



SciFinder

Searching for Science

Решения для химиков от CAS:
SciFinder, PatentPak, MethodsNow

Veli-Pekka Hyttinen
Minsk, 19.10.2017



CAS[®]

A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY



SCIFINDER[®]

A CAS SOLUTION

Chemical Abstracts Service (CAS) - подразделение Американского Химического Общества (ACS)

ACS, г. Вашингтон, США



CAS, г. Коламбус, США

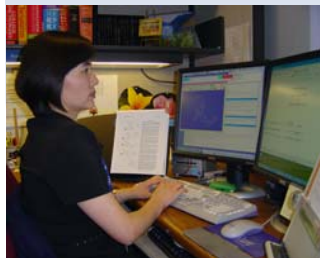


Ученые CAS анализируют, обобщают и делают доступной научную информацию коллегам по всему миру

Отбор
источников



Индексирование



Реакции



Структуры
Маркуша



Процессинг



Применение в базах данных CAS специально разработанной технологии **стандартизированного индексирования** обеспечивает высокое качество информации в результатах поиска.



CAS[®]

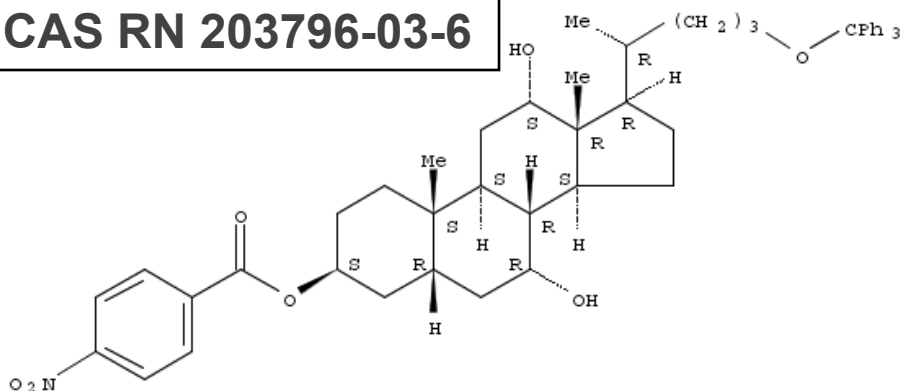
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

Сотрудники CAS находят химическую информацию и экономят Ваше время!

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,

CAS RN 203796-03-6



Absolute stereochemistry.



CAS®

A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

CAplus® – библиография 10,000+ журналов (185 стран) патенты из 63 ведомств	46+ млн. ссылок (5,000 ежедневно), Рефераты и индексирование с 1802 г., цитаты с 1997–
REGISTRY® – соединения Органические и неорганич. структуры, последовательности	133+ млн. малых молекул (20,000+ ежедневно), 67+ млн. Последовательностей, 7,0+ млрд. свойств
CASREACT® – реакции Структурные диаграммы, детали	98+ млн. реакций и синтезов с 1840г.
CHEMLIST® – регулируемая химия REACH, EINECS, US. Gov/Fed. Register	348 к регулируемых соединений с 1979 г.
CHEMCATS® – поставщики реактивов Химические каталоги	млн. соединений от поставщиков (28+ млн. уникальных CAS-номеров) с ценами
MARPAT® – структуры Маркуша 440k патентов, INPI с1961 г.	1,4+ млн.структур Маркуша (75 новых патентов ежедневно)
MEDLINE – библиография 5,200 биомедицинских журналов	25+ млн.библиографических NLM-ссылок с 1947 г.

Основные возможности SciFinder – мощного инструмента для поддержки научной деятельности в Вашей организации

133 млн.+

уникальных
органических
и неорганических
соединений

Самая обширная в
мире коллекция
малых молекул

46 млн.+

ссылок

+ интегрированный
доступ к 24 миллионам
ссылок из базы
данных MEDLINE®

98 млн.+

реакций

Почти в 2 раза
больше чем у
ближайшего
конкурента

63

**патентных
ведомств**

На 25% больше чем у
других
производителей

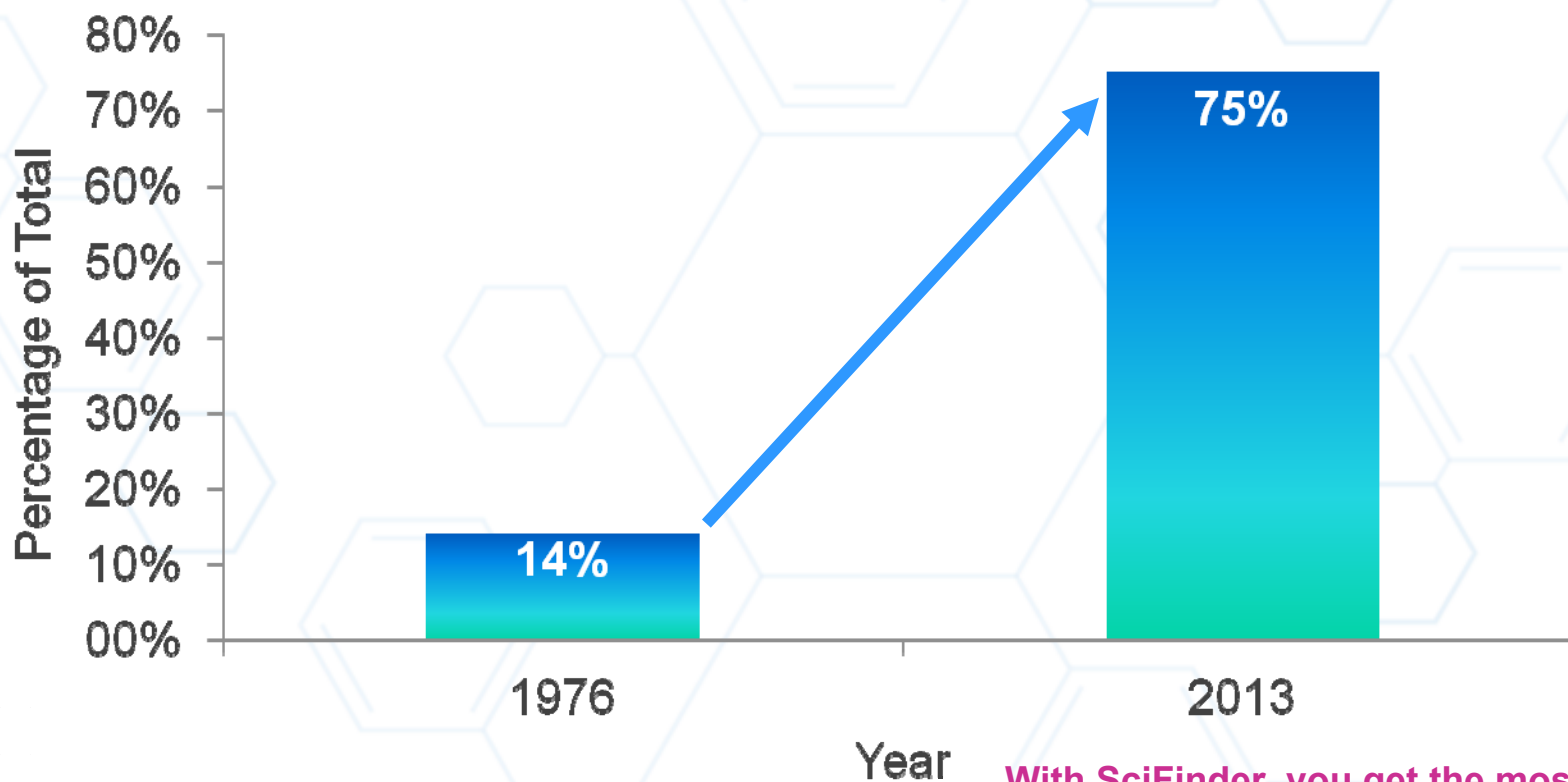


SCIFINDER®
A CAS SOLUTION

**Предоставляет
доступ к
максимальному
объему публичной
информации по
химии.**

Новые химические соединения все чаще впервые описываются в патентах

Процент новых соединений из патентов



With SciFinder, you get the most
comprehensive, timely patent data.

Максимальный охват азиатских патентов



CAS[®]
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

Эффективные инструменты интерфейса SciFinder

Stay current in
your field and
keep track of
competition

Quickly find and
analyze information
(research topic,
structure, reaction)

Share ideas with
colleagues and
collaborators

The screenshot displays the SciFinder web interface. At the top, there's a navigation bar with 'CAS Solutions', 'SciFINDER A CAS SOLUTION', and user options like 'Preferences', 'SciFinder Help', and 'Sign Out'. Below this is a secondary bar with 'Explore', 'Saved Searches', 'SciPlanner', and 'Welcome Veli-Pekka Hyttinen'. The main content area shows a search for 'Research Topic "COORDINATION COMPOUNDS" > references (85383)'. On the left, a sidebar under 'Analyze' shows filters for 'Sample Analysis' (Index Term), 'crystal structure' (≥ 5229), 'Molecular Structure' (≥ 5209), 'coordination compounds' (≥ 4865), 'Cluster compounds, coordinative' (≥ 1505), and 'Chemical compounds' (≥ 954). The main results list shows two entries: 1. 'Asymmetric Cycloaddition and Cyclization Reactions Catalyzed by Chiral N,N'-Dioxide-Metal Complexes' and 2. 'Zinc Metal-Organic Framework for Selective Detection and Differentiation of Fe(III) and Cr(VI) Ions in Aqueous Solution'. A pink arrow points from the 'coordination compounds' filter to the first result, and another pink arrow points from the 'Cluster compounds, coordinative' filter to the second result.



SciFINDER®
A CAS SOLUTION

Применение фильтров Categorize и Analyze облегчает поиск релевантной информации

Categorize

1. Select a heading and category.

Category Heading	Category
All	Substances in biology (221)
General chemistry	Animal pathology (69)
Biotechnology	Immunology (72)
Synthetic chemistry	Processes & systems (44)
Genetics & protein chemistry	Endocrinology (48)
Physical chemistry	Anatomy (27)
Polymer chemistry	Substances in adverse effects (16)
Biology	
Technology	
Analytical chemistry	
Environmental chemistry	

Biology > Immunology

2. Select index terms of interest.

Index Terms	Count
☐ Interferons	7
☐ Antibodies and Immunoglobulins	5
☐ Interferons, α	5
☐ Vaccines	5
☐ Interleukin 2	3
☐ Interleukin 4	3
☐ Leukotriene B4	3
☐ RANTES (chemokine)	3
☐ Spleen	3
☐ Tumor necrosis factor α	3
☐ Anti-HIV agents, vaccines	2
☐ CD4 antigens	2
☐ CXC chemokines	2
☐ Etanercept	2
☐ High throughput screening	2

SUBSTANCES

Get References Get Reactions Get Commercial Sources

Sort by: CAS Registry Number

0 of 1 Substance Selected

1. 28911-01-5

Analyze by:

- Target Indicators
- Bioactivity Indicators
- Commercial Availability
- Elements
- Reaction Availability
- Substance Role
- Target Indicators

Transport proteins (all) 1

Show More

C₁₇ H₁₂ Cl₂ N₄
4H-[1,2,4]Triazolo[4,3-a][1,4]benzodiazepine, 8-chloro-6-(2-chlorophenyl)-1-methyl-

Regulatory Information
Spectra
Experimental Properties



SciFINDER[®]
A CAS SOLUTION



PatentPak™

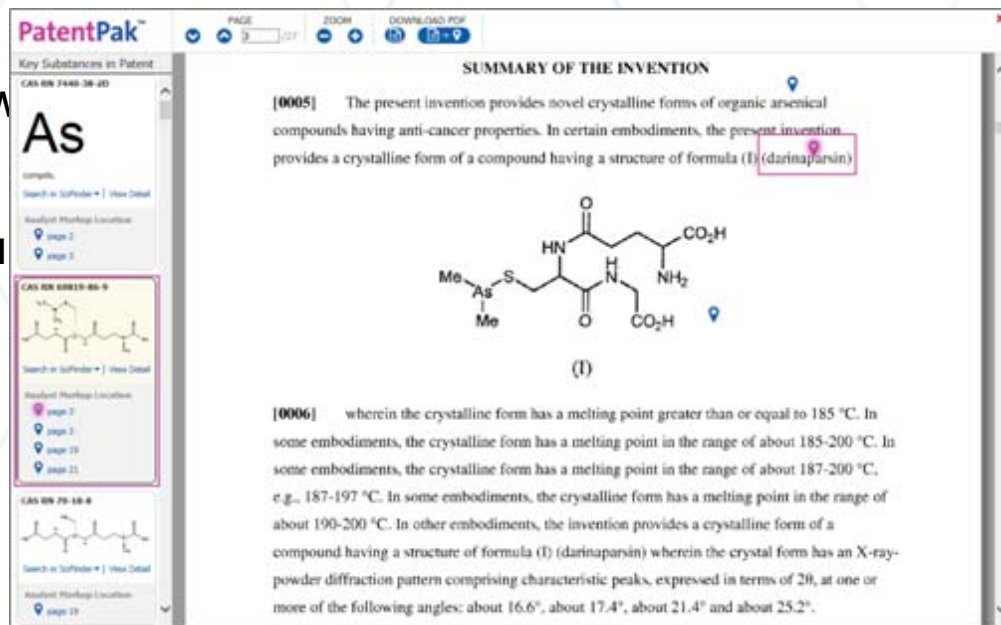
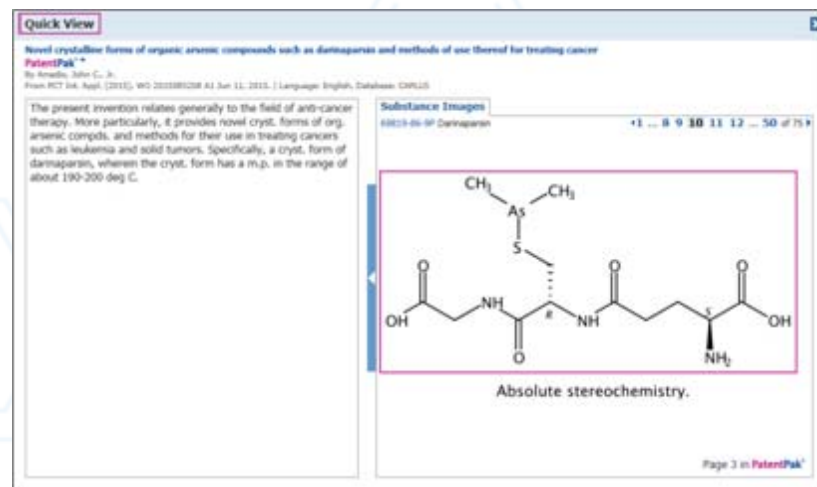
Патентное приложение для быстрого
поиска релевантной химической
информации в патентах, не выходя из
SciFinder!



Быстрый поиск релевантных химических соединений в патентах

- Постоянный доступ к **полным текстам патентов** из **основных патентных ведомств по всему миру**
- Семейства патентов на **разных языках**
- Поиск соединений
- **Интерактивный визуализатор** взаимосвязанный с SciFinder
- **Безопасный и конфиденциальный** патентный поиск
- **Ежедневное обновление** 12+ млн патентов из 31 стран

PatentPak™



PatentPak™

PAGE
123 / 163

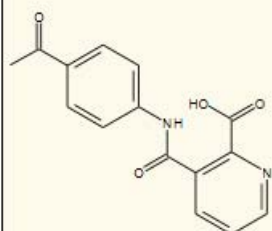
ZOOM
- +

DOWNLOAD PDF
[Icon] [Icon]

Key Substances in Patent

▼ page 123

CAS RN 497083-20-2

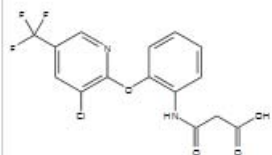


Search in SciFinder | View Detail

Analyst Markup Location

▼ page 123

CAS RN 321433-61-8



Search in SciFinder | View Detail

Analyst Markup Location

▼ page 123

15 yloxy)phenyl)methyl)acrylates, 2-(((3-chloro-5-(trifluoromethyl)pyridin-2-yloxy)phenyl)methyl)acrylonitriles, 3-(3-chloro-4-{[5-(trifluoromethyl)-2-pyridinyl]oxy}anilino)-3-oxopropanoic acid, Sethoxydim, Clethodim, 5-(Tetradecyloxy)-2-furoic acid, 2-[(2,6-Dichlorophenyl)amino]benzeneacetic acid, 2-[4-(4-Chlorophenoxy)phenoxy]propanoic acid, (RS)-2-[4-[3-chloro-5-(trifluoromethyl)-2-pyridinyl]oxy]phenoxy}propanoic acid, (RS)-2-[4-(6-chloro-1,3-benzoxazol-2-yloxy)phenoxy]propanoic acid, (RS)-2-[4-(2,4-dichlorophenoxy)phenoxy]propanoic acid, 20 (RS)-2-[4-[5-(trifluoromethyl)-2-pyridyloxy]phenoxy]propanoic acid, (RS)-2-[4-(6-chloroquinoxalin-2-yloxy)phenoxy]propanoic acid, (RS)-2-[4-(α , α , α -trifluoro-p-tolyloxy)phenoxy]propanoic acid, 5-([4,6-Dichlorotriazin-2-yl]amino)fluorescein hydrochloride, 3-[N-(4-acetylphenyl)carbomoyl]pyridine-2-Carboxylic acid, 3-(2-{[3-chloro-5-(trifluoromethyl)-2-pyridinyl]oxy}anilino)-3-oxopropanoic acid, L-ornithine-beta- 25 alanine, 2-Methyl-1-(3-morpholinopropyl)-5-phenyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid, Hippuric acid, Hippuryl-D-lysine, and hippuryl-L-phenylalanine.

2. The SHAL of claim 1, wherein said second ligand is a small organic molecule.

721980
268654

A1
A2

OCT 29, 2009
Jan 5, 2011

CA 2009-2721980
EP 2009-734156

Apr 21, 2009
Apr 21, 2009

SOURCE



METHODSNow™

A CAS SOLUTION

Презентация нового решения для поиска
и анализа информации в самой большой
в мире коллекции научных методов



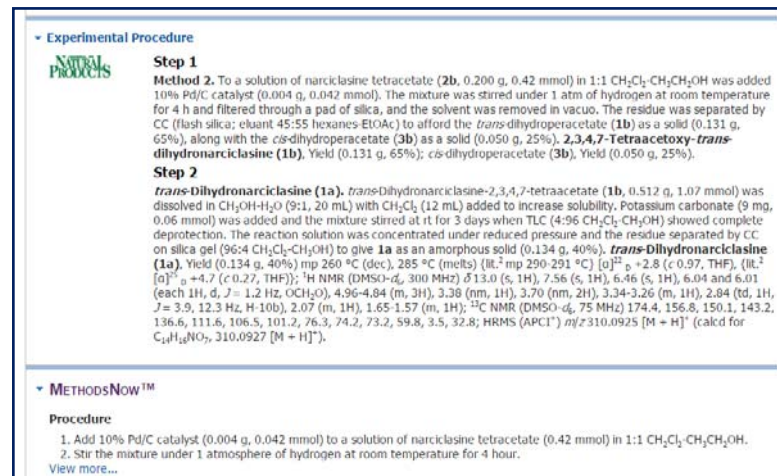
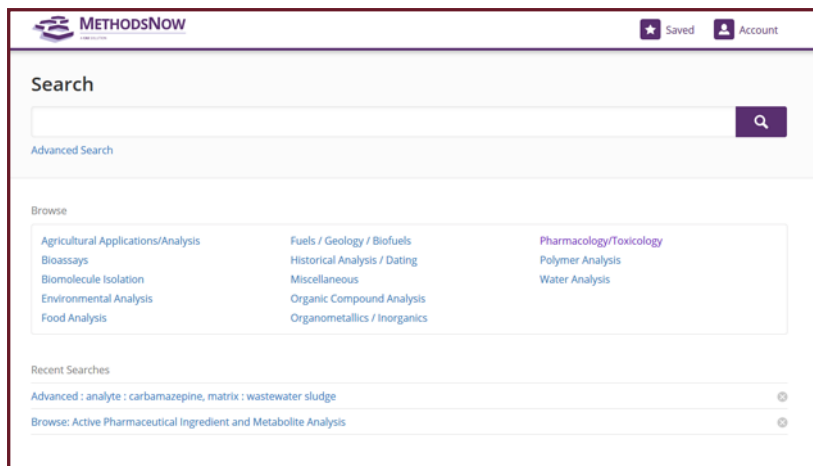
METHODSNow

A CAS SOLUTION



Отдельный Web-доступ

B SciFinder



METHODSNOW – Analysis

Укажите одно или несколько полей для поиска

**METHODSNOW**

A CAS SOLUTION



Saved



Account

[← Return to Home](#)

Advanced Search

Analyte



AND



Matrix



AND



Method Category



AND



Technique



AND



CAS Method Numbr



AND



Publication Name

[Add Search Criteria](#)

Clear



[← Return to Results](#)

Compare Protocols


[Expand All](#) | [Collapse All](#)

	1	2
Title	Analysis of Carbamazepine in Wastewater by Atmospheric pressure chemical ionization mass spectrometry	Analysis of Carbamazepine in Wastewater by Atmospheric pressure chemical ionization mass spectrometry
CAS Method Number	1-101-CAS-29149	1-101-CAS-27867
Method Category	Active Pharmaceutical Ingredient and Metabolite Analysis; Water / Wastewater / Sludge Analysis	Active Pharmaceutical Ingredient and Metabolite Analysis; Water / Wastewater / Sludge Analysis
Technique	Atmospheric pressure chemical ionization mass spectrometry	Atmospheric pressure chemical ionization mass spectrometry
Analyte	Carbamazepine	Carbamazepine
Matrix	Wastewater ; Wastewater treatment sludge	Wastewater ; Wastewater treatment sludge
Other Materials	Environmental cartridges; Glass-fiber (0.45mm); LazWell 96-well polypropylene plate cavities; Infrared (IR) laser diode (980 nm, 20 W, continuous).	Environmental cartridges; Glass-fiber (0.45mm); Stainless steel vessel (34 mL); LazWell 96-well polypropylene plate cavities; Infrared (IR) laser diode (980 nm, 20 W, continuous).
Equipment Used	Milli-Q/Milli-RO system, Millipore, Milford, MA, USA; Microwave Accelerated Reaction System, CEM Corporation, North Carolina, USA; Vacuum pump, Welch Rietschle Thomas, View All ▼	Milli-Q/Milli-RO system, Millipore, Milford, MA, USA; ASE extractor, 350, Dionex, Sunnyvale, CA, USA; Vacuum pump, Welch Rietschle Thomas, USA; LDTD-APCI ionization source, View All ▼
Source	Carbamazepine in municipal wastewater and wastewater sludge ; Ultrafast quantification by laser diode thermal desorption-atmospheric pressure chemical ionization View All ▼	Carbamazepine in municipal wastewater and wastewater sludge ; Ultrafast quantification by laser diode thermal desorption-atmospheric pressure chemical ionization View All ▼

METHODSNow – Synthesis

- Охват наиболее важных журналов по органическому синтезу, импакт-фактор и детальное описание методов синтеза: 4,2 млн. синтетических методов с 2000 г.
- Критерии включения журнала в базу данных:
 - Много реакций; известный и авторитетный журнал
 - Только реакции с протоколами
- Более 80 наиболее авторитетных химических журналов

Новые издатели

RSC

Elsevier

Wiley

Существующие издатели

ACS

Springer

Taylor&Francis

MethodsNow – Synthesis

- ◆ Исследуйте методы синтеза для реакций с бензодиоксолом (3099)

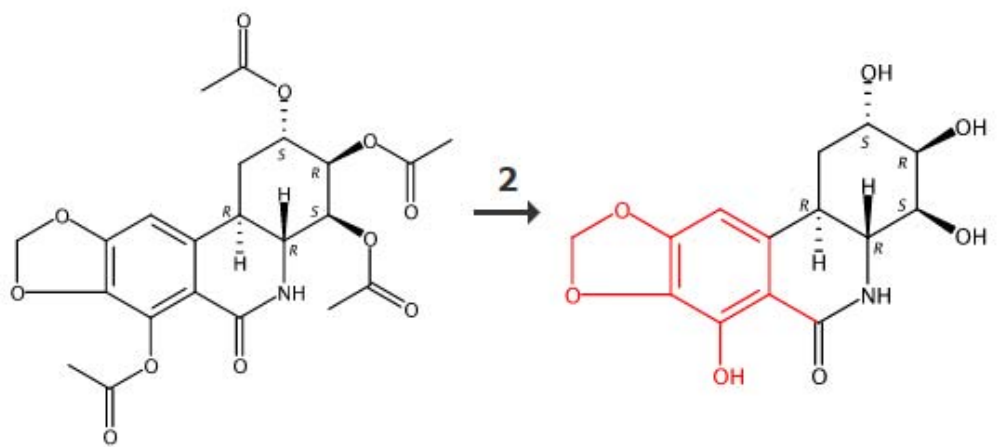
Procedure

MethodsNow

Antineoplastic Agents. 454. Synthesis of the Strong Cancer Cell Growth Inhibitors trans-Dihydronarciclasine and 7-Deoxy-trans-dihydron...

By Pettit, George R.; Ducki, Sylvie; Eastham, Stephen A.; Melody, Noeleen
 From Journal of Natural Products, 72(7), 1279-1282; 2009
 Published by American Chemical Society-American Society of Pharmacognosy

Reaction Steps **1** **2**



Products	[1,3]Dioxolo[4,5- <i>f</i>]phenanthridin-6(2 <i>H</i>)-one, 1,3,4,4a,5,11b-hexahydro-2,3,4,7-tetrahydroxy-, (2 <i>S</i> ,3 <i>R</i> ,4 <i>S</i> ,4a <i>R</i> ,11b <i>R</i>)-, 40%, CAS RN: 40042-05-5
Reactants	[1,3]Dioxolo[4,5- <i>f</i>]phenanthridin-6(2 <i>H</i>)-one, 2,3,4,7-tetrakis(acetyloxy)-1,3,4,4a,5,11b-hexahydro-, (2 <i>S</i> ,3 <i>R</i> ,4 <i>S</i> ,4a <i>R</i> ,11b <i>R</i>)-, CAS RN: 40042-07-7

Print/Export **Close**

MethodsNow – Synthesis

◆ MethodsNow Protocol

MethodsNow	
Reagents	Potassium carbonate, CAS RN: 584-08-7
Solvents	Water, CAS RN: 7732-18-5 Methanol, CAS RN: 67-56-1 Dichloromethane, CAS RN: 75-09-2
Procedure	1. Dissolve dihydronarciclasine-2,3,4,7-tetraacetate (1.07 mmol) in CH₃OH-H₂O (9:1, 20 mL) with CH₂Cl₂ (12 mL) to increase solubility. 2. Add potassium carbonate (9 mg, 0.06 mmol) to the reaction mixture. 3. Stir the mixture at room temperature for 3 days, when TLC (4:96 CH₂Cl₂-CH₃OH) shows complete deprotection. 4. Concentrate the reaction solution under reduced pressure. 5. Separate the residue by CC on silica gel (96:4 CH₂Cl₂-CH₃OH).
Scale	milligram
¹ H NMR	DMSO- <i>d</i> ₆ , 300 MHz δ 13.0 (s, 1H), 7.56 (s, 1H), 6.46 (s, 1H), 6.04 and 6.01 (each 1H, d, <i>J</i> = 1.2 Hz, OCH ₂ O), 4.96-4.84 (m, 3H), 3.38 (nm, 1H), 3.70 (nm, 2H), 3.34-3.26 (m, 1H), 2.84 (td, 1H, <i>J</i> = 3.9, 12.3 Hz, H-10b), 2.07 (m, 1H), 1.65-1.57 (m, 1H).
¹³ C NMR	DMSO- <i>d</i> ₆ , 75 MHz 174.4, 156.8, 150.1, 143.2, 136.6, 111.6, 106.5, 101.2, 76.3, 74.2, 73.2, 59.8, 3.5, 32.8.
[α] _D ²⁰	[α] _D ²² +2.8 (c0.97, THF), [α] _D ²⁵ +4.7 (c0.27, THF).
HRMS	APCI ⁺ <i>m/z</i> 310.0925 [M + H] ⁺ (calcd for C ₁₄ H ₁₆ NO ₇ , 310.0927 [M + H] ⁺).
State	amorphous solid.
CAS Method Number	3-352-CAS-1051749

Print/Export

Close