Recherchen in SciFinder

Grundlagen

Erstellt von Heike Seidel unter Verwendung der Materialien von Dr. Ina Weiss und Heike Göbel, Uni Jena, und des Chemical Absctacts Service

April 2010

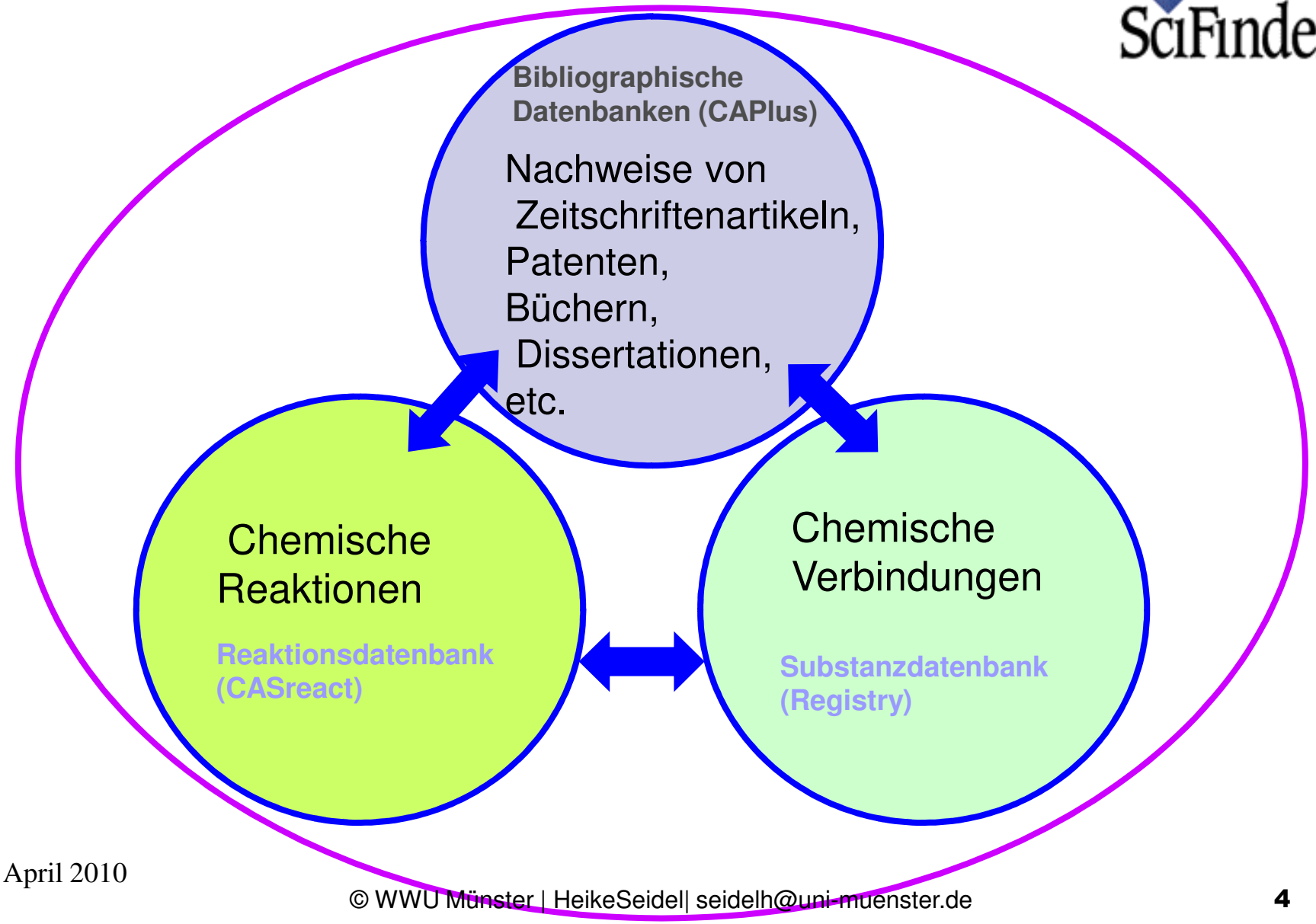
Gliederung

1. Allgemeine Informationen
2. Die Recherche
3. Zusammenarbeit mit anderen
4. Registrierung & Start der Recherche

Was ist drin?

- **CAPlus** Bibliografische Datenbank > 31 Mio. Einträge ab 1907 und mehr als 200.000 ältere Einträge
- **MEDLINE** Biomedizinische Informationen > 18 Mio Einträge ab 1949
- **CASreact** > 17 Mio. Einstufen- und Mehrstufen Reaktionen ab 1840
- **Registry** > 50 Mio. organische und anorganische Verbindungen mit mehr als 1 Mrd. „predicted property values“ und mehr als 2 Mio. „experimental properties“
  > 61 Mio. Sequenzen
- **Chemcats** > 35 Mio Käufliche Substanzen > 1000 Kataloge, > 900 Produzenten
- **Chemlist** Regulated CHEMicals LISTing > 248.000, Informationen zu chemischen Substanzen aus nationalen, US-amerikanischen und internationalen Verzeichnissen und Regelwerken

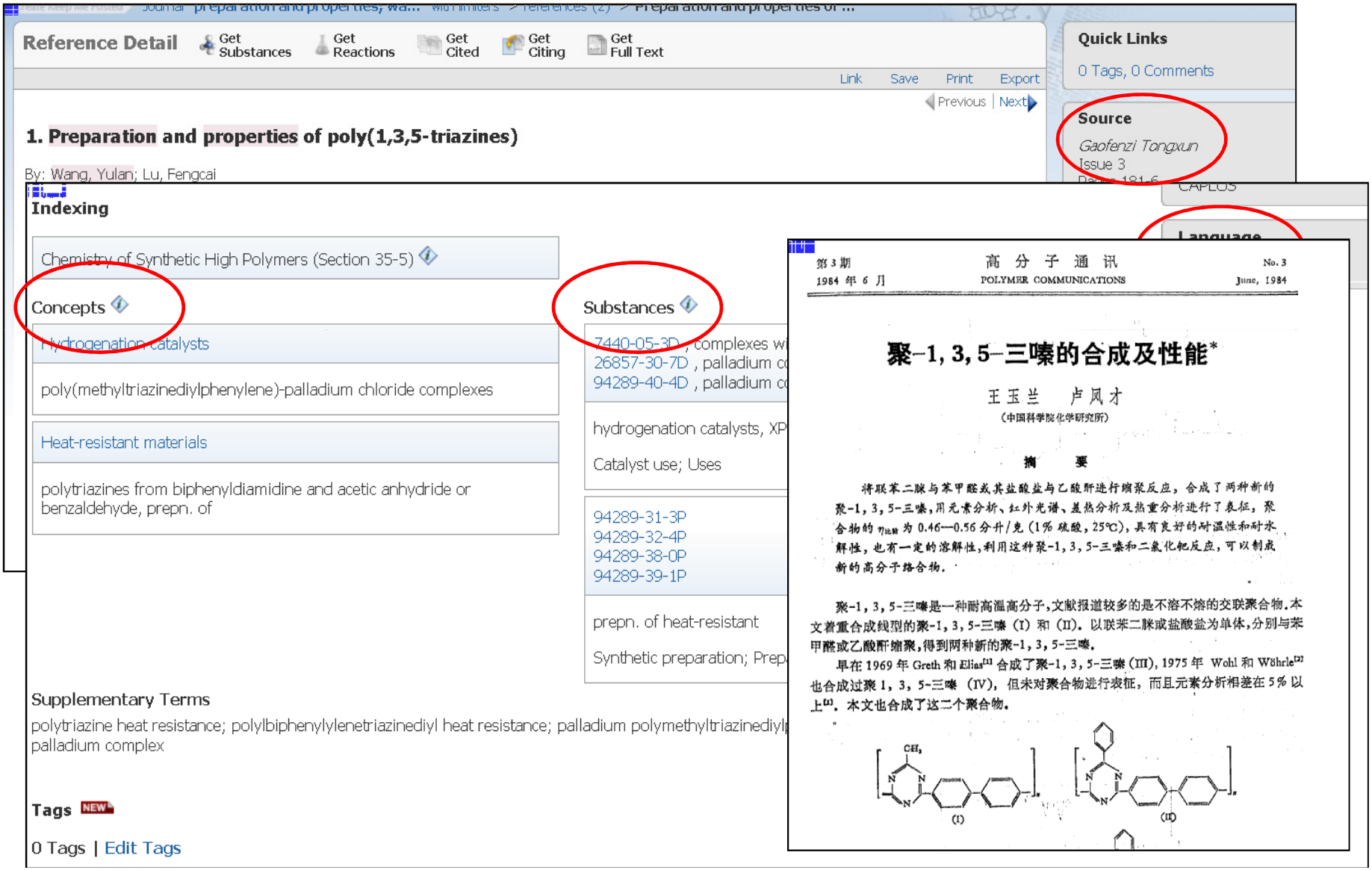
Alles unter einem Dach!



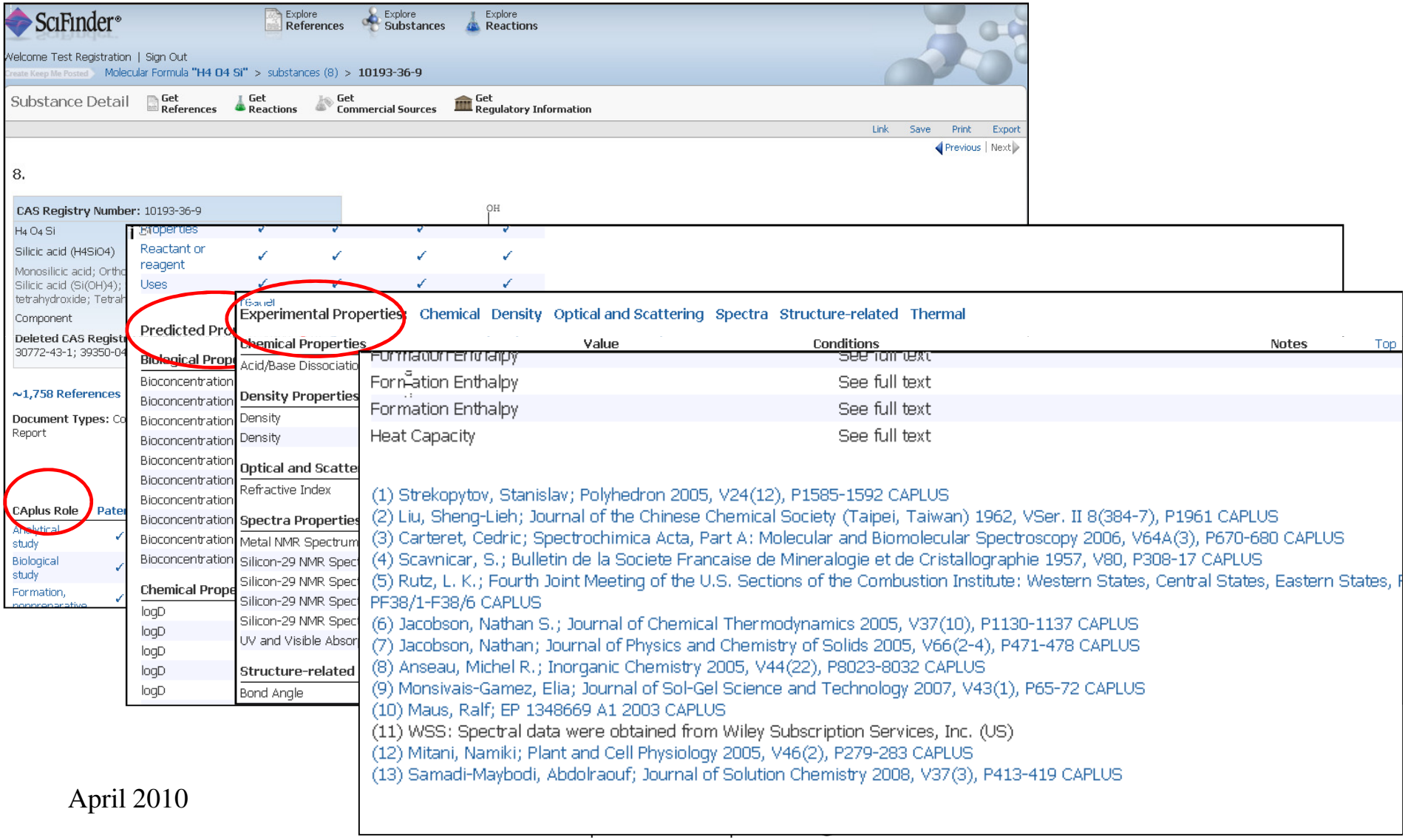
Gleiche Daten neue Oberfläche

SciFinder Scholar 2007	SciFinder (on the Web)
Installation der jeweils aktuellen Software für PC oder MAC, für Studis nur an einigen Uni-Rechnern	Nutzung der jeweils aktuellen Version im Netz, keine Installation, für Studis auf eigenem Rechner zugänglich
Schnellere Strukturensuchen Einstellungen sind nicht zu speichern „Auslaufmodell“: keine neuen Versionen geplant; neue Funktionen aus Web-Version nicht umgesetzt	Persönliche Einstellungen „Keep me posted“ + viele andere zusätzliche Funktionen Java, Java-Script, Cookies erforderlich Strukturensuchen langsamer

Bibliographischer Eintrag: CAPlus



Substanz-Eintrag: Registry



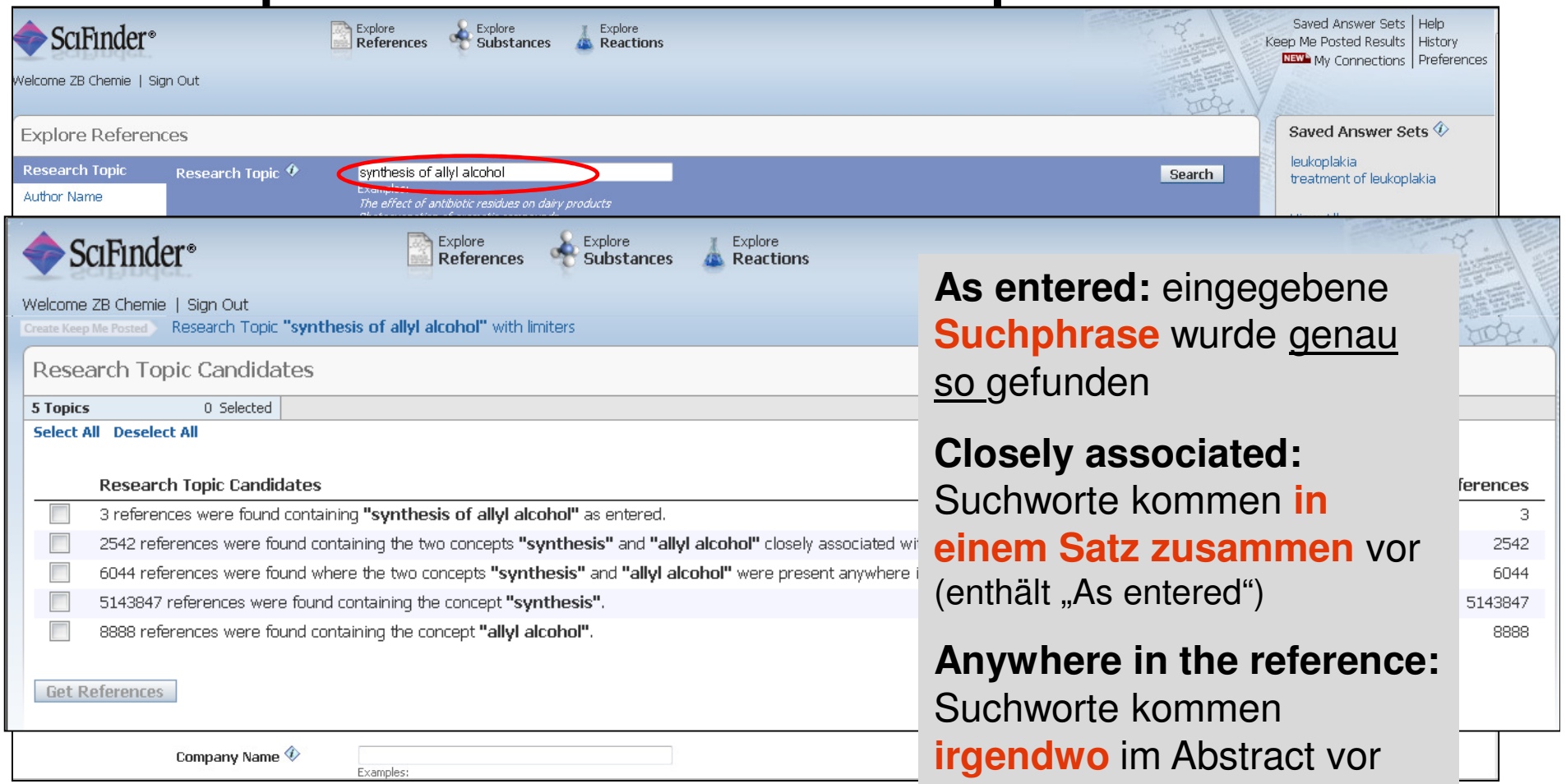
2. Teil: Die Recherche

- Nach Themen suchen
- Suche nach Autorennamen
- Substanzsuche mit Namen oder Nummern
- Substanzsuche mit Strukturen
- Reaktionensuche

Die richtigen Fragen stellen

- SciFinder “versteht” nur Englisch
- automatische Trunkierung, Suche nach Vergangenheitsformen oder anderen Wortformen
- Thematische Suche (Explore Research Topic):
  - Machen Sie sich mit dem Thema vertraut und zerlegen es in mehrere Komponenten (Hauptgedanken) →”Konzepte”
  - Trennen Sie Begriffe durch geeignete Präpositionen (of, in, with, by). SciFinder wertet Präpositionen aus und identifiziert daraus Konzepte.
  - Lassen Sie redundante und zu allgemeine Worte weg:
    statt: steroid analysis with hplc besser: hplc of steroids
  - Adjektive, die für mehrere Substantive gelten sollen, mehrfach eingeben.
    falsch: „I am interested in chiral reduction or hydrogenation“
    richtig: „I am interested in chiral reduction or chiral hydrogenation“
  - Richtiges Verwenden von AND und OR: Beispiel, eigentlich ist OR gemeint
    „HPLC of steroids and alkaloids“ statt „HPLC of steroids or alkaloids“
  - Verwendung von Synonymen: Begriffe in Klammern setzen
    cancer (carcinoma, neoplasm, tumor)

Thematische Suche (Topic): Suchptionen und Konzepte

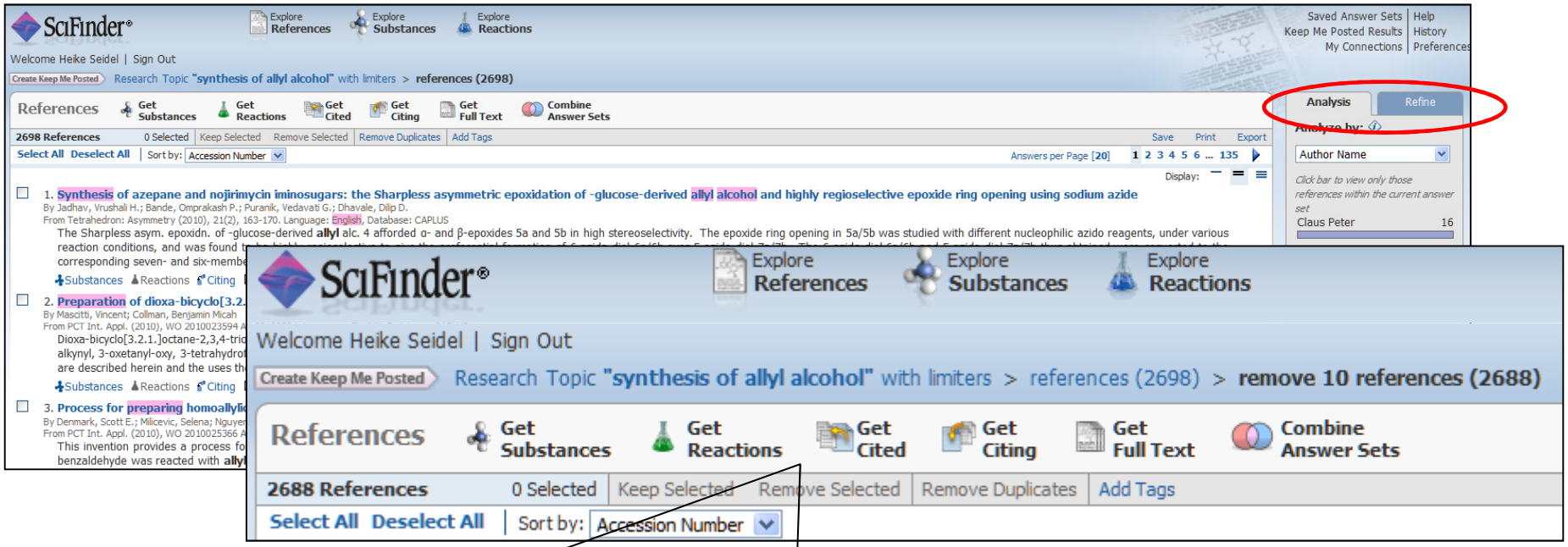


As entered: eingegebene **Suchphrase** wurde genau so gefunden

Closely associated: Suchworte kommen **in einem Satz zusammen** vor (enthält „As entered“)

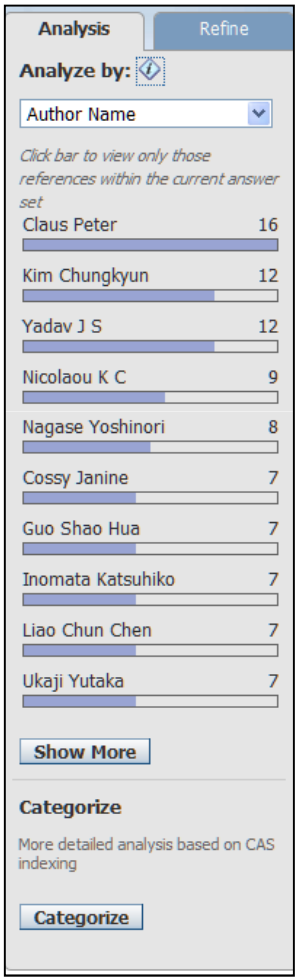
Anywhere in the reference: Suchworte kommen **irgendwo** im Abstract vor (enthält „Closely associated “)

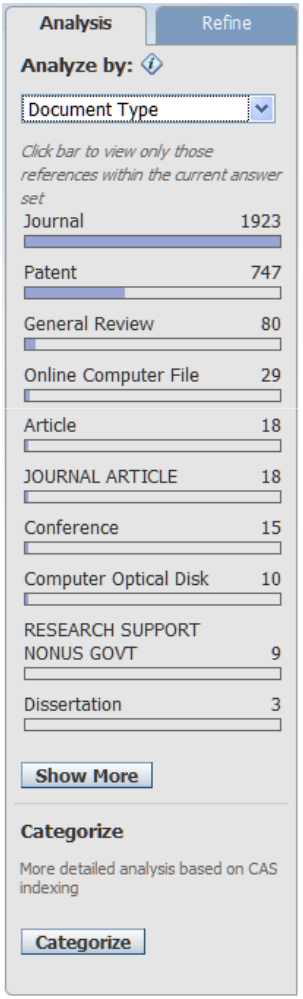
Überblick: Trefferliste

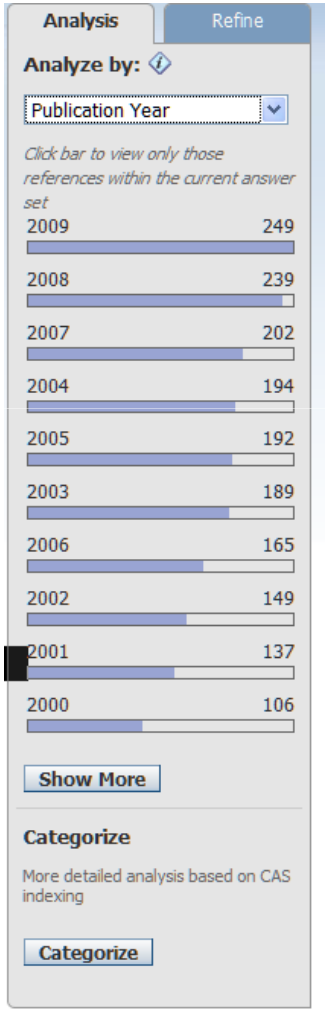


- Get Substances: Substanzen der ausgewählten Referenzen
- Get Reactions: Reaktionen der ausgewählten Referenzen
- Get Cited: zitierte Artikel in den ausgewählten Referenzen
- Get Citing: Artikel, die die ausgewählten Referenzen zitieren (ab 1997)
- Get Full Text: Prüfung, ob Volltext verfügbar (elektronisch/gedruckt)
- Combine Answer Sets: Ergebnisse mehrerer Recherchen verknüpfen

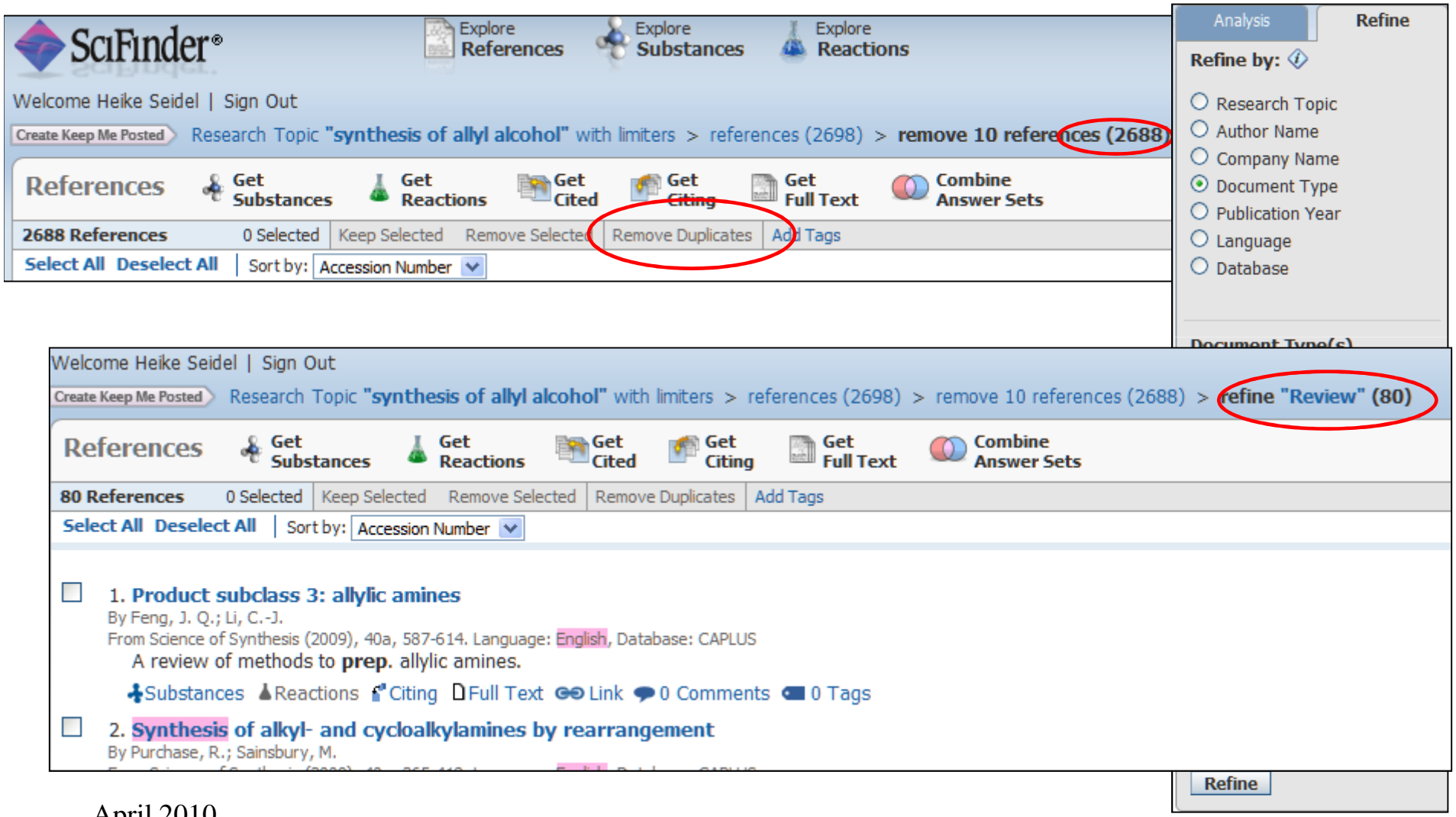
Analysis: Trefferzahl bleibt gleich



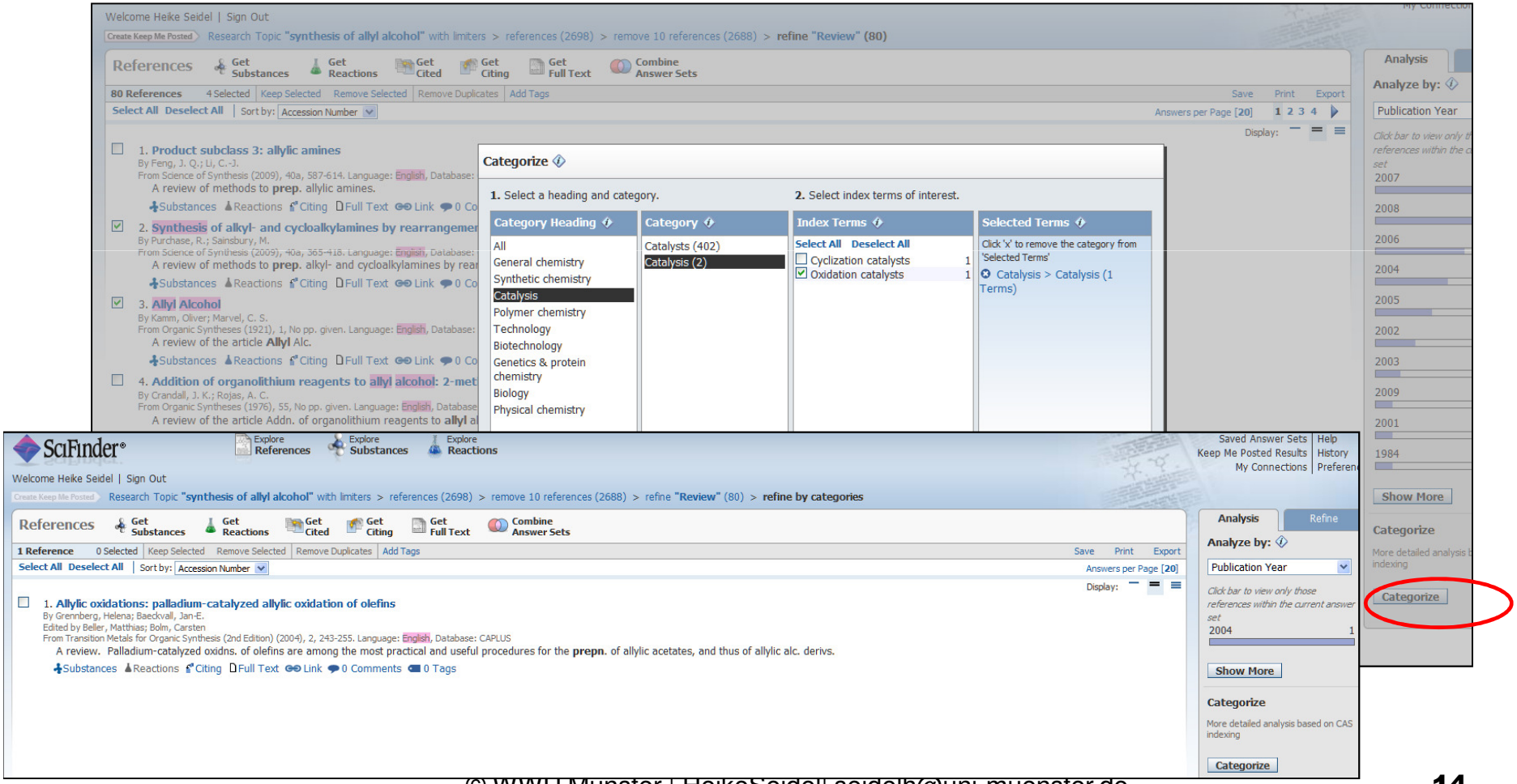




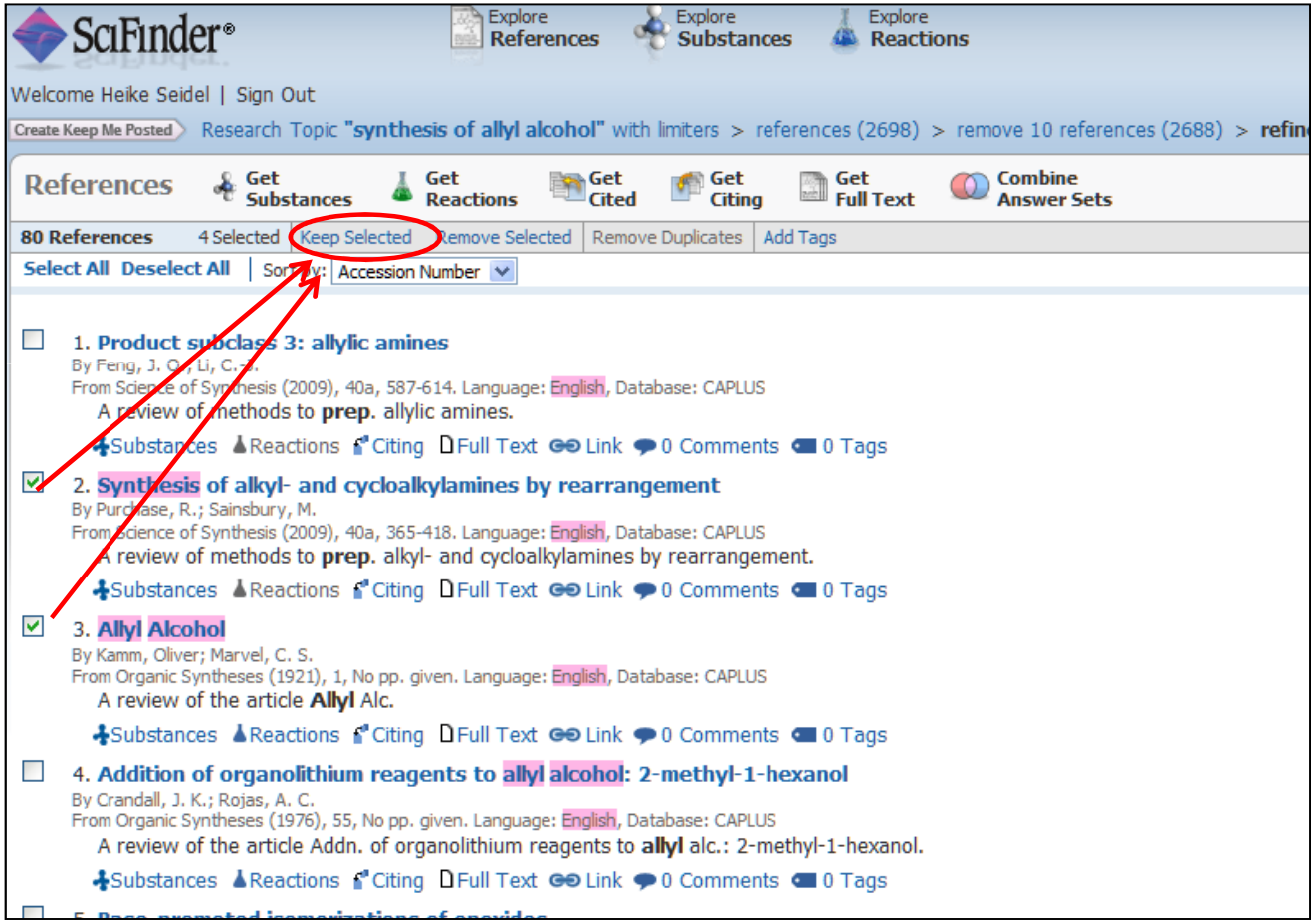
Trefferliste: Refine – geringere Trefferzahl



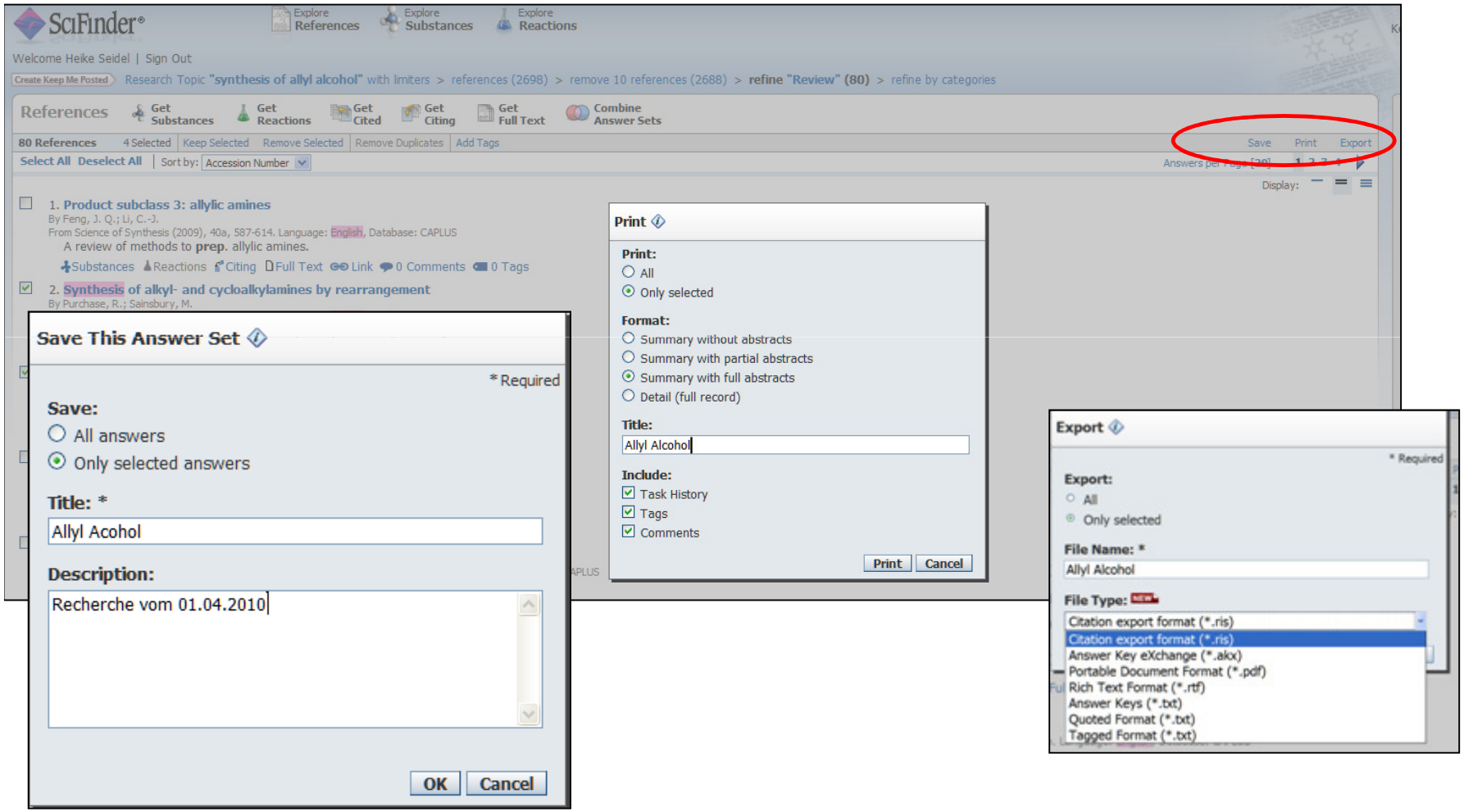
Categorize: geringere Treffermenge (= Refine)



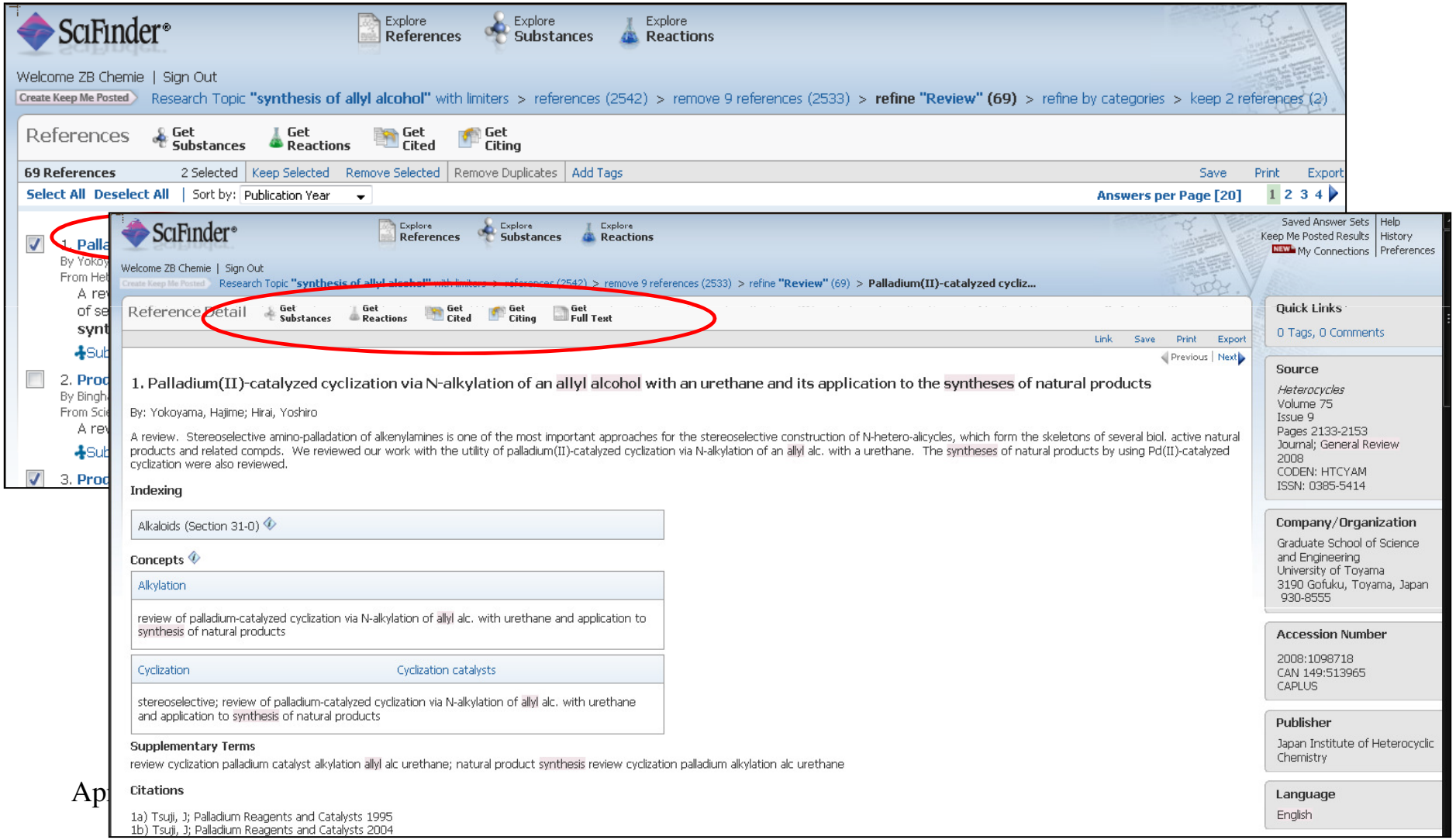
Keep Selected:
Eigene Trefferliste zusammenstellen



Save (auf CAS-Server!), Print, Export



Einzeltreffer aus der Liste



Volltext verfügbar?

SciFinder®

Explore References | Explore Substances | Explore Reactions

Welcome Heike Seidel | Sign Out

Create Keep Me Posted — Research Topic "synthesis of allyl alcohol" with limiters > references (2698) > remove 10 references (2688) > refine "finn" (2)

References | Get Substances | Get Reactions | Get Cited | Get Citing | Get Full Text | Combine Answer Sets

2 References | Select All | Deselect All

ChemPo… CONN

Docum…

Glycosy…

Glycosy…

JOC*Note*

pubs.acs.org/joc

Glycosylation Using Unprotected Alkynyl Donors

Sreeman K. Mamidyala* and M.G. Finn*

Department of Chemistry and The Skaggs Institute for Chemical Biology, The Scripps Research Institute, 10550 N. Torrey Pines Rd., La Jolla, California 92037

sreeman@scripps.edu; mgfinn@scripps.edu

Received September 8, 2009

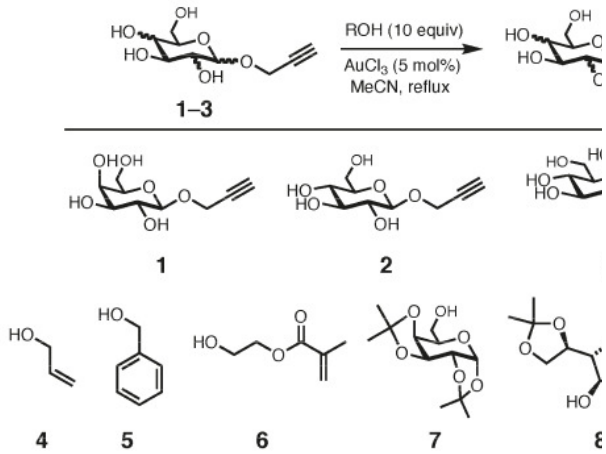
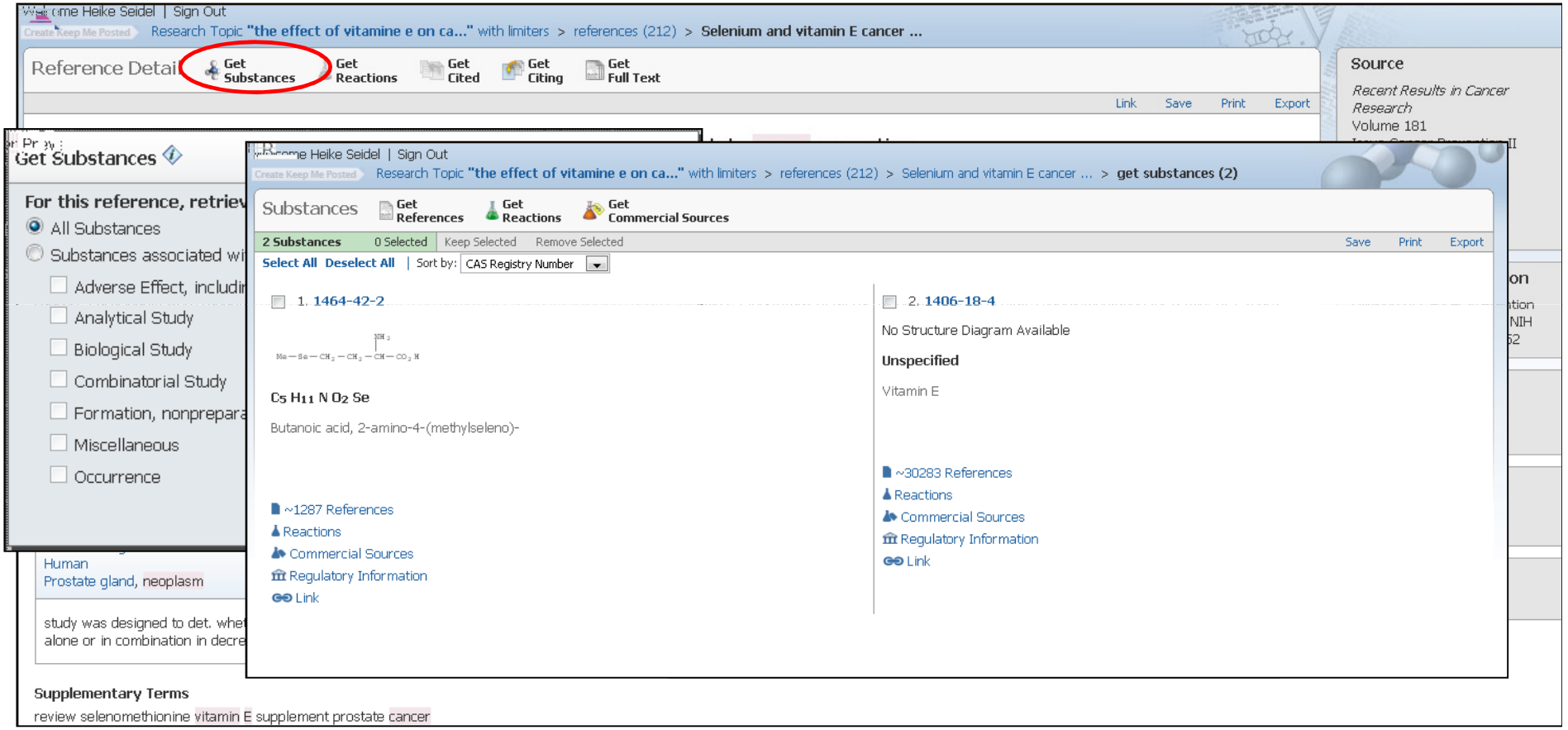


FIGURE 1. Synthesis of glycosides by the activati… donors **1**–**3** with $AuCl_3$.

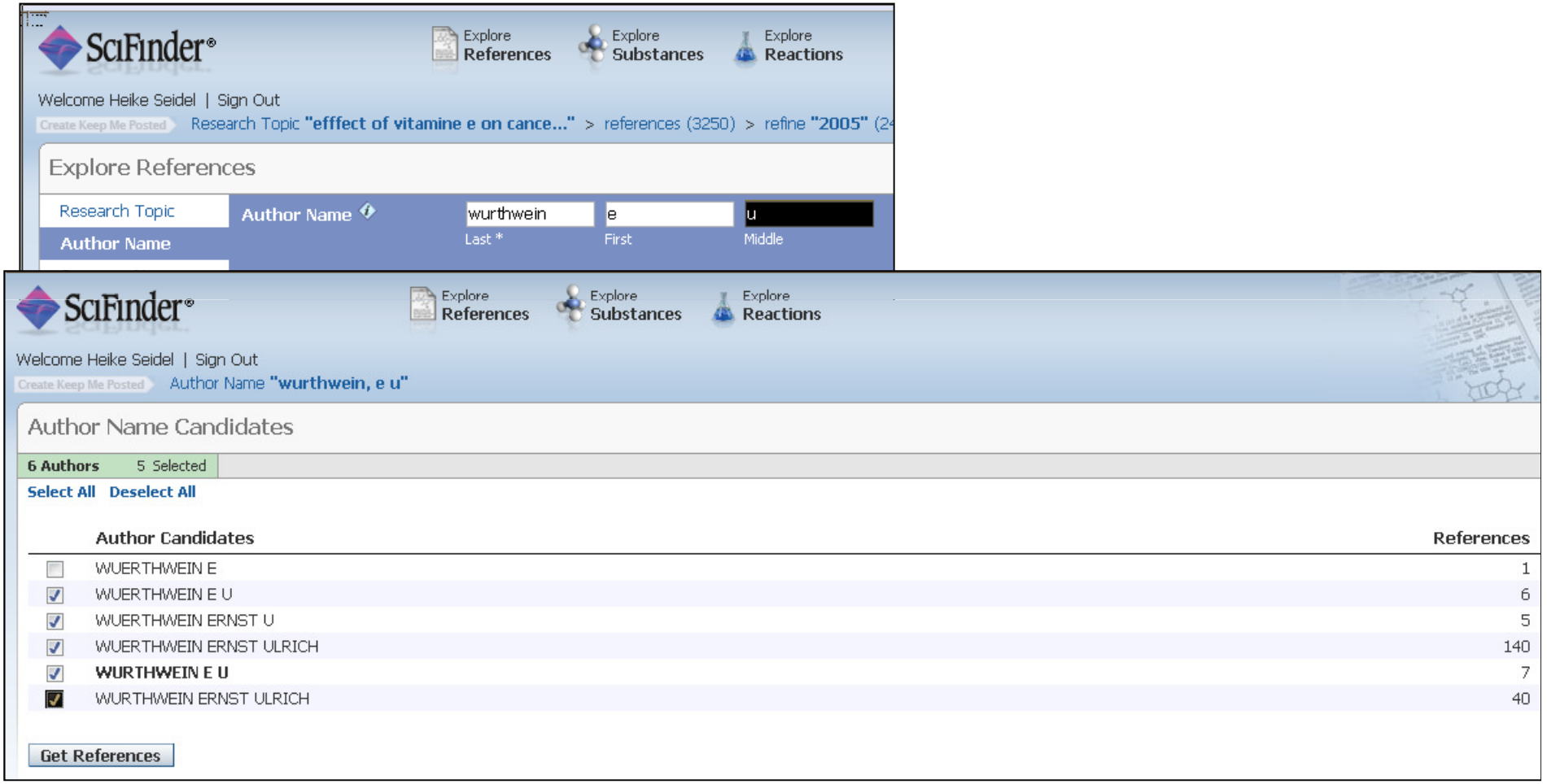
April 2010

Um welche Substanzen geht es?

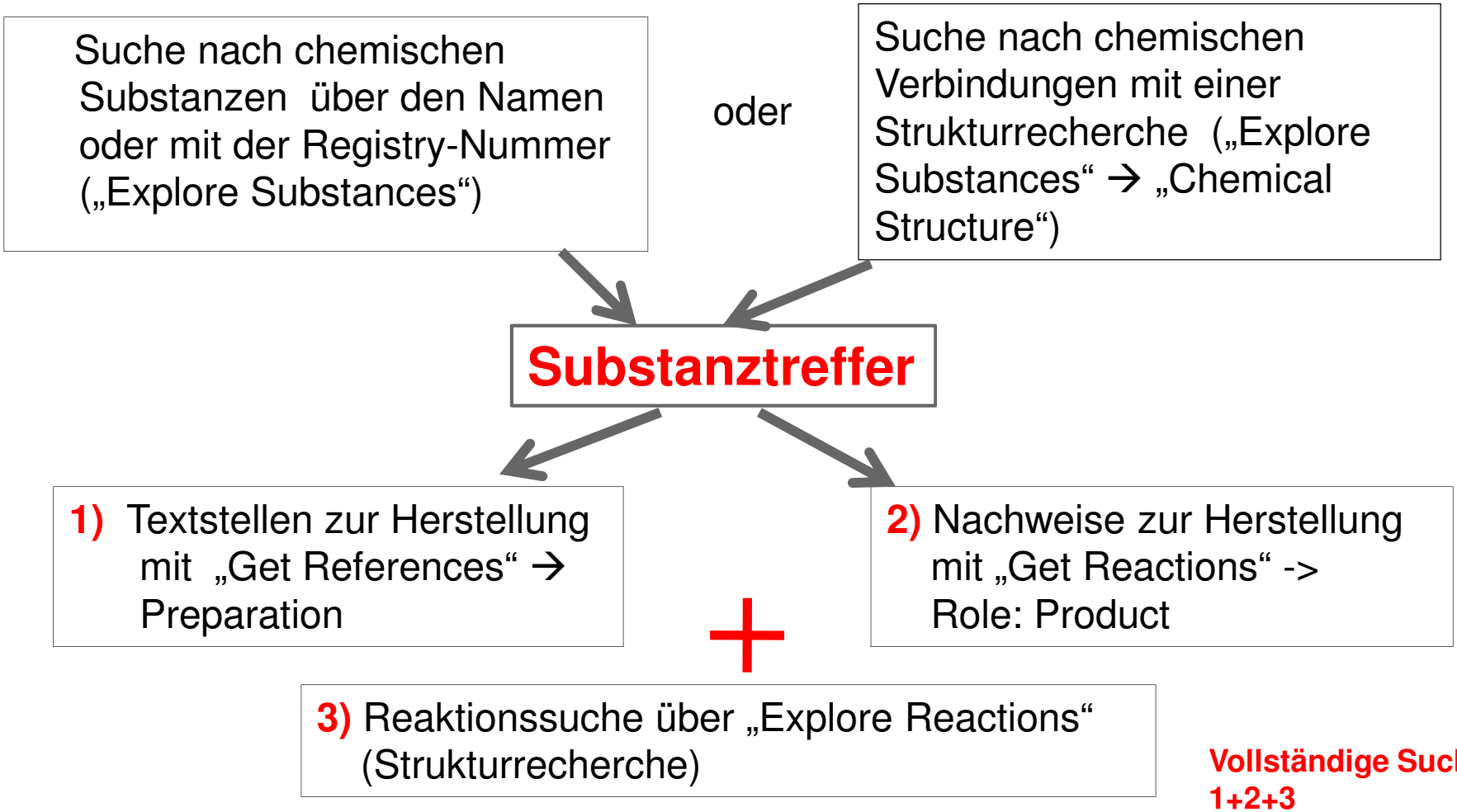


Roles erst ab 1967 – Ausnahme: Preparation auch schon früher!

Suche nach Autorennamen: Kandidatenliste

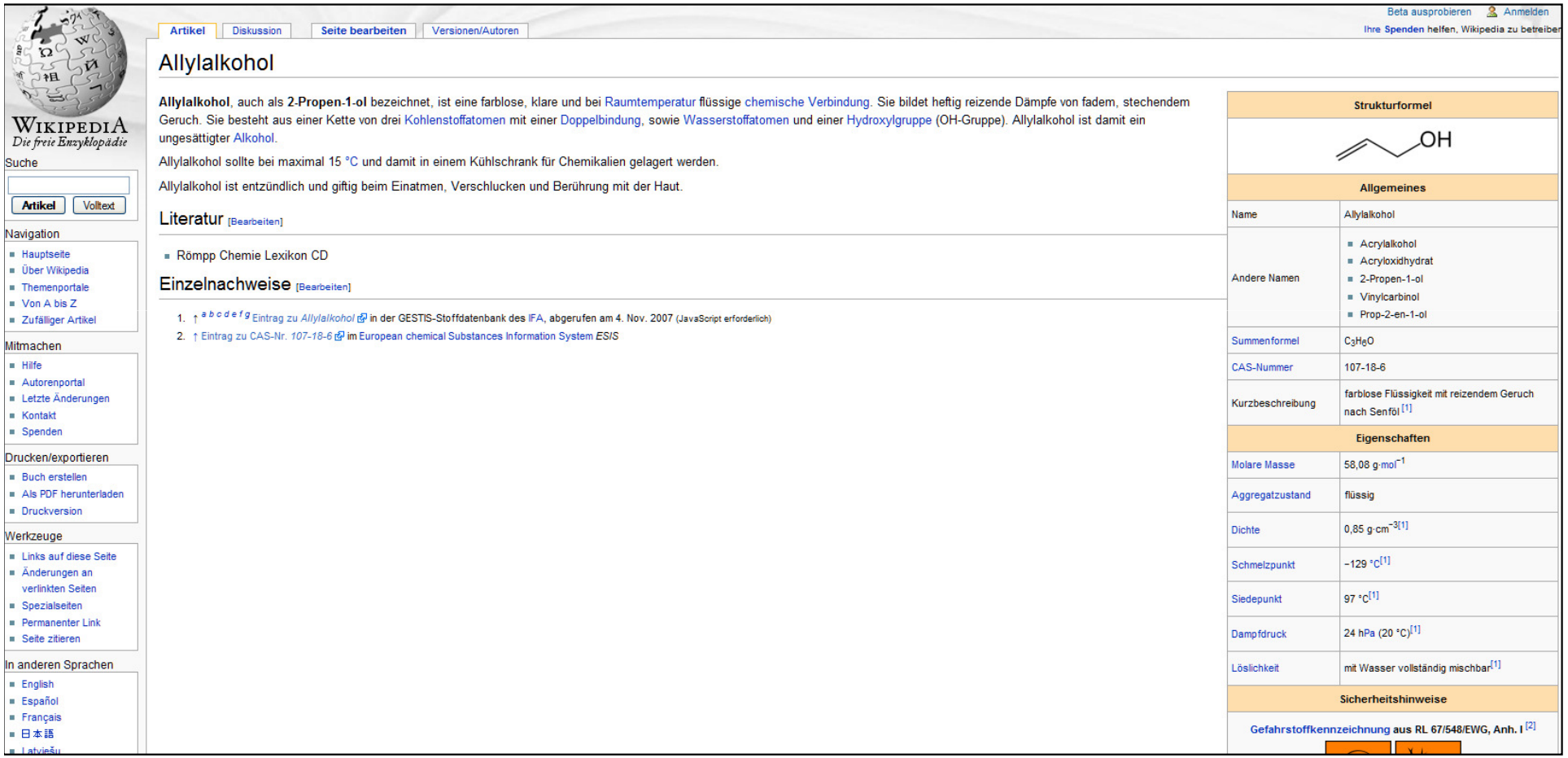


Synthesevorschriften suchen:



Vollständige Suche: 1+2+3

Allylalkohol – Wikipedia



Wikipedia
Die freie Enzyklopädie

Suche

Artikel | Volltext

Navigation
- Hauptseite
- Über Wikipedia
- Themenportale
- Von A bis Z
- Zufälliger Artikel

Mitmachen
- Hilfe
- Autorenportal
- Letzte Änderungen
- Kontakt
- Spenden

Drucken/exportieren
- Buch erstellen
- Als PDF herunterladen
- Druckversion

Werkzeuge
- Links auf diese Seite
- Änderungen an verlinkten Seiten
- Spezialseiten
- Permanenter Link
- Seite zitieren

In anderen Sprachen
- English
- Español
- Français
- 日本語
- Latviešu

Artikel | Diskussion | Seite bearbeiten | Versionen/Autoren

Beta ausprobieren | Anmelden

Ihre Spenden helfen, Wikipedia zu betreiben

Allylalkohol

Allylalkohol, auch als **2-Propen-1-ol** bezeichnet, ist eine farblose, klare und bei Raumtemperatur flüssige chemische Verbindung. Sie bildet heftig reizende Dämpfe von fadem, stechendem Geruch. Sie besteht aus einer Kette von drei Kohlenstoffatomen mit einer Doppelbindung, sowie Wasserstoffatomen und einer Hydroxylgruppe (OH-Gruppe). Allylalkohol ist damit ein ungesättigter Alkohol.

Allylalkohol sollte bei maximal 15 °C und damit in einem Kühlschrank für Chemikalien gelagert werden.

Allylalkohol ist entzündlich und giftig beim Einatmen, Verschlucken und Berührung mit der Haut.

Literatur [Bearbeiten]

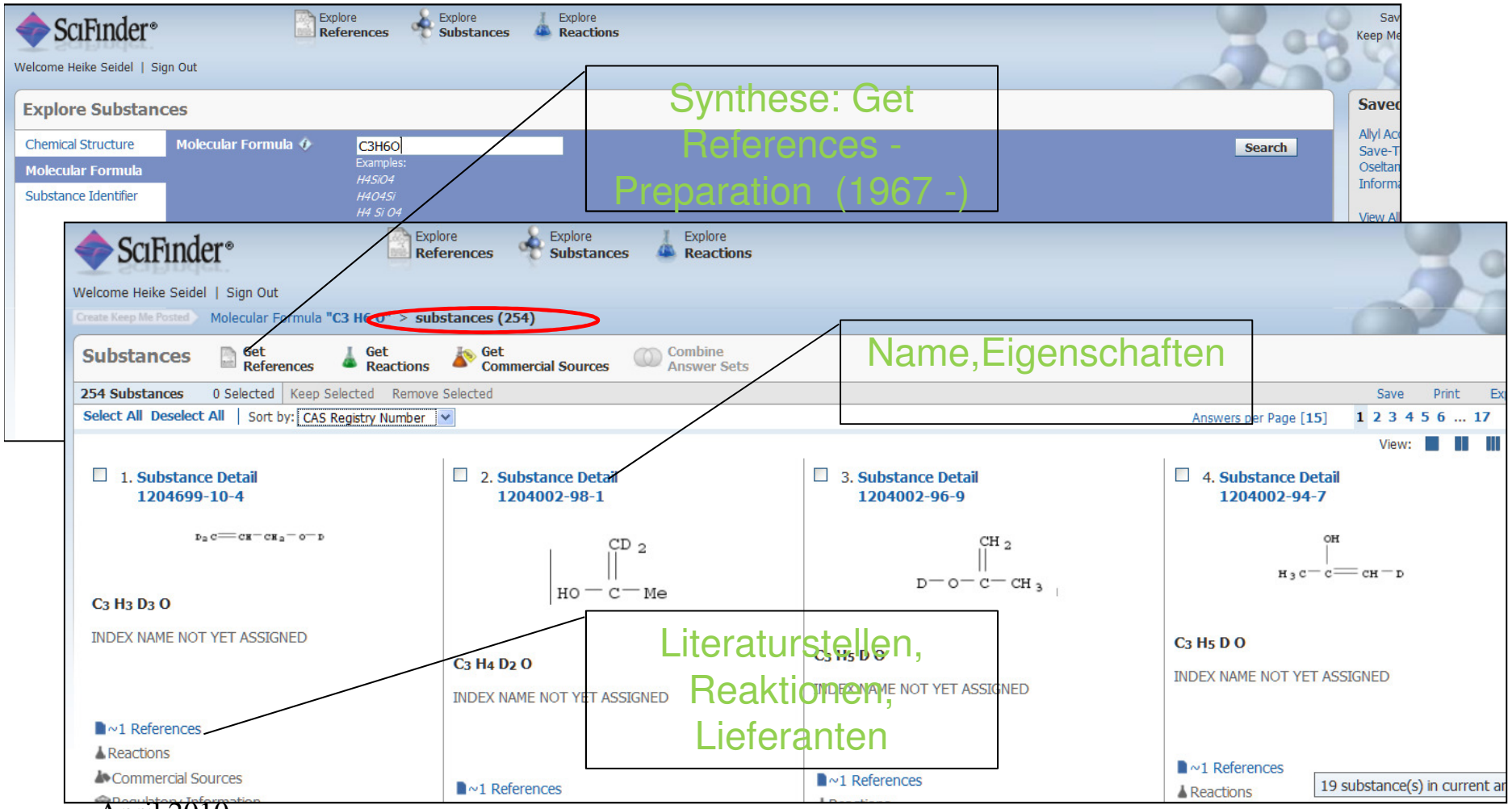
- Römpp Chemie Lexikon CD

Einzelnachweise [Bearbeiten]

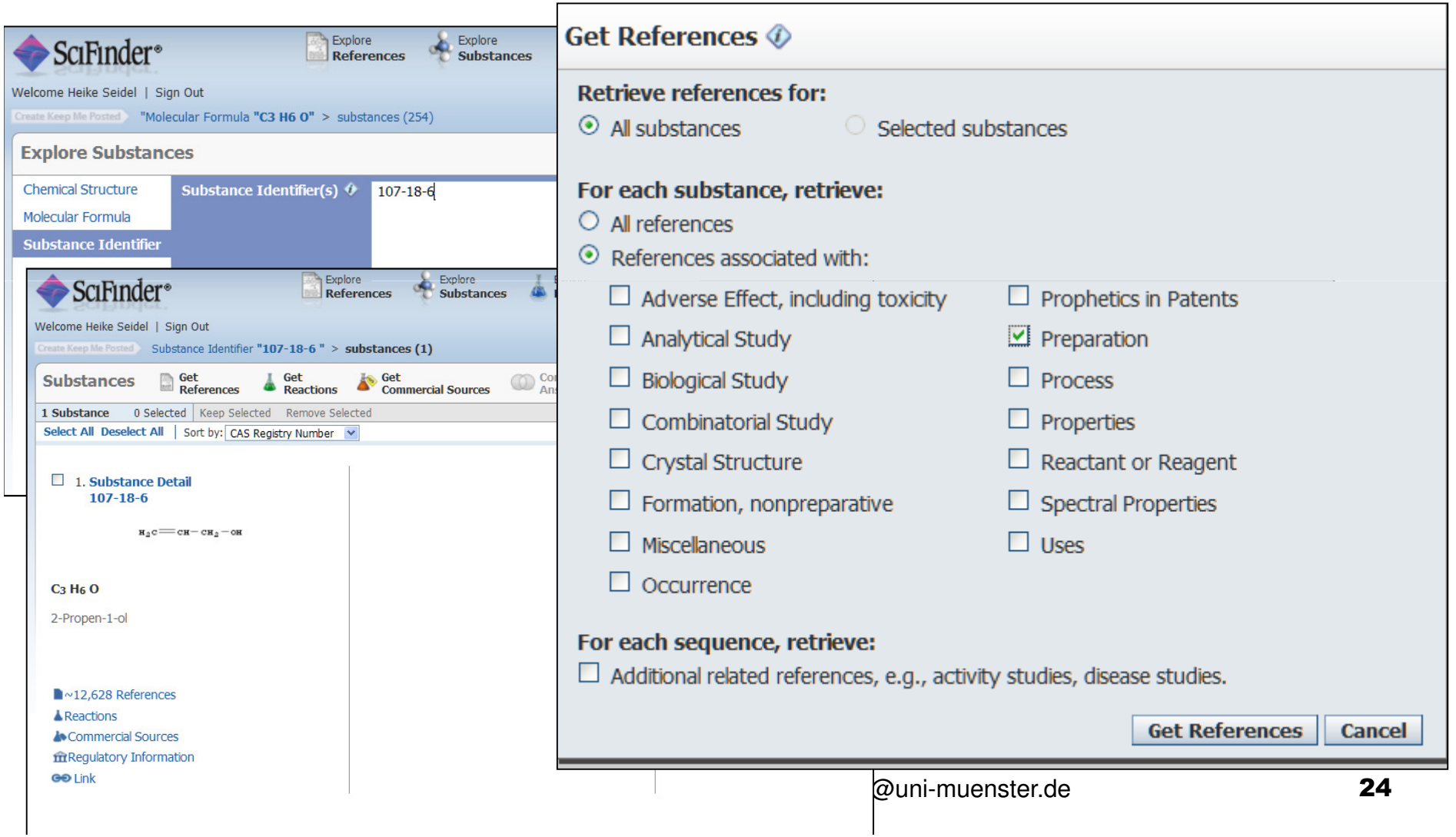
1. ↑ a b c d e f g Eintrag zu *Allylalkohol* in der GESTIS-Stoffdatenbank des IFA, abgerufen am 4. Nov. 2007 (JavaScript erforderlich)
2. ↑ Eintrag zu CAS-Nr. *107-18-6* im European chemical Substances Information System *ESIS*

Strukturformel	
Allgemeines	
Name	Allylalkohol
Andere Namen	▪ Acrylalkohol ▪ Acryloxidhydrat ▪ 2-Propen-1-ol ▪ Vinylcarbinol ▪ Prop-2-en-1-ol
Summenformel	C_3H_6O
CAS-Nummer	107-18-6
Kurzbeschreibung	farblose Flüssigkeit mit reizendem Geruch nach Senföl [1]
Eigenschaften	
Molare Masse	58,08 $g \cdot mol^{-1}$
Aggregatzustand	flüssig
Dichte	0,85 $g \cdot cm^{-3}$ [1]
Schmelzpunkt	−129 °C [1]
Siedepunkt	97 °C [1]
Dampfdruck	24 hPa (20 °C) [1]
Löslichkeit	mit Wasser vollständig mischbar [1]
Sicherheitshinweise	
Gefahrstoffkennzeichnung aus RL 67/548/EWG, Anh. I [2]	

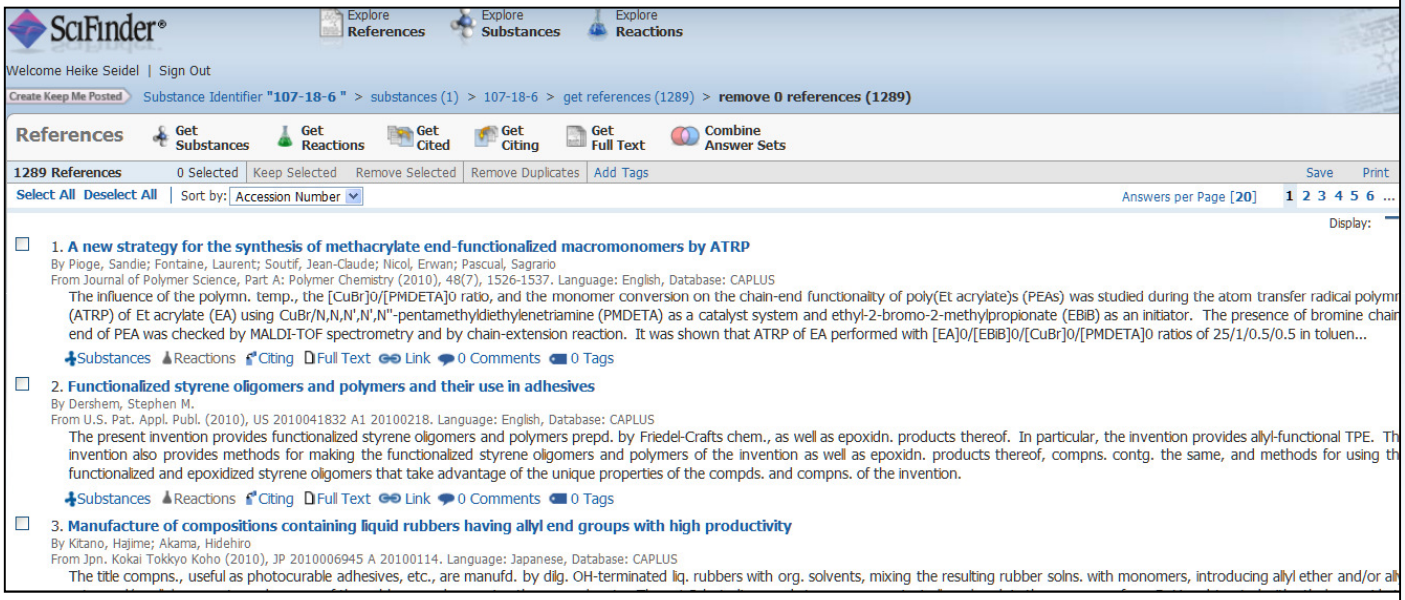
Suche mit der Summenformel

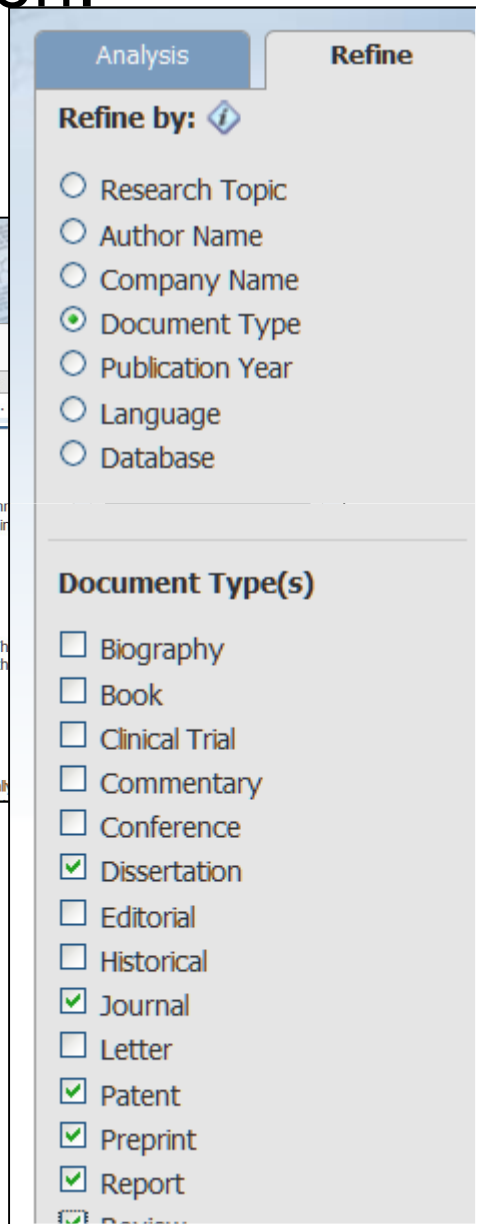


Suche mit CAS-Registry Number (CAS-RN)



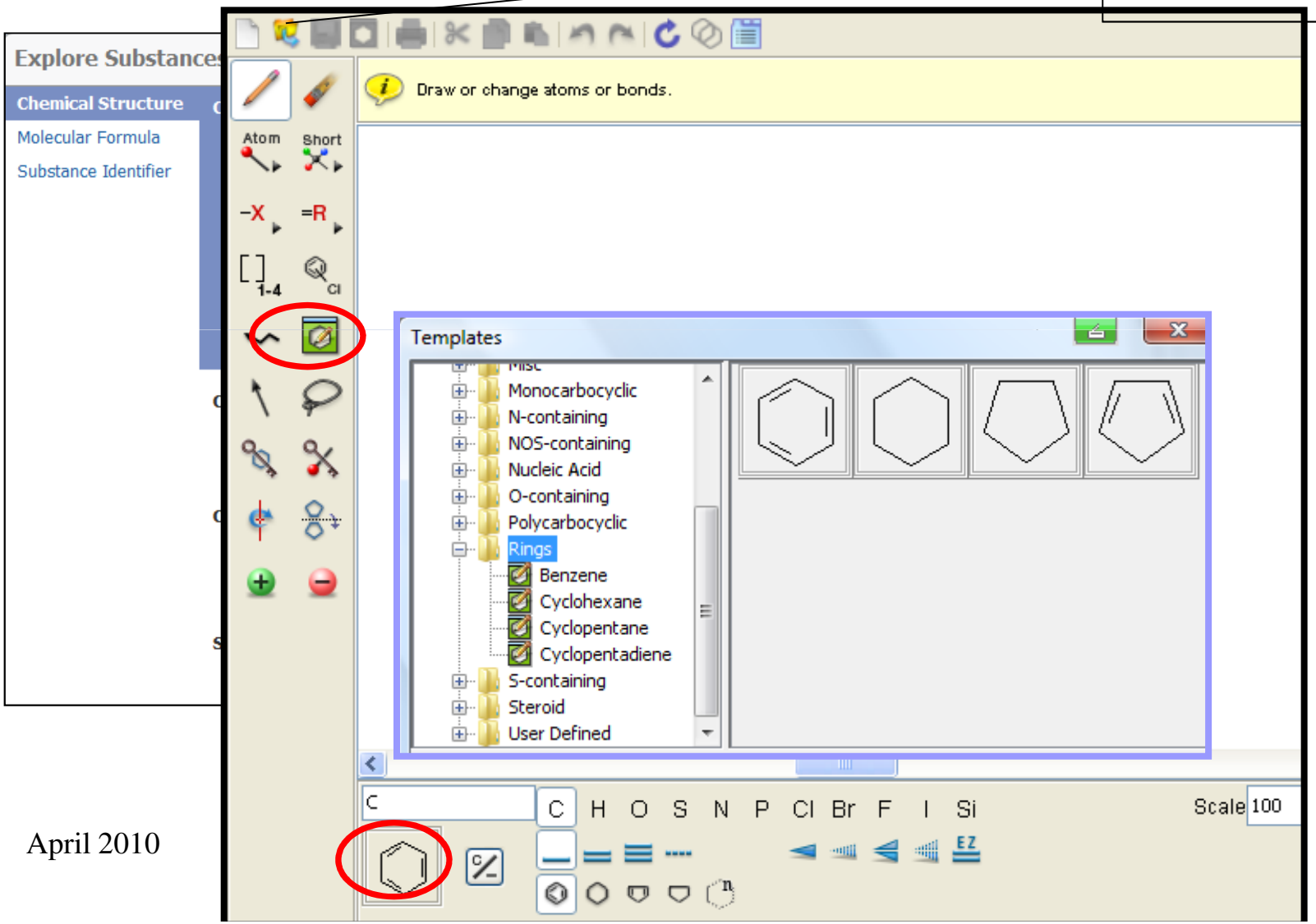
Mit dem (zu grossen) Antwortsatz arbeiten: Dubletten entfernen, Analysis, Refine





Arbeit mit dem Strukturediteor 1

Import von .mol-Strukturdateien. ChemDraw-Strukturen können mit Copy & Paste übertragen werden.



Arbeit mit dem Strukturediteor 2

Zeichenstift

Atome auswählen

Variable Atome

Struct. Repeating Unit

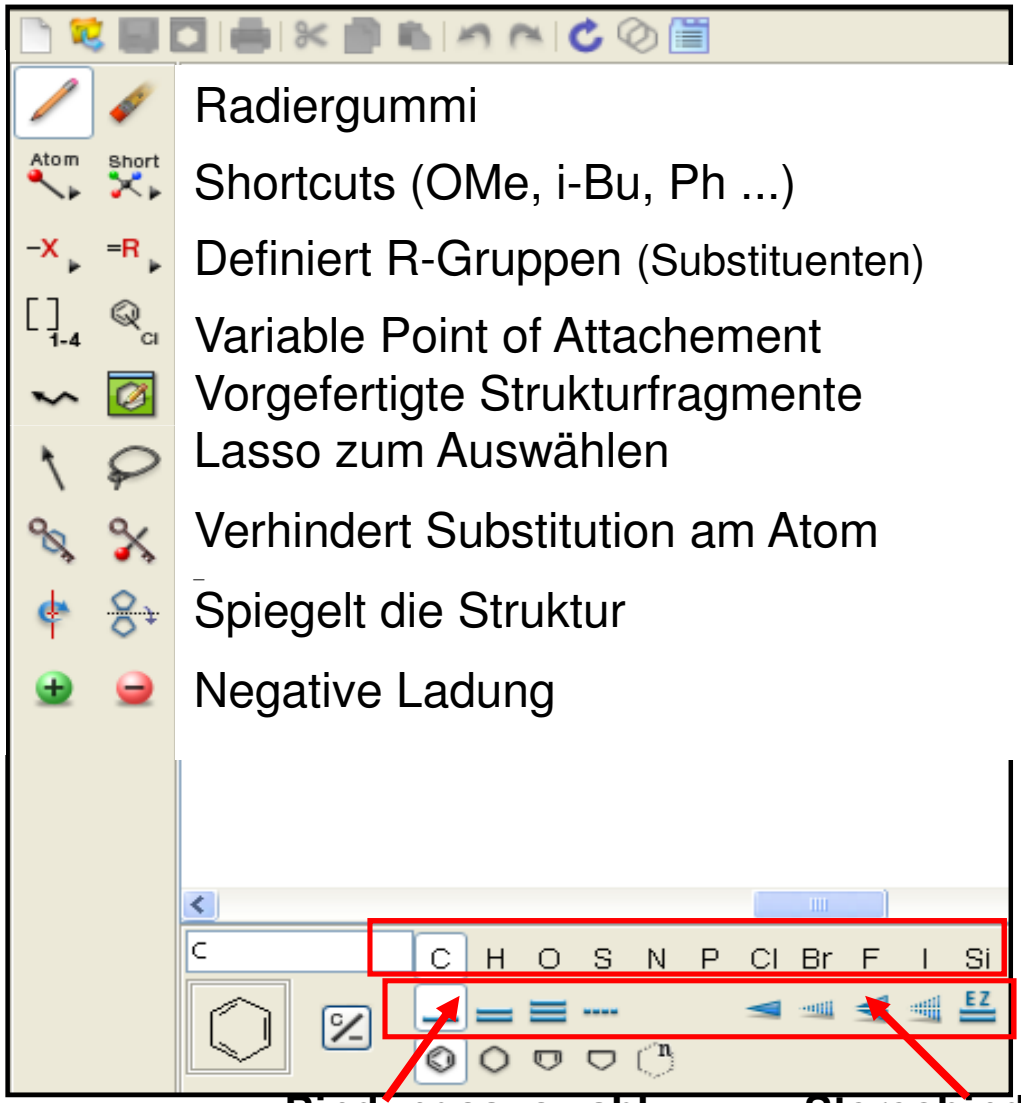
Zeichnet Ketten

Verschiebt Atome

Verhindert Ringbildung

Dreht die Struktur

Positive Ladung



Radiergummi

Shortcuts (OMe, i-Bu, Ph ...)

Definiert R-Gruppen (Substituenten)

Variable Point of Attachement

Vorgefertigte Strukturfragmente

Lasso zum Auswählen

Verhindert Substitution am Atom

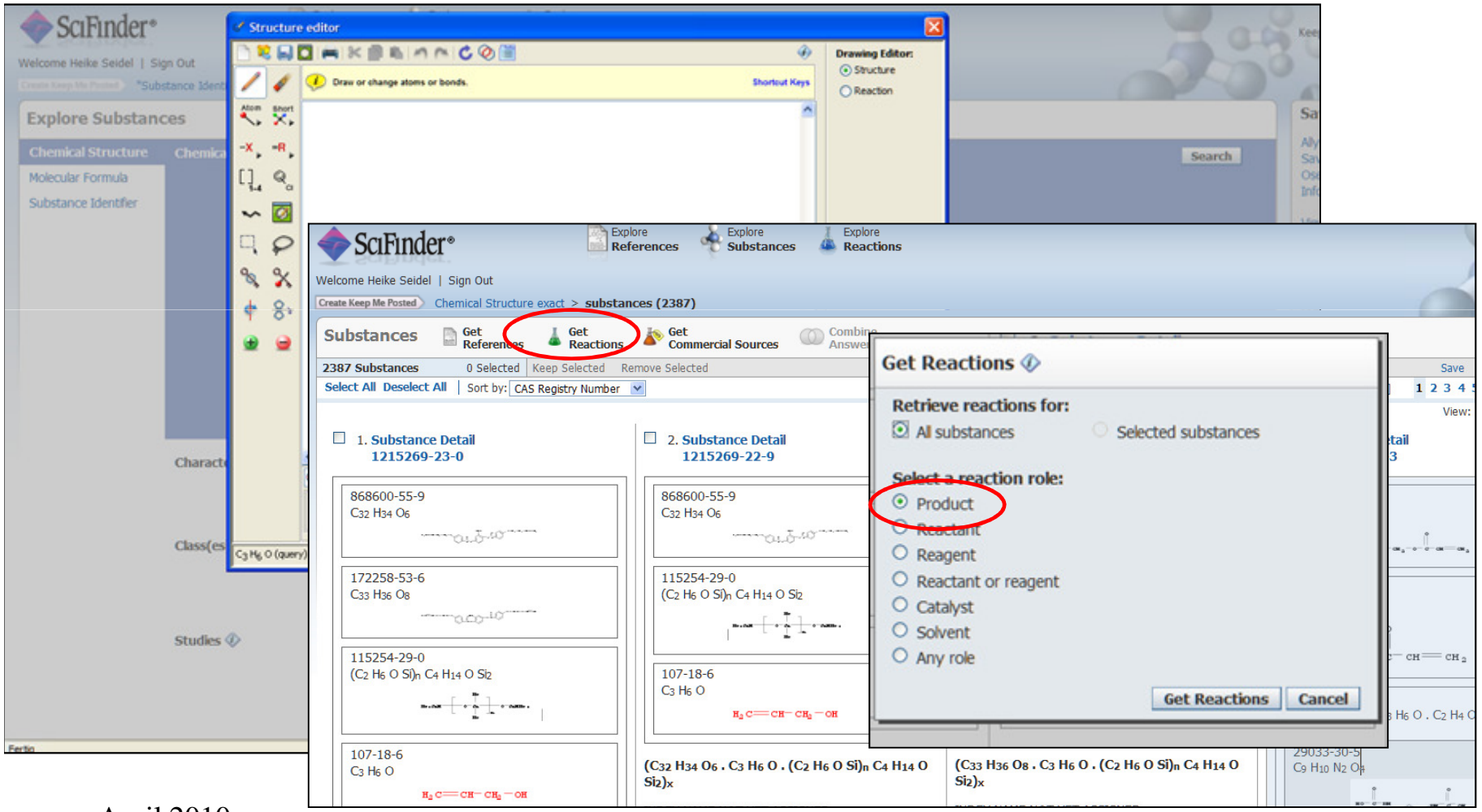
Spiegelt die Struktur

Negative Ladung

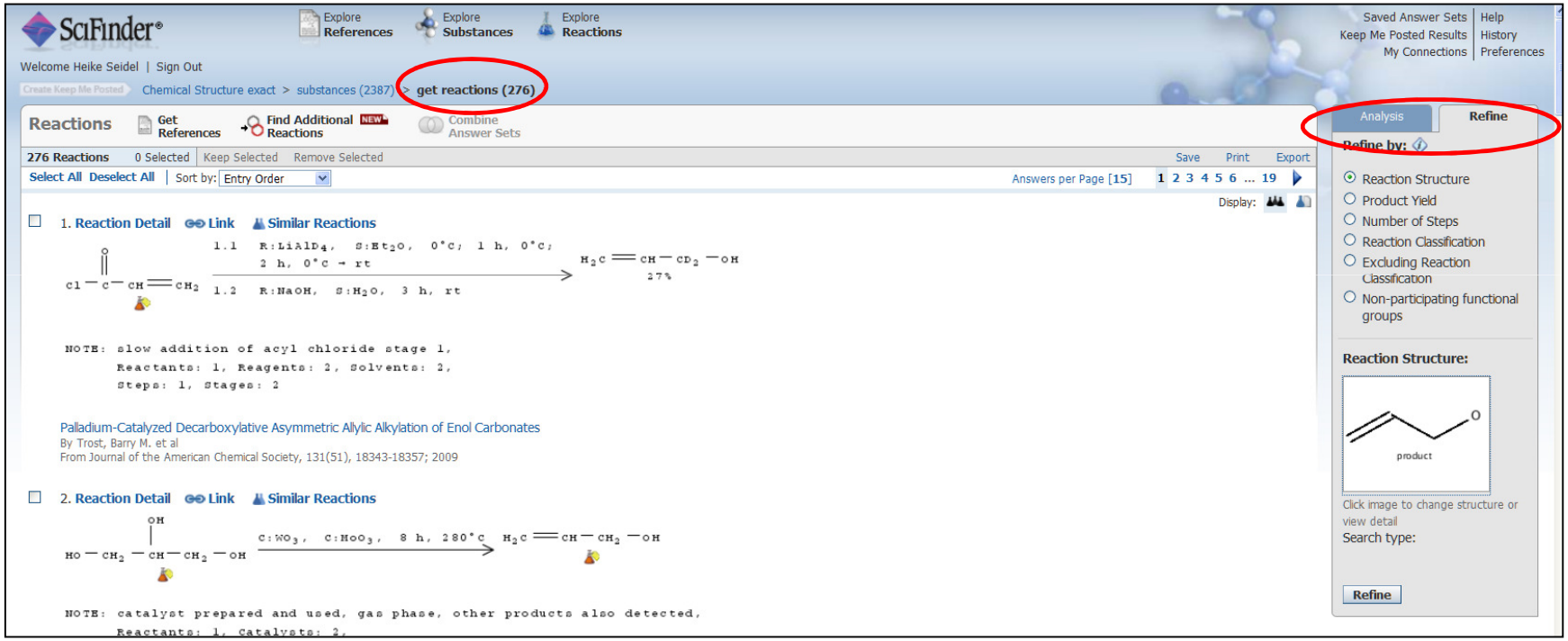
Bindungsauswahl

Stereobindungen

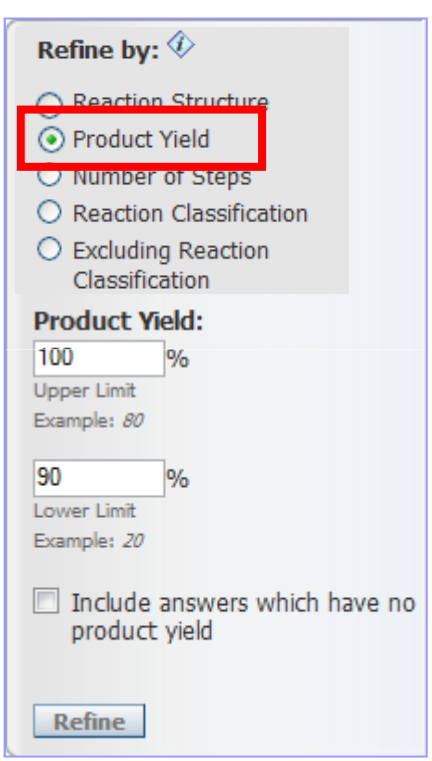
Suche mit der Struktur – Get Reactions - Product

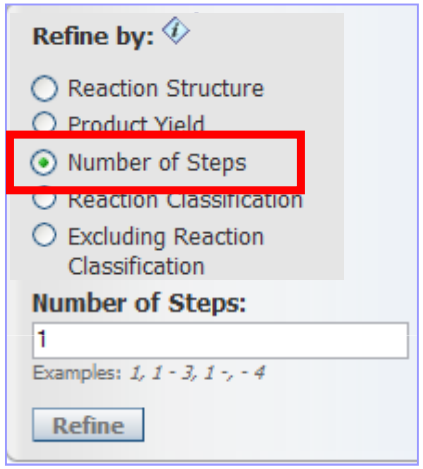


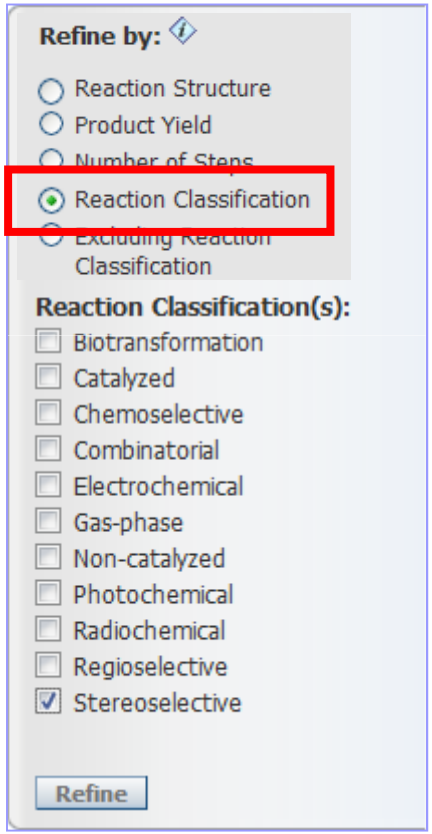
Mit dem (zu grossen) Antwortsatz arbeiten: Analyze, Refine

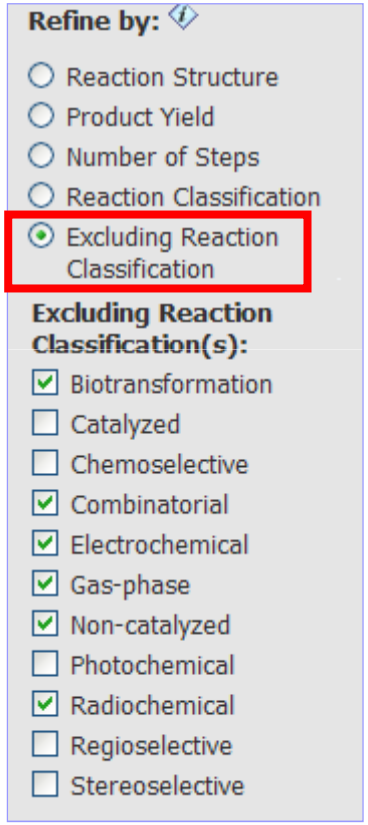


Einschränken über Ausbeute, Reaktionsstufen Reaktionsklassifizierung

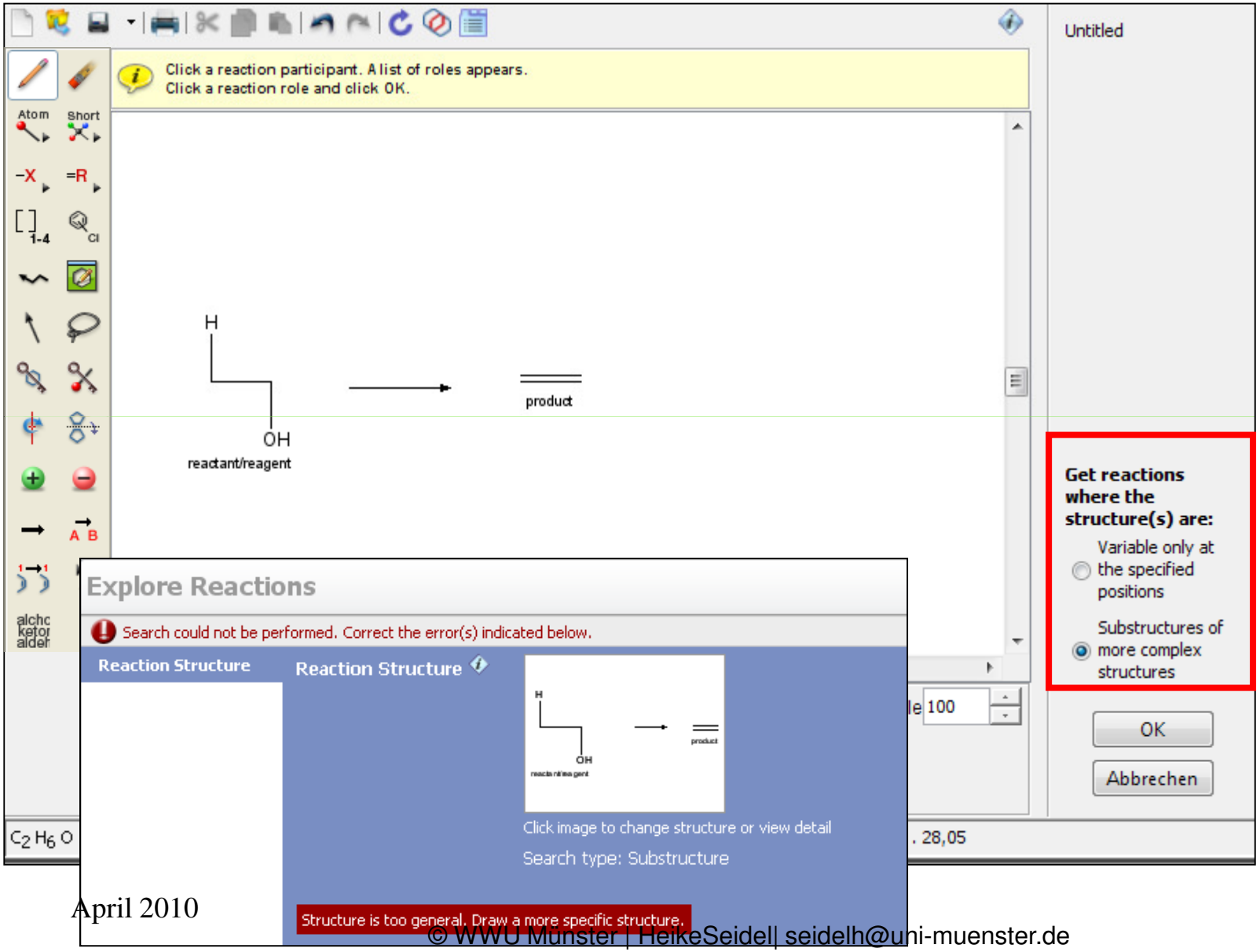






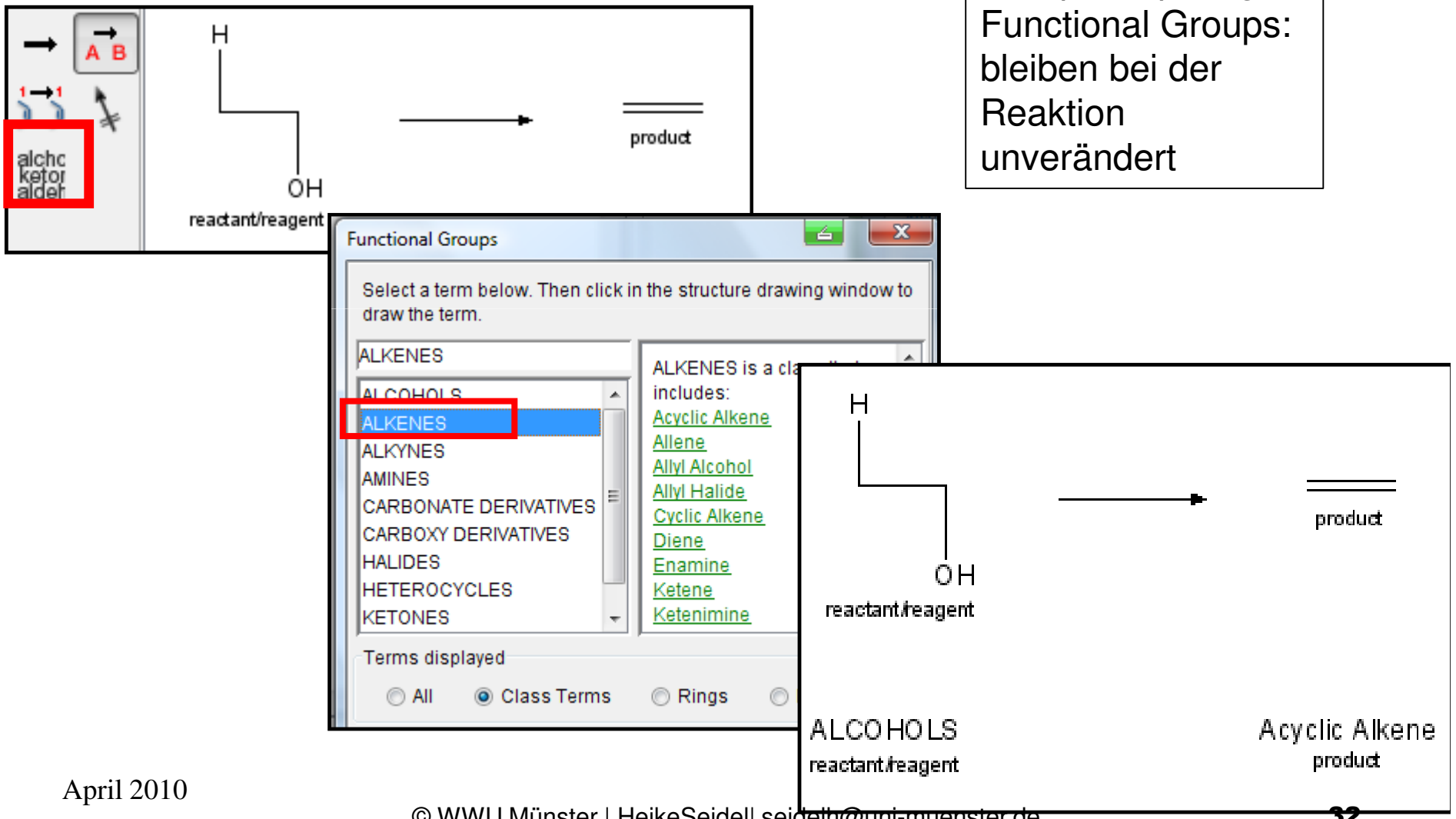


Reaktionen im Strukturediteor 1

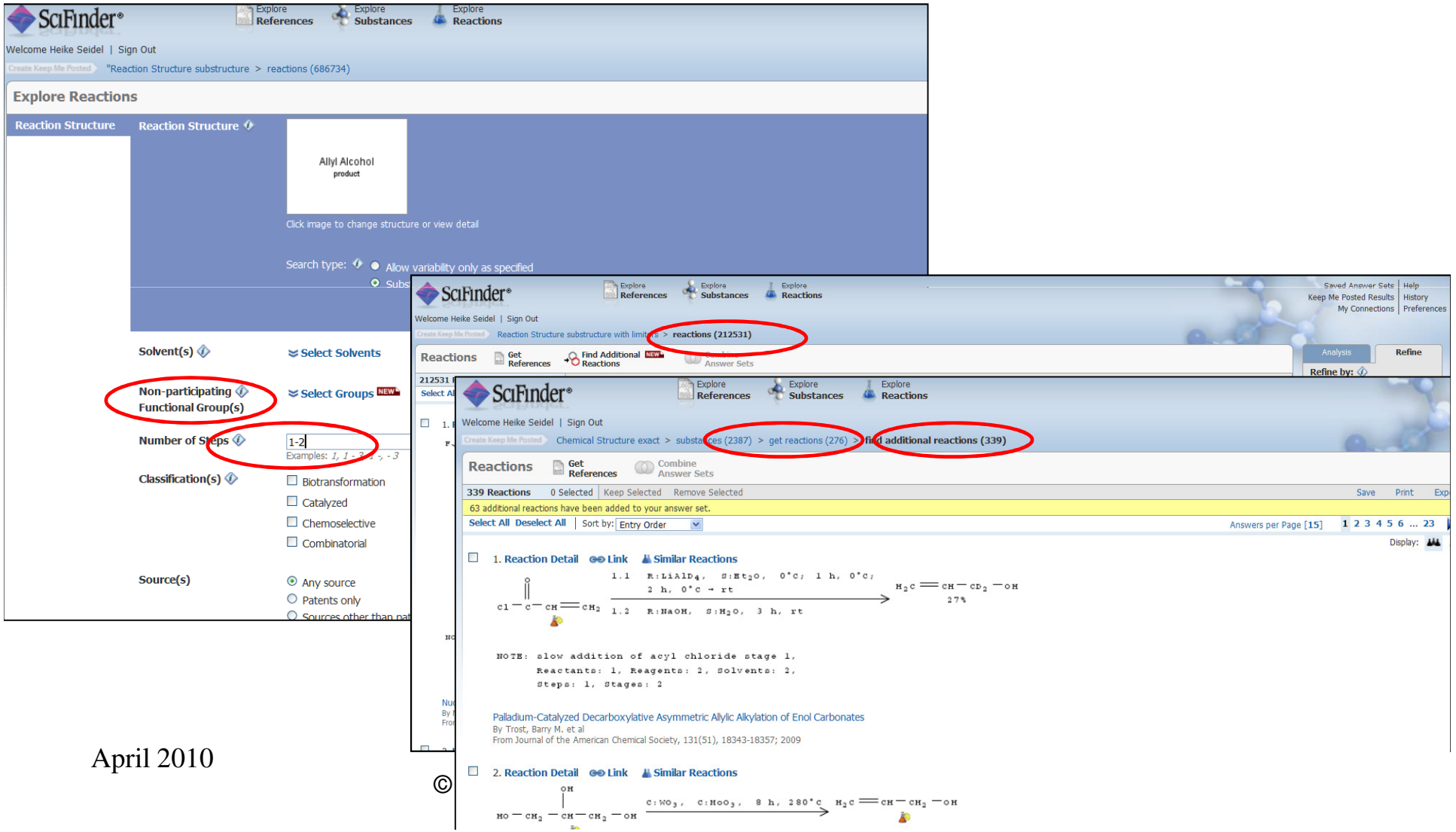


Reaktionen im Strukturediteor 2: Funktionelle Gruppen

Neu!
Non-participating Functional Groups: bleiben bei der Reaktion unverändert

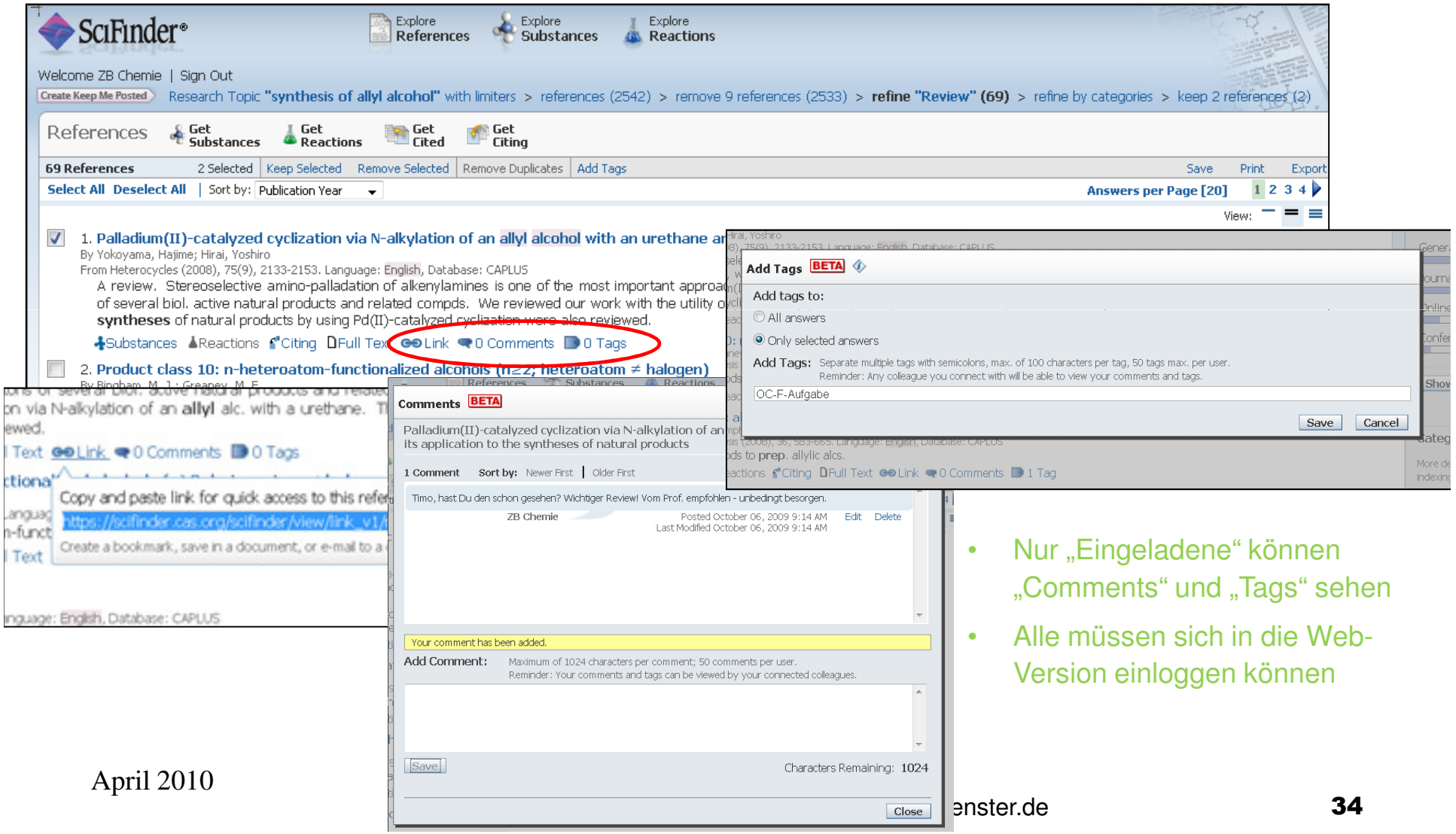


Produkt – Reaktionsstufen- Ausbeute…



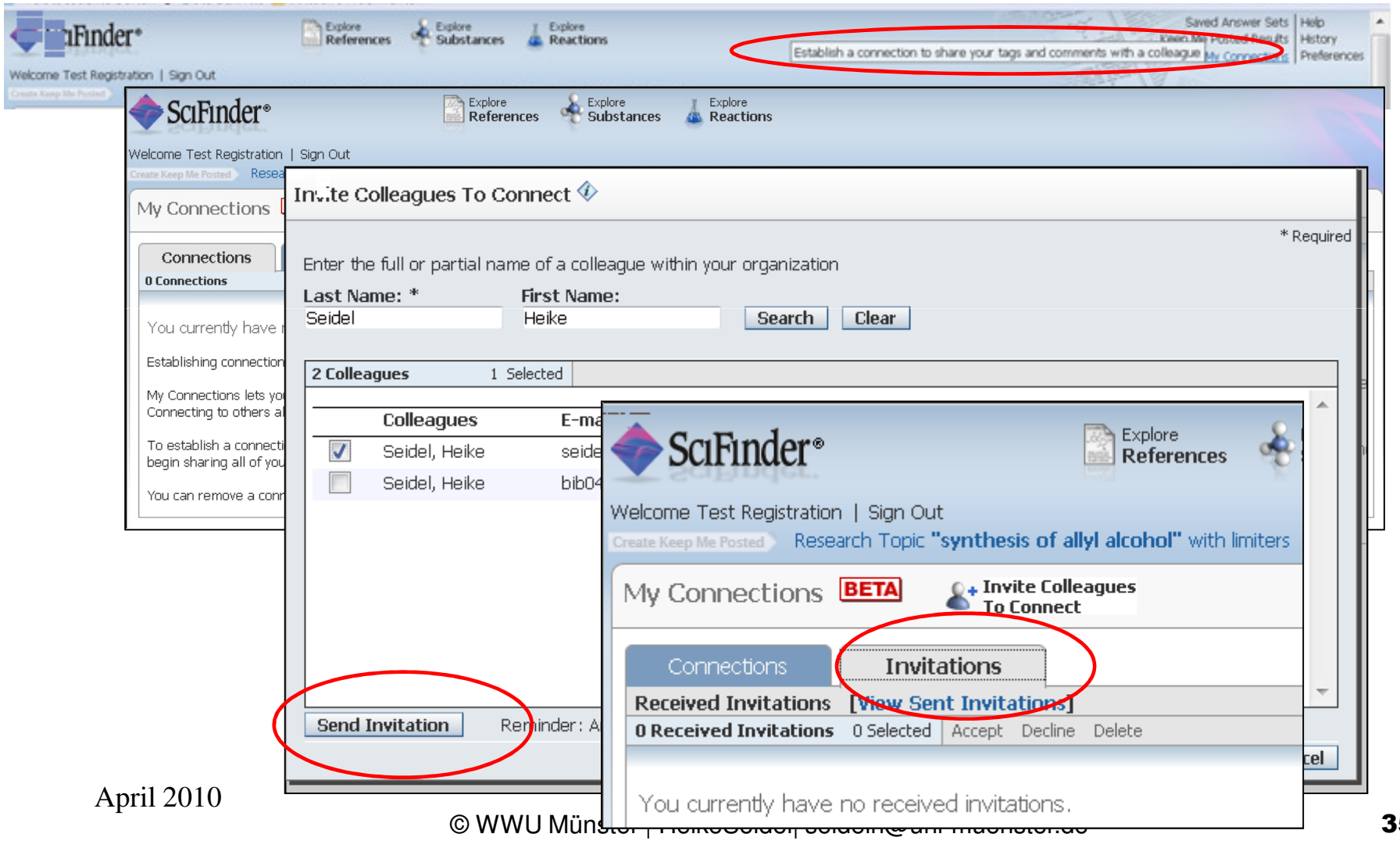
April 2010

3. Teil: Zusammenarbeit mit anderen

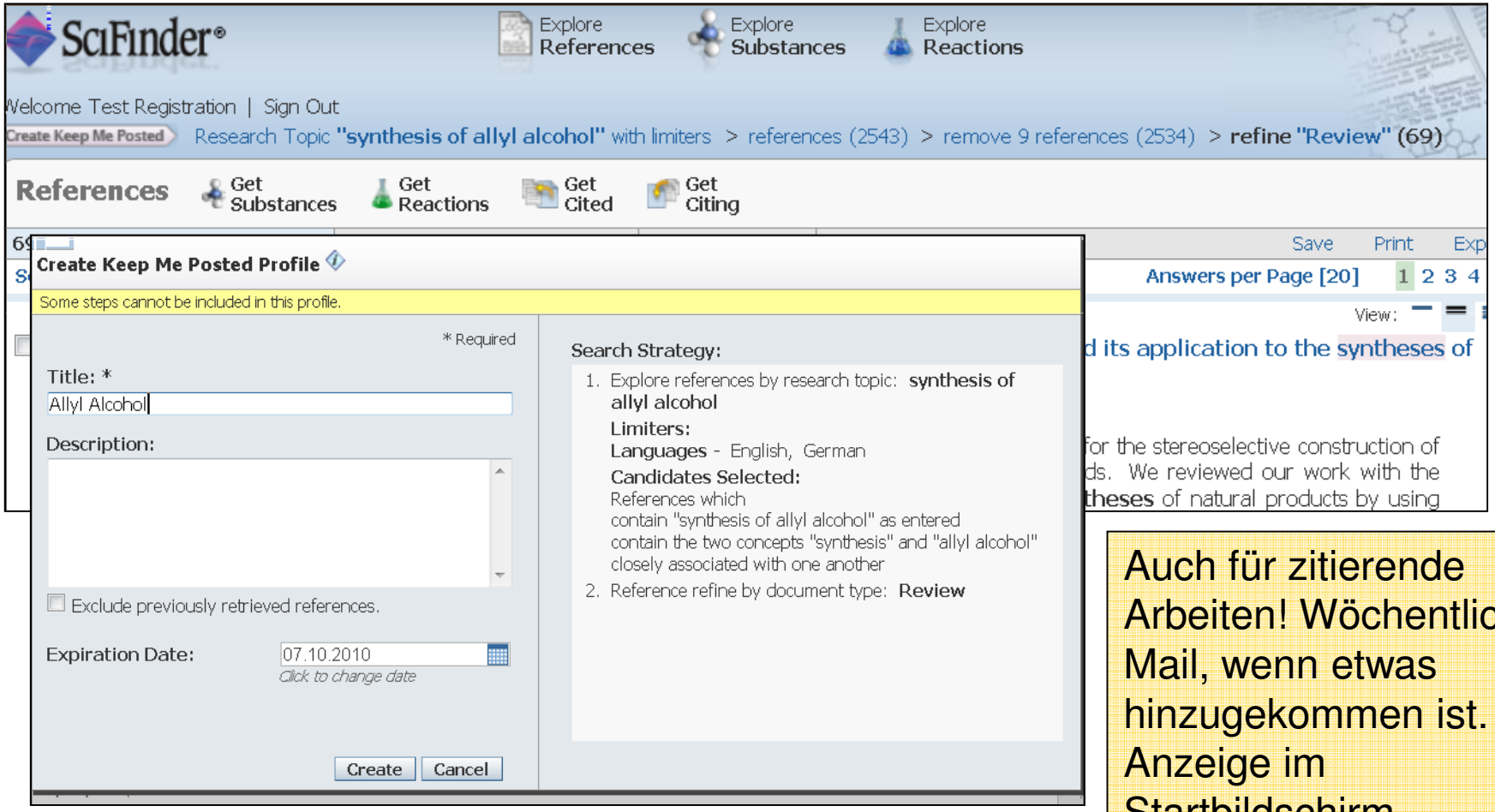


- Nur „Eingeladene“ können „Comments“ und „Tags“ sehen
- Alle müssen sich in die Web-Version einloggen können

Connections: Nur Personen aus eigener Uni einladen!



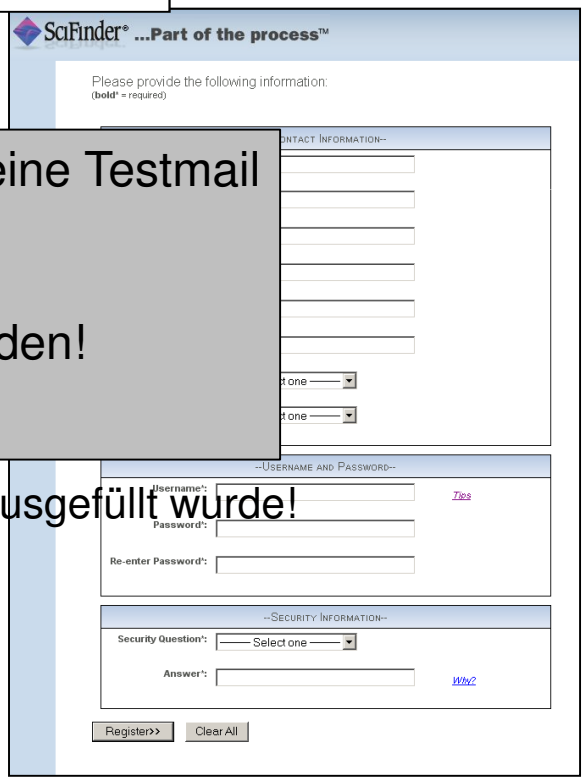
Benachrichtigungsfunktion „Keep me posted“



Auch für zitierende Arbeiten! Wöchentliche Mail, wenn etwas hinzugekommen ist. Anzeige im Startbildschirm.

4. Teil: SciFinder: Registrierung & Nutzung

- Web-Version: https://scifinder.cas.org
- Client-Version zur Zeit auch noch nutzbar
- Persönliche Registrierung
  - Mail mit Registrierungslink (vollständig in Browser!)
  - Verfallsdatum des Links beachten!
  - Hinweise zur Registrierung in F
  - nur uni-muenster.de-Adressen
- Bestätigungsmail beantworten
  - Kommt innerhalb von 48 Stunc
  - Vom selben Rechner, an dem das Registrierungsformular ausgefüllt wurde!
- Anzahl gleichzeitiger Nutzer beschränkt auf sechs (3:3)
- Lizenzbestimmungen beachten
- Automatisches Timeout nach 5 Minuten



Hat jemand von Ihnen keine Testmail bekommen?

Bitte bei mir melden!

Infoseiten der ZB Chemie: www.uni-muenster.de/Chemie.bib005/scifinder.html

Datenbanken
- Patente/Normen
- Dissertationen
Fernleihe
Elektronische Texte
Links
Service

Startseite ZB Chemie
Impressum

sogenannten "Breadcrumbs" können Sie leicht zu jedem vorhigen Schritt Ihrer Recherche zurückkehren.
Hier ein tabellarischer Vergleich der beiden Versionen.
Wenn Sie möchten, nutzen Sie auch weiterhin die Client-Version.

Anforderung und Installation:	**Client-Version: SciFinder Scholar** Studierende nutzen die Datenbank bitte auf den Rechnern des für sie zuständigen Fachbereichs. Für die Chemie sind dies z.B. die Benutzer-PCs in der Zweigbibliothek Chemie und die CIP-Pools des Instituts für Anorganische und Analytische Chemie sowie des Organisch-Chemischen Instituts. MitarbeiterInnen der Institute und Kliniken können die Zugangssoftware und den Zugangscode auf Ihren Rechnern installieren (s.u.). 1. Anforderung der Zugangssoftware und des Zugangscodes bei der Zweigbibliothek Chemie **Bitte beachten Sie: Der Zugangscode wird elektronisch verteilt und geht nur an E-Mail-Accounts der Universtität Münster. Das Anforderungsformular muss vollständig ausgefüllt werden.** 2. Download der Broschüre Getting started with SciFinder 2007 (PDF-File) Getting started with SciFinder 2007 - für MAC-Rechner unter OSX (PDF-File) 3. Optional: Eintragen in die Informations- und Diskussionsliste der WWU zu SciFinder Scholar 4. Optional: Accelrys ViewerLite zum Betrachten von Strukturen als 3 D Molekülmodelle, inklusive Patch zum ViewerLite. **Web-Version: SciFinder (https://scifinder.cas.org)** 5. Technische Voraussetzungen zur Nutzung der Web-Version: ○ Betriebssysteme: Windows (möglichst XP oder Vista), MAC OS, Linux (z.B. SUSE 10.2) ○ Browser: InternetExplorer, Version 6.0 oder neuer, Firefox: Version 2.0 oder neuer. ○ JavaScript, Java und cookies müssen zugelassen sein. Wenn Sie Volltexte über die ChemPort-Verbindung aufrufen wollen, dürfen PopUp-Fenster nicht blockiert sein. ○ Zum Zeichnen von Strukturen muss die Java Runtime Envorinment (JRE) 6.0, Update 3 oder neuer installiert sein. Sie finden die JRE hier zum Download: ■ JRE Version 6 Update 3 for Windows from CAS ■ Java for Mac OS X 10.4, Release 6 Studierende und Mitarbeiter/innen im FB 12 sowie der Kliniken können den Link für Ihre persönliche Registrierung hier anfordern: 6. Anforderung des Links zur Registrierung bei der Zweigbibliothek Chemie 7. **Bitte beachten Sie unbedingt die Anleitung zur Registrierung (pdf) mit den Anforderungen an Benutzernamen und Passwort!**
Infos: SciFinder Scholar in Münster	• SciFinderUser-Liste der WWU Informationen zum Betrieb von SciFinder Scholar an der WWU sowie Diskussionsliste
Infos: Chemical Abstracs Service	• Hilfe-Texte zu SciFinder Scholar **Web** • Hilfe-Texte zu SciFinder Scholar **2007** • SciFinder How to Guides: Substructure Searching, Reactions, Substance Identifyer, Properties... • SciFinder Strategies: Small molecules, Polymers, Synthetic Chemistry... • SciFinder e-Seminars • Daten-Import von SciFinder Scholar in EndNote, ProCite und Reference Manager
Infos: Tutorials	• Tutorial zu SciFinder Scholar 2007 Friedrich-Schiller-Universität Jena (Deutsch) • Tutorial zu SciFinder on the Web Friedrich-Schiller-Universität, Jena (Deutsch) • SciFinder Scholar Leeds University Library Training Materials (English) • Ridley, Damon: Information Retrieval - SciFinder and SciFinder Scholar. Chichester: Wiley, 2002. Das Buch finden Sie im Lehrbuchschrank der Zweigbibliothek Chemie mit der Signatur beige 070. Lösungen zu den Aufgaben im Buch sind online abrufbar:

- Noch Fragen?
- Viel Erfolg bei Ihren Recherchen!