CAS持续增值的数据内容与多元创新服务

潘娜 博士
npan@acs-i.org
美国化学文摘社(CAS)北京代表处

CAS
A division of the
American Chemical Society

提纲

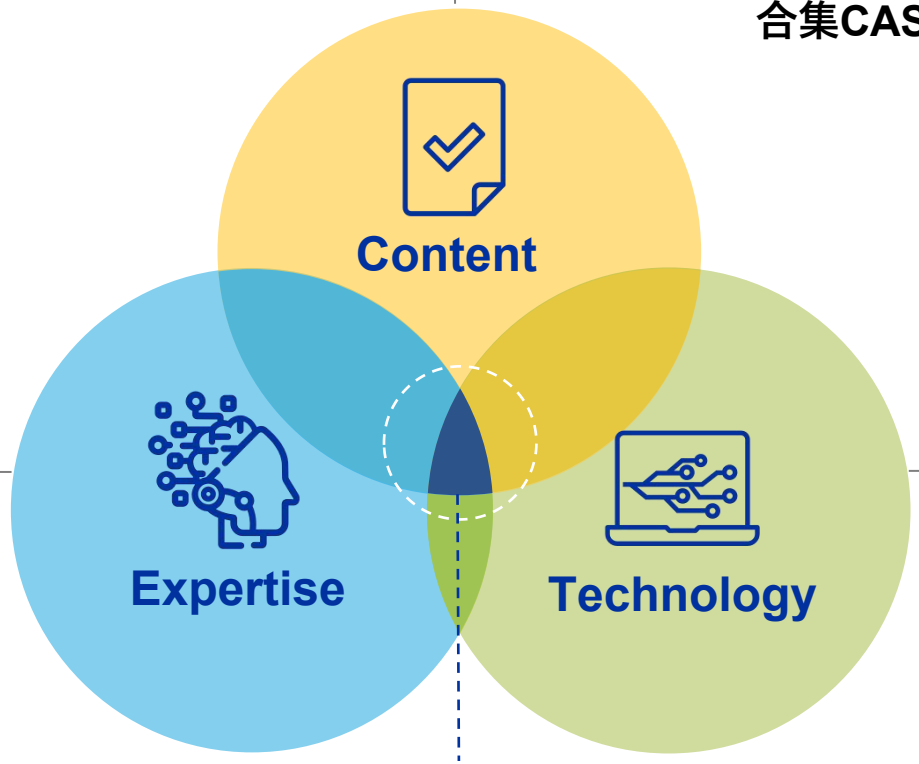
- CAS 简介
- CAS 持续增值的数据内容与多元创新服务
  - 先进技术与独特内容支撑的新增功能与内容
  - 跨学科多维度定制的学习资源与数据服务
  - 持续创新的丰富教学与学习活动支持

CAS
A division of the American Chemical Society

关于 CAS

CAS 从专业知识、内容和技术三方面为全球创新保驾护航

独特的内容 | 全球领先的科学数据合集CAS Content Collection™



专业知识 | 多学科背景的科学家和技术专家，精通50多国语言

专业技术 | 在数据管理、搜索和检索方面领先的创新者

我们在全球出版的科学数据间建立关联，

将科学数据转化为更好的洞察力

CAS
A division of the American Chemical Society

CAS 值得信赖

生物、学术、生物技术、化学、全球专利局等各行业领先机构的选择

TOP 25
LIFE SCIENCES COMPANIES[1]

TOP 25
CHEMICAL COMPANIES[2]

TOP 25
UNIVERSITIES[3]

TOP 10
GLOBAL PATENT OFFICES[4]

1. https://www.pharmexec.com/view/2024-pharm-exec-top-50-companies
2. https://www.chemanalyst.com/ChemAnalyst/ChemicalManufacturers
3. https://www.shanghairanking.com/rankings/gras/2024/RS0103
4. https://www.wipo.int/edocs/pubdocs/en/wipo-pub-941-2023-en-world-intellectual-property-indicators-2023.pdf

CAS
A division of the American Chemical Society

历经百年，CAS 始终如一
承担着连接全球科学知识的工作

协助科学家解决重大科学信息挑战

50K+
超过5万种科技期刊

50+
50多种语言

290+
超过2.9亿种物质

109
109家
专利授权机构

CAS
A division of the American Chemical Society

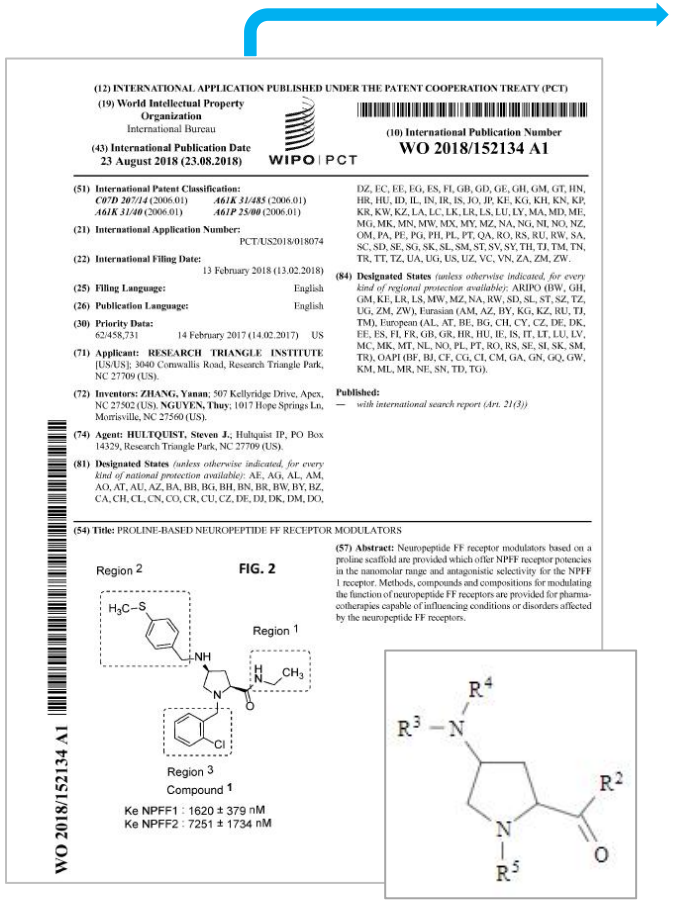
CAS 对文献的独特解读

以专利WO2018152134为例

改写的标准和摘要，尽可能揭示专利核心价值

丰富的增值标引信息：

- ***19** Concepts*
- ***163** Substances*
- ***625** Reactions*
- ***15** Patent Family Members*
- ***3** Formulations*
- ***1** Markush structure*
- ***18** SAR data points*
- ***141** ADME data points*



(12) INTERNATIONAL APPLICATION PUBLISHED UNDER THE PATENT COOPERATION TREATY (PCT)

(19) World Intellectual Property Organization
International Bureau

(10) International Publication Number
WO 2018/152134 A1

(43) International Publication Date
23 August 2018 (23.08.2018)

WIPO | PCT

(54) Title: PROLINE-BASED NEUROPEPTIDE FF RECEPTOR MODULATORS

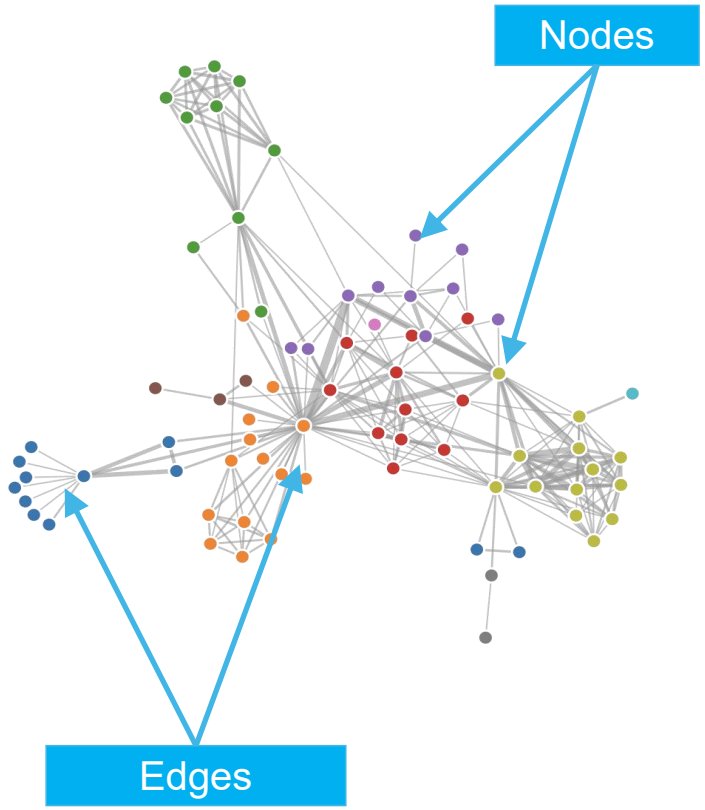
FIG. 2

Region 2 Region 1 Region 3

Compound 1

Ke NPFF1 : 1620 ± 379 nM
Ke NPFF2 : 7251 ± 1734 nM

WO 2018/152134 A1



Click document to view on CAS SciFinder®

CAS
A division of the American Chemical Society

CAS 持续开发新型解决方案，满足多元应用场景需求

Discovery

CAS SciFinder Discovery Platform™

Get discoveries to market faster and optimize margins by giving researchers the information they need

Life sciences

CAS BioFinder Discovery Platform™

Confidently advance your drug discovery program with integrated biological and chemistry data and analysis solutions

Intellectual property

STN IP Protection Suite™

Ensure that your intellectual property is protected and find opportunities to extend into new markets

Custom solutions

CAS Custom Services℠

Customized data, analytics and insights to maximize the value of information assets and fuel digitalization success

CAS
A division of the American Chemical Society

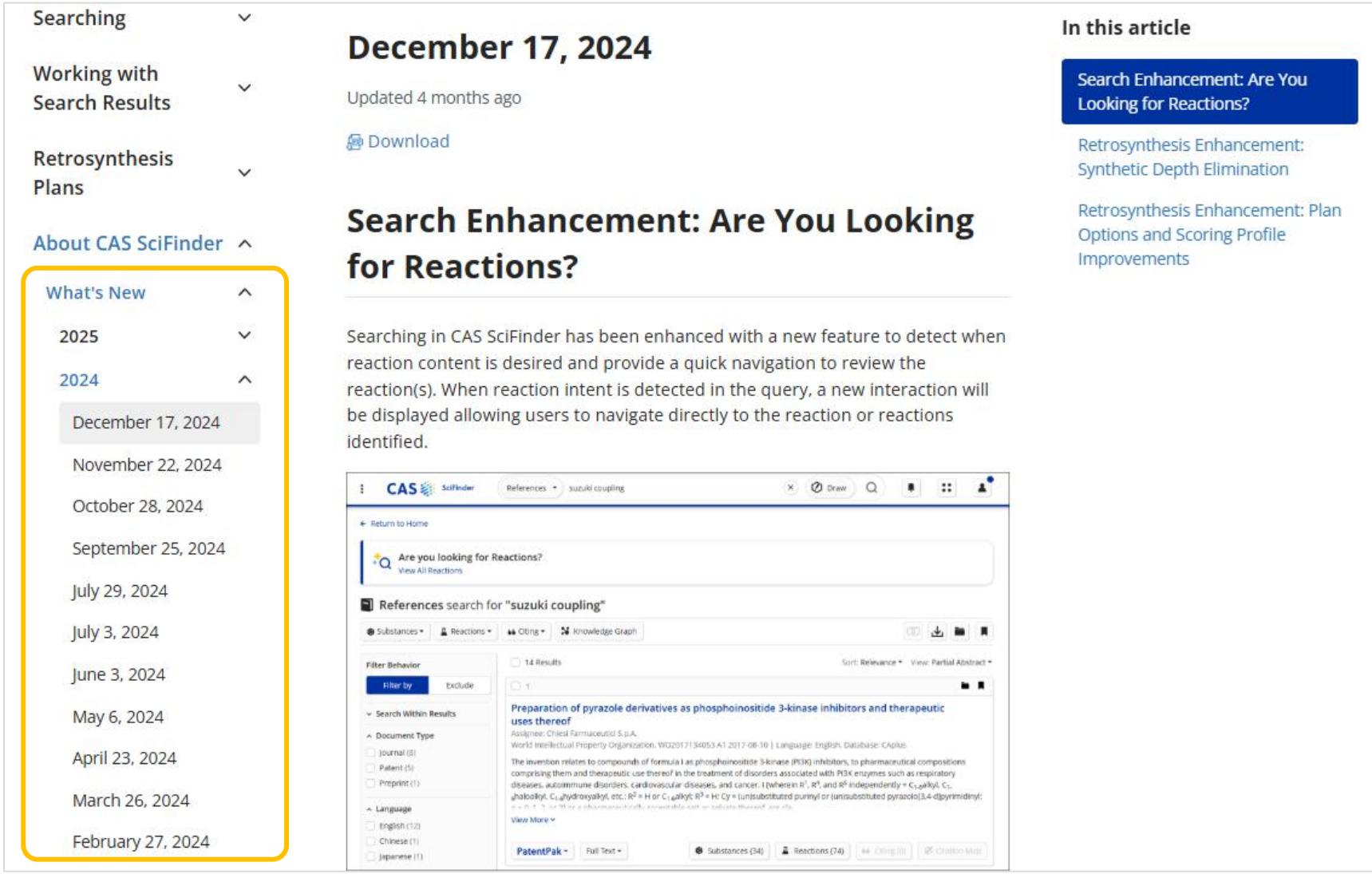
提纲

- CAS 简介
- CAS 持续增值的数据内容与多元创新服务
  - 先进技术与独特内容支撑的新增功能与内容
  - 跨学科多维度定制的学习资源与数据服务
  - 持续创新的丰富教学与学习活动支持

CAS
A division of the
American Chemical Society

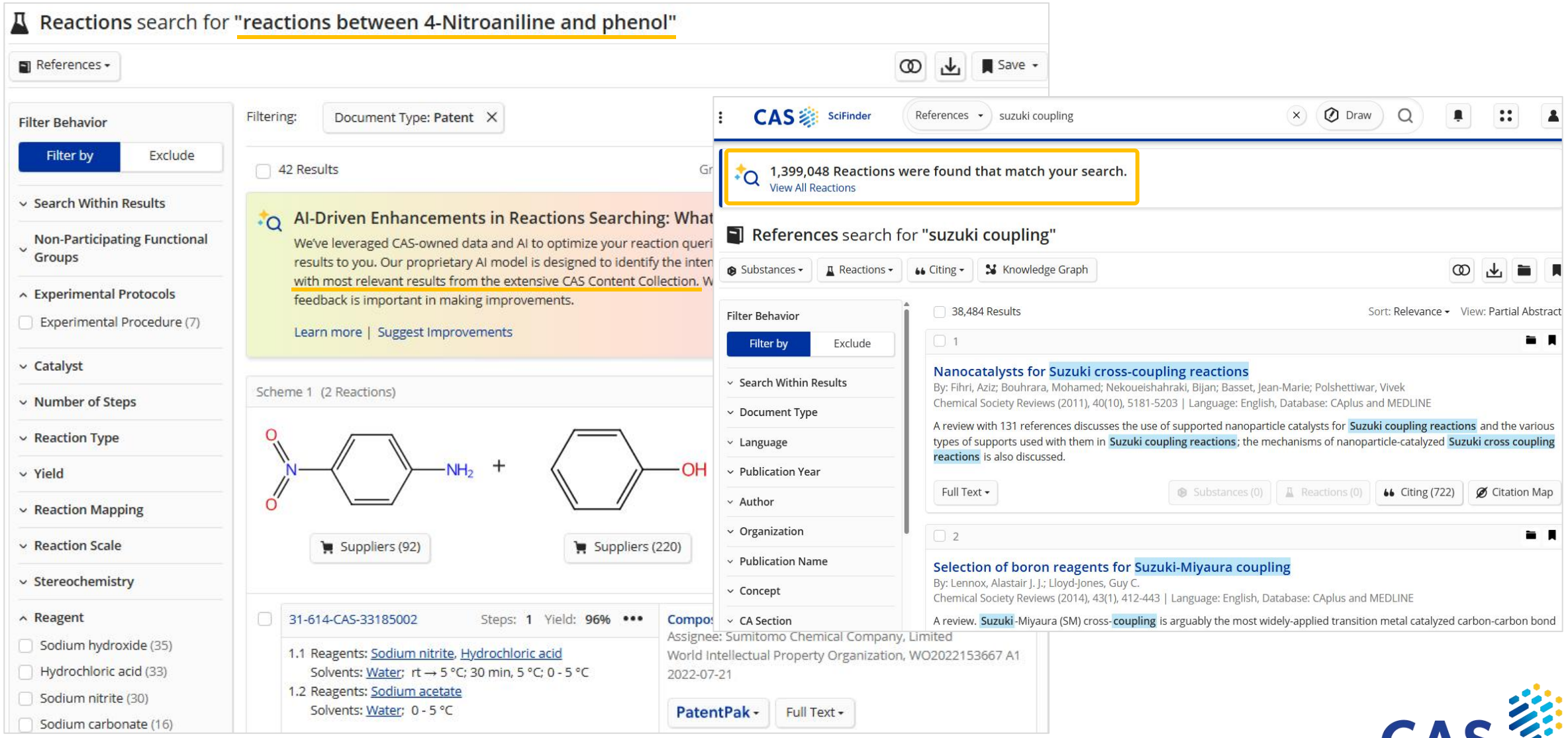
CAS SciFinder® 持续更新的功能与内容

- 更新说明列表
- 按更新时间索引



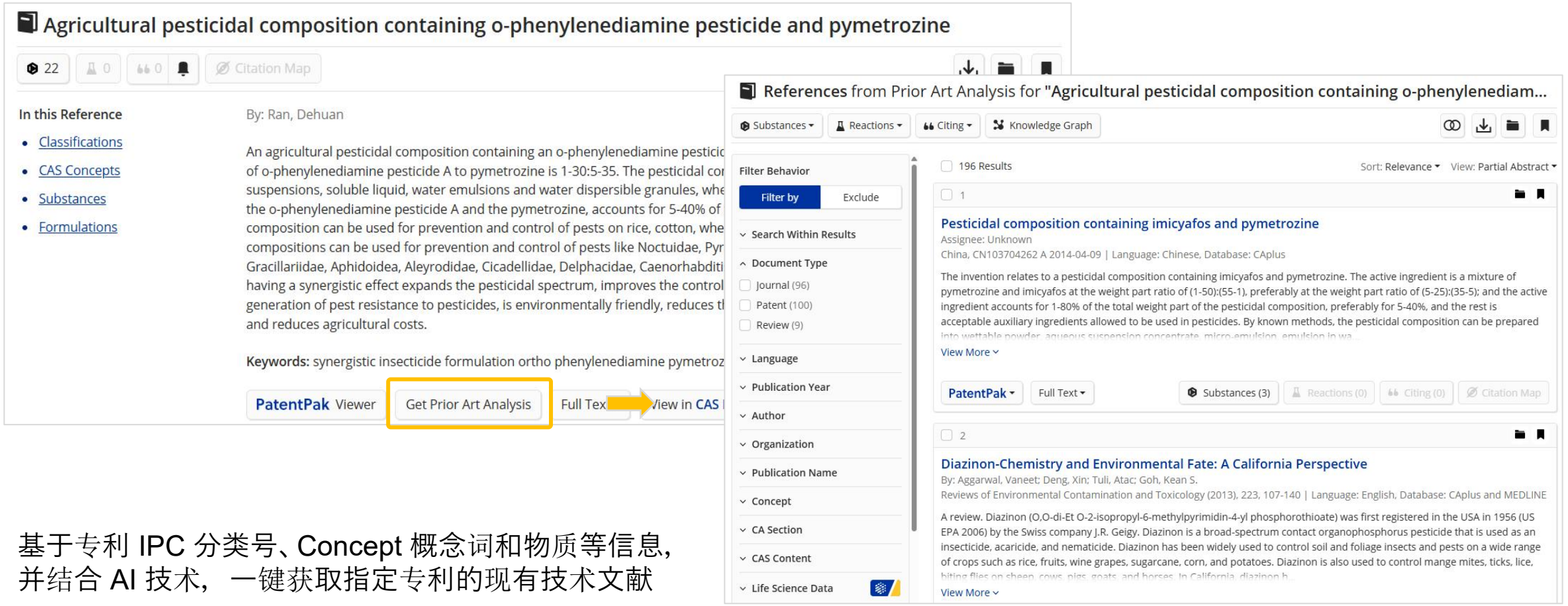
CAS
A division of the American Chemical Society

AI 识别检索意向，提供最相关检索结果



CAS
A division of the American Chemical Society

基于专利文献，一键获取现有技术分析，为判断新颖性和创造性提供信息支撑



基于专利 IPC 分类号、Concept 概念词和物质等信息，并结合 AI 技术，一键获取指定专利的现有技术文献

CAS
A division of the American Chemical Society

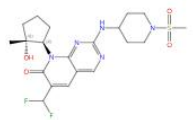
新增生命科学数据，便于挖掘隐藏的重要信息

Pharmacological Data

药理活性

CAS LIFE SCIENCES

2185857-97-8



Absolute stereochemistry shown

$C_{20}H_{27}F_2N_5O_4S$

6-(Difluoromethyl)-8-[(1*R*,2*R*)-2-hydroxy-2-methylcyclopentyl]-2-[[1-(methylsulfon...

Ligand	Target	Function	Parameter ^1	Value	Disease	Organism	Assay
2185857-97-8	Cyclin-dependent kinase 1	-	EC50				
2185859-32-7	Cyclin-dependent kinase 2	-	EC50				
2185857-97-8	Cyclin-dependent kinase 2	-	EC50				
2185859-32-7	Cyclin-dependent kinase 1	-	EC50				
2185857-97-8	Retinoblastoma-associated protein	-	EC50				
571190-30-2	Retinoblastoma-associated protein	Inhibitor	IC50				
2185859-32-7	Retinoblastoma-associated protein	Inhibitor	IC50	0.27 µM	-	Homo sapiens	View Detail

Biomarkers

生物标志物

CAS LIFE SCIENCES

Biomarker	Biomarker Type	Disease	Category	Measurement	Details
CDK4 (DNA)	Molecular	Cancer, Breast	Gene-disease association linked with genetic variation	Association score	View Detail
CDK4 (DNA)	Molecular	Breast Neoplasms	Gene-disease association linked with genetic variation	Association score	View Detail
CDK4 (DNA)	Molecular	CARCINOMA OF BREAST	Gene-disease association linked with genetic variation	Association score	View Detail

Toxicity

毒性

CAS LIFE SCIENCES

Ligand ^1	Target ^2	Function	Parameter ^3	Value	Disease		
1092443-55-4	786-O	Inhibitor	LC50	> 100 µM	cancer		
1092443-55-4	A498	Inhibitor	LC50	> 100 µM	cancer		
1092443-55-4	A549	Inhibitor	LC50	> 100 µM	cancer		
1092443-55-4	ACHN	Inhibitor	LC50	> 100 µM	cancer		
1092443-55-4	BT-549	Inhibitor	LC50	> 100 µM	cancer		
1092443-55-4	CAKI-1	Inhibitor	LC50	> 100 µM	cancer		
1092443-55-4	CCRF-CEM	Inhibitor	LC50	> 100 µM	cancer	-	View Detail
1092443-55-4	COLO 205	Inhibitor	LC50	0.637 µM	cancer	-	View Detail

ADME

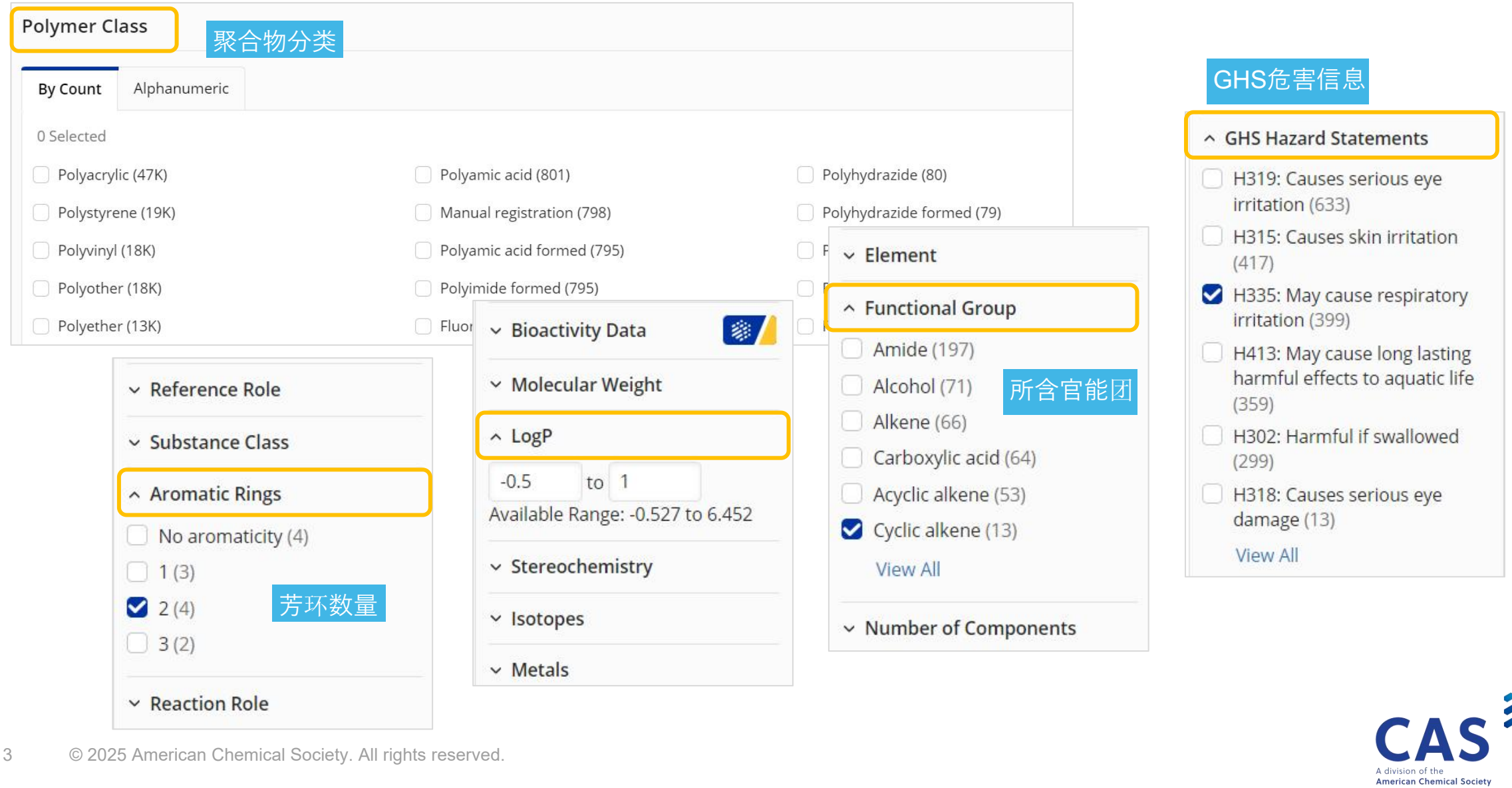
代谢数据

CAS LIFE SCIENCES

Ligand ^1	Target ^2	Function	Parameter ^3	Value	Disease	Organism	Assay
571190-30-2	-	Inhibitor	Bioavailability	56.1 %	cancer	-	View Detail
571190-30-2	-	Inhibitor	t1/2	2.1 hr	cancer	-	View Detail
363621-34-5	-	Inhibitor	AUC	12.1 µM.hr	cancer	-	View Detail
363621-34-5	-	Inhibitor	Cmax	2.99 µM	cancer	-	View Detail
328061-69-4	-	Inhibitor	Cmax	3.2 µM	cancer	-	View Detail
328061-69-4	-	Inhibitor	t1/2	3 hr	cancer	-	View Detail

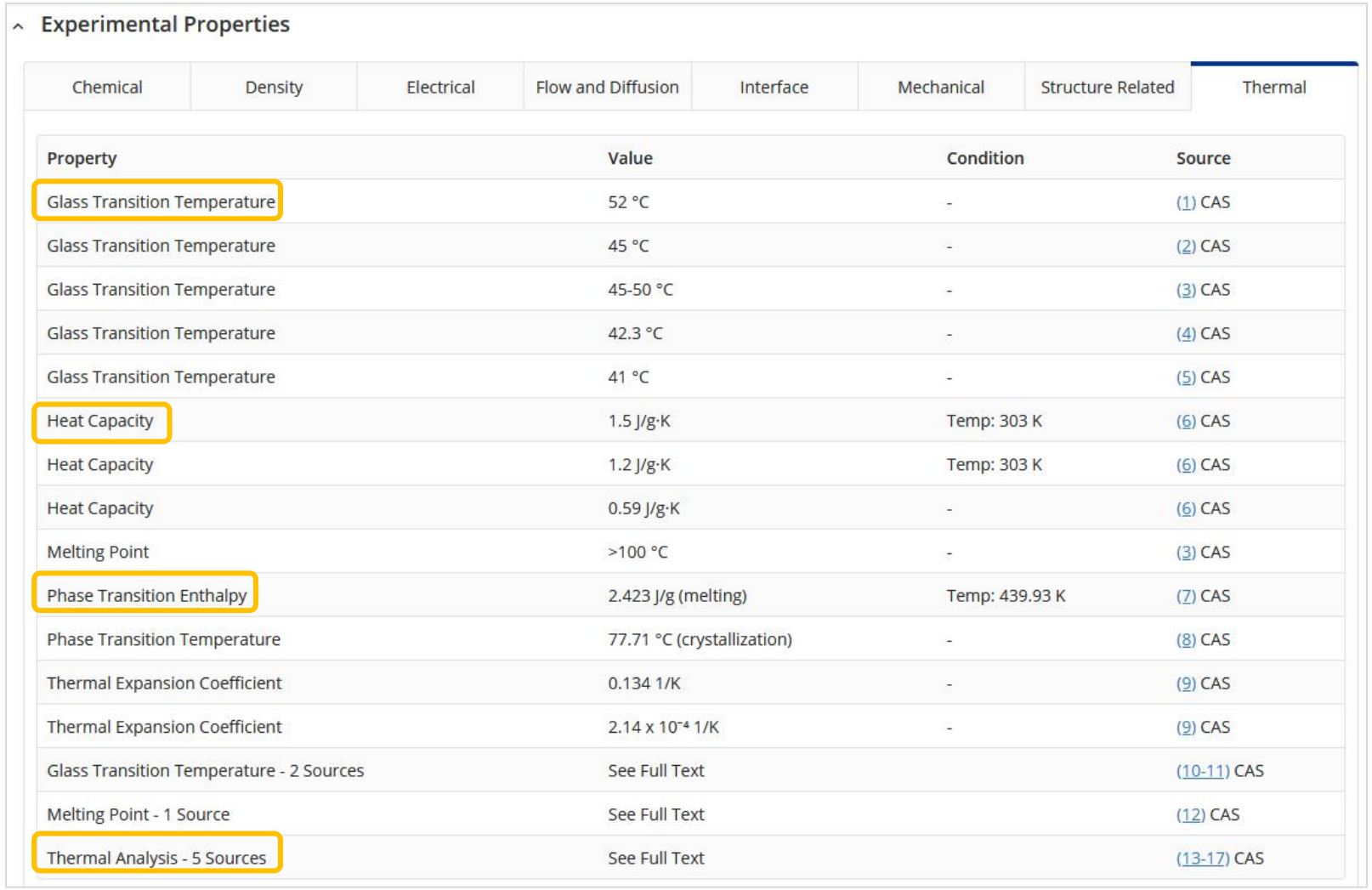
CAS
A division of the American Chemical Society

更多维的筛选项，便于不同领域聚焦核心物质/材料



CAS
A division of the American Chemical Society

新增多种属性数据：助力材料、化学化工研究



Experimental Properties

Chemical | Density | Electrical | Flow and Diffusion | Interface | Mechanical | Structure Related | Thermal

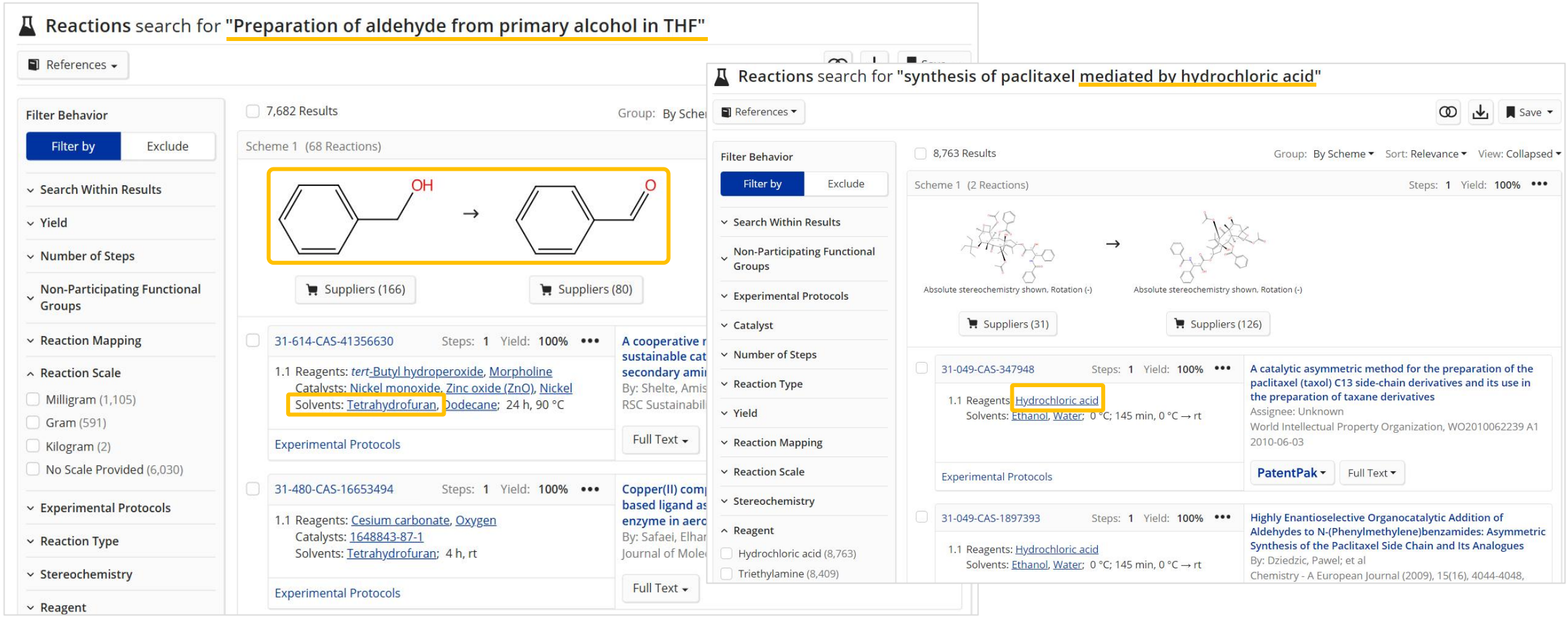
Property	Value	Condition	Source
Glass Transition Temperature	52 °C	-	(1) CAS
Glass Transition Temperature	45 °C	-	(2) CAS
Glass Transition Temperature	45-50 °C	-	(3) CAS
Glass Transition Temperature	42.3 °C	-	(4) CAS
Glass Transition Temperature	41 °C	-	(5) CAS
Heat Capacity	1.5 J/g·K	Temp: 303 K	(6) CAS
Heat Capacity	1.2 J/g·K	Temp: 303 K	(6) CAS
Heat Capacity	0.59 J/g·K	-	(6) CAS
Melting Point	>100 °C	-	(3) CAS
Phase Transition Enthalpy	2.423 J/g (melting)	Temp: 439.93 K	(7) CAS
Phase Transition Temperature	77.71 °C (crystallization)	-	(8) CAS
Thermal Expansion Coefficient	0.134 1/K	-	(9) CAS
Thermal Expansion Coefficient	2.14 x 10^{-4} 1/K	-	(9) CAS
Glass Transition Temperature - 2 Sources	See Full Text		(10-11) CAS
Melting Point - 1 Source	See Full Text		(12) CAS
Thermal Analysis - 5 Sources	See Full Text		(13-17) CAS

新增实验属性：

玻璃化转变温度、热分析动力学参数、相点、焓、自由能、热容、流体属性、溶解度、解离常数、偶极距数据等

CAS
A division of the American Chemical Society

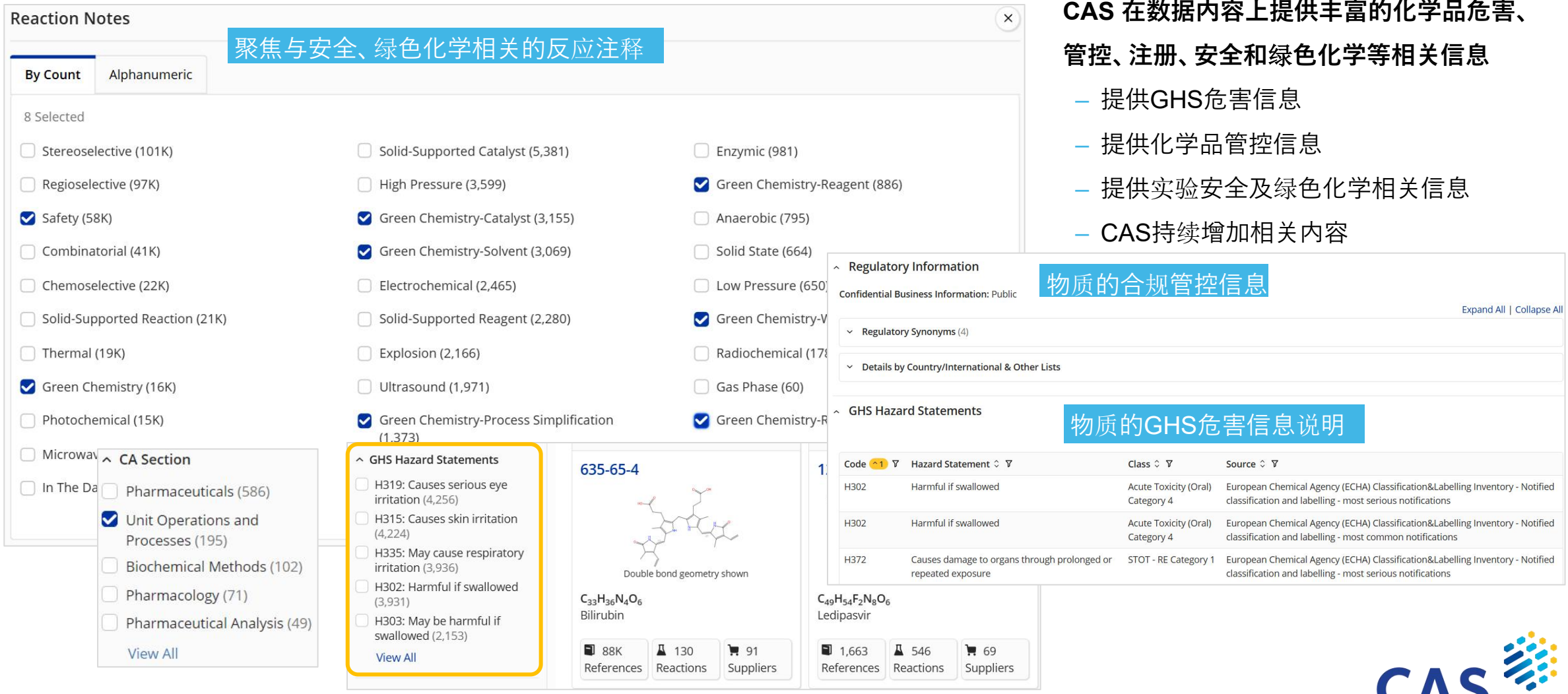
利用自然语言检索反应，降低检索难度



智能识别反应的底物、产物、溶剂、试剂、催化剂、物质类别等信息，便捷反应检索

CAS
A division of the American Chemical Society

持续助力杰出的EHS管理与规范，保障科研的可持续发展，并树立行业典范

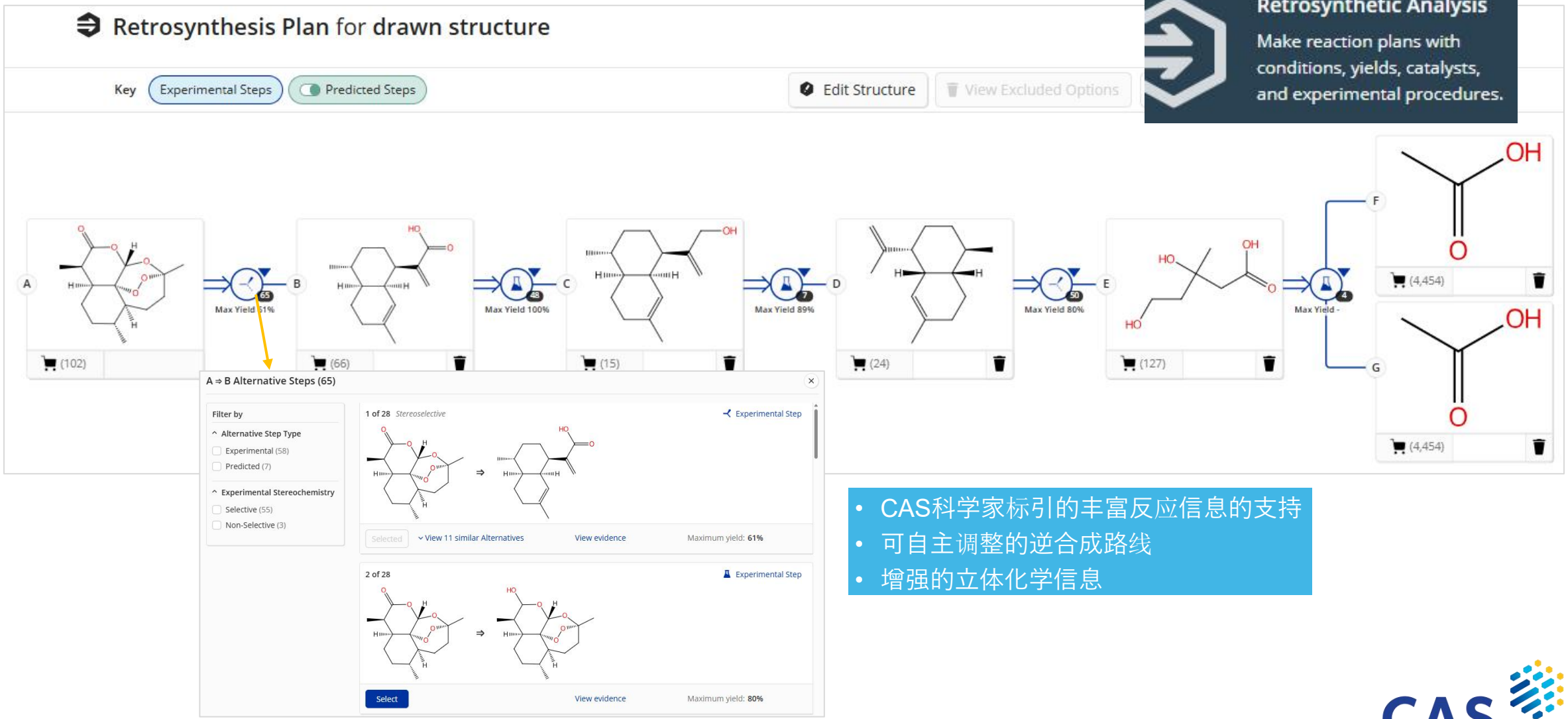


CAS 在数据内容上提供丰富的化学品危害、管控、注册、安全和绿色化学等相关信息

- 提供GHS危害信息
- 提供化学品管控信息
- 提供实验安全及绿色化学相关信息
- CAS持续增加相关内容

CAS
A division of the American Chemical Society

AI 加持的逆合成工具，为合成路线设计提供思路



- CAS科学家标引的丰富反应信息的支持
- 可自主调整的逆合成路线
- 增强的立体化学信息

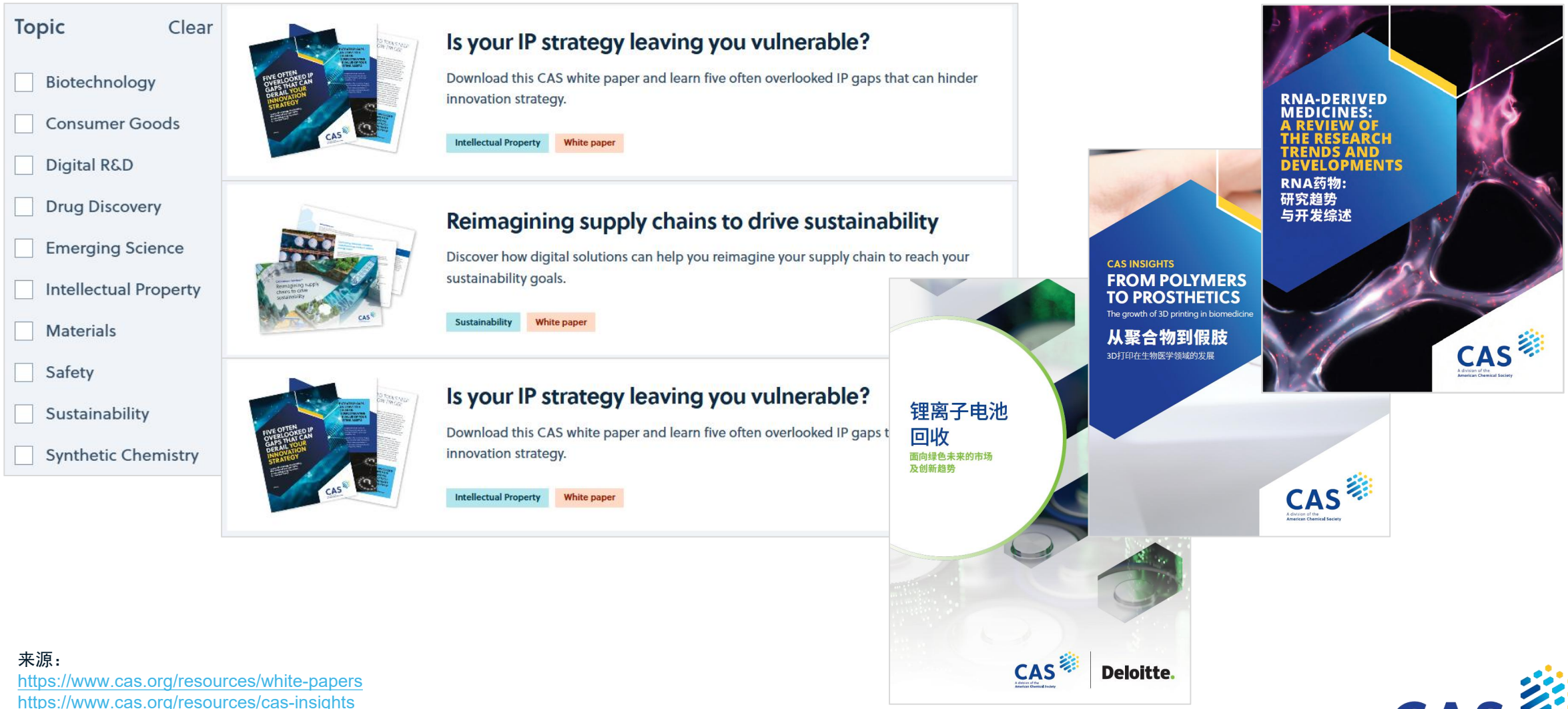
CAS
A division of the American Chemical Society

提纲

- CAS 简介
- CAS 持续增值的数据内容与多元创新服务
  - 先进技术与独特内容支撑的新增功能与内容
  - 跨学科多维度定制的学习资源与数据服务
  - 持续创新的丰富教学与学习活动支持

CAS
A division of the American Chemical Society

CAS 系列白皮书及洞察报告



来源：
https://www.cas.org/resources/white-papers
https://www.cas.org/resources/cas-insights

CAS
A division of the American Chemical Society

2024 CAS SCIFINDER 中文论坛

共计10场，ZOOM和微信视频号累计上万人次观看直播

Date	Topic
3/8/2024	CAS SciFinder Discovery Platform 快速入门
3/22/2024	聚焦课题探索与文献综述
4/12/2024	助力推动实验进展
4/26/2024	从实验数据到论文与专利
5/10/2024	助您生物科研快人一步
5/24/2024	典型合成反应案例
9/26/2024	助力药物立项调研
10/24/2024	聚合物可持续利用与创新
11/14/2024	电池及电化学能源材料
12/19/2024	专利查新与规避专利侵权风险

CAS
A division of the American Chemical Society

2025 CAS SCIFINDER 中文论坛

春季论坛直播时间表

3 月 21 日 | 零基础入门

演讲人：刘子露 博士

3 月 28 日 | 解锁新功能

演讲人：杜德鑫 博士

4 月 18 日 | 助攻论文写作

演讲人：潘娜 博士

4 月 25 日 | 探索科研成果转化

演讲人：钱欣 博士

5 月 9 日 | 结构绘制面板及案例详解

演讲人：刘子露 博士

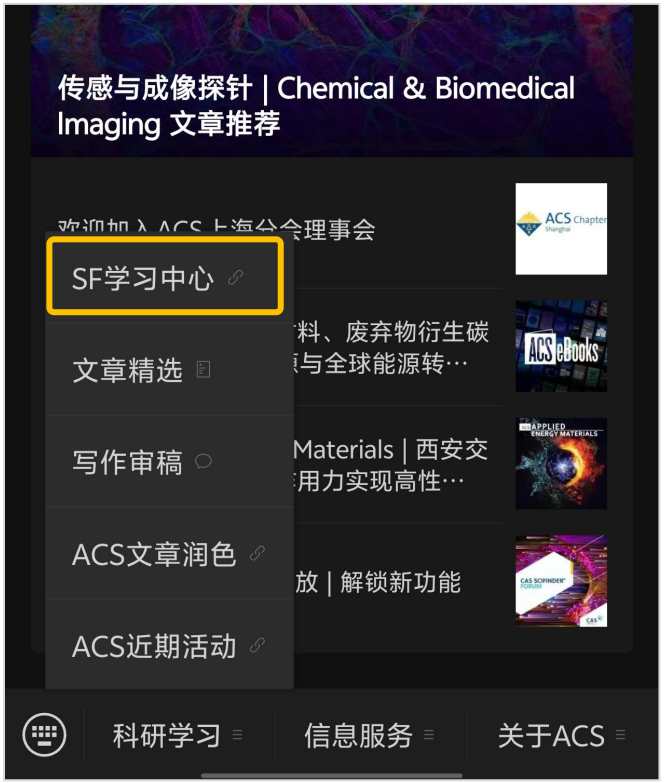
5 月 23 日 | 反应检索策略及典型案例

演讲人：陈开乾 博士

扫描二维码，一键预约六场直播！

CAS
A division of the American Chemical Society

多学科、多形式的线上学习资源



CAS
A division of the American Chemical Society

CAS 数据服务助您解决独特挑战

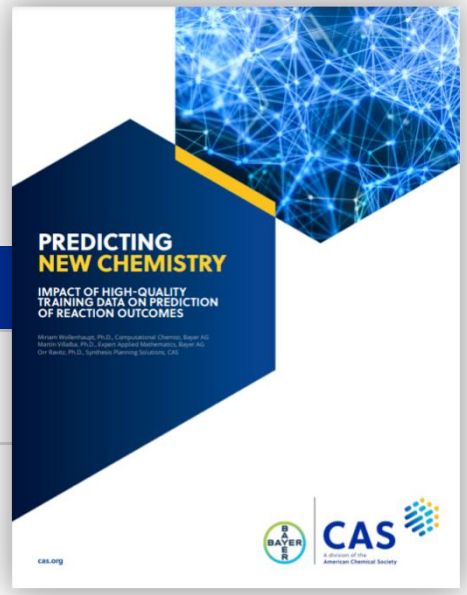
内容管理： 内部数据治理	知识管理： 数据设计	预测： 人工智能	数据驱动的风险管理	检索
数字化	物质登记	定制训练数据集 （算法开发）	可行的合成路线分析与设计	专利定制检索 – 全景分析 – 现有技术分析 – 自由实施检索 – 新颖性检索 – 预审 – 检索策略评估
数据提取	领域知识建模与治理	定制AI数据	物质供应链分析	
数据标准化	物质结构标准化	AI数据支持	物质监管状态与安全性	
数据分类标准制定	数据迁移	领域检索增强生成 （RAG）技术方案	毒理评估分析	
检索系统	内容审计	基于AI的研究领域评估报告	可靠供应商信息	
	外部数据源对接		替代品分析	

CAS
A division of the American Chemical Society

在极难突破的科学领域改进反应预测结果

案例分享

训练数据集	预测精度
基准数据集	16%
+CAS反应数据集	48%



Click to view on CAS SciFinder®

训练数据集	数据组成
基准数据集	商业可获得的正样本数据（800万）和负样本数据（2400万）
+CAS反应数据集	拜尔的3200万基准数据+CAS定制的14,500条特定的反应数据

影响

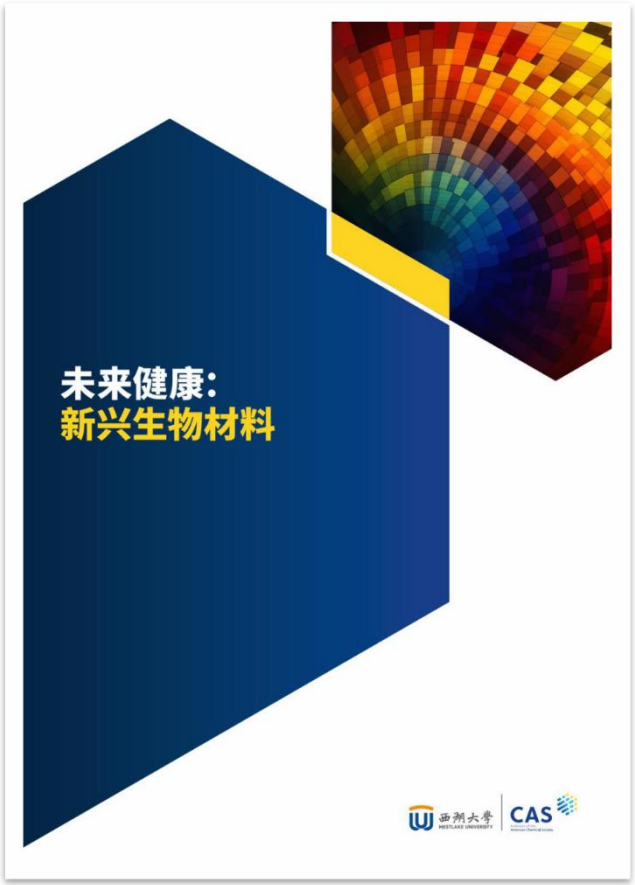
用CAS科学家标引的反应数据集进行训练时，准确率提高到48%——提高了32个百分点。

这种在“罕见”反应类别中增强的预测能力贡献了新的、有用的结果，为极难突破的科学领域开辟了道路。

CAS
A division of the American Chemical Society

西湖大学分析报告《未来健康：新兴生物材料》

案例分享



报告免费下载：
英文版： Trailblazing the future with emerging biomaterials
中文版： 未来健康：新兴生物材料

西湖大學 WESTLAKE UNIVERSITY
西湖大学 未来产业研究中心 WESTLAKE UNIVERSITY RESEARCH CENTER FOR INDUSTRIES OF THE FUTURE
CAS A division of the American Chemical Society

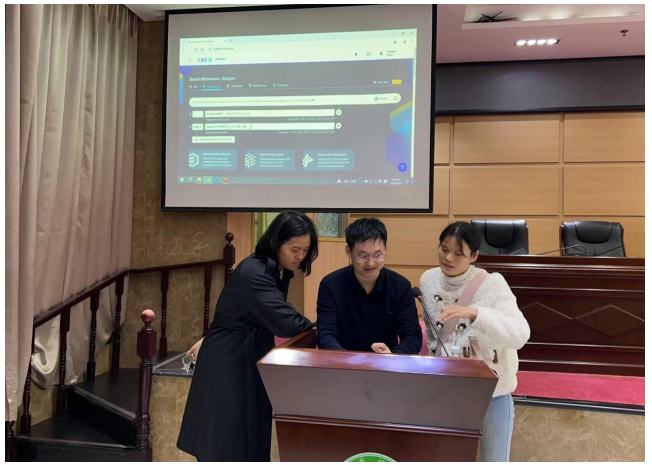
提纲

- CAS 简介
- CAS 持续增值的数据内容与多元创新服务
  - 先进技术与独特内容支撑的新增功能与内容
  - 跨学科多维度定制的学习资源与数据服务
  - 持续创新的丰富教学与学习活动支持

CAS
A division of the American Chemical Society

CAS 领先的技术培训团队

- 培训师均拥有国内外名校博士学位
- 每年为百余所学校提供数百场培训，参与人数超万人



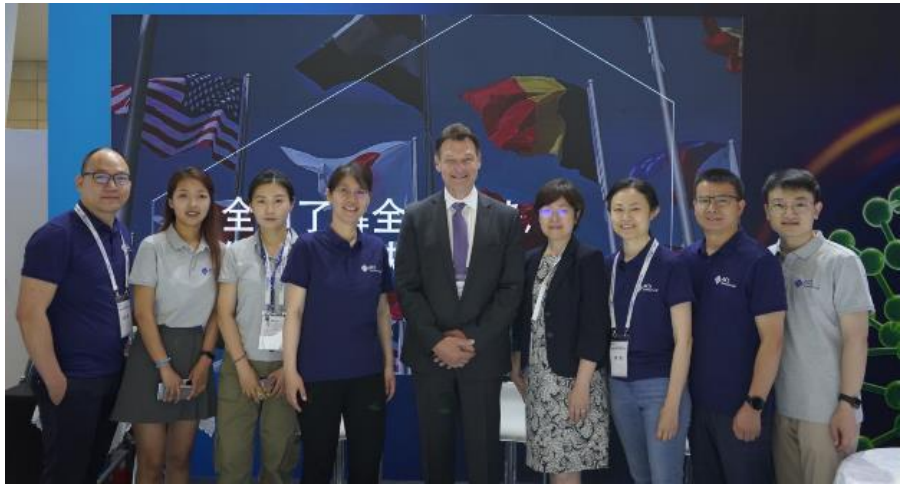
培训互动及读书节小礼品

*** 部分高校已将CAS SciFinder培训嵌入文检课程**

CAS
A division of the American Chemical Society

中国化学会第34届学术年会

CAS展位及活动照片



深入了解科研神器CAS SciFinder的功能和检索技巧，学习如何拆解检索问题思路开启检索，将丰富的功能和自己的研究课题更好的结合，又快又准地查到需要的结果。

鼓励同学们来现场寻找CAS SciFinder学习中心资源，答题，订阅中文简讯并参与抽奖活动，更有资深检索专家进行现场检索指导。

CAS
A division of the
American Chemical Society

2024 CAS SciFinder 检索技能大赛

第一阶段：4月8日 – 5月10日
在线学习检索技能，并参加线上考试。

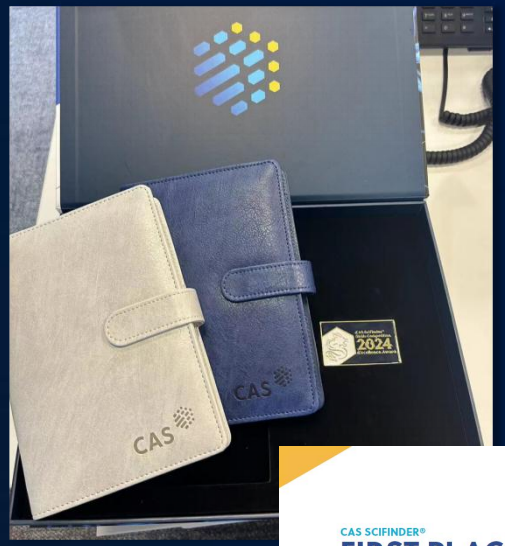
第二阶段：5月11日 – 6月8日*
分享检索体验，赢取全国大奖：

一等奖：1名
Apple Macbook Air

二等奖：3名
九号电动滑板车（配头盔）

三等奖：10名
索尼耳机
WH-CH720N

入围奖：30名
JBL音箱




CAS SCIFINDER®
FIRST PLACE

This certificate is proudly presented to

Name
ID: XXXXXXXXXXXXXX

for winning first place in the 2025 China National CAS SciFinder® Skills Competition.

Dr. Dennis W. McCullough
Global Vice President Customer Success & Managing Director International Business

ACS International
CAS
A division of the American Chemical Society

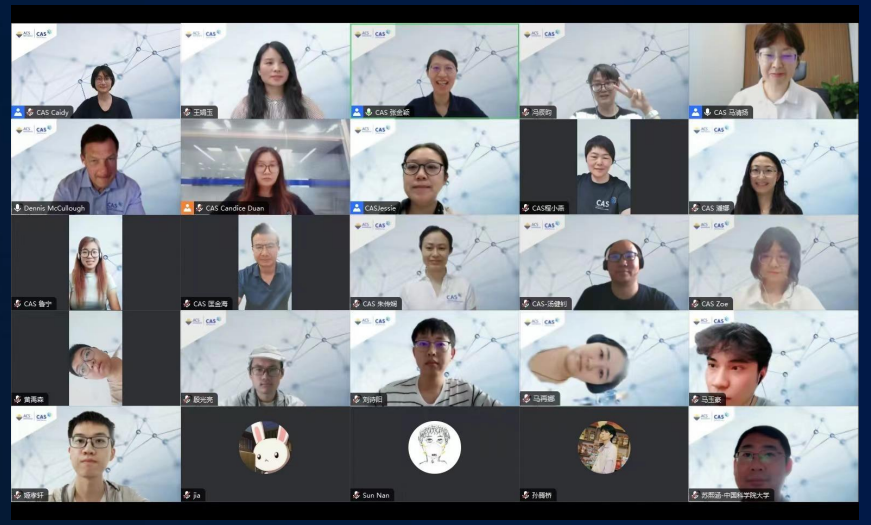
No. CN 2025xxxxxx

所有获奖者都将获得CAS官方获奖证书。
参赛有机会获得CAS定制礼盒。更多信息请扫描参赛二维码

***需要完成第一阶段且成绩不低于85分**

CAS
A division of the
American Chemical Society

大赛线上颁奖典礼



优秀组织奖
奖牌及奖品

CAS
A division of the
American Chemical Society

2025 CAS SciFinder 检索技能大赛

第一阶段：4月15日 – 5月16日
在线学习检索技能，并参加线上考试。

第二阶段：5月16日 – 6月15日*
分享检索体验，赢取全国大奖：

所有获奖者都将获得CAS官方获奖证书及ACS学生会员一年。
在第一轮中前300名85分以上的可额外获得CAS定制礼盒。

大赛证书

扫描参赛二维码了解更多
后续更多活动通知请关注公众号
ACS美国化学会

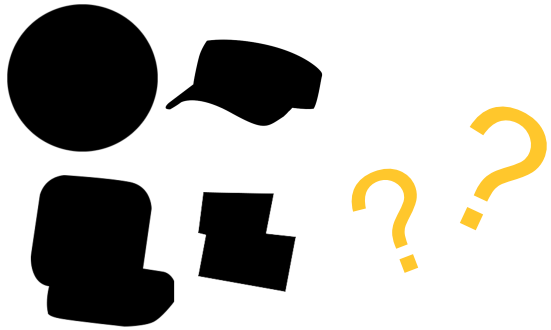
***参加第二轮需要完成第一阶段且成绩不低于85分，奖品颜色随机，最终解释权归CAS所有。**

一等奖：1名
Apple MacBook Air

二等奖：3名
大疆DJI Osmo Action 4

三等奖：10名
Xiaomi骨传导耳机

入围奖：30名
Decathlon徒步背包



CAS活力多巴胺礼盒：300名
敬请期待

CAS
A division of the
American Chemical Society

ACS会员权益

作为专业学会，ACS为会员免费提供众多权益

- ACS会员证书 — 放入简历是您专业背景的最佳证明
- 助力学生找工作的课程及证书- AI for Interdisciplinary Chemistry
- 免费下载50篇ACS期刊文章或图书章节，包括ACS 经典科技写作畅销书ACS Guide to Scholarly Communication
- LinkedIn Learning课程
- ACS在线研讨会所有报告录音合集 (ACS Webinars Archive)
- 权威杂志 C&EN (Chemical & Engineering News， 周刊)
- Discovery Report：每季度发行的前沿科研主题研究报告（比如AI for Materials Discovery, The Future of Gene Editing等热门主题）
- 使用文章润色服务 ACS Authoring Service, 享20%折扣
- 享有 25 次CAS SciFinder activities
- ACS年会减免400美金注册费
- 在JACS Au, ACS Omega, ACS Au 等OA刊发表文章，发表费用每篇减免250美金
- 发表内封面文章（supplementary journal cover），发表费用减免225美金


ACS
Chemistry for Life®
American Chemical Society
THIS IS TO CERTIFY THAT
is a Member of the American Chemical Society, entitled to all rights and privileges associated therewith as specified in the ACS Governing Documents of the Society.
Mary K. Carroll, Ph.D.
2024 American Chemical Society President
Albert G. Horvath
Chief Executive Officer (CEO)

ACS会员证书

CAS
A division of the American Chemical Society

服务创新——CAS SciFinder 教学沙龙

面向学科馆员、信息素养课程教师，旨在推动CAS SciFinder课程的创新共建和教学资源的共享

跨学科的教学资源

文本教学资源

- 通用系统课件
- 简短通用示例
- 学科应用案例
- 检索习题

视频教学资源

- 检索视频小课
- 系列专题课程视频

多主题的内容分享

CAS
A division of the American Chemical Society

Between problems and progress are connections that matter

谢 谢 !

美国化学文摘社(CAS)北京代表处

China@acs-i.org

+86-10-6250 8026/7

CAS
A division of the American Chemical Society