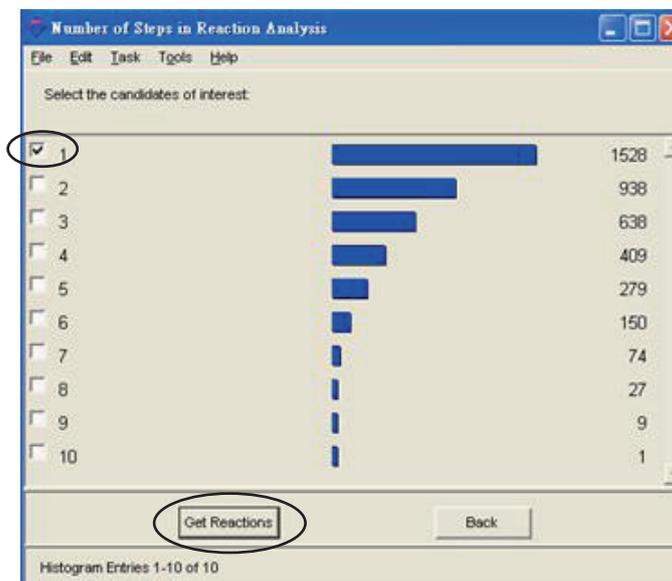
反應分析的定義如下：

選擇	定義
Catalyst	以催化劑作分析
Solvent	以溶劑作分析
Number of Steps in Reaction	以反應步驟數目作分析
Product Yield	以產率作分析
Author	以文摘作者姓名作分析
Company/Organization	以公司／團體名稱作分析
Document Type	以文獻類型作分析
Journal Name	以期刊名稱作分析
Language	以語言種類作分析
Publication Year	以文摘出版年份作分析

更多的選擇：

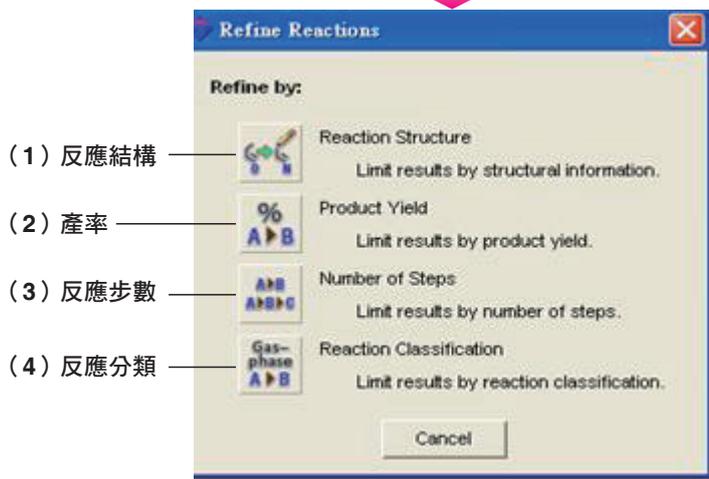
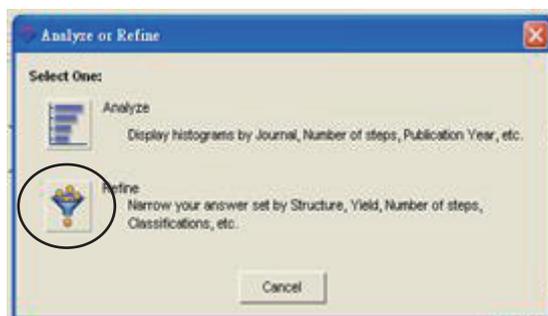
選擇	定義
Analyze by selected reactions	只分析已選之反應
Analyze all reactions	分析所有反應
Sort results alphabetically	以英文字母排序
Sort results frequency	以次數多少排序

例子：以反應步驟數目作分析，請點選 Number of Steps in Reaction。在分析之後，點選有興趣的反應步驟之數目，按下 Get Reactions 便可瀏覽相關反應式。



篩選反應結果 (RefineReaction Result)

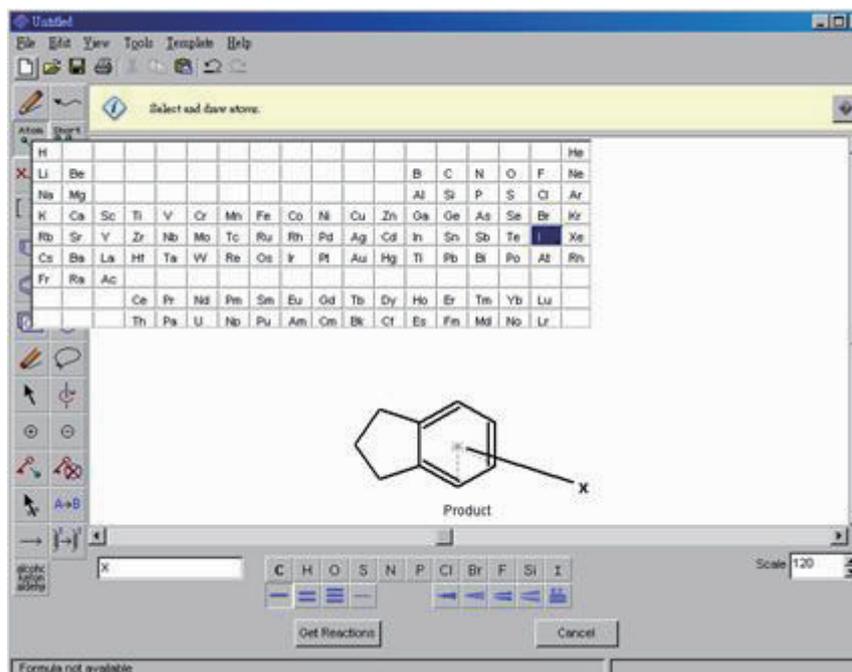
篩選 (Refine) 功能能有效地縮小反應檢索結果。點選分類/篩選 (Analyze/Refine) 中的篩選 (Refine)，篩選反應對話框便會出現，用戶可選擇以下不同的方向作篩選。



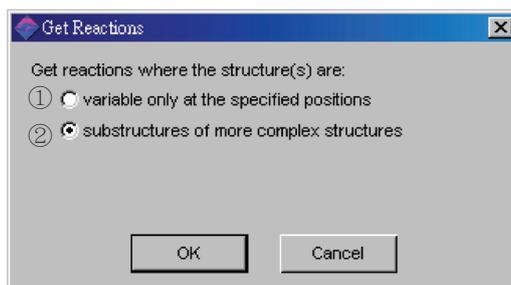
(1) 以反應結構篩選

使用反應結構篩選 (Refine by Reaction Structure)，用戶可在原本已繪製的結構中再加以修改和限制，重新檢索反應式。點選 Reaction Structure 之後，原本已繪製的結構繪製視窗便會再開啟。

例子：如想限制鹵族 (X) 為碘原子 (I)，可點選原子選單工具中的碘。再將滑鼠拖曳至視窗中結構的鹵族 (X) 上，鹵族 (X) 即轉變為碘原子 (I)。



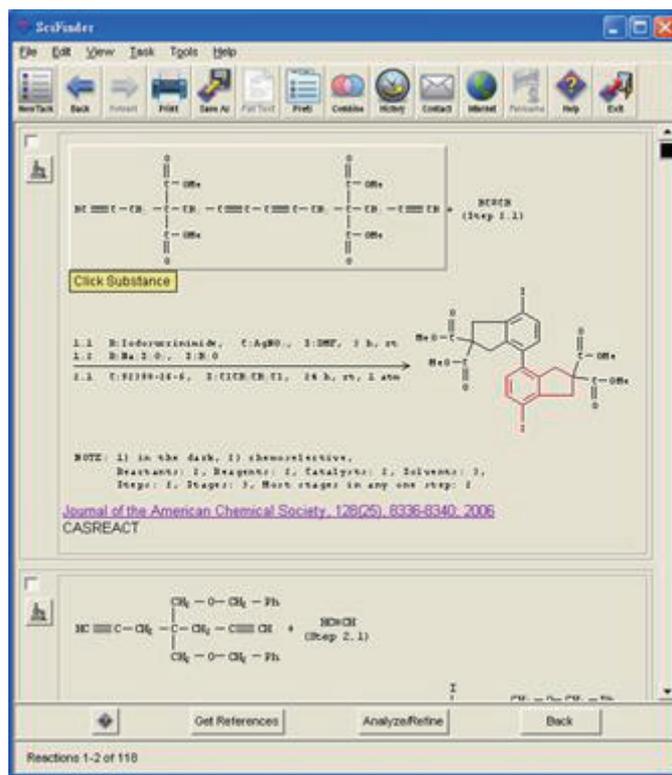
修改反應結構後，按下 Get Reactions，反應檢索視窗會出現如下。



請選擇任何一個檢索方法：

- ① 變化只適用於指定的結構的位置
- ② 為複雜結構中的次結構

在這個例子中選擇 ② substructures of more complex structures，按 OK。



當確認結果後，用戶可以按Back回到前一頁的繪製結構視窗，再按視窗中的Cancel，便會回到最初的反應檢索結果，用戶可再選擇其它的Analyze/Refine功能。

(2) 以產率篩選

在篩選反應中，按下Product Yield，便能限制檢索反應的產率範圍或指定產率。以下為產率篩選對話框。

Refine by Product Yield

Please enter the minimum and maximum product yield values.

0 Minimum product yield.

100 Maximum product yield.

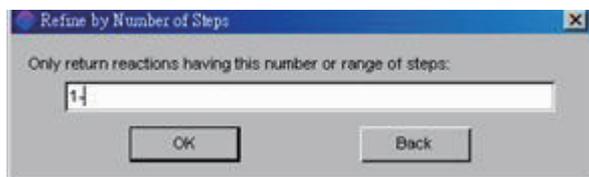
Include reactions that do not have yield data.

OK Back

輸入最高和最低的產率範圍。因為有些反應沒有產率資料提供，用戶可點選 Include reactions that do not have yield data，將有關的反應包括在結果內，再按下OK取得結果。

(3) 以反應步驟數目篩選

分別列出單步驟和多步驟反應，按下Number of Steps，便能限制檢索反應的步驟數目。以下為反應步驟數目產率篩選對話框，輸入想限制的步驟數目或範圍，按下OK，就會顯示結果。



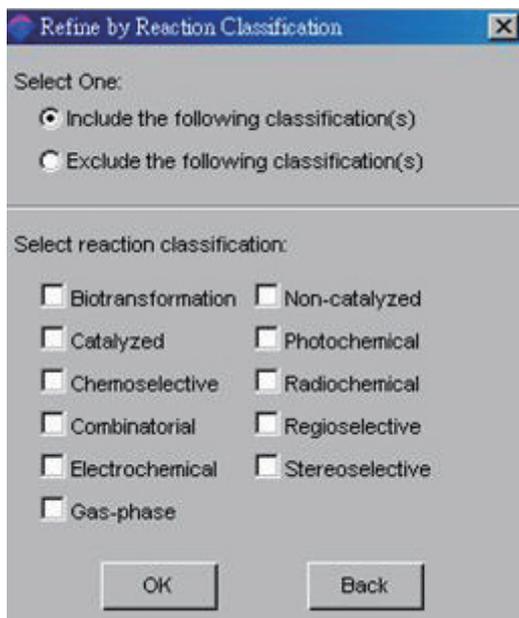
按下在視窗中的 Back，便回到上一頁的反應檢索結果。用戶可再選擇其它 Analyze/Refine 功能。

(4) 以反應分類篩選

SciFinder能讓用戶簡便地將反應分類，只選出相關的反應查看。反應分類有：生物轉化、催化、組合、電氣化學、氣相、立體化學等。可選擇一個或以上的分類。

按下Reaction Classification，選擇反應分類。

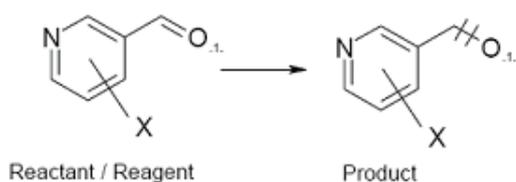
包括以下分類
刪去以下分類



指定反應物／試劑和產物 (Define the Reactant/Reagent and Product)

檢索舉例：

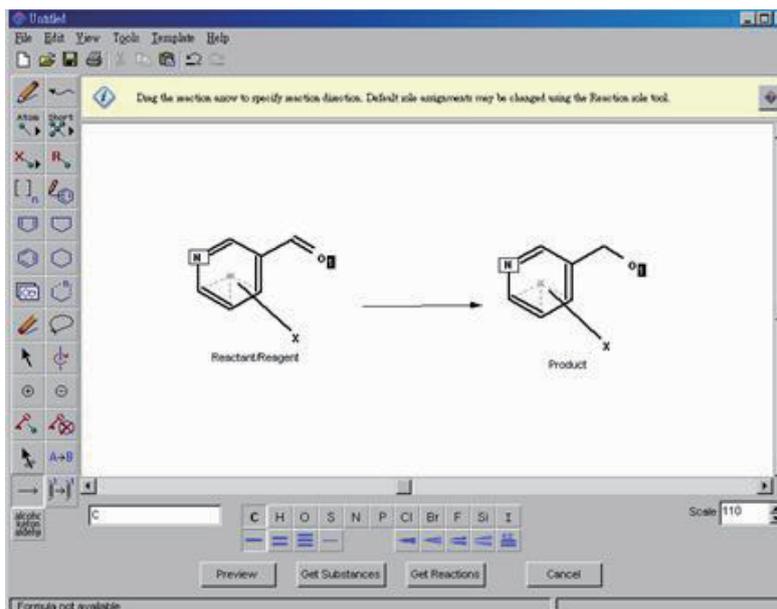
反應位置以雙重線顯示



- 氮原子不能有取代
- 苯環只連一個鹵原子
- 不能有環取代
- C-O鍵是反應位置
- 在反應物和產物的氧原子必需配對

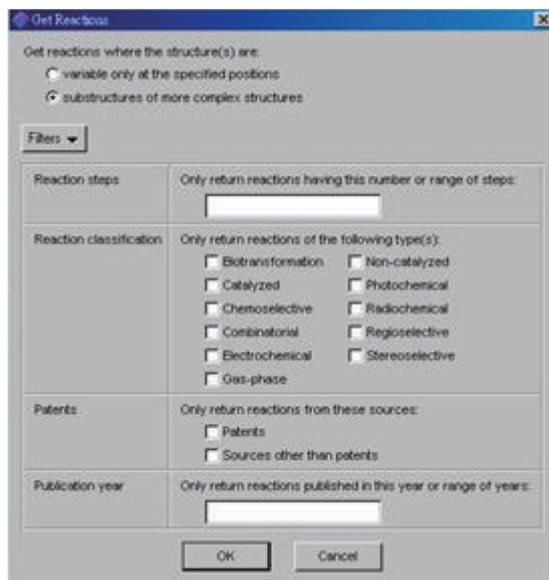
繪製方法：

- 使用苯環工具繪製苯環
- 在原子工具板中選擇氮原子，點選要取代的鍵結點，碳原子將被氮原子取代。
- 點選X選單工具（選擇X：任何鹵原子），在環結構以外的地方按X放置X。
- 點選可變的取代位置工具，點選及拖曳X取代基至取代位置。
- 用鏈工具在苯環畫上兩個碳原子鏈，在末端加上雙鍵。
- 在原子工具板中選擇氧原子，點選鏈的末鍵結點，碳原子將被氧原子取代。
- 用鎖定原子取代工具禁止氮原子取代。
- 用鎖定環取代工具，鎖定苯環和化學鍵的環取代。
- 點選箭頭工具繪製反應箭頭，加上箭頭位置後，反應角色會自動被指定。
- 點選原子繪圖工具繪製，先將滑鼠尖端先指向反應物的氧原子，然後按下在產物的氧原子，便能指定配對位置。
- 最後，選擇反應位置工具繪製，點選C-O鍵反應位置。

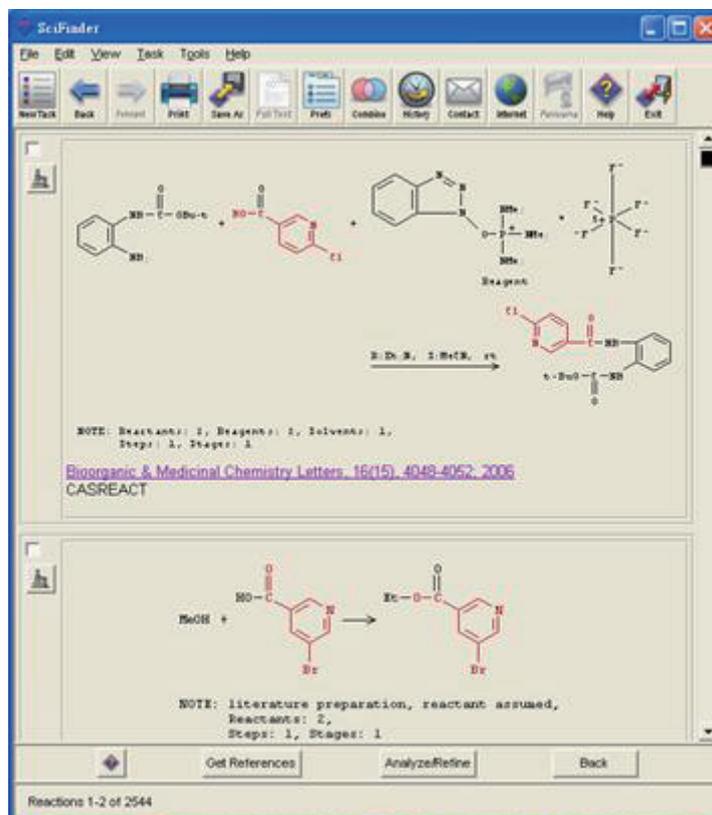


■ 進行反應檢索

在繪製結構之後，按下Get Reaction，反應檢索視窗會出現。選擇Substructure of more complex structure並按下OK，如想限制檢索範圍，可點選Filters（請參看第三頁）。



SciFinder的檢索結果會出現如下。查看反應式、文摘、使用 Analyze/Refine的方法和之前介紹的一樣。用戶也可存檔或列印結果。

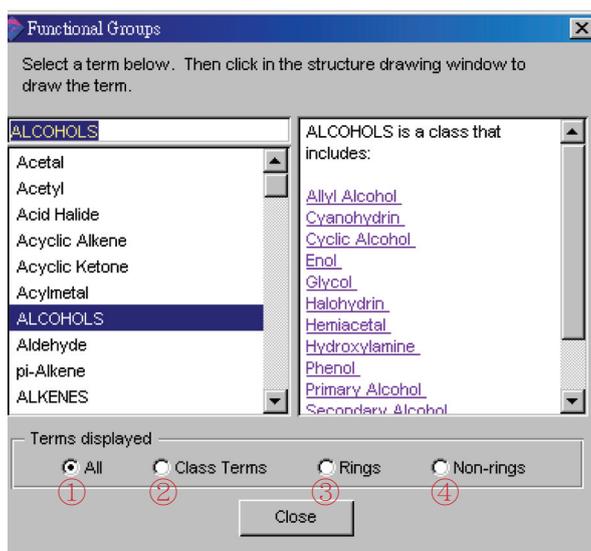


以官能基檢索 (Search By Functional)

SciFinder可讓用戶使用官能基的名稱去檢索反應。用戶可用官能基檢索，查詢使用什麼催化劑或在什麼樣的實驗條件下進行相關官能基的反應，也可用來限制反應結果，詳情可參考Analyze/Refine部份。

■ 選擇官能基

點選官能基工具圖標時，官能基的對話框將會出現。



有四種不同顯示形式可供選擇：

- ① 所有官能基 (All)
- ② 主要官能基分類 (Class terms)
- ③ 有環的官能基 (Rings)
- ④ 沒有環的官能基 (Non-rings)

- ① 預設值是顯示所有官能基 (All)，所有官能基分類和官能基都會以英文字母順序排列。
- ② 主要官能基分類 (Class terms)，顯示官能基的大分類。用戶可點選官能基分類的名稱 (如圖示選擇酒精)，便可選擇其下的小分類。
- ③ 檢索有環的官能基，請按Rings。選擇有環的官能基後，其結構便會在右邊顯示。如1,2 C4NS官能基，可用在以官能基檢索的反應中。
- ④ 檢索沒有環的官能基，請按Non-Rings。選好之後，其結構便會在右邊顯示。

用戶可直接點選官能基名稱或輸入名稱，官能基的結構便會在右邊顯示。選好官能基後，按下Close回到結構繪製視窗，加入已選的官能基。

ALCOHOLS	Allyl Alcohol, Cyanohydrin, Cyclic Alcohol, Enol, Glycol, Halohydrin, Hemiacetal, Hydroxylamine, Phenol, Primary Alcohol, Secondary Alcohol, Tertiary Alcohol
ALKENES	Acyclic Alkene, Allene, Allyl Alcohol, Allyl Halide, Cyclic Alkene, Diene, Enamine, Ketene, Ketenimine, Vinyl Halide
ALKYNES	pi-Alkyne, Alkyne, Enyne
AMINES	Amine Oxide, Aziridine, Chloramine, Cyanamide, Enamine, Hydroxylamine, Imine, Primary Amine, Secondary Amine, Tertiary Amine
CARBONATE DERIVATIVES	Carbamate, Carbonate, Guanidine, Haloformate, Thiourea, Urea
CARBOXY DERIVATIVES	Acid Halide, Amide, Amidine, Anhydride, Carboxylate Ester, Carboxylic Acid, Haloformate, Imide, Lactam, Lactone, Peroxy Acid, Peroxy Ester, Thioamide, Thiocarboxy, Unsaturated Acid, Unsaturated Ester
HALIDES	Acid Halide, Alkyl Halide, Allyl Halide, Aryl Halide, Chloramine, gem-Dihalide, vic-Dihalide, Haloformate, Halohydrin, Metal Halide, Sulfenyl Halide, Sufinyl Halide, Sulfonyl Halide, Trihalide, Vinyl Halide
HETEROCYCLES	Aziridine, Cephem, Episulfide, Epoxide, Penam, Purine, 1,2-C ₃ N ₂ , 1,2-C ₃ NO, 1,2-C ₃ NS, 1,2-C ₃ O ₂ , 1,2-C ₃ OS, 1,2-C ₃ S ₂ , 1,2-C ₄ N ₂ , 1,2-C ₄ NO, 1,2-C ₄ NS, 1,2-C ₄ O ₂ , 1,2-C ₄ OS, 1,2-C ₄ S ₂ , 1,3-C ₃ N ₂ , 1,3-C ₃ NO, 1,3-C ₃ NS, 1,3-C ₃ O ₂ , 1,3-C ₃ OS, 1,3-C ₃ S ₂ , 1,3-C ₄ N ₂ , 1,3-C ₄ NO, 1,3-C ₄ NS, 1,3-C ₄ O ₂ , 1,3-C ₄ OS, 1,3-C ₄ S ₂ , 1,4-C ₄ N ₂ , 1,4-C ₄ NO, 1,4-C ₄ NS, 1,4-C ₄ O ₂ , 1,4-C ₄ OS, 1,4-C ₄ S ₂ , 1,4-C ₅ N ₂ , C ₂ S, C ₃ N, C ₃ O, C ₃ S, C ₄ N, C ₄ O, C ₄ S, C ₅ N, C ₅ O, C ₅ S, C ₆ N, C ₆ O, C ₆ S
KETONES	Acyclic Ketone, Cyclic Ketone, <i>o</i> -Quinone, <i>p</i> -Quinone, Unsaturated Ketone
ORGANOMETALLICS	Acylmetal, pi-Alkene, pi-Alkyne, pi-Allyl, mu-Carbonyl, Metal Arene, Metal Carbene, Metal Carbonyl, Metal Cyclopentadienyl, Metal Halide, Metal Hydride, Metal-metal Bond, Metal Nitrogen, Metal Nitrosyl, Metal Phosphine, Metal Sulfur, Metallocarbycycle, Organometal

■ 以繪製的官能基檢索

在結構繪製視窗中繪製好官能基後（可多於一個），必須指定其在反應式中的角色。可用反應角色工具用來指定角色。

用戶可以用官能基和化學結構一起作檢索（在以後部分說明）。

■ 檢索例子：轉化仲醇至酮，但伯醇在反應中沒有被轉化。

繪製方法：

1. 點選官能基工具，官能基的對話框將會出現。
2. 拉下選單，點選仲醇，仲醇的名字將會出現在右邊，返回視窗，加入仲醇。
3. 繪製酮和伯醇，都是用同一的方法。將酮畫在仲醇的右方，伯醇畫在仲醇的上方。
4. 點選箭頭工具繪製反應箭頭，從仲醇至酮，反應角色會自動地被指定。
5. 點選反應角色工具，指定伯醇的角色為Non-reacting（不參與反應）。

反應角色工具的選項

Product	產物
Reactant	反應物
Reagent	試劑
Reactant or Reagent	反應物或試劑
Any role	任何角色
Non-reacting	不參與反應

*Non-reacting只可用於官能基檢索

以下是以官能基檢索的一些限制

- 結構不能結合官能基
- 不能指定官能基中的離子
- 不能指定原子對應位置和反應位置
- 官能基不能旋轉
- 最多只可繪製253個鍵結點

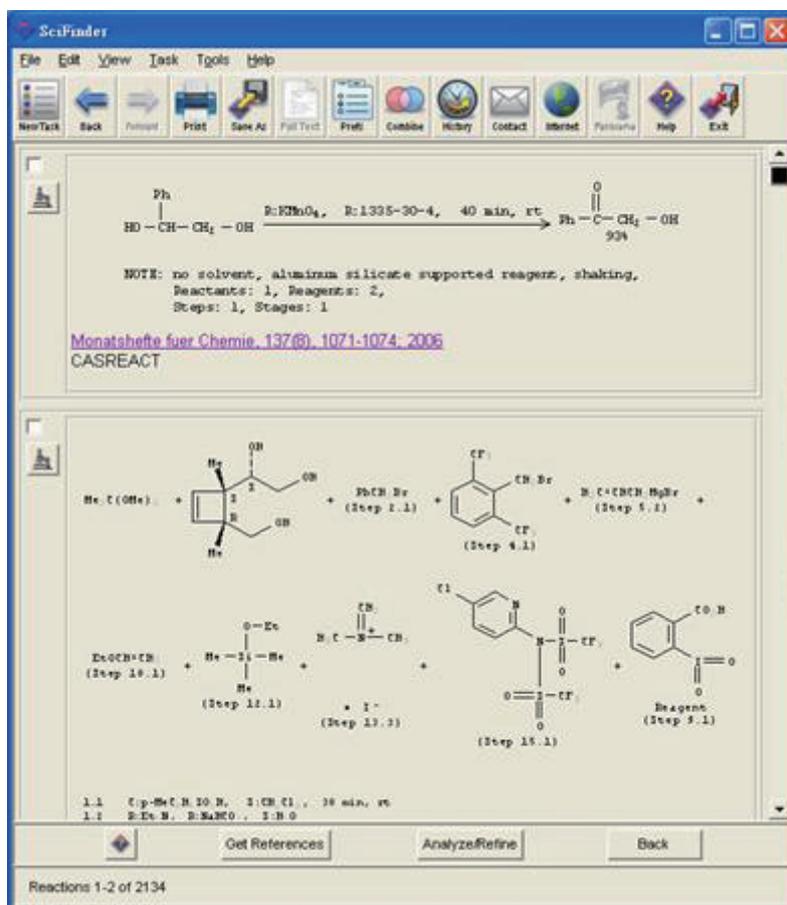
■ 進行官能基檢索

在繪製結構之後，按下Get Reaction，反應檢索視窗會出現。選擇Substructure of more complex structure，按OK。

如想限制檢索範圍，可點選Filters。



SciFinder的檢索結果會出現。以官能基檢索通常會出現較多的結果，用戶可用Analyze/Refine篩選，其中，結構篩選也是一個好的方法。



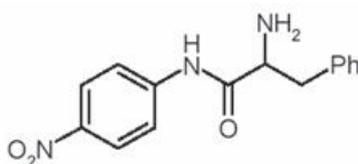
按下顯微鏡，觀看反應式和實驗條件。勾選小方格選擇感興趣的化學反應，再按下 Get Reference取得有關文摘參考。用戶亦可以連結觀看全文，或按Get Related選擇更多的相關資料，用Analyze/Refine來分析和篩選功能。

組合官能基和結構的檢索 (Search by Combination of Functional group and Structure)

用戶可組合官能基和結構一起作檢索，只需在結構繪製視窗上繪製官能基和化學結構，並指定其角色便可。

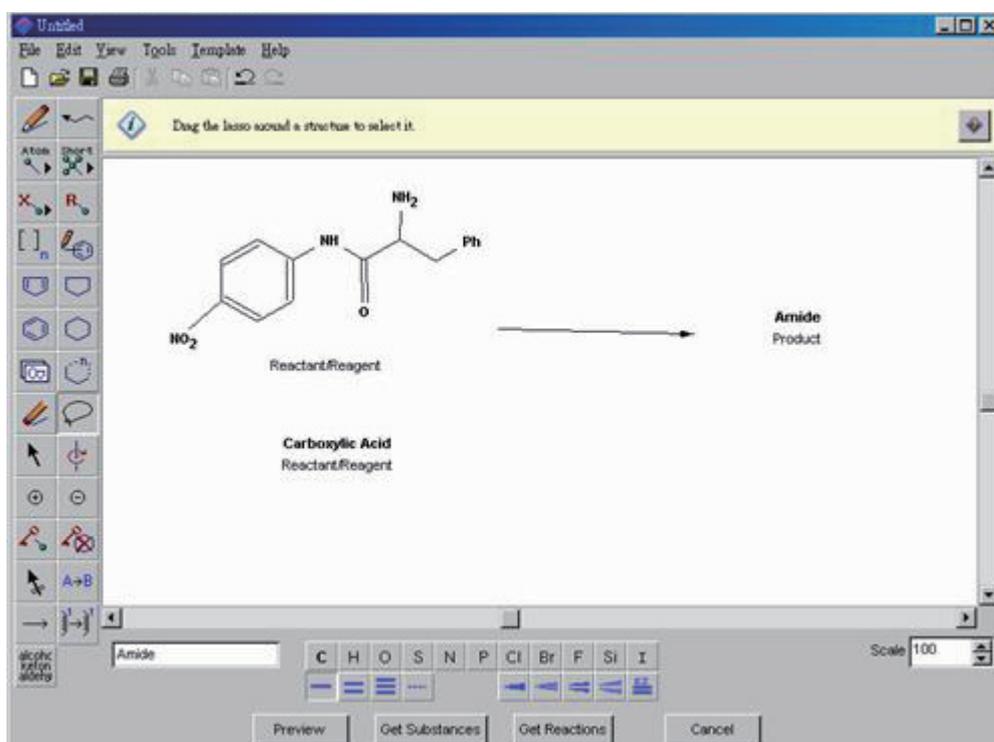
檢索例子：

找出由以下物質和羧酸 (Carboxylic acid) 所合成的氨基化合物 (Amide)。



怎樣繪製：

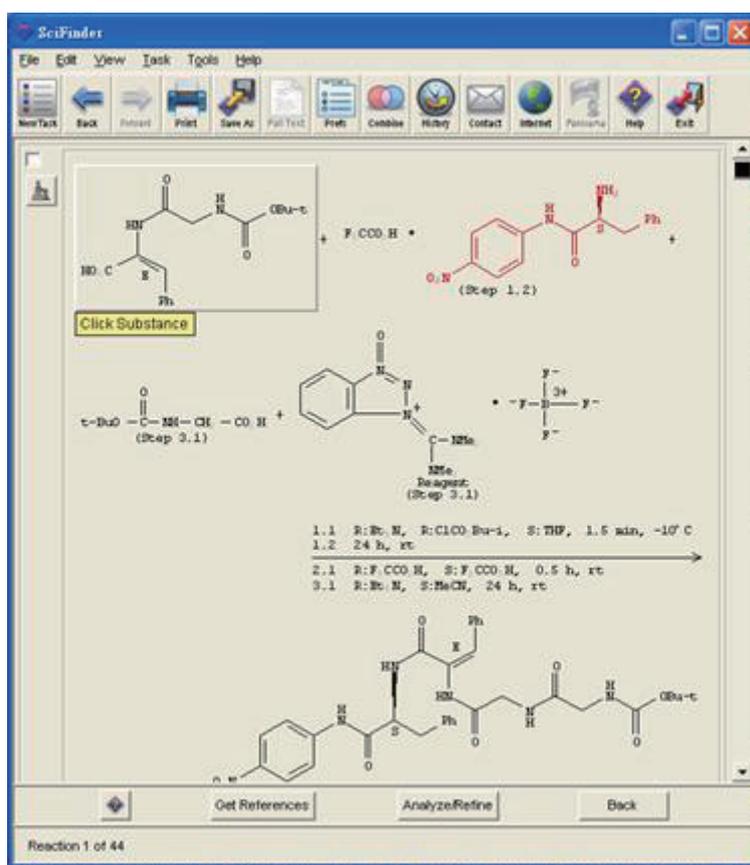
1. 在結構繪製視窗上繪製化學結構。
2. 點選官能基工具選擇羧酸，並加到結構繪製視窗上的左下方。點選官能基工具選擇氨基化合物，並加到視窗上的右方。
3. 點選反應箭頭工具，拖曳箭頭從羧酸到氨基化合物。反應角色將會被指定。



進行反應檢索 (Performance of Reaction Search)

當繪製好結構後，按下Get Reactions，Get Reactions的對話框便會顯示。選擇Variable only at the specified position（只變化指定位置），然後按下OK。

反應檢索結果會在SciFinder的視窗中顯示。



如有太多的結果，可用Analyze/Refine的功能分析和篩選來縮小結果數目。

按Get References顯示化學反應的相關文獻，文獻是以預設值來排列。用戶可在瀏覽工具列中選取反向排序，文獻的排序便相反。

按顯微鏡查閱反應式的詳細資料，按Analyze/Refine作分析和篩選結果，按Get Related可取得更多的相關訊息。

結束反應檢索 (Finish Raction Search)

按下文件選單的New Task (新任務) 或工具列的New Task (新任務) 圖標，結束反應檢索。

如想退出SciFinder，請選擇文件 選單的Exit (退出) 或工具列的 Exit (退出) 圖標即可。

Appendix A

智能檢索：SciFinder 怎樣去檢索結構

什麼是智能檢索？

SciFinder 有很多演算工具幫助用戶進行檢索，找出令人滿意的結果。SciFinder 的智能檢索能理解結構詢問，檢索出最全面和最多的相關結構結果。

智能檢索可理解在結構視窗中所呈現的結構，並考慮其不同的結構形式，包括任何有關此結構的物質，都會顯示在結果內。

注意：智能檢索適用於精確結構檢索和次結構檢索。

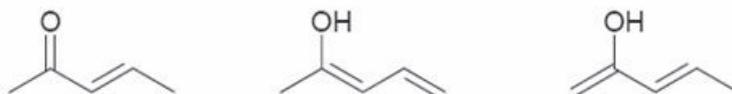
智能檢索能找出什麼樣的結構結果

智能檢索系統會自動檢索出所有有關的物質，包含原子排列和鍵會與輸入的結構相同。檢索結果會包括以下物質。

- 相同結構
- 結構同分異構體
- 互變異構體（包括酮-烯醇互變異構體）
- 配位化合物
- 含有電荷的化合物
- 離子基
- 含有同位素的物質
- 高分子

具體的例子

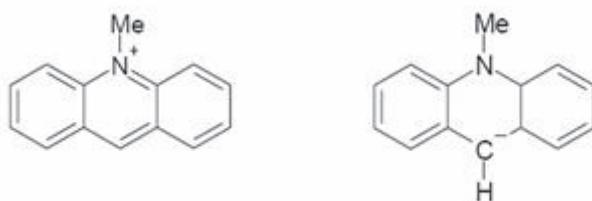
- 在互變異構體（如酮-烯醇互變異構體和共軛鍵）中，雖然其單鍵和雙鍵的位置不同，但 SciFinder 的智能檢索也會自動將這些結構包含在結果內。只需輸入以下任何一個結構，便能檢索全部有關的結構。



不同的氫鍵互變異構體會自動被檢索，只需輸入以下任何一個結構，便能檢索全部有關的結構。



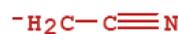
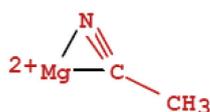
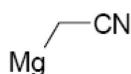
- 如分子為離子型態，其電荷附在不同原子的結構也會被自動檢索。只需輸入以下任何一個結構，便能檢索全部有關的結構。



- 如結構含有金屬原子，其金屬原子在結構的不同位置會自動被檢索。只需輸入以下任何一個結構，便能檢索全部有關的結構。

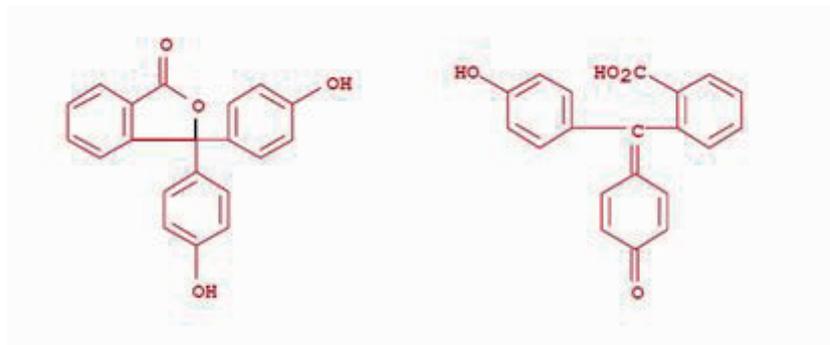
不論繪製何種含有金屬的結構，智能檢索也會自動檢索其分離結構和環結構。此外，它的水合離子也會被檢索。定義：金屬原子不包括以下原子：H, B, C, N, O, F, Si, P, S, Cl, As, Se, Br, Te, I, At, He, Ne, Ar, Kr, Xe

例子：若檢索下列左方的結構為 (HMg-CH₂-CN)，則下列右方顯示的六個結構也會被檢索

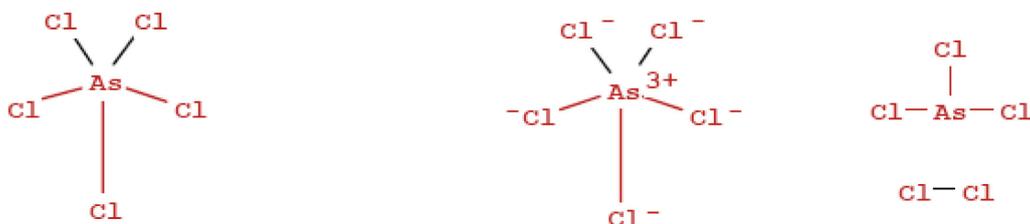


- 在熒光素或鄰苯二甲酸的化合物檢索中，所有其開環和閉環的結構都會被檢索。糖和半縮醛也是一樣。

例子：檢索下列左方的結構，則右方結構也會被檢索。



- 在五氯化磷和鹵化砷中，不論怎樣繪製結構，以下三種結構也會被檢索。其鹵原子是
1) 自由離子、2) 連接磷鍵和砷鍵、3) 連接其它的鹵原子鍵。



如結構有立體鍵，其立體異構物會被自動分析和顯示。如沒有立體鍵，結果會顯示所有物質。

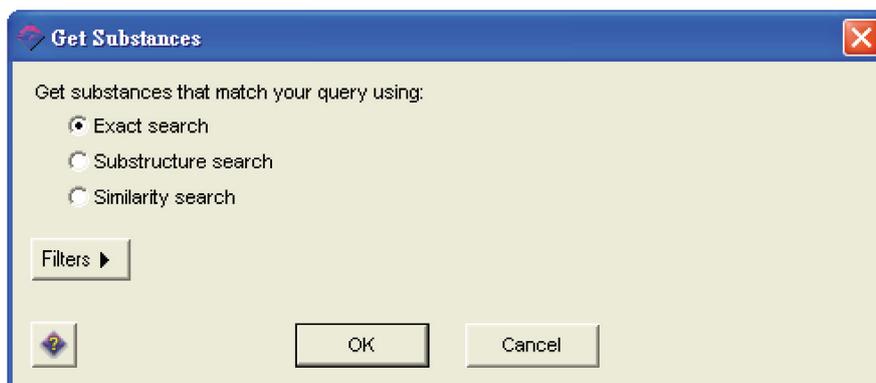
以下物質不包括在智能檢索結果內：高分子、複合碳水化合物、生物分子序列、合金、無機物、離子基等。但用戶可以直接檢索這些物質。

在SciFinder中，結構檢索的概念是找出最全面最多的結果，避免有遺漏。用戶會在結果中發現一些意想不到的資料，有助研發。用戶可利用Analyse/Refine（分類/篩選）的功能去處理結果，作更精確、更適題的檢索。

在檢索結構後，通常會有多個結果出現，這些結果通常是不同的：如其立體結構、鹽類、電荷或其它元素。用戶可按顯微鏡圖標來查看物質的名稱、化學結構和物性，確認檢索結果。

精確結構和次結構檢索

如用戶的帳號有次結構檢索功能，在繪製結構並按下Get Substance後，便可選擇三種不同的結構檢索模式。



如用戶的帳號沒有次結構檢索功能，視窗只會顯示精確結構檢索。以下介紹智能檢索怎樣在精確結構檢索和次結構檢索中應用。

精確結構檢索

在進行精確結構檢索時，智能檢索功能會自動執行，同時檢索有關結構的高分子、化合物、鹽類等。若只想顯示特定的物質，可在工具列的Preference Editor選擇或按“Get Substance”中的“Filters”。

所有輸入結構的原子在精確結構檢索下，不會被加以取代，所有鍵結點可看為“封閉”結點。另外，用戶也不需要再在結構上劃上氫原子（H），智能檢索會自動分辨。

次結構檢索

當進行次結構檢索時，其智能檢索功能與進行精確結構檢索相似。若只想顯示特定的物質，可在工具列的 Preference Editor選擇或按“Get Substance”中的“Filters”。

在檢索次結構時，輸入結構的原子可以被取代，所有鍵結點可看為“開放”結點。而結構中的環和鏈的取代預設值是不同的：

- SciFinder會找出以下的環系統取代：1) 與輸入的完全一樣 2) 原子被取代 3) 其環系統被另一較大的環系統包住。
- SciFinder會找出以下的鏈取代：1) 原子被取代 2) 取代為環部份 3) 取代為鏈部份。

有關怎樣鎖定取代和設定取代基（X選單工具和R基團工具），可參閱第三章。

Appendix B

CAS Registry : 物質特性參考表

物質特性	內容
NMR	核磁共振
NMR SOLUTION STRUCTURE (COMPLETE)	核磁溶液組成
NMR SPECTRA	核磁共振譜
TWO-DIMENSIONAL NMR SPECTRA	二維核磁共振譜
BORON-11 NMR SPECTRA	硼-11核磁共振譜
CARBON-13 NMR SPECTRA	碳-13核磁共振譜
FLUORINE-19 NMR SPECTRA	氟-19核磁共振譜
METAL NMR SPECTRA	金屬核磁共振譜
NITROGEN-15 NMR SPECTRA	氮-15核磁共振譜
PHOSPHORUS-31 NMR SPECTRA	磷-31核磁共振譜
PROTON NMR SPECTRA	質子氫核磁共振譜
SILICON-29 NMR SPECTRA	矽-29核磁共振譜
紅外線光譜	
IR ABSORPTION SPECTRA	紅外線吸收光譜
IR EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	紅外線發射發光光譜
IR REFLECTANCE SPECTRA	紅外線反射光譜
IR SPECTRA	紅外線光譜
紫外線可見光光譜	
UV AND VISIBLE SPECTRA	紫外線可見光光譜
UV AND VISIBLE ABSORPTION SPECTRA	紫外線可見吸收光譜
UV AND VISIBLE EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	紫外線可見發射發光光譜
UV AND VISIBLE REFLECTANCE SPECTRA	紫外線可見反射光譜
X光	
X-RAY SPECTRA	X光譜
X-RAY ABSORPTION SPECTRA	X吸收光譜
X-RAY EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	X發射發光光譜
X-RAY REFLECTANCE SPECTRA	X反射光譜
其它光譜	
CIRCULAR DICHROISM SPECTRA	圓偏光二色光譜
ELECTRON SPECTRA	電子光譜
EMISSION/LUMINESCENCE SPECTRA	發射發光光譜
ESR SPECTRA	電子自旋共振光譜
GAMMA RAY SPECTRA	伽馬射線光譜
MASS SPECTRA	質譜
MOSSBAUER SPECTRA	梅斯保譜

PHOTOELECTRON SPECTRA	光電光譜
RAMAN SPECTRA	拉曼光譜
散射	
NEUTRON DIFFRACTION PATTERN	中子繞射圖
NEUTRON SCATTERING	中子散射
X-RAY DIFFRACTION PATTERN	X光繞射圖
X-RAY SCATTERING	X光散射
材料 (力學)	
HYDRODYNAMIC RADIUS	流體半徑
ADHESIVE STRENGTH	黏著強度
BENDING STRENGTH	抗曲強度
CONTACT ANGLE	接觸角
DUCTILITY	延性
COMPRESSIBILITY	壓縮率
COMPRESSIVE STRENGTH	抗壓強度
COMPLEX MODULUS	複數模量
CREEP RATE	潛變速率
CREEP STRENGTH	抗潛變強度
ELONGATION AT BREAK	伸長斷裂強度
ELONGATION AT YIELD	伸長率
FATIGUE STRENGTH	疲乏強度
FLEXURAL MODULUS	彎曲模量
FRACTURE STRENGTH	破裂強度
FRACTURE TOUGHNESS	破裂韌度
FRICTION COEFFICIENT	摩擦係數
IMPACT STRENGTH	衝擊強度
INTERFACIAL TENSION	界面張力
LOSS MODULUS	損耗模量
POISSON RATIO	帕松比率
RESIDUAL STRESS	殘留應力
SHEAR MODULUS	剪切模數
SHEAR STRENGTH	抗剪強度
STORAGE MODULUS	儲存模數
SURFACE TENSION	表面張力
TEAR STRENGTH	撕裂強度
TENSILE STRENGTH	抗拉強度
THERMAL ANALYSIS	熱分析
THERMAL CONDUCTIVITY	熱傳導度
THERMAL EXPANSION COEFFICIENT	熱膨脹係數
THERMAL FATIGUE	熱疲勞
WEAR RATE	磨損率

材料 (電)	
BREAKDOWN VOLTAGE	崩壞電壓
DIELECTRIC CONSTANT	介電常數
DIELECTRIC LOSS	介電損耗
DIELECTRIC STRENGTH	介電強度
PIEZOELECTRIC COEFFICIENT	壓電係數
材料 (溫度・硬度)	
HARDNESS	硬度
MELT FLOW INDEX	熔融流動速率
MICROHARDNESS	微硬度
SOFTENING POINT	軟化點
VISCOSITY	黏度
YOUNG'S MODULUS	楊氏模數
材料	
FLASH POINT	閃點
IGNITION POINT	燃點
材料 (形狀・通透性)	
PERMEABILITY	通透性
PORE SIZE	孔徑
POROSITY	多孔性
PARTICLE SIZE	粒子大小
SPECIFIC SURFACE AREA	比表面積
材料	
MOLECULAR WEIGHT (POLYMERS)	分子量 (聚合物)
MOLECULAR WEIGHT DISTRIBUTION	分子量分佈
REACTIVITY RATIO IN POLYMERIZATION	聚合反應率
原子・分子	
BAND GAP	帶隙
BOND ANGLE	分子鍵角
BOND LENGTH	分子鍵長
CRYSTAL LATTICE PARAMETERS	晶格參數
CRYSTAL STRUCTURE	晶體結構
CRYSTALLIZATION TEMPERATURE	結晶溫度
ELECTRON AFFINITY	電子親和力
ELEMENTARY PARTICLE MASS	基本粒子
IONIZATION POTENTIAL	游離能
MOLECULAR STRUCTURE	分子結構
MOLECULAR ELECTRIC DIPOLE MOMENT	分子電偶極矩
NUCLEAR BINDING ENERGY	核束縛能
NUCLEAR ENERGY LEVEL	核能階
NUCLEAR TRANSITION PROBABILITY	核遷躍機率

RADIUS OF GYRATION	分子回旋半徑
液體 溶液 化學反應	
ACID NUMBER	酸鹼度
ACID/BASE DISSOCIATION CONSTANT (KA/KB)	酸鹼解離常數
CRITICAL MICELLE CONCENTRATION	臨界微胞濃度
CLOUD POINT	起霧點
DISSOCIATION CONSTANT	解離常數
LOGD	離子化合物的分配係數 (辛醇/水)
LOGP	分配係數 (辛醇/水)
PARTITION COEFFICIENT	分配係數
POTENTIAL OF ELECTRODE REACTION	電位
SOLUBILITY	溶解度
VAPOR PRESSURE/VOLATILIT	蒸氣壓、揮發性
WATER SORPTION CAPACITY	水吸附能力
相變化	
BOILING POINT	沸點
DENSITY	密度
DIFFUSION COEFFICIENT	擴散係數
FREEZING point	凝固點
GLASS TRANSITION TEMPERATURE	玻璃轉化溫度
HEAT CAPACITY	熱容量
LIQUID CRYSTAL TRANSITION TEMPERATURE	液晶轉化溫度
MELTING POINT	熔點
PHASE DIAGRAM	相圖
SUBLIMATION TEMPERATURE	昇華溫度
熱力學	
DEBYE TEMPERATURE	德拜溫度
ENTHALPY	焓
ENTROPY	熵
FORMATION ENTHALPY	生成焓
FORMATION ENTROPY	生成熵
FUSION ENTHALPY	熔合焓
FUSION ENTROPY	熔合熵
GIBBS FREE ENERGY	吉布斯自由能
HELMHOLTZ FREE ENERGY	亥姆霍茲自由能
音 音波	
ACOUSTIC IMPEDANCE	聲阻抗
SOUND ATTENUATION COEFFICIENT	聲衰減係數
SOUND VELOCITY	聲速
電氣	
ELECTRIC CONDUCTANCE AND ELECTRIC RESISTANCE	電導和電阻

ELECTRIC CURRENT-POTENTIAL CURVE	電流電位曲線
SUPERCONDUCTIVITY	超導
磁性	
CURIE TEMPERATURE	居禮溫度
HALL EFFECT COEFFICIENT	霍爾效應
MAGNETIC ANISOTROPY	磁各向異性
MAGNETIC COERCIVITY	磁矯頑力
MAGNETIC DOMAIN (WALL LENGTH, ENERGY, ETC.)	磁域 (壁長度 能量 等)
MAGNETIC MOMENT	磁矩
MAGNETIC SUSCEPTIBILITY	磁化率
MAGNETIZATION	磁化
MAGNETOELASTIC COUPLING COEFFICIENT	磁致彈性耦合常數
MAGNETORESISTANCE	磁電阻
MAGNETOSTRICTIVE CONSTANT	磁致伸縮常數
MARTENSITIC TRANSITION TEMPERATURE	麻田散體轉化溫度
REMANENCE	殘磁
光學	
FARADAY EFFECT	法拉第效應
HAZE	霧狀
KERR EFFECT (MAGNETOOPTICAL)	克爾效應
LIGHT SCATTERING	光散射
OPTICAL ROTATION	旋光度
REFRACTIVE INDEX	折射係數
BIREFRINGENCE	雙折射
NONLINEAR OPTICAL SUSCEPTIBILITY	非線性光學感受率
放射線	
HALF-LIFE (RADIONUCLIDES)	半衰期 (放射性核種)
RADIATION ATTENUATION/TRANSMISSION COEFFICIENT	輻射衰減和穿透係數
生物毒性	
ADME (ABSORPTION, DISTRIBUTION, METABOLISM, EXCRETION)	吸收、分佈、代謝、排泄
BIOCONCENTRATION FACTOR	生物濃度因子
HALF-LIFE (BIOLOGICAL)	半衰期 (生物)
LC50 50%	半致死濃度
LD50 50%	半致死劑量
MINIMUM INHIBITORY CONCENTRATION	最小抑制濃度
NOAEL/LOAEL	NOAEL/LOAEL 值
TOXIC EQUIVALENCE FACTORS	毒性等量因子

詳情請參閱：

<<http://www.cas.org/ONLINE/UG/taggedproperties.pdf>>