

.periodicos.

CAS

Chemical Abstracts Service

help@cas.org

Tutorial de uso do



SCIFINDER[®]

A CAS SOLUTION



CAS[®]

A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

CAS is a division of the American Chemical Society.
Copyright 2020 American Chemical Society. All rights reserved.



SCIFINDER[®]

A CAS SOLUTION

Sumário

- [Quem é o CAS](#)
- [O que é o SciFinder](#)
- [Acesso ao SciFinder pelo Portal de Periódicos](#)
- [Primeiros passos no SciFinder](#)
- [Buscas por referências](#)
 - [Tópicos de pesquisa, refino, análise e categorização](#)
 - [Detalhamento de referências](#)
 - [Salvar, exportar e combinar resultados](#)
 - [Criar alertas](#)
- [Buscas por substâncias](#)
 - [Desenhando estruturas](#)
 - [Detalhamento de substâncias](#)
 - [Markush](#)
 - [Fórmulas moleculares, propriedades, nomes e CAS RN](#)
- [Buscas por reações](#)
 - [Desenhando reações](#)
 - [Detalhamento de reações](#)
 - [Reações similares](#)
- [Usando o SciPlanner](#)
- [Suporte](#)

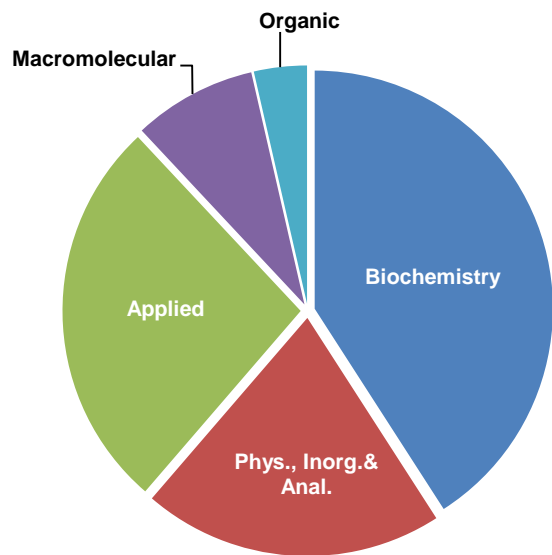
CAS – Chemical Abstracts Service



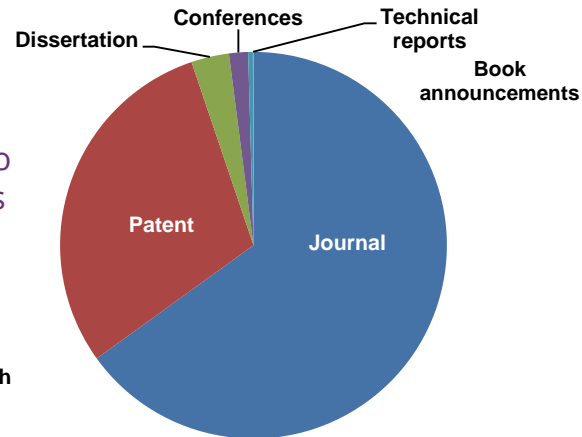
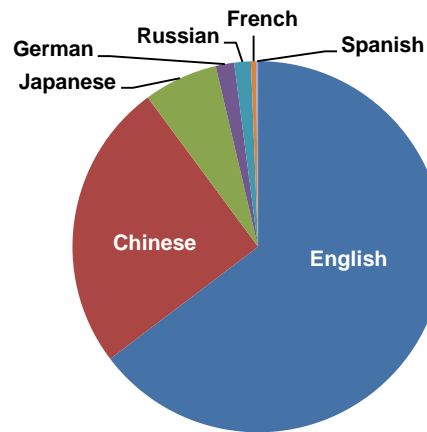
- Fundado em 1907 para monitorar, selecionar e indexar a literatura relacionada à química do mundo e torná-la disponível para a comunidade científica
- Chemical Abstracts – compêndio de resumos de artigos em química
- Com sede em Columbus, Ohio – EUA
- Aproximadamente 1.400 funcionários - incluindo cientistas do CAS, falando mais de 50 idiomas
- Milhares de revistas científicas e patentes de 63 autoridades de patentes são revisadas e indexadas
- Os clientes incluem mais de 2.300 universidades, muitas das principais corporações Fortune 500 e todos os principais escritórios de patentes

Cobertura de informação pelo CAS

Química e áreas correlatas
61% em campos não tradicionais

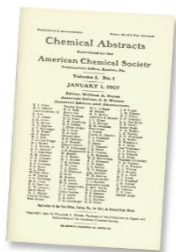


35% da informação não está contida em jornais



38% da informação não está em inglês

Linha do tempo do CAS



Chemical Abstracts
Compêndio de resumos de artigos científicos em química

1907



SciFinder
Plataforma online para acesso à coleção completa do CAS

Integração
Novos desafios, Inteligência artificial, big data, predições



1994

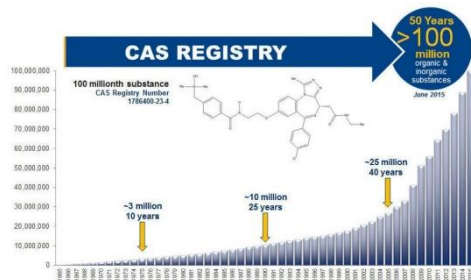
Hoje

1965

Número CAS
Indexação e registro de compostos químicos. Evita ambiguidades

Soluções científicas
Novos produtos e soluções customizadas para desafios científicos e tecnológicos

2015



SciFinder
A CAS SOLUTION

SciFinder, a plataforma de buscas por informações científicas

Conteúdo

- Referências Bibliográficas – cobertura do conteúdo CAPLUS e MEDLINE.
- Compostos Químicos
- Reações
- Propriedades e Espectros
- Informações Regulatórias
- Anterioridade em patentes
- Fornecedores

Cobertura

- Química
- Física
- Biologia
- Engenharias
- Ciências de Materiais
- Ciências da Saúde
- Farmácia
- Agricultura
- Alimentos
- Têxtil
- Nuclear
- Medicina
- Geologia
- Microbiologia
- ... e mais

Toda a indexação no SciFinder é manual, a curadoria da informação é feita por mais de 500 cientistas

Conteúdo do SciFinder – bases de dados acessíveis

CAPLus - referências	CAS REGISTRY - substâncias	CASREACT - reações
<ul style="list-style-type: none">> 50 milhões de referências (patentes, artigos, livros, casos clínicos)> 10 mil periódicos> Cobertura desde 1800- Patentes de 63 escritórios- Atualização diária	<ul style="list-style-type: none">> 150 milhões de substâncias (orgânicas, inorgânicas, materiais, PN,...)- Nomes e CAS RNs de substâncias> 8 bilhões de propriedades e espectros> 80 milhões de sequências- Substâncias relatadas desde 1802- Atualização diária	<ul style="list-style-type: none">> 120 milhões de reações indexadas (reagentes, produtos, catalisadores, solventes, condições, rendimentos)- Cobertura desde 1840- Detalhamento de procedimentos experimentais- Atualização diária
MARPAT - Markush	CHEMLIST - regulatórios	CHEMCATS - fornecedores
<ul style="list-style-type: none">- Estruturas Markush descritas em documentos de patente. A busca por estruturas genéricas traz estruturas moleculares como resultado> 1,5 milhões de estruturas Markush- Cobertura desde 1961- Atualização diária	<ul style="list-style-type: none">- Inventários de listas regulatórias sobre mais de 350 mil substâncias- Listas internacionais com descrições referenciais e país de origem- Atualização semanal	<ul style="list-style-type: none">- Catálogos de fornecedores com informações de mais de 70 milhões de substâncias- Fornecedores, quantidades, pureza, valores, links para direcionamento- Atualização semanal

Requisitos para acesso ao SciFinder via Portal de Periódicos da CAPES

1. Possuir um e-mail institucional (ex.: __@usp.br, __@ifsc.edu.br, __@ufpr.br)
2. Acessar de um IP autorizado: computador dentro de um campus universitário, VPN da Universidade, acesso remoto autorizado, acesso CAFe

Ética de uso

- O uso do SciFinder via CAPES deve ser exclusivo para pesquisas acadêmicas, não sendo permitido o uso por pessoas não autorizadas e nem para fins empresariais.
- O registro deve ser feito de maneira individual, não sendo aconselhada a criação de *logins* coletivos para laboratórios, bibliotecas e outras unidades.
- O acesso é de uso pessoal e intransferível.

Portal de

Periódicos

CAPES/MEC

Acesso livre



1. Acessar o Portal de Periódicos da CAPES a partir de um IP autorizado

Quentes Contato



BUSCA

Buscar assunto

Buscar periódico

Buscar livro

Buscar base

INSTITUCIONAL

Histórico

Missão e objetivos

Quem narra

TREINAMENTO:
USO DO SCIFINDER NA RECUPERAÇÃO
DE INFORMAÇÕES SOBRE COVID-19

17 abril 14h Vagas limitadas

BUSCA

Assunto

BUSCAR ASSUNTO

Insira DOI/PMID ou termo de busca

Enviar

Periódico

Livro

Base

É possível realizar a pesquisa em qualquer idioma, porém, sugere-se utilizar termos em inglês. Isto aumenta o número de resultados recuperados visto que a literatura científica é, em sua maioria, publicada em inglês.

DESTAQUES



SCIFINDER®
A CAS SOLUTION

Portal de

Periódicos

CAPES/MEC

Acesso livre



BUSCA

Buscar assunto

Buscar periódico

Buscar livro

Buscar base

INSTITUCIONAL

Histórico

Missão e objetivos

Quem narra

1.1. Caso você não esteja acessando via IP autorizado, você pode acessar todo o conteúdo do Portal de Periódicos via Acesso CAFe, a possibilidade oficial de acesso remoto da CAPES!

17
abril

14h

Vagas limitadas

BUSCA

Assunto

BUSCAR ASSUNTO

Insira DOI/PMID ou termo de busca

Enviar

Periódico

Livro

Base

É possível realizar a pesquisa em qualquer idioma, porém, sugere-se utilizar termos em inglês. Isto aumenta o número de resultados recuperados visto que a literatura científica é, em sua maioria, publicada em inglês.

DESTAQUES

National Geographic



SCIFINDER®
A CAS SOLUTION

Portal de

Periódicos

CAPES/MEC

Acesso livre

[Perguntas frequentes](#) | [Contato](#)



BUSCA

[Buscar assunto](#)

[Buscar periódico](#)

[Buscar livro](#)

[Buscar base](#)

INSTITUCIONAL

[Histórico](#)

[Missão e objetivos](#)

[Quem participa](#)

Acesso remoto via CAFe

Esta opção permite o acesso remoto ao conteúdo assinado do Portal de Periódicos disponível para sua instituição. Este serviço é provido pelas instituições participantes, ou seja, o nome de usuário e senha para acesso deve ser verificado junto à equipe de TI ou de biblioteca de sua instituição.

Para utilizar a identificação por meio da CAFe, sua instituição deve aderir a esse serviço provido pela Rede Nacional de Ensino e Pesquisa (RNP).



Digite a sigla ou o nome da instituição e a selecione ▾

[Enviar](#)

[Tutorial](#)

[Clique aqui para mais informações.](#)

1.2. Localize sua instituição de ensino na lista a seguir



Este acesso está mais seguro!
[Clique aqui](#) para saber mais.

- Não salvar meu login
- Remover qualquer permissão previamente
concedida dos meus atributos.

Login

1.3. Acesse todo o conteúdo com suas credenciais de acesso da sua Instituição de Ensino (exemplo)

Portal de

Periódicos

CAPE/MEC

Acesso por: UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

1.4. Agora o acesso ao Portal de Periódicos pode ser feito pelo IP autorizado da sua instituição de ensino



BUSCA

Buscar assunto

Buscar periódico

Buscar livro

Buscar base

INSTITUCIONAL

Histórico

Missão e objetivos

Quem participa

Documentos

TREINAMENTOS ON-LINE 2020

INSCRIÇÕES ABERTAS

O e-mail de confirmação será enviado uma semana antes do treinamento

BUSCA

Assunto

BUSCAR ASSUNTO

Insira DOI/PMID ou termo de busca

Enviar

Periódico

Livro

Base

É possível realizar a pesquisa em qualquer idioma, porém, sugere-se utilizar termos em inglês. Isto aumenta o número de resultados recuperados visto que a literatura científica é, em sua maioria, publicada em inglês.

[Busca avançada](#)

DESTAQUES

Nature

Should scientists infect healthy young people with



SCIFINDER®
A CAS SOLUTION



BUSCA

Buscar assunto

Buscar periódico

Buscar livro

Buscar base

INSTITUCIONAL

Histórico

Missão e objetivos

Quem participa

Documentos

ACERVO

NOTÍCIAS

SUPORTE

2. Selecionar o modo “Base” na busca e digitar “SciFinder”

BUSCA

Assunto

BUSCAR BASE

SciFinder web (CAS Chemical Abst

Enviar

Periódico

A B C D E F G H I J

Livro

K L M N O P Q R S T

Base

U V W X Y Z Lista Completa

Busca avançada | Visualizar

DESTAQUES

RBPG

A formação em pós-graduação na periferia da periferia

Notícias



BUSCA

Buscar assunto

Buscar periódico

Buscar livro

Buscar base

INSTITUCIONAL

Histórico

Missão e objetivos

Quem participa

Documentos

ACERVO

Buscar Base (Selecione uma das opções abaixo para buscar uma base)

Você buscou por "**Contém a palavra = SciFinder web (CAS Chemical Abstracts Service)**"

1 - 1 de 1 Base(s)

<<

Página: 1 de 1

Nome da base	Tipo	Ação
SciFinder web (CAS Chemical Abstracts Service)	Referenciais com resumos , Patentes	

1 - 1 de 1 Base(s)

<<

Página: 1 de 1

3. Clicar no link SciFinder web (CAS Chemical Abstracts Service)

- ACERVO
- NOTÍCIAS
- SUPORTE

Treinamentos







Materiais didáticos

Perguntas frequentes

Help desk

Dispositivos móveis

CENTRAL DE CONTEÚDOS

-  Apresentação
-  Áudio
-  Vídeo
-  Imagem
-  Planilha
-  Texto

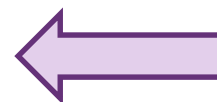
03-01-05
00h01



SciFinder - A CAS solution

O SciFinder é a plataforma de buscas por informações científicas e tecnológicas desenvolvida pelo CAS – Chemical Abstracts Service – que permite o acesso a informações relacionadas às áreas de Química Orgânica, Química Inorgânica, Físicoquímica, Química Analítica; Engenharia Química, Processamento de Petróleo, Tintas, Revestimentos; Engenharia Sanitária, Poluição do Ar e da Água, Tratamento de Resíduos; Ciências Ambientais; Farmacologia, Toxicologia; Medicina Experimental; Biologia Celular e Molecular, Genética, Genoma, Proteoma; Bioquímica, Microbiologia, Enzimologia; Alimentos; Física, Química e Engenharia de Materiais, Polímeros, Elastômeros, Ligas, Cerâmica e etc. No SciFinder é possível realizar a busca por três maneiras distintas: referências, substâncias e reações químicas. A busca por referências é feita em documentos de patentes, artigos científicos, teses, livros, casos clínicos, relatórios, compêndios de eventos, entre outros. A busca por substâncias pode ser feita por estruturas químicas, nomes de substâncias, números CAS, fórmulas moleculares e propriedades e a busca reações químicas traz resultados sobre reagentes, produtos, solventes, catalisadores e condições de reação. O SciFinder também traz informações regulatórias, sobre atividade biológica, moléculas alvo, patentes contendo estruturas Markush, anterioridade e catálogos de fornecedores de materiais de partida. Para utilizar a base é necessário registrar-se, e este registro pode ser realizado pelo seguinte link: <http://buscador-periodicos-capes.gov.br.ez22.periodicos.capes.gov.br/scifinder.htm> informar o seu e-mail institucional que será registrado como o seu nome de usuário para acesso à Scifinder. Para mais informações: <https://www-cas.ez22.periodicos.capes.gov.br/products/scifinder> O acesso à plataforma se dá por meio do seguinte link: <https://scifinder-cas.ez22.periodicos.capes.gov.br/>

4. Para registrar-se na plataforma, clicar no primeiro link



SciFinder®
A CAS SOLUTION

Welcome to User Registration for SciFinder[®]

Click Next to begin registration as a new user.

Next >>



5. Clicar em “Next >>”

License Agreement

SciFinder[®] is for Educational use ONLY.

Commercial use of your University account is strictly prohibited.

By clicking the Accept button, **I agree to the terms below:**

1. I am a current faculty, staff member or officially registered student of the University.
2. I will use SciFinder[®] ONLY for my own academic research.
3. I will not use SciFinder[®] for commercial research or for organizations other than my University.
4. I will not share my unique username and password with any other individual.
5. I will not use an automated script.
6. I may store no more than 5,000 records in electronic form at any one time.

Violations of these terms may result in your University losing SciFinder[®] access.

Contact your University's Key Contact for assistance or CAS Customer Care (help@cas.org) for commercial licensing information.



6. Aceitar as condições de uso em “Accept”

Copyright © 2019 American Chemical Society. All Rights Reserved. | 京ICP备13047075号-3

Registration Information

Please provide the following information:
(**bold*** = required)

Contact Information

First Name*:

Last Name*:

Email*:

Confirm Email*:

Phone Number:

Fax Number:

Area of Research*:

Job Title*:

Username and Password

Username*: [Tips](#)

Password*:

Re-enter Password*:







7. Preencher os campos para criação do registro.
Os campos em negrito são de preenchimento obrigatório!

Lembre-se que o e-mail a ser cadastrado deve ser o institucional!

- ACERVO
- NOTÍCIAS
- SUORTE

- Treinamentos
- Materiais didáticos
- Perguntas frequentes
- Help desk
- Dispositivos móveis

CENTRAL DE CONTEÚDOS

-  Apresentação
-  Áudio
-  Vídeo
-  Imagem
-  Planilha
-  Texto

03-01-05
00h01

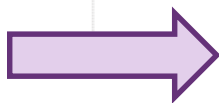


SciFinder - A CAS solution



O SciFinder é a plataforma de buscas por informações científicas e tecnológicas desenvolvida pelo CAS – Chemical Abstracts Service – que permite o acesso a informações relacionadas às áreas de Química Orgânica, Química Inorgânica, Físicoquímica, Química Analítica; Engenharia Química, Processamento de Petróleo, Tintas, Revestimentos; Engenharia Sanitária, Poluição do Ar e da Água, Tratamento de Resíduos; Ciências Ambientais; Farmacologia, Toxicologia; Medicina Experimental; Biologia Celular e Molecular, Genética, Genoma, Proteoma; Bioquímica, Microbiologia, Enzimologia; Alimentos; Física, Química e Engenharia de Materiais, Polímeros, Elastômeros, Ligas, Cerâmica e etc. No SciFinder é possível realizar a busca por três maneiras distintas: referências, substâncias e reações químicas. A busca por referências é feita em documentos de patentes, artigos científicos, teses, livros, casos clínicos, relatórios, compêndios de eventos, entre outros. A busca por substâncias pode ser feita por estruturas químicas, nomes de substâncias, números CAS, fórmulas moleculares e propriedades e a busca reações químicas traz resultados sobre reagentes, produtos, solventes, catalisadores e condições de reação. O SciFinder também traz informações regulatórias, sobre atividade biológica, moléculas alvo, patentes contendo estruturas Markush, anterioridade e catálogos de fornecedores de materiais de partida. Para utilizar a base é necessário registrar-se, e este registro pode ser realizado pelo seguinte link: <http://buscador-periodicos-capes.gov.br.ez22.periodicos.capes.gov.br/scifinder.htm> informar o seu e-mail institucional que será registrado como o seu nome de usuário para acesso à Scifinder. Para mais informações: <https://www-cas.ez22.periodicos.capes.gov.br/products/scifinder> O acesso à plataforma se dá por meio do seguinte link: <https://scifinder-cas.ez22.periodicos.capes.gov.br/>

8. Agora basta voltar à página do SciFinder no Portal de Periódicos, e acessar o SciFinder pelo terceiro link!



Sign In

Username

Password

Remember me
(Do not use on a shared computer)

Sign In

[Forgot Username or Password?](#)

By using SciFinder[®], you agree to the
[License Agreements and Policies](#)

New to SciFinder?

[Learn more about gaining access to SciFinder.](#)

News & Updates

Welcome to SciFinder!

Apply to be a 2019 CAS Future Leader!

Join an elite group of Ph.D. students and postdoctoral researchers from around the world. Network with peer scientists and renowned leaders and showcase the expertise behind the 2019 program by April 7,

power of n.

Society is committed to with the resources they ally, build knowledge, around the world, and stay developments in the chemical

9. O acesso sempre deve ser feito pelo link fornecido no Portal de Periódicos. Você pode favoritar essa página, entrar com seu login e senha e disfrutar das opções de busca do SciFinder!

Primeiros passos no SciFinder

CAS Solutions



Preferences | SciFinder Help | Sign Out

Welcome Gabriel Ferreira

Explore

Saved Searches

SciPlanner

Menu fixo: acesse a qualquer momento as modalidades de buscas, seus resultados salvos e o SciPlanner

REFERENCES

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

SUBSTANCES

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

REACTIONS

- Reaction Structure

REFERENCES: RESEARCH TOPIC

Examples:

The effect of antibiotic residues on dairy products

Photocyanation of aromatic compounds

Search

Advanced Search

Barra de buscas: sua função e forma variam de acordo com o tipo de busca realizada

As suas **buscas salvas** mais recentes, assim como os **alertas** criados e atualizações ficam listadas na página inicial

SAVED ANSWER SETS

You have no saved answer sets.

Learn how to:
[Create Saved Answer Sets](#)

[Import](#)

KEEP ME POSTED

You have no profiles.

Learn how to:
[Create Keep Me Posted](#)

Primeiros passos no SciFinder

CAS Solutions



Preferences | SciFinder Help | Sign Out

Welcome Gabriel Ferreira

Explore

Saved Searches

SciPlanner

REFERENCES

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

SUBSTANCES

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

REACTIONS

- Reaction Structure

REFERENCES: RESEARCH TOPIC

Examples:

The effect of antibiotic residues on dairy products

Photocyanation of aromatic compounds

Search

Advanced Search

Há 3 modos de buscas:
Referências,
Substâncias e Reações,
com a possibilidade de
realizar buscas
específicas e avançadas

- Preferências: alterar informações da conta, alertas e remover duplicatas do Medline e CApus

SAVED ANSWER SETS

You have no saved answer sets.

Learn how to:
[Create Saved Answer Sets](#)

[Import](#)

KEEP ME POSTED

You have no profiles.

Learn how to:
[Create Keep Me Posted](#)



REFERENCES

Research Topic

Author Name

Company Name

Document Identifier

Journal

Patent

Tags

SUBSTANCES

Chemical Structure

Markush

Molecular Formula

Property

Substance Identifier

REACTIONS

Reaction Structure

Modos de buscas - Referências

Referências

- Research topic: permite a busca usando frases de tópicos de pesquisa, sem a necessidade de truncamento e booleanos.
- Author name: busca por autores – nome e sobrenome
- Company name: busca pela produção de organizações, empresas, laboratórios, universidades, agências governamentais
- Document identifier: DOI, ISSN, ISBN
- Journal: referência completa ou não de periódicos
- Patent: referência completa ou não de patentes
- Tags: etiquetas personalizadas, como as das redes sociais

Busca por tópico de pesquisa

CAS Solutions ▾



Preferences | SciFinder Help ▾ | [Sign Out](#)

Welcome Gabriel Ferreira

Explore ▾

Saved Searches ▾

SciPlanner

REFERENCES

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

SUBSTANCES

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

REACTIONS

- Reaction Structure

REFERENCES: RESEARCH TOPIC ?

Examples:

The effect of antibiotic residues on dairy products

Photocyanation of aromatic compounds

Search

Advanced Search

As buscas podem ser realizadas utilizando frases completas, preposições.

Procure fazer uma busca inicial abrangente, mesmo havendo possibilidade de fazer a busca avançada.

As mesmas funcionalidades da busca avançada são encontradas em filtros de resultados.

SAVED ANSWER SETS ?

You have no saved answer sets.

Learn how to:
[Create Saved Answer Sets](#)

[Import](#)

KEEP ME POSTED ?

You have no profiles.

Learn how to:
[Create Keep Me Posted](#)

Busca por tópico de pesquisa

[Advanced Search](#) Always Show

Publication Years

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

Document Types

- | | |
|---|-------------------------------------|
| <input type="checkbox"/> Biography | <input type="checkbox"/> Historical |
| <input type="checkbox"/> Book | <input type="checkbox"/> Journal |
| <input type="checkbox"/> Clinical Trial | <input type="checkbox"/> Letter |
| <input type="checkbox"/> Commentary | <input type="checkbox"/> Patent |
| <input type="checkbox"/> Conference | <input type="checkbox"/> Preprint |
| <input type="checkbox"/> Dissertation | <input type="checkbox"/> Report |
| <input type="checkbox"/> Editorial | <input type="checkbox"/> Review |

Languages

- | | |
|----------------------------------|-----------------------------------|
| <input type="checkbox"/> Chinese | <input type="checkbox"/> Japanese |
| <input type="checkbox"/> English | <input type="checkbox"/> Polish |
| <input type="checkbox"/> French | <input type="checkbox"/> Russian |
| <input type="checkbox"/> German | <input type="checkbox"/> Spanish |
| <input type="checkbox"/> Italian | |

Author

Last Name *

First

Middle

Company

Examples:

Minnesota Mining and Manufacturing

DuPont

Há ainda a opção de realizar uma **busca avançada** para tópicos de pesquisa

- Faixas de anos de publicação
- Tipos de documentos
- Idiomas
- Autores
- Organização

 REFERENCES

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

 SUBSTANCES

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

 REACTIONS

- Reaction Structure

REFERENCES: RESEARCH TOPIC 

Examples:

The effect of antibiotic residues on dairy products

Photocyanation of aromatic compounds

 Search Advanced Search

Busca por uma frase simples,
utilizando dois conceitos: **copper**
e **cancer treatment**

SAVED ANSWER SETS 

You have no saved answer sets.

Learn how to:
[Create Saved Answer Sets](#)[Import](#)KEEP ME POSTED 

You have no profiles.

Learn how to:
[Create Keep Me Posted](#)

Explore

Saved Searches

SciPlanner

Research Topic "copper for cancer treatment "

REFERENCES

[Select All](#) [Deselect All](#)

0 of 5 Research Topic Candidates Selected

References

<input type="checkbox"/>	3 references were found containing " copper for cancer treatment " as entered.	3
<input type="checkbox"/>	878 references were found containing the two concepts " copper " and " cancer treatment " closely associated with one another.	878
<input type="checkbox"/>	3667 references were found where the two concepts " copper " and " cancer treatment " were present anywhere in the reference.	3667
<input type="checkbox"/>	2109640 references were found containing the concept " copper ".	2109640
<input type="checkbox"/>	855886 references were found containing the concept " cancer treatment ".	855886

O SciFinder tenta entender o que você quer como resultado e te dá opções de escolha:

- referências que contêm a frase em sua forma literal, como digitada
- Referências que contêm os conceitos proximamente associados um ao outro, no mesmo parágrafo, frase
- Referências que contêm os conceitos, não necessariamente próximos
- Referências que contêm apenas o primeiro conceito
- Referências que contêm apenas o segundo conceito

Mas o que são conceitos no SciFinder?

- A indexação no SciFinder é feita de maneira manual, ou seja, nossos mais de 500 cientistas leem as referências e indexam, manualmente, os tópicos científicos que são relevantes na publicação.
- Por isso o SciFinder é uma ferramenta feita por cientistas, para cientistas! A indexação é feita do ponto de vista do leitor.
- Por exemplo, se a sua busca contém o termo **cancer**, os resultados encontrados no SciFinder trarão, além de **cancer**, os seus sinônimos e variações como **carcinoma**, **sarcoma**, **neoplasm**, **tumor**, entre outros. O mesmo ocorre para nomes de substâncias e outros termos de busca.
- Dessa maneira, a busca no SciFinder é mais **completa**, não sendo necessário preocupar-se com sinônimos e variações.

[Explore](#) ▾[Saved Searches](#) ▾[SciPlanner](#)

Research Topic "copper for cancer treatment "

REFERENCES ⓘ[Select All](#) [Deselect All](#)

2 of 5 Research Topic Candidates Selected

	References
<input checked="" type="checkbox"/> 3 references were found containing " copper for cancer treatment " as entered.	3
<input checked="" type="checkbox"/> 878 references were found containing the two concepts " copper " and " cancer treatment " closely associated with one another.	878
<input type="checkbox"/> 5667 references were found where the two concepts " copper " and " cancer treatment " were present anywhere in the reference.	5667
<input type="checkbox"/> 2109640 references were found containing the concept " copper ".	2109640
<input type="checkbox"/> 855886 references were found containing the concept " cancer treatment ".	855886

[Get References](#)

Para essa busca vamos escolher os tópicos que trazem resultados mais precisos. Mas essa decisão depende do tipo de busca que será feita, se mais abrangente ou precisa.

Explore

Saved Searches

94 duplicates were automatically removed.

Duplicatas encontradas tanto no Medline como no CAPlus são removidas automaticamente

Save Print Export

Research Topic "copper for cancer treatment" > references (784)

REFERENCES

Get Substances Get Reactions Get Related Citations View Only CHEMZENT Tools

Analyze Refine Categorize

Sort by: Accession Number

0 of 784 References Selected

Analyze by:

Author Name

Chen Wei 14

Dou Q Ping 14

Ma Lun 9

Goldenberg David M 8

Brewer George J 6

Marzano Cristina 5

Coucouvannis Dimitri 4

Gandin Valentina 4

1. **Pharmaceutical composition of oxitinib and application thereof [Machine Translation].**

Quick View PATENTPAK

By Wang, Chunlei; Ye, Hongchun
 From Faming Zhuanyi Shenqing (2020), CN 111053780 A 20200424. | Language: Chinese, Database: CAPLUS

[Machine Translation of Descriptors]. The invention aims to solve the problems of drug resistance, large toxic and side effects and the like of epidermal growth factor receptor tyrosine kinase inhibitors (EGFR-TKIs) in non-small cell lung **cancer** (NSCLC) **treatment**, and provides a pharmaceutical compn. for targeted **treatment** of lung **cancer**, wherein the active ingredients of the pharmaceutical compn. are quercetin metal complex and Ao Xi tinib or pharmaceutically acceptable salts thereof, and The quercetin metal complex is selected from one of quercetin **copper**, quercetin manganese and quercetin zinc. The pharmaceutical compn. provided by drug resistance, high curative effect and fewer side effects.

2. **Pharmaceutical composition of afatinib and application thereof [Machine Translation].**

Quick View PATENTPAK

By Wang, Chunlei; Ye, Hongchun
 From Faming Zhuanyi Shenqing (2020), CN 111053776 A 20200424. | Language: Chinese, Database: CAPLUS

[Machine Translation of Descriptors]. The invention aims to solve the problems of drug resistance, large toxic and side effects and the like of epidermal growth factor receptor tyrosine kinase inhibitors (EGFR-TKIs) in non-small cell lung **cancer** (NSCLC) **treatment**, and provides a pharmaceutical compn. for targeted **treatment** of lung **cancer**, wherein the active ingredients of the pharmaceutical compn. are quercetin metal complex and afatinib or pharmaceutically acceptable salts thereof, and the quercetin metal complex is selected from quercetin **copper**, quercetin manganese and quercetin zinc. The pharmaceutical compn. provided by the invention has better water solv. low drug

É possível **salvar** os resultados de buscas localmente, **imprimir** em PDF ou **exportar** (formatos .ris, .txt, .rtf ou .pdf)

Títulos, informação bibliográfica e resumos das referências

Explore

Saved Searches

SciPlan

Links de acesso rápido às **substâncias, reações e citações indexadas** no conjunto de resultados

Save

Print

Export

Research Topic "copper for cancer treatment" > references (784)

REFERENCES

Get Substances | Get Reactions | Get Related Citations | View Only CHEMZENT | Tools

Create Keep Me Posted Alert | Send to SciPlanner

Analyze | Refine | Categorize

Sort by: Citing References

Display Options

Analyze by:

Author Name

Chen Wei 14

Dou Q Ping 14

Ma Lun 9

Goldenberg David M 8

Brewer George J 6

Marzano Cristina 5

Coucouvannis Dimitri 4

Gandin Valentina 4

Ordene os resultados por:

- Número de entrada na base de dados
- Nome do primeiro autor
- Número de referências que citantes
- Ano de publicação
- Título

É possível criar **alertas de buscas**: assim que um novo documento que obedecer aos critérios da sua busca for adicionado ao SciFinder você receberá um aviso em seu e-mail. Deixa o SciFinder te atualizar sobre o estado da arte da sua pesquisa!

0 of 784 References Selected

 1. **Copper in diseases and treatment**
 Quick View | Other Sources
 By Tisato, Francesco; Marzano, Cristina
 From Medicinal Research Reviews (2010)

A review. **Copper** is found in many biological systems and proteins involved in energy metabolism and functions of **copper**-biol. molecules. **Copper** regulated homeostatic mechanisms are involved in the pathogenesis of Menkes disease (MD), which is a particular into the understanding of intracellular trafficking and distribution of **copper** at mol. levels. Therapies based on removal of **copper** excess by means of specific **copper** chelators are currently effective in **treating** MD and WD, res attention for the investigation and **treatment** of various neurodegenerative disorders such as Alzheimer, Parkinson and an essential co-factor for angiogenesis. Moreover, elevated levels of **copper** have been found in many types of human brain. On these basis, the employment of **copper** chelators has been reported to be of therapeutic value in the **treatment** of mol. More recently, mixts. of **copper** chelators with **copper** salts have been found to act as efficient proteasome inhibitors and apoptosis inducers, specifically in **cancer** cells. Moreover, following the worldwide success of platinum(II) compds. in **cancer** chemotherapy, several families of individual **copper** complexes have been studied as potential antitumor agents. These investigations, revealing the occurrence of mechanisms of action quite different from platinum drugs, head toward the development of new anticancer metalodrugs with improved specificity and decreased toxic side effects.

Research Topic "copper for cancer treatment" > references (784)

REFERENCES

Analyze Refine Categorize

Analyze by:

Author Name

Chen Wei 14

Dou Q Ping 14

Ma Lun 9

Goldenberg David M 8

Brewer George J 6

Marzano Cristina 5

Coucouvani Dimitri 4

Gandin Valentina 4

Ferramentas de **análise** - tenha uma visão geral sobre os principais tópicos indexados:

- Autores
- Número CAS
- Título de seção do CA
- Companhia – Organização
- Base de dados
- Tipo de documento
- Termo de indexação
- Conceitos CA
- Nome do periódico
- Idioma
- Ano de publicação
- Termos suplementares

Analyze Refine Categorize

Analyze by:

CAS Registry Number

Author Name

CAS Registry Number

CA Section Title

Company-Organization

Database

Document Type

Index Term

CA Concept Heading

Journal Name


Language


Publication Year

Supplementary Terms


chem., growth and development. It is important for the function of several enzymes like superoxide dismutase, ascorbate oxidase, and tyrosinase. The major function of copper is to produce free radicals. Therefore, copper requires tightly regulated levels. Overload or deficiency of copper is associated, respectively, with Wilson disease (WD) and Menkes disease. These disorders have provided useful insights in the field of copper homeostasis and in the treatment of these disorders. Therapies based on metal supplementation with copper histidine or lysine are used in the treatment of WD and resp. Copper chelation therapy is now attracting much attention as Alzheimer, Parkinson and Creutzfeldt-Jakob. An excess of copper appears to be found in many types of human cancers, including prostate, breast, colon, lung, and pancreatic cancer. The therapeutic value in the treatment of several types of cancers as anti-angiogenic agents, as well as their ability to act as efficient proteasome inhibitors and apoptosis inducers, specifically in cancer chemotherapy, several families of individual copper complexes have been studied as potential drugs of action quite different from platinum drugs, head toward the development of new

[Explore](#)
[Saved Searches](#)
[SciPlanner](#)
[Save](#)
[Print](#)
[Export](#)


 Research Topic "copper for cancer treatment" > **references (784)**
REFERENCES
 Get Substances


 Get Reactions

 Get Related Citations

 View Only CHEMZENT

 Tools

 Create Keep Me Posted Alert

 Send to SciPlanner

[Analyze](#) | [Refine](#) | [Categorize](#)

 Sort by: [Citing References](#)
[Display Options](#)
 0 of 784 References Selected

Page: 1 of 16

Refine by:

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

Research Topic

Examples:

The effect of antibiotic residues on dairy products
Photocyanation of aromatic compounds

Também é possível refinar os resultados de busca por:

- Tópico de pesquisa
- Autores
- Nome da companhia
- Tipo de documento
- Ano de publicação
- Idioma
- Base de dados

dox chem., growth and development. It is important for the function of several enzymes such as cytochrome oxidase, superoxide dismutase, ascorbate oxidase, and tyrosinase. The major concern is the direct or indirect production of free radicals. Therefore, **copper** requires tightly controlled levels. Overload or deficiency of **copper** is associated, respectively, with Wilson disease (WD) and Menkes disease. Research on **copper** homeostasis and its role in human health and disease has provided useful insights in the field of **copper** homeostasis and in the treatment of **copper** deficiency and excess. Therapies based on metal supplementation with **copper** histidine or glycine are effective in **treatment** of WD and Menkes disease, respectively. **Copper** chelation therapy is now attracting much attention because of its potential to act as efficient proteasome inhibitors and apoptosis inducers, specifically in **cancer** chemotherapy, several families of individual **copper** complexes have been studied as potential agents of action quite different from platinum drugs, head toward the development of new

SciPlanner

Categoryize

1. Select a heading and category.

Category Heading	Category
All	Substances (51322)
General chemistry	Searched substances (2)
Biotechnology	Topics (49)
Synthetic chemistry	
Biology	
Physical chemistry	
Genetics & protein chemistry	
Technology	
Polymer chemistry	
Analytical chemistry	
Catalysis	
Environmental chemistry	

2. Select index terms of interest.

Index Terms	Selected Terms
Page: 1 of 514 Select All Deselect All <input type="checkbox"/> Antitumor agents 520 <input type="checkbox"/> Human 435 <input type="checkbox"/> Neoplasm 332 <input type="checkbox"/> Copper 301 <input type="checkbox"/> Homo sapiens 228 <input checked="" type="checkbox"/> Mammary gland neoplasm 153 <input type="checkbox"/> Drug delivery systems 126 <input type="checkbox"/> Lung neoplasm 118 <input type="checkbox"/> Prostate gland neoplasm 107 <input type="checkbox"/> Zinc 102 <input type="checkbox"/> Ovary neoplasm 90 <input type="checkbox"/> Iron 88 <input type="checkbox"/> Cisplatin 84 <input type="checkbox"/> Proteins 79	Click 'x' to remove the category from 'Selected Terms' All > Substances (1 Terms)

All > Substances > 1 Index Term(s) Selected

A ferramenta de **categorização** permite um refinamento sistemático em 3 níveis:

- Categoria da informação científica
- Subcategoria
- Termos indexados

Detalhes de uma referência

CAS Solutions

SCIFINDER
A CAS SOLUTION

Preferences | SciFinder Help | Sign Out

Welcome Gabriel Ferreira

Explore | Saved Searches | SciPlanner

Research Topic "copper for cancer treatment" > references (784) > Organic copper complexes as a

REFERENCE DETAIL

Get Substances | Get Related Citations | Link to Other Sources

Accesso às **substâncias** indexadas, **referências citadas e que citam o documento** e acesso à **fonte do documento original**

Link | Save | Print | Export

Send to SciPlanner

Return

Previous | Next

6. Organic **copper** complexes as a new class of proteasome inhibitors and apoptosis inducers in human **cancer** cells

By: Daniel, Kenyon G.; Gupta, Puja; Harbach, R. Hope; Guida, Wayne C.; Dou, Q. Ping

Here we report that org. **copper** complexes can potently and selectively inhibit the chymotrypsin-like activity of the proteasome in vitro and in vivo. Several **copper** compds., such as NCI-109268 and bis-8-hydroxyquinoline **copper**(II) [Cu(8-OHQ)₂], can inhibit the chymotrypsin-like activity of purified 20S proteasome. In human leukemia cells, proteasome inhibition occurs within 15 min after **treatment**, followed by apoptosis. Neither proteasome inhibition nor apoptosis occurs in non-transformed, immortalized human natural killer cells under the same **treatment**. Furthermore, proteasome inhibition and apoptosis induction were detected in prostate **cancer** cells **treated** with the ligand 8-OHQ alone following pre-**treatment** with **copper**(II) chloride. None of these events occurred in cells **treated** with **copper**(II) chloride alone, 8-OHQ alone (without growth in **copper**-enriched media), or nickel(II) chloride pre-**treatment** followed by 8-OHQ. Furthermore, we found that **copper**-mediated inhibition of purified 20S proteasome cannot be blocked by a reducing agent and that org. **copper** compds. do not generate hydrogen peroxide in the cells, suggesting that proteasome inhibition and apoptosis induction are not due to **copper**-mediated oxidative damage of proteins. Our results suggest that certain types of org. ligands could bind to tumor cellular **copper**, forming potent proteasome inhibitors and apoptosis inducers at **copper** concns. found in tumor tissues.

Indexing

Pharmacology (Section1-6)

Título, informação bibliográfica e resumo, com termos de buscas marcados em rosa

QUICK LINKS

0 Tags, 0 Comments

SOURCE

Biochemical Pharmacology
Volume67
Issue6
Pages1139-1151
Journal
2004
CODEN:BCPCA6
ISSN:0006-2952
DOI:10.1016/j.bcp.2003.10.031



Detalhes de uma referência (cont.)

Indexing

Pharmacology (Section1-6)

Section cross-reference(s): 29

Concepts

Antitumor agents

Human

Oxidative stress, biological

Apoptosis

Leukemia

Prostate gland, **neoplasm**

org. **copper** complexes as a new class of proteasome inhibitors and apoptosis inducers in human **cancer** cells

Detalhamento da indexação: **sessão** do Chemical Abstracts e **conceitos**. Os **termos indexados** aparecem como hiperlinks e os **termos suplementares** estão descritos nas caixas

Substances

[148-24-3](#) 8-Hydroxyquinoline, biological studies 🔍

org. **copper** complexes as a new class of proteasome inhibitors and apoptosis inducers in human **cancer** cells

Pharmacological activity; Reactant; Therapeutic use; Biological study; Uses; Reactant or reagent

[52-67-5DP](#) D-Penicillamine, copper2+ complexes 🔍

[15158-11-9DP](#) Copper2+, biological studies, complexes with D-penicillamine 🔍

[94955-60-9P](#) 🔍

org. **copper** complexes as a new class of proteasome inhibitors and apoptosis inducers in human **cancer** cells

Pharmacological activity; Synthetic preparation; Therapeutic use; Biological study; Preparation; Uses

[3251-23-8](#) Cupric nitrate 🔍

[3251-29-4](#) Cuprous nitrate 🔍

[4367-08-2](#) Cupric cyanide 🔍

[7447-39-4](#) **Copper**(II) chloride, biological studies

[7681-65-4](#) **Copper** iodide (CuI) 🔍

[7758-89-6](#) **Copper** chloride (CuCl) 🔍

[7758-98-7](#) Cupric sulfate, biological studies 🔍

[7787-70-4](#) Cuprous bromide 🔍

CODEN:BCPCAB
ISSN:0006-2952
DOI:10.1016/j.bcp.2003.10.031

COMPANY/ORGANIZATION

College of Medicine, H. Lee Moffitt Cancer Center & Research Institute, Departments of Biochemistry & Molecular Biology and Interdisciplinary Oncology, Drug Discovery Program University of South Florida Tampa, FL, USA

ACCESSION NUMBER

2004:190822
CAN140:417428
CAPLUS

PUBLISHER

Elsevier Science B.V.

LANGUAGE

Substâncias indexadas, com **números CAS** (CAS RN) como hiperlinks, termos suplementares e **visualização rápida**



Detalhes de uma referência (cont.)

Tags

0 Tags | [Edit Tags](#)

Comments

0 Comments Sort by: [Newer First](#) | [Older First](#)

No comments

Add Comment: Maximum of 1024 characters per comment; 50 comments per reference.

Save

Characters Remaining: **1024**

[◀ Previous](#) | [Next ▶](#)

[Contact Us](#) | [Legal](#)

Copyright © 2020 American Chemical Society. All Rights Reserved. | 京ICP备13047075号-3

Você pode adicionar **tags** e **comentários** aos documentos do SciFinder, criando uma **biblioteca pessoal** dentro da plataforma.

Essa é uma das vantagens de ter um **login e senha próprios** para uso do SciFinder!

Voltando aos resultados de busca, podemos salvar o conjunto de referências

3) Suas buscas salvas podem ser acessadas nessa aba, consultadas e até combinadas com outros resultados anteriores

1) **Salve** seus resultados de busca localmente

2) Adicione um título e comentários pertinentes

Combinando resultados de buscas

SciFinder®
A CAS SOLUTION

Preferences | SciFinder Help | Sign Out

Welcome Gabriel Ferreira

Explore | Saved Searches | SciPlanner

Research Topic "copper for cancer treatment" > references (786)

SAVED ANSWER SETS ?

Combine Answer Sets

2 of 2 Reference An

SAVED SEARCHES

Saved Answer Sets

Keep Me Posted

History

☑ Cobre para tratament
Research Topic "copp

☑ Antivirais - artigos de
Research Topic "antiv

Combine Answer Sets

Select an option for combining the two selected saved answer sets:

- Combine** Include all references from both sets
- Intersect** Include only references that appear in both sets
- Exclude** Include only answers from Cobre para tratamento de câncer that are not in Antivirais - artigos de 2018 até hoje
- Exclude** Include only answers from Antivirais - artigos de 2018 até hoje that are not in Cobre para tratamento de câncer

Edit [Link](#) Saved May 7, 2020

Edit [Link](#) Saved May 7, 2020

Você pode combinar resultados de buscas, gerando um novo conjunto de resultados.

Vá em *Saved searches*, selecione os resultados que deseja combinar e como será essa combinação:

- **Combine:** traz os resultados que estão em ambos os conjuntos, similar ao operador **OR**
- **Intersect:** traz os resultados comuns aos dois conjuntos – operador **AND**
- **Exclude:** traz apenas os resultados exclusivo de um dos conjuntos, excluindo os presentes no outro – operador **NOT**

Criando alertas de resultados

Create Keep Me Posted Profile

Some steps cannot be included in this profile.

Title: * Required
Cobre para tratamento de câncer

Description:
Characters Remaining: 1024

Duration
Expires On: May 07, 2021 [Change](#)

Frequency
Send updates once every **Week**
 Exclude previously retrieved references.

Search:
Explore references by research topic: **copper for cancer treatment**
Candidates Selected:
References which contain "copper for cancer treatment" as entered contain the two concepts "copper" and "cancer treatment" closely associated with one another

[Create](#) [Cancel](#)

[Create Keep Me Posted Alert](#)

1) Crie alertas de buscas e o SciFinder te avisará assim que uma nova referência for adicionada à plataforma e obedecer aos seus critérios de busca

2) Dê um título ao alerta, escolha a frequência de aviso (semanal ou mensal) e até quando você deseja receber os alertas (de 1 a 12 meses). Você os receberá no seu e-mail cadastrado



Busca por autores

CAS Solutions ▾



Preferences | SciFinder Help ▾ [Sign Out](#)

Welcome Gabriel Ferreira

Explore ▾

Saved Searches ▾

SciPlanner

Author Name "Alder, D"

REFERENCES

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

SUBSTANCES

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

REACTIONS

- Reaction Structure

REFERENCES: AUTHOR NAME ?

Last Name * First Middle

Look for alternate spellings of the last name

Search

Na busca por autores, é obrigatório como termo o último nome. Aqui buscaremos a produção de Otto Diels

SAVED ANSWER SETS ?

Cobre para tratamento de câncer

Antivirais - artigos de 2018 até hoje

[View All](#) | [Import](#)

KEEP ME POSTED ?

You have no profiles.

Learn how to:
[Create Keep Me Posted](#)

Busca por autores

Explore

Saved Searches

SciPlanner

Save

Print

Export

Author Name "Diels, Otto" > references (297)

REFERENCES

Get Substances

Get Reactions

Get Related Citations

View Only CHEMZENT

Tools

Create Keep Me Posted Alert

Send to SciPlanner

Analyze Refine Categorize

Sort by: Citing References

Display Options

0 of 297 References Selected

Page: 1 of 6

Analyze by:

Author Name

Diels Otto 285

Alder Kurt 39

Diels O 10

Abderhalden Emil 8

Gadke Willy 7

Meyer Reinhard 6

Blumberg Paul 4

Okada Harukichi 4

Reese Johannes 4

1. **Syntheses in the hydroaromatic series. I. Addition of "diene" hydrocarbons**

Quick View Other Sources

By Diels, Otto; Alder, Kurt

From Justus Liebig's Annalen der Chemie (1928), 460, 98-122. | Language: Unavailable, Database: CAPLUS

The cyclopentadienequinone of Albrecht (Ann. 348, 31(1906)) is considered to be an endo-methylene deriv. of a hydrogenated α -naphthoquinone (I); reduction with Zn and AcOH gives the dihydro deriv. (II), m. 34-5°; catalytic reduction of II gives nearly quant. endo-methylene-1,4-diketo-5,8-decahydronaphthalene (III), m. 56-7° (dioxime, m. 217-8° (decompn.)); further reduction with amalgamated Zn and fuming HCl gives endo-methylene-1,4-decalin (IV), b_{15} 84-5°, b_{22} 91°. Reduction of 25 g. of tetrahydrodi[cyclopentadienequinone] with amalgamated Zn and HCl (m. 80°, this yields di-[endo-methylene]-1,4,5,8-octahydro-tetrahydroanthraquinone, m. 102-3°. Oxidation with CrO₃ gives quant. cis-endo-methylene-3,6- Δ^1 -tetrahydrophthalic anhydride, m. 160-1°; A. 194-5°, VI and VII in C₈H₈ give quant. cis- Δ^1 -tetrahydrophthalic anhydride, m. 191°. $\Delta^{1,2}$ -Dihydrobenzene and VII give the compd. (I). Reduction of I with cyclopentadiene gives methyl-1-endo-methylene-3,6- Δ^1 -tetrahydrophthalic carboxylic-1-acetic anhydride, m. 53-4°; the free acid, m. 101-2°. Reduction of I with cyclopentadiene gives methyl-1-endo-methylene-2,5-hexahydrobenzoic acid, m. 101-2°. Condensation with cyclohexanone gives the compd. C₂₂H₂₆O, pale yellow, m. 105°. Reduction gives endo-methylene-2,5-hexahydrobenzaldehyde, b_{25} 75-6 (semicarbazone, m. 141-2°; condensation product with cyclohexanone, C₂₂H₃₀O, m. 101-2°). Acrolein and butadiene, heated 1 hr. at 100°, give Δ^3 -tetrahydrobenzaldehyde, b_{13} 51-2 (semicarbazone, m. 153-4°), which is catalytically reduced to hexahydrobenzaldehyde.

Os filtros de referências podem ser utilizados. Na análise por nome de autores é possível verificar que Kurt Alder é o autor que mais publicou com Otto Diels. De fato, estamos vendo os trabalhos que deram origem à reação de Diels-Alder!

Busca por organizações

CAS Solutions



Preferences | SciFinder Help | Sign Out

Welcome Gabriel Ferreira

Explore

Saved Searches

SciPlanner

Author Name "Diels, Otto" > references (297)

REFERENCES

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

SUBSTANCES

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

REACTIONS

- Reaction Structure

REFERENCES: COMPANY NAME

Examples:
3M
DuPont

Search

SAVED ANSWER SETS

Cobre para tratamento de câncer

Antivirais - artigos de 2018 até hoje

[View All](#) | [Import](#)

KEEP ME POSTED

You have no profiles.

Learn how to:
[Create Keep Me Posted](#)

Podem ser realizadas buscas pelo nome completo da entidade, por sua sigla, parte do nome, etc. A indexação manual permite trazer todas as variações. São indexados nomes de empresas privadas, indústrias, universidades, institutos, laboratórios, etc.



Busca por organizações

Company Name "Universidade Federal Amazonas" > references (1833)

REFERENCES

Get Substances Get Reactions Get Related Citations Tools

Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

Analyze Refine Categorize

Sort by: Citing References

Display Options

0 of 1833 References Selected

Page: 1 of 37

Analyze by:

Company-Organization

Universidade Federal Do Amazonas, Brazil 435

Federal University of Amazonas, Brazil 121

Universidade Federal do Amazonas (UFAM), Brazil 49

Universidade Federal do Amazonas UFAM, Brazil 36

Federal University of Amazonas (UFAM), Brazil 16

Federal University of Amazonas UFAM, Brazil 11

1. Establishment and cryptic transmission of Zika virus in Brazil and the Americas

Quick View Other Sources

By Faria N R; Theze J; Kraemer M U G; Hill S C; Raghvani J; du Plessis L; Pybus O G; Faria N R; Franco L C; Silva S P; et al
From Nature (2017), 546(7658), 406-410. | Language: English, Database: MEDLINE

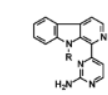
Transmission of Zika virus (ZIKV) in the Americas was first confirmed in May 2015 in northeast Brazil. Brazil has had the highest number of reported ZIKV cases worldwide (more than 200,000 by 24 December 2016) and the most cases associated with microcephaly and other birth defects (2,366 confirmed by 31 December 2016). Since the initial detection of ZIKV in Brazil, more than 45 countries have reported cases, but the origin and epidemic history of ZIKV in microcephaly. Here we address this issue by using a laboratory that travelled across northeast Brazil. Our epidemiological data yield an estimate that before the first detection of ZIKV in the Americas, the role of northeast Brazil as a recipient region. The role of northeast Brazil in the estimates of the basic reproduction number.

Na busca por trabalhos da Universidade Federal do Amazonas, é possível analisar as diversas formas de se representar o nome da UFAM, de acordo com registros em artigos, patentes e demais documentos.

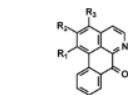
2. A Pyrimidine- β -carboline and Other Alkaloids from *Annona foetida* with Antileishmanial Activity

Quick View Other Sources

By Costa, Emmanoel V.; Pinheiro, Maria Lucia B.; Xavier, Clahildek M.; Silva, Jefferson R. A.; Amaral, Ana Claudia F.; Souza, Afonso D. L.; Barison, Andersson; Campos, Francinete R.; Ferreira, Antonio G.; Machado, Gerzia M. C.; et al
From Journal of Natural Products (2006), 69(2), 292-294. | Language: English, Database: CAPLUS



N-hydroxyannonomontine (1) (R = OH)
Annomontine (R = H)



O-methylmoschatoline (3) (R₁ = R₂ = R₃ = OCH₃)
Liriodenine (R₁ = R₂ = OCH₃, R₃ = H)

Bioassay-guided fractionation of the bark ext. of *Annona foetida* afforded a new antileishmanial pyrimidine- β -carboline alkaloid, N-hydroxyannonomontine (1), together with the previously reported annomontine (2), O-methylmoschatoline (3), and liriodenine (4). The structure of compd. 1 was established on the basis of extensive 1D and 2D NMR and MS analyses. This is the third reported pyrimidine- β -carboline-type alkaloid and is particularly important for *Annona* genus chemotaxonomy. In addn., all compds. exhibit in vitro antileishmanial activity against promastigote forms of *Leishmania braziliensis*. Compds. 2 and 4 showed better activity than compds. 1 and 3 against *L. braziliensis*. Compd. 2 was not active against *L. guyanensis*.

Busca por referências específicas

REFERENCES: JOURNAL ?

Journal Name *

Volume Issue Sta

Title Word(s)

Examples: Antibiotic

Author Last Name * First

Publication Year

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

REFERENCES: PATENT ?

Patent Number

Examples: WO 2001011365

Assignee Name

Examples: Cancer Research Technol

Inventor Last Name * First Middle

Publication Year

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

É possível buscar por referências específicas de periódicos e de documentos de patente

Modos de buscas - Substâncias

SUBSTANCES

Chemical Structure
Markush
Molecular Formula
Property
Substance Identifier

Substâncias

- Chemical Structure: Desenho de estruturas químicas ou fragmentos
- Markush: Estruturas genéricas Markush, o resultado são documentos de patente
- Molecular Formula: traz os isômeros que compartilham uma determinada fórmula molecular
- Property: busca por moléculas que apresentam determinadas propriedades experimentais ou teóricas
- Substance Identifier: busca por nome, número CAS, InChI, SMILES

Busca por estruturas químicas

The screenshot displays the SciFinder Structure Editor interface. On the left, there is a navigation menu with sections for REFERENCES, SUBSTANCES, and REACTIONS. The main workspace shows a chemical structure of a quinoline ring with a chlorine atom at the 6-position and a 2-(diethylamino)ethyl group at the 3-position. The interface includes a toolbar with drawing tools, a top status bar with a search icon and zoom level, and a right-hand panel with search options. The search options include 'Exact search', 'Substructure search' (which is selected), and 'Similarity search'. The chemical formula $C_{18}H_{26}ClN_3$ and the molecular weight 319.88 are displayed at the bottom of the editor.

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

OK **Cancel**

$C_{18}H_{26}ClN_3$ 319.88

No SciFinder é possível fazer buscas por estruturas químicas a partir de um editor de desenho. Veja a seguir as principais funcionalidades desse editor.

Busca por estruturas químicas - funcionalidades



Structure Editor



Símbolo	Significado
New	Novo quadro em branco
Import	Importa estruturas previamente salvas em .xcf ou .mol
Add to editor	Importa estruturas moleculares ao digitar o número CAS, SMILES ou InChi
Export	Exporta a estrutura desenhada em .xcf ou .mol
Save as template	Salva a estrutura como um template na sua aba de templates
Cut	Cortar
Copy	Copiar
Paste	Colar
Undo	Desfazer
Redo	Refazer
Preferences	Preferências de ligações

Busca por estruturas químicas – funcionalidades (cont.)



Símbolo	Significado
Pencil	Desenha o elemento químico ou o grupo que está selecionado
Eraser	Apaga átomos, ligações e fragmentos
Atom	Seleciona átomos abrindo uma tabela periódica
Shortcut menu	Menu de radicais (ex.: Me, Et, Pr, COOH, NH ₂ , entre outros)
Variable	Substitui átomos definidos por grupos variáveis.
R-groups	Substitui átomos definidos por grupos R definidos pelo usuário, podendo ser combinações entre radicais, átomos, variáveis.
Repeating groups	Define unidades de repetição
Variable attachment points	Define pontos variáveis de ligação, tanto em anéis, como em cadeias
Chain	Desenha cadeias carbônicas
Templates	Janela de templates previamente selecionados pelo SciFinder, incluindo estruturas mais complexas, além dos templates definidos pelo usuário

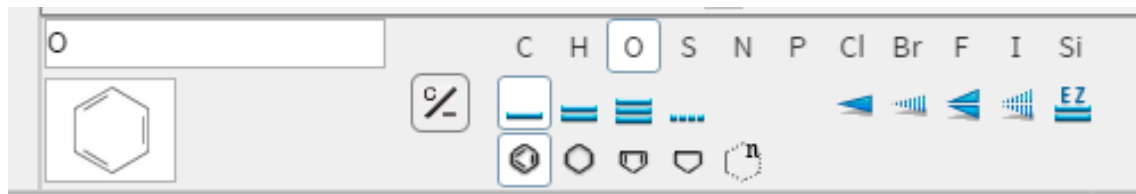
Busca por estruturas químicas – funcionalidades (cont.)



Símbolo	Significado
Marquee	Seleção retangular
Lasso	Seleção livre
Lock ring fusion or formation	Previne formação de anéis adicionais ou de fusões em anéis nos resultados de busca
Lock atoms	Bloqueia substituições adicionais nos átomos selecionados nos resultados de busca
Rotate fragments	Rotaciona fragmentos
Flip fragments	Gira fragmentos em 90°
Add positive charge	Adiciona carga positiva ao fragmento
Add negative charge	Adiciona carga negativa ao fragmento

Busca por estruturas químicas – funcionalidades (cont.)

Símbolo	Significado
Barra de elementos	Permite inserir o símbolo do elemento químico que será adicionado à estrutura
Elementos mais comuns	C, H, O, N, S, P, Si e halogênios
Reset to carbon/single bond	Transforma qualquer átomo em C e qualquer ligação em simples
Chemical bonds	Opção de ligações simples, dupla, tripla e não específica
Stereo bonds	Opção de ligações simples e duplas para dentro e para fora do plano, além de indicação de isomeria EZ
Rings	Anéis previamente selecionados: benzeno, ciclohexano, ciclopentadieno, ciclopentano e qualquer anel hidrocarboneto de n membros



Busca por estruturas químicas – funcionalidades (cont.)

Símbolo	Significado
Drawing editor	<u>Structure</u> – traz substâncias como resultado <u>Reaction</u> – traz reações químicas onde a estrutura desenhada está presente <u>Markush</u> – traz patentes que contenham a estrutura desenhada contemplada em uma estrutura Markush
Get substances that match your query using	<u>Exact Search</u> – traz compostos que sejam exatamente representados pela estrutura desenhada <u>Substructure Search</u> – traz compostos que contenham a estrutura desenhada como fragmento ou componente de um composto <u>Similarity Search</u> – traz estruturas similares à desenhada, em diferentes porcentagens de similaridade, de acordo com as métricas de Tanimoto

Drawing Editor:

- Structure
- Reaction
- Markush

Get substances that match your query using:

- Exact search
- Substructure search
- Similarity search

Retornando à busca por estruturas...



Explore ▾

Saved Searches ▾

SciPlanner

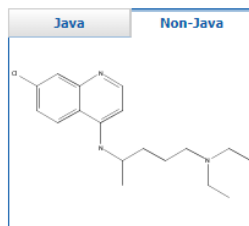
Chemical Structure substructure > substances (2315)

REFERENCES

Research Topic
Author Name
Company Name
Document Identifier
Journal
Patent
Tags

SUBSTANCES: CHEMICAL STRUCTURE

Structure Editor:



Click image to change structure or view detail.

Import CXF

Search Type:

- Exact Structure
 Substructure
 Similarity

Show precision a

ChemDraw
Launch a SciFinder
ChemDraw Learn

Search

Advanced Search

Always Show

Advanced Search

Always Show

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

A busca pode ser realizada diretamente ou com opções de busca avançada



Estruturas Químicas

Chemical Structure substructure > substances (2315)

SUBSTANCES

Get References

Get Reactions

Get Commercial Sources

Tools

Create Keep Me Posted Alert

Send to SciPlanner

Analyze Refine

Sort by: Relevance

Display Options

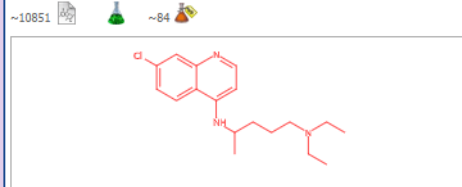
0 of 2315 Substances Selected

Page: 1 of 155

O resultado da busca por estruturas são compostos que contenham o fragmento desenhado: moléculas, sais, detalhamento estereoquímico, marcação isotópica, entre outros

Show More

1. 54-05-7

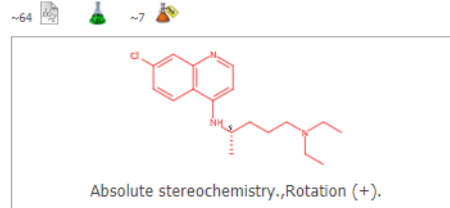


$C_{18}H_{26}ClN_3$
1,4-Pentanediamine, *N*-(7-chloro-4-quinolinyl)-*N*',*N*'-diethyl-

Key Physical Properties

Regulatory Information
Spectra
Experimental Properties

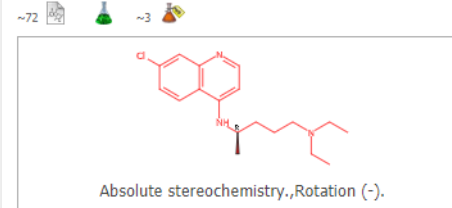
2. 58175-86-3



$C_{18}H_{26}ClN_3$
1,4-Pentanediamine, *N*-(7-chloro-4-quinolinyl)-*N*',*N*'-diethyl-, (4*S*)-

Key Physical Properties

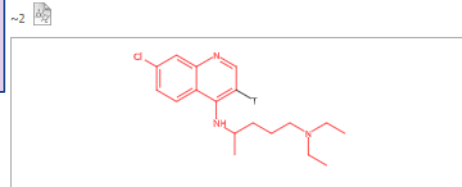
3. 58175-87-4



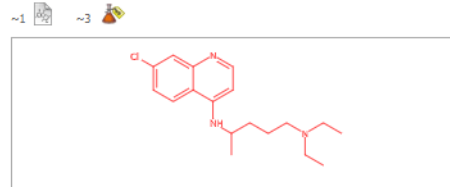
$C_{18}H_{26}ClN_3$
1,4-Pentanediamine, *N*-(7-chloro-4-quinolinyl)-*N*',*N*'-diethyl-, (4*R*)-

Key Physical Properties

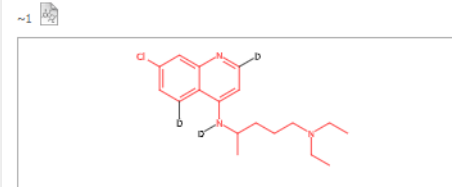
4. 157554-13-7



5. 68827-59-8



6. 216965-99-0



SCIFINDER®
A CAS SOLUTION

Estruturas Químicas

Chemical Structure substructure > substances (2315)

SUBSTANCES ?

Get References Get Reactions Get Commercial Sources Tools

Create Keep Me Posted Alert Send to SciPlanner

Analyze Refine

Sort by: Relevance

Analyze by:

Substance Role

Prophetic in Patents 827

Preparation 686

Biological Study 674

Uses 322

Properties 224

Reactant or Reagent 91

Analytical Study 41

Process 40

Formation, Nonpreparative 26

Occurrence 7

Show More

Ordenamento dos resultados:

- Relevância
- CAS RN
- Número de referências
- Número de fontes comerciais
- Massa molar
- Fórmula molecular

Links para **referências** que citam esses compostos, **reações** onde eles participam, suas **fontes comerciais** e opção de **combinar** conjuntos de resultados

Podem ser criados **alertas** e enviar resultados para o **SciPlanner**

Absolute stereochemistry.,Rotation (+).

Absolute stereochemistry.,Rotation (-).

C₁₈ H₂₆ Cl N₃

1,4-Pentanediamine, N'-(7-chloro-4-quinolinyl)-N,N'-diethyl-

(4-

R)-

Key Physical Properties

Análise dos resultados:

- Indicadores de bioatividade
- Disponibilidade comercial
- Elementos
- Disponibilidade de reações
- Função da substância
- Indicadores alvo

C₁₈ H₂₆ Cl N₃

1,4-Pentanediamine, N'-(7-chloro-4-quinolinyl)-N,N'-diethyl-

(4-

R)-

Key Physical Properties

6. 216965-99-0



Estruturas Químicas

Chemical Structure substance > substances (2315)

SUBSTANCES

Get References

Get Reactions

Get Commercial Sources

Tools

Create Keep Me Posted Alert

Send to SciPlanner

Analyze Refine

Sort by: Relevance

Display Options

0 of 2315 Substances Selected

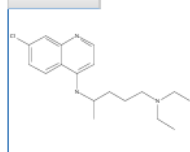
Page: 1 of 155

Refine by:

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

Structure Editor:

Java Non-Java



Click image to change structure or view detail.

Search type: **Substructure**

Only retrieve substances that:

Have references

Também é possível **refinar** a busca, limitando os resultados. Critérios:

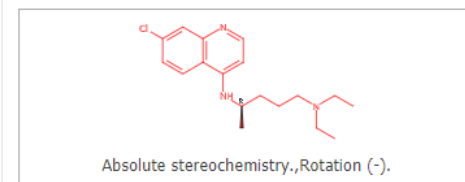
- Estrutura química: refinar pelo novo fragmento desenhado
- Contendo isótopos
- Contendo metais
- Disponibilidade comercial
- Propriedades disponíveis
- Referências disponíveis
- Vizinhanças atômicas

1. 54-05-7

2. 58175-86-3

3. 58175-87-4

~72

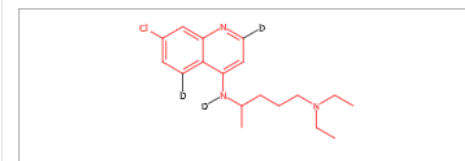


C₁₈ H₂₆ Cl N₃
1,4-Pentanediamine, N'-(7-chloro-4-quinolinyl)-N',N'-diethyl-, (4R)-

Key Physical Properties

6. 216965-99-0

~1



SCIFINDER
A CAS SOLUTION

Detalhamento da substância

CAS Solutions

SCIFINDER
A CAS SOLUTION

Preferences | SciFinder Help | Sign Out

Explore | Saved Searches | SciPlanner

Link | Save | Print | Export

Chemical Structure substructure > substances (2315) > 54-05-7

SUBSTANCE DETAIL

Get References | Get Reactions | Get Commercial Sources

Return

1. CAS Registry Number 54-05-7

~ 10.851 ~ 84

C₁₈ H₂₆ Cl N₃
1,4-Pentanediamine, *N*-(7-chloro-4-quinolinyl)-*N*,*N*-diethyl-

Molecular Weight
319.87

Melting Point (Experimental)
Value: 87-92 °C

Boiling Point (Experimental)
Value: 212-214 °C | Condition: Press: 0.2 Torr

Density (Predicted)
Value: 1.111±0.06 g/cm³ | Condition: Temp: 20 °C Press: 760 Torr

pKa (Predicted)
Value: 10.47±0.25 | Condition: Most Basic Temp: 25 °C

Other Names
Quinoline, 7-chloro-4-[[4-(diethylamino)-1-methylbutyl]amino]- (8Cl)
N-(7-Chloro-4-quinolinyl)-*N*,*N*-diethyl-1,4-pentanediamine
(±)-Chloroquine

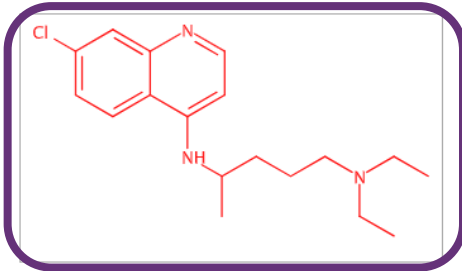
Essa é a página que abre quando você clica sobre o número CAS de uma substância

Links para referências, reações e fontes comerciais da substância

Desenho da estrutura quando disponível

Propriedades físico-químicas, número CAS, fórmula molecular e outros nomes

- Geração de **link** para compartilhamento
- **Salvar** localmente
- **Imprimir** em PDF
- **Exportar** em .pdf, .rtf, .xls, .txt, .akx e .mol (apenas em contas não acadêmicas)



Detalhamento da Substância - continua

Expand All | Collapse All

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

Além das propriedades já descritas, o **SciFinder** traz diversas outras informações indexadas, como espectros, indicadores de bioatividade, moléculas alvo, informações regulatórias e outras que serão detalhadas a seguir

◀ Previous | Next ▶

Detalhamento da substância – Propriedades e Espectros Experimentais

EXPERIMENTAL PROPERTIES

Biological Chemical Lipinski Nuclear Structure Related Thermal

Structure Related Properties	Value	Condition	Note
Crystal Structure	See full text		(13)CAS
Molecular Structure	See full text		(13)CAS
Notes			
(13) Hitosugi-Levesque, Marina; Acta Crystallographica, Section E: Structure Reports Online 2010, V66(9), Pm1098-m1099 CAPLUS 🔍			

EXPERIMENTAL SPECTRA

¹H NMR ¹³C NMR Hetero NMR IR Mass UV and Visible Additional Spectra

¹³ C NMR Properties	Value	Condition	Note
Carbon-13 NMR Spectrum	See spectrum		(8)ACD
Carbon-13 NMR Spectrum	See spectrum		(8)ACD
Carbon-13 NMR Spectrum	See spectrum		(9)WSS
Carbon-13 NMR Spectrum	See full text	1 of 3	(10)CAS
Notes			
(8) ACD: Spectral data were obtained from Advanced Chemistry Development, Inc.			
(9) Singh, S. P.; Journal of Heterocyclic Chemistry 1978, V15(1), P9-11 CAPLUS 🔍			
(10) Margolis, Brandon J.; Journal of Organic Chemistry 2007, V72(6), P2232-2235 CAPLUS 🔍			

Propriedades e espectros **experimentais** organizados por tipos e categorias.

Possibilidade de abrir espectros indexados.

Todas as propriedades e espectros possuem indicação referencial

Detalhamento da substância – Propriedades calculadas

▼ PREDICTED PROPERTIES

Biological Chemical **Density** Lipinski Structure Related Thermal

Density Properties	Value	Condition	Note
Density	1.111±0.06 g/cm ³	Temp: 20 °C Press: 760 Torr	(30)
Molar Volume	287.8±3.0 cm ³ /mol	Temp: 20 °C Press: 760 Torr	(30)

Notes

(30) Calculated using Advanced Chemistry Development (ACD/Labs) Software V11.02 (© 1994-2020 ACD/Labs)

Propriedades e espectros **calculados** a partir da estrutura molecular da substância

▼ PREDICTED SPECTRA

¹H NMR ¹³C NMR

¹ H NMR Properties	Value	Condition	Note
Proton NMR Spectrum	See spectrum		(31)

Notes

(31) Predicted NMR data calculated using Advanced Chemistry Development, Inc. (ACD/Labs) Software V11.01 (© 1994-2020 ACD/Labs)

Detalhamento da substância – Informações Regulatórias

Informações regulatórias

organizadas por países e territórios:

- Sinônimos regulatórios
- Visão geral de informações regulatórias por países
- Regulações mistas
- Pode incluir informações de TSCA e FDA em alguns casos

▼ REGULATORY INFORMATION

- ▶ Regulatory Synonyms
- ▼ Regulatory Overview by Country
 - Confidentiality Status
Public
 - ▶ Australia
 - ▼ European Union
 - EU Customs Code CN**
29334990
 - Inventory Status**
On REACH List of Pre-Registered Substances, March 2009 Registration Date: 30-NOV-2010.
On EINECS Annex to Official Journal of the European Communities, 15 June 1990
 - Regulatory List Number**
EC No.: 200-191-2
EINECS No.: 200-191-2
 - ▶ Japan
 - ▶ Philippines
 - ▶ International and other lists
 - ▶ Miscellaneous Regulations
 - ▶ U.S. State Regulations
 - ▶ File Segment

Detalhamento da substância – Indicadores de Bioatividade

▼ BIOACTIVITY INDICATORS

Indicators	References
Antidiabetic agents (all) > Antidiabetic agents	99
Anti-infective agents (all) >>> Antibacterial agents	160
Anti-infective agents (all) >>> Antibiotics	257
Anti-infective agents (all) >>>> Anti-HIV agents	89
Anti-infective agents (all) > Anti-infective agents	89
Anti-infective agents (all) >>>> Antimalarials	2291
Anti-infective agents (all) >> Antimicrobial agents	111
Anti-infective agents (all) >>> Antiviral agents	317
Anti-infective agents (all) >>> Fungicides	177
Anti-infective agents (all) >>>> Leishmanicides	58
Anti-infective agents (all) >> Parasitocides	190
Anti-infective agents (all) >>> Protozoacides	146
Anti-infective agents (all) >>> Trypanosomicides	52
Anti-infective agents (all) >>>> Tuberculostatics	53
Anti-inflammatory agents (all) > Antiarthritics	81
Anti-inflammatory agents (all) > Anti-inflammatory agents	333
Anti-inflammatory agents (all) > Antirheumatic agents	213
Anti-inflammatory agents (all) > Nonsteroidal anti-inflammatory agents	217
Antiproliferative agents (all) > Antiproliferative agents	91
Antitumor agents (all) > Alkylating agents	66
Antitumor agents (all) > Antiangiogenic agents	55

Informações de bioatividade
indexadas a partir da
literatura.

Cada classe de teste
biológico é apresentada
como um hiperlink que leva
às referências que relatam
esse teste.

Busca por fornecedores comerciais

CAS Solutions

SCIFINDER
A CAS SOLUTION

Preferences | SciFinder Help | Sign Out

Welcome Gabriel Ferreira

Explore | Saved Searches | SciPlanner

Chemical Structure substructure > substances (2315) > 54-05-7

SUBSTANCE DETAIL

Get References | Get Reactions | **Get Commercial Sources** | Send to SciPlanner

Return

1. CAS Registry Number 54-05-7

~10.851 | ~84

C₁₈ H₂₆ Cl N₃
1,4-Pentanediamine, *N*-(7-chloro-4-quinolyl)-*N*,*N*-diethyl-

Molecular Weight
319.87

Melting Point (Experimental)
Value: 87-92 °C

Boiling Point (Experimental)
Value: 212-214 °C | Condition: Press: 0.2 Torr

Density (Predicted)
Value: 1.111±0.06 g/cm³ | Condition: Temp: 20 °C Press: 760 Torr

pKa (Predicted)
Value: 10.47±0.25 | Condition: Most Basic Temp: 25 °C

Other Names
Quinoline, 7-chloro-4-[[4-(diethylamino)-1-methylbutyl]amino]- (8Cl)
N-(7-Chloro-4-quinolyl)-*N*,*N*-diethyl-1,4-pentanediamine
(±)-Chloroquine

Ao clicar nesse link você terá acesso à lista de **fornecedores** que comercializam esse composto. Lembre-se, o SciFinder não comercializa produtos químicos, apenas traz os catálogos de fornecedores indexados.

Sempre que encontrar o símbolo de um erlenmeyer laranja, ele representa os fornecedores comerciais.

CCN(CC)CCCCNC1=CC=C2C=C(C=C1)N=C3C=CC(=C23)Cl

Fornecedores Comerciais

CAS Solutions



Explore

Saved Searches

SciPlanner

Substance Identifier "chloroquine" > substances (1) > 54-05-7 > commercial sources (84)

COMMERCIAL SOURCES

Analyze

Analyze by:

Commercial Source

Chemieliva
Pharmaceutical
Product List 4

ASW MedChem
Product List 3

Hangzhou Synstar
Pharmaceutical
Technology Product
List 3

SAGECHEM
LIMITED Product
List 3

1Click Chemistry
Stock Products 2

Análise de resultados por diferentes critérios

Commercial Source	Substance	Purity	Quantity	Purchasing Details	Stock Status	Ships Within
1. Toronto Research Chemicals Product List Canada Set Preference	54-05-7 Chloroquine	95-98%	Milligrams	Order from Source 100mg, USD 50 250mg, USD 70 500mg, USD 90	Maintained in stock	1 week
2. Toronto Research Chemicals Product List Canada Set Preference	54-05-7 Chloroquine	95-98%	Grams	Order from Source 1g, USD 145	Maintained in stock	1 week
3.	54-05-7 Chloroquine	95-98%	Grams	Order from Source 1g, USD 173	Maintained in stock	1 week

Informações sobre fornecedores, contendo o nome das empresas, forma de contato (hyperlinks), grau de pureza, quantidade, detalhes de compra com links que redirecionam para o site da empresa, status em estoque e tempo de envio para os EUA



SCIFINDER®
A CAS SOLUTION

Busca por estruturas Markush

A estrutura desenhada, até o presente momento, não possui um número CAS, sendo **inédita**.

A busca por estrutura **Markush** permite pesquisar estruturas existentes ou aquelas que ainda não foram reportadas na literatura e podem ser descritas por estruturas genéricas contendo grupos variáveis R.

Os resultados de uma busca Markush são **documentos de patentes** que contenham estruturas variáveis que tenham o composto codificado por uma estrutura Markush

Busca por estruturas Markush

CAS Solutions

SCIFINDER
A CAS SOLUTION

Preferences | SciFinder Help | Sign Out

Welcome Gabriel Ferreira

Explore | Saved Searches | SciPlanner | Save | Print | Export

Markush substructure > references (141)

REFERENCES

Get Substances | Get Reactions | Get Related Citations | Tools

Analyze | Refine | Categorize

Analyze by: CA Concept Heading

Electrophotographic photoconductors 17

Fungicides and Fungistats 14

Human 13

Insecticides 13

Pesticides 12

Electrophotographic apparatus 7

Neoplasm 7

Antitumor agents 6

Sort by: Publication Year

0 of 141 References Selected

1. Adhesive composition containing at least two types of dyes and adhesive sheet
Quick View PATENTPAK
By Jung, Joon Ho; Joo, Hyun Young
From PCT Int. Appl. (2019), WO 2019132369 A1 20190704. | Language: Korean, Database: CAS

10
11
12

Disclosed are: an adhesive sheet that emits light in a visible light area; and a resin, thereby enabling light of a types of display devices.

2. Preparation of di(cyanostyryl)benzene derivatives and fluorescent materials
Quick View PATENTPAK
By Lee, Ji Hun; Choi, Yong Seon; Shin, Seong Jun
From Repub. Korean Kongkae Taehe Kongbo (2019), KR 2019043743 A 20190429. | Language: Korean

Intense Intensity

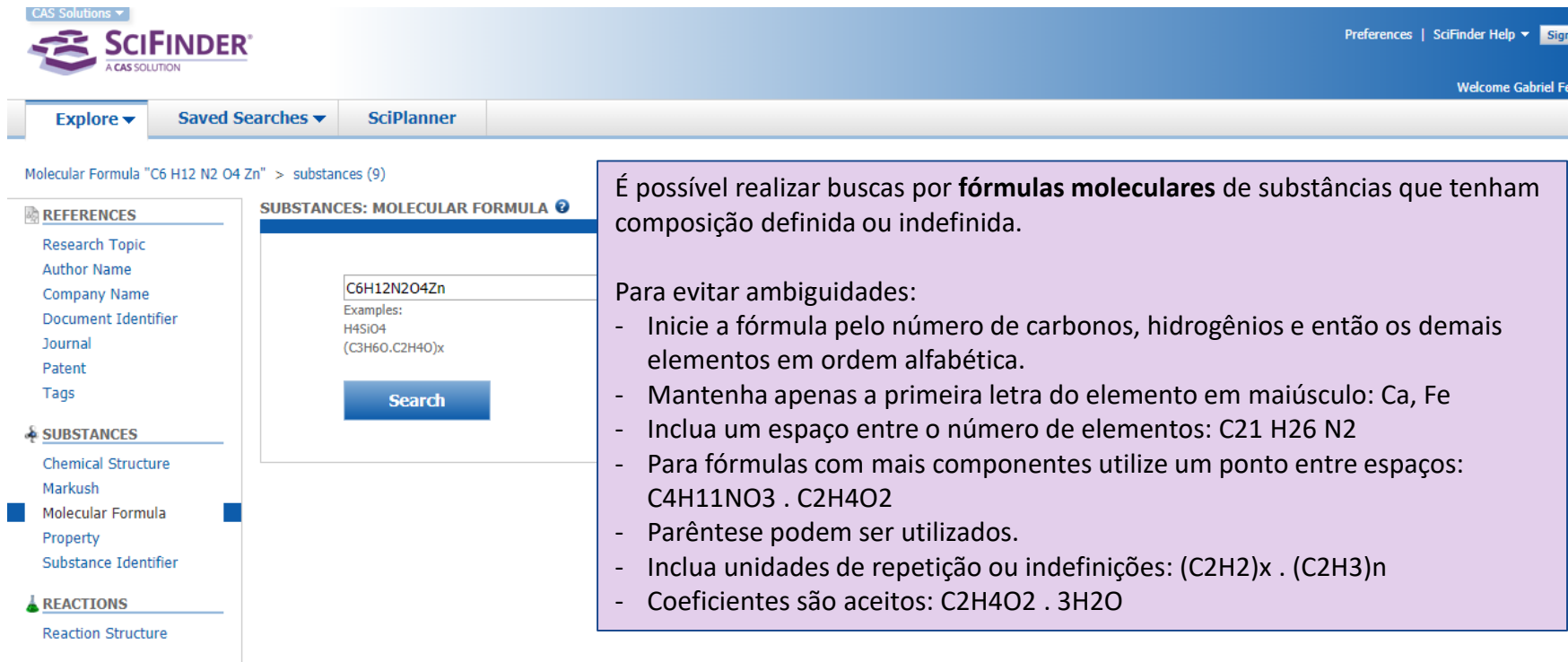
The present invention relates to alkyl or cycloalkyl, etc.; R³ and R⁴ = independently H, halogen, amino, nitro, (un)substituted alkyl or cycloalkyl, etc.]. For example, terephthalaldehyde was reacted with compd. II (prepn. given) in DMF in the presence of NaOH at 50° for 4 h to provide compd. III. The invention compds. can remarkably improve the fluorescence yield and drastically reduce the amt. of use, thereby providing fluorescent materials capable of minimizing environmental pollution and improving economic efficiency.

Mesmo nunca sendo reportada a síntese ou uma comprovação da obtenção da estrutura desenhada, até o momento, há mais de 140 patentes que possuem estruturas **Markush** que contemplam aquela **estrutura profética**.

Essa é uma busca que pode auxiliar em processos de **anterioridade** e **prospecção**, sendo possível através da indexação humana.

Todos os recursos de **análise**, **refino** e **categorização** de referências, além de **salvar**, **exportar** e criar **alertas** são possíveis.

Busca por Fórmula Molecular



CAS Solutions

SCIFINDER®
A CAS SOLUTION

Preferences | SciFinder Help | Sign

Welcome Gabriel F

Explore | Saved Searches | SciPlanner

Molecular Formula "C6 H12 N2 O4 Zn" > substances (9)

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: MOLECULAR FORMULA ?

C6H12N2O4Zn

Examples:
H4SiO4
(C3H6O.C2H4O)x

Search

É possível realizar buscas por **fórmulas moleculares** de substâncias que tenham composição definida ou indefinida.

Para evitar ambiguidades:

- Inicie a fórmula pelo número de carbonos, hidrogênios e então os demais elementos em ordem alfabética.
- Mantenha apenas a primeira letra do elemento em maiúsculo: Ca, Fe
- Inclua um espaço entre o número de elementos: C21 H26 N2
- Para fórmulas com mais componentes utilize um ponto entre espaços: C4H11NO3 . C2H4O2
- Parêntese podem ser utilizados.
- Inclua unidades de repetição ou indefinições: (C2H2)x . (C2H3)n
- Coeficientes são aceitos: C2H4O2 . 3H2O

Busca por Fórmula Molecular



Preferences | SciFinder Help | Sign Out

Welcome Gabriel Ferreira

Explore

Saved Searches

SciPlanner

Save

Print

Export

Molecular Formula "C6 H12 N2 O4 Zn" > substances (9)

SUBSTANCES

Get References

Get Reactions

Get Commercial Sources

Tools

Create Keep Me Posted Alert

Send to SciPlanner

Analyze Refine

Sort by: CAS Registry Number

Display Options

0 of 9 Substances Selected

Analyze by: Substance Role

Properties 8

Reactant or Reagent 6

Biological Study 5

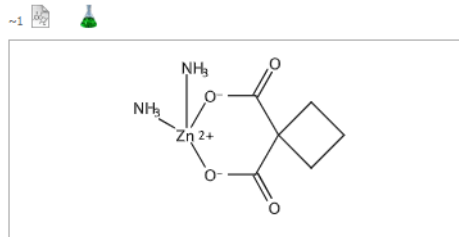
Preparation 5

Process 4

Uses 4

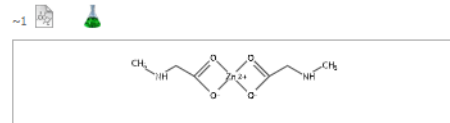
Analytical Study 1

1. 1801871-92-0



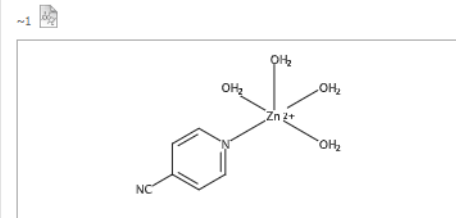
C₆ H₁₂ N₂ O₄ Zn
INDEX NAME NOT YET ASSIGNED

2. 1586857-98-8



C₆ H₁₂ N₂ O₄ Zn
INDEX NAME NOT YET ASSIGNED

3. 1243264-84-7



C₆ H₁₂ N₂ O₄ Zn
Zinc(2+), tetraaqua(4-pyridinecarbonitrile-κN)-

O resultado é uma lista de todos os isômeros que compartilham aquela fórmula molecular. São possíveis todas as funcionalidades de análise e refino de substâncias.

Busca por Propriedades

CAS Solutions ▾



Preferen

Explore ▾

Saved Searches ▾

SciPlanner

Molecular Formula "C6 H12 N2 O4 Zn" > substances (9)

REFERENCES

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

SUBSTANCES

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

REACTIONS

SUBSTANCES: PROPERTY ?

Experimental

Select Property... ▾

Examples: 44, 25-35, >125

Predicted

Select Property... ▾

Examples: 44, 25-35, >125

Search

A busca por **propriedades** permite trazer compostos que apresentam a propriedade selecionada, seja ela **experimental** ou **preditiva**.

Busca por Propriedades



Explore ▾

Saved Searches ▾

SciPlanner

Molecular Formula "C6 H12 N2 O4 Zn" > substances (9)

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: PROPERTY ?

Experimental

- Select Property...
- Select Property...
- Boiling Point (°C)
- Density (g/cm³)
- Electric Conductance (S)
- Electric Conductivity (S/cm)
- Electric Resistance (ohm)
- Electric Resistivity (ohm*cm)
- Glass Transition Temp. (°C)
- Magnetic Moment (μB)
- Median Lethal Dose (LD50) (mg/kg)
- Melting Point (°C)
- Optical Rotatory Power (degrees)
- Refractive Index
- Tensile Strength (MPa)

Examples: 44, 25-35, >125

Examples: 44, 25-35, >125

As **propriedades experimentais** são aquelas descritas na literatura, em artigos, patentes e outros documentos e que são indexadas pela equipe de cientistas do CAS.

O nível de detalhamento sobre as propriedades depende das informações que foram publicadas.

Busca por Propriedades

CAS Solutions ▾

SCIFINDER
A CAS SOLUTION

Explore ▾ Saved Searches ▾

Molecular Formula "C6 H12 N2 O4 Zn" > substan

REFERENCES

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

SUBSTANCES

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

REACTIONS

- Reaction Structure

Bioconcentration Factor
Boiling Point (°C)
Density (g/cm³)
Enthalpy of Vaporization (kJ/mol)
Flash Point (°C)
Freely Rotatable Bonds
H Donor/Acceptor sum
H Acceptors
H Donors
Koc
logD
logP
Mass Intrinsic Solubility (g/L)
Mass Solubility (g/L)
Molar Intrinsic Solubility (mol/L)
Molar Solubility (mol/L)
Molar Volume (cm³/mol)
Molecular Weight
pKa
Select Property... ▾

Examples: 44, 25-35, >125

Examples: 44, 25-35, >125

Search

As **propriedades preditivas** foram determinadas com o auxílio de softwares de modelagem e química teórica tendo como base a representação estrutural bidimensional e extrapolações tridimensionais.

Busca por Identificador de Substâncias



Prefer

Explore ▾

Saved Searches ▾

SciPlanner

Substance Identifier "N[C@@H](C)(=O)O; BQJCRHHNABKA..." > substances (0)

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: SUBSTANCE IDENTIFIER ?

chloroquine
1809249-37-3
Avigan

Enter one per line.

Examples:

50-00-0

999815

Acetaminophen

Search

A opção de busca por **identificador de substância** permite pesquisar por **números CAS** ou por **nomes de compostos** (comerciais, científicos, usuais, acrônimos, etc).

É possível mesclar os termos de buscas e pesquisar até 25 compostos de uma única vez, um em cada linha.

Busca por Identificador de Substâncias

SCIFINDER
A CAS SOLUTION

Preferences | SciFinder Help | Sign Out

Welcome Gabriel Ferrei

Explore | Saved Searches | SciPlanner

Substance Identifier "chloroquine; 1809249-37-3; Avi..." > substances (3)

Get References | Get Reactions | Get Commercial Sources | Tools

Create Keep Me Posted Alert | Send to SciPlanner

Analyze | Refine

Sort by: CAS Registry Number

0 of 3 Substances Selected

Analyze by: Substance Role

Analytical Study 3

Biological Study 3

Preparation 3

Properties 3

Uses 3

Occurrence 2

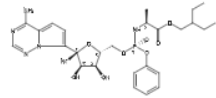
Process 2

Reactant or Reagent 2

Formation, Nonpreparative 1

1. **1809249-37-3**

~121 | ~32



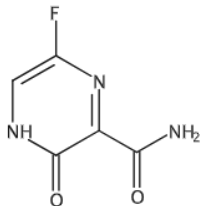
Absolute stereochemistry.

C₂₇ H₃₅ N₆ O₈ P
L-Alanine, *N*-[(*S*)-hydroxyphenoxyphosphinyl]-, 2-ethylbutyl ester, 6-ester with 2-*C*-(4-aminopyrrolo[2,1-*f*][1,2,4]triazin-7-yl)-2,5-anhydro-D-altronnitrile

▶ **Key Physical Properties**
Regulatory Information

2. **259793-96-9**

~378 | ~89

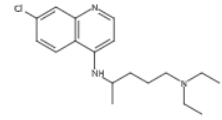


C₅ H₄ F N₃ O₂
2-Pyrazinecarboxamide, 6-fluoro-3,4-dihydro-3-oxo-

▶ **Key Physical Properties**
Regulatory Information

3. **54-05-7**

~10851 | ~84



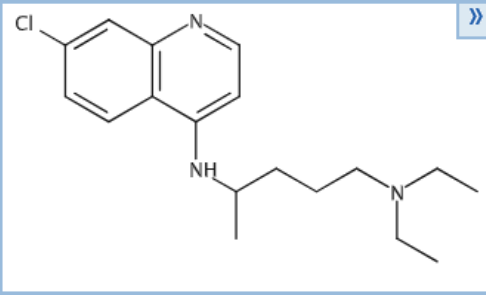
C₁₈ H₂₆ Cl N₃
1,4-Pentanediamine, *N*'-(7-chloro-4-quinolinyl)-*N*,*N*'-diethyl-

▶ **Key Physical Properties**
Regulatory Information
Spectra
Experimental Properties

Links rápidos em estruturas

Sempre que o cursor do mouse passar sobre o desenho de uma estrutura no SciFinder, surgirá uma seta dupla azul no canto superior direito, que dá acesso a links rápidos sobre o composto:

- Número CAS
- Ver detalhes da substância
- Explorar por estrutura: Estrutura química, Markush ou reações
- Sintetize: traz reações onde essa estrutura aparece como produto
- Traga reações onde a substância é: produto, reagente, catalisador, solvente ou qualquer papel
- Fontes comerciais
- Informação regulatória
- Referências
- Exportar como imagem
- Exportar como arquivo .mol
- Enviar para o SciPlanner



CAS Registry Number: 54-05-7

- » View Substance Detail
- Explore by Structure ▶
- Synthesize this...
- Get Reactions where Substance is a ▶
- Get Commercial Sources
- Get Regulatory Information
- Get References
- Export as Image
- Export as molfile
- Send to SciPlanner

Modos de buscas - Reações

REACTIONS

Reaction Structure

Reações

- Reaction Structure: permite desenhar um esquema de reação completo ou apenas parte dele (reagentes ou produtos)

Busca por Reações

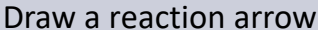
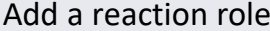
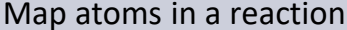
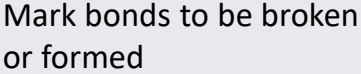
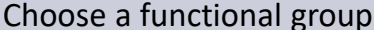
Na busca por reações você pode desenhar apenas os reagentes, o(s) produto(s) ou ainda um esquema de reação completo.

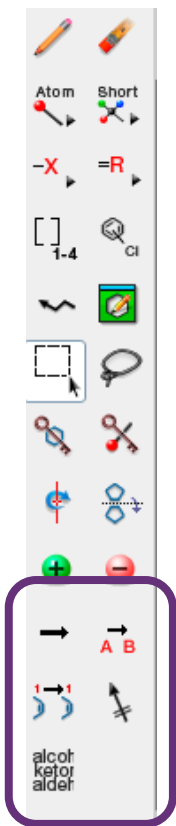
Novas opções no editor de estruturas estão presentes.

The screenshot displays the SciFinder Structure Editor interface. The main workspace shows a chemical reaction: benzaldehyde (reactant) reacts with ethyl acrylate (product) to form a chalcone derivative. The interface includes a toolbar on the left with various drawing tools, a top menu bar with 'Structure Editor' and search options, and a right-hand panel with 'Drawing Editor' settings (Structure, Reaction, Markush) and search filters. The bottom status bar shows the chemical formula $C_{12}H_{11}NO_2 \cdot C_7H_6O$ and the coordinates 201.22 . 106.12.

Busca por Reações – Ferramentas de edição

Novas funcionalidades estão presentes no editor de estruturas no modo reações, além daquelas encontradas para edição de substâncias.

Símbolo	Significado
	Inserir uma seta de reação. Os componentes desenhados à esquerda da seta serão identificados como reagentes e os à direita como produtos, automaticamente.
	Designa um papel na reação (reagente ou produto), independente da sua posição no esquema ou da necessidade de uma seta de reação.
	Mapeia átomos na trajetória da reação
	Indica quais ligações devem ser quebradas ou formadas no esquema de reação
	Não define elementos, mas grupos funcionais genéricos em um esquema de reação. Veja mais detalhes a seguir:



Busca por reações – Grupos funcionais

Functional Groups

Enter 3 or more characters...

- ▶ Alcohols (13)
- ▶ Alkenes (11)
- ▶ Alkynes (4)
- ▶ Amines (11)
- ▶ Carbonate Derivatives (7)
- ▶ Carboxy Derivatives (17)
- ▶ Halides (16)
- ▶ Heterocycles (54)
- ▶ Ketones (6)
- ▶ Organometallics (19)
- ▶ Non-Rings (136)
- ▶ Rings (71)

▼ Carbonate Derivatives (7)

CARBONATE DERIVATIVES is a class that includes: Carbamate, Carbonate, Guanidine, Haloformate, Thiourea, Urea

CARBONATE DERIVATIVES	 Carbamate	 Carbonate
	 Guanidine	 Haloformate
		 Thiourea
	 Urea	

Opções de classes de grupos funcionais disponíveis e exemplo de derivados de carbonatos.

Busca por Reações – Busca avançada



Explore Saved Searches SciPlanner

Substance Identifier "chloroquine; 1809249-37-3; Avi..." > substances (3)

REFERENCES

Research Topic
Author Name
Company Name
Document Identifier
Journal
Patent
Tags

SUBSTANCES

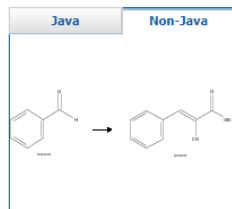
Chemical Structure
Markush
Molecular Formula
Property
Substance Identifier

REACTIONS

Reaction Structure

REACTIONS: REACTION STRUCTURE

Structure Editor:



Import CXF

Search

Advanced Search

Search Type:
 Allow varia
 Substructu

ChemDraw
Launch a Sc
ChemDraw.

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



SciFinder®
A CAS SOLUTION

Buscas por Reações - Resultados

Reaction Structure substructure > reactions (4080)

REACTIONS

Get References

Tools

Link para as referências que descrevem as reações do conjunto e possibilidade de combinar resultados de buscas

Send to SciFinder

Analyze Refine

Group by: No Grouping

Sort by:

Display Options

0 of 4080 Reactions Selected

Page: 1 of 272

Analyze by:

Reagent

Piperidine 158

Et₃N 115

K₂CO₃ 101

H₂O 86

HCl 79

NH₄OAc 78

NaOH 59

AcOH 55

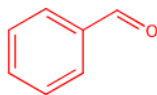
C₅H₅N 51

NH₃ 35

Show More

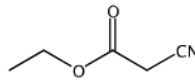
1. View Reaction Detail Link Similar Reactions

Single Step Hover over any structure for more options.



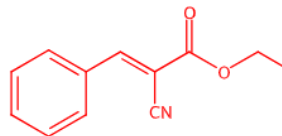
~81

+



~95

→



100%

~43

Overview

Steps/Stages

1.1 C:Mg sil S:EtOH, 4 h, 70°C

Resumo sobre notas de reação, solventes, reagentes, catalisadores e condições de reação. Referência que cita a reação

Esquema de reação com rendimentos e links de fornecedores

Notes

zeolite catalyst prepared and used, Knoevenagel condensation, Reactants: 2, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1

References

Straightforward synthesis of MTW-type magnesium silicalite for CO₂ fixation with epoxides under mild conditions

Quick View Other Sources

By Wen, Haimeng et al

From Catalysis Science & Technology, 9(20) 5725-5735, 2019



SCIFINDER®
A CAS SOLUTION

Buscas por Reações - Resultados

Reaction Structure substructure > reactions (4080)

REACTIONS

Get References

Tools

Send to SciPlanner

Analyze Refine

Group by: No Grouping Sort by: Relevance

Display Options

0 of 4080 Reactions Selected

Page: 1 of 272

Analyze by:

Reagent

Piperidine 158

Et₃N 115

K₂CO₃ 101

H₂O 86

HCl 79

NH₄OAc 78

NaOH 59

AcOH 55

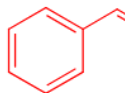
C₅H₅N 51

NH₃ 35

Show More

1. View Reaction Detail

Single Step



~81

Overview

Steps/Stages

1.1 C:Mg sil



Straightforward synthesis of Ni-iv-type magnesium silicalite for CO₂ fixation with epoxides under mild conditions

Quick View Other Sources

By Wen, Haimeng et al

From Catalytic Science & Technology 9(20) 5725-5735-2019

Agrupar por:

- Sem agrupar
- Documento: traz todas as reações de um documento
- Transformação: agrupa por tipo de reação química

Organizar por:

- Relevância: resultados mais próximos do que foi desenhado
- Número de entrada na plataforma
- Procedimento experimental
- MethodsNow: procedimentos sintéticos completos
- Número de etapas
- Rendimento de produto
- Ano de publicação



SCIFINDER®
A CAS SOLUTION

Buscas por Reações - Resultados

Reaction Structure substructure > reactions (4080)

REACTIONS

Get References

Tools

Send to SciPlanner

Analyze Refine

Analyze by:

Reagent

Piperidine 158

Et₃N 115

K₂CO₃ 101

H₂O 86

HCl 79

NH₄OAc 78

NaOH 59

AcOH 55

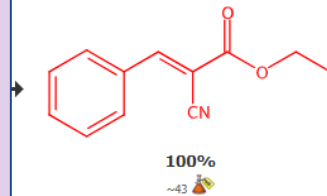
C₅H₅N 51

NH₃ 35

Show More

Opções de **análise** de resultados:

- Nome de autor
- Catalisadores empregados nas reações
- Companhia e Organizações
- Tipo de documento
- Procedimentos experimentais
- MethodsNow
- Nome do periódico
- Idioma
- Número de etapas de reação
- Rendimento de produto
- Ano de publicação
- Reagentes
- Solventes



Notes

solite catalyst prepared and used, Knoevenagel condensation, Reactants: 2, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1

References

straightforward synthesis of MTW-type magnesium silicalite for CO₂ fixation with epoxides under mild conditions
Quick View Other Sources
By Wen, Haimeng et al
From Catalytic Science & Technology 9(20) 5725-5735 2019



SCIFINDER®
A CAS SOLUTION

Buscas por Reações - Resultados

REACTIONS

Get References Tools

Analyze Refine

Group by: No Grouping Sort by: Relevance

0 of 4080 Reactions Selected Page: 1 of 272

Refine by:

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

Reaction Classification(s):

- Biotransformation
- Catalyzed
- Chemoselective
- Combinatorial
- Electrochemical
- Gas-phase
- Non-catalyzed
- Photochemical
- Radiochemical
- Regioselective
- Stereoselective

Refine

1. View Reaction Detail Similar Reactions

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

Opções de refino de resultados:

- Estrutura de reação
- Rendimento de produto
- Número de etapas
- Classificação de reação
- Exclusão de classes de reação
- Grupos funcionais não participantes

1.1 C:Mg silicite, S:EtOH, 4 h, 70°C

100%
~43

Notes

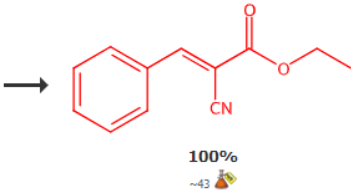
zeolite catalyst prepared and used, Knoevenagel condensation, Reactants: 2, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1

References

Straightforward synthesis of MTW-type magnesium silicalite for CO2 fixation with epoxides under mild conditions

Quick View Other Sources

By Wen, Haimeng et al
From Catalysis Science & Technology, 9(20), 5725-5735; 2019

CCOC(=O)C=C(C#N)c1ccccc1

Busca por Reações – Agrupadas por Transformação

REACTIONS

Get References Tools

Send to SciPlanner

Analyze Refine

Group by: Transformation Sort by: Frequency

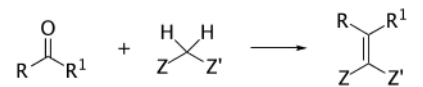
0 of 4080 Reactions Selected

Page: 1 of 3

Analyze by: Reagent

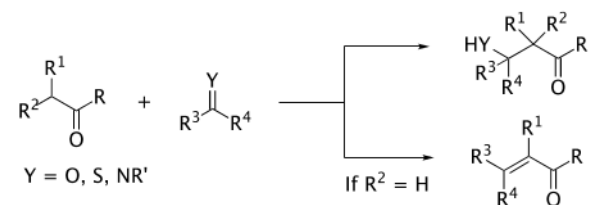
Piperidine	158
Et ₃ N	115
K ₂ CO ₃	101
H ₂ O	86
HCl	79
NH ₄ OAc	78
NaOH	59
AcOH	55
C ₆ H ₅ N	51
NH ₃	35

1. **Condensation Reaction between Compounds with Active Hydrogen and Aldehydes or Ketones/ Knoevenagel Reaction**
3649 Reactions



Z, Z' = Electron withdrawing group

2. **Aldol-Type Reactions between Carboxylic Acid Derivatives or Compounds with Active Hydrogen and Aldehydes, Ketones, Thioketones or Aldimines**
3582 Reactions



Y = O, S, NR'

O SciFinder organiza as reações por **tipo de reação química**, trazendo o título da reação e o **esquema genérico**.

O hiperlink seleciona apenas as reações que fazem parte do conjunto.

Detalhamento de resultado de reação

Welcome Gabriel Ferreira

Explore Saved Searches SciPlanner

Link Save Print Export

716 reactions with the Experimental Procedure Experimental Procedures Available are displayed [Return](#)

Opened saved answer set "Knoevenagel" (1998) - reaction 33 (5/1998)

REACTION DETAIL

Get Reference Detail Get Similar Reactions Link to Other Sources

Return Previous Next SciPlanner

33. Single Step *Hover*

Opções de detalhamento da referência, busca por reações similares e link para fonte original

Detalhamento bibliográfico

SOURCE

Amine-functionalized Metal-Organic Frameworks: An Efficient and Recyclable Heterogeneous Catalyst for the Knoevenagel Condensation Reaction

Taher, Abu; Lee, Dong-Jin; Lee, Byoung-Ki; Lee, Ik-Mo Synlett Volume 27 Issue 9 Pages 1433-1437 Journal; Online Computer File 2016

COMPANY/ORGANIZATION

Department of Chemistry Inha University Incheon S. Korea 402-751

NUMBER OF STEPS

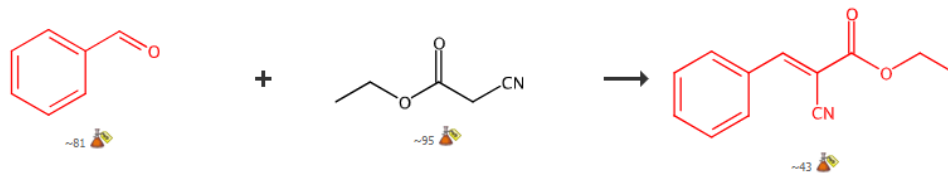
-

~81 + ~95 → ~43

Overview	Notes	Yield
Stages 1.1 C:1073133-02-4 (post-treated with PPh ₃), S:DMF, 5 h, 80°C	Notes Knoevenagel condensation, catalyst prepared and used, recyclable catalyst, Reactants: 2, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1 Transformations: 1. Aldol-Type Reactions between Carboxylic Acid Derivatives or Compounds with Active Hydrogen and Aldehydes, Ketones, Thioketones or Aldimines 2. Condensation Reaction between Compounds with Active Hydrogen and Aldehydes or Ketones/ Knoevenagel Reaction	98%

Detalhamento de resultado de reação

Esquema de reação com links para fornecedores (erlenmeyer laranja)



Visão geral da reação: reagentes, solventes, catalisadores de cada etapa. Notas, rendimento e transformações envolvidas.

▼ Overview

Stages

1.1 C:1073133-02-4 (post-treated with PPh₃), S:DMF, 5 h, 80°C

Notes

Knoevenagel condensation, catalyst prepared and used, recyclable catalyst, Reactants: 2, Catalysts: 1, Solvents: 1, Steps: 1, Stages: 1

Yield

98%

Transformations:

1. Aldol-Type Reactions between Carboxylic Acid Derivatives or Compounds with Active Hydrogen and Aldehydes, Ketones, Thioketones or Aldimines
2. Condensation Reaction between Compounds with Active Hydrogen and Aldehydes or Ketones/ Knoevenagel Reaction


▼ Experimental Procedure

SYNLETT

3. General procedure for the Knoevenagel reactions All catalytic runs and recycling experiments were performed in a similar manner. In a typical experiment, a given amount of the amino compound containing the catalyst corresponding to 0.13 mmol -NH₂ groups (based on the total amino group in MOF materials) was added to a solution of malononitrile or ethyl acetoacetate (1 mmol) in DMF (6mL). The reactor was encapsulated in a water jacket for temperature control during the reaction time, while being shaken under a N₂ atmosphere to avoid oxidation. After adjusting the temperature, the aldehyde or ketone was added (1mmol) to the reaction mixture under a nitrogen atmosphere. The reaction mixture was analysed periodically by gas chromatography using an Agilent 6890 N GC coupled to an Agilent 5975 Network Mass Selective Detector and a 60 m RTX[®]-1 fused silica capillary column. After the reaction was complete, the product was monitored by GC analysis. All the products were known. As an example, the ¹H and ¹³C NMR spectra of the compound (Table 1, entry 2) were observed and compared with the literature.^{2,3} The reaction mixture was then filtered and the solvent was evaporated completely under reduced pressure. The residue was then purified by column chromatography using the predetermined solvent ratio of hexane and ethyl acetate (7:3). Entry: 11. Yield: 98%.

Procedimento experimental extraído na íntegra de periódicos selecionados

Reações similares

 Get Similar Reactions

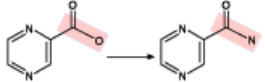
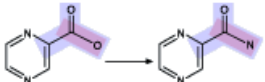
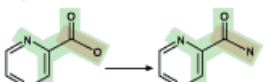


Get Similar Reactions ?

Retrieve similar reactions from:

- All reactions
- Current answer set

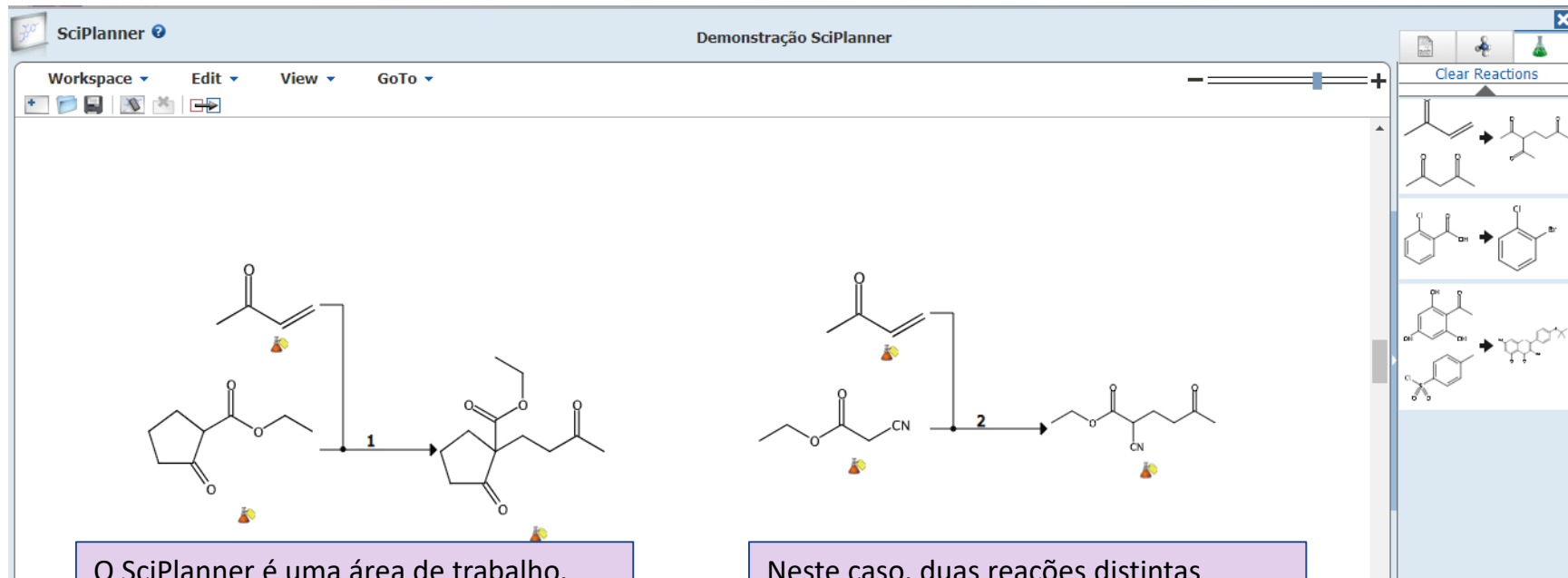
Include this level of similarity:

- Broad - Reaction centers only (235856)

- Medium - Reaction centers plus adjacent atoms and bonds (12643)

- Narrow - Reaction centers plus extended atoms and bonds (5932)


O SciFinder te ajuda a explorar reações similares àquela pesquisada. São 3 os níveis de similaridade:

- Ampla (*Broad*):** reações que compartilham apenas os átomos envolvidos nas ligações formadas/quebradas
- Médio (*Medium*):** centro da reação mais os átomos adjacentes
- Estreito (*Narrow*):** centro da reação, adjacências e segunda esfera de vizinhança

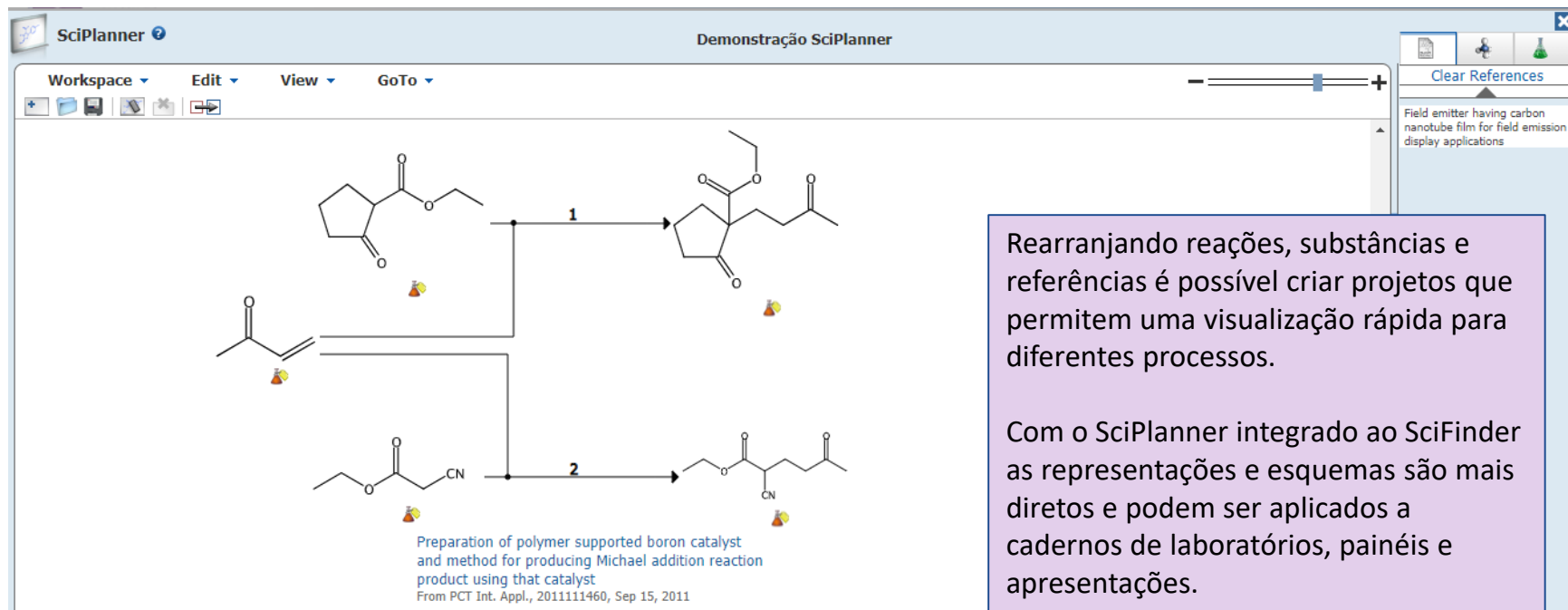
SciPlanner



O SciPlanner é uma área de trabalho, um quadro em branco, para onde você pode enviar referências, reações ou substâncias e organizar seus projetos

Neste caso, duas reações distintas empregam o mesmo reagente – a metil vinil cetona. É possível organizar o fluxo de trabalho para melhorar a visualização

SciPlanner



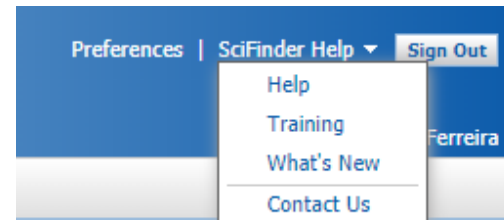
Rearranjando reações, substâncias e referências é possível criar projetos que permitem uma visualização rápida para diferentes processos.

Com o SciPlanner integrado ao SciFinder as representações e esquemas são mais diretos e podem ser aplicados a cadernos de laboratórios, painéis e apresentações.

Dúvidas sobre o uso do SciFinder?

Módulos de ajuda do **SciFinder**:

a) **Help**: abre os diretórios internos de dúvidas do SciFinder. Uma fonte completa de informações

A screenshot of the SciFinder 'Introduction' page. The page has a blue header with 'Contents', 'Index', 'Search', and 'Glossary' tabs. A search bar is on the right. A left sidebar contains a tree view of the help content. The main content area is titled 'Introduction' and includes text about getting started, three blue buttons for 'Working with References', 'Working with Substances', and 'Working with Reactions', a paragraph explaining the integrated information, a 'Learning Resources' section with an 'Introduction to SciFinder' button, and a search bar at the bottom right.

Home > Getting Started > Introduction

Introduction

To help you get started, see the suggested workflows for:

[Working with References](#) [Working with Substances](#) [Working with Reactions](#)

Because the information in SciFinder is uniquely integrated, you can start your exploration with a search for references, substances, or reactions, and then easily retrieve related information from any of the other areas.

Learning Resources

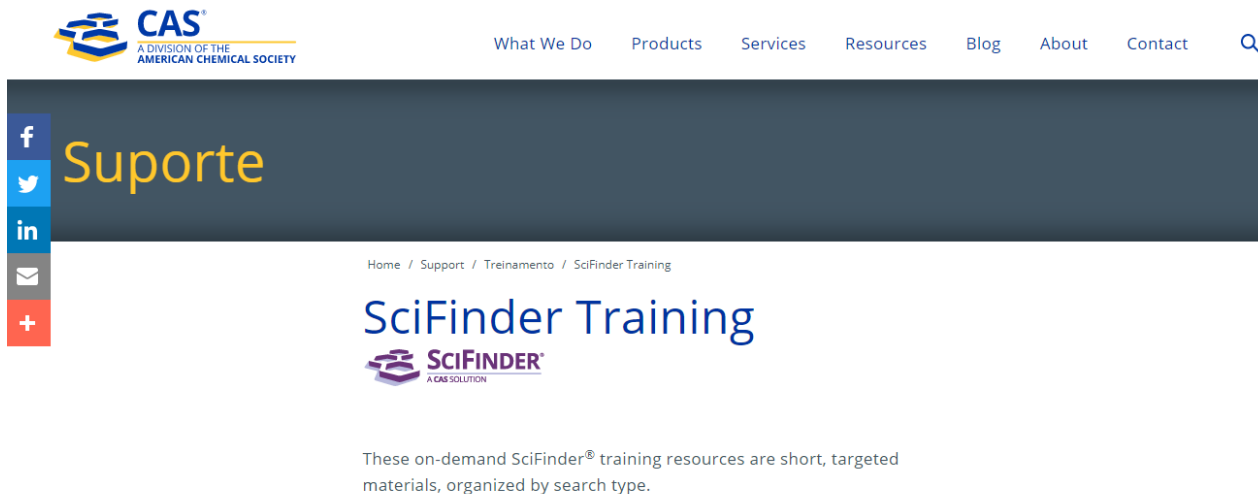
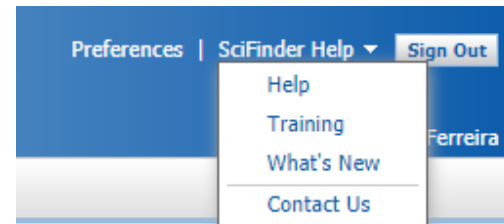
If you are new to SciFinder, you might like to explore the following tutorial:

[Introduction to SciFinder](#)

Dúvidas sobre o uso do SciFinder?

Módulos de ajuda do **SciFinder**:

b) **Training**: Redireciona ao site do CAS – cas.org – na página com vídeos e tutoriais para buscas



What We Do Products Services Resources Blog About Contact

f Suporte

Twitter

in

+

Home / Support / Treinamento / SciFinder Training

SciFinder Training

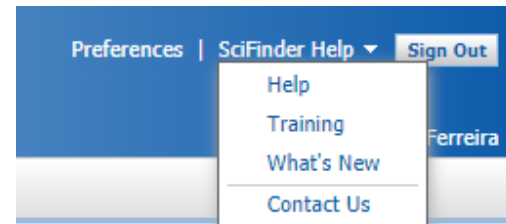
SCIFINDER
A CAS SOLUTION

These on-demand SciFinder® training resources are short, targeted materials, organized by search type.

Dúvidas sobre o uso do SciFinder?

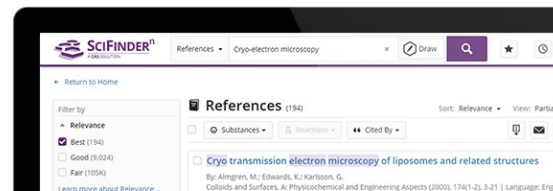
Módulos de ajuda do **SciFinder**:

c) **What's New**: Redireciona à página do [SciFinderⁿ](#), o mais novo e mais moderno produto da família SciFinder, baseado em inteligência artificial, relevância química, além de mais conteúdos sobre patentes, reações químicas e uma ferramenta de retrosíntese.



O que é o SciFinderⁿ?

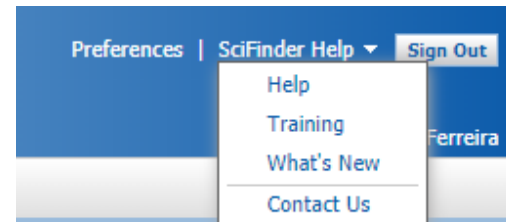
As pesquisas apontam que os atuais usuários das ferramentas de informação passam muito tempo tentando encontrar resultados úteis relevantes. O



Dúvidas sobre o uso do SciFinder?

Módulos de ajuda do **SciFinder**:

d) **Contact Us**: Contato direto com o help desk do CAS, funcionando em horário comercial e operado pelos especialistas em SciFinder e outras plataformas do CAS.



CONTACT US

If you have comments or questions, or have experienced a problem, please provide as much detail as possible.

From:

E-mail:

Phone:

Please contact me about this issue

Short Summary: *(limit to 40 characters)*

Full Description:

Dúvidas sobre o uso do SciFinder?

Você pode enviar um e-mail para nossa equipe de apoio. Cientistas com alto grau de especialização estão dedicados a responder os questionamentos e sanar as dúvidas dos usuários. Você terá sua resposta em até 24 horas.

help@cas.org

Deseja agendar um treinamento especial de uso do SciFinder na sua instituição de Ensino? Entre em contato com nosso especialista técnico: **gferreira@acs-i.org**

Para maiores informações, acesse:

<https://www.cas.org/pt-br/products/scifinder>

Conheça mais sobre o CAS e como podemos te ajudar



CAS[®]

A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY



Acelerar a inovação



**Gerenciar a
informação**



**Aumentar
retornos no
investimento**



**Proteger a
Propriedade
Intelectual**

