

BÚSQUEDAS EN SCIFINDER

OCTUBRE 2012

1. BÚSQUEDAS POR FRASES (explore References)

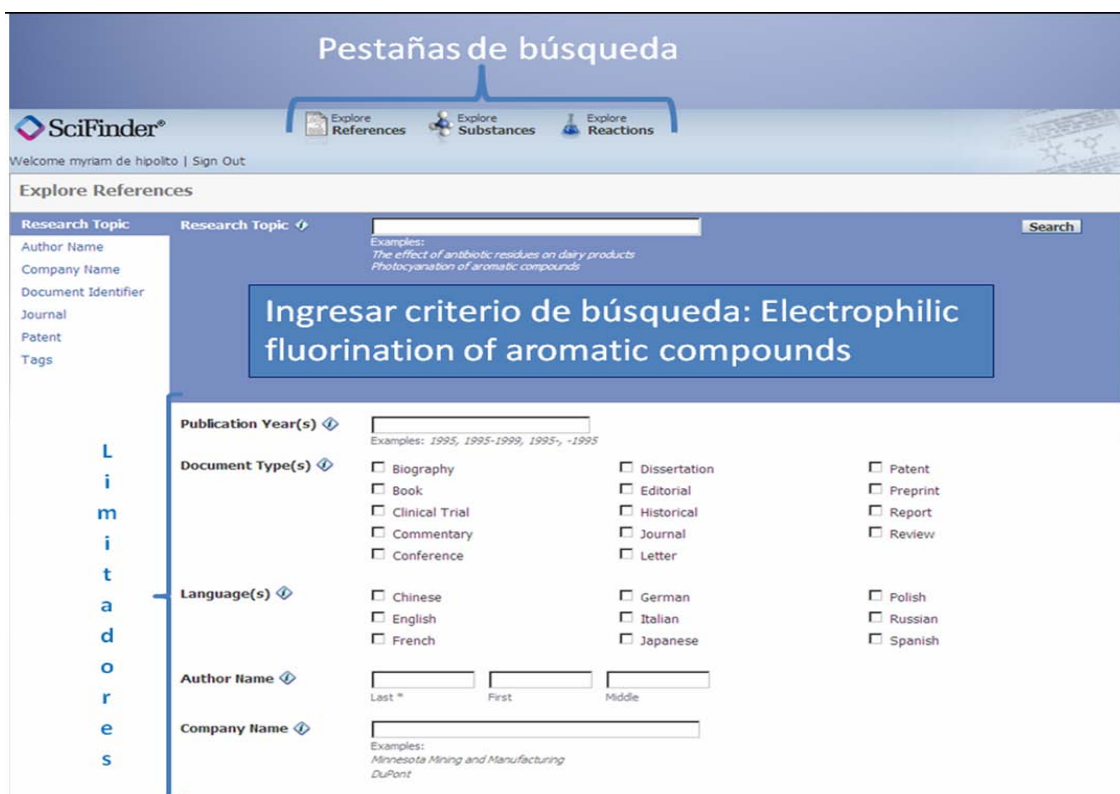
1. Cómo acceder desde la página web de la Biblioteca de Químicas.
 - a) Recursos Electrónicos
 - b) Bases de datos
 - c) SciFinder Scholar (conectarse)



The screenshot shows the website interface for the Biblioteca de Químicas. Key elements include:

- Navigation menu: Inicio/Buscar, Servicios, Bibliotecas, Colección Digital, Ayuda.
- Search bar: "Buscar" button.
- Left sidebar: "Recursos electrónicos" (circled in blue), "Acceso remoto", "Guías y Tutoriales", "Cursos de Formación", "Préstamo", "Libros electrónicos", "Sugerencias", "Visita virtual", "Investigación", "Exposiciones".
- Main content area: "Selección de recursos electrónicos de interés para los químicos". A sub-section "Bases de datos" (circled in blue) lists "SCIFINDER SCHOLAR (Conectarse): Licencia de Campus. Algo registrarse en SciFinder Scholar".
- Right sidebar: "Revistas electrónicas" and "Libros electrónicos" lists.

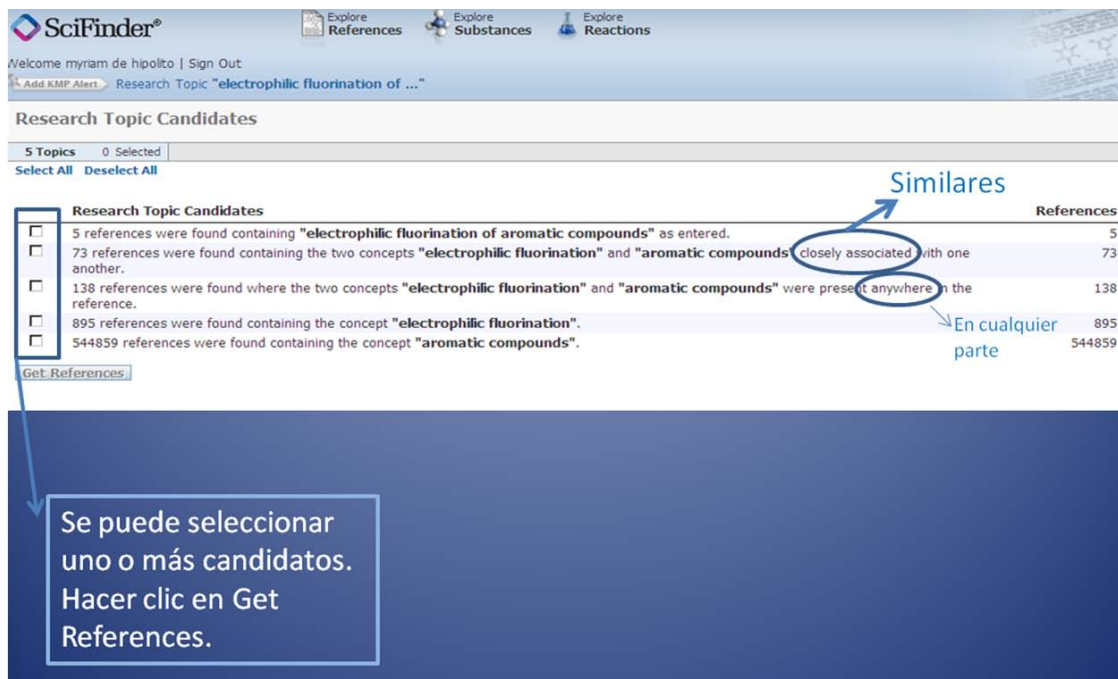
2. Pestañas de la Base de datos: Reference-Substances-Reactions.
3. Criterio de búsqueda. P. ej: Electrophilic fluorination of aromatic compounds



The screenshot shows the SciFinder search interface. Key elements include:

- Header: "Pestañas de búsqueda" with tabs for "Explore References", "Explore Substances", and "Explore Reactions".
- Search bar: "Ingresar criterio de búsqueda: Electrophilic fluorination of aromatic compounds".
- Filters: "Limitador" sidebar on the left.
- Search criteria:
 - Publication Year(s): []
 - Document Type(s):
 - Biography
 - Book
 - Clinical Trial
 - Commentary
 - Conference
 - Dissertation
 - Editorial
 - Historical
 - Journal
 - Letter
 - Patent
 - Preprint
 - Report
 - Review
 - Language(s):
 - Chinese
 - English
 - French
 - German
 - Italian
 - Japanese
 - Polish
 - Russian
 - Spanish
 - Author Name: Last, First, Middle fields.
 - Company Name: []

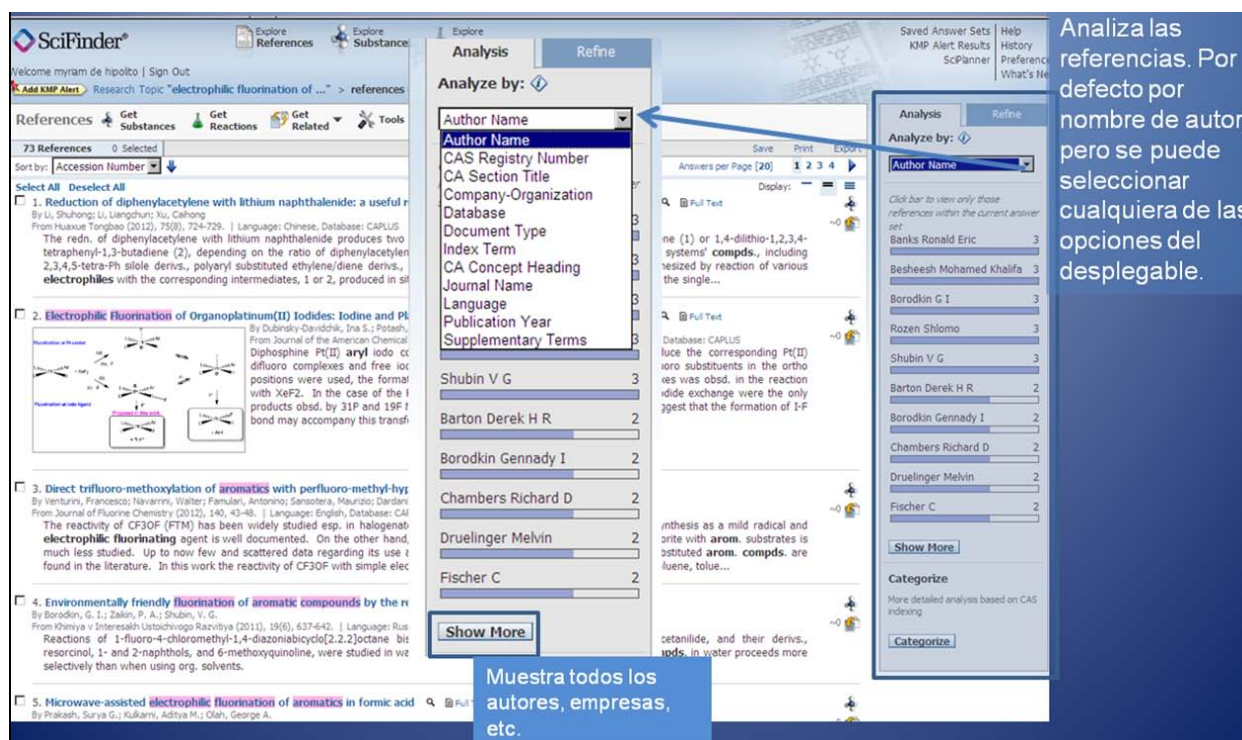
4. Seleccionar las referencias "candidatas" (entered y closely associated).



The screenshot shows the SciFinder interface for 'Research Topic Candidates'. It lists five candidates based on search criteria. A blue box highlights the 'Get References' button for the first candidate. A blue callout box contains the text: 'Se puede seleccionar uno o más candidatos. Hacer clic en Get References.' Another blue callout box points to the 'References' column, containing the text: 'Similares En cualquier parte'.

Research Topic Candidates	References
<input type="checkbox"/> 5 references were found containing "electrophilic fluorination of aromatic compounds" as entered.	5
<input type="checkbox"/> 73 references were found containing the two concepts "electrophilic fluorination" and "aromatic compounds" closely associated with one another.	73
<input type="checkbox"/> 138 references were found where the two concepts "electrophilic fluorination" and "aromatic compounds" were present anywhere in the reference.	138
<input type="checkbox"/> 895 references were found containing the concept "electrophilic fluorination".	895
<input type="checkbox"/> 544859 references were found containing the concept "aromatic compounds".	544859

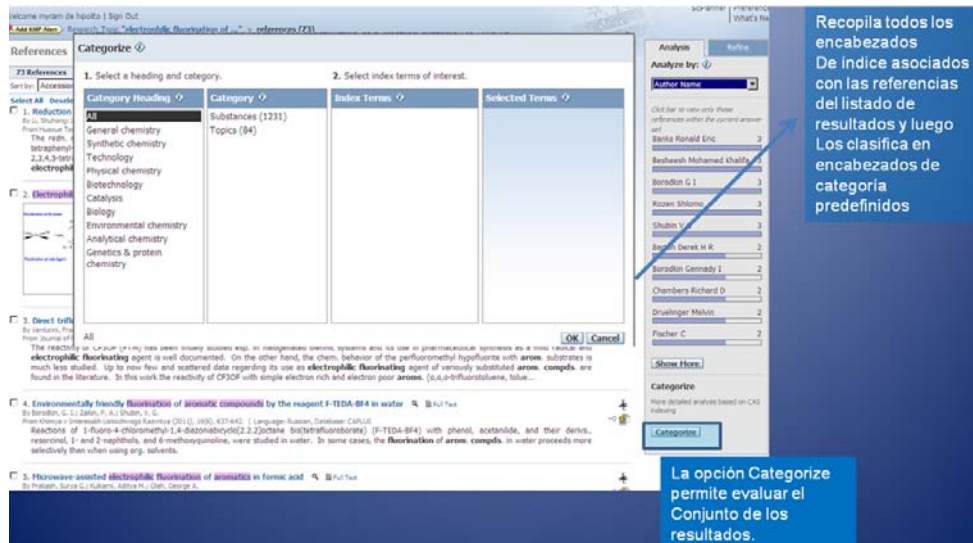
5. Analizar las referencias



The screenshot shows the SciFinder interface for 'References'. The 'Analysis' panel is open, displaying a dropdown menu for 'Analyze by:' with options like Author Name, CAS Registry Number, etc. A blue callout box points to the 'Author Name' option, containing the text: 'Muestra todos los autores, empresas, etc.' Another blue callout box on the right contains the text: 'Analiza las referencias. Por defecto por nombre de autor, pero se puede seleccionar cualquiera de las opciones del desplegable.' The main list shows five references with author names and counts.

Reference Title	Author	Count
1. Reduction of diphenylacetylene with lithium naphthalenide: a useful...	Shubin V G	3
2. Electrophilic fluorination of Organoplatinum(II) Iodides: Iodine and Pt...	Barton Derek H R	2
3. Direct trifluoro-methoxylation of aromatics with perfluoro-methyl-hy...	Borodkin Gennady I	2
4. Environmentally friendly fluorination of aromatic compounds by the re...	Chambers Richard D	2
5. Microwave-assisted electrophilic fluorination of aromatics in formic acid...	Druelinger Melvin	2

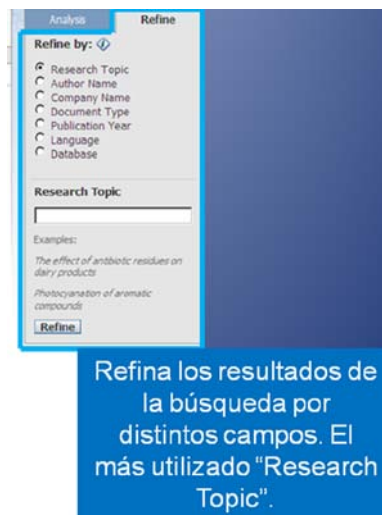
6. Categorizar Referencias



Recopila todos los encabezados de índice asociados con las referencias del listado de resultados y luego los clasifica en encabezados de categoría predefinidos

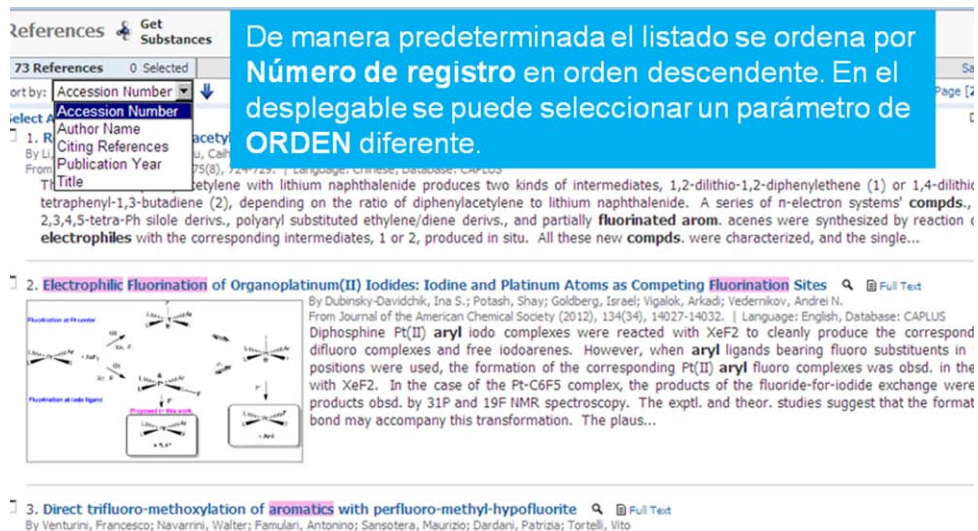
La opción Categorize permite evaluar el conjunto de los resultados.

7. Refinar



Refina los resultados de la búsqueda por distintos campos. El más utilizado "Research Topic".

8. Ordenar



De manera predeterminada el listado se ordena por Número de registro en orden descendente. En el desplegable se puede seleccionar un parámetro de ORDEN diferente.

2. **Electrophilic Fluorination of Organoplatinum(II) Iodides: Iodine and Platinum Atoms as Competing Fluorination Sites**
By Dubinsky-Davidchik, Ina S.; Potash, Shay; Goldberg, Israel; Vignalok, Arkadi; Vedernikov, Andrei N.
From Journal of the American Chemical Society (2012), 134(34), 14027-14032. | Language: English, Database: CAPLUS
Diphosphine Pt(II) aryl iodo complexes were reacted with XeF2 to cleanly produce the corresponding difluoro complexes and free iodoarenes. However, when aryl ligands bearing fluoro substituents in positions were used, the formation of the corresponding Pt(II) aryl fluoro complexes was obsd. in the with XeF2. In the case of the Pt-C6F5 complex, the products of the fluoride-for-iodide exchange were products obsd. by 31P and 19F NMR spectroscopy. The exptl. and theor. studies suggest that the format bond may accompany this transformation. The plaus...

9. Leer

Para ver los detalles de una referencia hacer clic en el título.

Conceptos, sustancias y términos suplementarios asociados a la referencia.


Bibliografía (Las indexadas aparecen en azul).

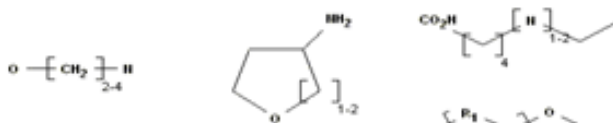
10. Imprimir/Guardar.


IMPRIMIR/GUARDAR

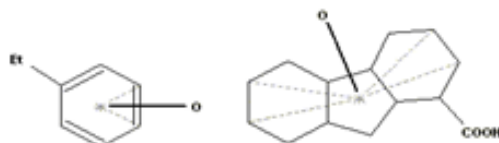
Para imprimir, marco las referencias que quiero imprimir y pulso PRINT.


Para guardar, marco las referencias que quiero guardar y pulso EXPORT.



 Herramienta para repetir grupos y crear estructuras compactas de forma más sencilla.

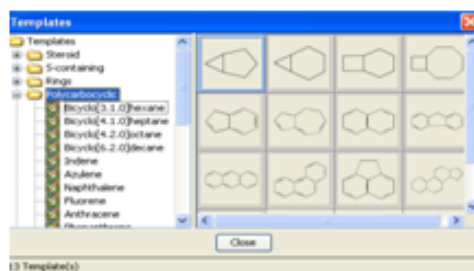




 Señala indicando las distintas posiciones que pueda tomar un grupo funcional o un átomo.




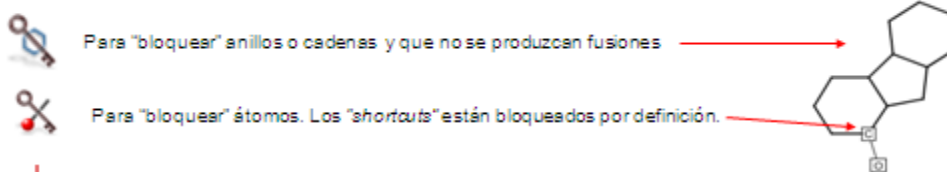

 Dibuja cadenas



 Plantillas predeterminadas






 Para seleccionar, copiar y pegar átomos, grupos, o fragmentos de estructuras



 Para seleccionar, copiar y pegar estructuras.




 Se usa para rotar una estructura o un fragmento – que no esté unido – en el sentido de las agujas del reloj o el contrario.


 Invertir una estructura, bien horizontal o verticalmente. Se seleccionan los puntos que se quieren invertir: control + click y: a) horizontal: marcar H; b) vertical: marcar V


 Añadir carga positiva


 Añadir carga negativa

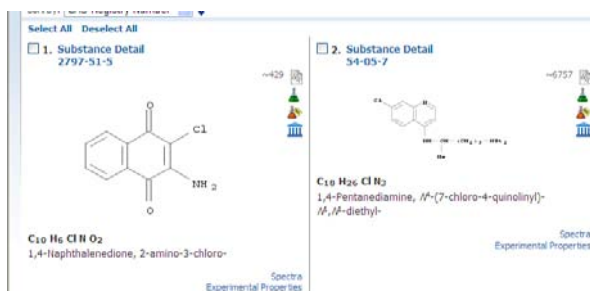
3. TIPOS DE BÚSQUEDA POR SUSTANCIAS

- Markus:** encuentra referencias de patente al comparar su consulta de estructura con genéricas indicadas en la patente.
- Molecular Formula:** encuentra sustancias con una fórmula molecular coincidente con la consulta que realizamos.
- Substance Identifier:**
 - dibujo de una estructura para encontrar sustancias de interés. Puede ser una búsqueda exacta o similar así como una subestructura.
 - por nombre químico (p.e. **chloroquine, 2797-51-5**)
 - por el número CAS Registry TM.

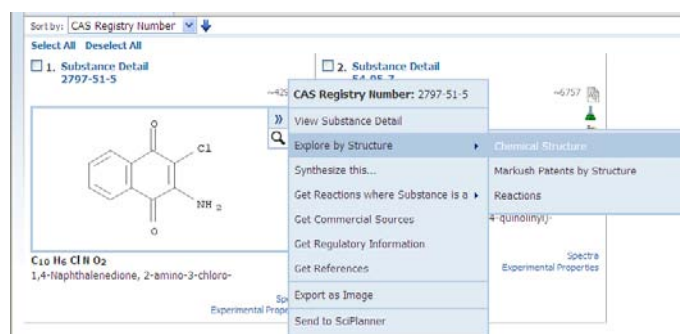
3.1 BÚSQUEDA POR "SUBSTRUCTURE SEARCHING"

Con esta opción Scifinder buscará sustancias que contengan la consulta incorporada como una subestructura dentro de la estructura química.

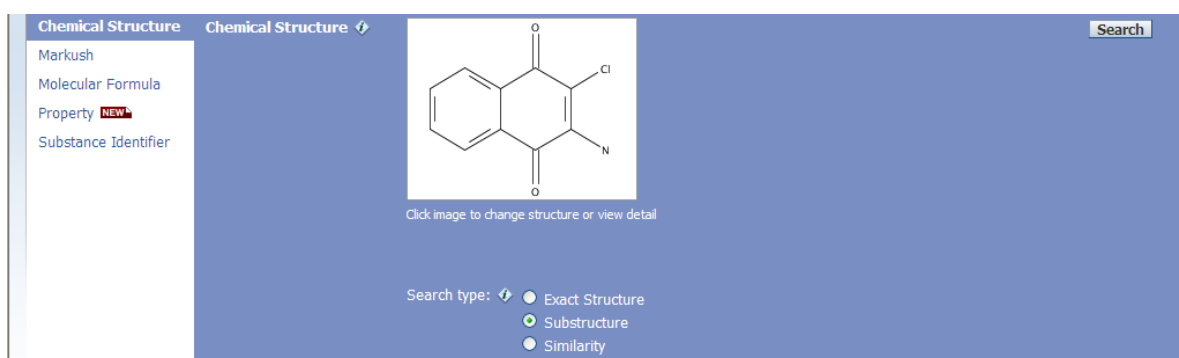
1. Elegimos la opción "Substance Identifier" (Chloroquine, 2797-51-5)
2. Recuperamos dos sustancias:



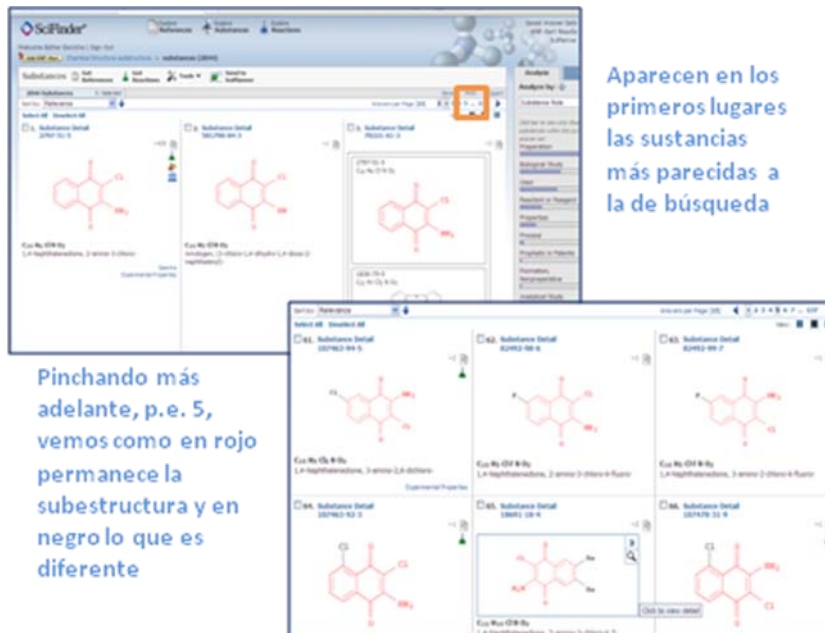
3. Elegimos una de ellas, al situar el cursor sobre la sustancia aparecen varias opciones.



4. Volvemos a la opción "explore substance" – "Chemical Structure". Seleccionado por defecto aparece "Substructure", pinchamos en "search".



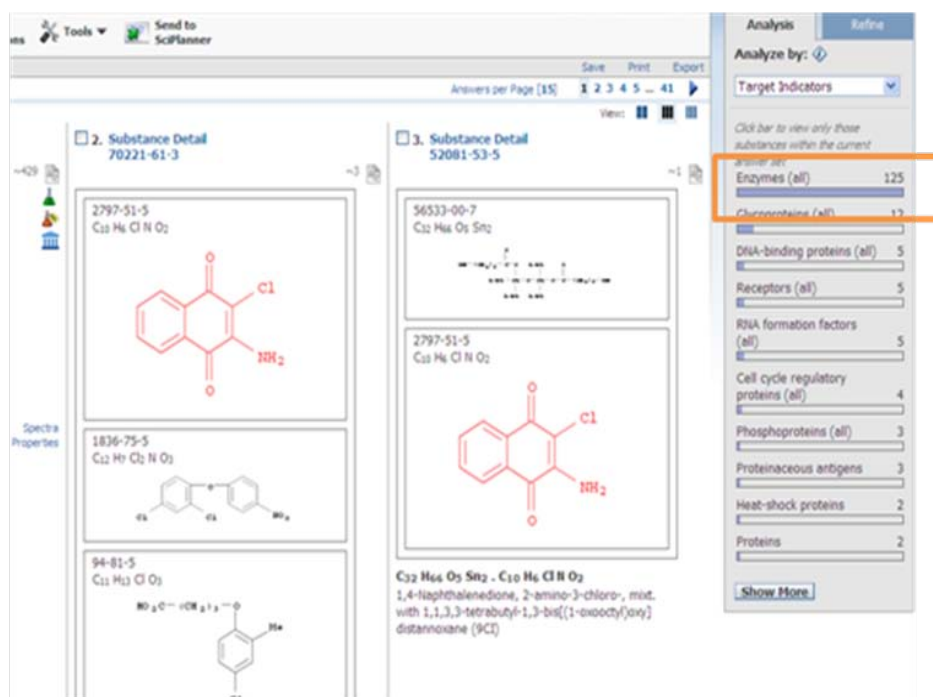
5. Aparecen los resultados de búsqueda (por relevancia), resaltando en rojo la estructura principal que hemos introducido como búsqueda. Así se puede ver en qué lugar se ha producido la sustitución en esa estructura.



Aparecen en los primeros lugares las sustancias más parecidas a la de búsqueda

Pinchando más adelante, p.e. 5, vemos como en rojo permanece la subestructura y en negro lo que es diferente

6. Para limitar, utilizamos la opción "Analyze", seleccionando "Substance role"
7. De los resultados obtenidos, podemos mantenerlos usando la opción "Keep analysis" o no, con "Clear analysis". Pulsamos "Keep analysis".
8. Ahora seguimos limitando, esta vez por "Target indicators"



Analysis Refine

Analyze by: Target Indicators

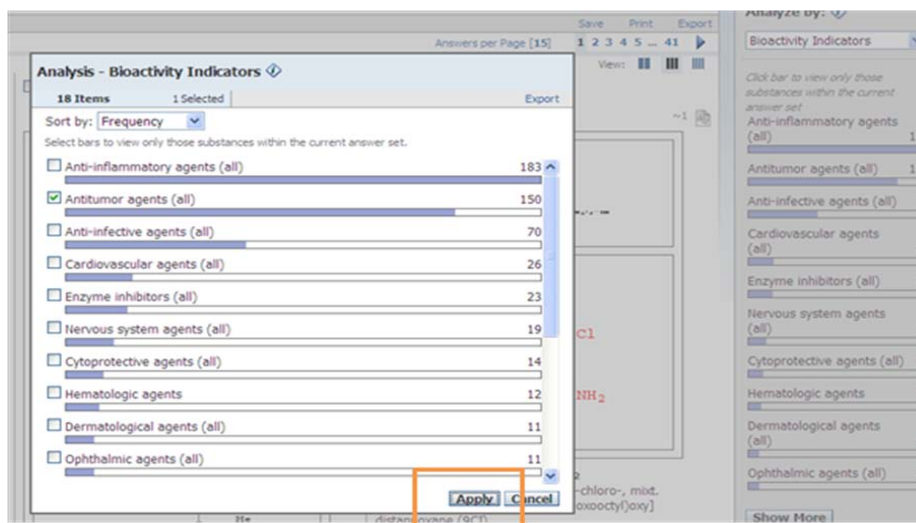
Click bar to view only those substances within the current analysis set:

Enzymes (all)	125
Glycoproteins (all)	17
DNA-binding proteins (all)	5
Receptors (all)	5
RNA formation factors (all)	5
Cell cycle regulatory proteins (all)	4
Phosphoproteins (all)	3
Proteinaceous antigens	3
Heat-shock proteins	2
Proteins	2

Show More

El término más frecuente con las sustancias recuperadas es "Enzymes".

9. Volvemos a limitar por "Analyze" siguiendo la secuencia: "Bioactivity indicators" – "show more" – "Antitumors Agents" – Apply

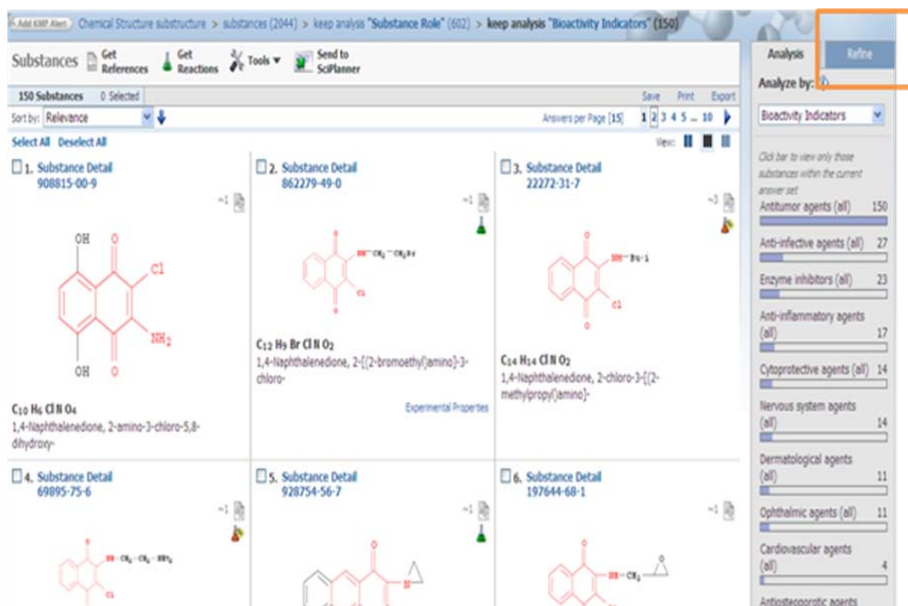


The screenshot shows the 'Analysis - Bioactivity Indicators' window. The 'Sort by' dropdown is set to 'Frequency'. A list of bioactivity indicators is displayed with their respective counts. The 'Antitumor agents (all)' indicator is selected with a checkmark. At the bottom of the list, the 'Apply' and 'Cancel' buttons are visible, with 'Apply' highlighted by an orange box.

Indicator	Count
Anti-inflammatory agents (all)	183
<input checked="" type="checkbox"/> Antitumor agents (all)	150
Anti-infective agents (all)	70
Cardiovascular agents (all)	26
Enzyme inhibitors (all)	23
Nervous system agents (all)	19
Cytoprotective agents (all)	14
Hematologic agents	12
Dermatological agents (all)	11
Ophthalmic agents (all)	11

Se recuperan todas las sustancias que tengan como indicador de Bioactividad "agentes antitumorales".

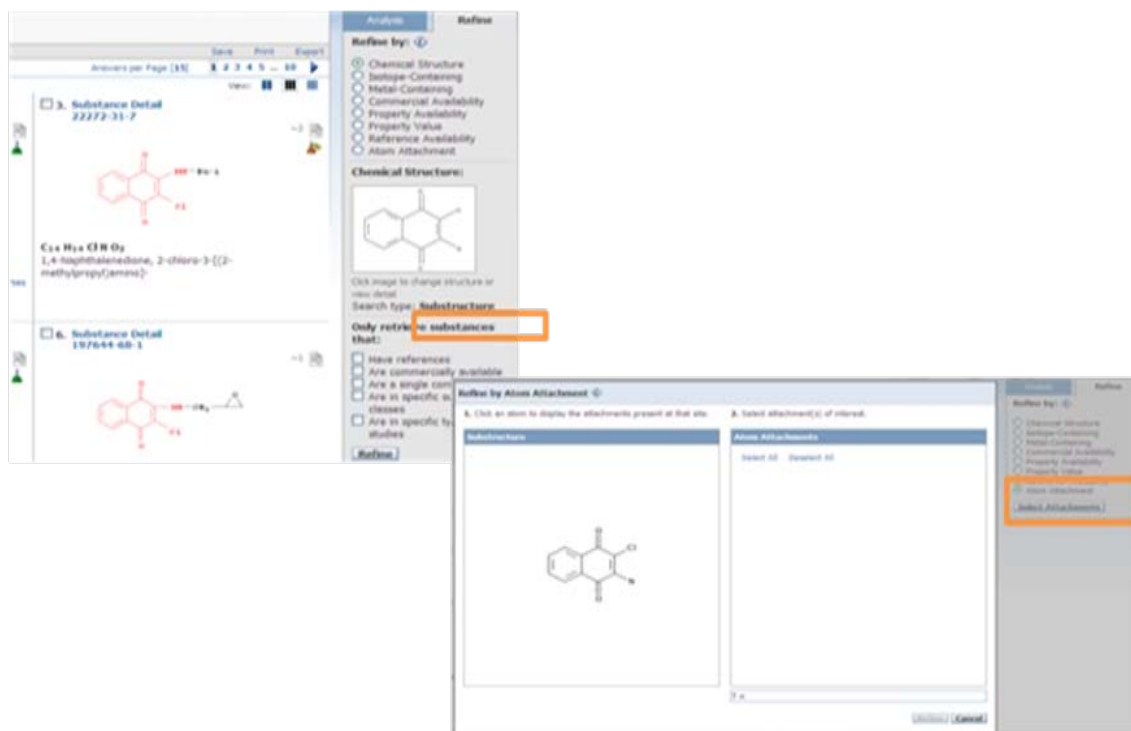
10. Mantenemos el análisis "Keep analysis" y vamos a limitar, esta vez por "Refine":



The screenshot shows the 'Substances' interface with a grid of chemical structures. The 'Refine' button in the top right corner is highlighted with an orange box. The grid displays six substance details, each with a chemical structure, name, and CAS number.

Substance Detail	CAS Number	Chemical Formula	Name
1. Substance Detail	908815-00-9	C ₁₀ H ₆ ClN ₂ O ₄	1,4-naphthalenedione, 2-amino-3-chloro-5,8-dihydroxy-
2. Substance Detail	862279-49-0	C ₁₂ H ₉ BrClN ₂ O ₂	1,4-naphthalenedione, 2-[(2-bromoethyl)amino]-3-chloro-
3. Substance Detail	22272-31-7	C ₁₄ H ₁₄ ClN ₂ O ₂	1,4-naphthalenedione, 2-chloro-3-[(2-methylpropyl)amino]-
4. Substance Detail	69895-75-6	C ₁₀ H ₆ ClN ₂ O ₄	1,4-naphthalenedione, 2-amino-3-chloro-5,8-dihydroxy-
5. Substance Detail	928754-56-7	C ₁₂ H ₉ BrClN ₂ O ₂	1,4-naphthalenedione, 2-[(2-bromoethyl)amino]-3-chloro-
6. Substance Detail	197644-68-1	C ₁₄ H ₁₄ ClN ₂ O ₂	1,4-naphthalenedione, 2-chloro-3-[(2-methylpropyl)amino]-

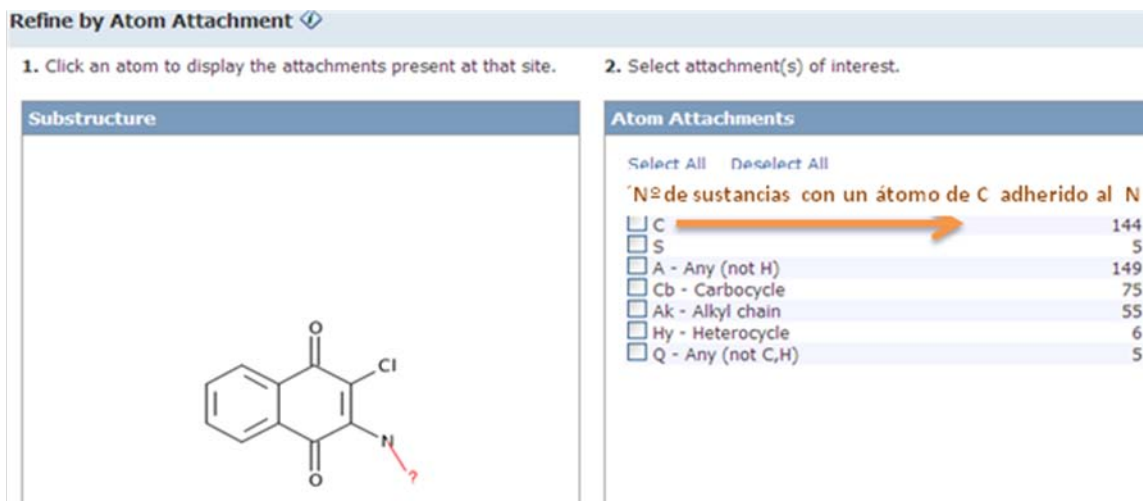
11. "Atom attachments" – "Select attachments".



The screenshot shows the 'Refine' interface with the following elements:

- Refine by:**
 - Chemical Structure
 - Isotope-Containing
 - Metal-Containing
 - Commercial Availability
 - Property Available
 - Reference Available
 - Atom Attachment
- Chemical Structure:**
 - Click image to change structure or view detail
 - Search type: **Substructure** (highlighted with an orange box)
 - Only retrieve substances that:
 - Have references
 - Are commercially available
 - Are a single component
 - Are in specific classes
 - Are in specific studies
- Refine by Atom Attachment:**
 - 1. Click on atom to display the attachments present at that site.
 - 2. Select attachment(s) of interest.
- Atom Attachments:**
 - Select All Deselect All
 - Nº de sustancias con un átomo de C adherido al N**
 - C 144 (highlighted with an orange arrow)
 - S 5
 - A - Any (not H) 149
 - Cb - Carbocycle 75
 - Ak - Alkyl chain 55
 - Hy - Heterocycle 6
 - Q - Any (not C,H) 5

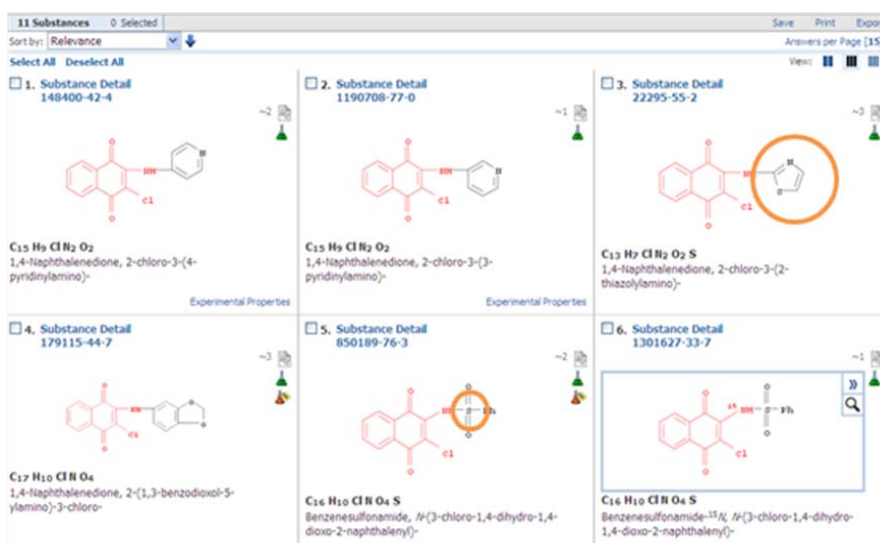
12. Seleccionamos el átomo de Nitrógeno para ver qué fijaciones existen en ese punto, apareciendo las diferentes fijaciones.



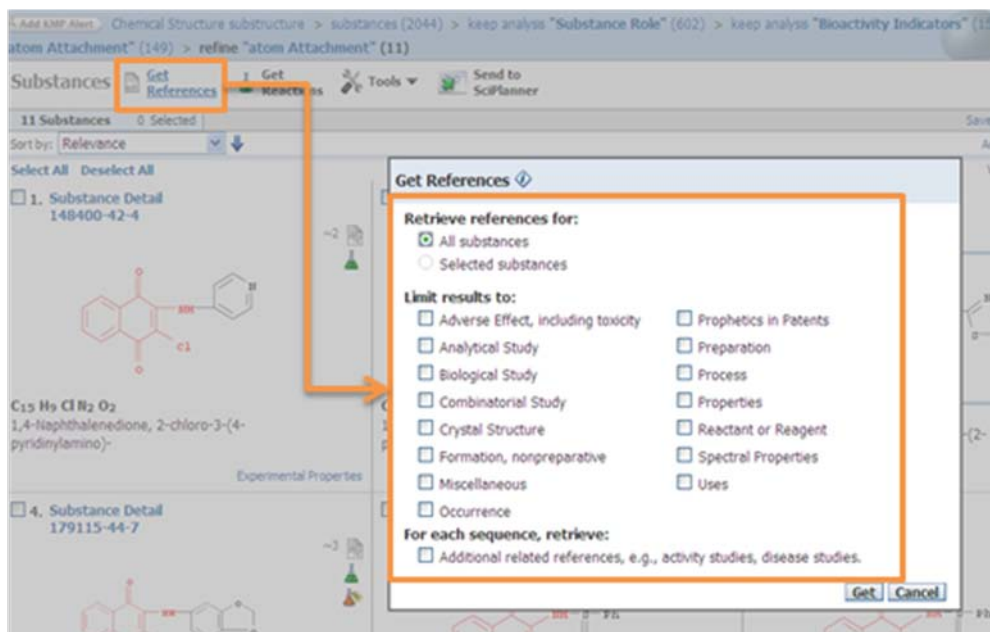
The screenshot shows the 'Refine by Atom Attachment' interface with the following elements:

- 1. Click on atom to display the attachments present at that site.**
- 2. Select attachment(s) of interest.**
- Substructure:**
 - Chemical structure of 1,4-naphthoquinone-2-chloro-3-((2-methylpropyl)amino) is shown with a red question mark next to the nitrogen atom.
- Atom Attachments:**
 - Select All Deselect All
 - Nº de sustancias con un átomo de C adherido al N**
 - C 144 (highlighted with an orange arrow)
 - S 5
 - A - Any (not H) 149
 - Cb - Carbocycle 75
 - Ak - Alkyl chain 55
 - Hy - Heterocycle 6
 - Q - Any (not C,H) 5

13. Seleccionamos las dos últimas opciones: heterociclos y sustancias que no tienen adheridos átomos de C ni de H.



14. Si queremos recuperar las referencias asociadas a estas sustancias, pinchamos en "Get References".



Add EMP Alert Chemical Structure substructure > substances (2044) > keep analysis "Substance Role" (602) > keep analysis "Bioactivity Indicators" (15) > atom Attachment (149) > refine "atom Attachment" (11)

Substances 11 Substances 0 Selected
 Sort by: Relevance
 Select All Deselect All

1. Substance Detail
 148400-42-4
C15H9ClN2O2
 1,4-Naphthalenedione, 2-chloro-3-(4-pyridinylamino)-
 Experimental Properties

4. Substance Detail
 179115-44-7
C17H10ClN2O4
 1,4-Naphthalenedione, 2-(1,3-benzodioxol-5-ylamino)-3-chloro-
 Experimental Properties

Get References

Retrieve references for:
 All substances
 Selected substances

Limit results to:

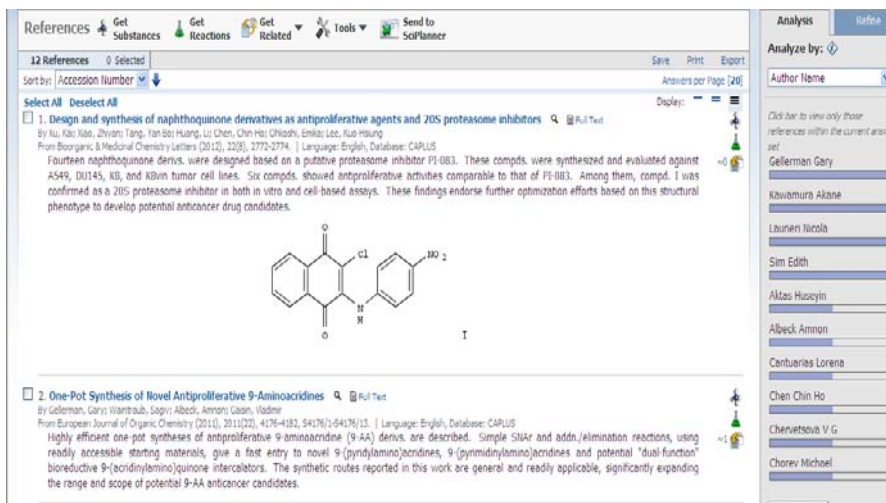
<input type="checkbox"/> Adverse Effect, including toxicity	<input type="checkbox"/> Prophetics in Patents
<input type="checkbox"/> Analytical Study	<input type="checkbox"/> Preparation
<input type="checkbox"/> Biological Study	<input type="checkbox"/> Process
<input type="checkbox"/> Combinatorial Study	<input type="checkbox"/> Properties
<input type="checkbox"/> Crystal Structure	<input type="checkbox"/> Reactant or Reagent
<input type="checkbox"/> Formation, nonpreparative	<input type="checkbox"/> Spectral Properties
<input type="checkbox"/> Miscellaneous	<input type="checkbox"/> Uses
<input type="checkbox"/> Occurrence	

For each sequence, retrieve:
 Additional related references, e.g., activity studies, disease studies.

Get Cancel

Aquí podemos seleccionar la opción por defecto "All substances" o limitar los resultados por otras opciones propuestas por la base de datos.

15. Pulsamos en "Get" y obtendremos las referencias.



References

12 References 0 Selected Save Print Export

Sort by: Accession Number Anivers per Page: 200

Select All Deselect All

1. Design and synthesis of naphthoquinone derivatives as antiproliferative agents and 20S proteasome inhibitors

By Yu, Kai; Xiao, Zhifan; Tang, Yan; Bai, Huang; Lu, Chen; Chen, Hai; Qian, Emlin; Lee, Kuo-Hsiung

From Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters (2012), 22(5), 2772-2774. | Language: English, Database: CAPLUS

Fourteen naphthoquinone derivs. were designed based on a putative proteasome inhibitor PI 003. These compds. were synthesized and evaluated against A549, DU145, KB, and K562 tumor cell lines. Six compds. showed antiproliferative activities comparable to that of PI 003. Among them, compd. 1 was confirmed as a 20S proteasome inhibitor in both in vitro and cell-based assays. These findings endorse further optimization efforts based on this structural phenotype to develop potential anticancer drug candidates.

Chemical structure of compound 1: O=C1C(=O)c2ccc(O)c(Cl)c2C1=O

2. One-Pot Synthesis of Novel Antiproliferative 9-Aminoacridines

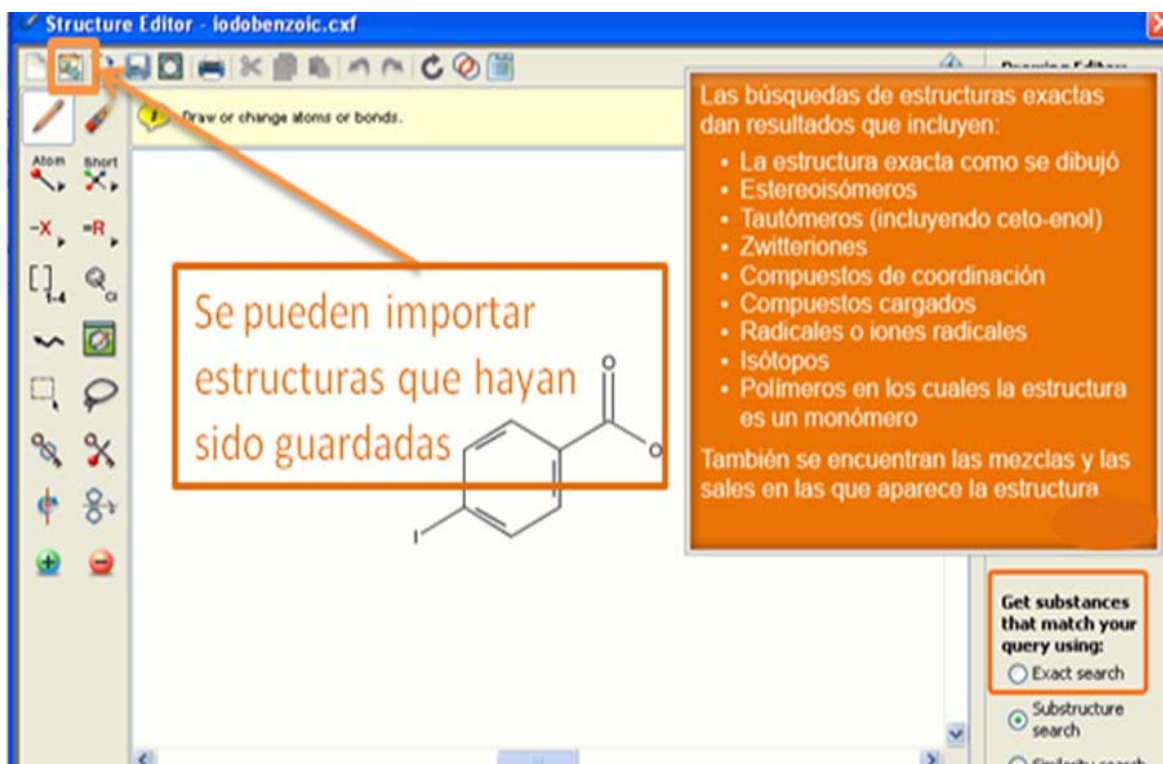
By Geleman, Gary; Wantraub, Sogri; Albeck, Amnon; Casan, Vladimir

From European Journal of Organic Chemistry (2011), 2011(22), 4176-4181, 54(767)-64(76)13. | Language: English, Database: CAPLUS

Highly efficient one-pot syntheses of antiproliferative 9-aminoacridine (9-AA) derivs. are described. Simple SNAr and addn./elimination reactions, using readily accessible starting materials, give a fast entry to novel 9-(pyridylamino)acridines, 9-(pyrimidinylamino)acridines and potential "dual-function" bioreductive 9-(oxindylamino)quinone intercalators. The synthetic routes reported in this work are general and readily applicable, significantly expanding the range and scope of potential 9-AA anticancer candidates.

3.3 BÚSQUEDA POR "ESTRUCTURA EXACTA"

Se sigue el mismo procedimiento que en el caso anterior pero seleccionado "Exact structure".



Structure Editor - iodobenzoic.cxf

Draw or change atoms or bonds.

Se pueden importar estructuras que hayan sido guardadas

Las búsquedas de estructuras exactas dan resultados que incluyen:

- La estructura exacta como se dibujó
- Estereoisómeros
- Tautómeros (incluyendo ceto-enol)
- Zwitteriones
- Compuestos de coordinación
- Compuestos cargados
- Radicales o iones radicales
- Isótopos
- Polímeros en los cuales la estructura es un monómero

También se encuentran las mezclas y las sales en las que aparece la estructura

Get substances that match your query using:

- Exact search
- Substructure search
- Similarity search

Más información:

Página de Facebook. Tutoriales
<http://www.facebook.com/bucmqi>



Código QR para móviles

Página Web de la Biblioteca de Químicas.
Tutoriales. <http://www.ucm.es/BUCM/qui>



Código QR para móviles