



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

CRAI

Centre de Recursos per a
l'Aprenentatge i la Investigació

SciFinder



SCIFINDER[®]
A CAS SOLUTION

- Plataforma produïda pel [Chemical Abstracts Service \(CAS\)](#) 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 [pàgina d'instruccions](#) 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 l'accés als recursos en línia.](#)
- ✓ Un cop a la [pàgina d'accés a Scifinder](#) cal introduir l'usuari i contrasenya creats al registrar-se.

Contingut:



- Substàncies - CAS Registry:
 - ✓ Més de 123 milions de compostos orgànics, inorgànics, aliatges, organometàl·lics, de coordinació, minerals, mesclades, 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.

Contingut:

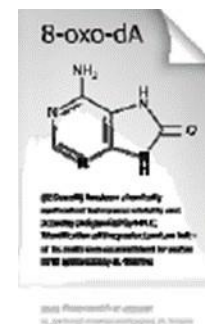


- Reaccions - CASREACT:
 - ✓ Més de 93 milions de reaccions, 79 milions de reaccions d'una o més etapes i 14 milions de mètodes sintètics amb especial èmfasi en síntesi orgànica.
 - ✓ S'inclouen reaccions d'organometàl·lics, síntesi de productes naturals i biotransformacions.
 - ✓ Cobertura des de 1840.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

Contingut:

- Referències - CPlus:

- ✓ 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.





Contingut:

- 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

Formulari per a la cerca de referències per tema. S'ha de posar una frase que identifiqui el tema de cerca

Diferents opcions per la cerca de referències: tema, autor, empresa, dades de la revista, dades de la patent...

És possible limitar la cerca a priori

Resultats de la cerca de referències

SCIFINDER A CAS SOLUTION

392 duplicates were automatically removed.

Research Topic "analysis of pesticide in veget..." > references (2582)

REFERENCES

Get Substances | Get Reactions | Get Related Citations | Tools

Sort by: Accession Number

0 of 2582 References Selected

1. **A method for rapid detection of pyrethroid pesticide residues** [Machine Translation of Descriptors]. The present invention provides a method for rapid detection of pyrethroid pesticide residues, a step of for hydrolysis of the known concn. pyrethroid pesticide; a step of developing detecting, selecting the spectrophotometry for detn. of absorbance value of blank control and known concn. pyrethroid pesticide in 525nm, getting linear relation std. curve between absorbance difference and pyrethroid pesticide concn.; hydrolysis of the unknown concn. pyrethroid pesticide, using the developing detection system for detecting the samples, obtaining absorbance difference of the sample based on the carboxylesterase hydrolysis chromogenic method, and using the std. curve for detn. of the pyrethroid pesticide content of samples. the method of the present invention can be widely used in qual. and quant. detection of II type and I type pyrethroid pesticide residues in food, vegetables, fruit and other agricultural products and environment, has simple and shortcut steps, low cost, easy for used in site rapid testing devices.

2. **Determination of 255 pesticides in edible vegetable oils using QuEChERS method and gas chromatography tandem mass spectrometry** [Machine Translation of Descriptors]. In this study, a simple and high-throughput method for detn. of 255 pesticides in vegetable oils was developed based on QuEChERS sample prepn. method combined with gas chromatog.-triple quadrupole mass spectrometry. Different clean-up approaches were tested: A, 150 mg PSA + 150 mg C18; B, 250 mg PSA + 250 mg C18; C, 250 mg PSA + 250 mg C18+15 mg GCB; D, 250 mg PSA + 250 mg C18+50 mg GCB; and E, EMR-Lipid™. Best clean-up capacity was obsd. for EMR clean-up. The extrn. procedures and parameters, including extrn. time, solvent/sample ratio, and buffer system, were also thoroughly investigated and optimized. The limits of quantification (LOQ) ranged between 5 and 50 µg kg⁻¹, and for the majority of the pesticides the LOQs were 5 µg kg⁻¹, which were below the regulatory MRLs. Most recoveries at seven spiking levels were in the range of 70-120 % with RSDs <20 % indicating satisfactory accuracy. The coeff. of detn. (R²) was >0.99 within the calibration linearity range of 2-500 µg L⁻¹ for the majority of the pesticides. This method was proved to be simple, sensitive, and effective, which can be applied for large-scale pesticide screening and quantification in vegetable oils.

3. **Detection method of phoxim residues in animal tissues** [Machine Translation]. The present invention discloses a detection method of phoxim residues in animal tissues, comprising the steps of: (1) the samples to be detected is eluted by dichloromethane, at 37 °C, blowing and drying with nitrogen gas to get the exts.; (2) the ext. is dissolved in methanol, then using 0.45 µl of org. filter membrane to obtain the ext. soln.; (3) using methanol - water as the mobile phase, detecting by HPLC, detg. phoxim residues in animal tissues; compared to the method of detecting the amt. of residual phoxim in

Duplicats eliminats de Medline

Número de referències obtingudes

Articles que citen aquest document

Accés al text complet

Analysis | Refine

Refine by:

- Research Topic
- Author Name
- Company Name
- Document Type
- Publication Year
- Language
- Database

Research Topic

Examples:

The effect of antibiotic residues on dairy products

Photocyanine compounds of aromatic

Refine

Opcions per refinar la cerca

Els resultats es poden analitzar per diferents camps, obtenint el corresponent histograma

Resultats de la cerca de referències

Export

For:

- Citation Manager
- Citation export format (*.ris)
- Quoted Format (*.bt)
- Tagged Format (*.bt)

Offline review

- Portable Document Format (*.pdf)
- Rich Text Format (*.rtf)
- Answer Keys (*.bt)

Saving locally

- Answer Key exchange (*.alc)

Details:

File Name: *
Reference_11_22_2016_132235

Export **Cancel**

Des d'aquí s'accedeix al text complet

Amb l'opció Export es poden exportar els resultats a un gestor de bibliografia o gravar-los en pdf o rtf, entre d'altres possibilitats

Registre d'un document amb totes les dades disponibles

Cerca de substàncies

REFERENCES

- Research Topic
- Author Name
- Company Name
- Document Identifier
- Journal
- Patent
- Tags

SUBSTANCES

- Chemical Structure
- Markush
- Molecular Formula
- Property
- Substance Identifier

REACTIONS

- Reaction Structure

SUBSTANCES: CHEMICAL STRUCTURE

Structure Editor:

Java Non-Java

Click to Edit

Search Type:

- Exact Structure
- Substructure
- Similarity

Show precision analysis

Import CFX

Search

Advanced Search Always Show

ChemDraw

Launch a SciFinder substance or reactant Ultra 14. Learn More

Characteristics

- Single component
- Commercially available
- Included in references

Classes

- Alloys
- Coordination compounds
- Incompletely defined
- Mixtures
- Polymers
- Organics, and others not listed

Studies

- Analytical
- Biological
- Preparation
- Reactant or reagent

Structure Editor

Draw or change atoms or bonds

Shortcut Keys

Drawing Editor:

- Structure
- Reaction
- Markush

Get substances that match your query using:

- Exact search
- Substructure search
- Similarity search

Accept Cancel

Editor d'estructures:
A triar amb Java o sense Java

Opcions per a limitar la cerca

Es poden cercar substàncies per estructura química, estructura de Markush, fórmula molecular, número CAS, nom químic i nom comercial

Resultats de la cerca de substàncies

The screenshot displays the SciFinder web interface. At the top, there are navigation tabs for 'Explore', 'Saved Searches', and 'SciPlanner'. Below this, the search results are shown for 'substances (4)'. A sidebar on the left offers 'Analyze' and 'Refine' options, with a 'Show More' button at the bottom. The main area contains four search results, each with a chemical structure and associated text. A callout box on the left points to the 'Analyze' and 'Refine' options in the sidebar, with the text 'Opcions per analitzar o refinar la cerca'. Another callout box on the right points to the 'Key Physical Properties' section of the search results, with the text 'A cadascuna de les substàncies li correspon una fitxa'.

Opcions per analitzar o refinar la cerca

A cadascuna de les substàncies li correspon una fitxa

Resultats de la cerca de substàncies

Explore Saved Searches SciPlanner Link Save Print Export

Chemical Structure substructure > substances (4) > 60576-13-8

SUBSTANCE DETAIL Get References Get Commercial Sources Send to SciPlanner

Return Previous Next

1. CAS Registry Number 60576-13-8

Cc1ccc(NC(=O)C(C)c2ccc(cc2)C(=O)c3ccccc3)nc1

C₂₂H₂₆N₂O₂
Benzeneacetamide, 3-benzoyl-o-methyl-N(4-methyl-2-pyridinyl)-

Molecular Weight
344.41

Boiling Point (Predicted)
Value: 583.5±50.0 °C | Condition: Press: 760 Torr

Density (Predicted)
Value: 1.195±0.06 g/cm³ | Condition: Temp: 20 °C Press: 760 Torr

pKa (Predicted)
Value: 12.86±0.70 | Condition: Most Acidic Temp: 25 °C

Other Names
3-Benzoyl-o-methyl-N(4-methyl-2-pyridinyl)benzeneacetamide
Piketopifen

Expand All | Collapse All

- ▶ PREDICTED PROPERTIES
- ▶ PREDICTED SPECTRA
- ▶ REGULATORY INFORMATION
- ▶ BIOACTIVITY INDICATORS
- ▶ CAS REFERENCE ROLES
- ▶ ADDITIONAL DETAILS

L'opció export permet gravar els resultats

Export

For:

Offline review

- Portable Document Format (*.pdf)
- Rich Text Format (*.rtf)
- Properties Only - Microsoft Excel Worksheet (*.xls)
- Answer Keys (*.bt)
- Quoted Format (*.bt)
- Tagged Format (*.bt)

Saving locally

- Answer Key eXchange (*.alx)

Details: * Required

File Name: *
Substance_11_22_2016_133106

Include:

- Select All
- Chemical Names
- GenBank® Definition & Feature Table
- Experimental Properties
- Experimental Spectra
- Predicted Properties
- Predicted Spectra
- Regulatory Information
- Bioactivity Indicators
- Target Indicators
- CAS Reference Roles
- Task History

Export Cancel

Registre d'una de les substàncies amb totes les dades disponibles

Cerca de reaccions

REFERENCES

- Research Topic
- Author Name
- Company Name
- Document Identifier
- Journal
- Patent
- Tags

SUBSTANCES

- Chemical Structure
- Markush
- Molecular Formula
- Property
- Substance Identifier

REACTIONS

- Reaction Structure

REACTIONS: REACTION STRUCTURE

Structure Editor: **Java** **Non-Java**

Search Type:

- Allow variability only as specified
- Substructure

Click to Edit

Import CXF

Search

Advanced Search Always Show

Solvents **Select Solvents**

Non-participating Functional Groups **Select Groups**

Number of Steps

Examples: 1, 1-3, 1-, -3

Classifications

<input type="checkbox"/> Biotransformation	<input type="checkbox"/> Non-catalyzed
<input type="checkbox"/> Catalyzed	<input type="checkbox"/> Photochemical
<input type="checkbox"/> Chemoselective	<input type="checkbox"/> Radiochemical
<input type="checkbox"/> Combinatorial	<input type="checkbox"/> Regioselective
<input type="checkbox"/> Electrochemical	<input type="checkbox"/> Stereoselective
<input type="checkbox"/> Gas-phase	

Sources

- Any source
- Patents only
- Sources other than patents

Publication Years

Examples: 1995, 1995-1999, 1995-, -1995

Només es pot cercar per estructura

La cerca es fa dibuixant qualsevol dels components de la reacció, no és necessari dibuixar-los tots.

Opcions per a limitar la cerca

Resultats de la cerca de reaccions

Opcions per
analitzar o refinar la
cerca

The screenshot displays a search interface for chemical reactions. On the left, a 'Refine' panel lists reagents with their respective counts:

Reagent	Count
HCl	≥ 8951
K ₂ CO ₃	≥ 5791
NaHCO ₃	≥ 5380
NaOH	≥ 5253
Et ₃ N	≥ 4868
Disodium carbonate	≥ 4753
EtN(Pr-) ₂	≥ 4323
AcOK	≥ 4249
Cs ₂ CO ₃	≥ 3972
H ₂ O	≥ 3727

The main area shows two reaction results:

- 1. View Reaction Detail** [Link](#) [Similar Reactions](#)
Single Step *Hover over any structure for more options.*
Reaction 1: 2-bromopyridine + a boronate ester (with a methyl group on the nitrogen) yields a bipyridine derivative. Yield: 99%. Count: ~58.
- 2. View Reaction Detail** [Link](#) [Similar Reactions](#)
Single Step *Hover over any structure for more options.*
Reaction 2: 2-chloropyridine + a boronic acid (with a hydroxyl group on the nitrogen) yields the same bipyridine derivative. Yield: 99%. Count: ~58.

Below each reaction, there are tabs for 'Overview' and 'Experimental Procedure'.

Des del 2005 s'inclou el
procediment experimental

Resultats de la cerca de reaccions

Reaction Structure substructure > reactions (91388) > reaction 1 (of 91388)

REACTION DETAIL

1. Single Step *Hover over any structure for more options.*

CN1CCOC(=O)C1c2cccnc2.BrC3=CC=CC=C3>>CN1CCOC(=O)C1c2cccnc2-c3cccnc3

Overview

Stages

1.1 R: K_2PO_4 , C:155940-98-0, S: H_2O , S: $EtOH$, 4 h, 90°C

Notes

Suzuki coupling, green chemistry, Reactants: 2, Reagents: 1, Catalysts: 1, Solvents: 2, Steps: 1, Stages: 1

Transformation:

1. Coupling of Aryl Compounds with Arylboronic Acid Derivatives/ Suzuki Coupling

Yield

99%

SOURCE

Palladacycle-catalyzed Suzuki-Miyaura reaction of aryl/heteroaryl halides with MIDA boronates in EtOH/H₂O or H₂O

Li, Yabo; Wang, Jingran; Wang, Zhiwei; Huang, Mengmeng; Yan, Beiqi; Cui, Xiuling; Wu, Yusheng; Wu, Yangjie

RSC Advances
Volume 4
Issue 68
Pages 36262-36266
Journal; Online Computer File
2014

COMPANY/ORGANIZATION

College of Chemistry and Molecular Engineering, Henan Key Laboratory of Chemical Biology and Organic Chemistry, Key Laboratory of Applied Chemistry of Henan Universities
Zhengzhou University
Zhengzhou, Peop. Rep. China 450052

NUMBER OF STEPS

1

Export

Export:

- All
- Selected
- Range

Example: 2-20

For:

Offline review

- Portable Document Format (*.pdf)
- Rich Text Format (*.rtf)

Saving locally

- Answer Key eXchange (*.abx)

Details:

File Name: *

Reaction_11_22_2016_135051

Format:

- Summary
- Detail

Include:

- Experimental Procedure (if available)
- Overview
- Task History

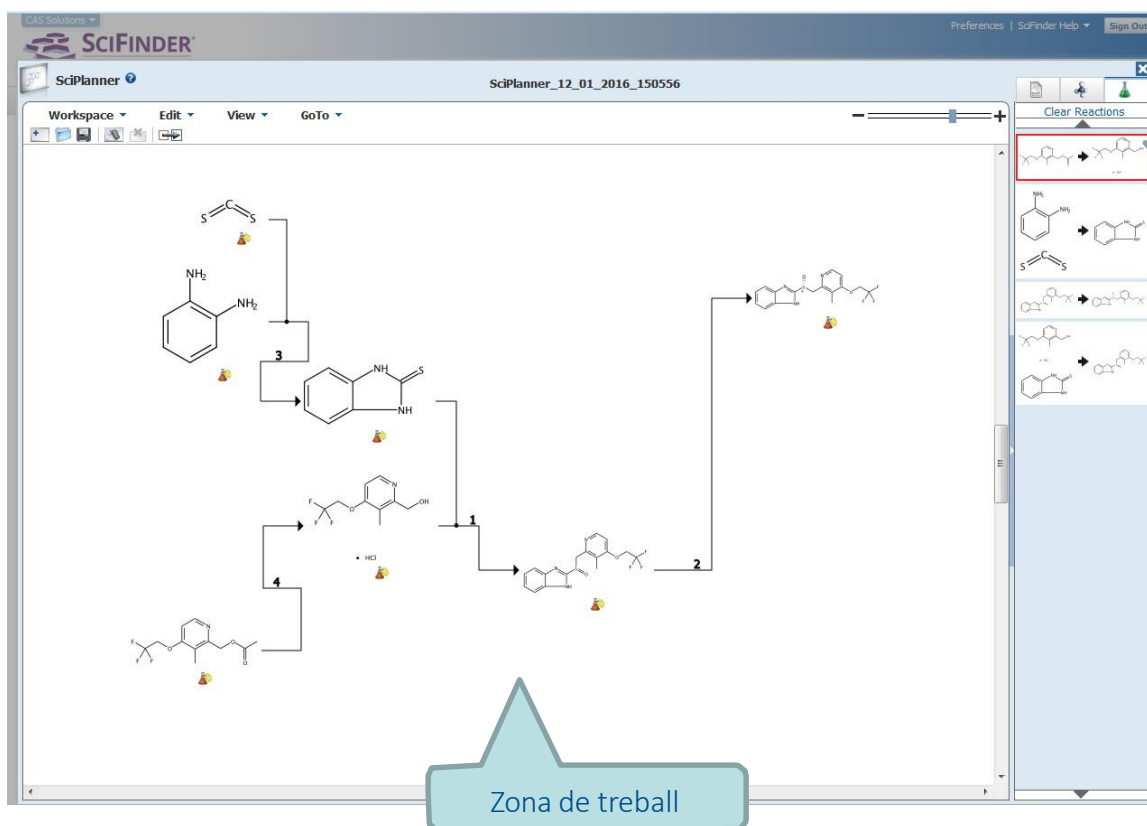
Export Cancel

Registre d'una reacció amb totes les seves dades, incloses les bibliogràfiques

L'opció export permet gravar els resultats

SciPlanner

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



Libreria: On van a parlar les referències, substàncies i reaccions enviades des dels resultats de les cerques fetes a SciFinder

[Tutorial en vídeo](#)

[Informació al blog de la biblioteca](#)

La informació es pot exportar en diferents formats

Export

For: Offline Review
 Portable Document Format (*.pdf)
 Citations (*.ris)
 Image (*.png)

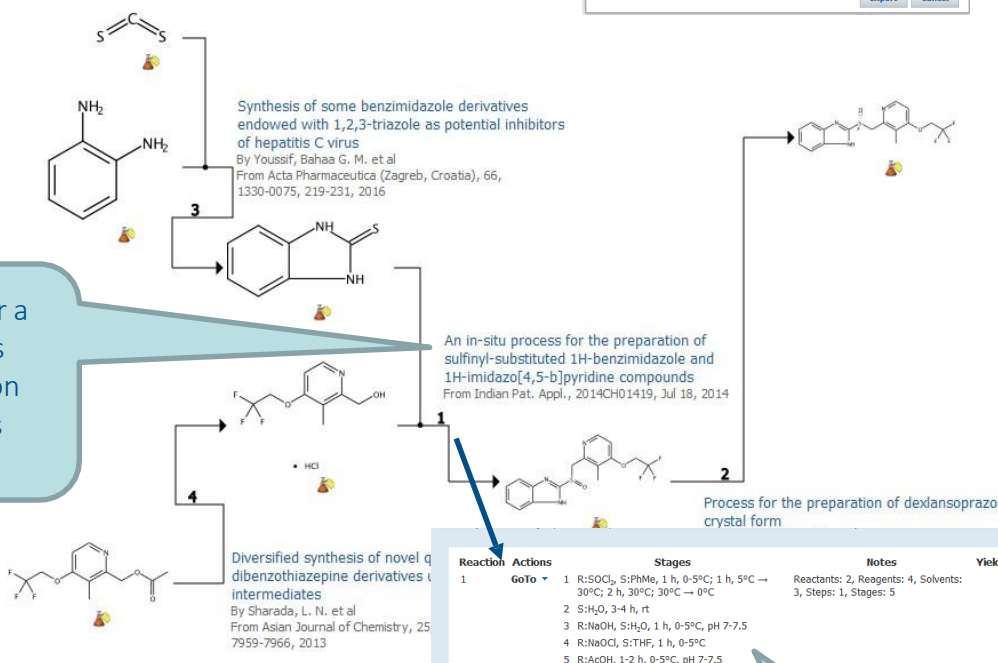
Saving Locally
 SciPlanner eXchange (*.plx)

Details: * Required
File Name: SciPlanner_12_01_2016_150556
Title: _____

Include:
 SciPlanner Image
 Reaction Details
 Substance Details
 Reference Details

Export Cancel

Es poden afegir a l'esquema les referències d'on s'han tret les reaccions



Reaction	Actions	Stages	Notes	Yield
1	GoTo	1 R:SOCl ₂ , S:PhMe, 1 h, 0-5°C; 1 h, 5°C → 30°C; 2 h, 30°C; 30°C → 0°C 2 S:H ₂ O, 3-4 h, rt 3 R:NaOH, S:H ₂ O, 1 h, 0-5°C, pH 7-7.5 4 R:NaOCl, S:THF, 1 h, 0-5°C 5 R:AcOH, 1-2 h, 0-5°C, pH 7-7.5	Reactants: 2, Reagents: 4, Solvents: 3, Steps: 1, Stages: 5	

Dades de la reacció 1

Libreria: Aquí van a parar les referències, substàncies i reaccions enviades des dels resultats de les cerques fetes a SciFinder

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!



Us ha estat útil?
Ajudeu-nos a millorar
bit.ly/2s05WCQ