

SciFinder® Scholar

Guia do Usuário

Janeiro/ 2005



e

OPTIONLINE

Copyright American Chemical Society
Todos os direitos reservados

Sumário

Capítulo 1 - Introdução	1-1
Capítulo 2 - Aspectos Gerais	2-1
Iniciando o SciFinder Scholar	2-1
Menu Principal (Main Menu)	2-3
Barra de Botões (Main Menu Toolbar)	2-6
Gravando os dados. (comando Save As).....	2-7
Imprimindo os dados	2-8
Terminando um task	2-8
Encerrando a sessão	2-8
Capítulo 3 - Pesquisa (Exploring)	3-1
Pesquisa por Tópico (Explore by Research Topic)	3-1
Pesquisa por Autor (Explore by Author Name)	3-5
Pesquisa por Número do Documento (Explore by Document Identifier)	3-5
Pesquisa por Nome de Empresa (Explore by Company Name/Organization).....	3-5
Pesquisa por Substância ou Reação (Explore by Chemical Substance or Reaction)	3-6
Capítulo 4 - Pesquisa por Estrutura Química Exata (aspectos gerais)	4-1
Capítulo 5 - Pesquisa por Sub-Estrutura Química (aspectos gerais)	5-1
Capítulo 6 - Pesquisa por Reações (aspectos gerais)	6-1
Capítulo 7 - Trabalhando com as Referências	7-1
Formato, Ordem e Detalhes dos registros, comando 'Keep References'	7-1
Acesso ao texto completo dos documentos	7-2
Botão 'Analyze / Refine'	7-2
Recurso 'Refine'	7-2
Recurso 'Analyze'	7-3
Botão 'Get Related'	7-4
Recursos 'Cited References', 'Citing References'	7-5
Recursos 'Substances', 'Reactions' e 'eScience'	7-6
Capítulo 8 - Links para Informações Adicionais	8-1
Substâncias, Fontes comerciais, Listas regulatórias, Citações	8-1
Reações, eScience, Estruturas em 3D, Texto completo dos documentos	8-2
Ícones para as Informações Adicionais	8-3
Capítulo 9 - Acesso ao Sumário dos Periódicos (Browse Journal Table of Contents)	9-1
Anexo A - Preferências	A-1
Anexo B - Importação e Exportação de Estruturas	B-1
Anexo C - Smartsearch	C-1

1 Introdução

Perfil do SciFinder Scholar

O **SciFinder Scholar** disponibiliza os seguintes recursos:

- Pesquisa por: substância química (incluindo reações e sub-estrutura), assuntos, palavras-chave, nome de autor, número de identificação de documentos e nome de companhias/organizações.
- Recursos para ordenação, análise e refinamento das buscas (tanto de referências quanto de reações)
- Pesquisa por citações (referências citadas)
- Links para as citações
- Capacidade de imprimir e salvar os resultados
- Acesso ao texto completo dos documentos através do serviço ChemPort
- Links para os dados de registros, fontes comerciais e listas de inventários das substâncias
- Capacidade de visualização das estruturas em 3D
- Acesso ao sumários/resumos de mais 1800 periódicos
- Link para o site eScience, um recurso dinâmico do CAS e outros sites grátis da internet
- Possibilidade de desenhar estrutura estereoquímica

Conteúdo do SciFinder Scholar

CAPLUS: a base de dados desenvolvida pelo CAS Chemical Abstracts Service, contém atualmente mais de 23 milhões de documentos, indexados a partir de 8.000 periódicos de todo o mundo e cobrindo informação a partir de 1907 até o presente. As fontes incluem: revistas, patentes, palestras, teses, relatórios técnicos, etc. As patentes englobam mais de 3 milhões de documentos originados em 43 países e 2 escritórios internacionais. Cobre áreas tais como: Engenharia e Química Aplicada, Química Geral, Física, Biologia, Ciências Médicas, Polímeros, Ciências dos Materiais, Ciências Geológicas, Alimentos, Agricultura.

MEDLINE: a base, desenvolvida pela National Library of Medicine, cobre literatura biomédica a partir da indexação de mais de 3.900 periódicos provenientes de mais de 70 países, a partir de 1958.

CAS REGISTRY: a base de dados desenvolvida pelo CAS Chemical Abstracts Service, contém atualmente mais de 25 milhões de substâncias orgânicas e inorgânicas e incluindo incluindo ainda milhões de bioseqüências.

CASREACT: a base oferece acesso a mais de 5 milhões de reações cadastradas a partir de artigos de revistas publicados de 1907-agora e de patentes de 1982-1984 e 1991 em diante.

CHEMCATS: base de dados incluindo fontes comerciais para mais de 6 milhões de substâncias químicas.

CHEMLISTS: base de dados contendo mais de 228 mil registros de substâncias catalogadas em inventários de diversos países.

A informação que você encontra no **SciFinder Scholar** inclui:

Substâncias

- Nome químico
- Número CAS (CAS RN, CAS Number, CAS Registry Number)
- Estrutura química para substâncias
- Estrutura química para reações
- Bioseqüências
- Dados químicos
- Fontes comerciais para substâncias
- Informação regulatória

Documentos

- Título
- Autor/Inventor
- Nome da Companhia/Entidades/Detentor da Patente
- Ano de Publicação
- Fonte, Ano, Editora, Volume, Número, Página, ISSN
- Identificação da patente, incluindo Prioridade, Aplicação, Prioridade e Família
- Resumo
- Indexação
- Termos Complementares de indexação
- Citações

Material de apoio

Site do **SciFinder Scholar**: dados sobre funcionamento e recursos

<http://www.cas.org/SCIFINDER/SCHOLAR>

Link direto para materiais de apoio

<http://www.cas.org/SCIFINDER/SCHOLAR/resources.html>

- **See How it Works:** diversos exemplos sobre como utilizar os recursos
- **Training at Your Computer - Scholar Tutorial:** telas interativas mostrando passo a passo como pesquisar no **SciFinder Scholar**. Três tutoriais estão disponíveis com exemplos específicos em : General Chemistry, Biology, Chemical Engineering
- **Download the Tutorial:** 3 arquivos para gravar no seu computador os tutoriais acima.
- **SciFinder e-Seminars:** treinamentos online (gravados) de curta duração (aprox. 10 minutos). O computador precisa ter placa de som e ter instalado o programa WebEx (gratuito).
- **User Documentation - Getting Started with SciFinder Scholar:** manual básico para uso do sistema.

2 Aspectos gerais

Iniciando o SciFinder Scholar

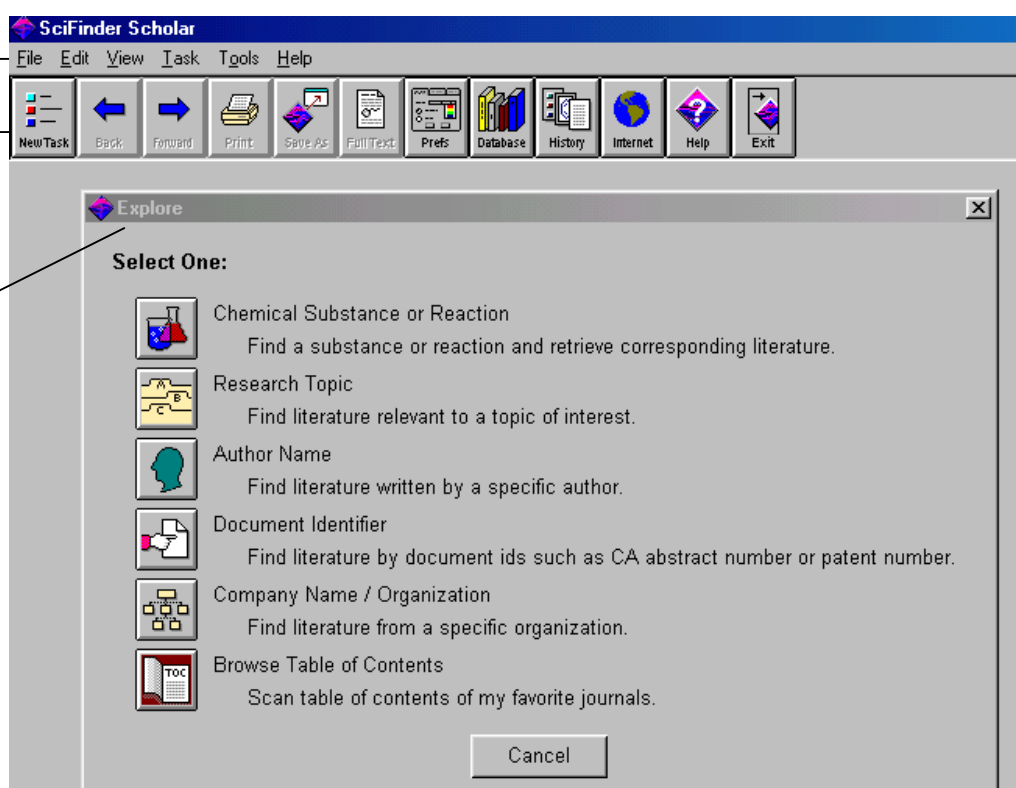
A tela inicial do **SciFinder Scholar** contém as seguintes alternativas de navegação

- **Main Menu:** alternativas de navegação e recursos
- **Main Menu Toolbar:** botões para escolha rápida de navegação e recursos
- **New Task / Explore:** botão e tela para escolher a alternativa de busca.

Menu Principal
(Main Menu)

Barra de Botões
(Main Menu
Toolbar)

Janela
New Task
(Explore)



Alternativas da janela **New Task (Explore)**, para iniciar uma busca.

- **Chemical Substance or Reaction**
- **Research Topic**
- **Author Name**
- **Document Identifier**
- **Company Name/Organization**
- **Browse Table of Contents**

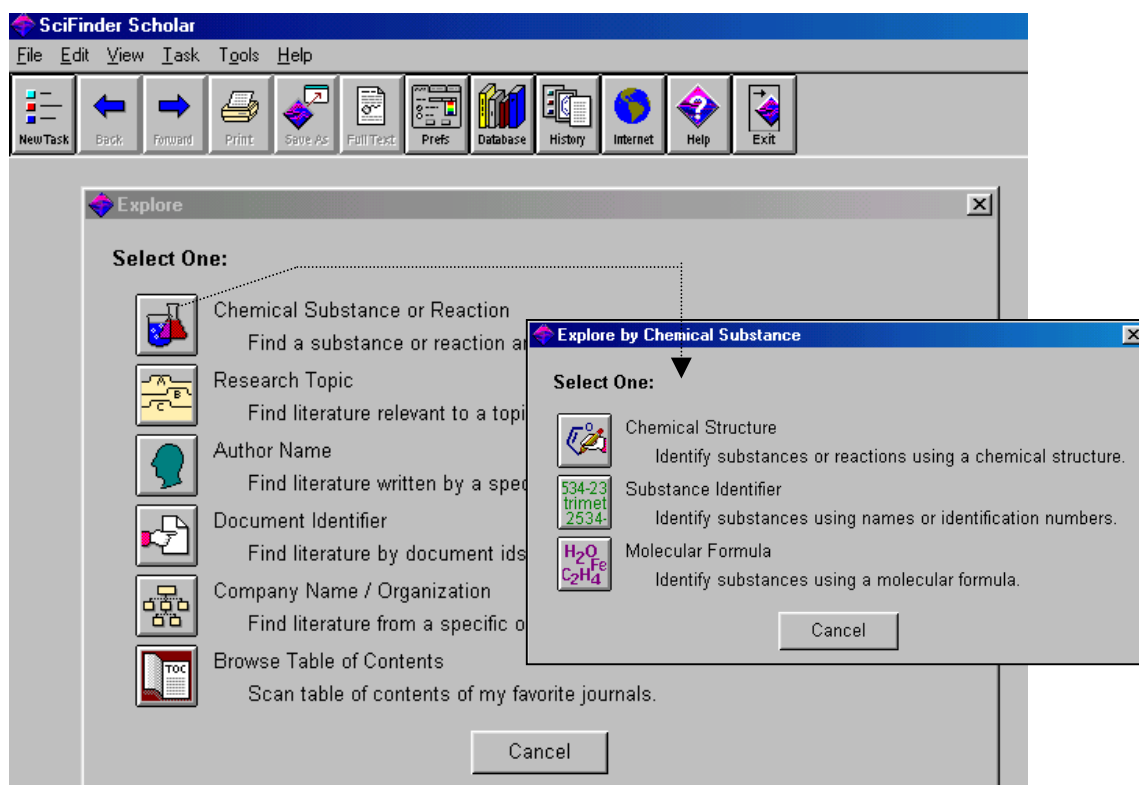
Clique no ícone da atividade que deseja executar.

Com o **SciFinder Scholar** você pesquisa informação científica de 1907 até o presente na base do Cplus bem como dados de 1958 até agora na base Medline e ainda Reações, Fornecedores e muito mais.

Explore by Chemical Substance or Reaction

O ícone **Chemical Substance or Reaction**, disponível na janela Explore, oferece três opções de pesquisa:

- **Chemical Structure** - para buscar por estrutura ou reações
- **Substance Identifier** - para buscar por nome da substância ou Número CAS
- **Molecular Formula** - para buscar por fórmula molecular



Explore by Research Topic

O ícone **Research Topic** disponível na janela **Explore** permite indicar assuntos ou palavras para a sua pesquisa.

Explore by Author

O ícone **Author Name** permite pesquisar pelo nome do autor.

Explore by Document Identifier

A opção **Document Identifier** permite pesquisar pelo número de identificação do documento dentro da base de dados. Para a base CPlus a designação é o AN (Accession Number) e para o Medline é o PubMed ID.

Explore by Company Name

O ícone **Company Name / Institution** permite pesquisar por nome de empresa, universidade ou instituição do seu interesse.

Browse Table of Contents

A opção **Browse Table of Contents** permite visualizar os sumários dos periódicos com possibilidade de dar continuidade na busca a partir desse ponto.

Menu Principal

As tabelas a seguir mostram os comandos localizados no **Menu Principal** (Main Menu) do **SciFinder Scholar**.

File

O menu **File** oferece os seguintes comandos

Item	Definição
New Task	Mostra a janela New Task com as opções de pesquisa.
Save As	Permite salvar o resultado de uma pesquisa em vários formatos. Veja mais detalhes no tópico <i>Saving Files</i> mais adiante neste capítulo.
Print Setup	Permite escolher parâmetros para impressão.
Print	Mostra a janela de impressão.
Full Text Option	Abre o navegador de Internet e acessa o site ChemPort. Esse serviço dá acesso ao texto completo de referências selecionadas. Para detalhes clicar no botão HELP e escolher o tópico OBTAINING DOCUMENTS.
Exit SciFinder	Encerra o SciFinder Scholar e fecha o programa.

Edit

O menu **Edit** oferece as funções padrão de edição.

Item	Definição
Cut	Recorta um bloco selecionado (texto ou figura) e coloca na memória virtual, podendo ser colado em outro aplicativo.
Copy	Copia um bloco selecionado (texto ou figura) e coloca na memória virtual, podendo ser colado em outro aplicativo.
Paste	Cola o conteúdo da memória virtual no local do cursor.
Select All	Seleciona todo o conteúdo mostrado na janela.
Unselect All	Desfaz a seleção.

View

O menu **View** oferece opções para visualização das referências, substâncias e reações. As opções em cinza não estão disponíveis para aquele determinado conjunto de respostas. Por exemplo, a opção *Title Order* não está ativa para um conjunto contendo substâncias.

Item	Definição
Compact	Referências: Mostra o título do artigo ou patente. Substâncias: Mostra a estrutura química.
Standard	Referências: Mostra a informação bibliográfica com o nome do autor em primeiro lugar. Substâncias: Mostra a estrutura química, CAS RN, número aprox. de referências citando a substância, e se disponível, links para outras informações adicionais.
Summary	Referências: Mostra a informação bibliográfica com o título em primeiro lugar seguido de resumo e, se aplicável, a família da patente. Substâncias: Mostra a estrutura química, CAS RN, CA Index Name, número aprox. de referências citando a substância, e se disponível, links para outras informações adicionais.
Full	Referências: Mostra o registro completo, indicando a informação bibliográfica (título em primeiro lugar) seguido de resumo e, se aplicável, a família da patente, indexação, termos complementares, CAS RN, nomes químicos e citações. Substâncias: registro completo incluindo a estrutura, CAS RN, nomes químicos, fórmula molecular, lista das bases no STN que contém informação sobre a substância, propriedades químicas, número aprox. de referências citando a substância, e se disponível, links para outras informações adicionais.
All Reactions	Mostra todas as reações encontradas para uma dada substância.
One Reaction per Reference	Mostra apenas a primeira reação para cada referência.
Accession Number Order	Mostra resultados na ordem que foram incluídos na base.
Similarity Order	Mostra resultados com substâncias agrupadas por similaridade.
Title Order	Mostra o resultado da busca em ordem alfabética de títulos, quando tratar-se de referências.
Year, Title Order	Mostra o resultado da busca por ordem de data e, dentro dessa, em ordem alfabética de títulos, quando tratar-se de referências.
Reverse Order	Mostra o resultado em ordem inversa da atual.


Task

O menu **Task** mostra as opções de pesquisa oferecidas pelo **SciFinder Scholar**.

Item	Definição
Explore	Acessa a atividade Explore, isto é, pesquisa por Nome de Autor, Estrutura Química, etc.
Browse Journals	Acessa o recurso Browse Table of Contents.

Tools

O menu **Tools** indica as ferramentas disponíveis para as diversas atividades oferecidas pelo **SciFinder Scholar**.

Item	Definição
Analyze References	Permite criar sub-conjuntos de referências utilizando certos critérios, por exemplo, Publication Year. Dessa forma, você pode visualizar apenas as referências de seu interesse.
Analyze Substances	Permite avaliar as respostas por átomo anexado, variáveis, grupos R ou precisão.
Analyze Reactions	Permite avaliar o resultado de uma busca de reações por números de passos, solvente, etc.
Refine	Permite adicionar outros critérios à busca inicial, e assim, reduzir o número de referências recuperadas.
Keep References	Possibilita marcar registros interessantes (referências, reações ou substâncias) e depois, ao escolher esta alternativa no menu, reter apenas as selecionadas descartando as demais.  Dica: recurso interessante.
Get Related	Permite recuperar citações, substâncias e ainda ampliar a busca no site eScience.
Task History	Mostra o histórico da pesquisa em andamento.
Back	Mostra a janela anterior.
Forward	Mostra a próxima janela.
Edit Preferences	Abre a janela Preference Editor onde é possível configurar diversos parâmetros do software na sua máquina. As alterações são válidas apenas para a sessão em curso.
Database Settings	Aciona a aba Databases dentro da janela Preference Editor onde é possível incluir/excluir a base Medline das buscas.
Statistics Monitor	Mostra informações sobre o servidor, memória e velocidade de acesso no que se refere ao acesso do sistema SciFinder Scholar .
Internet	Mostra diversos sites para acesso via internet. Entre eles: CAS, chemistry.org, etc.

Help Menu

Usando o menu **Help** você acessa os textos de ajuda enquanto está pesquisando no **SciFinder Scholar**.

Item	Definição
SciFinderScholar Help	Abre o arquivo de ajuda online do SciFinder Scholar
Contents and Index	Abre o arquivo de ajuda online do SciFinder Scholar .
Message of the Day	Permite visualizar a mensagem do dia enviada pelo setor de Administração do CAS.
About SciFinder Scholar	Contém a versão do software e informação sobre direito autoral.

Barra de Botões

A barra de botões **Main Menu Toolbar** acessa rapidamente as funções de seu interesse.

Botão	Definição
New Task	Mostra a janela de New Task .
Back	Mostra a tela anterior.
Forward	Mostra a próxima tela.
Print	Imprime o conteúdo da tela atual de acordo com as preferências configuradas no menu Print Setup .
Save As	Permite salvar o resultado da pesquisa atual em diferentes formatos.
Full Text	Abre o navegador de Internet e acessa o site ChemPort.
Prefs	Abre o menu Preference Editor , que permite personalizar o SciFinder Scholar em sua máquina. As alterações são válidas apenas para a sessão em curso.
Database	Aciona a aba Databases dentro da janela Preference Editor .
History	Mostra os passos executados (histórico) na pesquisa atual.
Internet	Mostra diversos sites para acesso via internet. Entre eles: CAS, chemistry.org, etc.
Help	Abre a janela de ajuda (SciFinder Scholar Help).
Exit	Encerra o programa SciFinder Scholar .

Gravando os dados

Resultados obtidos a partir de pesquisas de referências, substâncias ou reações, podem ser salvos na sua máquina usando o comando **Save As**.

Formatos de arquivo

e Opções para o comando **SAVE AS**

Para gravar o conteúdo dos registros recuperados em uma busca selecione a opção **Save As** no menu **File** ou clique no botão **Save As** na **barra de botões**.

1. Escolha o diretório/pasta onde deseja salvar os dados
2. Digite um nome para o arquivo
3. Selecione o formato de arquivo desejado
4. Opcionalmente: clique **Options**, para escolher preferências
5. Clique **Save**

O conteúdo dos registros, tanto de **referências** como de **substâncias**, pode ser salvo com a opção **SAVE AS** em diferentes formatos:

- Rich Text Format (.rtf)
- Quoted format (.txt)
- Tagged Format (.txt)
- Answer Keys (.txt)
- Plain ASCII (.txt)

Registros contendo **reações** podem ser salvos apenas nos Rich Text Format (.rtf) e formatos Plain ASCII (.txt).

FORMATOS DISPONÍVEIS PARA A OPÇÃO "SAVE AS"

Rich Text Format: salva o conteúdo visível na tela, preservando a formatação, cor e gráficos (se existentes no registro). O botão **Options** permite selecionar a quantidade de informação desejada para impressão bem como se todas as referências ou apenas as selecionadas.

Quoted: este formato permite criar arquivos com delimitadores. Use a opção **Options** para definir suas necessidades.

Tagged: este formato indica o nome do campo antes da informação propriamente dita. O botão **Options** permite escolher todas as referências ou apenas as selecionadas

Answer Keys: este formato salva apenas os números de acesso dos registros (o AN para a base CAplus e o PubMed ID para a base Medline).

Plain ASCII: salva o conteúdo visível na tela mas sem formatação de negrito, gráficos, etc. O botão **Options**, permite selecionar a quantidade de informação desejada para impressão bem como se todas as referências ou apenas as selecionadas.

★ ATENÇÃO

- ***O sistema faz download de no máximo 100 registros de cada vez. Utilize os recursos do sistema para refinar o resultado sempre que necessário.***
- ***O CAS monitora o volume de registros salvos pelos usuários (sessões / IPs). Para registros salvos além daqueles estipulados em contrato, o CAS solicitará que sejam deletados. Dessa forma, utilize ao máximo a capacidade o sistema para ANALISAR e REFINAR seus resultados antes de copiar os dados para sua máquina.***
- ***Ainda: imprima as referências de maior importância. Não existe limite para a impressão dos registros.***

Imprimindo os dados

Resultados contendo referências, substâncias e reações bem como quaisquer outros dados mostrados na tela, podem ser impressos.

Para imprimir os registros recuperados em uma busca, selecione a opção **Print** dentro do menu **File** ou clique no botão **Print** na barra de botões. Configure as alternativas, o papel ou a impressora conforme seu interesse.

★ *Dica:*

- A opção **File / Print** ou **Print** envia para a impressora todos os registros recuperados na busca atual.
- Se desejar imprimir apenas registros selecionados, clique na caixa à esquerda das referências desejadas. No momento da impressão, escolha a opção 'Seleção'.
- Outra alternativa é marcar as referências desejadas conforme acima e acionar o comando **Tools / Keep References** antes de enviar para a impressora.

Terminando um Task

Para terminar uma busca ("task") e iniciar uma nova, selecione a opção **New Task** dentro do menu **File** ou clique no botão **New Task** na barra de botões.

★ *ATENÇÃO*

*Ao executar essa operação, todos os dados da pesquisa atual serão apagados. Se você deseja manter os dados da sua pesquisa atual, utilize o recurso **Save As** ou **Print**, antes de clicar no botão **New Task**.*

Encerrando a sessão

Para encerrar uma sessão de busca, selecione a opção **Exit SciFinder Scholar** dentro do menu **File** ou clique no botão **Exit** na barra de botões.

★ *ATENÇÃO*

*1- Ao executar essa operação, todos os dados da pesquisa atual serão apagados. Se você deseja manter os dados da sua pesquisa atual, utilize o recurso **Save As** ou **Print**, antes de utilizar a opção **Exit**.*

*2- O sistema **SciFinder Scholar** possui mecanismo automático para encerrar uma sessão em caso de inatividade do software. Esse tempo é determinado pelo Administrador do **SciFinder Scholar** dentro da sua instituição. Em média, se o sistema não registrar atividade em 20 minutos, o software será fechado. a sessão encerrada e os dados não serão salvos.*

3 Pesquisa (Exploring)

Pesquisa por Tópico

Utilize este recurso para encontrar referências sobre um assunto.

★ DICAS:

(Explore by Research Topic)

- digite uma frase ou algumas palavras que descrevam o tópico de seu interesse
- escreva a frase utilizando normalmente preposições, conjunções, etc
- não existe diferença entre letras maiúsculas e minúsculas

Para pesquisar por tópicos/termos:

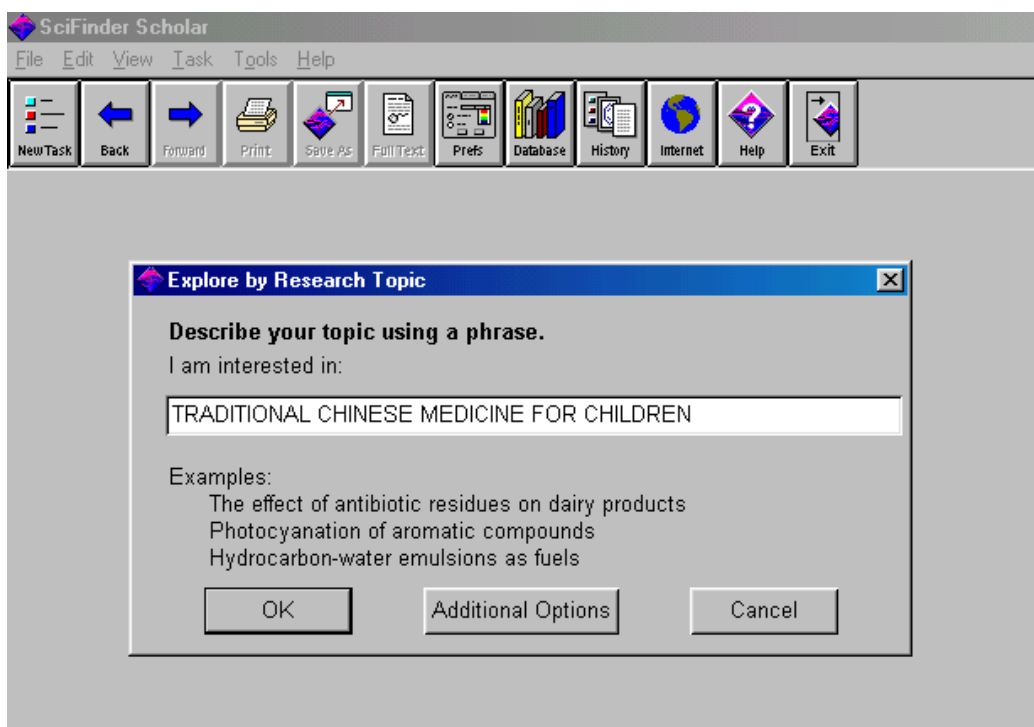
- clicar **New Task**, e dentro da janela **Explore**, clicar no ícone **Research Topic**
- digitar os termos de seus interesse
- clicar no botão **OK**

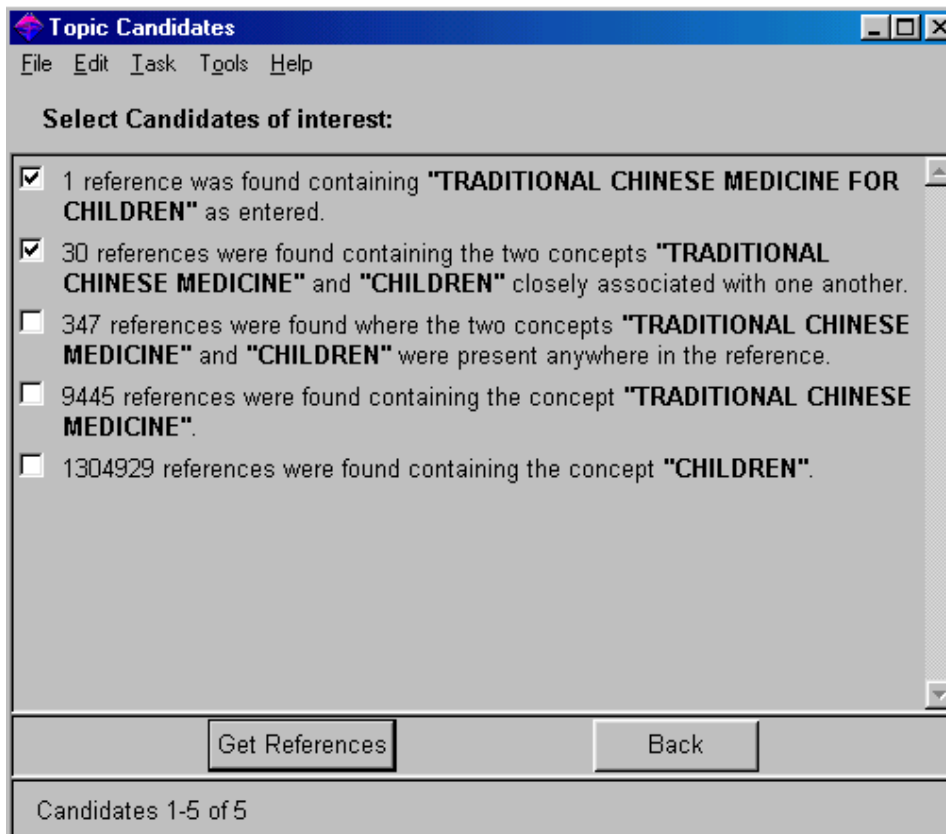
Pode-se ainda clicar no botão **Additional Options** para restringir alguns aspectos, mas é melhor receber **primeiro** o resultado da busca e aí então, escolher entre os diversos recursos do sistema para Analisar ou Refinar o resultado.

Se a pergunta gerar resultado ele será mostrada em forma de uma lista de alternativas (**Topic Candidates**). Esses tópicos devem ser analisados com cuidado para não descartar alternativas válidas.

Marque os tópicos do seu interesse e clique no botão **Get References** para visualizar as referências.

Mesmo após ter visualizado as referências de um determinado tópico escolhido, é possível clicar no botão **Back** para voltar à tela dos **Topic Candidates**. Pode-se então desmarcar tópicos e clicar outros, para novas visualizações.





Como funciona o recurso 'Explore by Research Topic'

- 1- Quando você digita uma frase para ser pesquisada pelo **SciFinder Scholar** o programa separa os principais conceitos e a relação entre os termos é determinada pela avaliação das preposições e palavras de ligação. No exemplo abaixo

I am interest in...

CAVES IN KENTUCKY, BUT NOT MAMMOTH CAVE

o programa quebra a frase em três conceitos: CAVES, KENTUCKY e MAMMOTH CAVE. O sistema sabe que CAVES e KENTUCKY são termos relacionados e que o conceito MAMMOTH CAVE não deve ser considerado.

- 2- O dicionário interno do **SciFinder Scholar** também considera se alguma outra palavra ou combinação de palavras pode ajudar na recuperação dos dados. Em especial, considera:
 - **sinônimos:** se você digitar CANCER, o **SciFinder Scholar** também pesquisará NEOPLASM e CARCINOMA, além de vários outros termos.
 - **variações de grafia:** se você digitar FREEZE, o **SciFinder Scholar** também pesquisará FROZE, FROZEN, FREEZING, etc.
 - **abreviações:** entre com o termo CHEM e o **SciFinder Scholar** também pesquisará CHEMICAL
 - **grafia americana e inglesa:** entre com a palavra COLOR e o **SciFinder Scholar** também pesquisará COLOUR

continua

continuação

- 3- Quando o **SciFinder Scholar** pesquisa uma frase ele analisa se alguma das palavras refere-se à alguma substância química. Se a substância é identificada o **SciFinder Scholar** encontra o CAS RN correspondente e o pesquisa também.
- 4- Qualquer outro termo restante é processado de forma a que o sufixo seja removido e o termo é, então, truncado, isto é, reduzido apenas à raiz principal. Por exemplo: o termo ADJUSTMENT pode ser processado de forma que as alternativas ADJUST e ADJUSTABLE também sejam recuperadas. Eventualmente, a truncagem pode recuperar resultados imprecisos.

Dicas para usar o recurso 'Explore by Research Topic'



- 1- **Pesquise frases contendo termos usuais (em inglês):** digite a frase como você normalmente falaria ou escreveria, incluindo preposições, conjunções, etc. O **SciFinder Scholar** não utiliza linguagem de comandos (como por exemplo: operadores booleanos, parênteses, truncagem, etc.), use portanto linguagem natural para escrever sua busca.

- 2- **Especifique dois ou três conceitos:** combine 2 ou 3 conceitos com preposições para obter um resultado mais preciso. Por exemplo:

I am interested in...

WASTEWATER TREATMENT AT WALT DISNEY WORLD

- 3- **Prefira usar preposições em vez de OR ou AND:** usar preposições resulta numa busca mais precisa do que usar os operadores OR e AND. Por exemplo, a frase

I am interested in...

THE EFFECTS OF HUMAN GROWTH HORMONE ON FETAL DEVELOPMENT

é bem mais precisa que

I am interested in...

HUMAN GROWTH HORMONE AND FETAL DEVELOPMENT

- 4- **Especifique os adjetivos:** aplique os adjetivos em todas as palavras pertinentes. Por exemplo, a frase

BLACK DRAGONS AND BLACK MAGIC -- trará a resposta desejada

mas a frase

BLACK DRAGONS AND MAGIC -- trará resultados não previstos.

- 5- **Use negativas para eliminar o "lixo":** O **SciFinder Scholar** entende a inclusão de negativas, como por exemplo: NOT e EXCEPT. Se existir a possibilidade de recuperar dados de áreas relacionadas mas que não interessam à sua pesquisa, remova essas referências incluindo a negativa na sua frase de busca. Por exemplo: CAVES IN KENTUCKY, BUT NOT MAMMOTH CAVE

- 6- Use seus próprios sinônimos: Coloque os sinônimos entre parênteses logo após o termo relacionado. Por exemplo:

I am interested in...

TOPICAL TREATMENT FOR POISON IVY (RHUS RADIACANS)

Lista de alternativas

A partir das informações acima o **SciFinder Scholar** pesquisa os conceitos nos TITULOS, RESUMOS e TERMOS DE INDEXAÇÃO e aponta as respostas numa lista de alternativas -- denominada **Topic Candidates** -- onde os conceitos podem ser indicados como '**as entered**', '**closely associated**', '**anywhere in the reference**' ou ainda '**containing the concept**'.

Frase exata

('As Entered' ou Exact Phrase Candidate)

Quando o tópico de busca é relativamente curto, por exemplo de três palavras, o **SciFinder Scholar** tenta encontrar registros contendo exatamente a(s) palavra(s) digitada(s). Nesse caso, se encontrado, a resposta virá como "**...as entered.**"

Por exemplo, para uma busca **CONDUCTING POLYMERS** o tópico "frase exata" incluirá documentos contendo exatamente a frase indicada. Neste caso, as palavras aparecerão nos documentos exatamente com a grafia **CONDUCTING** e **POLYMERS** e nessa ordem.

As referências contidas na alternativa "As Entered" são mais precisas que os outros candidatos. Se nenhuma referência for encontrada nessa condição, esse item não será exibido na tela.

Entretanto, olhe com atenção as demais alternativas apresentadas pelo **SciFinder Scholar**, pois elas incorporam os recursos inteligentes de busca descritos no tópico **Como Funciona o Recurso 'Explore by Research Topic' (How Explore by Research Topic Works)** - página 3-2.

Outras alternativas:

O item '**Closely Associated**' usualmente indica que **todos** os termos estão localizados no título, numa mesma sentença dentro do resumo ou em um único termo de indexação.

'Closely Associated'

Os itens '**Anywere in the Reference**' indicam que os termos estão presentes num mesmo registro mas em qualquer lugar do título, resumo ou termo de indexação.

'Anywhere in the Reference'

Os itens '**Containing the Concept**' indicam a recuperação de cada termo isoladamente.

'Containing the Concept'

Assume-se que quanto mais próximos estiverem os conceitos pesquisados mais diretamente relacionados eles são, e portanto, as referências ali indicadas apresentam maior grau de precisão em relação aos termos desejados.



DICAS:

- . Analise com cuidado a lista de respostas oferecidas pelo **SciFinder Scholar** e verifique se o algoritmo foi aplicado da maneira que você esperava.
- . Muitas vezes o usuário digita muitos conceitos para a executar a busca, entretanto respostas mais apropriadas são recuperadas utilizando-se menos termos.
- . Prefira entrar com a quantidade de 2 a 5 termos e a incluir as preposições entre os conceitos (entrar com a frase completa).
- . Se a lista de alternativas não trazer resultados adequados à sua expectativa, clicar o botão **BACK** e reescrever os conceitos.

Pesquisa por Autor

(Explore by Author Name)

Use esse recurso para obter referências escritas por autores de seu interesse, independente de ter ou não, os nomes exatos.

O **SciFinder Scholar** encontra referências pesquisando por autor a partir de:

- nome exato conforme digitado
- grafias similares ao sobrenome
- apelidos e alternativas comuns de grafias para o primeiro nome

Para pesquisar por Autor:

- clicar **New Task**, e dentro da janela **Explore**, clicar no ícone **Author Name**
- digitar os termos de seus interesse
- clicar no botão **OK**



DICA: Clique a opção **'Look for alternative spellings of the last name'** para que o sistema encontre nomes contendo grafias similares.

Pesquisa por Número do Documento

(Explore by Document Identifier)

Use esse recurso para obter referências a partir do número de acesso do registro da própria base de dados. Aqui pode-se pesquisar ainda um número da patente, ou ainda o número de um depósito ou de uma prioridade de patente.

Para pesquisar por Número de Acesso:

- clicar **New Task**, e dentro da janela **Explore**, clicar no ícone **Document ID**
- digitar o(s) número(s) de seus interesse
- clicar no botão **OK**



DICAS:

- *Pode-se incluir uma relação de números de acesso a partir de um arquivo pré-gravado, como por exemplo, os resultados gravados com a alternativa 'Answer Keys' dentro do menu File / Save As.*
- *Nesse caso, clique no botão **Read from file...** e escolha o arquivo desejado para carregar sua lista.*

Pesquisa por Nome de Empresa / Organização

(Explore by Company Name/ Organization)

Use esse recurso para obter referências a partir de nome de empresas, institutos, organizações, universidades, etc.

A digitação dos termos pode acontecer em qualquer ordem e, em geral, pesquisando mais termos ao mesmo tempo, menor quantidade de registros são recuperados.

O **SciFinder Scholar** utiliza um dicionário interno de nomes e sinônimos de companhias e organizações, de forma a recuperar diferentes grafias, abreviaturas e siglas. Entretanto, o dicionário não inclui fusões e aquisições. Por exemplo, uma pesquisa por NOVARTIS recuperará apenas referências contendo esse dado no registro. Referências contendo CIBA-GEIGY ou SANDOZ --que atualmente são NOVARTIS, não serão recuperadas.

Para pesquisar por Empresas:

- clicar **New Task**, e dentro da janela **Explore**, clicar no ícone **Company Name / Organization**
- digitar o nome de seu interesse
- clicar no botão **OK**

Pesquisa por Substância ou Reação

(Explore by Chemical Substance or Reaction)

Esse botão dá acesso a três formas de busca

- **Explore by Chemical Structure**
- **Explore by Substance Identifier**
- **Explore by Molecular Formula**

Pesquisa por Estrutura (Explore by Chemical Structure)

A pesquisa por estrutura está descrita nos **Capítulos 4 e 5**.

Pesquisa por Substância (Explore by Substance Identifier)

Use esse recurso para localizar substâncias a partir do nome químico, nome comercial, nome comum ou do CAS RN da substância.

Para pesquisar por Substância:

- clicar **New Task**, e dentro da janela **Explore**, selecionar **Chemical Substance or Reaction** e, a seguir, no ícone **Substance Identifier**
- digitar o nome ou número CAS de seu interesse e clicar no botão **OK**

A partir do resultado da busca por substância pode-se escolher as alternativas GET REFERENCES, GET REACTIONS ou ANALYSE/REFINE.



Dicas

- 1- O nome da substância pode ou não conter espaços e pontuações. Se o nome químico possuir " , " ou " - " e esses não forem digitados para a busca, o **SciFinder Scholar** tende a recuperar substâncias similares.
- 2- É necessário digitar o nome correto da substância. Digitando "raloxifen" (quando o correto é "raloxifene") a resposta será zero. Se não houver certeza, a melhor alternativa é a pesquisa por tópico (**Explore by Research Topic**).
- 3- O número CAS RN pode ser digitado com ou sem hífens

Pesquisa por Fórmula Molecular (Explore by Molecular Formula)

Use esse recurso para localizar substâncias a partir da fórmula molecular.

Para pesquisar por Substâncias:

- clicar **New Task**, e dentro da janela **Explore**, selecionar **Chemical Substance or Reaction** e, a seguir, no ícone **Molecular Formula**.
- digitar a fórmula molecular e clicar no botão **OK**

Digite uma fórmula válida com os átomos arranjados em qualquer ordem. Você também pode indicar fórmulas de substâncias com multi componentes. Polímeros, misturas e sais são representados com as fórmulas separadas, ligadas por pontos, por exemplo: C10H5N.HCL

As fórmulas podem ser escritas tanto em letras maiúsculas como minúsculas. Entretanto, em certos casos, você deve digitar a forma apropriada para eliminar ambiguidades, por exemplo, H4SiO4, onde, se fosse digitado "si" poderia implicar nas substâncias: "silicon", "sulfur" e "iodine".

A inclusão de espaços entre os elementos não acarreta alteração no resultado, por exemplo: C6 H6 recupera o mesmo resultado que C6H6.

A partir do resultado da busca por fórmula molecular pode-se escolher as alternativas GET REFERENCES, GET REACTIONS ou ANALYSE/REFINE.

4

Pesquisa por Estrutura Química Exata

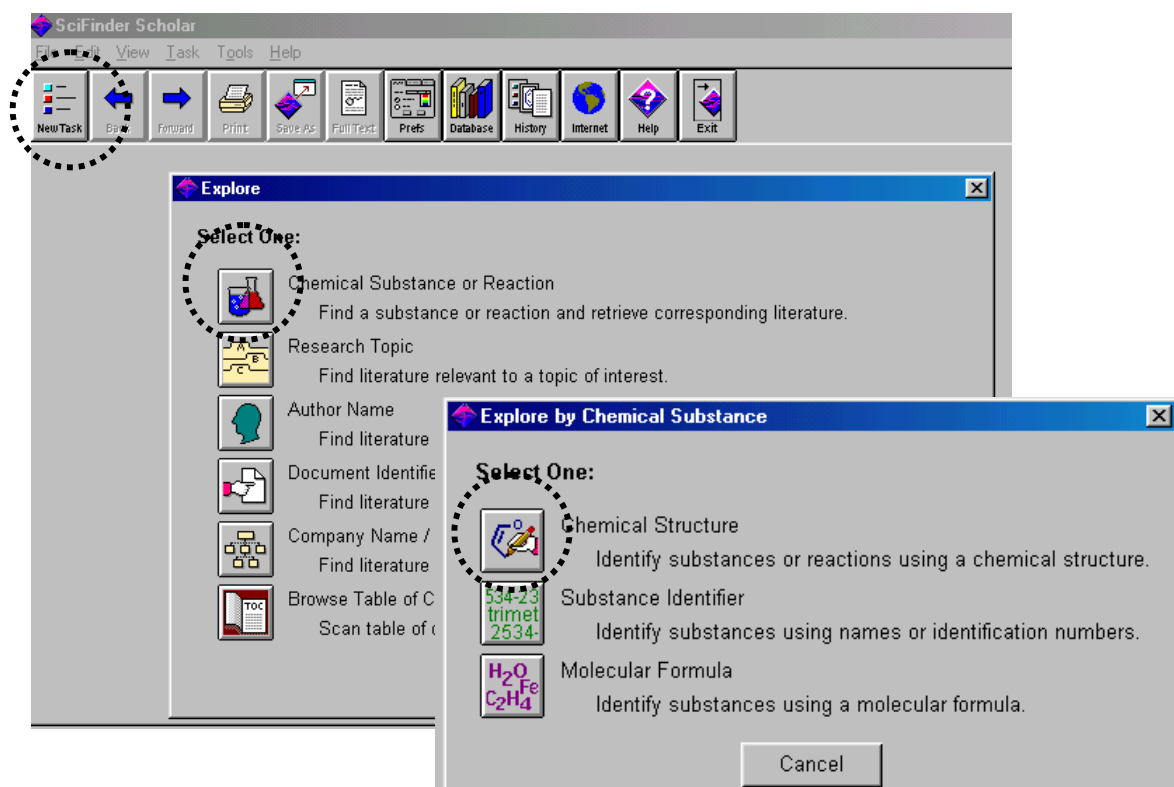
(aspectos gerais)

A pesquisa por estrutura química exata oferece a capacidade de você desenhar uma estrutura e recuperar diversas alternativas que podem incluir:

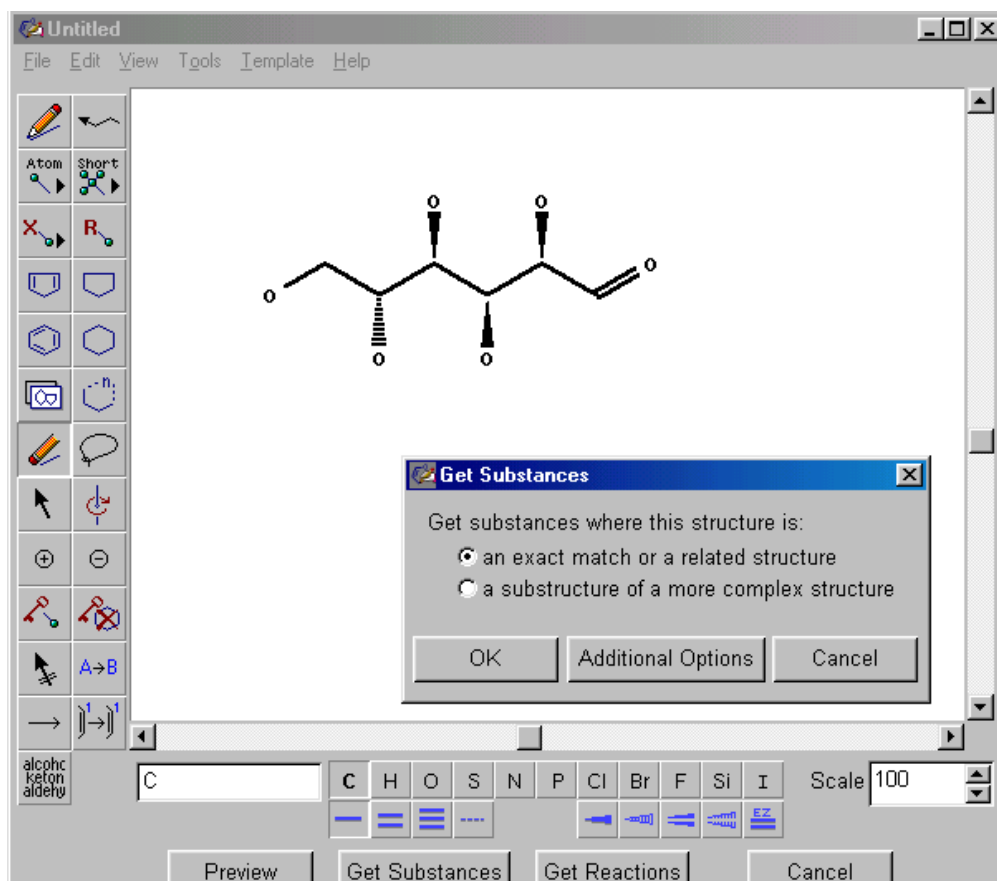
- a estrutura exata que você desenhou
- estereoisômeros
- tautômeros (incluindo keto-enol)
- compostos coordenados
- "charged compounds"
- radicais ou radicais de ions
- isótopos
- polímeros cuja estrutura seja um monômero

Para pesquisar por Estrutura Química Exata:

- clicar **New Task**, e dentro da janela **Explore**, selecionar **Chemical Substance or Reaction** e, a seguir, escolher o ícone **Chemical Structure**.



Após ter desenhado a estrutura desejada (ou após ter importado uma estrutura já gravada com a alternativa **File / Open**) clique em **Get Substances**. Na nova janela escolha a alternativa "**an exact match or a related structure**" para efetuar a busca por estrutura química exata.



Ferramentas

Diversas ferramentas estão disponíveis para desenhar ou modificar uma estrutura:

- tabela periódica (Atom Menu)
- lista de átomos comuns (Shortcuts)
- ferramenta para desenhar ciclopentanos, benzenos, etc.
- estruturas pré-prontas (Template)
- rotação
- carga positiva e negativa
- ligações

Alternativa para desenhar uma estrutura

O **SciFinder Scholar** oferece um caminho muito prático para "desenhar" estruturas químicas.

Utilizando o recurso selecionar/copiar/colar em um número RN, o sistema transfere, de forma automática, a estrutura da substância para a tela de desenho. Depois, basta você fazer os ajustes, se for necessário, e pronto: a estrutura já está desenhada e pronta para ser pesquisada.

Como fazer:

- a partir de uma lista de substâncias ou do registro de uma substância específica, selecione com o mouse (ou com as teclas **SHIFT + ->**) o **CAS RN** desejado
- acione as teclas '**CRTL'+ 'C'**' ou utilize o menu **Edit / Copy** para "copiar" o CAS RN. **Note que o sistema indica a execução dessa tarefa mostrando na tela a mensagem "Copying Substance to Clipboard".**
- Clique no botão **New Task** para iniciar uma nova busca. **Atenção: a busca em curso será apagada.**
- na tela **Explore**, clique no botão **Chemical Substance or Reaction**
- na nova tela, escolha a opção **Chemical Structure**
- na tela de desenho acione as teclas '**CRTL'+ 'V'**' ou utilize o menu **Edit / Paste**

Nesse momento a estrutura é transferida para a tela e você pode executar a busca.

Restringindo por substâncias

A partir das respostas obtidas é possível utilizar os recursos:

- Get References
- Get Reactions
- Analyze/Refine, que permite restringir o número de respostas através de diversas alternativas:
 - por estrutura química
 - por disponibilidade comercial
 - por propriedades, etc.

Dicas

- 1- Estruturas desenhadas no **SciFinder Scholar** podem ser salvas para uso posterior no próprio **SciFinder Scholar** ou em outros aplicativos. Para mais detalhes clicar no botão **HELP**, escolher o tópico **EXTENDING SCIFINDER FUNCTIONALITY** e a seguir em **EXPORT A STRUCTURE QUERY**.

continua

 **Dicas****Continuação**

2- Explicações mais detalhadas e exemplos de busca podem ser encontrados no **SciFinder Scholar Help (online)**. Como consultar:

. clique no botão **HELP** (ou **Help** na barra de Menu e escolha o item **SciFinder Scholar Help F1**)

. na aba **Contents** clique sobre o item **Explore Tasks**

. dentro desse item, clique em **Explore by Chemical Substance or Reaction** e depois em **Explore by Chemical Structure**

. os links a seguir contêm informações sobre como utilizar a ferramenta de desenho de estruturas

**Access Explore by Chemical Structure
Exact vs. Substructure Searching
How Explore by Chemical Structure**

. o manual contém ainda diversos outros documentos sobre o assunto:

**Draw a Substance
Draw a Reaction,
Search for Chemical Structures
Search for Reactions**

5 Pesquisa por Sub-Estrutura Química

(aspectos gerais)

O módulo adicional de pesquisa por sub-estrutura (**SSM - SciFinder Substructure Module**) oferece a possibilidade de desenhar uma estrutura química conforme descrito no Capítulo 4 e, além disso, recuperar respostas que podem incluir:

- a estrutura exata desenhada
- estruturas mais complexas onde desenho pesquisado seja apenas uma parte
- estruturas onde possam ocorrer substituições de elementos nas posições que tenham ficado em aberto

Para pesquisar por Sub-Estrutura Química:

- clicar **New Task**, e dentro da janela **Explore**, selecionar **Chemical Substance or Reaction** e, a seguir, escolher o ícone **Chemical Structure**.

Após ter desenhado a estrutura desejada (ou após ter importado uma estrutura já gravada com a alternativa **File / Open**) clique em **Get Substances**. Na nova janela escolha a alternativa "**a substructure of a more complex structure**" para efetuar a busca por sub-estrutura química.

The screenshot displays the SciFinder software interface. The main window shows a chemical structure with two 'Ak' labels indicating variable groups. Three dialog boxes are open:

- Variables**: A list of predefined variables:

X	Any halogen
M	Any metal
A	Any atom except H
Q	Any atom except C or H
Ak	Any alkyl chain
Cy	Any cycle
Cb	Any carbocycle
Hv	Any heterocycle
- R-group Definitions**: A dialog for defining R-groups with fields for R1, R2, and R3, and buttons for 'Atom', 'Short', and 'Close'.
- Get Substances**: A dialog with the following text:

Get substances where this structure is:

an exact match or a related structure

a substructure of a more complex structure

Buttons: OK, Additional Options, Cancel

Ferramentas

Além das ferramentas disponíveis para a pesquisa por estrutura exata, aqui você também dispõe de recursos para:

- substituição de variáveis
- substituição por grupos
- possibilidade de abrir ou fechar posições para substituição
- capacidade de checar previamente a quantidade aproximada de resultados

Alternativa para desenhar uma estrutura

O **SciFinder Scholar** oferece um caminho muito prático para "desenhar" estruturas químicas.

Utilizando o recurso selecionar/copiar/colar em um número RN, o sistema transfere, de forma automática, a estrutura da substância para a tela de desenho. Depois, basta você fazer os ajustes, se for necessário, e pronto: a estrutura já está desenhada e pronta para ser pesquisada.

Como fazer:

- a partir de uma lista de substâncias ou do registro de uma substância específica, selecione com o mouse (ou com as teclas **SHIFT + ->**) o **CAS RN** desejado
- acione as teclas **'CTRL'+ 'C'** ou utilize o menu **Edit / Copy** para "copiar" o CAS RN. **Note que o sistema indica a execução dessa tarefa mostrando na tela a mensagem "Copying Substance to Clipboard".**
- Clique no botão **New Task** para iniciar uma nova busca. **Atenção: a busca em curso será apagada.**
- na tela **Explore**, clique no botão **Chemical Substance or Reaction**
- na nova tela, escolha a opção **Chemical Structure**
- na tela de desenho acione as teclas **'CTRL'+ 'V'** ou utilize o menu **Edit / Paste**

Nesse momento a estrutura é transferida para a tela e você pode executar uma busca por estrutura exata ou uma busca por sub-estrutura química.

Restringindo por substâncias

A partir das respostas obtidas é possível utilizar os recursos:

- Get References
- Get Reactions
- Analyze/Refine, que permite restringir o número de respostas através de diversas alternativas:
 - por estrutura química
 - por disponibilidade comercial
 - por propriedades, etc.



DICAS

- 1- O módulo *SSM (SciFinder Substructure Module)* é adquirido à parte. Sua instituição pode ou não ter contratado acesso a este módulo.
- 2- Explicações mais detalhadas e exemplos de busca podem ser encontrados no **SciFinder Scholar Help (online)**. Veja como consultar esse recurso no item **Dicas**, na página 4-4 deste manual.

6 Pesquisa por Reações

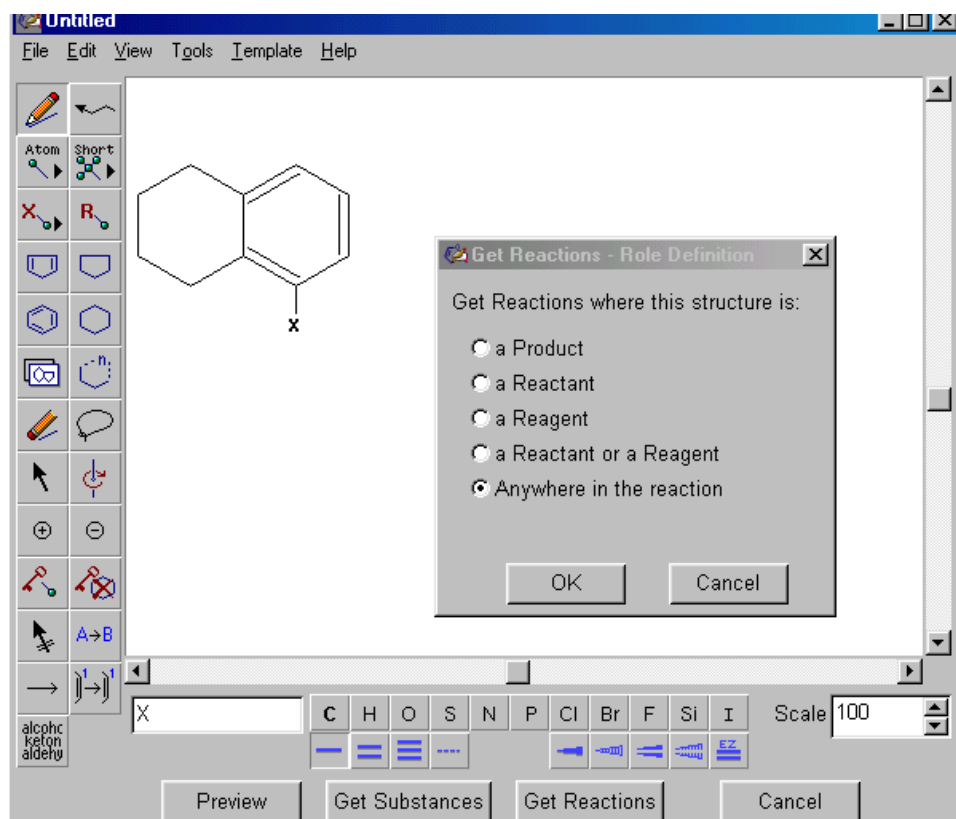
(aspectos gerais)

O módulo de pesquisa por reações oferece a possibilidade de pesquisa por estruturas e/ou grupos funcionais em reagentes/reactantes ou produtos. Você pode pesquisar apenas um lado da reação ou pela reação completa.

Para pesquisar por **Reações**:

- clicar **New Task**, e dentro da janela **Explore**, selecionar **Chemical Substance or Reaction** e, a seguir, escolher o ícone **Chemical Structure**.

Após ter desenhado a estrutura desejada (ou após ter importado uma estrutura já gravada com a alternativa **File / Open**) clique em **Get Reactions**.



Ao pesquisar por reações você pode encontrar:

- reações que sejam idênticas à estrutura que você desenhou ou que contenham partes dela e/ou de grupos funcionais
- métodos de preparação para substâncias específicas
- fontes comerciais
- listas regulatórias
- referências e resumos descrevendo as reações com mais detalhes

Restringindo as reações

A partir do resultado obtido pode-se utilizar o ANALYZE/REFINE para reduzir o número de respostas recuperadas. Você pode escolher entre várias alternativas:

- estrutura
- rendimento
- número de passos
- classificação (tipo)



Dicas

- 1- *O módulo SSM (SciFinder Substructure Module) é adquirido à parte. Sua instituição pode ou não ter contratado acesso a este módulo.*
- 2- *Explicações mais detalhadas e exemplos de busca podem ser encontrados no **SciFinder Scholar Help (online)**. Veja como consultar esse recurso no item **Ferramentas - Dica** na página 4-4 deste manual.*

7

Trabalhando com as Referências

O **SciFinder Scholar** oferece excelentes ferramentas para trabalhar os resultados obtidos.

Formato de visualização e ordem dos registros

O resultado da busca mostra as referências em ordem e formato padronizados. Para alterar esse padrão, clique no menu **View** e escolha a alternativa apropriada:

- Accession Number Order (padrão) -> da mais nova para a mais antiga
- Similarity Order (para substâncias)
- Title Order -> ordem alfabética de títulos
- Year, Title Order -> ordem de ano, e dentro desta por título
- Reverse Order -> ordem inversa da atual

★ **LEMBRETE**

*As alterações efetuadas nos formatos-padrão do menu **PREFERÊNCIAS** são válidas somente para a sessão em curso. Quando o **SciFinder Scholar** é desligado, todos os parâmetros retornam aos valores-padrão estabelecidos pelo sistema.*

Referências de seu interesse (Keep References)

Se você fizer uma seleção manual no resultado da sua busca você pode escolher manter apenas os registros de maior interesse.

Para isso, selecione a caixa ao lado esquerdo da referência desejada. Depois clique no menu **Tools** e a seguir em **Keep References**.

O **SciFinder Scholar** irá mostrar na tela, e trabalhar os próximos passos de sua seleção, apenas a partir das referências selecionadas. Para retornar ao resultado completo anterior, clicar no botão **Back**.

Detalhes das referências

O ícone 'microscópio', localizado ao lado direito da referência bibliográfica, dá acesso a mais detalhes sobre o trabalho: referência completa, resumo, indexação, citações.

A informação é mostrada no formato padrão. Para alterar essa configuração clique no ícone **Prefs** (Preferences) ou no menu **Tools / Edit Preferences** e escolha a aba **Display**. Você pode escolher formatos de sua preferência para as referências e para as substâncias. Clique **OK** para confirmar.

★ **LEMBRETE**

*As alterações efetuadas nos formatos-padrão do menu **PREFERENCES** são válidas somente para a sessão em curso. Quando o **SciFinder Scholar** é desligado, todos os parâmetros retornam aos valores-padrão estabelecidos pelo sistema.*

Acesso ao texto completo dos documentos

O ícone 'computador' (ou uma 'casinha verde'), localizado ao lado direito da referência bibliográfica, dá acesso ao texto completo de artigos e patentes que estejam disponíveis online pelo próprio editor ou pelos escritórios de patentes.

O acesso é oferecido diretamente de dentro do **SciFinder Scholar**, através do serviço **ChemPort**. O acesso ao texto pode ser:

Gratuito: Para patentes européias e americanas, os textos completos dos documentos estão disponíveis no site do Espacenet e do USPTO e são gratuitos.

Pago: O texto completo de artigos de periódicos e patentes depositadas nos demais países podem incorrer em custos.

Os documentos podem ser consultados em formato .pdf ou .html, dependendo do editor ou da disponibilidade.



Dica

As universidades que possuem acesso ao Portal Periódicos da CAPES, têm acesso liberado ao texto completo de todos os periódicos incluídos no portal, sem custos.

ANALYZE / REFINE

O botão **ANALYZE / REFINE** permite escolher os recursos de refinar os resultados através da opção REFINE ou analisar os documentos através da opção ANALYZE.

Recurso 'Refine'

Esse recurso permite refinar a busca adicionando critérios complementares.

Para utilizar esse recurso: a partir da tela dos resultados, clique no botão **ANALYZE/REFINE** e escolha o ícone **REFINE**.

Se você estiver trabalhando com um conjunto de referências, você pode refinar os resultados de acordo com os seguintes critérios:

- Research Topic: você pode incluir um outro assunto, termo, nome, etc
- Company Name: nome de empresa
- Author Name: nome de autor
- Publication Year: ano específico ou período. Ex. 2003 ou 2000-2005
- Document Type: patente, livro, artigo, revisão, estudo clínico, etc.
- Language: língua do documento original
- Database: você pode escolher manter apenas registros do CPlus ou Medline
- Full Text Availability: se haverá disponibilidade de texto completo ou não

Se você estiver trabalhando com um conjunto de substâncias ou reações outras alternativas para análise estarão disponíveis:

- Chemical Structure
- Isotope-Containing Substances
- Metal-Containing Substances
- Commercial Availability
- Property Data
- Property Availability
- Reference Availability

Recurso 'Analyze'

O recurso **ANALYZE** é usado para criar sub-conjuntos, para atender, por exemplo, a um critério específico. Os histogramas permitem visualizar uma representação gráfica baseada na quantidade dos registros recuperados.

Para utilizar esse recurso: a partir da tela dos resultados, clique no botão **ANALYZE/REFINE** e escolha o ícone **ANALYZE**.

Se você estiver trabalhando com um conjunto de referências, você pode analisar os resultados de acordo com os seguintes atributos:

- Nome de autor
- CAS RN
- Indexação do CAS (CAS Section Title)
- Empresa / Organização
- Base de Dados
- Tipo de Documento
- Termos de Indexação
- Títulos dos Periódicos
- Língua original do documento
- Ano de Publicação
- Termos complementares



DICA: Alguns registros podem não conter a informação específica que está sendo analisada no momento (por exemplo: registros recuperados da base Medline quando a análise estiver sendo feita por `Seção de Indexação do CAS`). Quando isso ocorre, as referências nessa condição são colocadas em linha nomeada 'References not containing information for this analysis'

Os resultados podem ser mostrados em ordem alfabética ou por maior frequência de registros recuperados.

Se você estiver trabalhando com um conjunto de substâncias ou reações outras alternativas para análise estarão disponíveis:

- Real-atom Attachments
- Variable group (A, Q, X, and M)
- R-group composition
- Precision
- Ring Skeletons
- Stereo



Dicas

- Os histogramas resultantes de uma análise podem ser impressos ou salvos. Clique no menu **File** e escolha **Print** ou **Save As**, respectivamente.

- As barras dos histogramas não são mantidos na impressão. Apenas o texto e a quantidade de registros recuperados é que são impressos.

GET RELATED

A partir da tela de resultados ou da visualização individual de cada registro é possível acionar o botão **GET RELATED** e recuperar informações relacionadas a:

- **CITAÇÕES**
- **SUBSTANCIAS**
- **REAÇÕES**
- **eSCIENCE**

- **CITED REFERENCES:** recupera **documentos citados** no(s) registro(s) selecionado(s)
- **CITING REFERENCES:** recupera **documentos que citam** o(s) registro(s) selecionado(s)
- **SUBSTANCES:** recupera as **substâncias indexadas** no(s) registro(s) selecionado(s)
- **REACTIONS:** recupera as **reações indexadas** no(s) registro(s) selecionado(s)
- **eSCIENCE:** recupera informação relacionada ao tópico pesquisa, em sites gratuitos da web

Se o botão **GET RELATED** for acionado a partir da tela de resultados, as referências, substâncias ou reações recuperadas serão relativas a todos os registros da busca.

Para recuperar trabalhos relativos a um registro específico ou a alguns registros selecionados utilize uma dessas alternativas:

- para apenas um registro: clique no ícone 'microscópio' e, a partir da visualização da referência completa, clique no botão **GET RELATED**.
- para alguns registros selecionados: clique primeiro nas caixas da esquerda para selecionar os registros desejados e, a seguir, clique no botão **GET RELATED**.

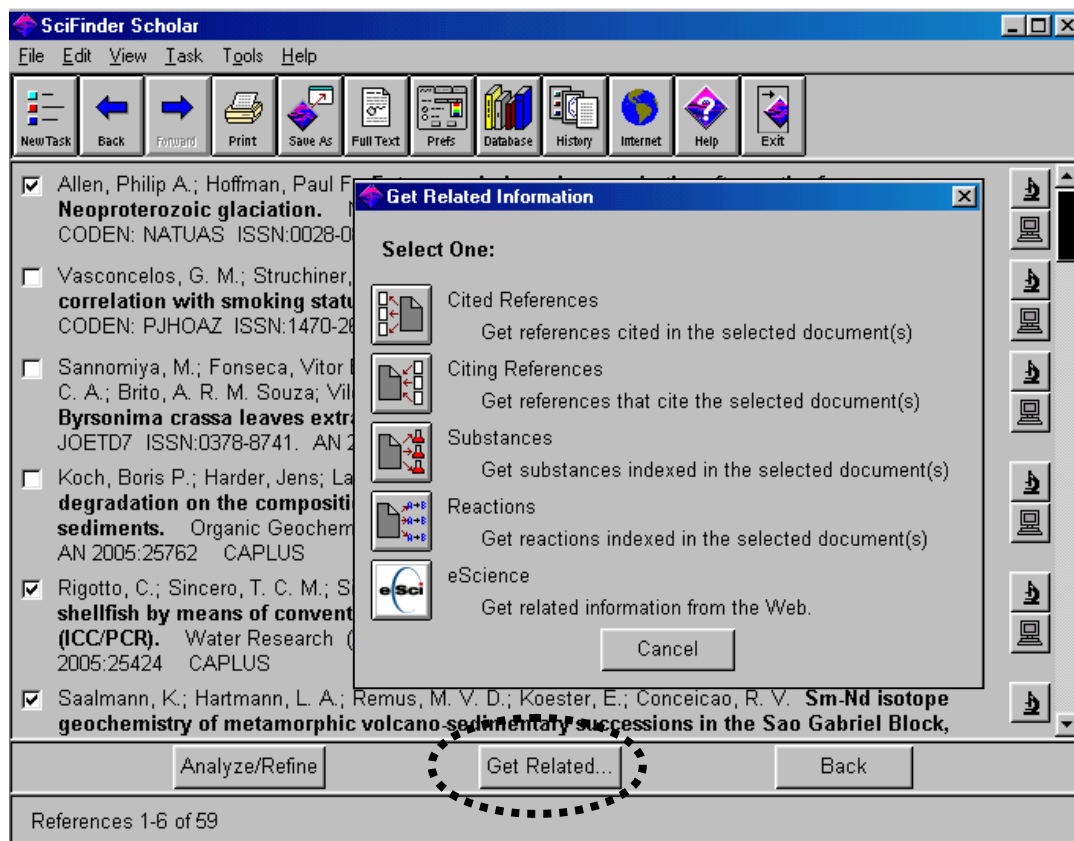
Lembrete:

- **Lista de citações:** o registro precisa estar na base CAplus (Chemical Abstracts) para que a lista de citações esteja disponível. Não existe lista de citações nos registros da base Medline.
- **Documentos citados:** na busca por documentos citados tanto os registros da base CAplus quanto da Medline podem gerar resultados. As referências que serão mostradas na tela (os documentos citados) serão registros da base CAplus.



Dica

O recuso eSCIENCE está disponível para resultados obtidos a partir de buscas com Explore by Research Topic, Explore by Author Name e Explore by Company Name/Organization.



Recurso 'Cited References'

Esse recurso permite recuperar referências citadas pelos documentos da pesquisa em curso. Ou seja, você terá acesso a documentos mais antigos, que serviram de base para o desenvolvimento da tecnologia ou do assunto em questão.

A partir da tela contendo o resultado da busca, clique no botão **Get Related**, e na nova janela, escolha o botão **Cited References**.

Recurso 'Citing References'

Esse recurso permite recuperar trabalhos posteriores que citam os documentos da pesquisa em curso. Ou seja, você terá acesso à literatura mais recente, e que portanto pode oferecer novos enfoques ao assunto em questão.

A partir da tela contendo os resultados da busca, clique no botão **Get Related**, e na nova janela, escolha o botão **Citing References**.

**Recurso
'Substances'**

Esse recurso permite recuperar todas as substâncias associadas às referências da pesquisa em curso. Ou seja, você terá acesso ao registro individual de cada substância mencionada bem como poderá refinar ou analisar o resultado de acordo com os vários parâmetros oferecidos pelo sistema.

A partir da tela contendo os resultados da busca, clique no botão **Get Related**, e na nova janela, escolha o botão **Substances**.

**Recurso
'Reactions'**

Esse recurso permite recuperar as reações associadas às referências da pesquisa em curso. Ou seja, você terá acesso ao registro individual de cada reação mencionada bem como poderá refinar ou analisar o resultado de acordo com os vários parâmetros oferecidos pelo sistema nesse ponto da busca.

A partir da tela contendo os resultados da busca, clique no botão **Get Related**, e na nova janela, escolha o botão **Reactions**.

**Recurso
'eScience'**

Permite transferir a busca atual para sites gratuitos da internet.

Esse recurso está disponível para buscas efetuadas no **SciFinder Scholar** a partir de pesquisa por tópico, por nome de autor ou empresa.

A partir da tela contendo os resultados da busca, clique no botão **Get Related**, e na nova janela, escolha o botão **eScience**.

8

Links para Informações Adicionais

O **SciFinder Scholar** oferece inúmeros links dentro das próprias referências ou dos registros das substâncias como forma de complementar as informações:

Substâncias

- Os **números CAS (CAS RN)** incluídos nas referências, possuem links para as fichas detalhadas. Essas fichas contém: nomes químicos, nomes comerciais, fórmula molecular, estrutura química, propriedades físico-químicas, etc.
- Os dados são fornecidos pela base REGISTRY.

Fontes comerciais

- o link **Commercial Sources** está disponível para milhões de substâncias a partir da ficha completa da substância ou do resultado obtido a partir de busca por Substance Identifier ou por Chemical Structure.
- Os dados são fornecidos pela base CHEMCATS.

Listas regulatórias

- o link **Regulated Chemicals Listing** está disponível a partir da ficha completa da substância ou do resultado obtido a partir de busca por Substance Identifier ou por Chemical Structure.
- As listas incluem substâncias regulamentadas nos Estados Unidos, Japão, Coreia, Canadá, Europa (ELINCS e EINECS) e outros países.
- Os dados são fornecidos pela base CHEMLIST.

Citações

- para registros a partir de 1998, na base CPlus, está disponível a lista das referências citadas pelo autor do artigo ou da patente. Para visualizar essas citações, o formato de "DISPLAY / VIEWER" deve ser mantido como "FULL" (formato padrão).

continua

continuação

Reações

- a partir do registro de uma substância é possível recuperar as reações onde a tal substância entre como um dos elementos.

eScience

Este recurso gratuito do CAS permite transferir a pesquisa feita no **SciFinder Scholar** de forma automática para sites tais como Google, ChemIndustry ou ChemGuide. O link para eScience está disponível para os resultados criados a partir de buscas efetuadas com os recursos Explore by Research Topic, Author Name e Company Name/Organization

- para utilizar o recurso **eScience**: a partir da tela de resultados, clique no botão **Get Related** e escolha o ícone eScience.

Estruturas em 3D

Utilizando o software **WebLab ViewerLite** ou o software **ViewerPro** (adquiridos separadamente) o usuário pode visualizar as estruturas químicas em 3D.

Os softwares indicados são fornecidos mediante compra por seus produtores.

Texto completo dos documentos

Com o **SciFinder Scholar** você tem acesso ao texto completo de artigos e patentes através do serviço **ChemPort Connection**.

a) texto completo GRATUITO, está disponível para:

- patentes depositadas através dos escritórios USPTO e EPO
- artigos de periódicos disponibilizados eletronicamente, na Internet, pelas próprias editoras e de forma gratuita.

b) texto completo com pagamento:

- artigos, patentes e demais documentos indexados nas bases de dados



Dica

As universidades que possuem acesso ao Portal Periódicos da CAPES, têm acesso liberado ao texto completo de todos os periódicos incluídos no portal, sem custos.

Ícones

Ícones para as Informações Adicionais

A existência dos ícones e/ou links abaixo indica disponibilidade de informação adicional.



Referências Bibliográficas: a partir de uma busca por estrutura, substância ou reação, o ícone indica que existem referências bibliográficas disponíveis. Acessando os registros é possível visualizar as referências, resumos, indexação e citações, bem como dar continuidade na busca a partir daquele ponto.



Reações: a partir de uma busca por estrutura ou substância, indica disponibilidade de reações. Acessando o botão é possível visualizar os passos da(s) reação (ções) indicada(s), bem como dar continuidade na busca a partir daquele ponto.



Fontes Comerciais: a partir do registro de uma substância, indica disponibilidade de fontes comerciais para o produto. Acessando o botão é possível visualizar nomes de fornecedores, endereços, condições, etc.



Listas Regulatórias: a partir do registro de uma substância, indica que a substância está incluída em listas regulatórias. Acessando o botão é possível visualizar detalhes regulatórios, nomes, números, e países onde a substância possui regulamentação.

79-94-7, Tetrabromobisphenol A

CAS RN (CAS Number ou Número CAS): a partir do registro de uma substância ou referência, o link indica que existe uma ficha da substância disponível para consulta de mais detalhes: nome químico, nomes comerciais, propriedades físico-químicas, etc.

Citations

- 1) Sellstrom, U; Chemosphere 1993, 26, 1703
- 2) Allchin, C; [Environm Pollution 1999, 105, 197](#)

Citações: a partir do registro de uma referência ou de uma reação, o link da citação dá acesso ao registro do documento citado. Clicando sobre a citação, é possível visualizar a referência completa, o resumo, indexação, etc. bem como dar continuidade na busca a partir daquele ponto.



Microscópio: a partir de qualquer busca o ícone indica que existem mais detalhes para aquela referência ou substância. Acessando o botão é possível ver a referência completa, resumo, indexação, citações, etc. quando se tratar de texto (patente, artigo, etc) ou então visualizar detalhes da substância tais como: nome químico, comercial, estrutura, fórmula, propriedades físico-químicas, etc.



Computador: A partir de uma referência (no formato abreviado ou completo) o ícone indica a disponibilidade de acesso ao texto completo daquele documento. O acesso pode ser grátis (patentes US / EPO, artigos disponíveis online de forma gratuita, periódicos já assinados eletronicamente pela instituição) ou pago (para demais patentes, artigos disponíveis eletronicamente via site das próprias editoras, e demais textos indexados). O acesso ao texto completo é feito através do serviço **ChemPort**.



Casinha verde: As instituições que informarem ao sistema **SciFinder Scholar** os ISSNs das suas assinaturas eletrônicas, visualizarão o ícone 'casinha verde' no lugar do 'computador'.

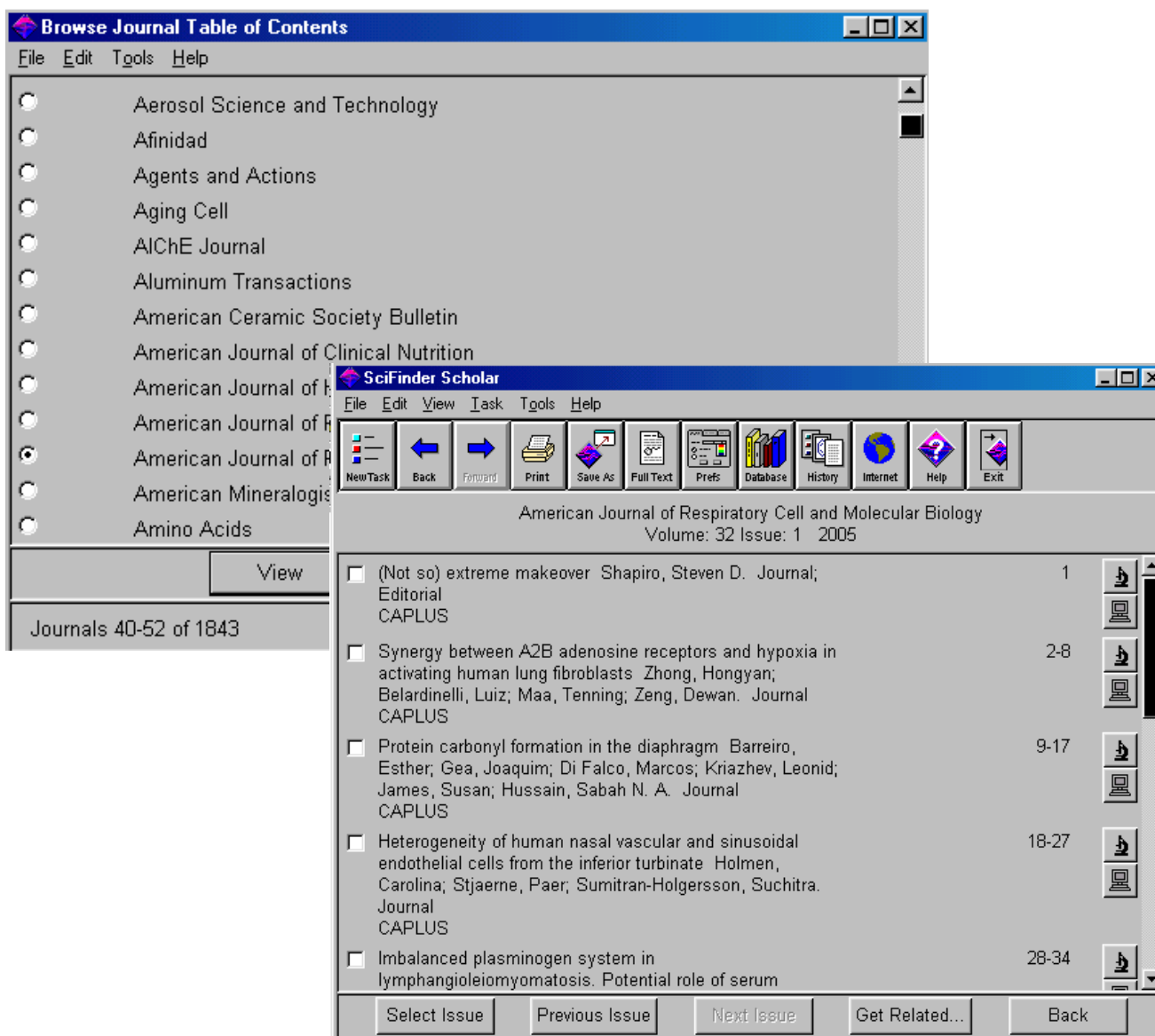
Nota: as instituições que possuem acesso ao **Portal Periódicos da CAPES**, têm acesso liberado ao texto completo de todos os periódicos incluídos no portal, sem custos.

9 Acesso ao Sumário dos Periódicos (Browse Journal Table of Contents)

Mais de 1800 dos principais periódicos científicos indexados pelo CAS estão disponíveis para consulta neste recurso do **SciFinder Scholar**. Com ele, a partir da visualização do sumário do periódico, você pode "folhear" o número da revista do seu interesse e recuperar o resumo e demais links oferecidos pelo sistema bem como dar continuidade a uma busca a partir desse ponto.

Para acessar o recurso **Browse Table of Journal Contents**:

- clicar **New Task**, e dentro da janela **Explore**, selecionar **Browse Table of Contents**.



Como visualizar os sumários

- a partir da lista completa que é mostrada na tela, você pode descer a barra de rolagem e localizar o título desejado ou clicar no menu **Edit** e a seguir em **Find Journal Title**. Nesse caso, digite algumas palavras do título e clique no botão **Find**.
- para ver o sumário do título desejado, marque a caixa ao lado esquerdo da tela e clique no botão **View**.
- para ver números anteriores (mais antigos) do mesmo título, clique no botão **Previous Issue**.
- para voltar aos mais recentes ou ao atual, clique no botão **Next Issue**.
- Para ver um número específico clique no botão **Select Issue** e escolha o volume/número desejado.

Na tela apresentada é só clicar sobre o ícone 'microscópio' para acessar a referência completa com o resumo e/ou clicar sobre o ícone 'computador' (ou 'casinha verde') para acessar/adquirir o texto completo do documento.

A Preferências

O recurso **Preference Editor** pode ser utilizado para personalizar o software SciFinder na sua máquina.

Para alterar os parâmetros: clique no botão **Prefs** (na barra de botões) ou clique no menu **Tools** e escolha o item **Edit Preferences**.

Display | Print | Explore | Drawing | Databases | Analyze | Other | Save As

References

Main Viewer: Standard

Viewer: Full

Sort Options: Accession Number

Compact: Titles only

Standard: Compact, plus bibliography

Summary: Standard, plus abstract (if available) and patent family information (patent documents only)

Full: Summary, plus indexing, supplementary/controlled terms, and citations (CAplus database only)

Substances

Main Viewer: Standard

Viewer: Full

Sort Options: Accession Number | 3 | Number of Columns

Compact: Structures only

Standard: Compact, plus CAS Registry Number and approx. no. of references

Summary: Standard, plus CA Index name

Full: Summary, plus other chemical names, molecular formula, STN files, and property data (if available)

Reactions

Main Viewer: Standard

Viewer: Full

Description of Reaction display formats. ⓘ

Presentation of Reactions

All Hit Reactions

Other

Display Font: Arial | Size: 10

Show "In Memory" status

OK Cancel

A tela **Preference Editor** oferece opções de ajustes para:

- **Display:** formatos para visualização das referências e das substâncias
- **Print:** formatos para impressão das referências e das substâncias
- **Explore** (Explore by Structure): inclusão/exclusão de classes de substâncias
- **Drawing:** alternativas para desenho de estruturas
- **Databases:** inclusão/exclusão bases a serem pesquisadas
- **Analyze:** alternativas para análise de referências e substâncias
- **Other:** alternativas para cor, som, etc.
- **Save As:** formatos para gravação de referências e de substâncias



LEMBRETE

*As alterações efetuadas nos formatos-padrão do menu PREFERÊNCIAS são válidas somente para a sessão em curso. Quando o **SciFinder Scholar** é desligado, todos os parâmetros retornam aos valores-padrão estabelecidos pelo sistema.*

B Importação e Exportação de Estruturas

O **SciFinder Scholar** permite que você faça pesquisa por estrutura utilizando desenhos de estruturas criadas em outros aplicativos.

Entre eles estão:

- STN Express with Discover
- ChemDraw
- ChemWindows
- ISIS/Draw

Qualquer dos formatos abaixo pode ser utilizado para armazenamento das estruturas:

- **.str** (utilizado no sistema STN Express)
- **.cxf** (utilizado no SciFinder e CXF)
- **.mol** (utilizado no MDL Molfile, ISIS Draw, ChemWindows, ChemDraw)

O sistema **SciFinder Scholar** permite ainda salvar estruturas nos formatos indicados de forma que as estruturas possam ser utilizadas nos aplicativos acima ou em outros similares.

Importação de estruturas

Qualquer estrutura que tenha sido salva em outro aplicativo (com os formatos **.str**, **.cxf** ou **.mol**) pode ser utilizada pela **SciFinder Scholar**.

Para abrir o arquivo contendo o desenho de uma estrutura:

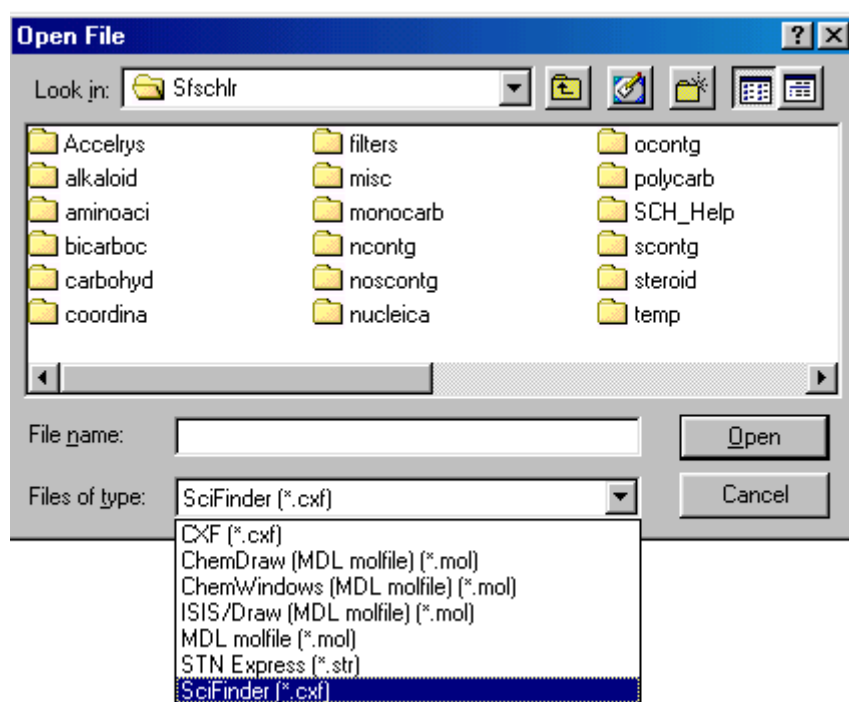
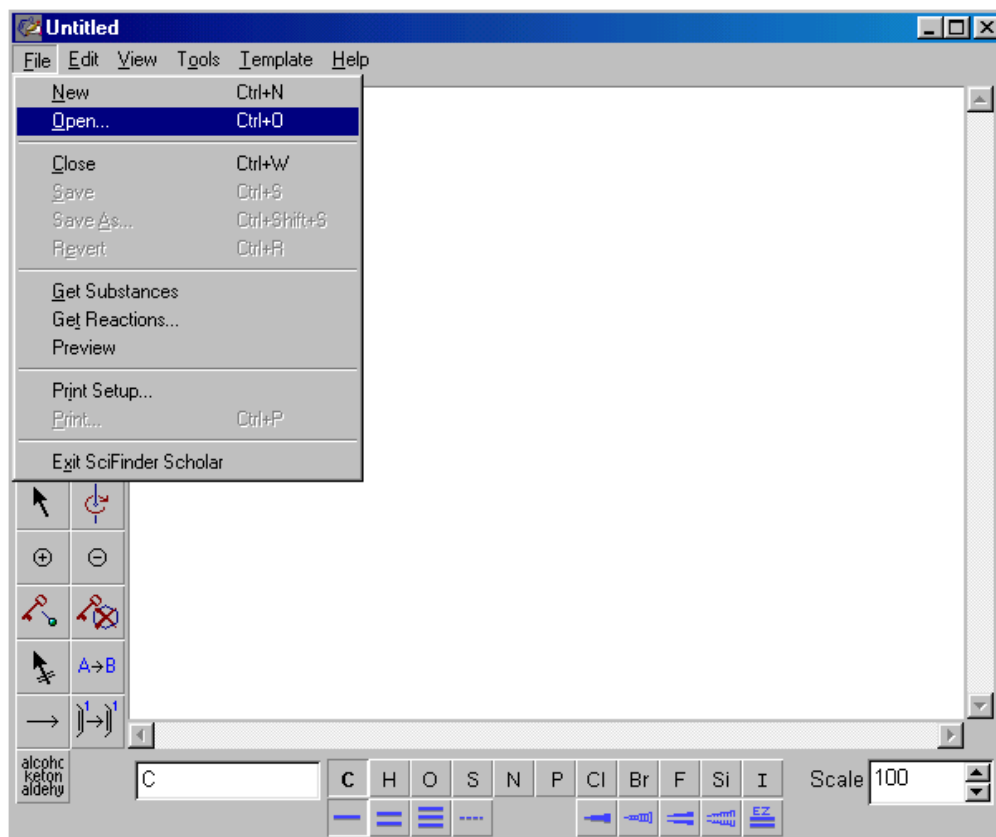
- a partir na tela **Explore**, clique no botão **Chemical Substance or Reaction**
- na nova tela, escolha a opção **Chemical Structure**
- na tela de desenho, clique no menu **File** e depois em **Open**
- escolha o formato bem como o caminho, diretório, pasta e nome do arquivo onde a estrutura foi gravada.

Exportação de estruturas

O **SciFinder Scholar** também pode salvar estruturas nos formatos **.str**, **.cxf** ou **.mol** de modo a serem exportadas e utilizadas em outros programas.

Para salvar uma estrutura:

- estando com a estrutura desenhada na tela apropriada
- clique no menu **File** e depois em **Save** (ou **Save As**)
- escolha o formato desejado bem como caminho, diretório, pasta e nome de arquivo onde a estrutura será gravada.



C

Smartsearch

O **SciFinder Scholar** incorpora a capacidade de interpretar uma estrutura química com vistas a recuperar o máximo de informação sobre a substância pesquisada. Essa característica é denominada "Smartsearch".

Nota: essa função aplica-se à busca por estrutura exata e sub-estrutura, mas não por reações.

O que é Smartsearch

O Smartsearch permite que você desenhe a estrutura na forma que for mais familiar a você. Depois, o Smartsearch faz vários ajustes técnicos levando em consideração as convenções adotadas pelos químicos. Os recursos inteligentes do Smartsearch interpretam a estrutura desenhada para permitir o máximo de referências recuperadas que atendam o desenho da sua estrutura.

O que o Smartsearch recupera

O Smartsearch automaticamente encontra substâncias que contêm o mesmo arranjo atômico e ligações que você desenhou, incluindo:

- a estrutura exata conforme você tenha desenhado
- estereoisômeros
- tautômeros (incluindo keto-enol)
- compostos coordenados
- "charged compounds"
- radicais ou radicais iônicos
- isótopos
- polímeros nos quais a estrutura seja um monômero

Alguns exemplos de como o Smartsearch recupera os dados:

- tautômeros e ligações aromáticas são automaticamente recuperados, incluindo as formas keto e enol. Ligações simples e duplas são também incluídas.
- estruturas podem ser recuperadas contendo ligações simples e duplas em diferentes posições das que você desenhou ou contendo hidrogênios em diferentes átomos.
- Para algumas substâncias, especialmente corantes, poderão ser recuperadas estruturas com átomos em diferentes posições.
- Estruturas contendo metais são automaticamente manipuladas para englobar variações.
- Pesquisas contendo 'phosphorus-halide' e 'arsenic-halide' recuperam variações onde o halogênio: é ion livre, está ligado ao fósforo ou ao arsênio ou está ligado a qualquer outro halogênio, independente de como você desenhou a estrutura.
- Tanto as representações cíclicas e acíclicas de corantes do tipo "fluorescein" e "phthalein" são recuperadas, independente da estrutura desenhada. O mesmo é válido para "hemiacetals" e açúcar do tipo simples.

continua

continuação

Nenhum tipo de programação foi desenvolvida para recuperação automática de estruturas similares de polímeros, carboidratos complexos, bioseqüências, estereoquímicos e radicais iônicos. Claro está, entretanto, que essas substâncias são recuperadas se forem identificadas com a estrutura desenhada.

Devido a essas características do **SciFinder Scholar** --de buscar similaridades para aumentar o resultado-- você pode recuperar alguns registros não relevantes na sua busca. Entretanto, você pode decidir se deseja ou não ver mais detalhes dos registros recuperados ou se deseja utilizar os recursos de ANALYSE ou REFINE para restringir a busca com maior precisão.

Recuperação de estruturas similares

Como indicado na página anterior, o **SciFinder Scholar** recupera automaticamente variações de uma estrutura e famílias (por exemplo: polímeros, misturas, sais, etc.).

1- Se sua instituição assinou acesso ao sistema **SciFinder Scholar com o módulo SSM**, esse recurso já estará configurado automaticamente.

PARA ELIMINAR ESSAS SUBSTÂNCIAS

- Para eliminar alguns tipos de substâncias, você pode ajustar as preferências na sua máquina ou utilizar os recursos de refinamento. Para ajustar a configuração: clique no menu **Tools** e escolha a opção **Preference Editor** (ou clique no botão **Prefs**). Na aba **Explore** desmarque o item ' **Include substance with additional components** ' e/ou escolha quais substâncias devem ser eliminadas no item ' **Include de following substance classes** '.

- Outra alternativa é refinar o resultado: depois de clicar no botão **Get Substances**, escolha a opção **Additional Options** para restringir os tipos de substâncias não desejadas.

2- Se sua instituição **não optou pelo acesso ao módulo SSM do SciFinder Scholar** você pode configurar esses parâmetros.

PARA INCLUIR ESSAS SUBSTÂNCIAS

- Para incluir estruturas similares na busca por estrutura, basta marcar uma opção nas Preferências. Para ajustar a configuração: clique no menu **Tools** e escolha a opção **Preference Editor** (ou clique no botão **Prefs**). Na aba **Explore** marque o item ' **Include substance with additional components** ' e/ou escolha quais substâncias devem ser incluídas no item ' **Include de following substance classes** '.

★ LEMBRETE

*As alterações efetuadas nos formatos-padrão do menu PREFERÊNCIAS são válidas somente para a sessão em curso. Quando o **SciFinder Scholar** é desligado, todos os parâmetros retornam aos valores-padrão estabelecidos pelo sistema.*