



Tutoriel SciFinder Web / Substances et Réactions

1.	Présentation et accès	2
1.1	Présentation	2
1.2	Accès.....	2
2.	Modes de recherche.....	3
3.	Substances - Affichage et filtres	4
3.1	Affichage des résultats	4
3.2	Filtres	5
4.	Réactions – Résultats et filtres	6
4.1	Affichage des résultats	6
4.2	Filtres.....	7
5.	Sauvegarde des résultats.....	8
5.1	Sauvegarde des résultats.....	8
6.	Autres fonctionnalités	9
6.1	La copie de structures dans le logiciel de dessin.....	9
6.2	La fonction partage	10
7.	Pour en savoir plus	11

1. Présentation et accès

1.1 Présentation

Organisme responsable	Chemical abstracts Service
Plateforme	Chemical abstracts Service
Discipline(s)	Chimie - Biochimie
Type d'information	Pour les substances : dénominations, RN, propriétés physico-chimiques, spectres, réglementation et données commerciales, références bibliographiques Pour les réactions : Schéma réactionnel, référence bibliographique
Langue(s)	Anglais
Période couverte	Plus de 60 millions de substances répertoriées depuis 1957 / Plus de 15 millions de réactions répertoriées depuis 1840
Accès	Par abonnement

1.2 Accès

À partir du portail documentaire de Lyon 1 : <http://portaildoc.univ-lyon1.fr/>

Onglet Collections → *Trouver des documents* → *Articles et bases de données*

L'accès à cette base est réservé aux étudiants et enseignants – chercheurs de Lyon 1. Pour accéder à la base et au plein texte des articles lors de la consultation de la base, il convient de privilégier absolument les liens proposés sur cette page.

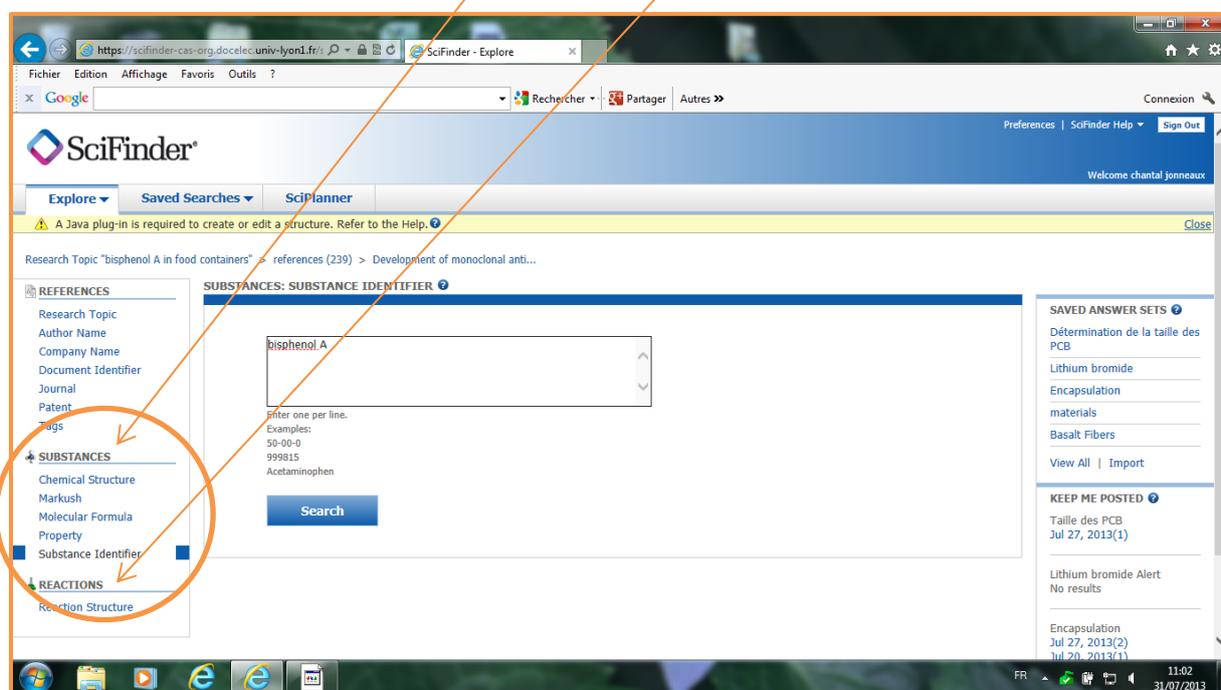
Lors de la 1^{ère} connexion, il est nécessaire d'ouvrir un compte. [Voir les modalités d'accès.](#)

2. Modes de recherche



SciFinder Web propose une collection de 3 bases de données reliées entre elles : CAPIus la base bibliographique, Register la base de substances, et CASReact la base de réactions. Ce tutoriel présente la base de substances et la base de réactions.

Sélectionner un champ de recherche et entrer les termes ou dessiner une structure




Les options d'interrogation : Nom de substance ou Register number (Substance identifier) / Formule moléculaire / Formule de Markush (pour les brevets) / Propriété physico – chimique / Dessin de substance (Chemical structure) ou de schéma réactionnel (Reaction structure).

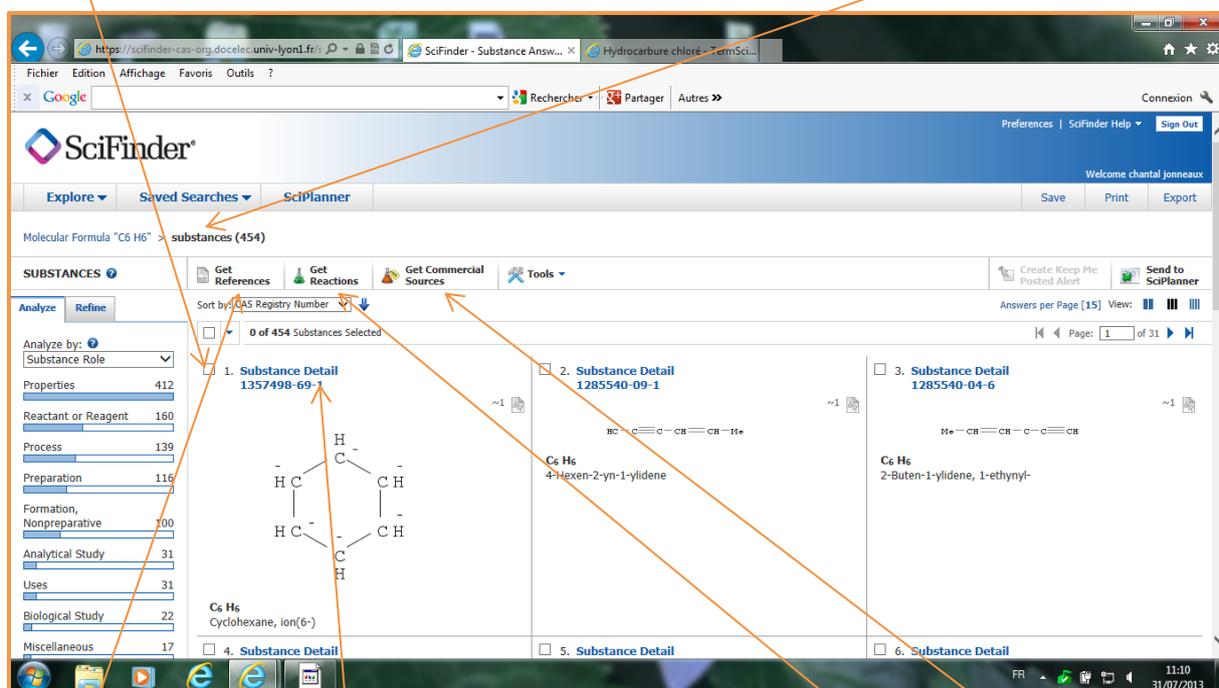
L'utilisation du logiciel de dessin nécessite le télé- téléchargement de JavaScript ([voir informations données par CAS](#)). Par défaut, tous les sites des cycles dessinés sont libres. Ils acceptent donc toutes les combinaisons d'atomes possibles.

3. Substances - Affichage et filtres

3.1 Affichage des résultats

Sélectionner les substances pertinentes et / ou visualiser leur fiche descriptive

Circuler dans l'historique de navigation



Basculer vers les références d'articles qui concernent les notices sélectionnées

Basculer vers les réactions dans lesquelles la substance sélectionnée joue un rôle. Préciser alors ce rôle

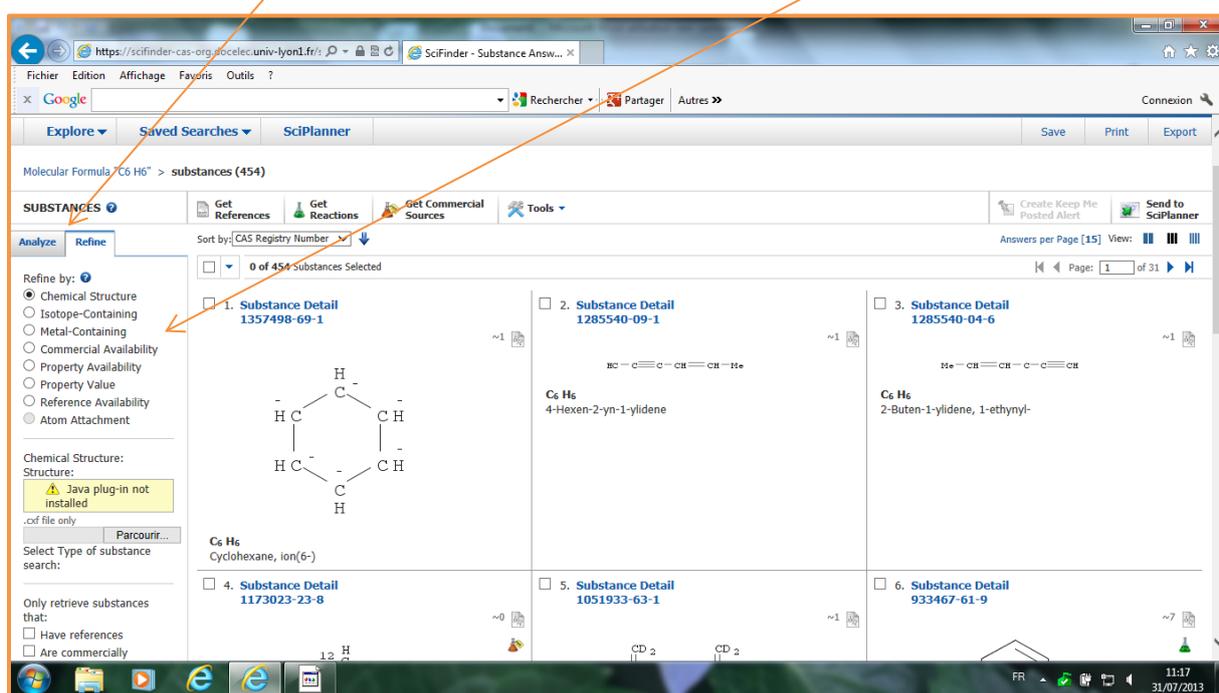
Obtenir les coordonnées des sociétés qui commercialisent la substance sélectionnée

Cliquer sur le lien pour obtenir le détail des dénominations, des propriétés physico – chimiques (calculées et expérimentales), des spectres et des données réglementaires (USA – Canada – Japon – Europe)

3.2 Filtres

Choisir le type d'action : Analyze / Refine

Choisir le filtre



The screenshot shows the SciFinder interface with the search results for 'C6 H6' (454 substances). The 'Analyze' tab is selected, and the 'Refine' section is visible on the left. The search results are displayed in a grid format, showing the chemical structure, name, and CAS number for each substance. The first result is Cyclohexane, ion(6-), with CAS number 1173023-23-8. Other results include 4-Hexen-2-yn-1-ylidene and 2-Buten-1-ylidene, 1-ethynyl-.



Les fonctions Analyze et Refine permettent d'appliquer des filtres sur des index similaires ou proches. Avec Analyze, l'utilisation est guidée par une présentation des occurrences possibles sous forme d'histogrammes. Avec Refine, l'utilisation des filtres est libre.

Filtres proposés par Analyze : Disponibilité dans la base de données commerciales ou réactionnelles / Sélection par éléments / Indicateur de bioactivité ou de cible.

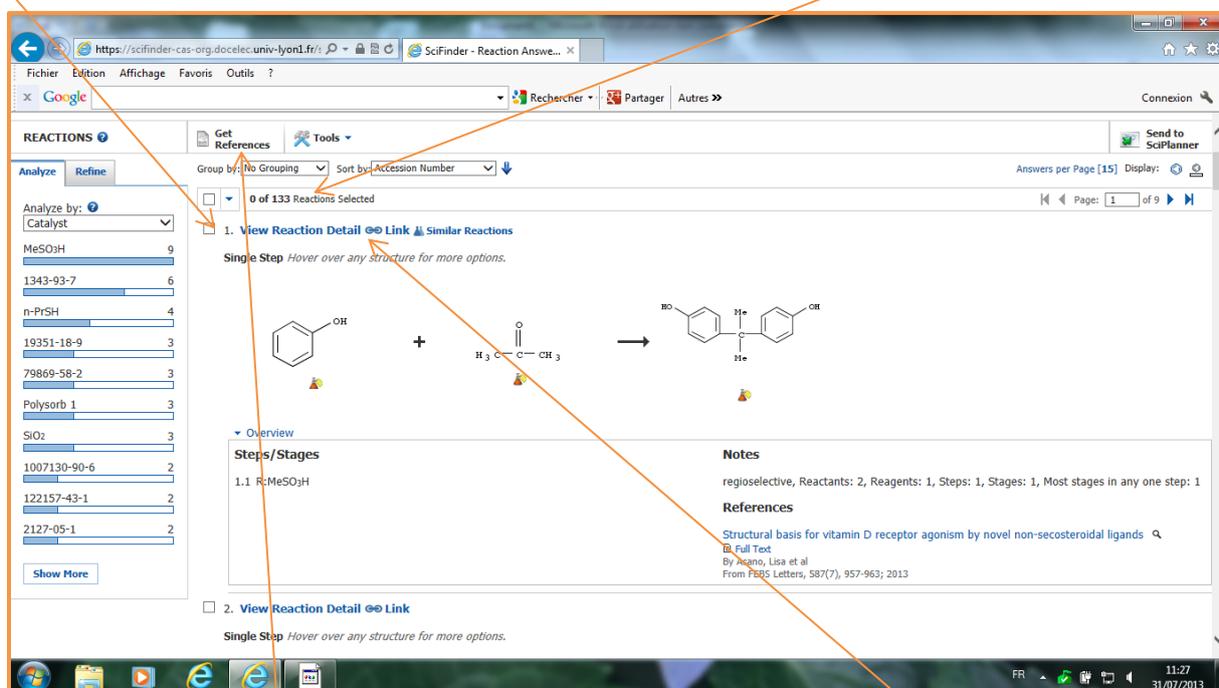
Filtres proposés par Refine : Modification du dessin de la structure / Sélection par isotope ou par métal / Sélection par une propriété / Disponibilité dans la base de données commerciales ou bibliographiques.

4. Réactions – Résultats et filtres

4.1 Affichage des résultats

Sélectionner les réactions pertinentes et / ou visualiser leurs fiches descriptives

Circuler dans l'historique de navigation



The screenshot displays the SciFinder interface. On the left, there is a 'Catalyst' filter table:

Catalyst	Count
MeSO ₃ H	9
1343-93-7	6
n-PrSH	4
19351-18-9	3
79869-58-2	3
Polysorb 1	3
SiO ₂	3
1007130-90-6	2
122157-43-1	2
2127-05-1	2

The main area shows a list of reactions. The first reaction is selected and its details are shown below. The reaction scheme shows the reaction of 4-hydroxyacetophenone with acetone in the presence of MeSO₃H catalyst to form a bisphenol A derivative.

Steps/Stages
1.1 R:MeSO₃H

Notes
regioselective, Reactants: 2, Reagents: 1, Steps: 1, Stages: 1, Most stages in any one step: 1

References
Structural basis for vitamin D receptor agonism by novel non-secosteroidal ligands
Full Text
By Aciano, Lisa et al
From FEBS Letters, 587(7), 957-963; 2013

Basculer vers les références d'articles qui concernent la réaction concernée

Cliquer sur le lien pour obtenir plus d'informations sur la réaction

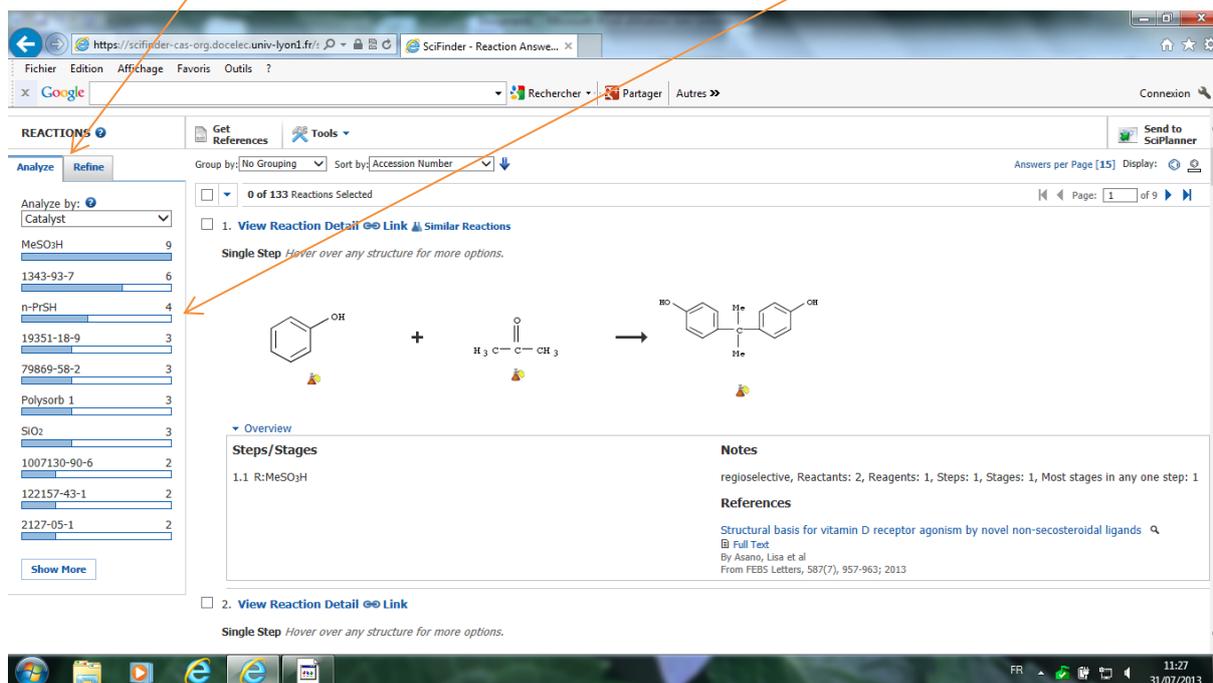


Les informations de détail portent sur le schéma réactionnel, le détail des étapes avec des précisions sur les conditions requises (solvants, catalyseurs, durée, température etc.) et mentionnent la référence bibliographique majeure pour cette réaction. Par ailleurs des liens cliquables permettent d'obtenir les fiches détaillées de toutes les substances qui interviennent dans la réaction.

4.2 Filtres

Choisir le type d'action : Analyze / Refine

Choisir le filtre




Les fonctions Analyze et Refine permettent d'appliquer des filtres sur des index similaires ou proches. Avec Analyze, l'utilisation est guidée par une présentation des occurrences possibles sous forme d'histogrammes. Avec Refine, l'utilisation des filtres est libre.

Filtres proposés par Analyze : Nom d'auteur / Type de document / Nom de revue / Année de publication / Nombre d'étapes / Taux de rendement / Solvants / Catalyseurs.

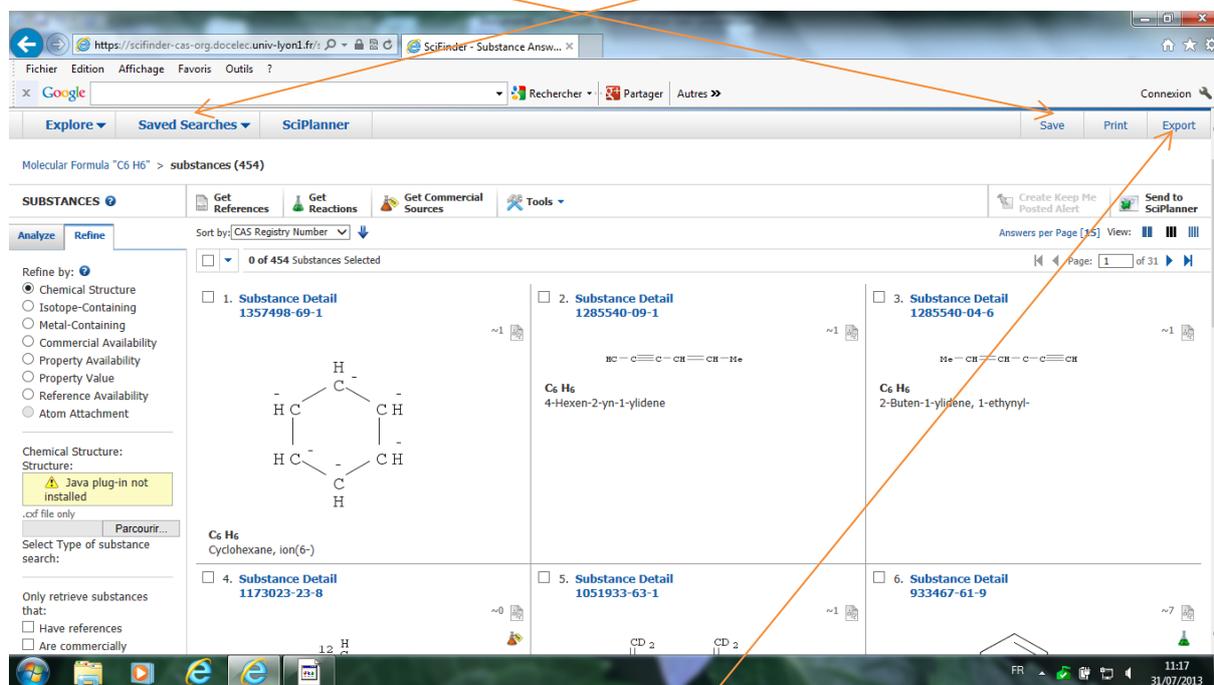
Filtres proposés par Refine : Modification du schéma réactionnel / Nombre d'étapes / Taux de rendement / Sélection ou exclusion d'un type de réaction / Sélection d'un groupe fonctionnel non participant.

5. Sauvegarde des résultats

5.1 Sauvegarde des résultats

Sauvegarder les résultats de la recherche sur la plate – forme de Chemical Abstracts Service

Accéder aux résultats sauvegardés lors d'une prochaine connexion



Exporter les résultats de la recherche vers un document bureautique.

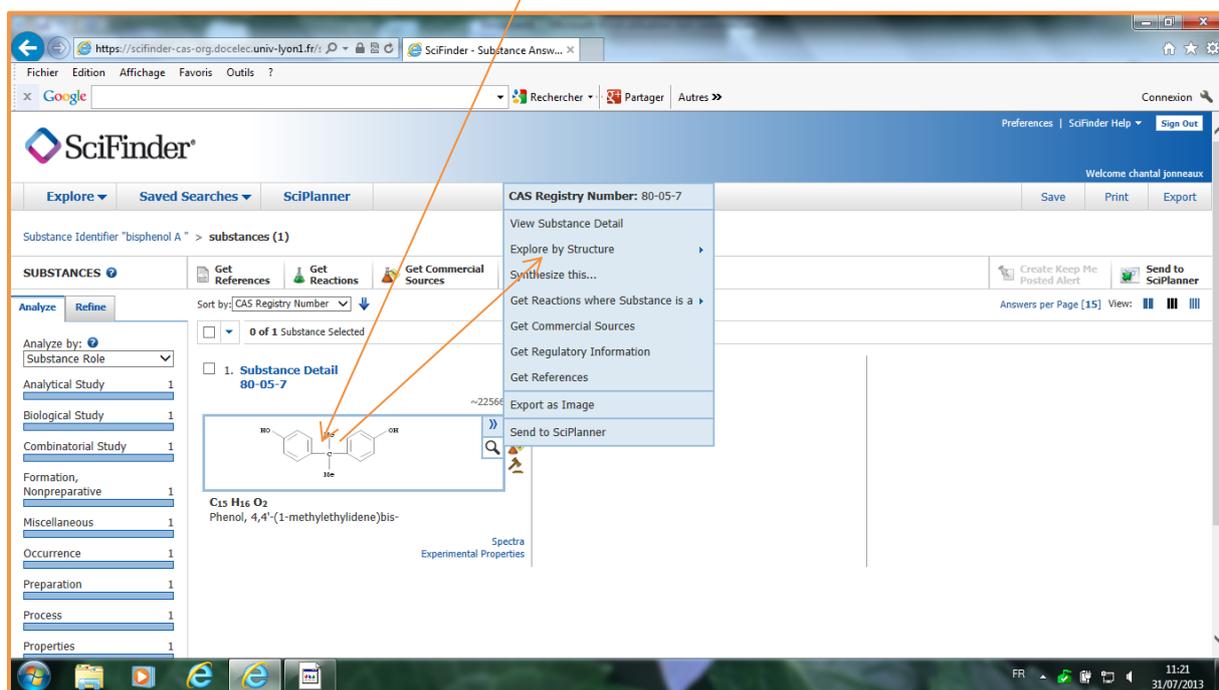


La sauvegarde est possible pour les substances et les réactions. Il n'y a pas de possibilité de veille.

6. Autres fonctionnalités

6.1 La copie de structures dans le logiciel de dessin

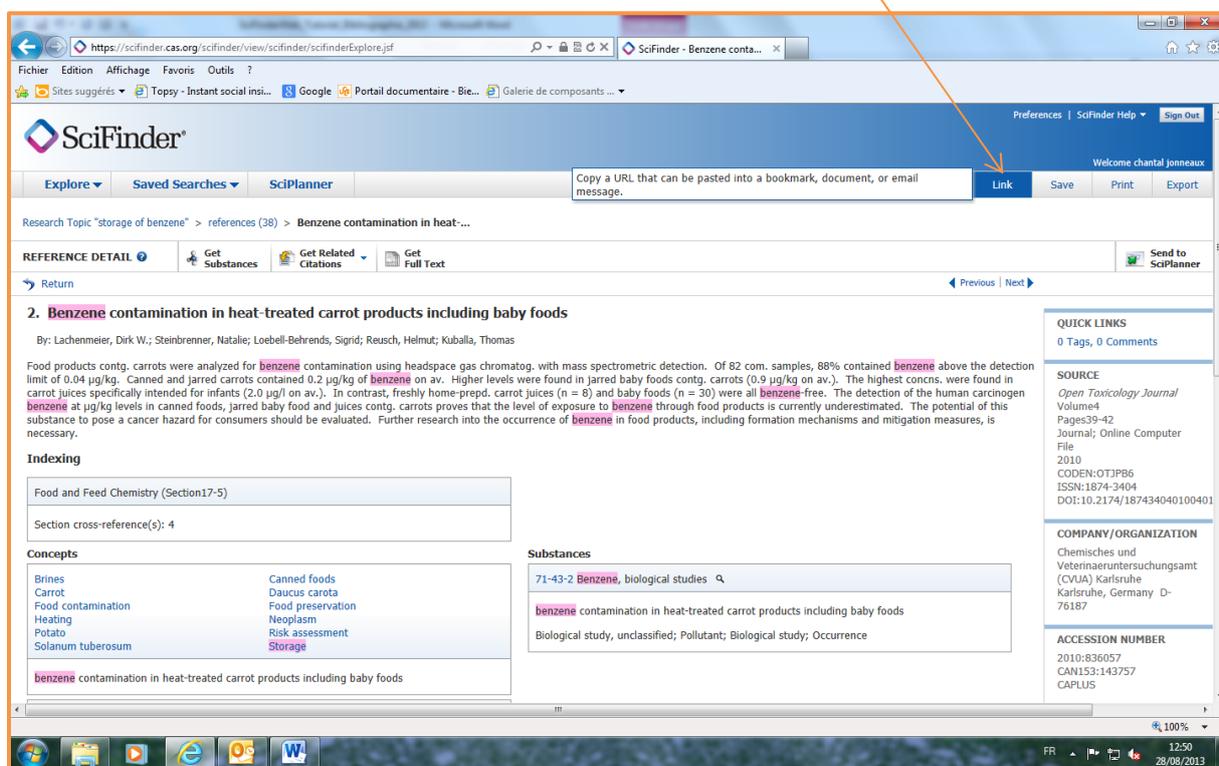
Depuis l'affichage abrégé ou détaillé d'une substance, cliquer sur le dessin et choisir Explore by structure. Le schéma sera alors basculé dans le formulaire d'interrogation et il pourra être retravaillé



The screenshot shows the SciFinder web interface. The browser address bar displays <https://scifinder-cas.doculib.univ-lyon1.fr/>. The page title is "SciFinder - Substance Answer...". The main content area shows a search for "bisphenol A" with 1 substance identified. The substance detail for CAS Registry Number 80-05-7 is displayed, including a chemical structure and the name "Phenol, 4,4'-(1-methylethylidene)bis-". A context menu is open over the chemical structure, with the "Explore by structure" option highlighted. The menu also includes options like "View Substance Detail", "Synthesize this...", "Get Reactions where Substance is a", "Get Commercial Sources", "Get Regulatory Information", "Get References", "Export as Image", and "Send to SciPlanner". The left sidebar shows various analysis filters such as "Analyze by: Substance Role", "Analytical Study", "Biological Study", "Combinatorial Study", "Formation, Nonpreparative", "Miscellaneous", "Occurrence", "Preparation", "Process", and "Properties".

6.2 La fonction partage

Copier le lien qui s'affiche pour envoi par mail à d'autres destinataires



The screenshot shows the SciFinder web interface. At the top, there is a navigation bar with 'SciFinder' logo and user information. Below that, a search bar and navigation tabs are visible. The main content area displays a reference detail for a paper titled '2. Benzene contamination in heat-treated carrot products including baby foods'. On the right side of the page, there is a 'QUICK LINKS' section with a 'Link' button. A callout box from the text above points to this 'Link' button, indicating that clicking it will copy the URL for sharing via email.



Cette fonction n'est accessible qu'à partir de la page de présentation détaillée des notices.

7. Pour en savoir plus

- **SciFinder training**
Le guide développé par Chemical Abstracts Service
<http://www.cas.org/training/scifinder>