



SCIFINDER[®]
A CAS SOLUTION

Пошук науково-технічної інформації на прикладі ресурсної бази SciFinderⁿ

Тетяна Хрїстова
Chemical Abstracts Service
tkhristova@acs-i.org



SCIFINDER[®]
A CAS SOLUTION

Chemical Abstracts Service

Провідне глобальне джерело хімічної інформації для наукових і патентних досліджень



CAS провідне світове джерело хімічної інформації для наукових і патентних досліджень



Сотні вчених CAS вилучають інформацію з хімічної літератури на 50 мовах, щоб зробити її доступною для наукового співтовариства.

Ці вчені накопичили багато знань, які допомагають їм розкрити ідеї та тенденції.

CAS вчені аналізують, узагальнюють та роблять наукову інформацію доступною для колег по всьому світу

Вибір джерела



Індексування документів



Індексування сполук



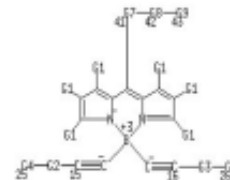
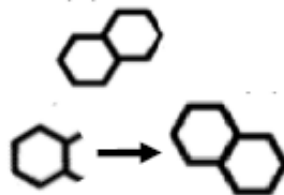
Індексування реакцій



Обробка



1990
Smith, M.
anthracene



Androst-4-en-3-one, 17-hydroxy-17-methyl-, (17β)-

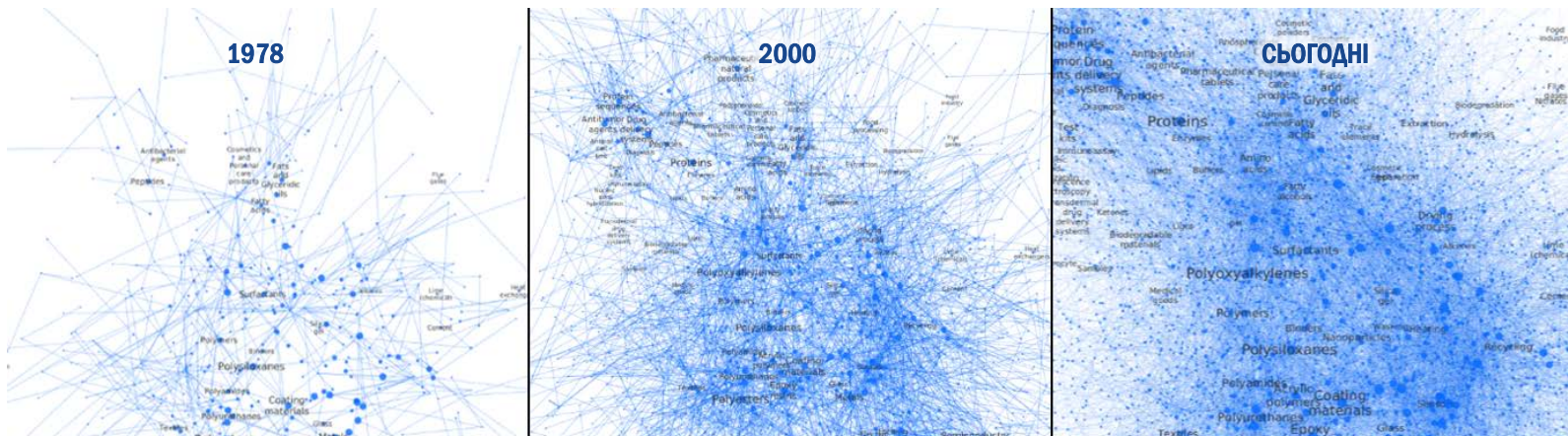
Стандартизоване індексування в базах даних CAS забезпечує послідовні та всебічні результати пошуку.



КІЛЬКІСТЬ НАУКОВОЇ ІНФОРМАЦІЇ ПОДВОЮЄТЬСЯ КОЖНІ 9 РОКІВ

1

Важливість управління науковою інформацією продовжує загострюватися



ТЕНДЕНЦІЇ НАУКОВОЇ ІНФОРМАЦІЇ:

🏠 ОБСЯГ

🏠 СКЛАДНІСТЬ

🏠 ВЗАЄМОЗВ'ЯЗОК

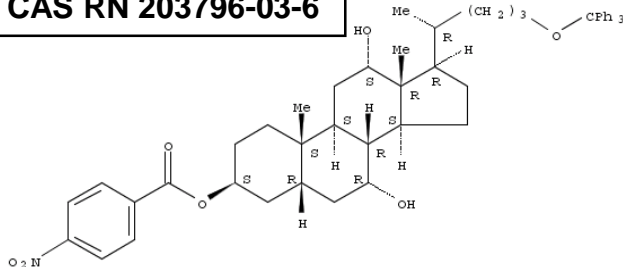
Вчені - "індексатори" CAS аналізують повні тексти статей, дисертацій та патентів...

Compound 34: Diisopropyl azodicarboxylate (DIAD) (1.20 mL, 6.08 mmol) was added to triphenylphosphine (1.60 g, 6.08 mmol) in THF (100 mL) at 0 °C. and was stirred for half an hour during which time the yellow solution became a paste.

Compound 14 (2.58 g, 4.06 mmol) and p-nitrobenzoic acid (0.81 g, 4.87 mmol) were dissolved in THF (50 mL) and added to the paste. The resulted mixture was stirred at ambient temperature overnight. Water (100 mL) was added and the mixture was made slightly basic by adding NaHCO₃ solution followed by extraction with EtOAc (3x50 mL). The combined extracts were washed with brine once and dried over anhydrous Na₂SO₄. The desired product (2.72 g, 85% yield) was obtained as white powder after SiO₂ chromatography (Et₂O/hexanes 1:2). m.p. 207-209 °C.; IR (KBr) 3434, 3056, 2940, 2868, 1722, 1608, 1529,1489, 1448, 1345 cm⁻¹; ¹H NMR (CDCl₃, 300 MHz) δ 8.30-8.26 (m, 2 H), 8.21-8.16 (m, 2 H), 7.46-7.42 (m, 6 H), 7.31-7.18 (m, 9 H) 5.33 (bs, 1 H), 4.02 (bs, 1 H), 3.90 (bs, 1 H), 3.09-2.97 (m, 2 H), 2.68 (td, J=14.95, 2.56 Hz, 1 H), 2.29-2.19 (m, 1 H), 2.07-1.06 (series of multiplets, 24 H), 1.01 (s, 3 H), 0.98 (d, J=6.6 Hz, 3 H), 0.70 (s, 3 H); ¹³C NMR (CDCl₃, 75 MHz) δ 164.21, 150.56, 144.70, 136.79, 130.77, 64.22, 47.79, 46.79, 42.18, 28.74, 27.71, 26.85, 26.3

(thioglycerol+Na⁺ matrix)

CAS RN 203796-03-6



Absolute stereochemistry.



CAS вилучає більше знань, ніж будь-хто інший

- Приклад патенту

WO 2012135049

[Compounds and methods for chemical and chemo-enzymatic synthesis of complex glycans](#)

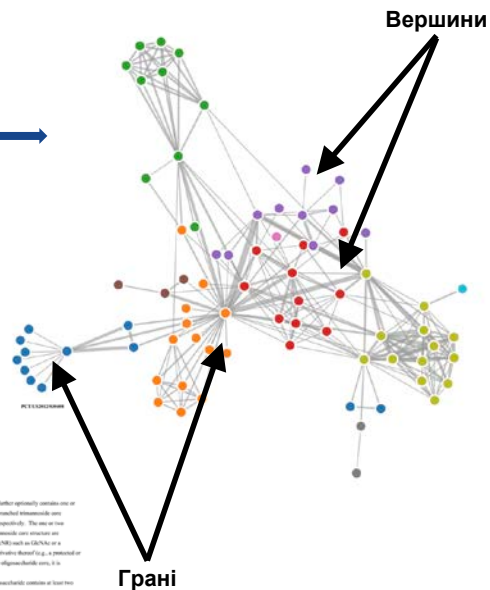
7 концепцій

138 речовин

4614 реакцій

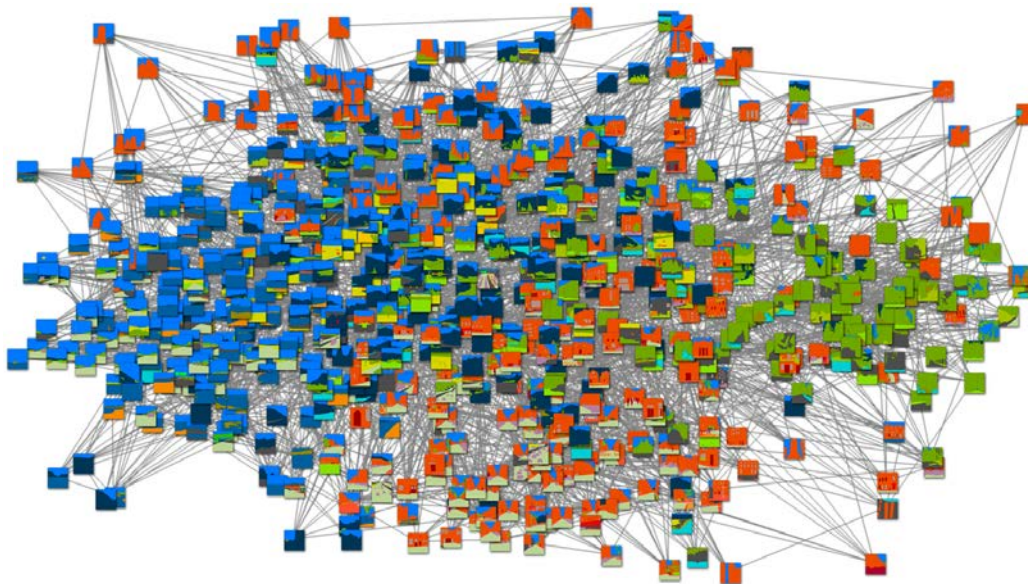
4 членів патентних сімейств

3 цитованих документа



CAS розуміє як взаємопов'язані різні галузі науки

*1.4 млрд вершин
14 млрд граней*

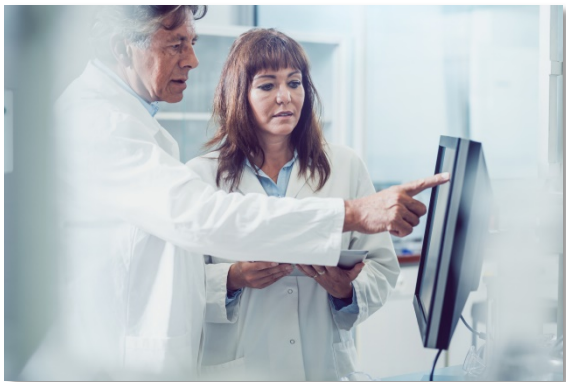


See Blog: [Innovation Drives Transformation](#)



Вчених все частіше просять швидше отримати результати

- Отримайте цей грант
- Синтезуйте цю сполуку
- Отримайте ці результати в лабораторії
- Комерціалізуйте цей винахід

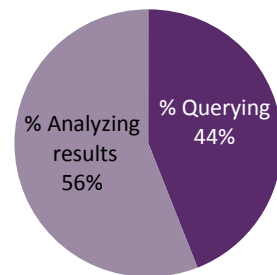


На жаль, вчені витрачають більше половини свого часу не роблячи досліджень

І більше половини часу витрачають на фільтрацію інформації, використовуючи інформаційні ресурси



Source: Research, Nature(2016): Nature Salary and job satisfaction survey



Source: CAS Global Customer Satisfaction Survey

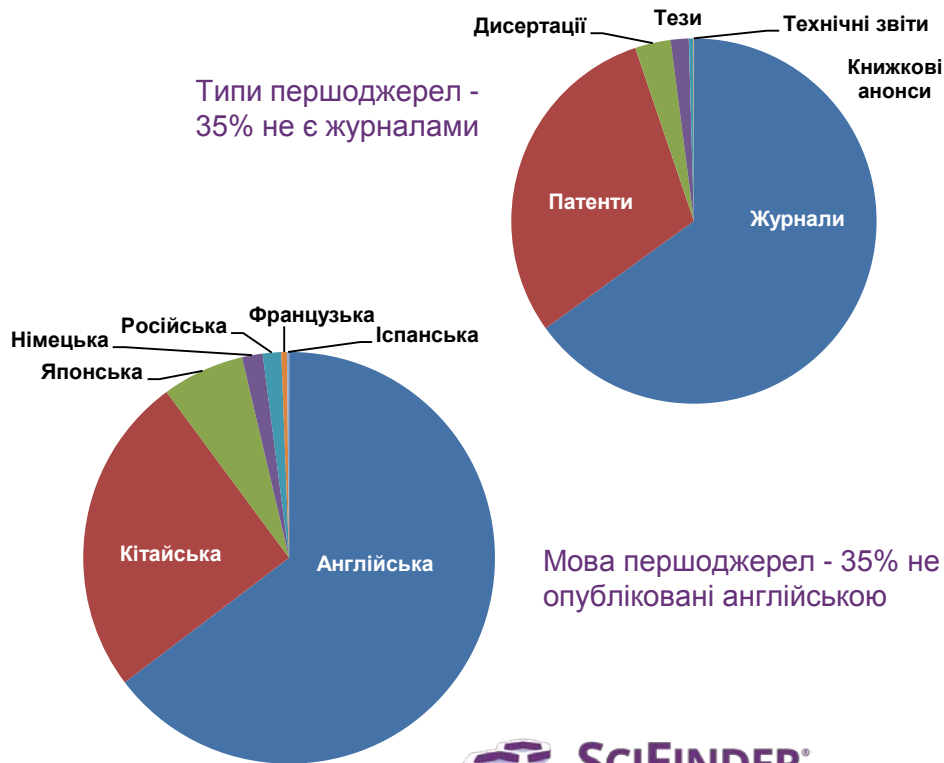


SciFINDERⁿ

A CAS SOLUTION

База даних для пошуку
науково-технічної інформації

SciFinderⁿ дозволяє отримати величезну кількість інформації з різних областей хімії та суміжних наук



CAS охоплює всі області хімії та деякі суміжні науки

- Біохімія
- Біохімічні методи
- Біоінформатика
- Біофізика
- Клітинна біологія
- Метаболізм лікарських засобів
- Ензимологія
- Генетика
- Мікробіологія
- Молекулярна біологія
- Фармакогенетика
- Фармакокінетика
- Фармакологія
- Протеоміка
- Токсикологія



Більш ніж 100 українських журналів



SciFinderⁿ - база даних для пошуку науково-технічної інформації від CAS

- Новий підхід до постачання CAS-контенту дослідникам, обумовлений тривалим вивченням користувацьких звичок, потреб користувачів, стратегій пошуку та розвитком технологій
- Нова платформа допоможе користувачам не тільки отримати релевантні результати, але й допоможе зрозуміти з чого краще розпочати
- Досвід CAS щодо хімічної інформації, знання системи та людські ресурси допоможуть прискорити вашу роботу

Зростаючі потреби користувачів, зростаючий вміст та більш широкі можливості потребують нові технологічні рішення!



SciFinderⁿ оптимізований для того, щоб відповісти на найбільш актуальні питання вчених

Як синтезувати цю речовину?
Чи відомий більш екологічний синтез?
Чи є схожі реакції з більшим виходом реакції?

Речовини

Чи ця речовина відома?
Яка температура кипіння цієї речовини?
Чи ця молекула біологічно активна?

Реакції

Реферати

Де я можу купити цей реагент?
Чи він доступний у місцевого постачальника?

Хімічні
каталоги

Хто запатентував цю технологію?
Хто цитував це дослідження?
Які інші дослідження опублікував цей автор?



SCIFINDER[®]
A CAS SOLUTION

Отримайте релевантні результати швидше

The screenshot displays the SciFinder web interface. On the left, there is a search sidebar with filters for 'Substance Role' (Product, Reactant, Yield, Number of Steps, Experimental Protocols, Reaction Type, Reagent, Catalyst, Solvent, Commercial Availability, Reaction Notes) and 'Source Reference' (Publication Year, Document Type, Language). The main search area shows 'References' for 'treatment of cancer' with 3,103 results. A 'Structure Match' section shows 'As Drawn (3,103)' and 'Substructure (3,290)'. A 'Filter by' section includes 'Document Type' (Journal, Patent, Review, Conference, Dissertation), 'Language' (English, Chinese, Japanese, Korean, French), and 'Publication Year' (with a bar chart showing a peak in 2017). The results list includes 'Multikinase inhibitors: a new option for the treatment of thyroid cancer' and 'sorafenib for the treatment of renal cancer', each with an abstract snippet and options for 'Full Text', 'Substances', 'Reactions', and 'Cited By'.

Провідні організації по всьому світу покладаються на CAS



47 з 50 топ
фармацевтичних
компаній¹



21 з 25 топ
біотехнологічних
компаній²



49 з 50 топ
хімічних компаній³



98 зі 100 топ
університетів⁴

1. Pharm Exec's Top 50 Companies 2017 <http://www.pharmexec.com/pharm-execs-top-50-companies-2017>
2. The Top Biotech Companies of 2017 <https://www.genengnews.com/the-lists/top-25-biotech-companies-of-2017/77901002>
3. C&EN's Global Top 50 <https://cen.acs.org/articles/95/i30/CENs-Global-Top-50.html>
4. ShanghaiRanking's Global Ranking of Academic Subjects 2017 – Chemistry <http://www.shanghairanking.com/Shanghairanking-Subject-Rankings/chemistry.html>



Тетяна Хрістова
Представник CAS в Україні
TKhristova@acs-i.org

Connect with SciFinder



Дякую!!!

CAS провідне світове джерело хімічної інформації для наукових і патентних досліджень

- Компанія заснована в 1907р для моніторингу та вилучення інформації з хімічної літератури, щоб зробити її доступною для наукового співтовариства
- Перші публікації в журналі *Chemical Abstracts*
- Штаб-квартира в Коламбусі, штат Огайо
- Більш ніж 1,400 співробітників, включаючи вчених CAS, які володіють 50 мовами
- Аналізуються та індексуються більше 10,000 наукових журналів і патентів з 63 патентних відомств
- 2,500 університетів, 500 провідних міжнародних організацій і всі основні патентні відомства є нашими клієнтами

Підкорить хаос завдяки науковій інформації від CAS



CAS[®]

A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

Забезпечте успіх студентів. **Підвищте** продуктивність досліджень. **Прискорьте** научний прорив.



Вчені-фахівці CAS роблять хімічну інформацію легкодоступною завдяки інтелектуальній індексації

(12) INTERNATIONAL APPLICATION PUBLISHED UNDER THE PATENT COOPERATION TREATY (PCT)

(19) World Intellectual Property Organization
International Bureau

(43) International Publication Date
13 June 2002 (13.06.2002)

PCT

(10) International Publication Number
WO 02/46157 A2

(5) International Patent Classification: C07D 211/00

(2) International Application Number: PCT/US01/47037

(2) International Filing Date: 4 December 2001 (04.12.2001)

(25) Filing Language: English

(26) Publication Language: English

(30) Priority Data:
09/211,209 4 December 2000 (04.12.2000) US
09/275,000 13 March 2001 (13.03.2001) US

(71) Applicant: SEPRACOR, INC., [US;US]; 111 Locke Avenue, Marlborough, MA 01752 (US).

(72) Inventors: WEI, Xiaohu, One Royal Crest Drive, Marlborough, MA (US); BANNISTER, Thomas, B., 112 Green Street, Marlborough, MA 01752 (US); CUNY, Gregory, D., 100 Tower Street #210, Hudson, MA 01749 (US).

(74) Agents: GORDON, Dana, M., et al., Patent Group, Foley, Hoag & Elliot, LLP, One Post Office Square, Boston, MA 02109 (US).

(81) Designated States (national): AE, AG, AI, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, BZ, CA, CH, CN, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, ES, FI, GB, GD, GE, GR, GM, HU, IL, IN, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LU, LV, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MW, ...

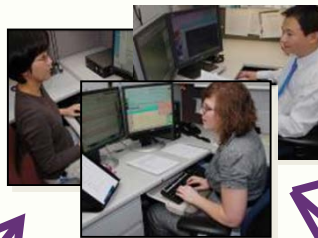
(54) Title: METHODS FOR THE STEREOSELECTIVE SYNTHESIS OF SUBSTITUTED PIPERIDINES

(57) Abstract: One aspect of the present invention relates to methods of synthesizing substituted piperidines. A second aspect of the present invention relates to stereoselective methods of synthesizing substituted piperidines. The methods of the present invention will find use in the synthesis of compounds useful for treatment of numerous ailments, conditions and diseases that affect mammals, including but not limited to addiction and pain. An additional aspect of the present invention relates to the synthesis of combinatorial libraries of the substituted piperidines using the methods of the present invention. An additional aspect of the present invention relates to enantioselectively substituted piperidines, piperidines, and acetates.

Example of Substituted Piperidines Accessible Via the Methods of the Present Invention

Structures A, B, C, and D

For Structures A, B, C, and D:
n = 0, 1, or 2
R₁ = alkyl, aryl, heteroaryl, acetyl, CO₂R₂, or ClO₂RP₃
R₂ = alkyl
R₃ = H, MeO, or NH(C₂H₅)₂, NH, NH₂, O, or S(O)
R₄ = alkyl, acetyl, aryl, or heteroaryl
R₅ = alkyl, aryl, heteroaryl, or acetyl



23 нових речовин

153 реакцій

3 структур Маркуша

27 одностадійних реакцій

42 відомих речовин з новою інформацією

6 нових концепцій



Більш ніж 100
українських
журналів



CASSISM
A CAS SOLUTION



CAS Source Index (CASSI) Search Tool

CAS Source Index (CASSI) Search Result

Displaying Record for Publication: [Ukrainica Bioorganica Acta](#)

Entry Type	Active Serial
Title	Ukrainica Bioorganica Acta
Abbreviated Title	Ukr. Bioorg. Acta
CODEN	UBAKAL
ISSN	1814-9766
Language of Text	English
Summaries In	English
History	v1 n1/2 2004+
Publication Notes	Avail. from Internet at URL: htt
Publisher Name	Institut Molekulyarnoi Biologii

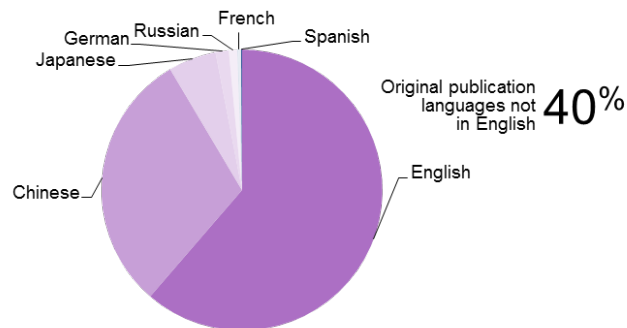
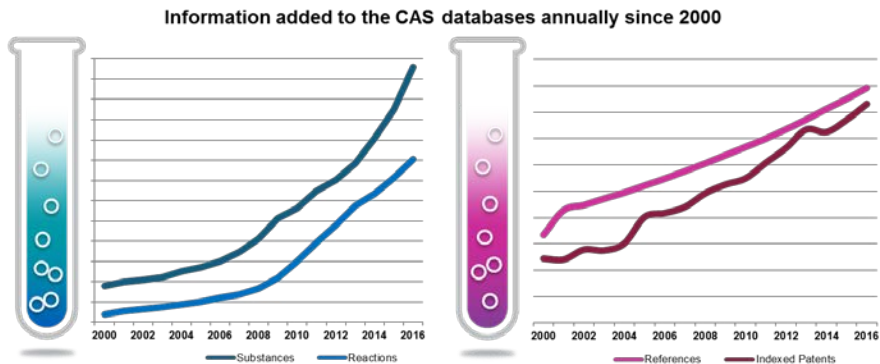
CAS Source Index (CASSI) Search Result

Displaying Record for Publication: [Zhurnal Klinichnikh ta Eksperimental'nikh Medichnikh Doslidzhen](#)

Entry Type	Active Serial
Title	Zhurnal Klinichnikh ta Eksperimental'nikh Medichnikh Doslidzhen
Abbreviated Title	Zh. Klin. Eksp. Med. Dosl.
Translated Title	Journal of Clinical and Experimental Medical Research
CODEN	ZKEMBU
ISSN	2310-2209
Language of Text	English
Summaries In	English
History	v1 n1 2013+
Publication Notes	Avail. from Internet at URL: http://ujcem.med.sumdu.edu.ua/en/
Publisher Name	Sums'kii Derzhavnii Universitet, Medichnii Institut
Alternate Title(s)	Journal of Clinical and Experimental Medical Research
Abbreviated Alternate Title(s)	J. Clin. Exp. Med. Res.

Проте кількість наявної хімічної інформації, доступної для підтримки цієї роботи, є вражаючою

- Вона зростає з неймовірною швидкістю
- Складність інформації зростає, особливо в патентах
- Це має більш глобальний характер, ніж будь-коли



Original publication languages in CAS databases