SciFinder^{n}快速入门指南

CAS
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder^{n}
A CAS SOLUTION

SciFinder^n——最全面的化学及相关学科信息资源，加速实现科学突破

SciFinder^{n}是一个研发应用平台，由美国化学会（American Chemical Society，简称“ACS”）旗下的美国化学文摘社（Chemical Abstracts Service, 简称”CAS”）出品，提供全球最大、最权威的化学及相关学科文献、物质和反应信息。SciFinder^{n}涵盖了化学及相关领域如生物医药、工程、材料科学、农业科学等多学科、跨学科的科技信息。SciFinder^{n}收录的文献类型包括期刊、专利、会议论文、学位论文、图书、技术报告、评论和网络资源等。

SciFinder^{n}收录所有已经公开披露、高质量且来自可靠信息源的信息，由 CAS 科学家分析文献的每一个细节并加以标引，您无需担心遗漏任何关键信息。

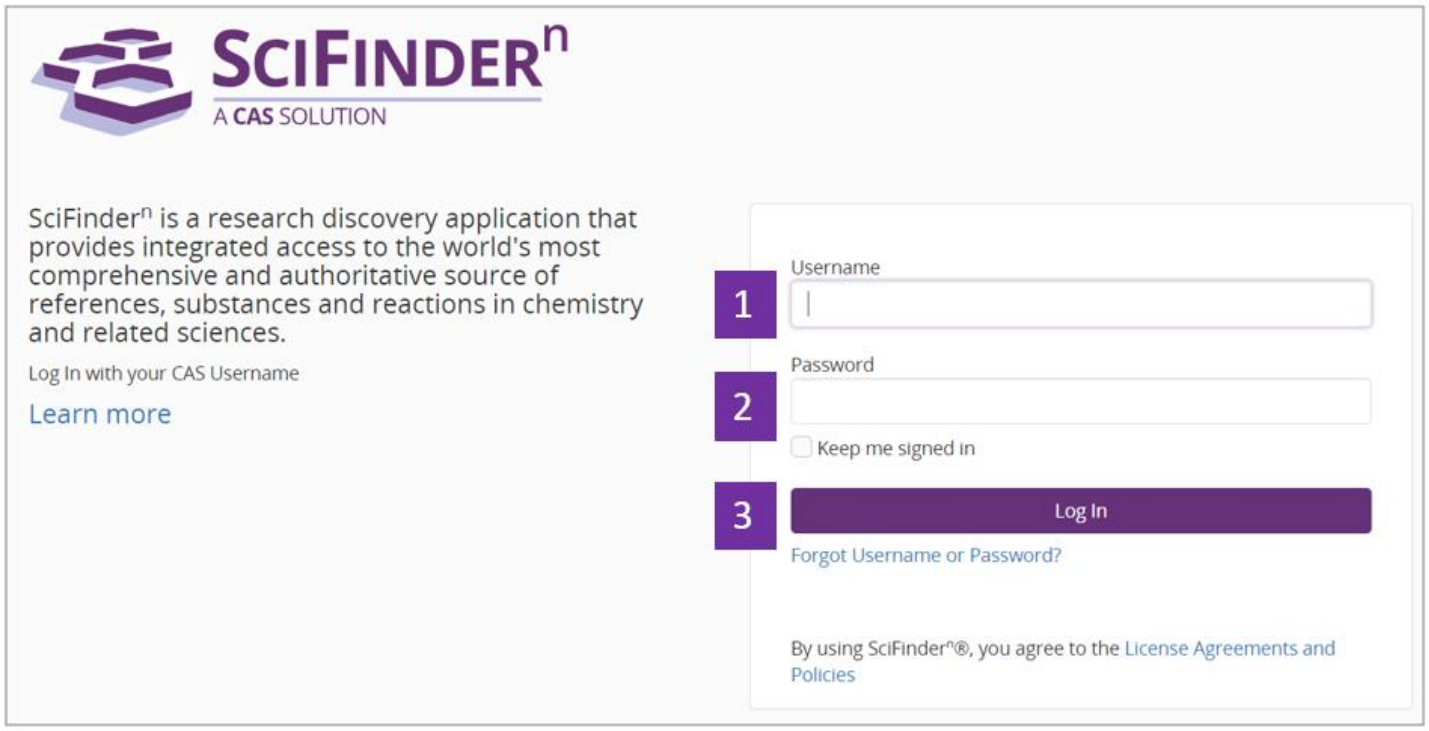
CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SCIFINDER^n
A CAS SOLUTION

目录

登陆进入 SciFinder^n

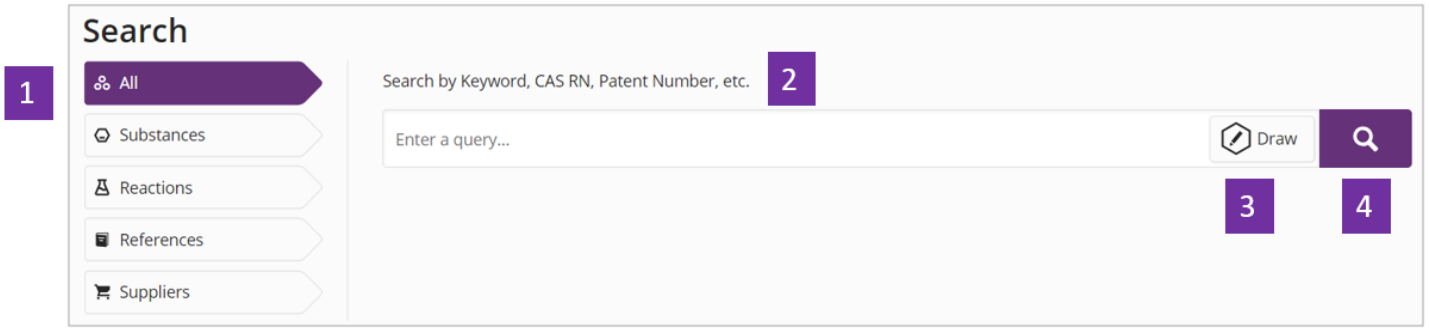
(https://SciFinder-n.cas.org)



1. 输入用户名
2. 输入密码
3. 点击Log In登陆

开始检索

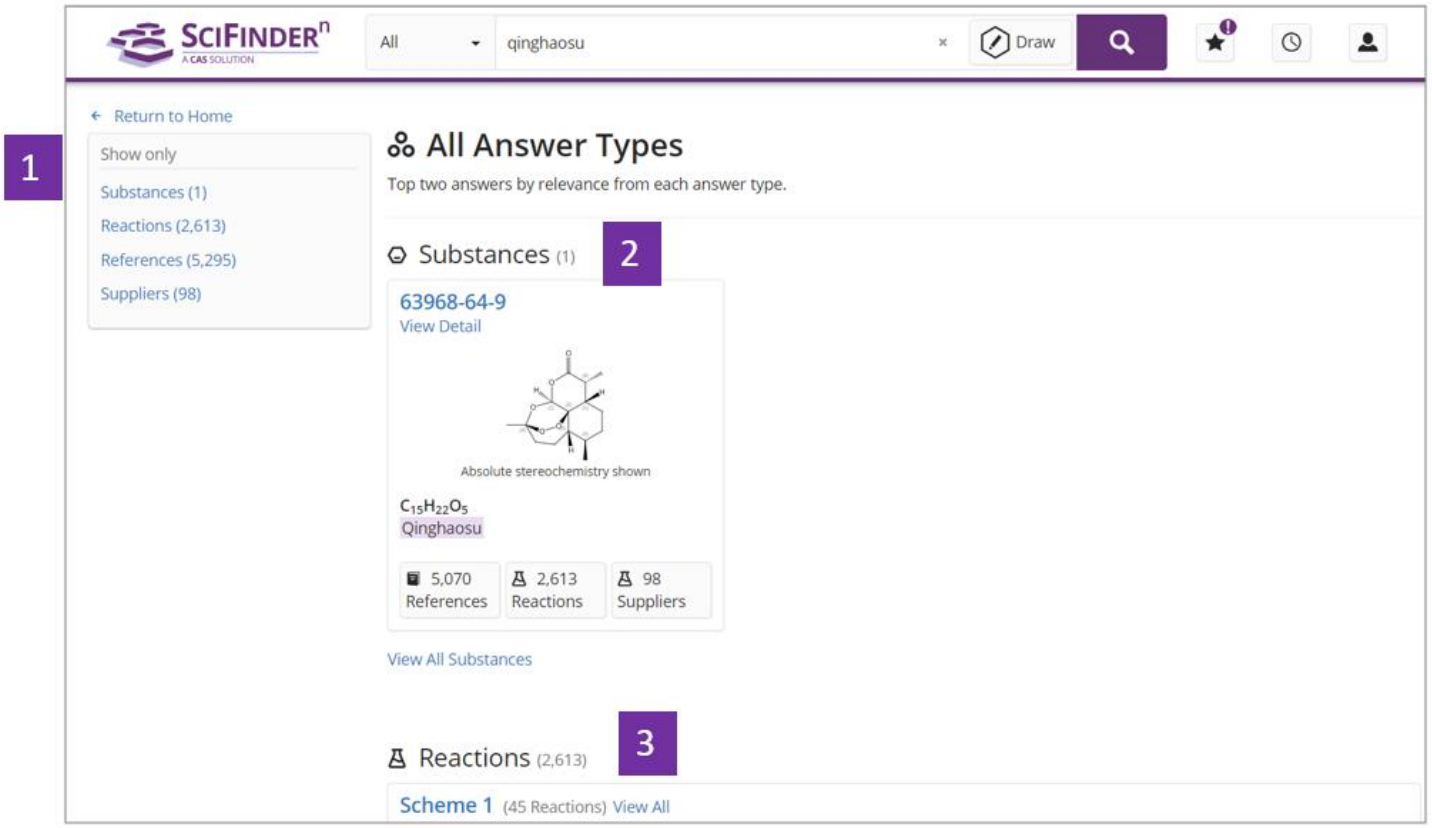
SciFinder^n 具有全新的简洁界面。



1. 选择需要的检索选项：选择 All，进行全面的检索（包括物质，反应，文献和供应商）
2. 输入检索信息：关键词，CAS 登记号，专利号等

3. 点击 Draw，绘制检索结构
4. 点击放大镜，开始检索

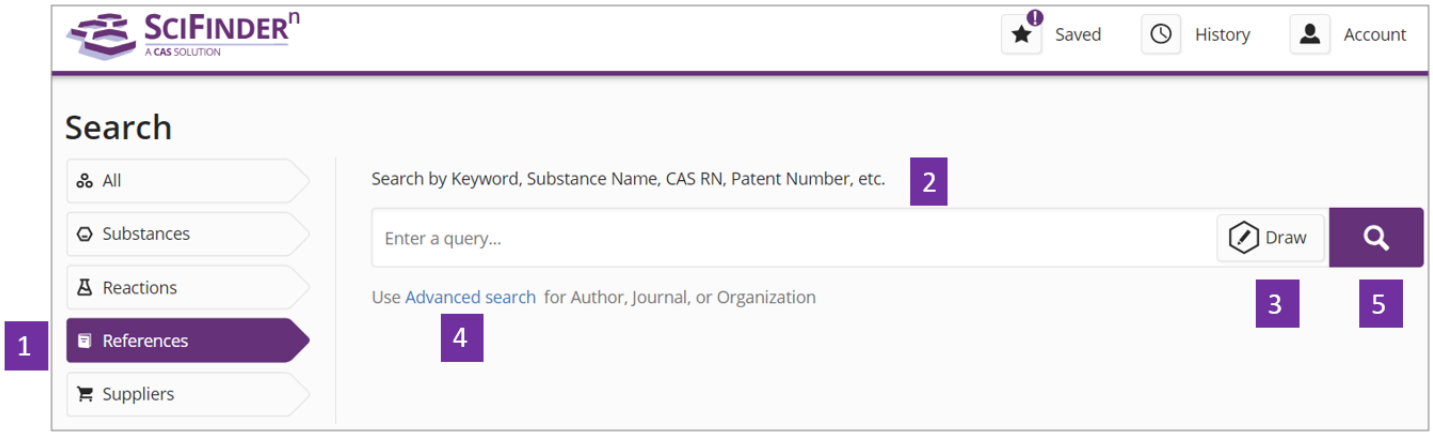
All 检索结果展示



1. 显示检索的结果集：物质，反应，文献，供应商及对应的结果数，点击任何一项即可进入对应的结果界面
2. 点击 Substances，即可进入物质结果集界面
3. 点击 Reactions，即可进入反应结果集界面

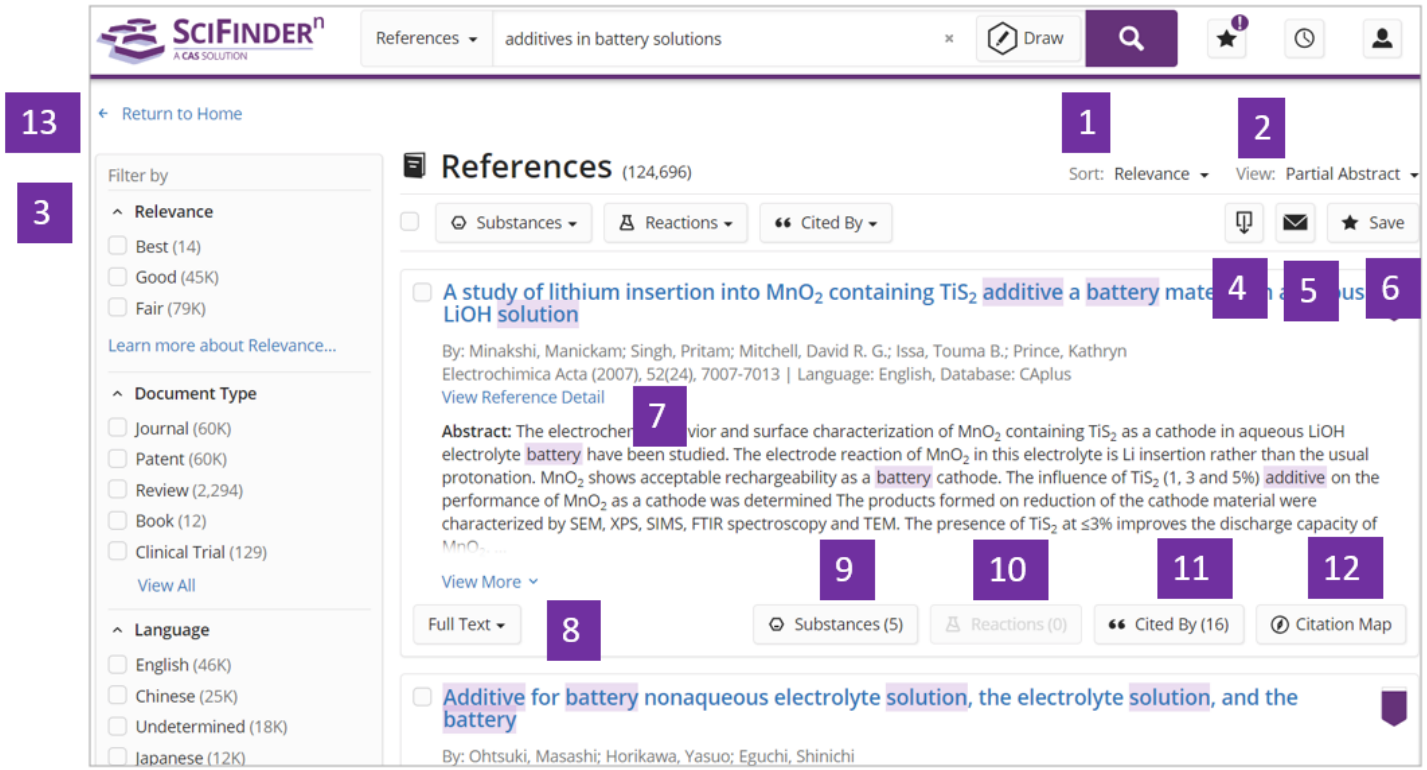
文献检索

文献检索使用了全球最高级的化学智能算法。结果页面可视化、动态化，并且显示布局便于使用。



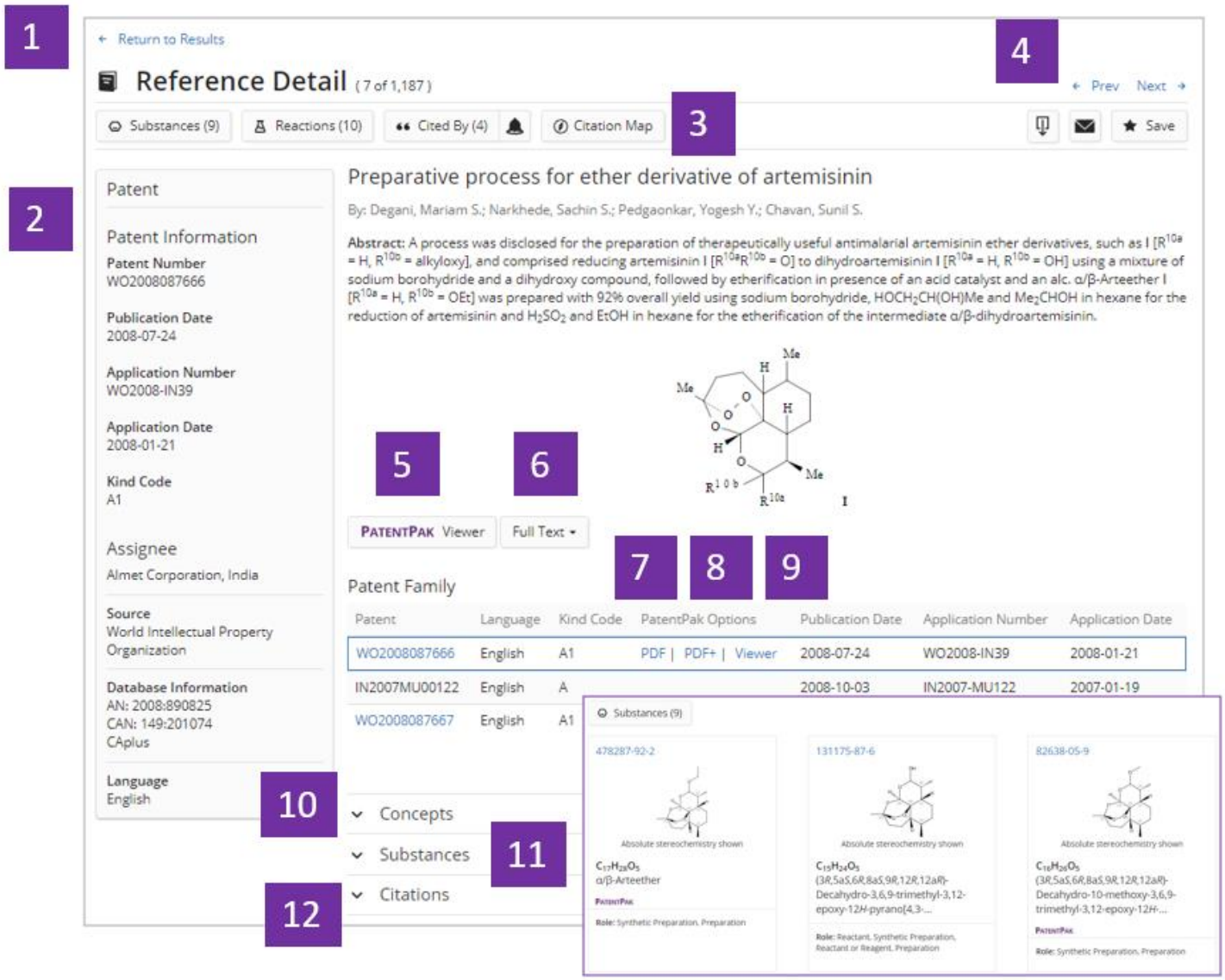
1. 选择 References，进行文献检索
2. 输入检索信息：关键词、物质名称、CAS 登记号和专利号等
3. 点击 Draw，绘制检索结构
4. 点击 Advanced Sear h，进行作者、期刊或组织机构检索
5. 点击放大镜，开始检索

文献检索结果展示



1. 点击 Sort 右侧小箭头，对结果进行重新排序
2. 点击 View 右侧小箭头，选择结果展示的详略
3. 全面的文献结果分类
4. 下载检索结果
5. 分享检索结果
6. 保存检索结果，并可同时设定信息更新提醒
7. 查看文献详情
8. 获取全文链接
9. 获取相关的物质
10. 获取相关的反应
11. 获取被引用文献
12. 引文地图，获取引用及被引用文献
13. 回到首页界面

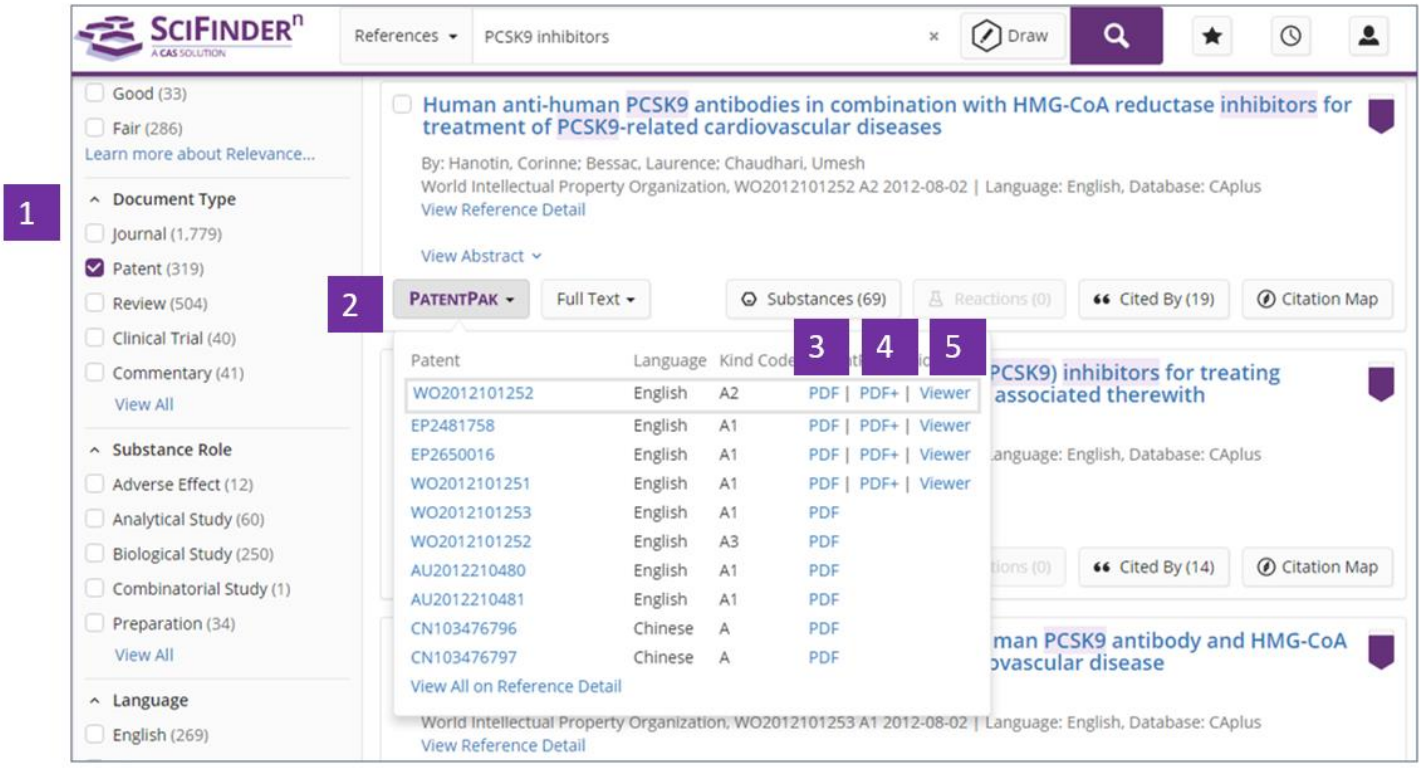
文献详情



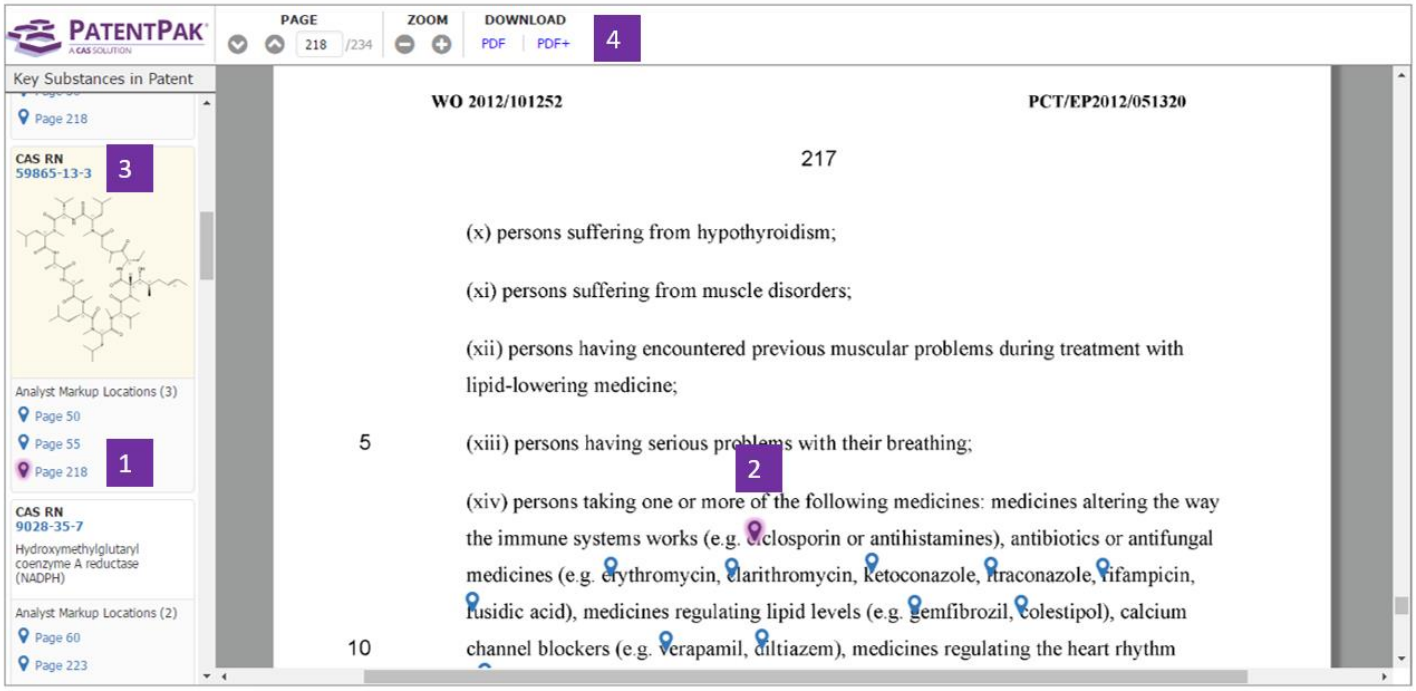
1. 返回至文献结果集界面
2. 文献书目信息
3. 文献相关信息：物质、反应、引文
4. 点击左右箭头，查看上一篇或下一篇文献详情
5. PatentPak 浏览器快速阅读专利全文
6. 全文链接
7. PDF: 获取专利 PDF 全文
8. PDF+: 获取附有物质标引信息的专利 PDF 全文

9. Viewer: PatentPak 浏览器，在线快速阅读专利全文
10. 概念词语
11. 文献中报道的物质
12. 引文信息

专利文献的获取——PatentPak 的使用

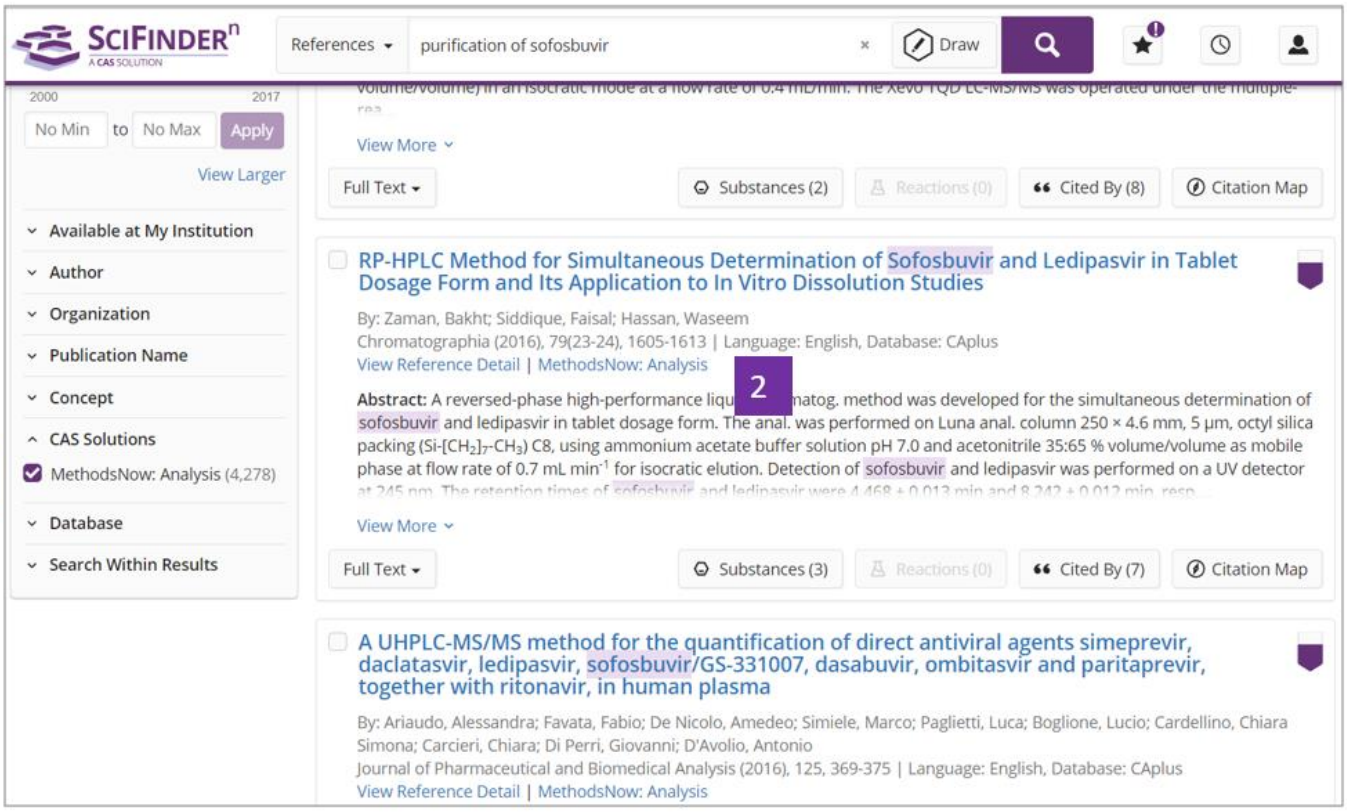


1. 选择文献类型为 Patent
2. 点击 PatentPak 旁的小箭头，查看专利族
3. PDF: 获取专利 PDF 全文
4. PDF+: 获取附有物质标引信息的专利 PDF 全文
5. Viewer: PatentPak 浏览器，在线快速阅读专利全文

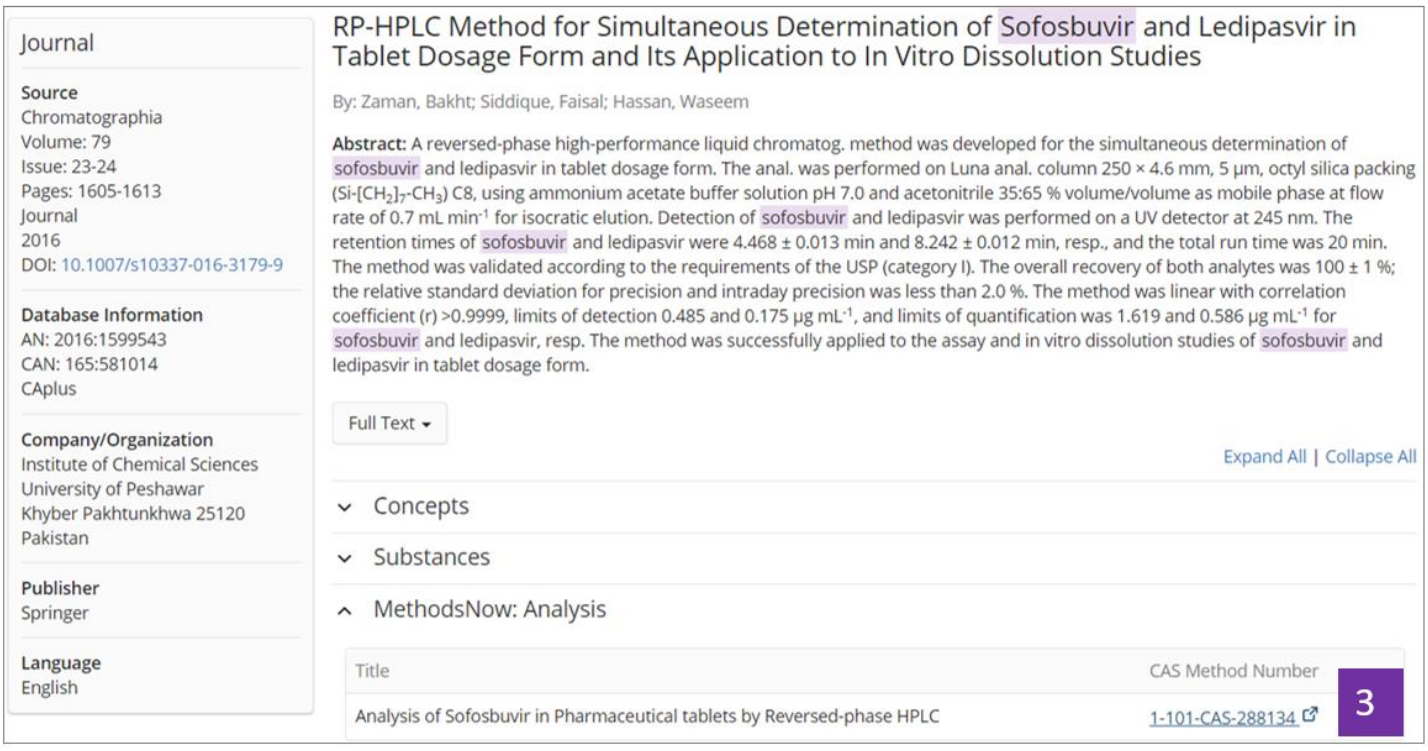


1. 物质位置信息：点击页码定位符号，右侧 PDF 全文快速跳转该物质出现的页码处，同时对应物质的位置符号由蓝色变为紫色。
2. PDF 全文中对应的物质位置符号
3. 点击 CAS 登记号，获取物质详情
4. 下载专利全文：PDF: 获取专利 PDF 全文；PDF+: 获取附有物质标引信息的专利 PDF 全文。

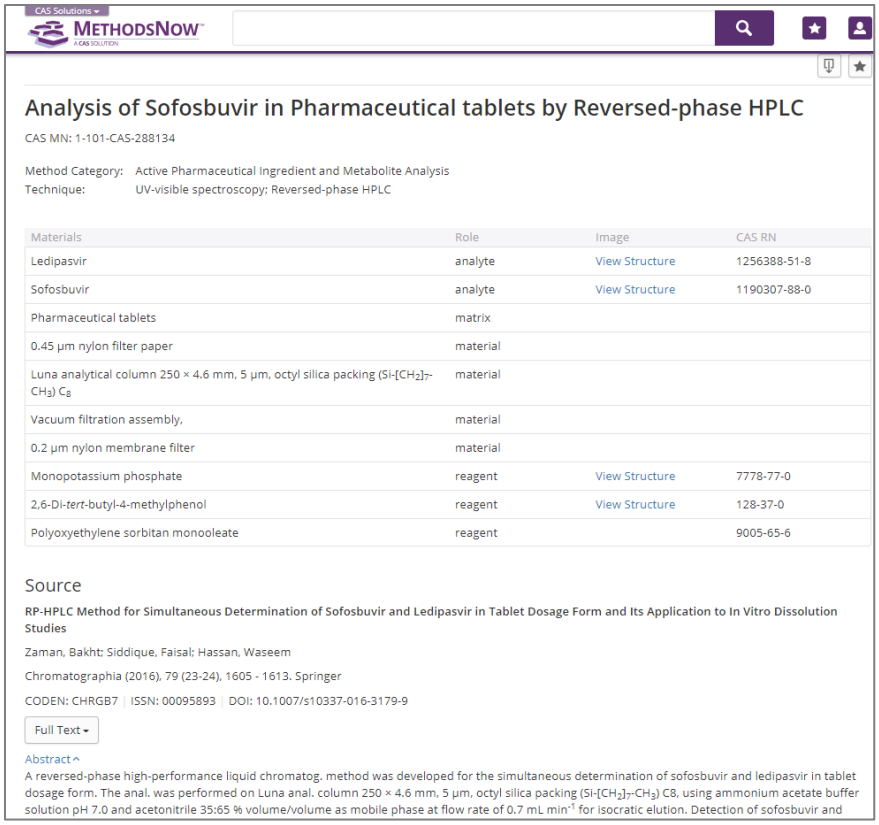
分析实验详情的获取——MethodsNow 的使用



1. 选择 CAS Solutions 中的 MethodsNow: Analysis
2. 点击 MethodsNow: Analysis 获取实验方法详情



3. 点击 CAS 方法号，获取实验方法详情
   获得 CAS 科学家深度标引的、全面、有条理的实验详情。



CAS Solutions

METHODSNOW™
A CAS SOLUTION

Analysis of Sofosbuvir in Pharmaceutical tablets by Reversed-phase HPLC

CAS MN: 1-101-CAS-288134

Method Category: Active Pharmaceutical Ingredient and Metabolite Analysis
Technique: UV-visible spectroscopy; Reversed-phase HPLC

Materials	Role	Image	CAS RN
Ledipasvir	analyte	View Structure	1256388-51-8
Sofosbuvir	analyte	View Structure	1190307-88-0
Pharmaceutical tablets	matrix		
0.45 µm nylon filter paper	material		
Luna analytical column 250 × 4.6 mm, 5 µm, octyl silica packing (Si-$[CH_2]_7$-CH_3) C_8	material		
Vacuum filtration assembly,	material		
0.2 µm nylon membrane filter	material		
Monopotassium phosphate	reagent	View Structure	7778-77-0
2,6-Di-*tert*-butyl-4-methylphenol	reagent	View Structure	128-37-0
Polyoxyethylene sorbitan monooleate	reagent		9005-65-6

Source

RP-HPLC Method for Simultaneous Determination of Sofosbuvir and Ledipasvir in Tablet Dosage Form and Its Application to In Vitro Dissolution Studies

Zaman, Bakht; Siddique, Faisal; Hassan, Waseem

Chromatographia (2016), 79 (23-24), 1605 - 1613. Springer

CODEN: CHRGB7 | ISSN: 00095893 | DOI: 10.1007/s10337-016-3179-9

Full Text

Abstract

A reversed-phase high-performance liquid chromatog. method was developed for the simultaneous determination of sofosbuvir and ledipasvir in tablet dosage form. The anal. was performed on Luna anal. column 250 × 4.6 mm, 5 µm, octyl silica packing (Si-$[CH_2]_7$-CH_3) C8, using ammonium acetate buffer solution pH 7.0 and acetonitrile 35:65 % volume/volume as mobile phase at flow rate of 0.7 mL min^{-1} for isocratic elution. Detection of sofosbuvir and

Equipment Used

HPLC system

Pump, Adept CE-4104, Cecil Instruments Limited, UK

UV detector, Adept CE 4200, Cecil Instruments Limited, UK

Electronic balance, AW220, Shimadzu, Japan

Ultrasonic bath, SONOREX, Bandelin, Germany

Conditions

Instrument

Column: Luna analytical column 250 × 4.6 mm, 5 µm, octyl silica packing (Si-$[CH_2]_7$-CH_3) C_8; mobile phase: ammonium acetate buffer pH 7.0 and acetonitrile in the ratio 35:65% v/v ; flow rate: 0.7 mL/min

wavelength: 245 nm

Instructions

Preparation of dissolution medium

1. Prepare potassium dihydrogen orthophosphate 0.01 M solution by dissolving 8.16 g in about 4.0 L purified water using a 6.0-L volumetric flask.
2. Add 90 g of polysorbate 80 to the solution and dissolve by mechanical shaking and heat to 37 °C.
3. Adjust the pH of the solution to 6.0 ± 0.5 by using 0.0075 mg/mL solution of butylated hydroxytoluene (BHT) and adjust the volume to 6.0 L using purified water.

Preparation of pharmaceutical tablets

1. Prepare sample solution of tablet dosage form by dissolution of 10 tablets in 1 L dissolution medium.
2. Dilute ten milliliters of the solution with ammonium acetate buffer pH 7.0 and acetonitrile in the ratio 35:65% v/v to a composite sample stock solution containing sofosbuvir 0.4 mg/mL and ledipasvir 0.09 mg/mL using 100 mL amber-colored volumetric flasks and filter through 0.45 µm nylon filter paper from Millipore.

Preparation of stock solutions

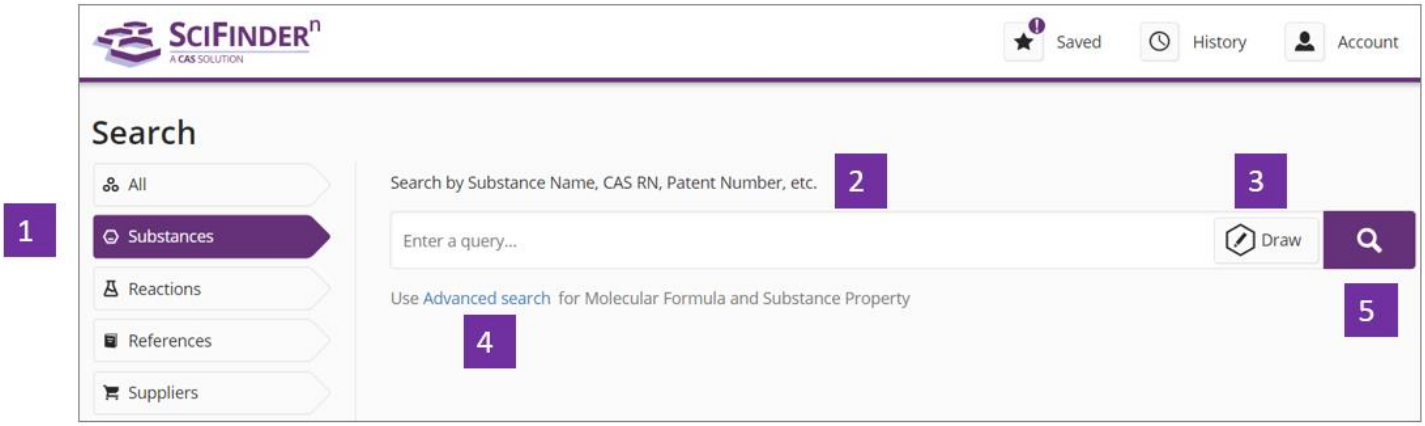
1. Prepare the stock solutions by dissolving equivalent to 20.0 mg of sofosbuvir (SOF) and 4.5 mg ledipasvir (LED) separately in 30 mL of acetonitrile in 50-mL amber-colored volumetric flasks and dilute to volume with ammonium acetate buffer pH 7.0.
2. Store the reference and sample stock solutions at 2 - 8 °C, protect from light and further dilute.

Reversed phase high-performance liquid chromatography (RP-HPLC)

1. Use the HPLC system consisting of a Cecil Adept CE-4104 low pressure quaternary gradient pump, Adept CE 4200 variable wavelength UV detector (Cecil Instruments Limited UK), controlled by PowerStream chromatography manager software version 4.2.
2. Carry out the separation on Luna analytical column (Phenomenex USA) 250 × 4.6 mm, 5 µm, octyl silica packing (Si-$[CH_2]_7$-CH_3) C_8.
3. Prepare the mobile phase by mixing ammonium acetate buffer pH 7.0 and acetonitrile in the ratio 35:65% v/v and filter through a 0.2 µm nylon membrane filter using a Millipore vacuum filtration assembly.
4. Set the flow rate at 0.7 mL/min.
5. Set the detector at 245 nm.

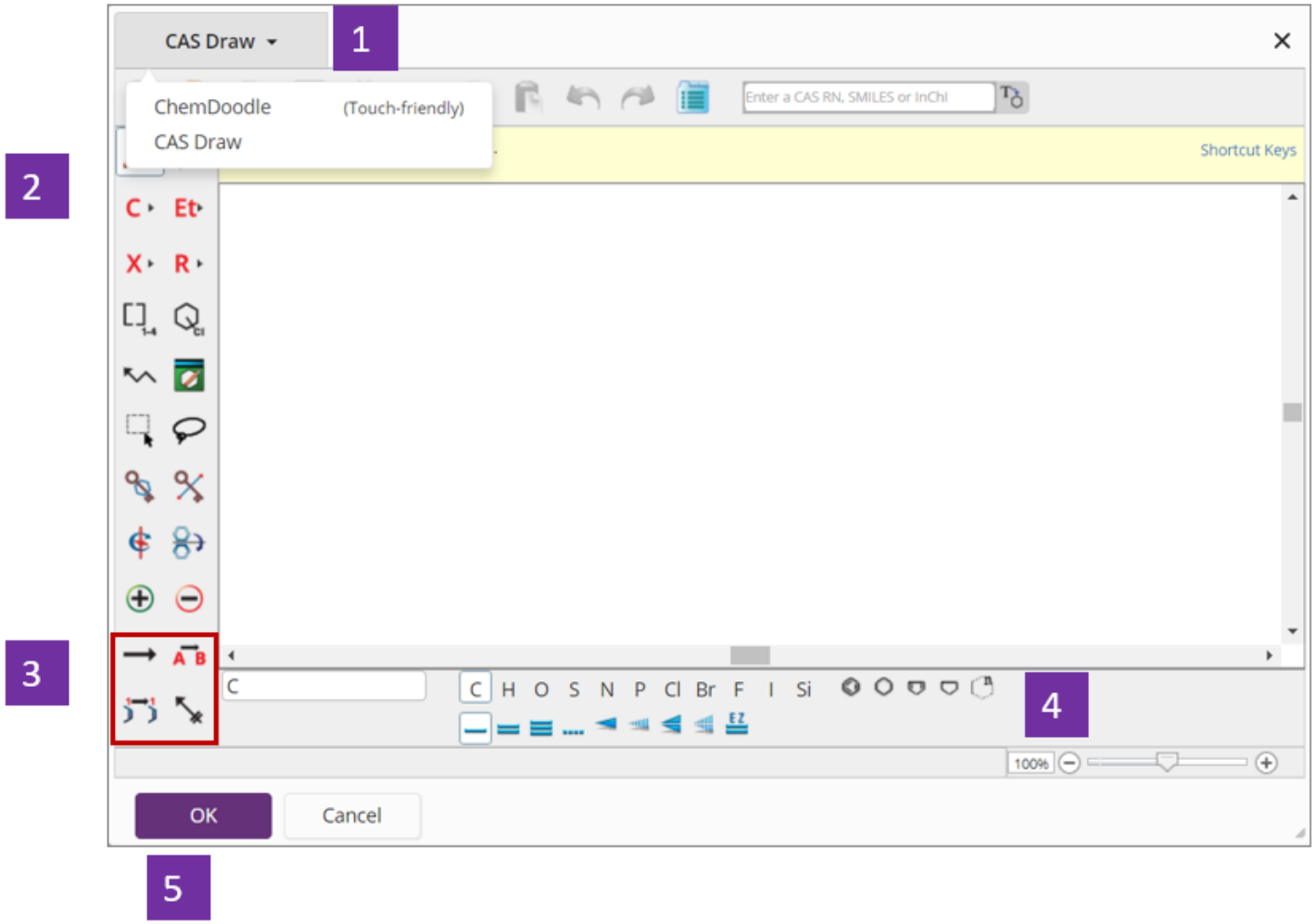
Validation	
Limit of Detection	0.485 µg/mL, Sofosbuvir 0.175 µg/mL, Ledipasvir
Limit of Quantitation	1.619 µg/mL, Sofosbuvir 0.586 µg/mL, Ledipasvir
Recovery	99.67 ± 0.40, 100.05 ± 0.65, 99.39 ± 0.55, 99.71 ± 0.58, 99.31 ± 0.41 and 98.95 ± 0.61% in 120, 100, 80, 60, 40 and 20% concentrations, respectively, Sofosbuvir 99.88 ± 0.69, 99.76 ± 0.59, 99.04 ± 0.78, 99.19 ± 0.54, 100.08 ± 0.4 and 99.33 ± 0.51% in 120, 100, 80, 60, 40 and 20% concentrations, respectively, Ledipasvir
Accuracy	0.33, −0.05, 0.61, 0.29, 0.69 and 1.05% (RE) in 120, 100, 80, 60, 40 and 20% concentrations, respectively, Sofosbuvir 0.12, 0.24, 0.96, 0.81, −0.08 and 0.67% (RE) in 120, 100, 80, 60, 40 and 20% concentrations, respectively, Ledipasvir
Precision	0.669, 0.727 and 0.872% (RSD, peak area) in 96 µg/mL concentration, Sofosbuvir 0.955, 0.975 and 0.492% (RSD, peak area) in 3.2 µg/mL concentration, Ledipasvir
Retention Time	4.468 ± 0.013 min, Sofosbuvir 8.242 ± 0.012 min, Ledipasvir

物质检索



1. 选择 Substances，进行物质检索
2. 输入检索信息：物质名称、CAS 登记号、专利号等
3. 点击 Draw，绘制结构
4. 点击 Advanced Search，进行分子式和物质属性检索
5. 点击放大镜，开始检索

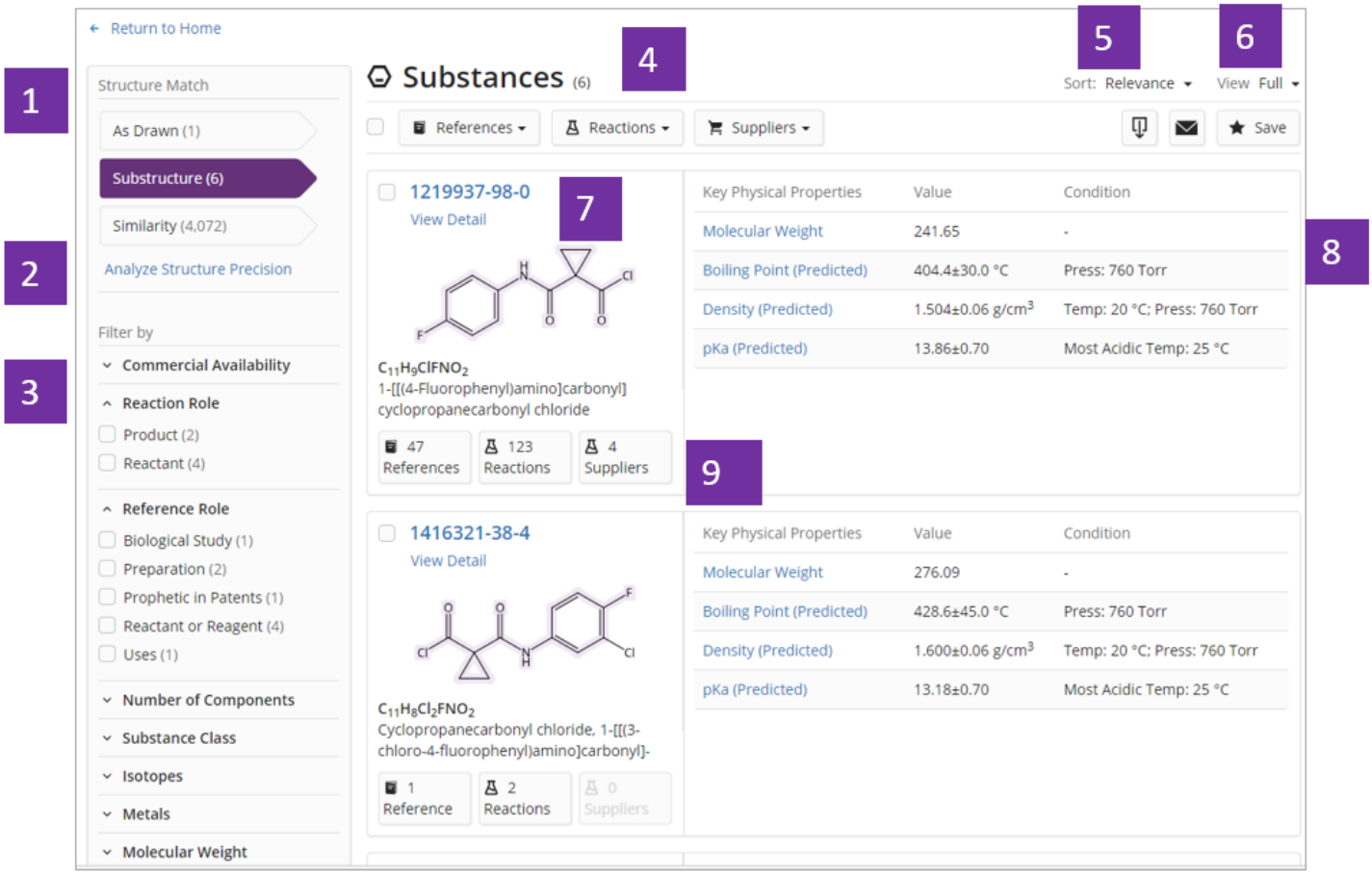
结构编辑器的使用



1. 结构编辑器的两种模式：ChemDoodle 支持触摸屏模式， CAS Draw 为普通的绘图模式。
2. 绘制结构需要的一系列工具
3. 绘制反应需要的工具
4. 常用的原子、环和键
5. 点击 OK，开始检索

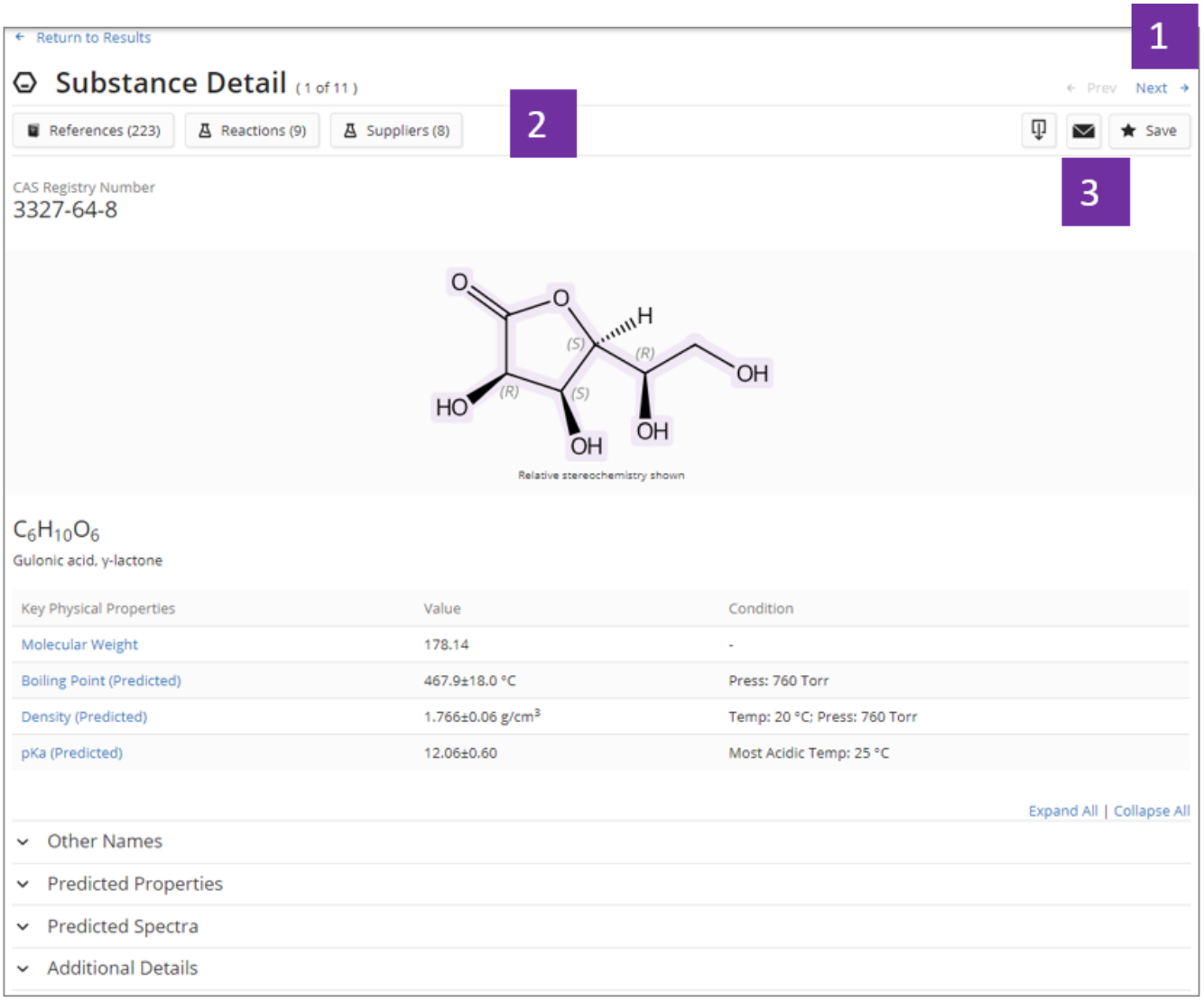
物质结果界面

物质检索以直观的布局展示结果。结果展示页面突出了最相关的结果，关键属性信息，以及高分辨率结构图。



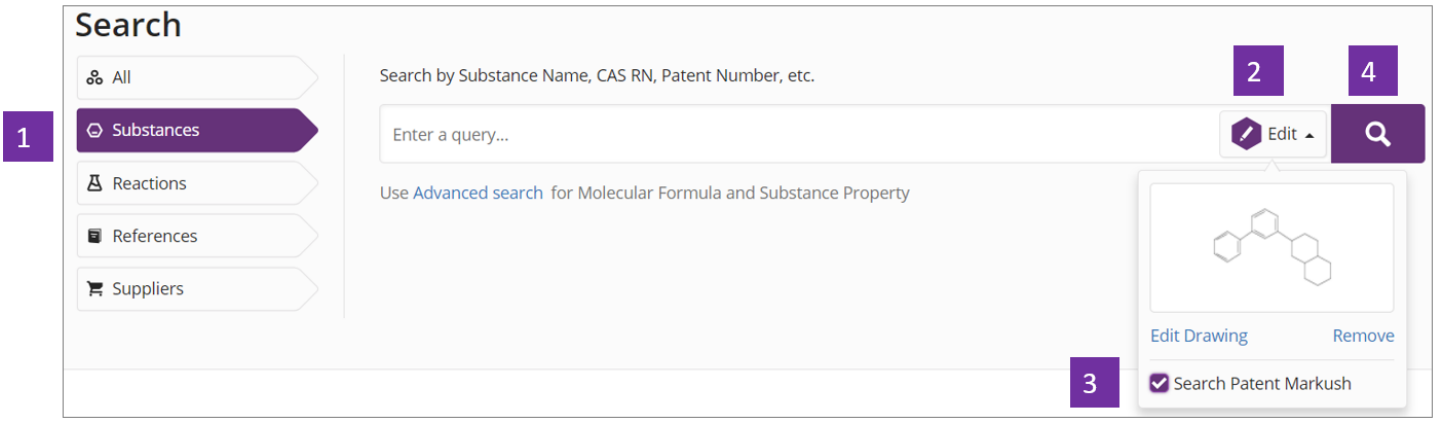
1. 结果结构匹配程度：As Drawn 精确结构，Substructure 亚结构，Similarity 相似结构
2. 点击 Analyze Structure Precision，对精确结构和亚结构的检索结果进行更细化的结构分类
3. 全面的物质结果聚类
4. 和物质结果集相关的文献、反应和供应商
5. 重新排序
6. 选择结构信息展示的详略
7. 点击 CAS 登记号，查看物质详情
8. 关键的物理属性
9. 此物质相关的文献、反应和供应商

物质详情界面



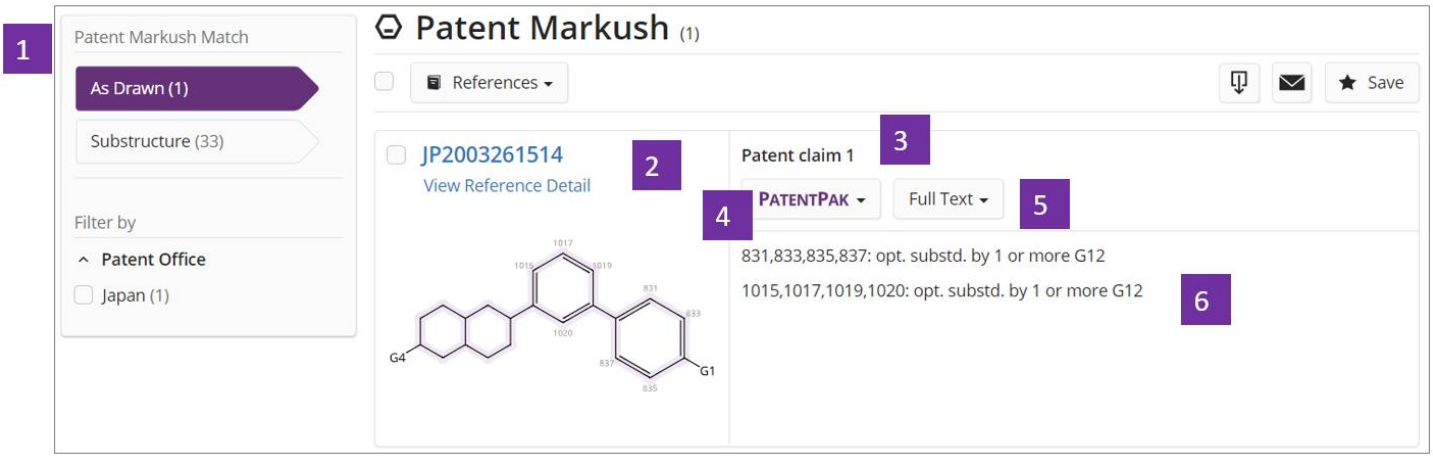
1. 点击左右箭头，查看前一个或后一个物质详情
2. 此物质相关的文献、反应和供应商
3. 下载、分析及保存物质详情
4. 关键的物理属性
5. 名称、预测属性、预测谱图及其他信息

物质 Markush 结构检索



1. 选择 Substances，进行 Markush 结构检索
2. 点击 Draw，绘制检索结构
3. 勾选 Search Patent Markush
4. 点击放大镜，开始检索

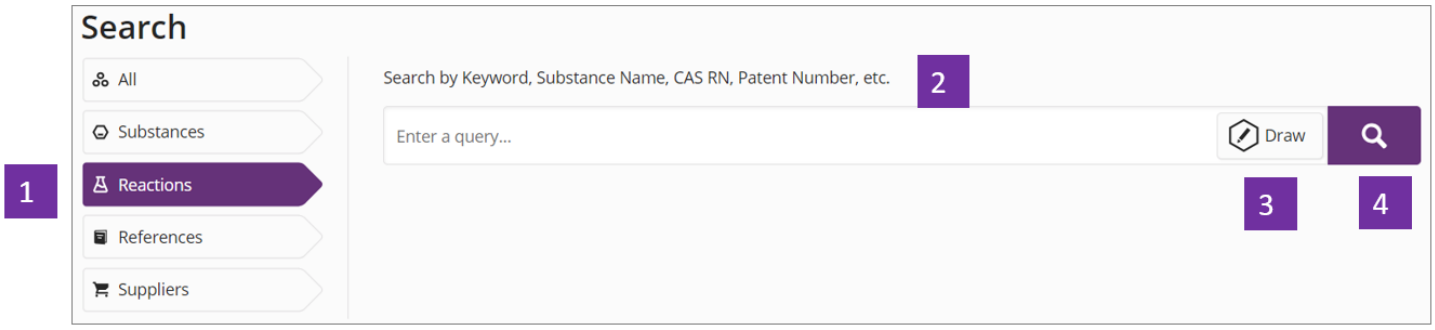
物质 Markush 结构检索结果展示



1. Markush 结构检索的匹配程度：As Drawn 精确结构，Substructure 亚结构
2. 点击专利号，获取专利文献详情
3. 匹配的 Markush 结构在专利中出现的位置
4. PatantPak：高效获取经 CAS 科学家深度标引的专利全文
5. 全文链接

6. Markush 结构的描述

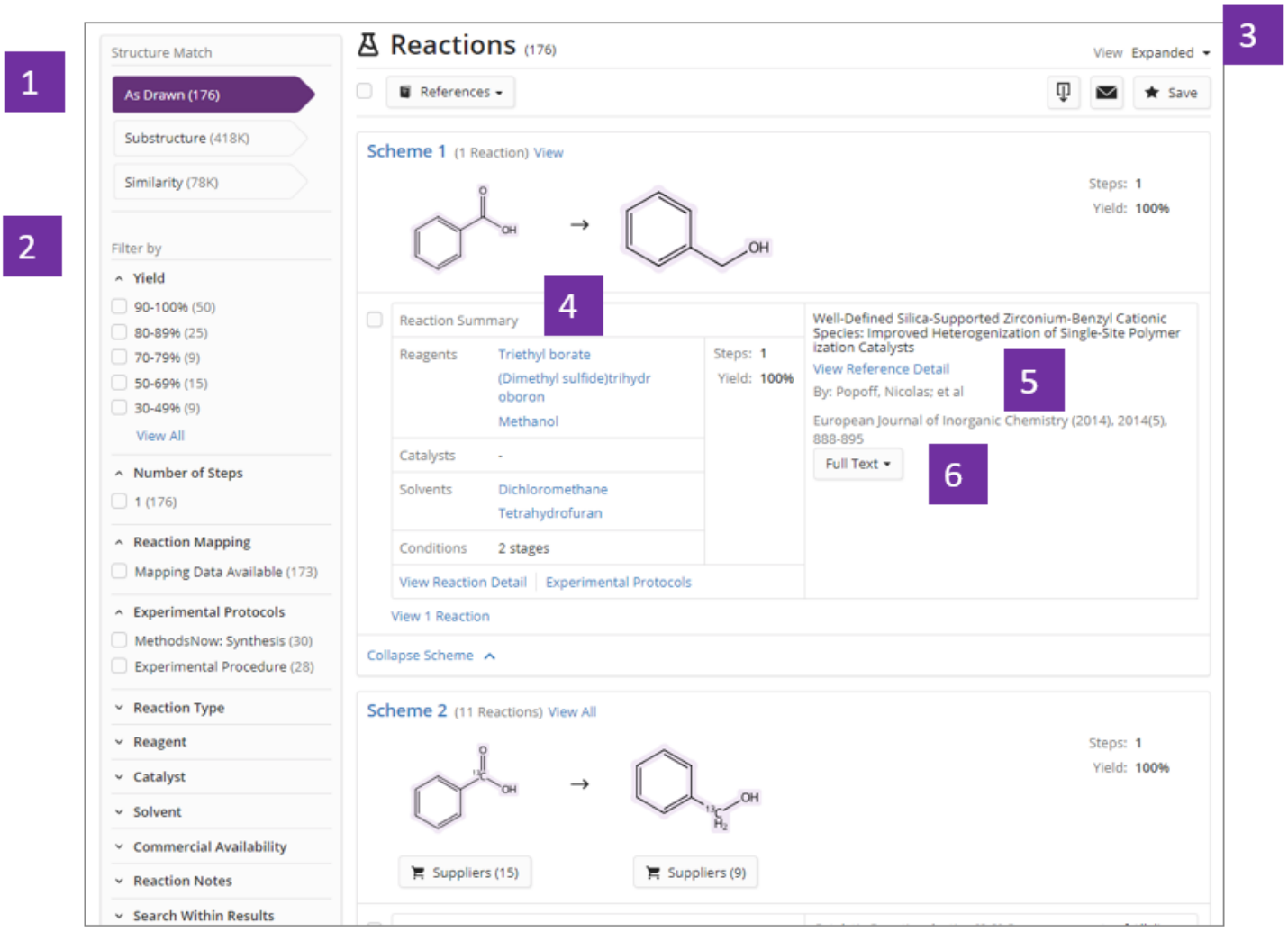
反应检索



1. 选择 Reactions，进行反应检索
2. 输入检索信息：关键词、物质名称、CAS 登记号和专利号等
3. 点击 Draw，绘制反应式
4. 点击放大镜，开始检索

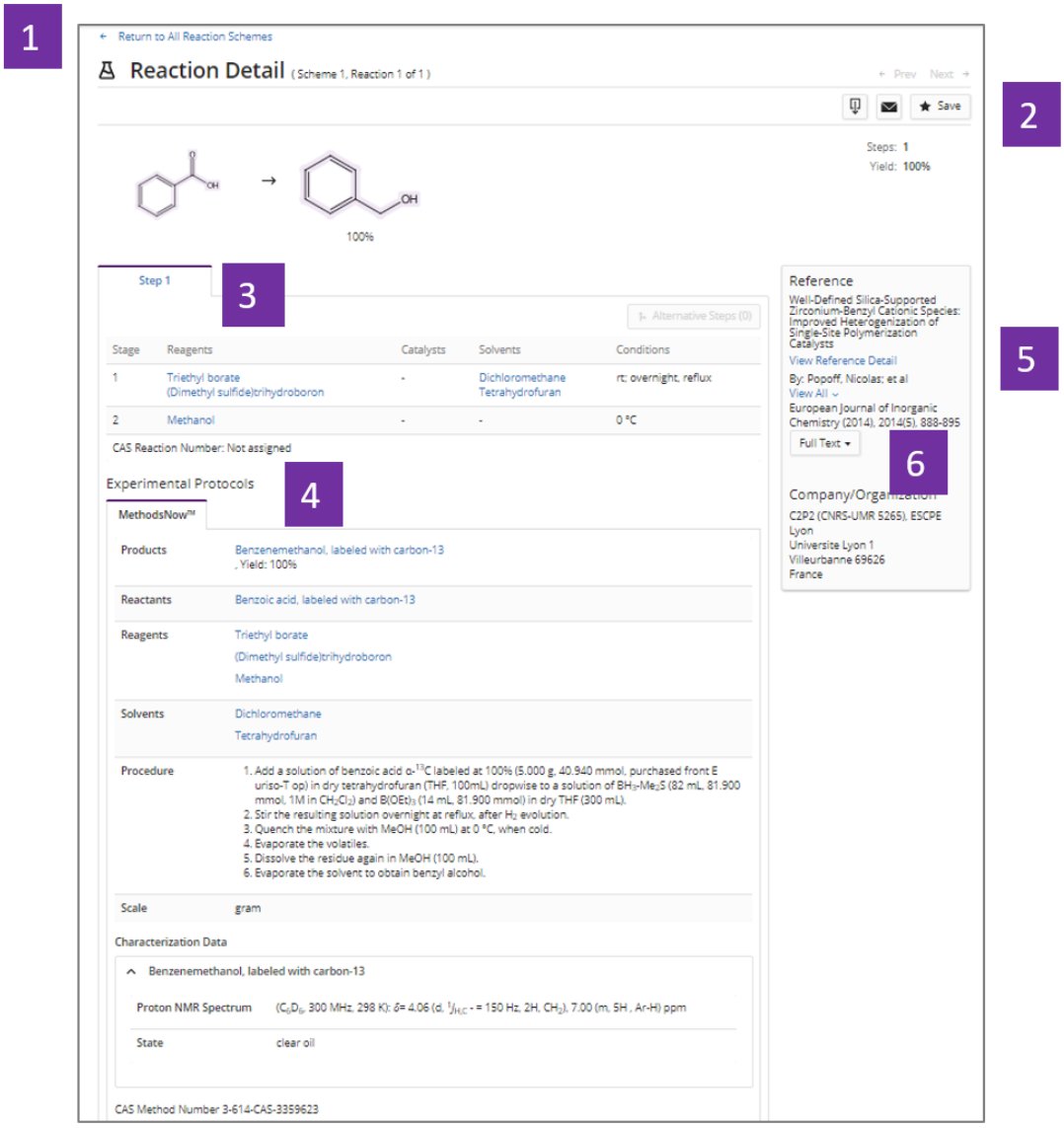
反应检索结果展示

反应检索显示了相关的结果，以及关键合成信息。



1. 反应结果集的匹配程度：As Drawn 精确结构，Substructure 亚结构，Similarity 相似结构
2. 全面的反应结果集聚类
3. 选择结果展示的详略
4. 反应条件概述
5. 获取文献详情
6. 文献全文链接

反应详情

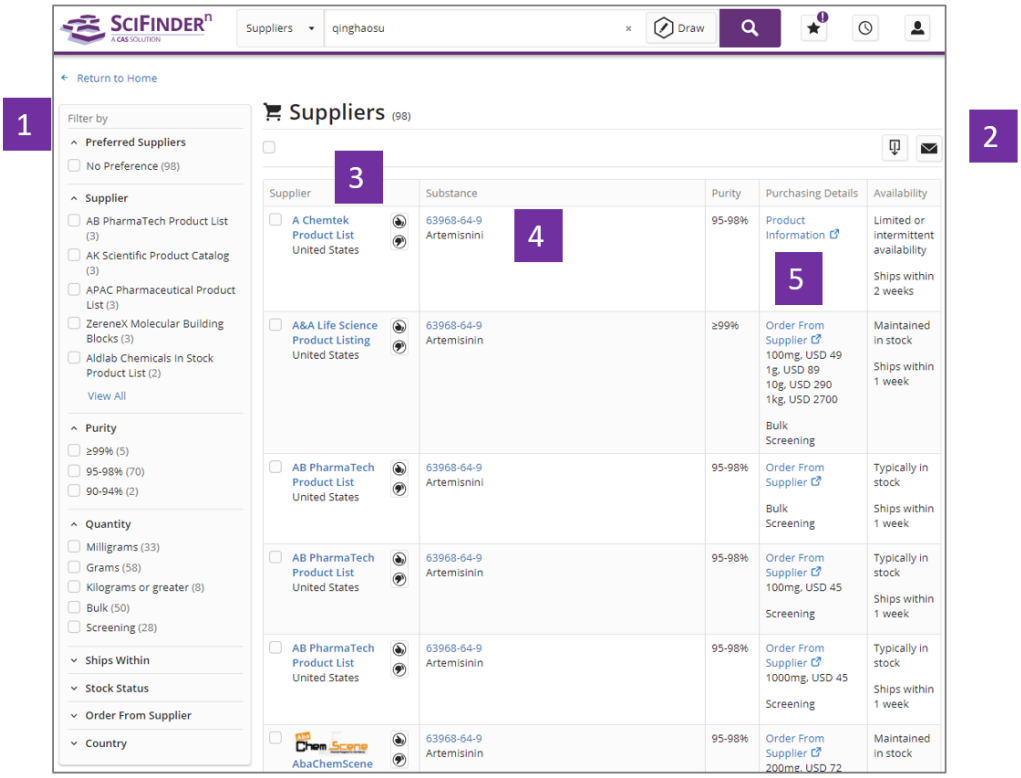


1. 返回至反应结果集界面
2. 下载、分享并保存检索结果
3. 反应步骤概述
4. MethodsNow，获取全面有条理的实验详情
5. 查看文献详情
6. 文献全文链接

供应商检索

1. 选择 Suppliers，进行供应商检索
2. 输入检索信息：物质名称、CAS 登记号等
3. 点击 Draw，绘制检索结构
4. 点击放大镜，开始检索

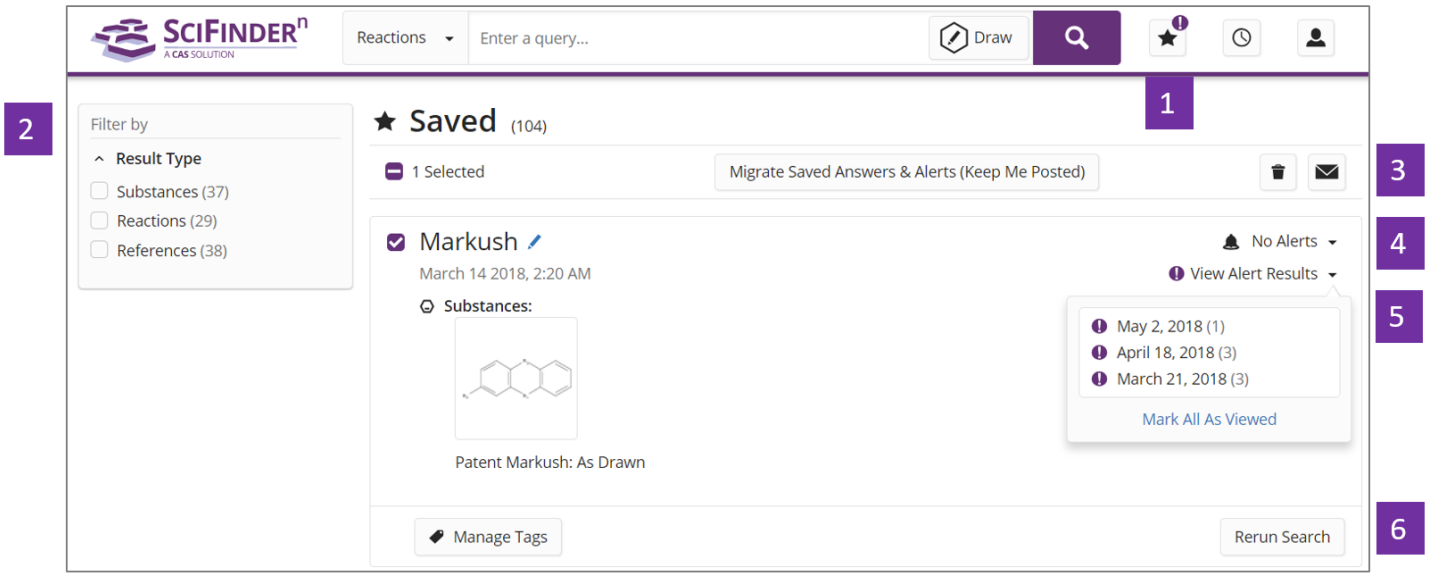
供应商检索结果展示



1. 全面的结果集聚类
2. 下载、分享检索结果

3. 点击供应商名，获取供应商信息
4. 点击 CAS 登记号，获取物质详情
5. 点击进入购买页面

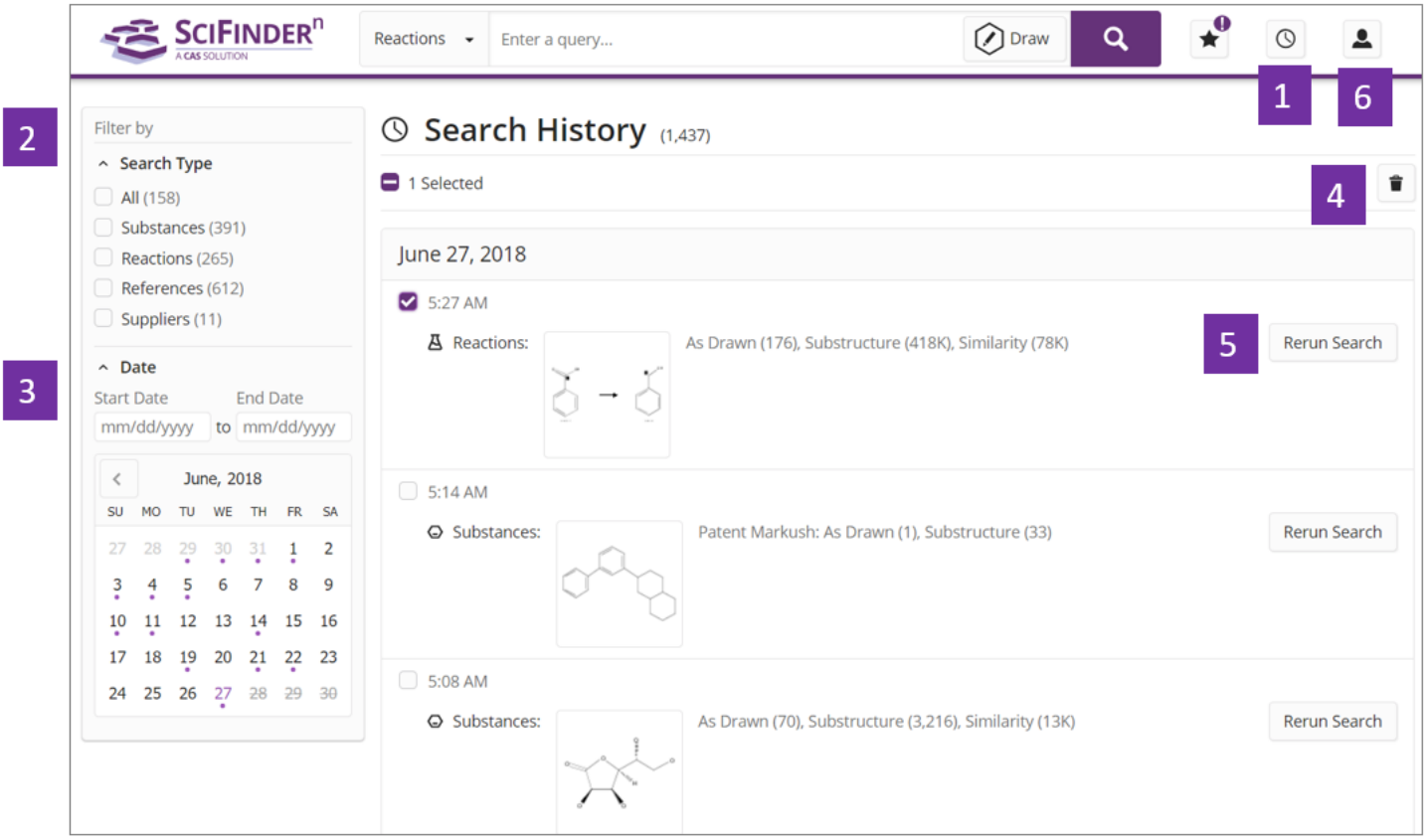
保存的结果



1. 查看保存的及信息更新提醒的结果集
2. 结果集的类型
3. 删除或分享结果
4. 点击铃铛旁的箭头，更改提醒设置
5. 查看设置的信息更新结果
6. 重新进行检索

检索历史

SciFinder^n 动态跟踪您的检索记录，并帮助您快速找到之前的检索。您还可以很容易地进行保存并设置检索提醒。



1. 检索历史
2. 检索类型
3. 检索日期
4. 筛选检索结果
5. 重新开始检索
6. 退出检索

美国化学文摘社（Chemical Abstracts Service, 简称“CAS”）是美国化学会（American Chemical Society，简称“ACS”）旗下的分支机构，是全球提供化学及相关信息解决方案的权威机构。秉承美国化学会“运用化学的力量改善人们的生活”的愿景，美国化学文摘社专业的科学家团队致力于发现、收集及管理所有公开的化学物质信息，创建了世界上对于创新至关重要的、最具价值的内容集合。全球的科研人员及从事专利的专业人士依靠美国化学文摘社提供的研究解决方案实现其科研发现并完成工作流程。

美国艾赛思国际有限公司北京代表处

Tel: 010-62508026/7

Email: china@acs-i.org

CAS
A DIVISION OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

SciFinder^n
A CAS SOLUTION