# CAS SciFinder<sup>n</sup> Guia Rápido de Uso

Interface e Buscas por Referências	1-2
Buscas por Substâncias e Editor de Estruturas	3-4
Construindo Estratégias de Buscas Avançadas	5
CAS Roles	6
Buscas por Sequências Biológicas	7-8
Buscas por Reações	9-10
Planejamento de Retrossíntese	11-13
Buscas Markush e CAS PatentPak®	14
Fornecedores e ChemDoodle	15
Análise de Anterioridade	16
Login, Feedback e Suporte	17



## Interface e Buscas por Referências



#### Interface de Busca O CAS SciFinder<sup>n</sup> apresenta uma interface de pesquisa simplificada.

earching for	Substances Inicie	a busca		$\uparrow$
& All	Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number,	PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. Learn More		_
9 Substances	Enter a query		Draw Q	•
A Reactions	- Molecular Formula 👻		×	
References	Ţ	Examples: C6H6   (C8H8)x   C22H	H26CuN2O5.C2H3N	
Suppliers	+ Add Advanced Search Field	Learn more about Sci	Abra o editor de	Execute a busca ou
Biosequences	Acesse a busca por para substâncias e	or campos, disponível referências	estruturas	pressione ENTER
Retrosynthesis				

#### **Buscapor** Referências

#### O modo Referências traz visualizações, menus dinâmicos e um layout fácil de utilizar

- Referências são ordenadas por relevância
- Você pode salvar as buscas, enviar por e-mail e definir alertas
- Os filtros permitem que você foque os seus resultados
- O CAS PatentPak mostra a localização de substâncias químicas em patentes



## Detalhes de referências e Buscas

Informações bibliográfi	cas
PATENT Patent Number	CAS Formulus®, the comprehensive formulations database and workflow solution, is now available for all SciFinder <sup>n</sup> x users. <u>View content from CAS Formulus</u> in this document. <u>Learn more about Formulus</u> .
US20140005234	Insecticidal N-substituted sulfilimine and sulfoximine pyridine N-oxides
Publication Date 2014-01-02	By: Bland, Douglas C.; Ross, Ronald, Jr.; Johnson, Peter L.; Johnson, Timothy C.
Application Number US2013-13919035	N-substituted sulfilimine and sulfoximine pyridine N-oxides were prepared according to the invention and their use in controlling insects and other invertebrates are provided. Further embodiments, forms, objects, features, advantages, aspects, and benefits shall become apparent from the description.
Application Date 2013-06-17	Me MeS
Kind Code A1	Me
Assignee	Automatize suas buscas por anterioridade
Unknown	Keywords: insecticide sulfilimine sulfoximine pyridine q
Source United States CODEN: USXXCO	PDF traz o PDF original da patente PatentPak Viewer Get Prior Art Analysis Get Prior Art Analysis Viewer mostra a versão interativa do texto completo
Database Information	Patent Family
AN: 2014:3851	Patent Language Kind Code PatentPak Options Publication Date Application Number Application Date
CAplus	US20140005234 English A1 PDF   PDF+   Viewer 2014-0 155914492 155914492
Language	CA2876184 English A1 20144 5 2 37 4 5
English Dados de IPC indexados, sub	por membro da família, termos patrices e formulações 1 PDF 2014-( CHUCHAGE
	voimtet synner-Present, Torget
	✓ Substances 15281480.8 15281480.8 15281489.5
	Formulations
	Control Contro
	indexadas, com CAS RN e http://www.index.com/com/

# Operadores Operadores lógicos trazem precisão para sua estratégia de busca Booleanos

Use parênteses para agrupar expressões lógicas ou sinônimos, ex.: (flavor or odor) and menthol

- AND Requer que ambos os conceitos estejam presentes no documento
- **OR** Requer que um ou ambos os conceitos estejam presentes no documento Conecte sinônimos com OR
- NOT Exclui um conjunto de resultados que conteham o termo após NOT

**Wildcards** Wildcards permitem uma recuperação de resultados mais abrangente e maior precisão. Use em buscas por referências e nomes de substâncias

Truncamento interno e ao final são permitidos

- Substitui por qualquer número de caracteres E.g.: polymorph\*
- **?** Substitui por zero ou um caracter E.g.: *benzonorbornen*?

Termos entre aspas são buscados como uma única frase, ex.: "Programmed cell death protein"

## Nomes de substâncias e Estruturas

#### **Buscas por nomes**

Streptomycin 57-92-1 Streptomycin sulfate "Streptomycin sulfate" Sulfoximin\* WO2019234160

**Buscas por** 

estruturas

#### Busque com um ou mais idenficadores ou nomes de compostos

Encontra o resultado *Streptomycin* Encontra o resultado *Streptomycin*, usa o CAS RN como identificador Encontra 3 resultados: *Streptomycin*, *Streptomycin sulfate* e *Sulfate* Encontra o resultado *Streptomycin sulfate* Encontra todos os nomes com o prefixo *Sulfoximin* Encontra todas as substâncias indexadas nesta patente

As buscas por estruturas trazem resultados em um *layout* intuitivo. Os resultados mais relevantes são destacados com suas propriedades e imagens em alta resolução

#### Clique para desenhar estruturas Searching for... Substances Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOL Learn More & All 🚺 Edit 🔺 Q Enter a query.. Substances A Reactions Molecular Formula 👻 Examples: C6H6 (C8H8)x C Entre o nome de uma substância ed Search Field Learn more about Scil Clique para editar a Remove Edit Drawing Acesse opções de busca avançadas para substâncias estrutura Search Patent Markush Biosequences Retrosynthesis Clique na caixa para fazer uma busca Markush Selecione o nível de correspondência 5,597,153 Results Sort: Number of Suppliers - View: Partial -Structure Match Altere o ordenamento 2 1 3 As Drawn (111) Altere o nível de detalhamento Ν 90357-06-5 149104-88-1 80-08 Substructure (5,5M) Ы Ы Clique nos Números de Registro Similarity (1.035) CAS para abrir detalhes Analyze Structure Precision Analise a precisão Clique na estrutura C7H9BO₄S **Chemscape Analysis** C18H14F4N2O4S C12H12N2O2S para v er opções Bicalutamide [4-(Methylsulfonyl)phenyl]boronic acid Dapsone Visually explore structure similarity with a powerful new 3.877 及 224 2 114 tool. CAS RN References Reactions Suppliers $(\mathbf{x})$ 80-08-0 Learn more about Chemscape. CAS Name Create Chemscape Analysis NH<sub>2</sub> Dapsone л И **Filter Behavior** Inicie a análise no Chemscape Recupere dados da substância Filter by Exclude Q Substance Detail **Reaction Role** Reactions (4.512) Product (680K) д Double bond geometry show $H_2N$ Reactant (157K) Synthesize (117) C<sub>10</sub>H<sub>9</sub>NO<sub>2</sub>S Reagent (454) (2E)-3-[(4-Methylphenyl)sulfonyl]-2-Start Retrosynthetic Analysis Ð Catalyst (472) propenenitrile References (16K) B Solvent (57) Edit Structure Reset + Suppliers (104) 3 744 **囚** 30 **E** 99 References Reactions Suppliers A Reference Role Abra o editor de estruturas Faça o download em .sdf ou .mol Reference Roles trazem informações sobre o contexto das substâncias nas referências

## Detalhes das substâncias e editor

# Detalhes de substâncias

Clique sobre o número CAS para mostrar os detalhes da substância, como estrutura, fórmula molecular, propriedades e outros dados



#### **Editor CAS Draw**

Defina estratégias de buscas para estruturas e reações

СА	S	CAS Draw - Importe e exporte arquivos de estruturas Insira Números CAS, SMILES ou InChI para importar estruturas	×	Ľ	Acc
		🗈 🛱 🛱 🛱 🕼 🕤 🗢 🔁 📪 Enter a CAS Registry Number, MILES, or InChI			
P		Laço   Selecionar objects. Ctrl-click to select or deselect individual objects.	ſ	С	H
2		Desenhar átomos e ligações   Apagar         Aprenda sobre atalhos do teclado para desenho de átomos         Seleção de	1	0	s
	Et	Selecione elementos da tabela periódica   Atalhos	J	Ν	Р
X	R	Seleção de variáveis   Defina suas variáveis (Grupos R)		сı	Si
	0	Selecione a partir de templates ou crie o seu próprio	Ī		۸.
•	Θ	Inclua carga positiva   Inclua carga negativa indicam que outras opções estão disponíveis.			ĔΖ
[],4	~	Repetição de grupos   Cadeia carbônica	Ĩ	$\bigcirc$	$\bigcirc$
Q.	AB	Definir pontos variáveis de ligação no anel   Papel na reação Desenhe aneis	]-	0	$\bigcirc$
5)	%_	Mapeamento de átomos   Bloquear anéis e átomos Altere o tamanho do editor		0	$\bigcirc$
<u>~</u>	→	Mapeamento de ligações   Desenhar seta de reação Molecular Formula: C <sub>18</sub> H <sub>14</sub> F <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> S (430.38)	•		
ent S	earch	С • ОК Cancel Digite o símbolo de um elemento para desenhar		w All Se	arch Hi

## Estratégias de busca avançada

#### Construindo estratégias de busca avançada

## Fornece campos específicos de referência e pesquisa de substâncias na página inicial do CAS SciFinder<sup>n</sup>

- Operadores são processados nesta ordem: OR, AND, NOT
- Operadores não são permitidos em campos de busca avançada
  - Truncamento é permitido, ex. polymorph\*
- Até 50 campos de busca avançada

	References	
	Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed II	D, AN, CAN, and/or DOI. Learn More
	Enter a query Altere o campo Caixa de buscas geral	Draw Q
Defina os operadores entre os campos	• Author Name • Enter last name, first name middle nam	ne. X
	+ Add Advanced Search Field • Adicione mais campos específicos	<i>Example</i> : Schubert, J A Learn more about SciFinder <sup>n</sup> Advanced Search.
Exemplos	Buscas por Referências Buscas por Referências	uscas por Substâncias

# Operador para "pollution monitoring" Steel\* AND • Chemical Name • polyethylene OR • Chemical Name • polypropylene Interpretação da estratégia: Interpretação da estratégia:

Interpretação da estratégia: "pollution monitoring" and (polyethylene or polypropylene) Interpretação da estratégia: Steel with tensile strength property information

#### Campos de Busca Avançada

#### \_ . . .

- ReferênciaNome de autor
- Nome da publicação
- Nome da Organização
- Título
- Resumo/Palavra chave
- Conceito
- Substâncias
- Ano de publicação
- Identificador de documento
- Identificador de patente
- Editor

#### Substância

Os campos de busca avançada a seguir estão disponíveis

- Fórmula molecular
- Número CAS
- Nome químico
- Identificador de documento
- Identificador de patente
- Espectro experimental
- Propriedades biológicas
- Propriedades químicas
- Densidade
- Elétricas
- Lipinski
- Magnéticas
- Mecânicas
- Óticas e de espalhamento
- Estruturais
- Térmicas

## **CAS** Roles

#### **CAS** Roles

Os *roles* estão relacionados às substâncias e permitem que você explore o contexto das substâncias nas referências associadas.

- Super roles são categorias mais amplas e contemplam os roles específicos.
   Por exemplo, Analytical Study, Preparation ou Occurrence
- Os roles específicos são mais precisos. Eles estão relacionados a aspectos como o uso de uma substância como analito (Analyte) ou a ocorrência de um composto em uma planta (Natural Product Occurrence)

#### Roles em resultados de substâncias

Em uma busca a partir de substâncias, os filtros de *roles* indicarão os tipos de *roles* que estarão conectados às substâncias nas referências.

Reference Role				
By Count Alphanumeric Exemplo de 'reference roles' em um conjunto de resultados de substâncias		Númoro do subst	âncias no conjunto	
0 Selected			de resultados cor	n aquele <i>role</i> .
Adverse Effect (15)	Diagnostic Use (3)	Phar	macological Activity (10)	
Agricultural Use (29)	Food or Feed Use (120)	Phys	ical, Engineering, or	
Analyte (17)	Formation, Non-preparative	Chen	nical Process (888)	

#### Roles em resultados de referências

Roles estarão como um filtro em resultados de referências se sua busca partiu de substâncias, por exemplo, buscando por nomes de compostos ou trazendo referências associadas a estruturas.

**Exemplo**: Tenho interese no tema de poluição marinha, como encontro publicações onde o polipropileno é especificamente descrito como poluente?

A busca por polipropileno traz um grande número de referências. O filtro de *substance role* mostra todos os roles que se aplicam ao propileno neste conjunto de dados. O *role Pollutant* indica que há 1657 publicações que descrevem o polipropileno como um poluente.



## Buscas por sequências biológicas

Opções de buscas	<ul> <li>São possíveis três modalidades de buscas</li> <li>BLAST: Busca por sequências similares</li> <li>CDR: Busca por anticorpos através de sítios de ligação em antígenos</li> <li>Motif: Busca por padrões conservados em sequências curtas</li> </ul> A ligação entre todas as sequências e a literatura científica está em desenvolvime	ento
Busca por simiaridad BLAST	BLAST permite a busca por sequências de aminoácidos ou nucleotídeos similares. Os resultados de alinhamento são apresentados de forma intuitiva com filtros de fácil uso para percentagens de identidade e cobertura. Os resultados de referência são relacionados aos hits de sequências.	а
	<ul> <li>Iniciando uma busca BLAST</li> <li>Abra o modo <i>Biosequences</i> a partir da página inicial do CAS SciFinder<sup>n</sup></li> <li>Carregue a sequência a partir de um arquivo ou cole uma sequência</li> <li>Formatos aceitos: sequências contendo resíduos representados por uma única letra, por exemplo, em formato FASTA. Numeração não é permitida.</li> <li>Cada sequência deve começar com o símbolo &gt;. Sequências podem ser separadas por múltiplas linhas, permitindo o processamento de múltiplas simultaneamente.</li> <li>Ajuste os parâmetros BLAST como desejar e inicie a busca</li> </ul>	
Searching for B	sequences	
& All	r a protein or nucleotide string, or upload a .txt or .fasta file. <u>Learn more about Biosequence Search.</u>	
© Substances	LAST CDR Motif Opções de buscas Upload Sequence Clear Search	
A Reactions	Sequence Type:	
E Suppliers	IQHLCGSHLVEAYLVCGERGFFYTPKTGIVEQCCTSICSLYQLENYCN Nucleotide Protein	
	Cole a sequência Suba uma sequência FASTA de um arquivo sem	
♦ Biosequences	nesta janela a numeração ou cole na aba BLAST O Nucleotides O Proteins	
Retrosynthesis	Inclua sequências Include NCBI Sequences	
	Limit Total Sequence Results to:	
	20000 -	
	Q Start Biosequence Search	
	dvanced Biosequence Search 🔺 Adjust Parameters for Short Sequences   Reset All	
	lignment Identity %  Match with Gaps? Gap Costs	
	Yes No     Existence 11 Extension 1	
Parâmetros av ançados BLAST	uery Coverage % 🛛 Word Size O Scoring Matrix O	
	90 3 • BLOSUM62 •	
	LAST Algorithm E-Value I Exclude Low	
	BLASTP	
	Ves ♥ No	

## Análise de resultados BLAST

# Acessando os resultados

Os resultados de buscas por sequências aparecem no histórico recente de buscas e no Histório geral ( History ). Clique em '*View Results*' para analisar as respostas.

Biosequences	Sequence Type: <b>Protein</b>	> human insulin sequence	View Res
6:29 PM	Search Within: Proteins	FVNQHLCGSHLVEAYLVCGERGFFYTPKTGIVEQ	
	NCBI Included: Yes	CCTSICSLYQLENYCN	
	BLAST Algorithm: BLASTp		Edit Sear
	Alignment Identity: -		
	Query Coverage: 90%		<i>c i</i>
			Comple
	Results will expire on		
	Mar 20, 2022		

#### Veja os Resultados

- Veja os resultados de similaridade de sequências BLAST.
- Alinhamentos são ordenados pela Identidade da Sequência
- Imagens simplificadas trazem a qualidade do alinhamento
  - Mismatches são indicados por linhas vermelhas
  - Alinhamentos detalhados podem ser vistos na aba Alignment
- Detalhes da sequência original e das patentes são vistos em abas distintas
- Clique em 
   References para recuperar patentes relacionadas
- É possível fazer o download em XLSX 速



## **Buscas por reações**

## Buscas por reações

Estratégias de buscas por reações podem conter nomes de substâncias, números CAS, identificadores de documentos ou estruturas químicas Reações são agrupadas em esquemas com reagentes e produtos idênticos • As reações são ordenadas por rendimento dentro de um mesmo esquema

 Encontre reações pelo nome da substância, CAS RN, identificador de documento ou estrutura química

Searching for	Reactions	
& All	Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. Lear	m More
☑ Substances	Enter a query	🚺 Edit 🔺 🔍
A Reactions	Selecione Reactions	
References	Clique na caixa de diálogo para editar	or • or
📜 Suppliers		Edit Drawing Remove
Retrosynthesis		
eja por correpondência com	a estrutura	rupamento por decumento
ure Match		Group: By Scheme  View: Expand
rawn (0)	References	Rendimento d
		reação
arity (1,947)	Scheme 22 (4 Reactions) Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância OH	Steps: 1 Yield: 39
ehavior ter by Exclude d Veja forne	Scheme 22 (4 Reactions) Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância OH + Relative stereochemistry shown reedores F Suppliers (91)	Steps: 1 Yield: 39-
arity (1,947) Tehavior ter by Exclude Id 100% (23) 89% (19)	Scheme 22 (4 Reactions) Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância OH + Relative stereochemistry shown Relative stereochemistry shown Re	Steps: 1 Yield: 39-
arity (1,947) ehavior ter by Exclude d 100% (23) 89% (19) 79% (40) 59% (30)	Scheme 22 (4 Reactions) Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância OH + OH Relative stereochemistry shown Relative stereochemistry shown	Steps: 1 Yield: 39-
arity (1,947) ehavior ter by Exclude d 100% (23) 89% (19) 79% (40) 59% (30) 49% (15) w All	Scheme 22 (4 Reactions) Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância OH + OH Relative stereochemistry shown Relative stereochemistry shown Rela	Steps: 1 Yield: 39- Control of the stereochemistry shown Relative stereochemistry shown Suppliers (83) Proline-3-carboxamides as H-PGDS et al Veja a ref erência da reação roperty Organization, WO2017103851 A
arity (1,947) ehavior ter by Exclude d 100% (23) 89% (19) 79% (40) 59% (30) 49% (15) w All mber of Steps	Scheme 22 (4 Reactions)       Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         OH       OH         Relative stereochemistry shown       Preparation of quin inhibitors         sceedores       Image: Suppliers (91)         Reaction Summary       Steps: 1 Yield: 67%         1.1 Reagents: Triethylamine, Diphenylphosphoryl azide Solvents: tert-Butanol; 1 h, 60 °C; overnight, reflux; reflux → rt       By: Cadilla, Rodolfo; World Intellectual Pr 2017-06-22         View Reaction Detail       Detalhes da reação       PatentPak ▼	Steps: 1 Yield: 39- Comparison of the stereochemistry shown Relative stereochemistry shown Suppliers (83) Poline-3-carboxamides as H-PGDS et al Veja a referência da reação roperty Organization, WO2017103851 A Full Text •
arity (1,947) ter by Exclude d Veja forme 89% (19) 79% (40) 69% (30) 49% (15) w All mber of Steps n-Participating Functional ups	Scheme 22 (4 Reactions)       Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         OH       OH         Relative stereochemistry shown       OH         Relative stereochemistry shown       F Suppliers (89)         Reaction Summary       Steps: 1 Yield: 67%         1.1 Reagents: Triethylamine, Diphenylphosphoryl azide Solvents: tert-Butanol; 1 h, 60 °C; overnight, reflux; reflux → rt       By: Cadilla, Rodolfo; World Intellectual Pr 2017-06-22         View Reaction Detail       Detalhes da reação       PatentPak ▼         Reaction Summary       Steps: 1 Yield: 67%       Preparation of 1,3-c	Steps: 1 Yield: 39- Steps: 1 Yield: 39- Relative stereochemistry shown Suppliers (83) toline-3-carboxamides as H-PGDS et al Veja a referência da reação roperty Organization, WO2017103851 A Full Text -
arity (1,947) ter by Exclude d Veja forme 89% (19) 79% (40) 69% (30) 49% (15) w All mber of Steps n-Participating Functional sups ide (70)	Scheme 22 (4 Reactions)       Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         OH       OH         Relative stereochemistry shown       Preparation of quin inhibitors         scedores       Image: Suppliers (91)         Reaction Summary       Steps: 1 Yield: 67%         1.1 Reagents: Triethylamine, Diphenylphosphoryl azide Solvents: tert-Butanol; 1 h, 60 °C; overnight, reflux; reflux → rt       By: Cadilla, Rodolfo; World Intellectual Pr 2017-06-22         View Reaction Detail       Detalhes da reação       Preparation of 1,3-c derivatives as heme PGDS) inhibitors         Reaction Summary       Steps: 1 Yield: 67%       Preparation of 1,3-c derivatives as heme PGDS) inhibitors	Steps: 1 Yield: 39- Steps: 1 Yield: 39- Control of the stereochemistry shown Relative stereochemistry shown Suppliers (83) Proline-3-carboxamides as H-PGDS et al Veja a referência da reação et al Full Text + disubstituted cyclobutane or azetidine atopoietic prostaglandin D synthase (H
arity (1,947) Behavior ter by Exclude Id 100% (23) 89% (19) 79% (40) 69% (30) 49% (15) w All mber of Steps n-Participating Functional pups lide (70) tbamate (67) tone (48) tlic ketone (47)	Scheme 22 (4 Reactions)       Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         OH       OH         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         OH       OH         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         OH       OH         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         OH       OH         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         OH       OH         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         OH       OH         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância         Image: Clique na estrutura para ver as informaçõe da substância      <	Steps: 1 Yield: 39- Steps: 1 Yield: 39- Comparison of the stereochemistry shown Relative stereochemistry shown Suppliers (83) toline-3-carboxamides as H-PGDS et al Veja a referência da reação roperty Organization, WO2017103851 A Full Text - disubstituted cyclobutane or azetidine atopoietic prostaglandin D synthase (H torman; et al roperty Organization, WO2018069863 A

## **Detalhes de reações**

# Detalhes de reações

Detalhes incluem solventes, catalisadores, reagentes, condições e protocolos experimentais extraídos das publicações



xperimental Prot	ocols
MethodsNow™ ●	Veja protocolos experimentais, incluindo procedimentos detalhados
Products	Ethyl (1 <i>R</i> ,3 <i>S</i> )-3-[(benzyloxycarbonyl)amino]cyclohexanecarboxylate, Yield: 85%
Reactants	1,3-Cyclohexanedicarboxylic acid, 1-ethyl ester, (1 <i>R</i> ,3 <i>S</i> )-
	Benzyl alcohol
Reagents	Triethylamine
	Diphenylphosphoryl azide
Solvents	Toluene
Procedure Characterization Dat	<ol> <li>Add diphenylphosphoryazide (DPPA) (166 mL, 769 mmol) and triethylamine (107 mL, 769 mmol) to (15, 3R) -3-ethoxycarbonylcyclohexanecarboxylic acid (140 g, 700 mmol) in toluene (1.4 L).</li> <li>Reflux the mixture for 2 h under N<sub>2</sub>.</li> <li>Cool the reaction mixture to 60°C and add benzyl alcohol (87 mL, 839 mmol) in one portion.</li> <li>Heat the mixture to 80°C overnight.</li> <li>Stir the mixture and separate the layers.</li> <li>Veja dados de caracterização</li> </ol>
<ul> <li>Ethyl (1<i>R</i>,3<i>S</i>)-3-</li> </ul>	[(benzyloxycarbonyl)amino]cyclohexanecarboxylate
Proton NMR Spectrum	(300 MHz, CDCl <sub>3</sub> ) δ7.48-7.30 (m, 5H), 5.11 (s, 2H), 4.67 (s, 1H), 4.13 (q,J= 7.1 Hz, 2H), 3.55 (s, 1H), 2.42 (t,J= 11.8 Hz, 1H), 2.28 (d,J = 12.6 Hz, 1H), 2.10-1.79 (m, 3H), 1.50-1.19 (m, 6H), 1.19-1.00 (m, 1H).
Optical Rotatory Power	=-33.3° (c = 1 in DCM).
HRMS	(ESI) [M + H] <sup>+</sup> calculated for C <sub>17</sub> H <sub>24</sub> NO <sub>4</sub> 306.1700, found 306.1700
State	sticky solid

## Planejamento de retrossíntese

#### Inicie a geração do planejamento

## Há duas opções para iniciar o planejamento retrossintético no CAS SciFinder<sup>n</sup>

0 Desenhe a estrutura no editor de Retrossíntese na página inicial

Olique no desenho de qualquer estrutura e inicie a Análise Retrossintética



#### Opções da Retrossíntese

#### Edite as opções do planejamento para...

- aumentar os passos de retrossíntese
- proteger ligações em toda a rota
- definir as ligações que serão quebradas na primeira etapa
- alterar o custo dos materiais de partida
- criar um plano preditivo com mais alternativas significativas, ex. para moléculas poli ou heterocíclicas



### Plano de retrossíntese e passos alternativos

#### Abra o plano

O Plano Experimental é gerado em poucos segundos, o cálculo do Plano Preditivo levará mais tempo



#### Passos Alternativos

Uma visão geral de todos os passos experimentais e preditivos As evidências são apresentadas como um conjunto de resultados de reações

Acesse as evidências de reações a partir do 1 link na visão geral dos passos ou
 nas alternativas de passos no esquema



## **Opções de ordenamento**

# Opções de ordenamento

Para planos com passos preditivos, você pode aumentar ou reduzir a importância dos passos e alternativas para cada perfil, determinando o que será mostrado nos passos alternativos e em qual ordem.

- Cada perfil de pontuação pode ser ajustado para Off (extrema esquerda), Baixo, Médio ou Alto (extrema direita)
- A configuração padrão para cada perfil é "Médio"
- Ao mover a barra de controle toda para a esquerda, o perfil de pontuação é desligado e não será considerado um fator para o ranqueamento da alternativa

#### Perfis de ranqueamento

Atributo	Definição
Redução da complexidade	Reduz a complexidade dos reagentes de um passo quando comparado ao produto Na retrossíntese, geralmente se prefere uma alta redução de complexidade
Convergência	Determina o quão ramificado um plano é; <b>geralmente se prefere uma</b> <b>elevada convergência</b> ao invés de um plano linear. Para um determinado passo, quanto mais precursores houver, e o mais próximo seus tamanhos relativos forem, é considerado mais convergente. <b>Aumentar a convergência mostra passos com mais reagentes.</b>
Evidência	Ranqueia as alternativas baseado no número de exemplos na literatura que dão base ao tipo de reação. <b>Mais evidências</b> para um passo <b>significa que o tipo de reação tem mais</b> <b>aplicações e é mais versátil em termos de condições e substratos</b> e, por isso, predições feitas baseadas nelas são provavelmente mais confiáveis. <b>Aumentar as evidências mostra alternativas com mais exemplos</b> .
Custo	Leva em conta as despesas das reações ao ranquear os materiais de partida baseado no menor preço encontrado nos catálogos indexados.
Rendimento	Aplica-se ao rendimento de cada passo do plano, o que contribui para o rendimento médio da molécula alvo. <b>Aumentar o rendimento mostra a molécula alvo e as alternativas com</b> <b>os maiores rendimentos</b> (máximo para passos da literatura e médio para passos preditivos).
Eficiência Atômica	Reduz as partes dos reagentes que não são incluídas nos produtos de cada passo. Aumentar a eficiência atômica mostra alternativas com menores quantidades de átomos dos reagentes que não são mapeados nos produtos.

## **Buscas Markush e CAS PatentPak®**

#### **Buscas Markush**

Buscas por estruturas Markush podem ser realizadas utilizando a opção Search Patent Markush na busca por substâncias



## Fornecedores e ChemDoodle®

#### Buscas por Fornecedores

A busca por fornecedores permite acesso direto a informações de catálogos de produtos químicos baseadas na estrutura química, nomes e outros identificadores

Filter Behavior	E Suppliers (384)			Opçõe	s de ordenamento	Soe: Relevance
Filter by Exclude	Seleça	ão de forne ridos/não pr	ecedores referidos			Relevance Supplier: A to Z Supplier: Z to A
No Preference (384)	Supplier	Si	ubstance	Purity	Purchasing Details	Ships Within Purity
Supplier     Hayashi Pure Chemical     Products Catalog (107)     KANTO CHEMICAL (41)	Oakwood Oakwood Chemical Product List United States	<ul> <li>70</li> <li>9</li> <li>9</li> <li>10</li> </ul>	664-93-9 ulfuric acid, 60%	95-98%	Order From Supplier 50 ml, USD 10 100 ml, USD 11 500 ml, USD 15	☑ Maintained in stock
<ul> <li>FUJIFILM Wako Chemicals Europe GmbH Product List (37)</li> <li>FUJIFILM Wako Chemicals U.S.A. Corporation Product</li> </ul>	Link para o detaihamento We Em	akwood Chen <sup>eb</sup> nail none	nical Product List	eleção d ef eridos	e fornecedores s/não preferidos cas r cas n	ance Information egistry Number 7664-93-9 ame Sulfuric acid
FUJIFILM Wako Pure Chemical Corporation Product List (37) View All	Oakwood Chemical Product L United States	em Details nemical Name rder Number	Sulfuric acid, 60%	ições ato	ļ	но— <u>s</u> —он
<ul> <li>▶ Purity</li> <li>≥99% (2)</li> <li>95-98% (108)</li> </ul>	Qu	uantity, Price	50 ml, USD 10 100 ml, USD 11 500 ml, USD 15 4 L, USD 39 18 L, USD 90 200 L, USD 400	s do o		
<ul> <li>90-94% (8)</li> <li>&lt;90% (10)</li> <li>Quantity</li> </ul>	Oakwood Stor Oakwood Chemical Product L United States Las	ock Status icing Information ist Updated	Bulk Available Maintained in stock	a		
Milligrams (2)	Ore	rder From Supplie	compra	s		

#### **ChemDoodle**®

O editor de estruturas ChemDoodle está disponível com o editor padrão CASDraw. O ChemDoodle é útil para tablets e celulares.



## **Busca por Anterioridade**

#### Análise de Anterioridade em Documentos de Patente

Ao visualizar uma página de detalhes de referência de patente, uma opção para gerar uma busca por anterioridade está disponível. Os resultados aparecem no histórico de pesquisa.

- Predição baseada em Inteligência Artificial
- Baseado em um único documento como ponto de partida
- Análise dos conceitos do CAS, substâncias indexadas, códigos IPC e o texto complete adicional
- Gera uma lista de documentos previamente conhecidos ranqueados por relevância, contendo patentes e literatura não patentária

PatentPak Vier	Incia detall	a análise a par nes do docume	tir dos			
Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
WO2004011464	English	A2	PDF   PDF+   Viewer	2004-02-05	WO2003-FR2354	2003-07-25
ReferencesP10:44 AMN		Prior Art Analysis (154) Novel substituted pyrazolo[1,5-a]-1,3,5-triazine derivatives and their				View Results
		analogs, ph drugs, parti methods fo	armaceutical composition cularly as neurotrophic fa r their preparation	ns containing th actor production	em, their use as n enhancers, and Veja os resultado	Complete os no Histórico de bu

# Login, Feedback e Suporte

Detalhes de login	Crie suas credenciais de acesso ao CAS SciFinder Discovery Platform por <u>este endereço</u> .			
	<ul> <li>Acesse o CAS SciFinder Discovery Platform pela página web do CAS.</li> </ul>			
Botão de Feedback	Forneça feedback direto ao CAS			
Aprenda mais	Treinamentos de uso do CAS SciFinder <sup>n</sup> (inglês): <u>https://www.cas.org/support/training/scifinder-n</u>			
	Seminários futuros e gravados (inglês): https://www.cas.org/about/events/scifinder-webinars			
	Treinamentos e gravações em <b>português</b> : https://solutions.cas.org/b-on			
Contato ao Suporte ao Cliente	Envie um e-mail para <u>help@cas.org</u> para falar com um representante do CAS Customer Center			
Contatos do CAS na Península Ibérica	Envie um e-mail para a equipe do CAS na Península Ibérica para resolver suas dúvidas, agendar treinamentos e conversar sobre qualquer assunto relacionado: <u>respallardo@acs-i.org</u>			