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 dona 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:

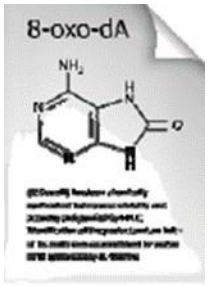
- ✓ La primera vegada cal registrar-se a través de la pàgina d'instruccions que proporciona el CRAI. És necessari utilitzar l'adreça del correu institucional de la UB (@ub.edu).
- ✓ Després, s'ha de validar l'accés a SIRE introduint l'identificador i la contrasenya amb què s'accedeix a les intranets de la UB (PDI, PAS i 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, mescles, polímers i sals registrats.
  - ✓ Més de 66 milions de seqüències de proteïnes i àcids nucleics registrats.
  - ✓ 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.
  - ✓ Dona informació sobre condicions de reacció, rendiment i catalitzadors.



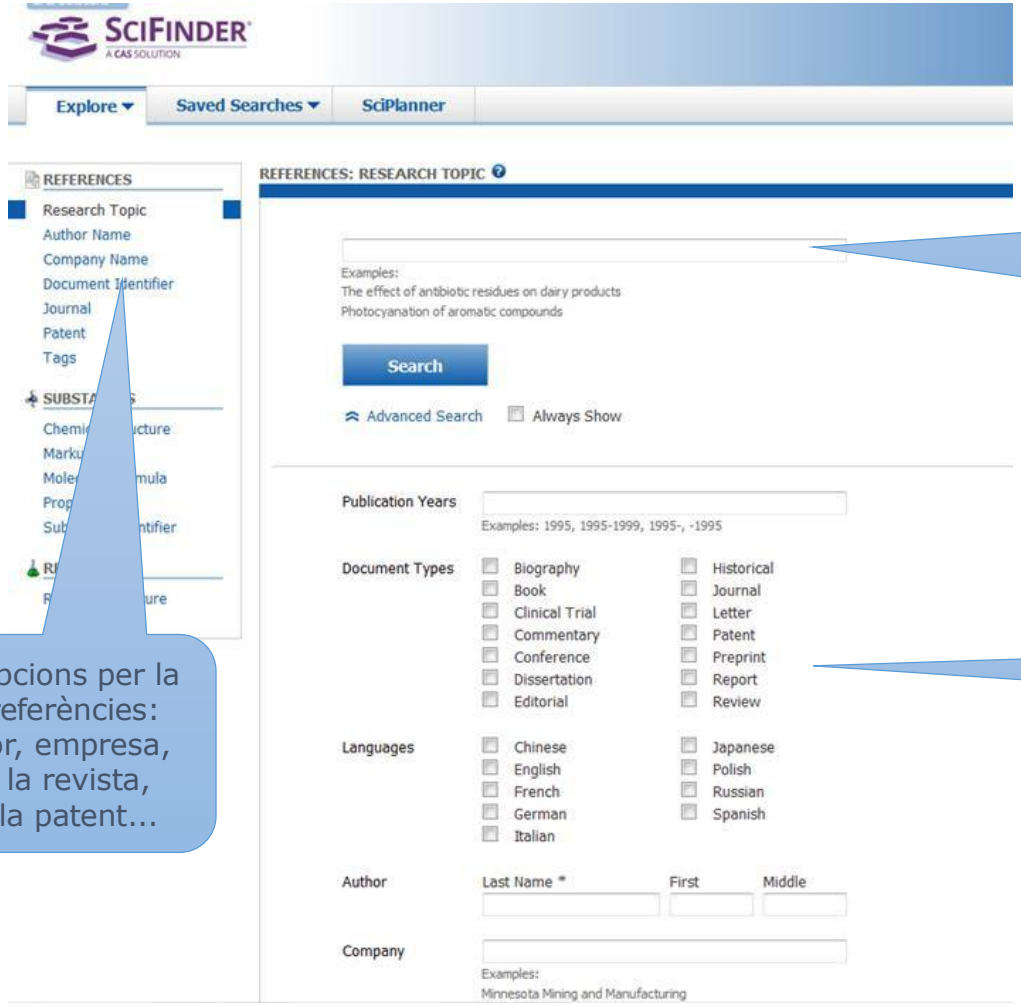
Contingut:

- 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.

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

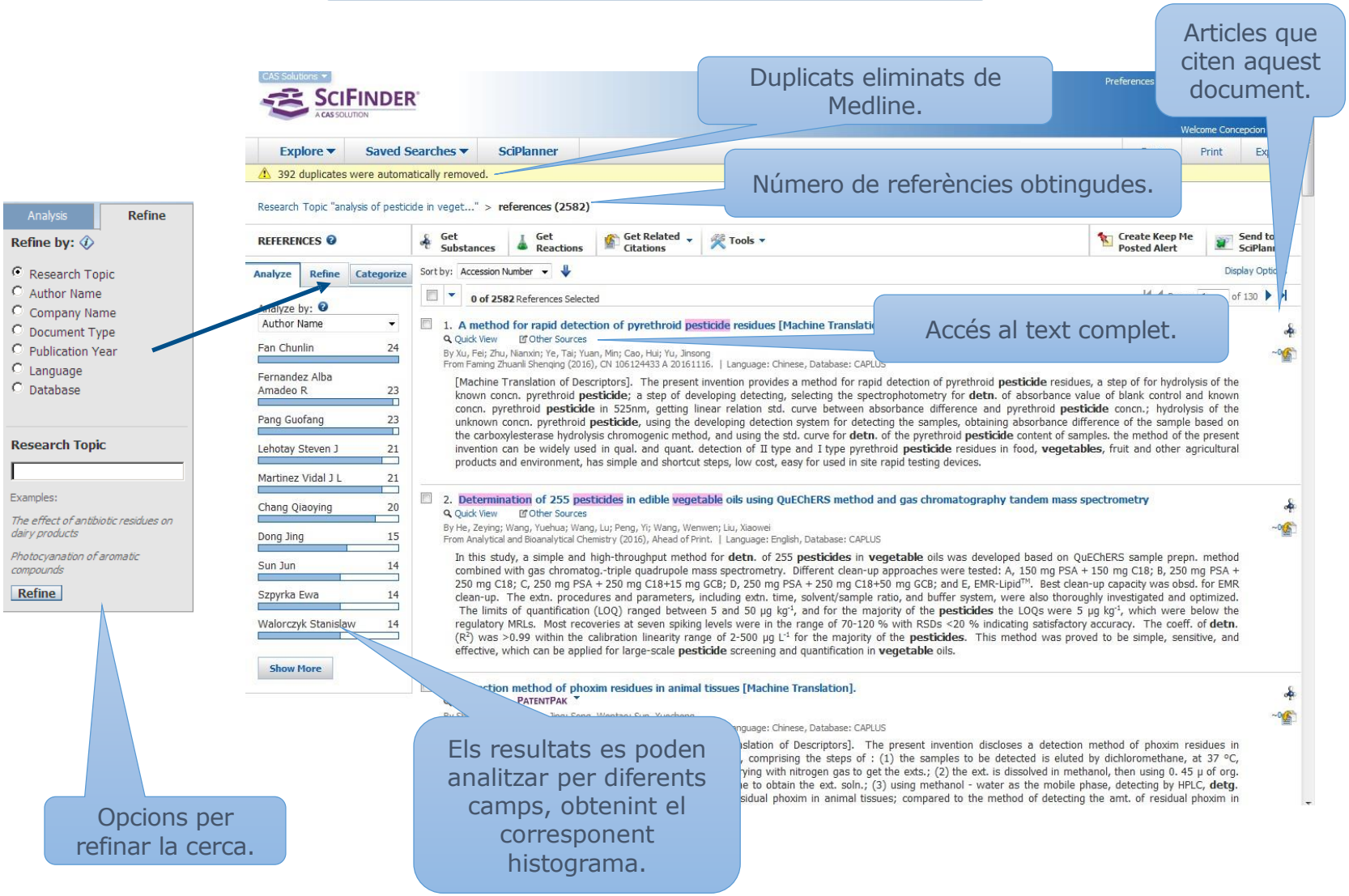


Formulari per a la cerca de referències per tema. S'ha de posar una frase que identifiqui el tema de cerca.

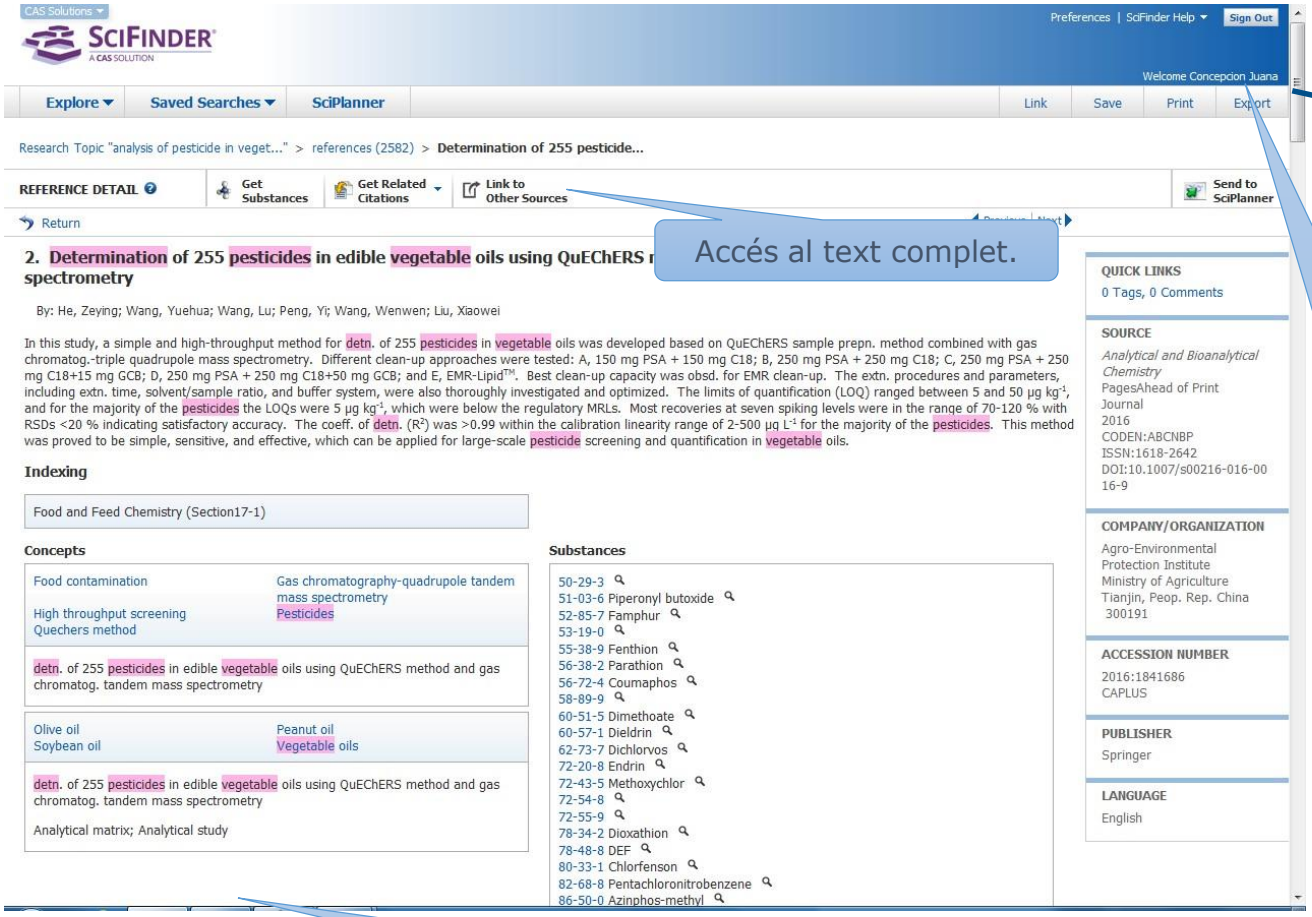
És possible limitar la cerca a priori.

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

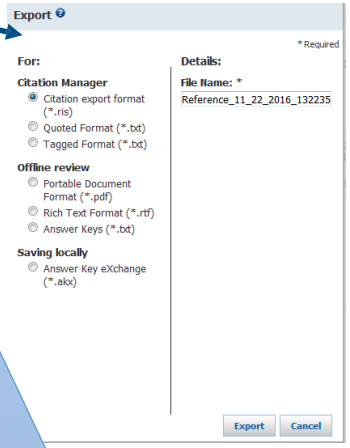
Resultats de la cerca de referències



Resultats de la cerca de referències



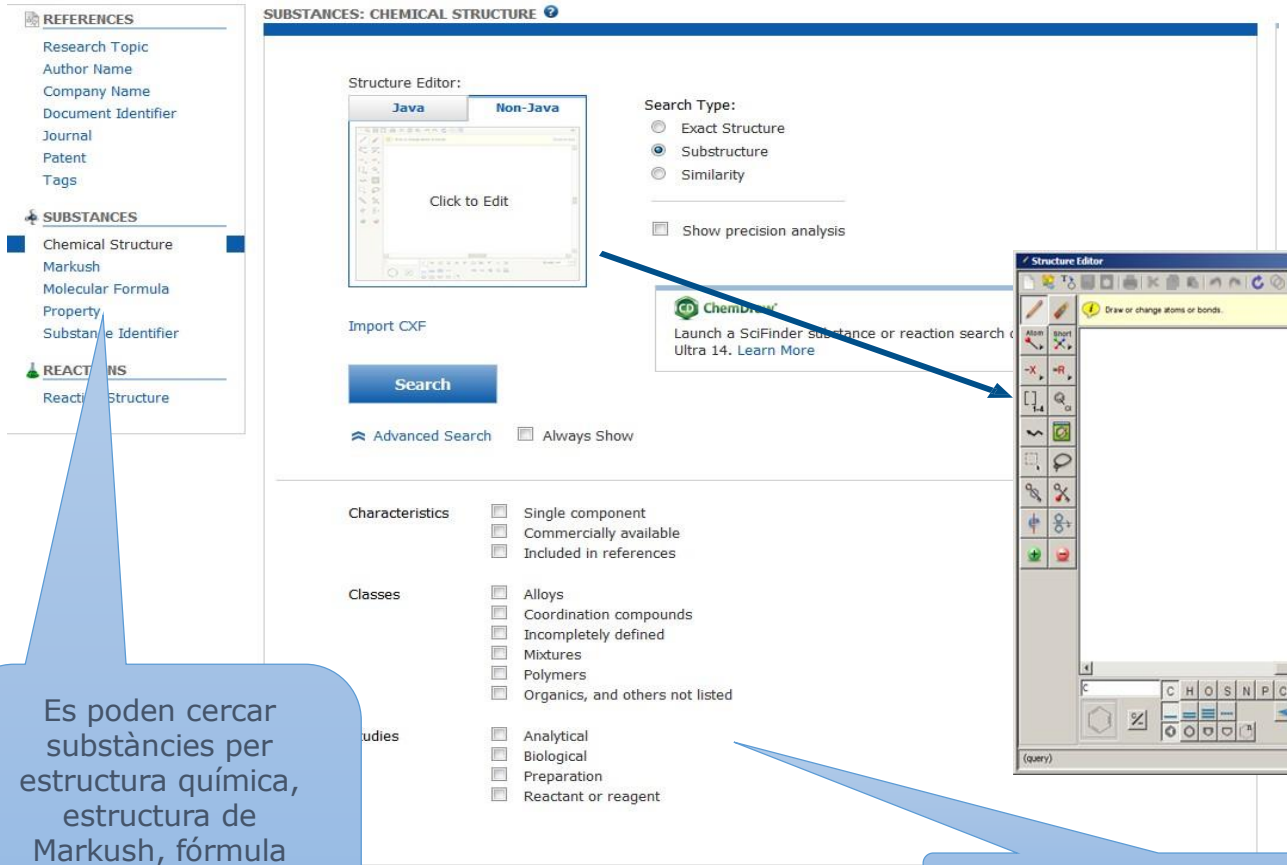
Accés al text complet.

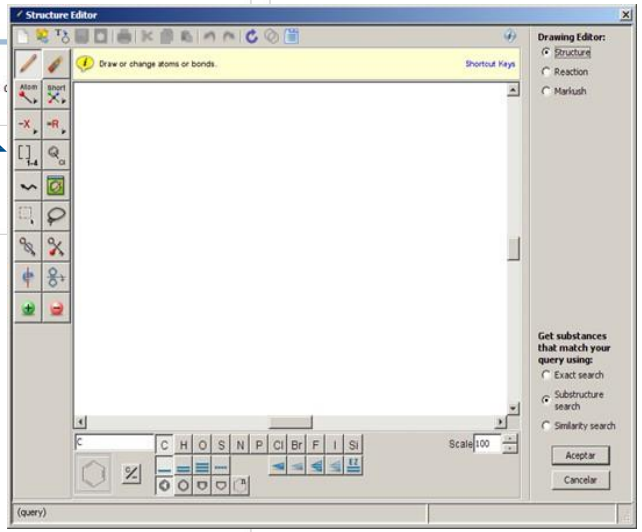


Els resultats es poden exportar a qualsevol gestor de bibliografia amb format ris o gravar-los com a pdf o rtf, entre d'altres possibilitats.

Registre d'un document amb totes les dades disponibles.

Cerca de substàncies

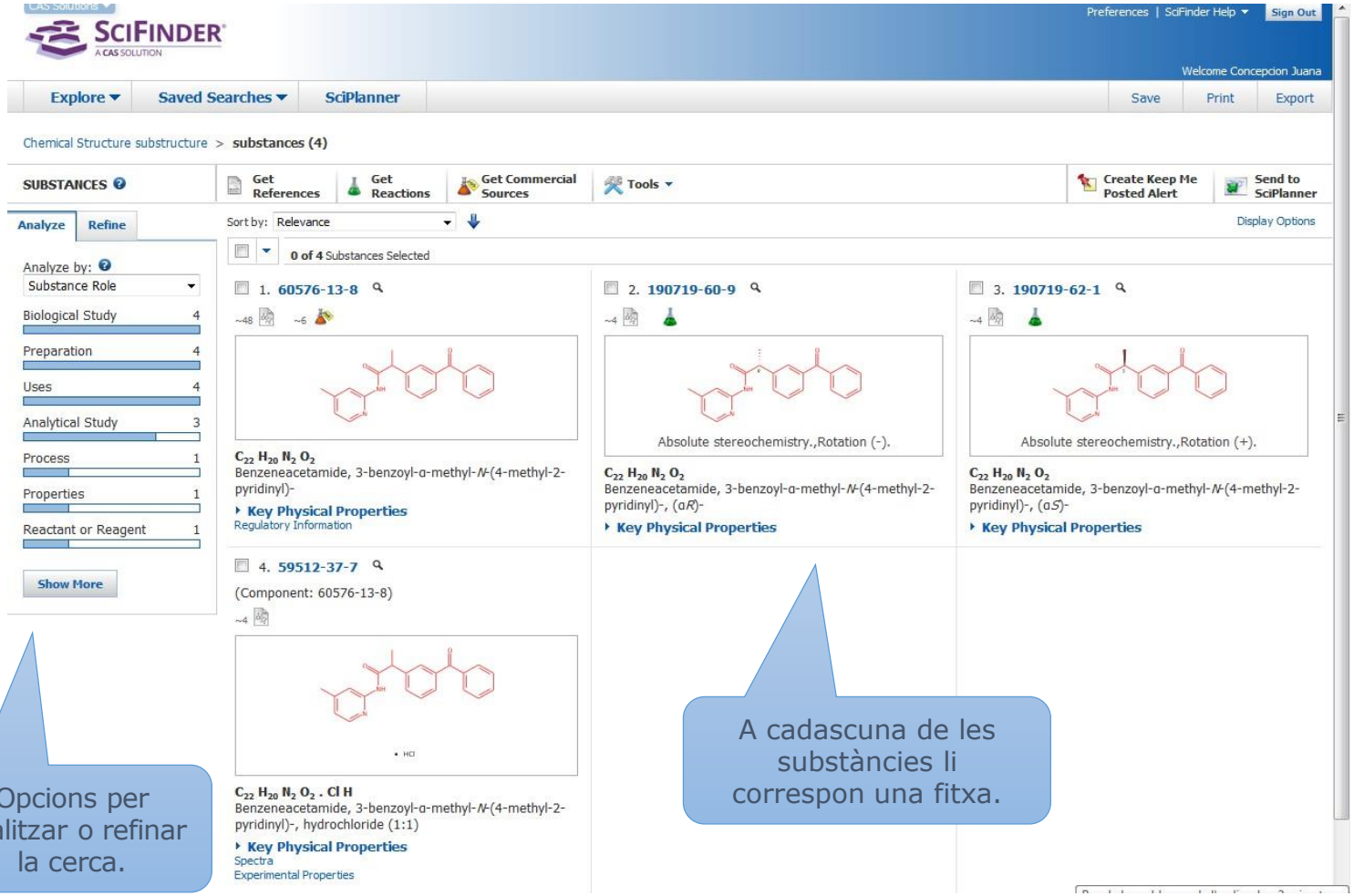




Es poden cercar substàncies per estructura química, estructura de Markush, fórmula molecular, número CAS, nom químic i nom comercial.

Opcions per a limitar la cerca.

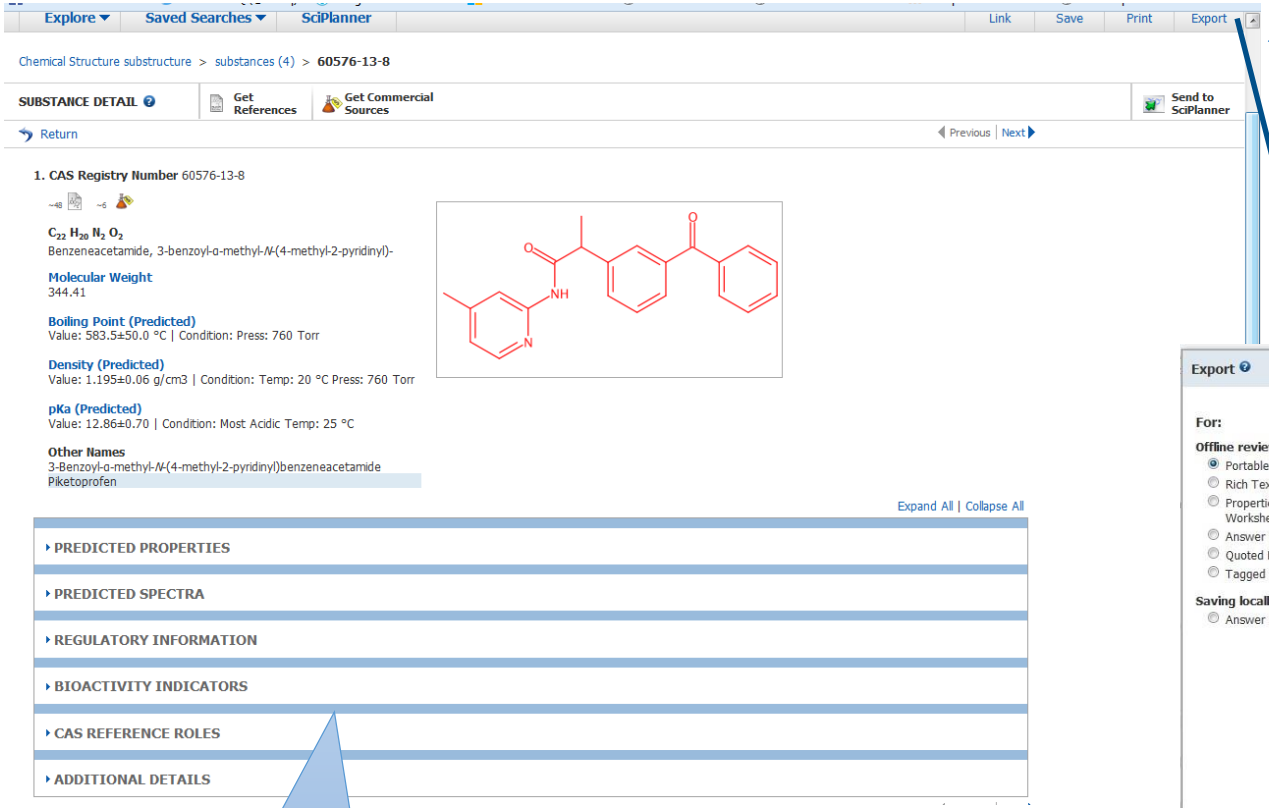
Resultats de la cerca de substàncies



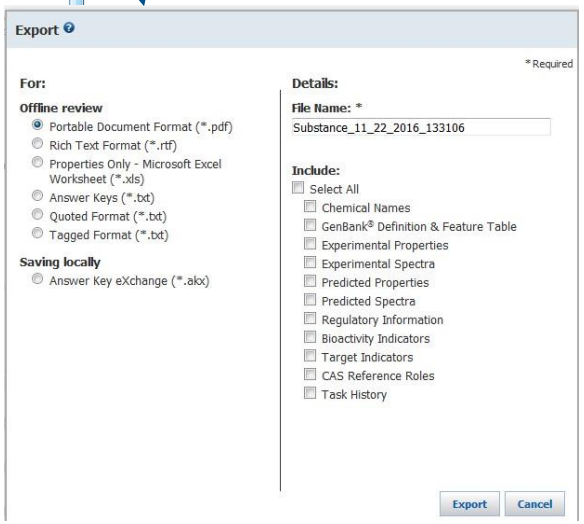
Opcions per analitzar o refinar la cerca.

A cadascuna de les substàncies li correspon una fitxa.

Resultats de la cerca de substàncies

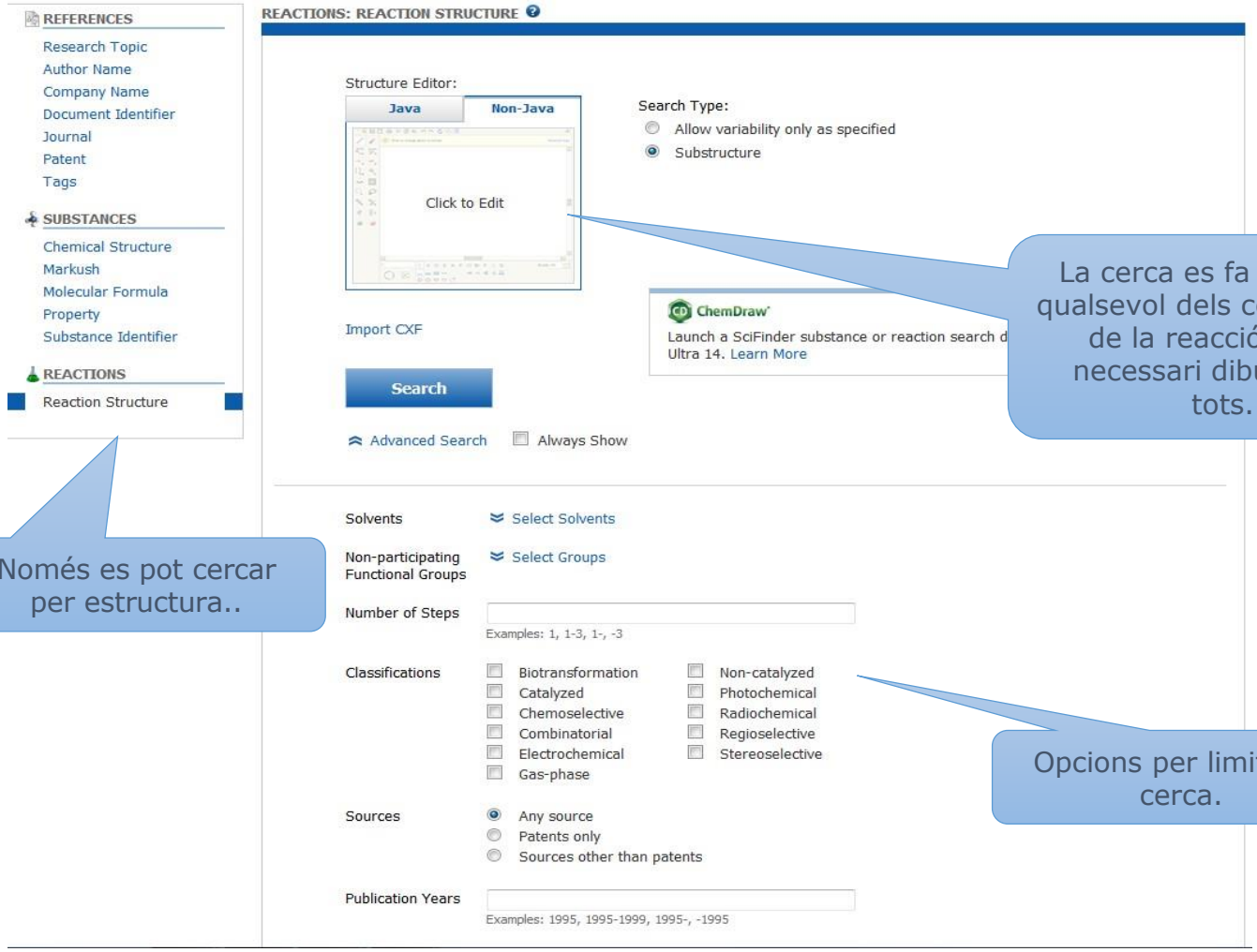


L'opció export permet gravar els resultats.



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

Cerca de reaccions



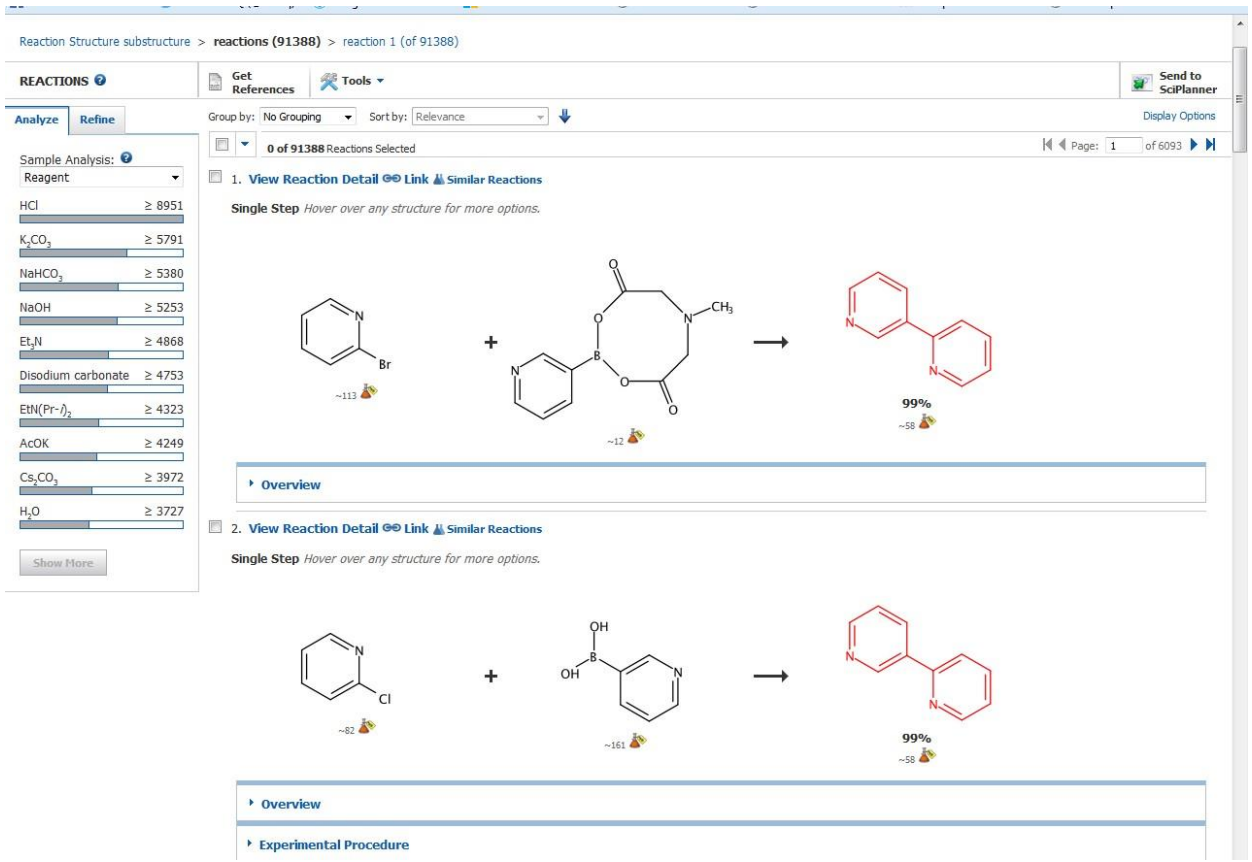
Només es pot cercar per estructura..

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

Opcions per limitar la cerca.

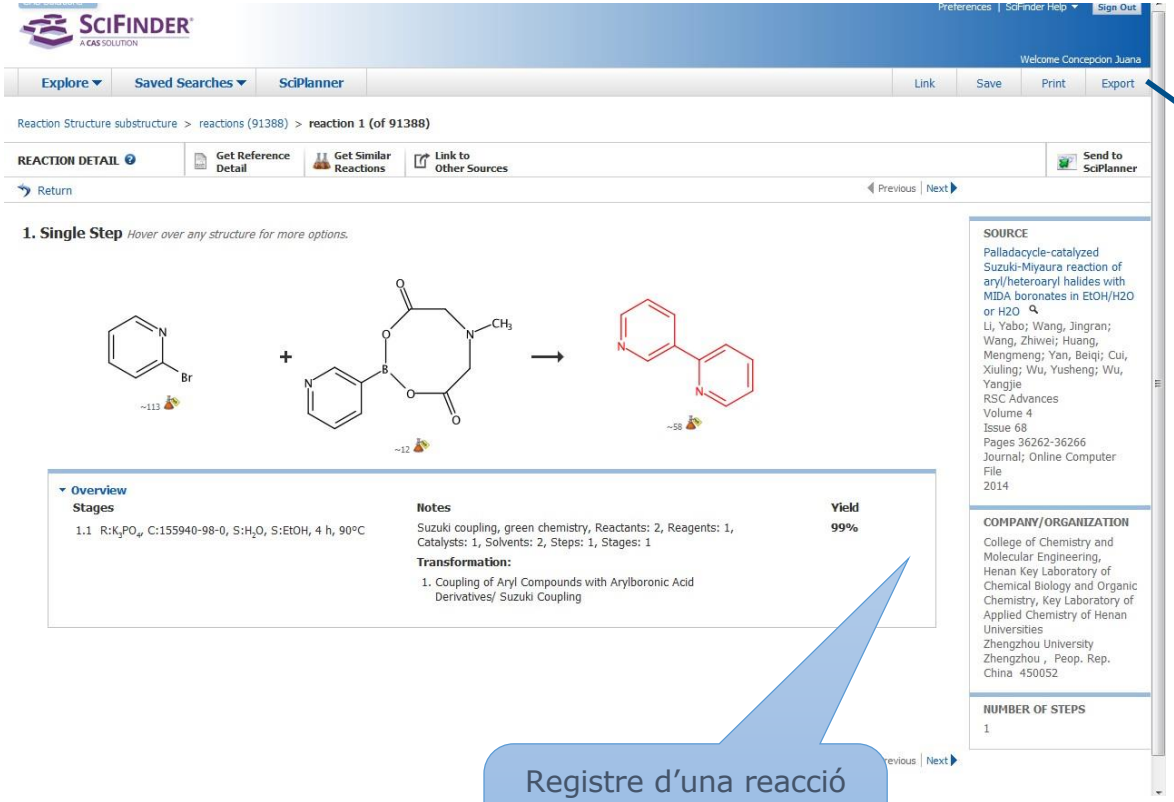
Resultats de la cerca de reaccions

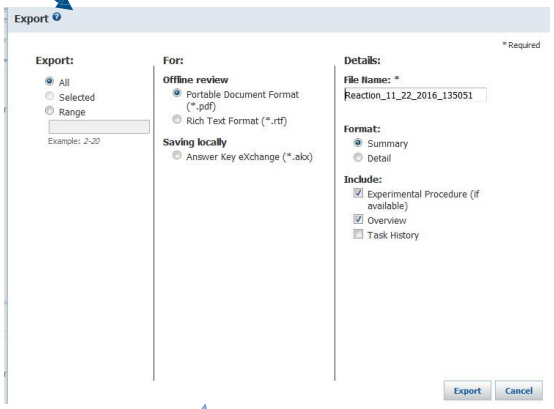
Opcions per analitzar o refinar la cerca.



Des del 2005 s'inclou el procediment experimental.

Resultats de la cerca de reaccions



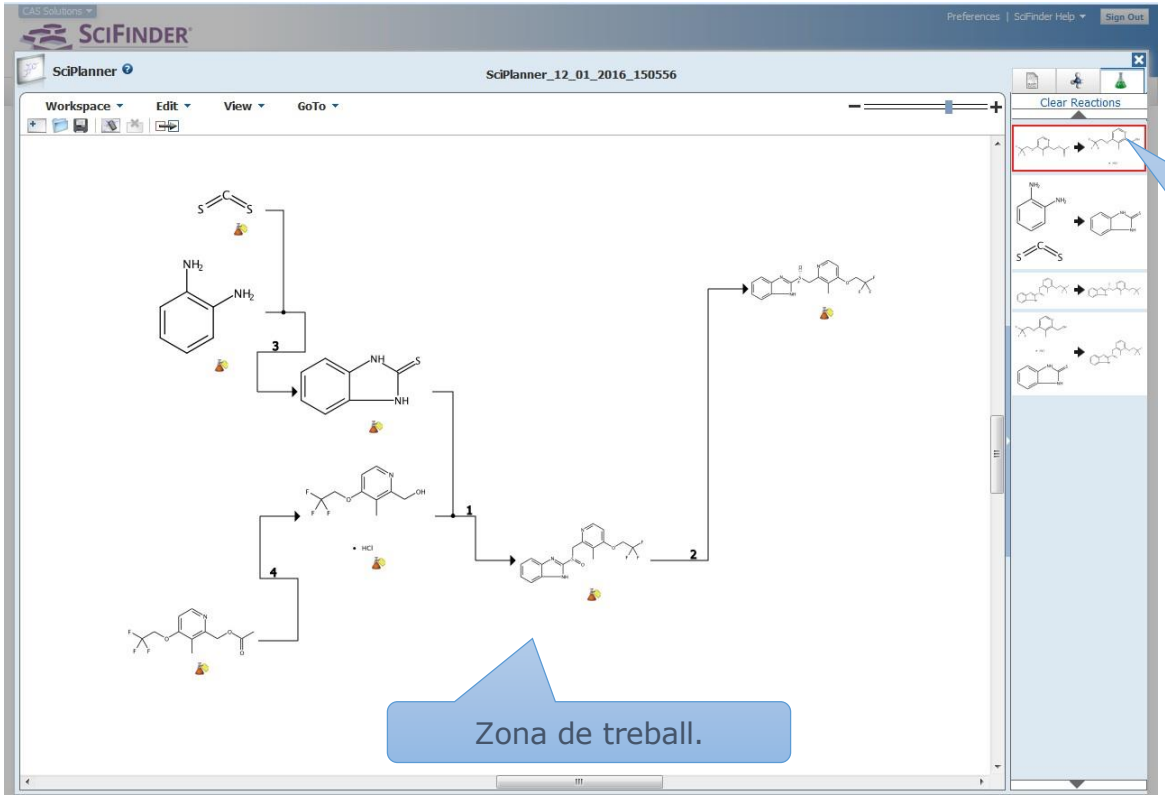


Registre d'una reacció amb totes les seves dades, incloses les bibliogràfiques.

L'opció export permet gravar els resultats.

SciPlanner

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

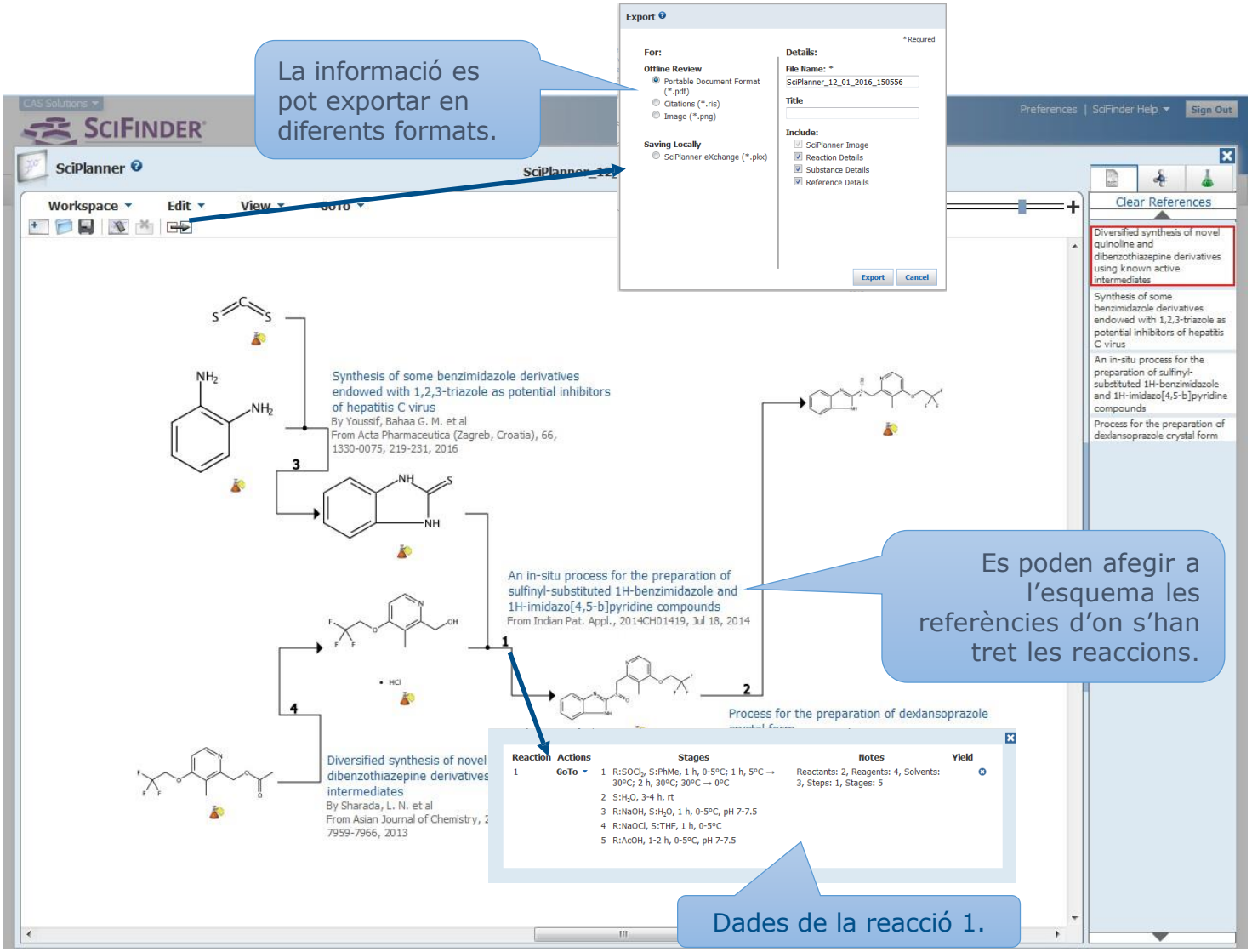


Llibreria: On van a parar les referències, substàncies i reaccions enviades des dels resultats de les cerques fetes a SciFinder.

Tutorial en vídeo

Informació al blog de la biblioteca

SciPlanner


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:
File Name: *
SciPlanner_12_01_2016_150556
Title
Include:
SciPlanner Image
Reaction Details
Substance Details
Reference Details
Export
Cancel
SciFinder
SciPlanner
Workspace
Edit
View
GoTo
Preferences | SciFinder Help
Sign Out
Clear References
Diversified synthesis of novel quinoline and dibenzothiazepine derivatives using known active intermediates
Synthesis of some benzimidazole derivatives endowed with 1,2,3-triazole as potential inhibitors of hepatitis C virus
An in-situ process for the preparation of sulfinyl-substituted 1H-benzimidazole and 1H-imidazo[4,5-b]pyridine compounds
Process for the preparation of dexlansoprazole crystal form
Synthesis of some benzimidazole derivatives endowed with 1,2,3-triazole as potential inhibitors of hepatitis C virus
By Youssif, Bahaa G. M. et al
From Acta Pharmaceutica (Zagreb, Croatia), 66, 1330-0075, 219-231, 2016
An in-situ process for the preparation of sulfinyl-substituted 1H-benzimidazole and 1H-imidazo[4,5-b]pyridine compounds
From Indian Pat. Appl., 2014CH01419, Jul 18, 2014
Process for the preparation of dexlansoprazole
Diversified synthesis of novel dibenzothiazepine derivatives intermediates
By Sharada, L. N. et al
From Asian Journal of Chemistry, 7959-7966, 2013
Reaction
Actions
Stages
Notes
Yield
1
GoTo
1 R:SOCl2, S:PhMe, 1 h, 0-5°C; 1 h, 5°C → 30°C; 2 h, 30°C; 30°C → 0°C
2 S:H2O, 3-4 h, rt
3 R:NaOH, S:H2O, 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
Es poden afegir a l'esquema les referències d'on s'han tret les reaccions.
Dades de la reacció 1.

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.

UNIVERSITAT DE BARCELONA

CRAI Centre de Recursos per a l'Aprenentatge i la Investigació

Moltes gràcies!