

C R A I

SciFinder







- Plataforma produïda pel <u>Chemical Abstracts Service (CAS)</u> que dóna accés a la major col·lecció d'informació sobre química, enginyeria química i altres matèries relacionades.
- Permet buscar:
 - ✓ Bibliografia per tema, autor, institució, títol i altres dades del document (revista, patent, llibre etc.).
 - ✓ Substàncies per la seva estructura, fórmula, propietats, nom i altres identificadors com el núm. CAS.
 - ✓ Reaccions per l'estructura de qualsevol dels seus components.





Accés:



- La primera vegada cal registrar-se a través de la <u>pàgina d'instruccions</u> que proporciona el CRAI. És necessari utilitzar l'adreça del correu institucional de la UB (@ub.edu).
- Després, s'ha de validar l'accés a SIRE introduint l'identificador i la contrasenya amb què s'accedeix a les intranets de la UB (PDI, PAS o MónUB). Vegeu <u>l'accés als recursos en línia</u>.
- ✓ Un cop a la <u>pàgina d'accés a Scifinder</u> cal introduir l'usuari i contrasenya creats al registrar-se.







- Substàncies CAS Registry:
 - ✓ Més de 123 milions de compostos orgànics, inorgànics, aliatges, organometàl·lics, de coordinació, minerals, mescles, polímers i sals registrats
 - ✓ Més de 66 milions de seqüències de proteïnes i àcids nucleics registrades.
 - ✓ Cobertura des de 1800.
 - ✓ La fitxa de les substàncies registrades pot incloure nom, sinònims, CAS RN, dades de propietats experimentals i calculades, estructura, mètodes sintètics, espectres, informació comercial i reguladora, referències, etc.







- Reaccions CASREACT:
 - Més de 93 milions de reaccions, 79 milions de reaccions d'una o més etapes i 14 milions de mètodes sintètics amb especial èmfasi en síntesi orgànica.
 - S'inclouen reaccions d'organometàl·lics, síntesi de productes naturals i biotransformacions.
 - ✓ Cobertura des de 1840.
 - ✓ Dóna informació sobre condicions de reacció, rendiment i catalitzadors.







- Referències CAplus:
 - ✓ Més de 44 milions de referències provinents de 50.000 revistes científiques, llibres, ponències de conferències, tesis i patents provinents de 60 oficines de patents.
 - ✓ Cobertura des de 1907, de qualsevol branca de la química, enginyeria química i d'altres matèries relacionades com biomedicina, ciència de materials i ciències agrícoles.
 - ✓ Proporciona resums en anglès de publicacions escrites en més de 50 idiomes diferents i provinents de 180 països.
 - ✓ Des de 1997 inclou dades sobre referències citades de revistes, conferències i patents.





- També inclou:
 - ✓ Informació de catàlegs i proveïdors de substàncies comercials.
 - ✓ Inventaris i llistes regulatòries de diferents països.
 - ✓ Publicacions de indústries químiques.
 - ✓ Estructures de Markush provinents de més de 472.000 patents.
 - ✓ Medline, la base de dades d'informació biomèdica produïda per la NLM (National Library of Medicine) amb cobertura des de 1949 i més de 17 milions de referències.



Cerca de referències



Explore Saved S	earches				
REFERENCES Research Topic Author Name Company Name Document Identifier Journal Patent Tags SUBST CES Structure	REFERENCES: RESEARCH TOP Examples: The effect of antibiotic Photocyanation of aro Search Rearch	c residues on dairy products matic compounds			Formulari per a la cerca de referències per tema. S'ha de posar una frase que identifiqui el tema de cerca
Marky Mole ormula Prof Sul lentifier & R F cture	Publication Years Document Types	Examples: 1995, 1995-1995 Biography Book Clinical Trial Commentary Conference Dissertation	, 1995-, -1995 Histo Jour Letto Pate Rep Rep	orical nal er int int ort	És possible limitar la cerca a priori
Diferents opcions per la cerca de referències: tema, autor, empresa, dades de la revista, dades de la	Languages	Chinese English French German Italian	Dapa Dapa Polis Russ Spa	ew nese sh sian nish	
patent	Author	Last Name *	First	Middle	
	Company	Examples: Minnesota Mining and Manu	acturing		



Resultats de la cerca de referències







Resultats de la cerca de referències



CAS Solutions SCIFINDER ACM SOLUTION	Prefer	ences SciFinder Help 👻 Sign Out 🕺	E		
Explore Saved Searches SciPlanner	Link	Save Print Export			
Research Topic "analysis of pesticide in veget" > references (2582) > Determination	of 255 pesticide		Export		
REFERENCE DETAIL 🛛 🕹 Get Substances 🖆 Get Related 🗸 🗹 Link to Other S	Des d'aquí s'accedeix al text	complet d to danner	For: Details: Citation Manager File Name: *		
★ Return			Citation export format Reference_11_22_2016_132235 (*.ris)		
2. Determination of 255 pesticides in edible vegetable oils us spectrometry By: He, Zeving: Wang, Yuehua: Wang, Lu: Peng, Yi: Wang, Wenwen: Liu, Xanwei	QUICK LINKS 0 Tags, 0 Comments	Quoted Format (*.bd) Tagged Format (*.bd) Offline review Portable Document Format (*.ndf)			
In this study, a simple and high-throughput method for deth. of 255 pesticides in veget dromatog-triple quadrupole mass spectrometry. Different clean-up approaches were mg C18+15 mg GCB; D, 250 mg PSA + 250 mg C18+50 mg GCB; and E, EMR-Lipid TM . including extn. time, solvent/sample ratio, and buffer system, were also throughly im and for the majority of the pesticides the LOQs were 5 µg kg ² , which were below the r RSDS <20 % indicating satisfactory accuracy. The coeff. of deth. (R ³) was >0.99 withi was proved to be simple, sensitive, and effective, which can be applied for large-scale Indexing	SOURCE Analytical and Bioanalytical Chemistry PagesAhead of Print Journal 2016 CODEN:ABCNBP ISSN:1618-2642 D01:10.1007/s00216-016-00 16-9	Format (*,por) ◎ Rich Text Format (*,rtf) ◎ Answer Keys (*,txt) Saving locally ◎ Answer Key eXchange (*,abx)			
Food and Feed Chemistry (Section17-1)	Substance	COMPANY/ORGANIZATION	Export Cancel		
Food contamination Gas chromatography-quadrupole tandem mass spectrometry High throughput screening Ouechers method	Substances 50-29-3 Q 51-03-6 Piperonyl butoxide Q 52-85-7 Famphur Q 53-19-0 Q	Agroectivitoinnental Protection Institute Ministry of Agriculture Tianjin, Peop. Rep. China 300191			
detn. of 255 pesticides in edible vegetable oils using QuEChERS method and gas chromatog. tandem mass spectrometry	55-38-9 Fenthion Q 56-38-2 Parathion Q 56-72-4 Coumaphos Q 58-89-9 Q	ACCESSION NUMBER 2016:1841686 CAPLUS	Amb l'opció Export es poden exportar els resultats		
Olive oil Peanut oil Soybean oil Vegetable oils	00-31-5 Direldrin Q 60-57-1 Dichlorros Q 72-00-8 Endrin Q	PUBLISHER Springer			
detn. of 255 pesticides in edible vegetable oils using QuEChERS method and gas chromatog. tandem mass spectrometry	72-435 Genetic	LANGUAGE			
Analytical matrix; Analytical study	78-34-2 Dioxathion 9 78-48-8 DEF 9	Lingitali	a un gestor de bibliografia o		
	80-33-1 Chlortenson A 82-66-8 Pentachloronitrobenzene A 86-50-0 Azinphos-methyl A		gravar-los en pdf o rtf, entre		
			u altres possibilitats		

Registre d'un document amb totes les dades disponibles



Cerca de substàncies







Resultats de la cerca de substàncies



CAS 50 ns 🗸 Preferences | SciFinder Help 🔻 Sign Out SCIFINDER[®] Welcome Conception Juan Saved Searches SciPlanner Explore Save Print Export Chemical Structure substructure > substances (4) 🗽 Create Keep Me Get References Get Get Commercial Send to SUBSTANCES 2 👰 Tools 🔻 ≛> SciPlanner Reactions Sources Posted Alert - 4 Display Options Sort by: Relevance Analyze Refine 0 of 4 Substances Selected Analyze by: 😨 Substance Role -1. 60576-13-8 Q 2. 190719-60-9 **Q** 3. 190719-62-1 Q Biological Study ~48 🖗 ~6 卜 ~4 4 ~4 4 Preparation Uses Analytical Study 3 Absolute stereochemistry., Rotation (-). Absolute stereochemistry., Rotation (+). Process 1 C22 H20 N2 O2 Benzeneacetamide, 3-benzoyl-a-methyl-N-(4-methyl-2-C22 H20 N2 O2 C22 H20 N2 O2 pyridinyl)-Benzeneacetamide, 3-benzoyl-a-methyl-N-(4-methyl-2-Benzeneacetamide, 3-benzoyl-a-methyl-N-(4-methyl-2-Properties pyridinyl)-, (aR)pyridinyl)-, (aS)-Key Physical Properties Regulatory Information Key Physical Properties Key Physical Properties Reactant or Reagent ■ 4. 59512-37-7 Q Show More (Component: 60576-13-8) ~4 **Opcions** per analitzar o refinar la A cadascuna de les HCI cerca substàncies li CIH tamide, 3-benzoyl-a-methyl-N-(4-methyl-2pyriainyi)-, hydrochloride (1:1) correspon una fitxa Key Physical Properties Spectra Experimental Properties



Resultats de la cerca de substàncies



cal Structure substructure > substances (4) > 60576-13-8			
rANCE DETAIL $ \bigcirc Get \\ References \bigotimes Get Commercial \\ Sources turn \bigotimes Get \\ Sources \bigotimes Get \\ Sources CAS Registry Number 60576-13-8 \bigotimes Get \\ Sources \bigotimes Get \\ Sources CAS Registry Number 60576-13-8 \bigotimes Get \\ Sources \bigotimes Get \\ Sources CAS Registry Number 60576-13-8 \bigotimes Get \\ Sources \bigotimes Get \\ Sources CAS Registry Number 60576-13-8 \bigotimes Get \\ Sources \bigotimes Get \\ Sources CAS Registry Number 60576-13-8 \bigotimes Get \\ Sources \bigotimes Get \\ Sources Get \\ Sources \bigotimes Get \\ Sources \bigotimes Get \\ Sources if Get \\ Sources Get \\ Sources \bigotimes Get \\ Sources if Get \\ Sources if Get \\ Sources $	Previous Next	ScoPlanner	L'opció export permet gravar els resultats
Alue: 1.195±0.06 g/cm3 Condition: Temp: 20 °C Press: 760 Torr XA (Predicted) Yalue: 12.86±0.70 Condition: Most Acidic Temp: 25 °C Pher Names -Benzoyl-a-methyl-/k-(4-methyl-2-pyridinyl)benzeneacetamide iketoprofen PREDICTED PROPERTIES	Expand All Collapse All	For: Offine review © Portable Document Format (*.pdf) © Rich Text Format (*.rtf) © Properties Only - Microsoft Excel Worksheet (*.sds) © Answer Keys (*.bd) © Quoted Format (*.bd) © Taneed Format (*.bd)	*Re Details: File Name: * Substance_11_22_2016_133106 Include: Select All Chemical Names GenBank [®] Definition & Feature Table
PREDICTED SPECTRA REGULATORY INFORMATION BIOACTIVITY INDICATORS		Saving locally Answer Key eXchange (*.alx)	Experimental Properties Experimental Spectra Predicted Properties Predicted Properties Regulatory Information Bioactivity Indicators Target Indicators
cas reference roles Additional details Registre d'una de			Task History

· · · ·



Cerca de reaccions







Resultats de la cerca de reaccions







Resultats de la cerca de reaccions







SciPlanner



✓ Permet dissenyar, organitzar i treballar amb les pròpies rutes sintètiques.









Altres funcionalitats:

- Els registres de Medline contenen des d'abril de 2011 les cites de cada document, això permet ampliar la cerca a través de la bibliografia dels documents.
- A *Preferences* es pot marcar l'opció *Automatically remove duplicates Medline answers* per a eliminar directament els duplicats entre les bases de dades CAS i Medline.
- Es possible afegir etiquetes i comentaris personals (*Tags , comments*) als registres i compartir-los. Els tags es poden cercar a *Explore References*.
- Les estructures dibuixades a ISIS/Draw es poden copiar i pegar directament a l'editor d'estructures de SciFinder.
- Els usuaris de ChemDraw poden fer directament la cerca a la interfície de ChemDraw i veure els resultats a SciFinder.
- Es pot accedir amb qualsevol Smartphone.





Moltes gràcies!



© CRAI Universitat de Barcelona, curs 2016-17