



| | |
|---|----|
| Introduction à la base : se créer un compte | 2 |
| La base Scifinder | 3 |
| I-References | 3 |
| 1-La recherche simple et avancée | 3 |
| 3-Trouver des références en utilisant une structure chimique..... | 5 |
| 4-Références : les résultats | 7 |
| 5-Références : document détaillé | 9 |
| II-Les Substances et Réactions | 10 |
| 1-Substances | 10 |
| 2-Réactions | 12 |
| 3-PatentPak : brevets | 13 |
| 4-Les fournisseurs..... | 14 |
| III-Outils de veille | 15 |

SciFinder N est l'interface web du Chemical Abstracts Service (CAS) et se présente comme une collection de 3 bases de données interrogeables séparément ou conjointement.

Une base bibliographique (CAplus, 39 millions de références issues de 10 000 publications, en version **intégrale ou non**), une base sur les substances et produits chimiques (CA Registry contient 89 millions de substances organiques et inorganiques) et une base sur les réactions chimiques (CASReacts, avec 75 millions de réactions).

Elle est la base de référence en chimie, couvrant tous ses domaines (biochimie, chimie organique, appliquée, analytique, inorganique, physique, chimie des polymères) et des sciences connexes (sciences biomédicales, pharmacologie, sciences de l'ingénieur, sciences des matériaux, etc.)

Introduction à la base : se créer un compte

L'accès à Scifinder se fait grâce à la création d'un compte individuel. Pour le créer rendez vous sur le site de la BU, rubrique « Ressources », puis « ressources en ligne ».

Le lien d'inscription se trouve dans la répartition par disciplines : Sciences, puis chimie.

SciFinder-n (CAS)

[Accès à SciFinder-n](#) (membres UCA)

Ressource incontournable en chimie, produite par l'American Chemical Society, SciFinder-n permet de rechercher à la fois des références bibliographiques, des substances et des réactions chimiques.

La partie Références permet de trouver à la fois des références d'articles, de livres, de thèses, d'actes de congrès et de brevets dans tous les domaines de la chimie, depuis 1800 : biochimie, chimie organique, chimie macromoléculaire, chimie appliquée... Ces références sont issues de la base Chemical Abstracts Plus et de Medline. Le lien vers le texte intégral des documents est proposé lorsqu'il est disponible.

La création d'un compte est obligatoire : rendez-vous sur la [page d'inscription](#) et utilisez votre adresse mail institutionnelle.

@uca.fr

@cc.uca.fr

@ext.uca.fr

@sigma-clermont.fr

Il faudra ensuite se connecter via l'ent puis accepter les termes d'utilisation.

Username and Password: Tips

What are the rules for specifying a user name?

Username must be 5-15 characters and contain at least one letter. It must start with a letter or number, but may include numbers, dashes, underscores, periods, or @.

How long does my password need to be?

Your password must contain a minimum of 7 and a maximum of 15 characters.

Can my password be the same as my username?

At least 2 of the characters in your password must be different from your username.

What types of characters does my password have to include?

Your password must include at least three (3) of the following:

- Letters
- Mixed upper and lowercase letters
- Numbers
- Non-alphanumeric characters (e.g., @, #, %, &, *)

When I change my password, how different does it need to be from my old password?

A new password must differ from your old password by at least 2 characters.

Additional questions may be directed to [CAS Customer Center](#).

Après avoir complété le formulaire, vous recevrez un mail de confirmation à l'adresse de contact précédemment renseignée.

PS : CETTE ADRESSE DOIT OBLIGATOIREMENT ETRE UN MAIL UCA OU SIGMA

Les modes de recherche sur ScifinderN

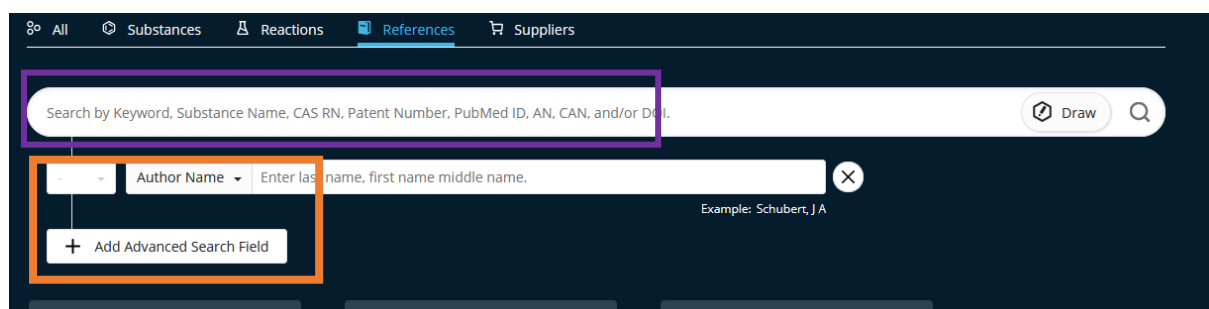
Il y a trois modes de recherche dans Scifinder N : References, Substances et Reactions. SciFinder N permet l'interrogation croisée de ces bases, à partir de recherches effectuées par mots-clés, par substance, mais aussi par réaction, à l'aide d'un éditeur inclus dans l'interface de recherche.

I-References

1-La recherche simple et avancée

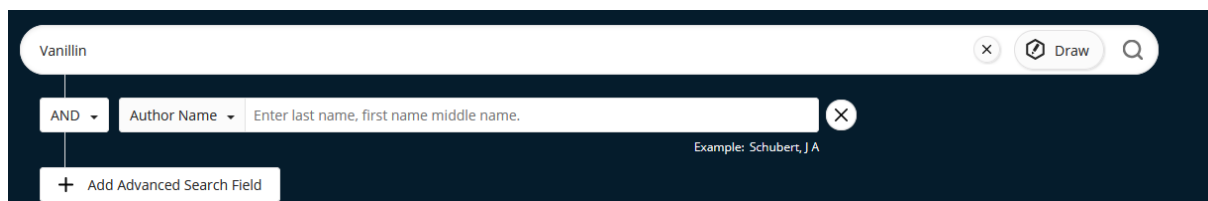
Il y a deux façons de trouver des **références bibliographiques** en utilisant des termes de recherche :

- **La recherche simple** interrogeable avec : Sujet de recherche/mot clé/concept, nom de la substance, numéro de registre CAS (n° attribués aux substances chimiques, **une référence mondiale**), notes et identifiant du document.
- **La recherche avancée** : Opérateur booléen (AND, OR, NOT) + valeurs du champ de recherche, nom de l'auteur, nom du journal, nom de l'organisation, titre, année de publication, concepts = mots clés du CAS.

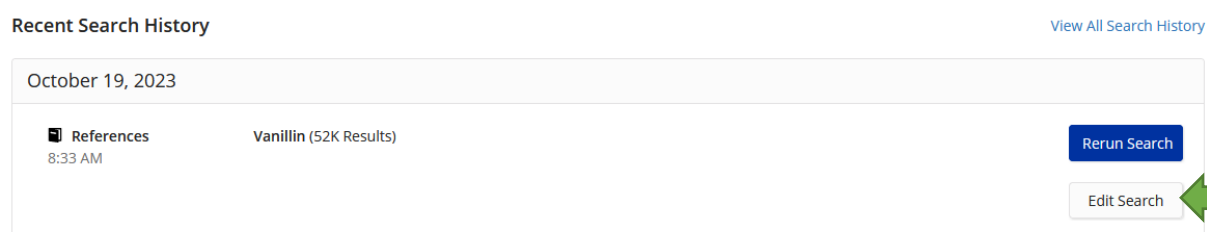


Vous pouvez utiliser le champ de recherche et les champs de recherche avancée séparément ou en combinaison.

Par exemple, je vais entrer la substance Vanilline dans le champ de recherche.



J'obtiens un grand nombre de résultats. Pour ajouter des champs de recherche avancée, il faut retourner sur la page d'accueil en cliquant en haut sur Return to Home. Puis dans la partie « Recent Search History », cliquez sur « Edit Search »



Jusqu'à cinquante champs de recherche avancée peuvent être utilisés simultanément

Dans l'exemple, ajout d'un champ « Author Name » : Verdier

Ajout d'un champ « Patent Identifier » (numéro de brevet) : WO/2019/020773

Cette recherche renvoie trois résultats contenant Vanillin qui ont également Verdier comme auteur et WO2019020773 comme identifiant de brevet.

2-Les opérateurs booléens

AND : Exige que les deux mots, phrases ou concepts soient présents dans le document.

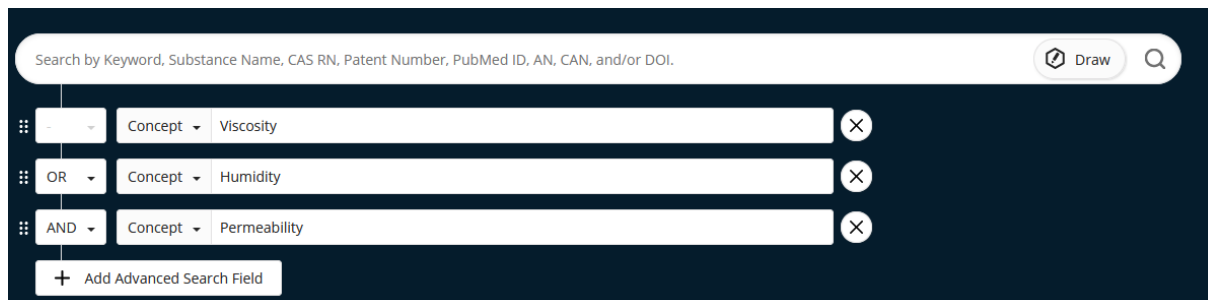
OR : Nécessite la présence de l'un ou l'autre ou des deux mots, phrases ou concepts

NOT: Exclut les documents d'un ensemble de réponses

« » : Recherche une expression exacte

* : Recherche tous les mots commençant par.... Par exemple : Plastil* va chercher plastilin, plastilys, plastilube, etc.

Exemple de recherche :

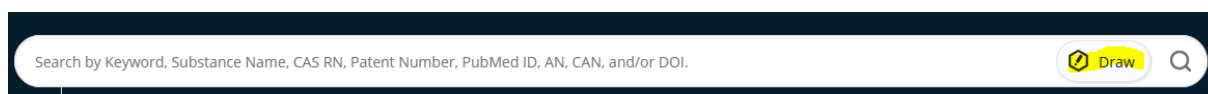


The screenshot shows a search bar with the text "Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI." and a "Draw" button. Below the search bar, there are three search fields, each with a "Concept" dropdown and a search term: "Viscosity", "Humidity", and "Permeability". The fields are connected by "OR" and "AND" operators. There is also a button labeled "+ Add Advanced Search Field".

Dans cet exemple on recherche des documents qui peuvent avoir pour concept : (Viscosity ou Humidity) et Permeability

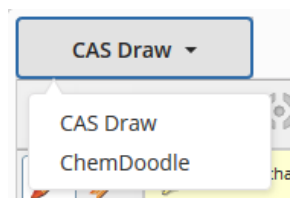
3-Trouver des références en utilisant une structure chimique

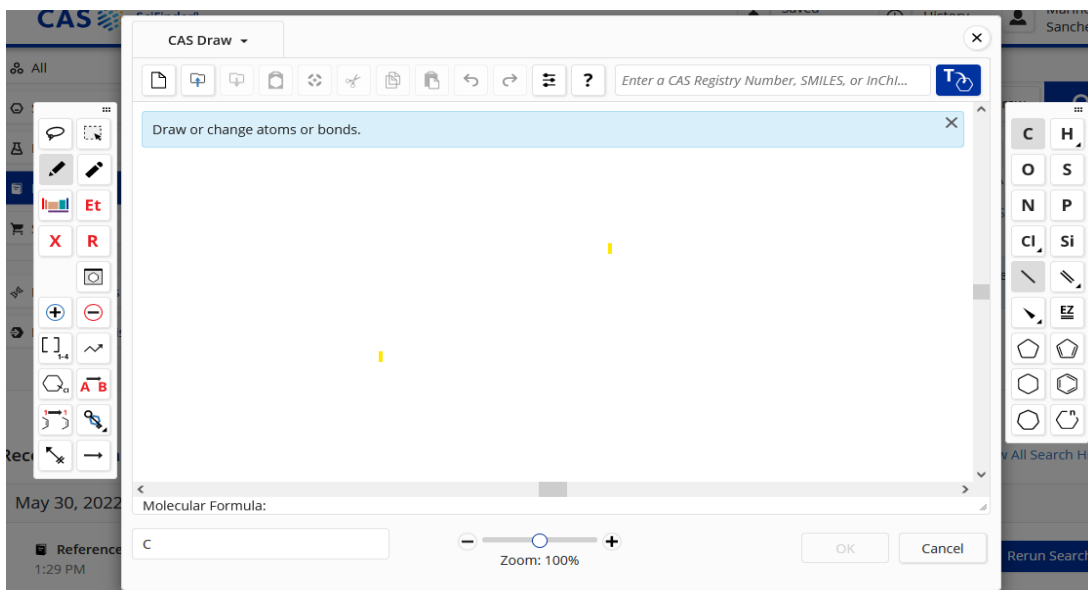
Pour trouver des références à partir d'une structure chimique, il faut d'abord dessiner ou télécharger une requête de structure. La structure chimique d'un système se réfère à la fois à sa topologie moléculaire, à sa géométrie (géométrie moléculaire ou groupe d'espace pour un cristal) et à sa structure électronique.



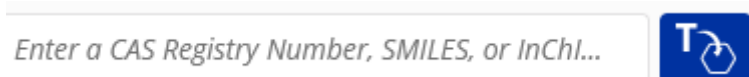
The screenshot shows the same search bar as above, but the "Draw" button is highlighted in yellow.

Cliquez sur le bouton Draw dans le champ de recherche pour ouvrir l'éditeur de structure. Deux « interfaces » sont disponibles : CAS Draw ou ChemDoodle.





Utiliser la barre de recherche pour dessiner une molécule plus rapidement



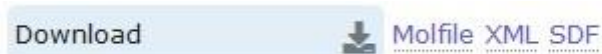
Exemple avec la molécule Ethanol, numéro CAS 64-17-5. Tapez 64-17-5

Ou importez le fichier d'une base externe comme le Chemical Entities of Biological Interest (ChEBI) après avoir trouvé la structure.



Attention, seuls les formats CXF et MOL sont compatibles avec l'éditeur de structure CAS Draw.

Il faut cliquer dans la ligne Download sur Molfile



et faire « enregistrer le fichier » (et non « ouvrir le fichier »)

Retourner dans Cas Draw pour importer le fichier en cliquant sur

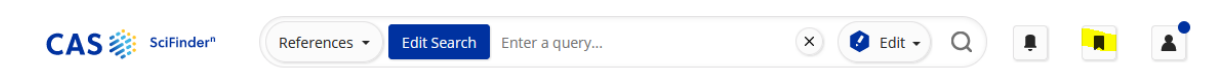


Cliquer sur « Choose file », sélectionner le fichier puis cliquer sur « Upload »

La recherche retrouvera les références qui incluent la structure dessinée, soit comme structure complète, soit comme sous-structure.

Pour effectuer une recherche, il est possible d'utiliser à la fois la recherche textuelle et l'éditeur de structure. Scifinder considérant **automatiquement** l'opérateur booléen AND.

L'icône signet permet d'accéder à l'historique de ses recherches depuis un an en cliquant sur « Save and History »



4-Références : les résultats

On peut filtrer les résultats après avoir cliqué sur « Filter by » ou « Exclude ». Ce dernier permet d'exclure les résultats correspondant au filtre sélectionné.

Possibilités de filtres pour réduire le nombre de résultats.

Document type : Journal = revues ; Patent = brevets ; Book = livres ; Review = compte-rendu ; Conference = colloque, conférence, congrès

Tri par langues : Les documents concernés ne sont pas dans la langue sélectionnée mais émanent d'auteur ou d'éditeurs du pays.

Substance role : Permet de trier par sous-thèmes

Scifinder donne la possibilité de récupérer les résultats des substances, des réactions et des citations (références) liés à tous les résultats de référence biblio :

Substances : toutes les substances indexées dans la référence textuelle

Réactions : Réactions indexées

Citing : Références citant les résultats

A template for the validation of DART-MS for qualitative seized drugs analysis

By: Sisco, Edward; Burns, Amber; Schneider, Elizabeth; Bobka, Laurel; Ikpeama, Ikenna
Forensic Chemistry (2022), 29, 100415 | Language: English, Database: CAplus


Direct anal. in real time mass spectrometry (DART-MS) is an increasingly employed tool for a wide range of forensic applications, including seized drug anal. A significant body of research surrounds DART-MS for the anal. of seized drugs and how it can be used to address many of the challenges caused by the increased presence of emerging drugs and novel psychoactive substances. A lack of available resources to help address validation, operation, training, and data interpretation needs is just one of the hurdles that laboratories face when adopting new technologies, such as DART-MS. To provide a...


[View More](#) ▾

Full Text ▾

Substances (15) Reactions (0) Citing (1) Citation Map

Save and Alert

Le téléchargement  des références est autorisé en plusieurs formats dont citation (.ris) et PDF

La liste peut également être exportée par email  ou sauvegardée sur le compte CAS

La sauvegarde, Save and Alert, propose une alerte périodique (hebdomadaire ou mensuelle) sur la requête.

Pour visualiser le texte intégral d'une référence, soit celle-ci est directement accessible sur SciFinder en cliquant sur View Source, soit on la récupère ailleurs en cliquant sur Full Text (sources via abonnements UCA ou en Open access, sources toujours indexées et de référence)

[View Source](#) Full Text ▾

Choisir une des options suivantes dans Full Text

Voir BU UCA : fait le lien avec notre catalogue, permet de voir la disponibilité du document dans les BU de Clermont-Ferrand.

DOI : Digital Object Identifier, lien vers le document intégral, si disponible sur internet

View all Sources : lien qui affiche toutes les possibilités d'accès au document.

Privilégiez « View all sources » car il y a ici toutes les infos utiles : titre, auteur, BU UCA et DOI ainsi qu'un lien lorsque ce dernier n'est pas disponible en intégral via la BU ou le DOI, il est possible de faire une demande de prêt entre bibliothèque grâce à : [Request source from your institution](#)

La demande est directement envoyée à la BU.

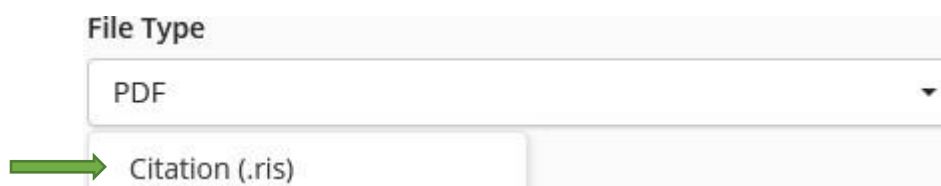
5-Références : document détaillé

Dans la fiche du document, accessible en cliquant sur le titre [en bleu](#) du document, se trouvent en dessous :

- Similar Reference : sources portant sur le même sujet
- Concepts : Les mots-clés de Scifinder pour décrire ce document
- Medline (facultatif) : mots clés de PubMed issus du thésaurus MESH
- Substances : Les substances contenues dans le document
- Cited document : documents citant l'article. En bleu lien vers le texte intégral.

Et sur le côté gauche de ce résultat, on a Source, qui est utile pour la bibliographie (titre, date, DOI, décrivant la source)

Si on clique sur l'icône télécharger, en haut à droite, dans le menu déroulant « File Type », on va choisir « Citation (ris) » ce qui permet en cliquant ensuite sur download de télécharger la fiche bibliographique dans Zotero.

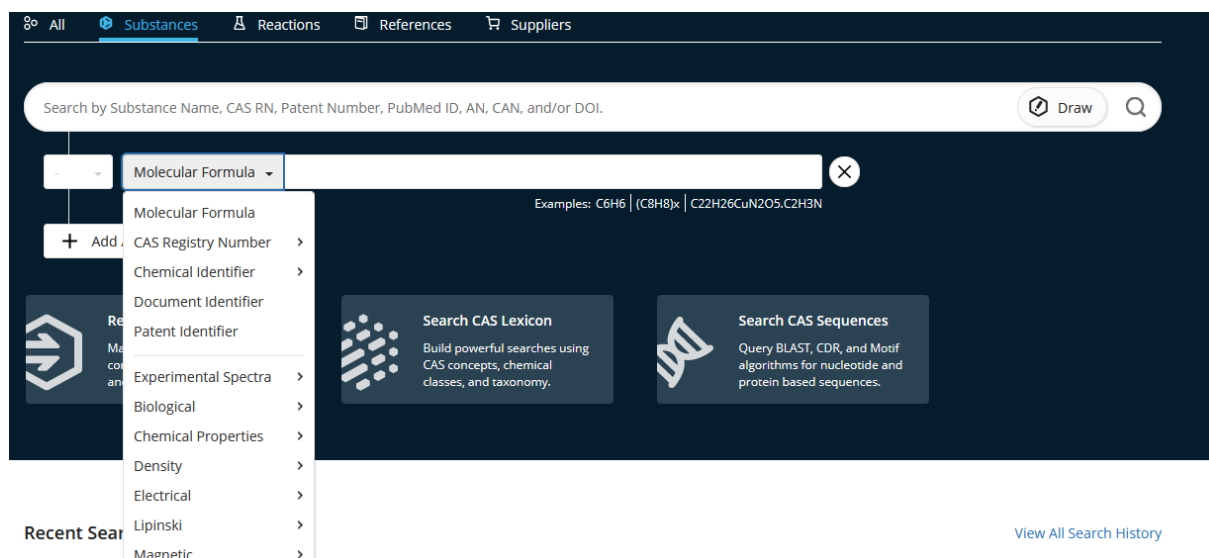


II-Les Substances et Réactions

1-Substances

Les substances chimiques désignent « les éléments chimiques et leurs composés tels qu'ils se présentent à l'état naturel ou tels qu'ils sont obtenus par tout procédé de production ». La recherche de substances se base sur le même principe que la recherche de références. On peut chercher une substance principale ou secondaire. L'utilisation de Draw est là aussi possible. On retrouve les deux types de recherches, simple et avancée.

- Champ de recherche : Nom de la substance, numéro de registre CAS, notes et identifiant du document.
- Champs de recherche avancée : Opérateur booléen (AND, OR, NOT) + valeurs du champ de recherche : formule moléculaire, spectres expérimentaux, catégories de propriétés suivantes : biologique/chimique, densité, électrique, Lipinski, magnétique, mécanique, optique et diffusion, liée à la structure et thermique.



La recherche s'effectue aussi de manière textuelle, par structure chimique ou les deux.

Par exemple, je rentre le numéro de brevet WO2010071837 dans le champ de recherche. J'obtiens 1 157 résultats.

Substances search for "WO2010071837"

References Reactions Suppliers Save and Alert

Filter Behavior
Filter by Exclude

Search Within Results

Reaction Role

- Product (1 115)
- Reactant (421)
- Reagent (140)
- Catalyst (112)
- Solvent (58)

Reference Role

1,157 Results Sort: Relevance View: Partial

1 67-56-1
CO
CH₄O
Methanol
662K References 3.6M Reactions 472 Suppliers

2 62-53-3
Nc1ccccc1
C₆H₇N
Aniline
168K References 166K Reactions 101 Suppliers

3 74-88-4
CI
CH₃I
Methyl iodide
129K References 290K Reactions 96 Suppliers

Ensuite, je rajoute quelques champs de recherche avancée. Par exemple

NOT Biological > Median Lethal Dose (mg/kg): >160

AND Thermal > Melting Point (°C): <220

All Substances Reactions References Suppliers

WO2010071837 Draw

AND Median Lethal Dose (mg/kg) >160
Search key property values only. Examples: 1.15 | <7.53 | >150 | 9.3 to 15 | 8.9e-2

AND Melting Point (°C) <220
Search key property values only. Examples: 1.15 | <7.53 | >150 | 9.3 to 15 | 8.9e-2

+ Add Advanced Search Field

La liste des résultats possède des similarités avec celle des références ; cependant les filtres diffèrent. Ainsi on trouve : Dessin de la réaction, les références (articles sur le sujet), les réactions et les disponibilités commerciales (Suppliers).

Quand on clique sur le numéro CAS de la référence, en haut de la fenêtre du résultat, on a une fenêtre qui s'ouvre avec toute une série de données : Rôle de réaction, Nombre de composants, Classe de substance, Isotopes, Métaux, Poids moléculaire...et les différents noms de la molécule avec « other names and identifiers »

| Key Physical Properties | Value |
|------------------------------|------------------------|
| Molecular Weight | 141.94 |
| Melting Point (Experimental) | -66.5 °C |
| Boiling Point (Experimental) | 42.5 °C |
| Density (Experimental) | 2.28 g/cm ³ |

[Experimental Properties](#) | [Spectra](#)

✓ Other Names and Identifiers

Tout comme les références, il est possible de sauvegarder une recherche, de l'envoyer par mail ou de la télécharger.

2-Réactions

Les réactions chimiques provoquent un changement de la nature chimique de la matière. Ex : combustion, corrosion, photosynthèse, fabrication de l'essence à partir du pétrole, fabrication d'engrais, de produits d'entretien, de médicaments, élaboration des métaux à partir des minerais (métallurgie), fabrication d'électricité par piles, etc.

La recherche s'effectue de la même manière que les substances. Elle peut être couplée avec une recherche par structure chimique.

ATTENTION : Il n'y a pas de recherche avancée pour les réactions

Affichage des résultats : Exemple avec Ethanol

Cette page permet d'obtenir plusieurs informations sur les réactions sélectionnées comme :

Les **références bibliographiques sur la réaction**, le **texte intégral** de celles-ci ou des informations sur les **substances** que composent la réaction. Et avec l'exemple ethanol, vient s'ajouter à côté de Full Text, la fenêtre «PatentPak», donnant accès au brevet (voir ci-dessous).

3-PatentPak : brevets

La nouvelle version de Scifinder donne accès à la fonction PatentPak. Cette fonction permet de consulter et/ou télécharger les brevets. **C'est un outil précieux**

PatentPak permet d'accéder à ~18 millions de brevets en texte intégral

Quand la fonction est disponible pour une référence/substance, le logo PatentPak est présent.

Exemple avec la recherche : « Process for the production of vanillin »

[Return to Home](#)

filter Behavior

Filter by Exclude

Document Type

Patent (1)

Conference (1)

Language

English (2)

Publication Year

1990 2000

No Min to No Max Apply

View Larger

Author

Organization

Publication Name

Concent

References (2) Sort: Relevance View: Partial Abstract

Substances Reactions Cited By

Based on your input, we have interpreted your query as a Reference Title. Is this correct? Yes No

1

Process for the production of vanillin

By: Muheim, Andreas; Muller, Bruno; Munch, Thomas; Wetli, Markus

European Patent Organization, EP885968 A1 1998-12-23 | Language: English, Database: CAplus

The present invention concerns a microbiol. process for the production of vanillin, comprising cultivating in a nutrient broth of a bacterium belonging to the order of the Actinomycetales, preferably of the family Streptomycetaceae, adding the substrate ferulic acid, wherein the substrate concentration in the nutrient broth is from ~5 to ~40 g/L in the fermentation broth, producing vanillin as the main reaction product of the biotransformation of ferulic acid and separating the biomass from the fermentation broth, and extracting the vanillin and, if desired, the byproduct guaiacol from the fer...

View More

PATENTPAK Full Text Substances (4) Reaction (1) Cited By (23) Citation Map

| Patent | Language | Kind Code | PatentPak Options |
|-----------|----------|-----------|---------------------|
| EP885968 | English | A1 | PDF PDF+ Viewer |
| ES2258290 | English | T3 | PDF |

tion of vanillin

Edited by Schreier, Peter; Winterhalter, Peter

Trois options peuvent apparaitre pour visualiser les brevets : PDF, PDF+ et Viewer.

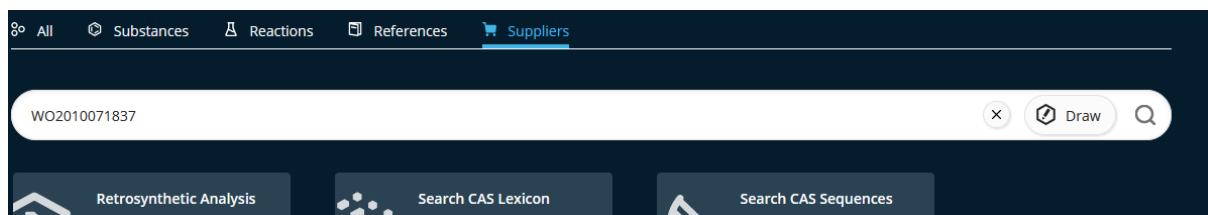
PDF +: Le texte intégral du brevet PDF avec les substances clés marquées par un numéro correspondant à une ligne du tableau à la fin du document. Le tableau indique le numéro d'enregistrement, le nom et la structure de la substance.

Viewer (**recommandé**) : Un rendu du brevet PDF avec les substances clés marquées et affichées dans le PatentPak Viewer dans la fenêtre à gauche. Ceci permet de naviguer plus rapidement dans le brevet.



Lorsque PatentPak n'est pas disponible, il est possible d'avoir accès au brevet en cliquant sur Full Text, puis Espacenet. (Brevets européens)

4-Les fournisseurs

Scifinder donne la possibilité de rechercher les fournisseurs des substances et de les acheter.



Après avoir sélectionné un fournisseur, vous pouvez accéder à ces informations détaillées (site, prix...), aux informations de la substance et au lien d'achat. On peut acheter en cliquant sur « [Order from supplier](#) ».

| | | | | |
|--|---|--------|--|--|
| 2 | | | | |
|  TCI America Research Chemicals United States |  121-33-5 Vanillin | 95-98% | Order From Supplier 25 g, USD 16 500 g, USD 63 Bulk | Maintained in stock Ships within 1 week |

Un autre site pour trouver des fournisseurs :

<https://www.sigmaaldrich.com/FR/fr>

III-Outils de veille

En cliquant sur « Saved », on peut sauvegarder des recherches et accéder à son historique de recherche

Il y a aussi une fonction « Save and Alerts » qui permet de se créer des alertes et choisir la fréquence de réception sur son mail.

L'icône signet permet d'accéder à l'historique de ses recherches depuis un an en cliquant sur « Save and History »

