

SciFinder Web

SciFinder Web

- [Introducció](#)
- [Com accedir-hi](#)
- [Contingut](#)
- [Opcions de cerca](#)
- [Resultats de cerca](#)
- [SciPlanner i altres funcions](#)

Introducció

- Plataforma produïda pel **Chemical Abstracts Service (CAS)** que dóna accés a la col·lecció més gran d'informació sobre química, enginyeria química i altres matèries relacionades.
- Permet consultar de manera transparent diverses bases de dades. Cerca automàticament a les bases de dades més adients segons el tipus de consulta.
- Es pot buscar per nom, fórmula o estructura dels compostos, per reacció, tema, autor, institució, etc.
- Permet fullejar els sumaris de les revistes considerades més importants dins l'àmbit de la química.



Introducció

Proporciona dades de:

- Més de 34 milions de referències provinents de més de 10.000 revistes científiques, llibres, ponències de conferències i patents de 60 oficines de patents.
- Més de 190 milions de citacions des de 1997 fins ara.
- Més de 61 milions de substàncies i 62 milions de seqüències registrades pel CAS.
- Més de 44 milions de compostos comercials.
- Més de 43 milions de reaccions amb informació sintètica de compostos orgànics, organometàl·lics i productes naturals.
- Informació biomèdica de la base de dades Medline.



Com accedir-hi

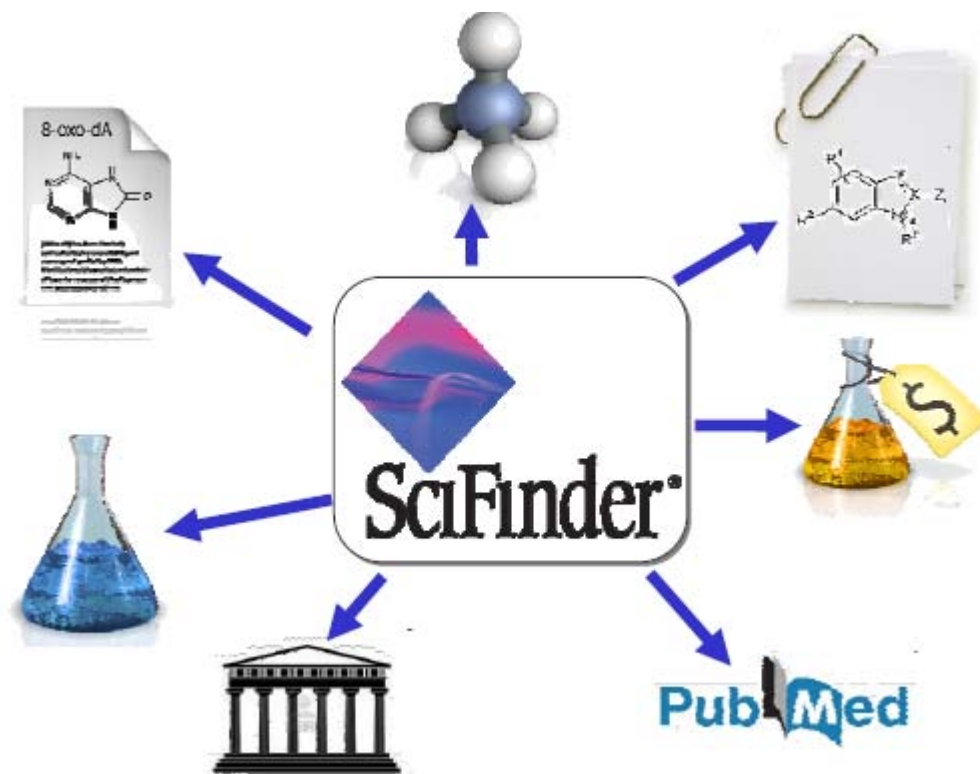
- No cal la instal·lació de cap programa. Vegeu els [Requeriments informàtics](#).
- Per accedir-hi és necessari [registrar-se](#) des d'un ordinador de la UB. Cal utilitzar un correu institucional (@ub.edu).
- La pàgina d'accés és: <http://scifinder.cas.org>. Us demanarà l'usuari i la contrasenya que heu creat en registrar-vos.
- Si voleu accedir-hi **des de fora de la UB**, heu de configurar-vos el [servidor intermediari](#) (proxy) al vostre navegador.



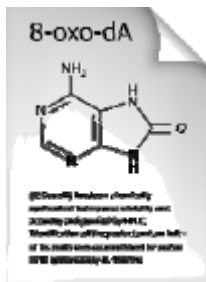
Contingut

Accés a set bases de dades:

- [CA PLUS](#)
- [REGISTRY](#)
- [CASREACT](#)
- [MARPAT](#)
- [CHEMCATS](#)
- [CHEMLIST](#)
- [MEDLINE](#)



Contingut



CA PLUS: base de dades bibliogràfica

- És la col·lecció més gran d'informació sobre química, enginyeria química i altres matèries relacionades, des de 1907 fins a l'actualitat.
- Conté més de 34 milions de referències provinents de més de 10.000 revistes científiques, llibres, ponències de conferències i patents de 60 oficines de patents.
- S'actualitza diàriament.



Contingut



REGISTRY: base de dades de substàncies

- Més de 61 milions de substàncies i 62 milions de seqüències registrades pel CAS .
- Cobertura: 1957-present. Pot incloure substàncies des de 1900.
- Informació de les substàncies: nom, sinònims, CAS RN, propietats experimentals i calculades, estructura, etc.
- Permet cercar per estructura química, CAS RN, nom químic o comercial i fórmula molecular.
- S'actualitza diàriament.



Contingut

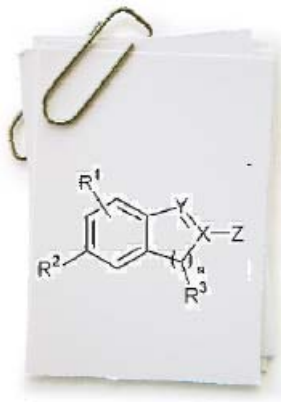


CASREACT: base de dades de reaccions

- Més de 43 milions de reaccions d'una o més etapes.
- Cobertura: 1840-present.
- Inclou reaccions Wiley: EROS, síntesi orgànica i reaccions orgàniques.
- Permet cercar dibuixant la reacció completa o només l'estructura d'alguns del reactius i/o productes.
- S'actualitza setmanalment.



Contingut



MARPAT: base de dades de patents

- Més de 890.000 estructures de Markush.
- Més de 300.000 patents.
- Cobertura: 1840-present.
- Informació INPI inclosa 1961-1987.
- Permet cercar dibuixant l'estructura de les substàncies.
- S'actualitza diàriament.



Contingut



CHEMCATS: base de dades de catàlegs i proveïdors

- Més de 44 milions de substàncies incloses a 1.215 catàlegs de 1.100 proveïdors.
- Informació sobre preus, dades de contacte, quantitats, CAS RN, etc.
- S'actualitza dues vegades a la setmana.



CHEMLIST: base de dades de regulacions

- Més de 100 inventaris i llistes regulatòries de diferents països amb informació de més de 280.000 substàncies.
- Cobertura: 1970-present.
- S'actualitza setmanalment.



Contingut



MEDLINE: base de dades de biomedicina

- Base de dades bibliogràfica produïda per la National Library of Medicine (NLM).
- Cobertura: 1949-present.
- Més de 17 milions de referències de més de 4.800 revistes biomèdiques.
- S'actualitza quatre vegades a la setmana.



Opcions de cerca → Explore References

Cerca de referències

Cerca per tema, autor, companyia, revista, etc.

The screenshot shows the SciFinder 'Explore References' search page. At the top, there are three navigation buttons: 'Explore References', 'Explore Substances', and 'Explore Reactions'. A callout points to these buttons, stating 'Des d'aquí es poden escollir les opcions de cerca'. Below the navigation is a search bar with a 'Search' button and a 'Formulari de cerca' callout. The search bar contains 'Examples: The effect of antibiotic residues on dairy products' and 'Photocyanation of aromatic compounds'. To the left of the search bar is a sidebar with filters: 'Research Topic', 'Author Name', 'Company Name', 'Document Identifier', 'Journal', 'Patent', and 'Tags'. Below the search bar are several filter sections: 'Publication Year(s)', 'Document Type(s)', 'Language(s)', 'Author Name', and 'Company Name'. Each section has a dropdown arrow and a list of options with checkboxes. A callout points to the filter sections, stating 'És possible limitar a priori la cerca, mitjançant l'any de publicació, el tipus de document, la llengua, etc.'. On the right side of the page, there is a list of search results, a 'View All' link, an 'Import' button, and a 'Keep Me Posted Results' section with a dropdown arrow and the text 'No profiles exist'. A curved arrow is located at the bottom right of the page.

Des d'aquí es poden escollir les opcions de cerca

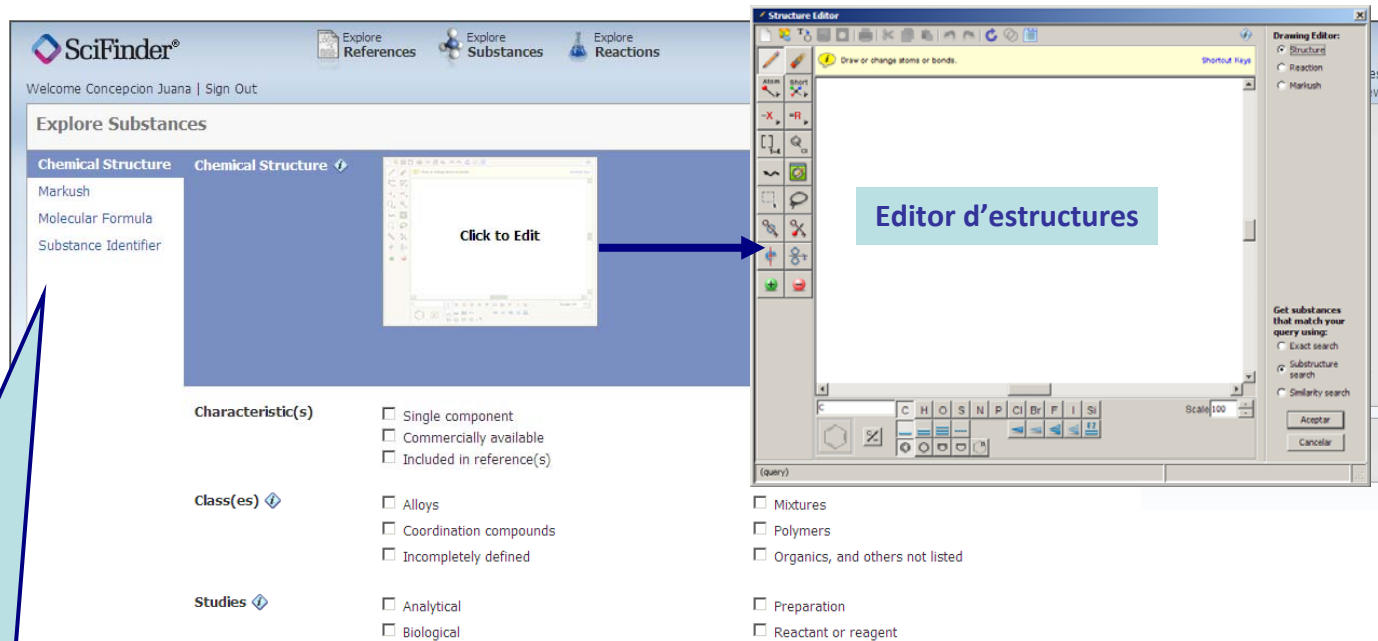
Formulari de cerca

És possible limitar a priori la cerca, mitjançant l'any de publicació, el tipus de document, la llengua, etc.



Opcions de cerca Explore Substances

Cerca de substàncies



The screenshot shows the SciFinder 'Explore Substances' interface. On the left, there are search options: 'Chemical Structure', 'Markush', 'Molecular Formula', and 'Substance Identifier'. Below these are filter categories: 'Characteristic(s)', 'Class(es)', and 'Studies', each with several checkboxes. A blue callout box points to the 'Click to Edit' button in the 'Chemical Structure' section. An arrow points from this button to the 'Structure Editor' window on the right, which is also labeled with a blue callout box. The Structure Editor window contains a drawing toolbar, a central canvas, and a 'Drawing Editor' panel on the right with options for 'Structure', 'Reaction', and 'Markush'.

Editor d'estructures

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

Opcions per limitar la cerca

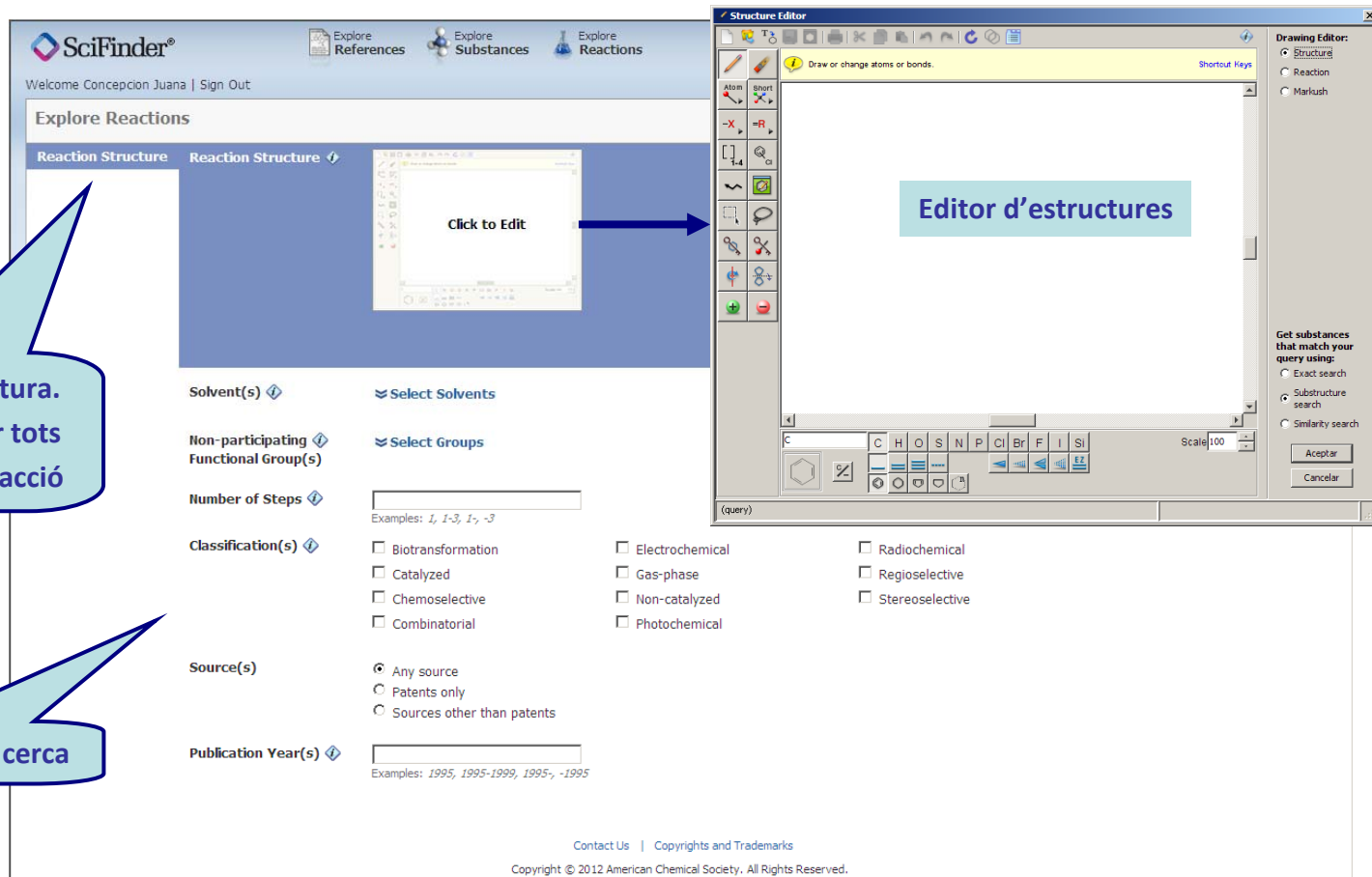


Opcions de cerca Explore Reactions

Cerca de reaccions

La cerca es fa per estructura. No és necessari dibuixar tots els components de la reacció

Opcions per limitar la cerca



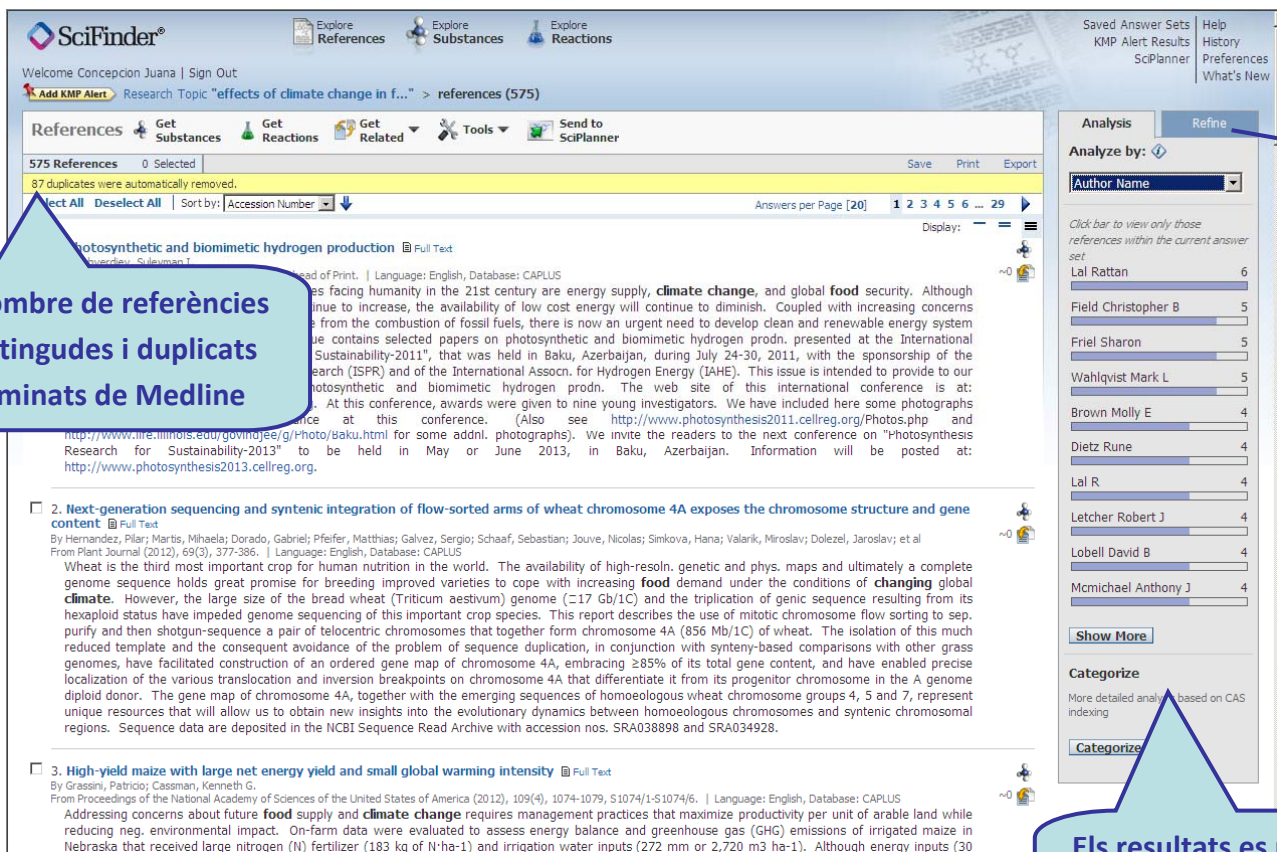
The screenshot shows the SciFinder 'Explore Reactions' interface. The main window has a 'Click to Edit' button that points to a 'Structure Editor' window. The 'Structure Editor' window has a 'Drawing Editor' panel on the right with options for Structure, Reaction, and Markush. Below the main window, there are search filters:

- Solvent(s)**: Select Solvents
- Non-participating Functional Group(s)**: Select Groups
- Number of Steps**: [Input field] Examples: 1, 1-3, 1-, -3
- Classification(s)**:
 - Biotransformation
 - Catalyzed
 - Chemoselective
 - Combinatorial
 - Electrochemical
 - Gas-phase
 - Non-catalyzed
 - Photochemical
 - Radiochemical
 - Regioselective
 - Stereoselective
- Source(s)**:
 - Any source
 - Patents only
 - Sources other than patents
- Publication Year(s)**: [Input field] Examples: 1995, 1995-1999, 1995-, -1995

At the bottom of the interface, there is a footer: 'Contact Us | Copyrights and Trademarks. Copyright © 2012 American Chemical Society. All Rights Reserved.'



Resultats de la cerca de referències



SciFinder®

Welcome Concepcion Juana | Sign Out

Research Topic "effects of climate change in f..." > references (575)

References 575 References 0 Selected

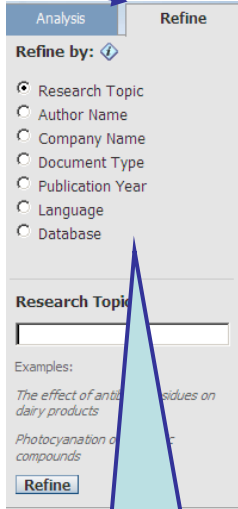
87 duplicates were automatically removed.

Photosynthetic and biomimetic hydrogen production

2. Next-generation sequencing and syntenic integration of flow-sorted arms of wheat chromosome 4A exposes the chromosome structure and gene content

3. High-yield maize with large net energy yield and small global warming intensity

Nombre de referències obtingudes i duplicats eliminats de Medline



Analysis Refine

Refine by:

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

Research Topic

Examples:

The effect of antibiotics on dairy products

Photocyanation of... compounds

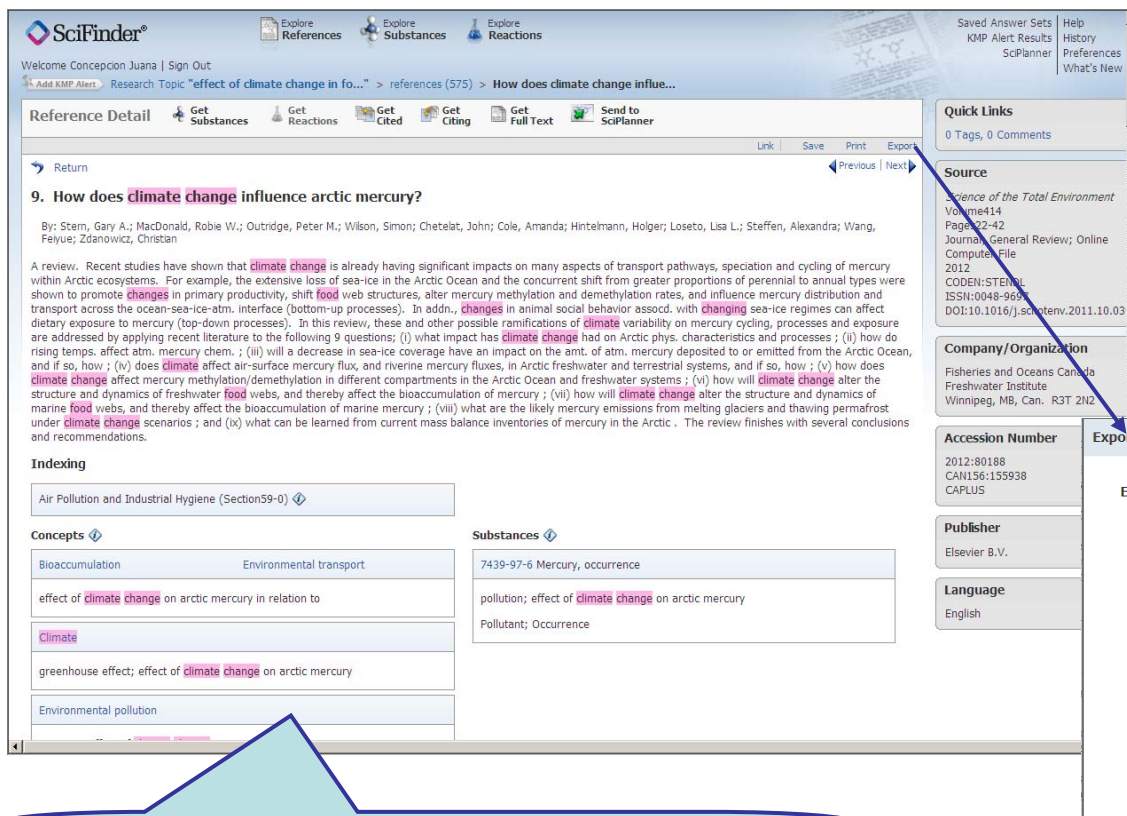
Refine

Opcions per refinar

Els resultats es poden analitzar per diferents camps, i obtenir l'histograma corresponent



Resultats de la cerca de referències



The screenshot shows the SciFinder interface with a search result for the article "9. How does climate change influence arctic mercury?". The interface includes a navigation bar, a search bar, and various tool icons. The main content area displays the article title, authors, and a detailed abstract. On the right side, there is a "Quick Links" section and a "Source" section. Below the article, there are sections for "Indexing", "Concepts", and "Substances". At the bottom right, an "Export" panel is open, showing options for exporting the results in various formats.

Amb l'opció *Export* es poden exportar els resultats a un gestor de bibliografia, o bé gravar-los com a PDF o RTF, entre altres possibilitats

Registre d'un document amb totes les dades disponibles

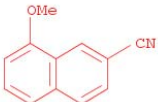
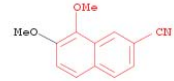
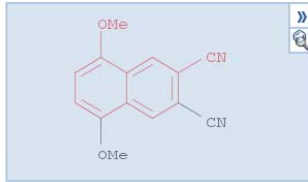
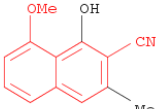
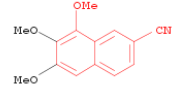
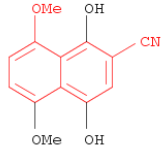
Export Cancel



Resultats de la cerca de substàncies

SciFinder®
 Welcome Concepcion Juana | Sign Out
 Add KMP Alert | Chemical Structure substructure > substances (31)

Substances 31 Substances 0 Selected
 Select All Deselect All | Sort by: Relevance (New) | Save Print Export
 Answers per Page [15] 1 2 3 | View: [Icons]

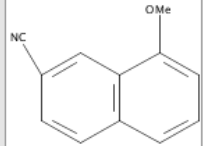
| | | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>1. Substance Detail 590369-72-5</p>  <p>C₁₂ H₉ N O 2-Naphthalenecarbonitrile, 8-methoxy-</p> <p>Experimental Properties</p> | <p>2. Substance Detail 220298-90-8</p>  <p>C₁₃ H₁₁ N O₂ 2-Naphthalenecarbonitrile, 7,8-dimethoxy-</p> | <p>3. Substance Detail 181701-96-2</p>  <p>C₁₄ H₁₀ N₂ O₂ 2,3-Naphthalenedicarbonitrile, 5,8-dimethoxy-</p> |
| <p>4. Substance Detail 129319-19-3</p>  <p>C₁₃ H₁₁ N O₂ 2-Naphthalenecarbonitrile, 1-hydroxy-8-methoxy-3-methyl-</p> <p>Experimental Properties</p> | <p>5. Substance Detail 220298-92-0</p>  <p>C₁₄ H₁₃ N O₃ 2-Naphthalenecarbonitrile, 6,7,8-trimethoxy-</p> | <p>6. Substance Detail 197573-93-6</p>  <p>C₁₃ H₁₁ N O₄ 2-Naphthalenecarbonitrile, 1,4-dihydroxy-5,8-dimethoxy-</p> |
| <p>7. Substance Detail 121675-73-8</p> | <p>8. Substance Detail 129319-21-7</p> | <p>9. Substance Detail 858031-18-7</p> |

Analysis Refine

Refine by: ⓘ

- Chemical Structure
- Isotope-Containing
- Metal-Containing
- Commercial Availability
- Property Availability
- Property Value
- Reference Availability
- Atom Attachment

Chemical Structure:



Click image to change structure or view detail

Search type: **Substructure**

Only retrieve substances that:

- Have references
- Are commercially available
- Are a single component
- Are in specific substance classes
- Are in specific types of studies

Refine

Analysis Refine

Analyze by: ⓘ

Substance Role

Click bar to view only those substances within the current answer set

Preparation 28

Reactant or Reagent 17

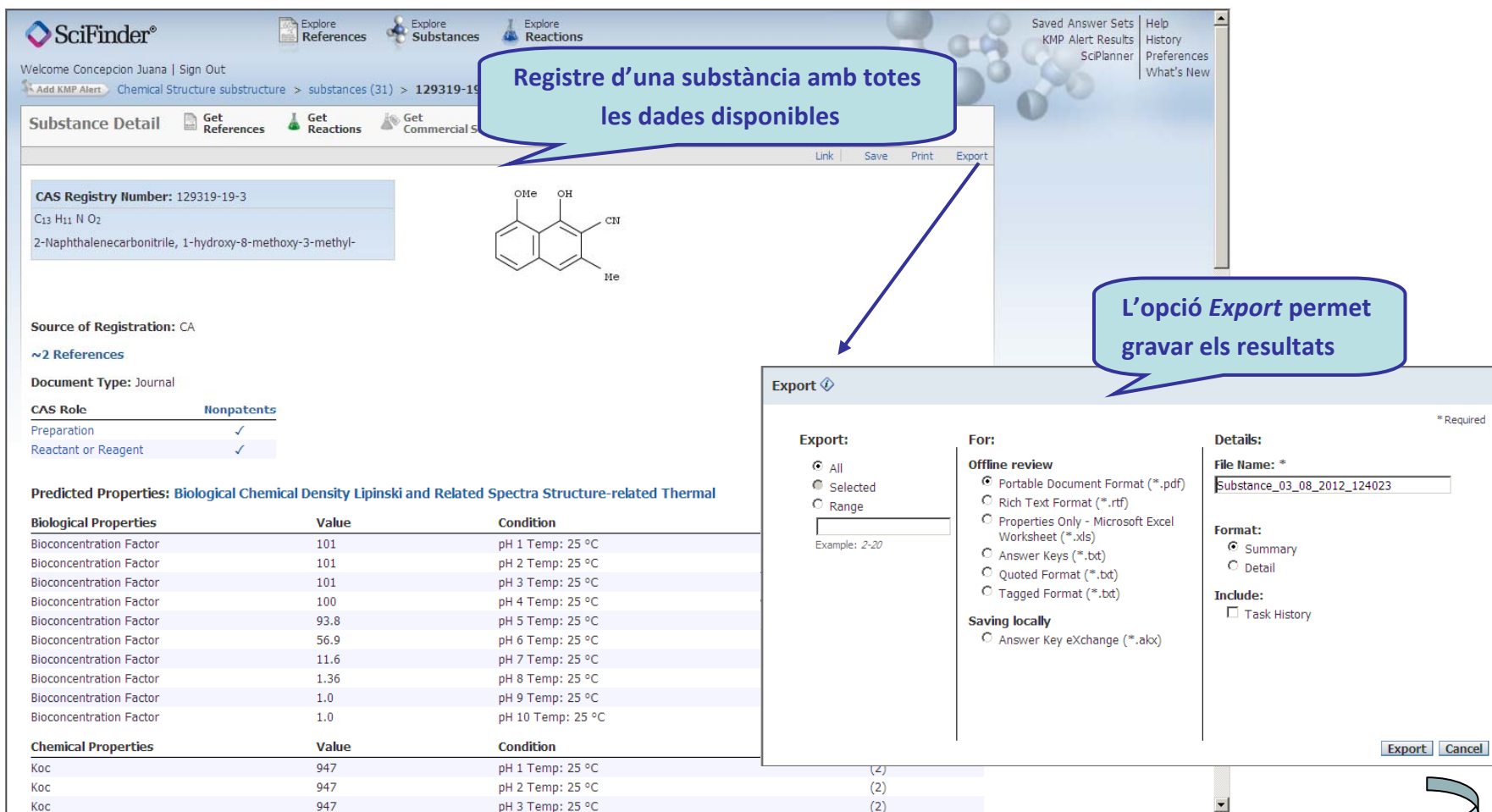
Properties 1

Show More

Els resultats de les cerques de substàncies es poden analitzar i refinar



Resultats de la cerca de substàncies:



Registre d'una substància amb totes les dades disponibles

L'opció *Export* permet gravar els resultats

Substance Detail

CAS Registry Number: 129319-19-3
 C₁₃ H₁₁ N O₂
 2-Naphthalenecarbonitrile, 1-hydroxy-8-methoxy-3-methyl-

Source of Registration: CA
 ~2 References
 Document Type: Journal
 CAS Role: **Nonpatents**
 Preparation
 Reactant or Reagent

Predicted Properties: Biological Chemical Density Lipinski and Related Spectra Structure-related Thermal

| Biological Properties | Value | Condition |
|-------------------------|-------|-------------------|
| Bioconcentration Factor | 101 | pH 1 Temp: 25 °C |
| Bioconcentration Factor | 101 | pH 2 Temp: 25 °C |
| Bioconcentration Factor | 101 | pH 3 Temp: 25 °C |
| Bioconcentration Factor | 100 | pH 4 Temp: 25 °C |
| Bioconcentration Factor | 93.8 | pH 5 Temp: 25 °C |
| Bioconcentration Factor | 56.9 | pH 6 Temp: 25 °C |
| Bioconcentration Factor | 11.6 | pH 7 Temp: 25 °C |
| Bioconcentration Factor | 1.36 | pH 8 Temp: 25 °C |
| Bioconcentration Factor | 1.0 | pH 9 Temp: 25 °C |
| Bioconcentration Factor | 1.0 | pH 10 Temp: 25 °C |

| Chemical Properties | Value | Condition |
|---------------------|-------|------------------|
| Koc | 947 | pH 1 Temp: 25 °C |
| Koc | 947 | pH 2 Temp: 25 °C |
| Koc | 947 | pH 3 Temp: 25 °C |

Export

Export:
 All
 Selected
 Range
 Example: 2-20

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 (*.akx)

Details:
File Name: *
 Substance_03_08_2012_124023
Format:
 Summary
 Detail
Include:
 Task History

Export **Cancel**



Resultats de la cerca de reaccions

SciFinder®

Welcome Concepcion Juana | Sign Out

Reaction Structure substructure > reactions (34564)

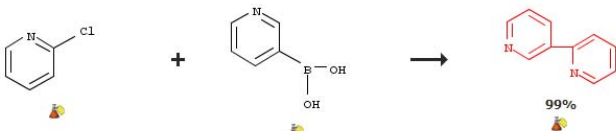
34564 Reactions 0 Selected

Select All Deselect All Sort by: Relevance

Answers per Page [15] 1 2 3 4 5 6 ... 2305

Display: [Icons]

1. View Reaction Detail [Link](#) [Similar Reactions](#)
Single Step *Hover over any structure for more options.*



Overview

Steps/Stages

1.1 R:K₂CO₃, C:1010075-53-2, C: PdCl₄•2Na, S:H₂O, 12 h, 100°C

Notes

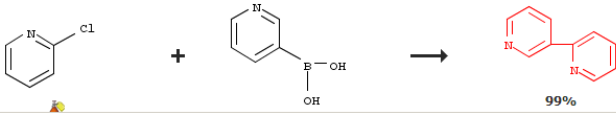
Reactants: 2, Reagents: 1, Catalysts: 2, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1

References

New cyclopentadienyl, indenyl or fluorenyl substituted phosphine compounds and their use in catalytic reactions [Full Text](#)
By Plenio, Herbert et al
From PCT Int. Appl., 2008025673, 06 Mar 2008

Experimental Procedure

2. View Reaction Detail [Link](#) [Similar Reactions](#)
Single Step *Hover over any structure for more options.*



Analysis Refine

Sample Analysis: [Down Arrow](#)

Catalyst

Pd(PPh₃)₄

DMF

Pd

Pd₂(dba)₃

72287-26-4

PdCl₂(PPh₃)₂

CuI

95464-05-4

Pd(OAc)₂

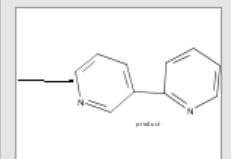
54761-04-5

Analysis Refine

Refine by: [Down Arrow](#)

- Reaction Structure
- Product Yield
- Number of Steps
- Reaction Classification
- Excluding Reaction Classification
- Non-participating functional groups

Reaction Structure:



Click image to change structure or view detail

Search type: **Substructure**

Refine

Les reaccions es poden analitzar o refinar



Resultats de la cerca de reaccions

SciFinder®

Welcome Concepcion Juana | Sign Out

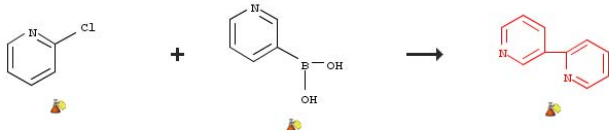
Reaction Structure substructure > reactions (35281) > reaction 1 (of 35281)

Reaction Detail | Get Reference Detail | Get Full Text | Get Similar Reactions | Send to SciPlanner

Link | Save | Print | Export

Return

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



Stages

1.1 R:K₂CO₃, C:1010075-53-2, C:PdCl₄•2Na, S:H₂O, 12 h, 100°C

Notes

Reactants: 2, Reagents: 1, Catalysts: 2, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1

Yield

99%

Experimental Procedure

Source

New cyclopentadienyl, indenyl or fluorenyl substituted phosphine compounds and their use in catalytic reactions
Plenio, Herbert; Fleckenstein, Christoph; Kadyrov, Renat; Almena, Juan; Monsees, Axel; Riermeier, Thomas
Assignee Evonik Degussa GmbH, Germany
2008

Patent Information

Mar 6, 2008
WO 2008025673
A1

Number of Steps

1

Export

Export: All Selected Range

For: **Offline review**
 Portable Document Format (*.pdf)
 Rich Text Format (*.rtf)

Saving locally
 Answer Key eXchange (*.akc)

Details: * Required

File Name: *
Reaction_03_08_2012_123720

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

Des de 2005 s'inclou el procediment experimental

Export permet gravar els resultats



SciPlanner

Tutorial en vídeo
Informació al bloc de la biblioteca

Permet dissenyar, organitzar i treballar amb les pròpies rutes sintètiques

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

La informació es pot exportar en diferents formats (PDF, imatge, etc.)

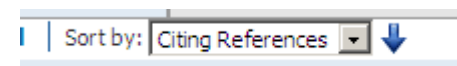
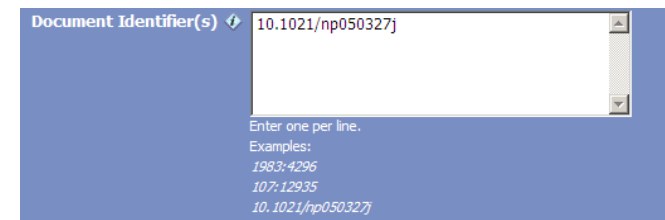
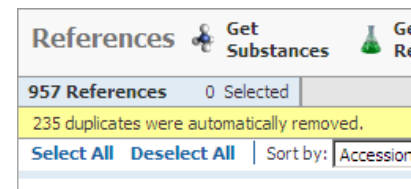
Zona de treball

The screenshot displays the SciPlanner software interface. At the top, there are navigation tabs for 'Explore References', 'Explore Substances', and 'Explore Reactions'. The main workspace shows a chemical synthesis pathway with three steps labeled 1, 2, and 3. Step 1 starts with a complex starting material and leads to an intermediate. Step 2 involves a reaction with cyclopropanone (labeled 'CH=O'). Step 3 leads to the final product. A callout box points to the 'Libreria' (Library) on the right, which contains search results for 'Uses of an immunomodulatory protein (GMI) from Ganoderma microsporum' and 'Capsules of pharmaceuticals and polyunsaturated fatty acids for treatment of prostate diseases'. Another callout points to a 'Send to SciPlanner' button. A third callout points to the main workspace area, labeled 'Zona de treball'. The interface also includes a 'Clear References' button and a 'Workspace' dropdown menu.



Algunes característiques i funcions...

- Els registres de Medline contenen des d'abril de 2011 les citacions de cada document, cosa que permet ampliar la cerca a través de la bibliografia dels documents.
- A *Preferences* es pot marcar l'opció *Automatically remove duplicates Medline answers* per eliminar directament els duplicats entre les bases de dades CAS i Medline.
- A *Explore References* es pot cercar per DOI (*digital object identifier*).
- Amb l'opció *Citing References*, inclosa a *Sort by*, es poden ordenar els resultats per nombre de citacions.



Algunes característiques i funcions...

- Els registres de reaccions inclouen el procediment experimental.
- És possible dibuixar l'estructura d'un compost utilitzant els SMILES i InChi.
- Les estructures dibuixades a ISIS/Draw es poden copiar i enganxar directament a l'editor d'estructures de SciFinder.
- És possible afegir etiquetes i comentaris personals (*tags, comments*) als registres i compartir-los amb els col·legues. Els tags es poden cercar a *Explore References*.

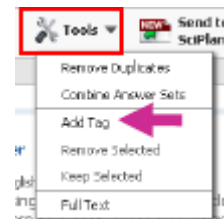
Benceno

Estructura:



InChI: 1/C6H6/c1-2-4-6-5-3-1/h1-6H

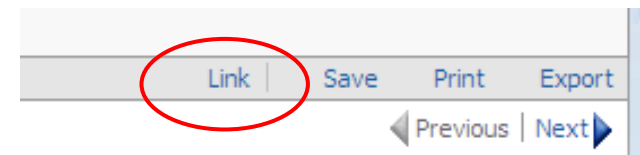
SMILE: c1ccccc1

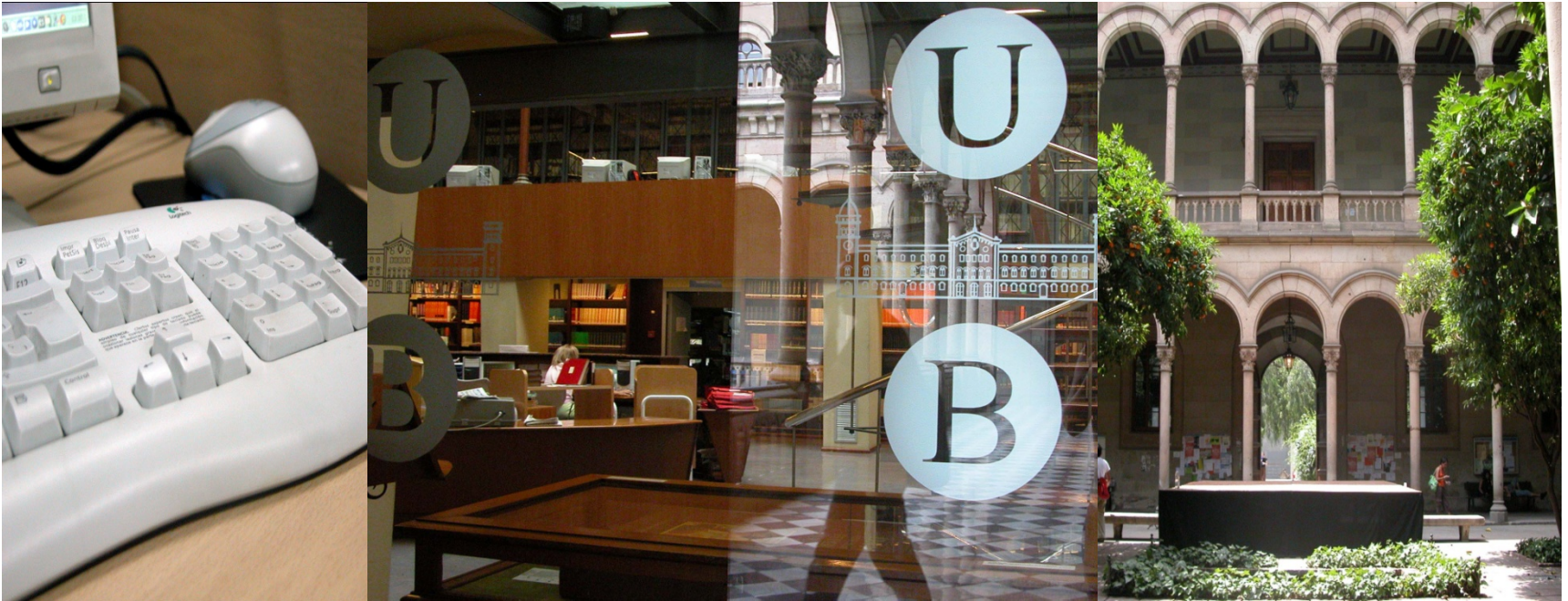


Algunes característiques i funcions...

- **Create Keep Me Posted** permet crear alertes personals per estar al dia.
- L'opció **Link** permet crear un hipervincle i compartir cerques completes o registres concrets amb els col·legues.
- **SciFinder version Mobile** permet accedir-hi des del mòbil, amb qualsevol *Smartphone*.

Create Keep Me Posted





Moltes gràcies!