

# Індексування та пошук науково-технічної інформації на прикладі ресурсної бази CAS

Тетяна Хрістова

Account Consultant

Eastern Europe & South Caucasus region

Chemical Abstracts Service

[tkhristova@acs-i.org](mailto:tkhristova@acs-i.org)

## Сьогоднішнє обговорення

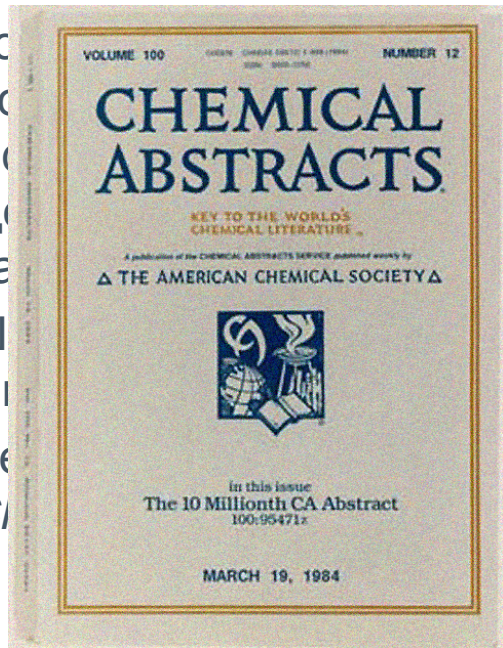
- CAS є світовим авторитетом для хімічної інформації...
  - про CAS
- ... що прискорює відкриття, об'єднуючи найширшу колекцію наукових даних...
  - Бази даних CAS
- ... з найбільш доступним і зручним набором інструментів аналізу та науково-дослідні послуги

# Chemical Abstracts Service

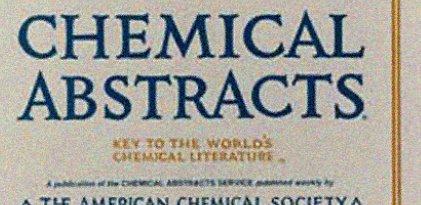
Ведуче глобальне джерело хімічної інформації для наукових і патентних досліджень



# CAS провідне світове джерело хімічної інформації для наукових і патентних досліджень



# Chemical Abstracts Service (1907 – 2010)

- 

- Більш ніж 1,400 співробітників - включаючи вчених CAS, які володіють 50 мовами
  - Аналізуються і 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



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

Вибір  
джерела



Індексування  
документів



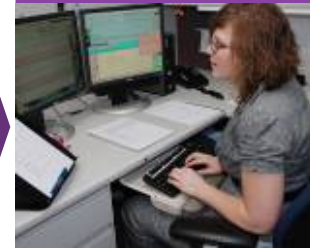
Індексування  
сполук



Індексування  
реакцій



Обробка



# SciFinder дозволяє отримати величезну кількість інформації в різних областях хімії та суміжних наук



Типи першоджерел -  
44% не є журналами



Мова першоджерел - 40% не опубліковані англійською

# 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





**CASSI**<sup>SM</sup>  
A CAS SOLUTION



CAS Source Index (CASSI) Search Tool

Displaying Record for Publication: [Visnik Kiivs'kogo Universitetu: Biologiya](#)

Displaying Record for Publication: [Visnik Kiivs'kogo Universitetu: Biologiya](#)

Більш ніж 100  
українських  
журналів

Entry Type	Active Serial
Title	<a href="#">Visnik Kiivs'kogo Universitetu: Biologiya</a>
Abbreviated Title	<a href="#">Visn.</a> Kiiv. Univ.: Biol.
Translated Title	Bulletin of Kiev University: Biology
CODEN	VKSBAM
ISSN	0453-8595
Language of Text	Ukrainian
Summaries In	Russian
History	n1 1958+

Publisher Name	<a href="#">Kharkivs'kii Natsional'nii Universitet im. V. N. Karazina</a>
Alternate Title(s)	Biophysical Bulletin
Abbreviated Alternate Title(s)	Biophys. Bull.
Publication Title	<a href="#">Biologicheskaya Nauka v Universitetakh i Pedagogicheskikh Institutakh Ukrainy za 50 Let, Materialy Mezhevuzovskoi Respublikanskoi Konferentsii</a>



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

Вибір  
джерела



Індексування  
документів



Індексування  
сполук



Індексування  
реакцій



Обробка



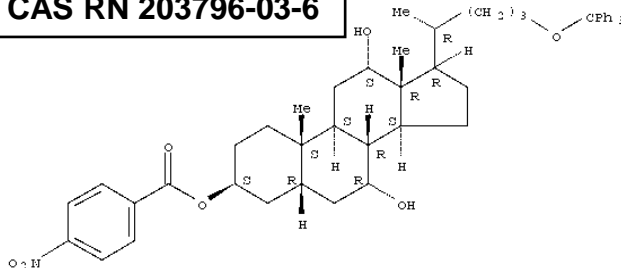
Стандартизоване індексування в базах даних CAS забезпечує послідовні та всебічні результати пошуку.

# CAS вчені займаються пошуком інформації та заощаджують час!

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 NaHCO<sub>3</sub> solution followed by extraction with EtOAc (3x50 mL). The combined extracts were washed with brine once and dried over anhydrous Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. The desired product (2.72 g, 85% yield) was obtained as white powder after SiO<sub>2</sub> chromatography (Et<sub>2</sub>O/hexanes 1:2). m.p. 207-209 °C.; IR (KBr) 3434, 3056, 2940, 2868, 1722, 1608, 1529, 1489, 1448, 1345 cm<sup>-1</sup>; <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 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); <sup>13</sup>C NMR (CDCl<sub>3</sub>, 75 MHz) δ 164.21, 150.56, 144.70, 136.79, 130.77, 64.22, 47.79, 46.79, 42.1, 28.74, 27.71, 26.85, 26.3 (thioglycerol+Na<sup>+</sup> matrix)

CAS RN 203796-03-6



Absolute stereochemistry.



# Вчені CAS обробляють наукову інформацію, використовуючи стандартизовану термінологію, щоб допомогти дослідникам швидко знаходити релевантні результати пошуку в SciFinder

## Indexing

Electric Phenomena (Section76-3)

## Concepts

Transparent films

electric conductors; low-temp., high-performance soln.-processed metal oxide thin-film transistors formed by a sol-gel on chip process and application to LD and displays

Amorphous materials	Drain current
Electric current-potential relationship	Electroluminescent devices
	Electroluminescent display devices
Gate potential	Hydrolysis
MOS devices	Semiconductor device fabrication
Sol-gel processing	Sputtering
Thin film transistors	Transistors

low-temp., high-performance soln.-processed metal oxide thin-film transistors formed by a sol-gel on chip process and application to LD and displays

## Substances

1312-43-2P Indium oxide (In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)  
 1314-13-2P Zinc oxide (ZnO), properties  
 12024-21-4P Gallium

low-temp., high-performance transistors formed by LD and displays

Properties; Synthetic use; Preparation; Use

4452-61-3  
 118240-53-2  
 129918-15-6

low-temp., high-performance transistors formed by LD and displays

Індексування в інших пошукових сервісах може бути

- непередбачуваним
- менш деталізованим
- не існувати

**SUBSTANCE DETAIL** | Get References | Get Reactions | Get Commercial Sources | Send to SciPlanner

Return | Previous | Next

**48. CAS Registry Number 50-23-7**

~55.285 | ~205

**C<sub>21</sub>H<sub>30</sub>O<sub>5</sub>**  
 Pregnen-4-ene-3,20-dione, 11,17,21-trihydroxy-, (11β)-

**Molecular Weight**  
 362.46

**pKa (Predicted)**  
 Value: 12.47±0.70 | Condition: Most Acidic Temp: 25 °C

**Melting Point (Experimental)**  
 Value: 217-220 °C (decomp)

**Boiling Point (Predicted)**  
 Value: 566.4±50.0 °C | Condition: Press: 760 Torr

**Density (Experimental)**  
 Value: 1.4 g/cm<sup>3</sup>

**Other Names**  
 Cortisol (8CI)  
 11β,17,21-Trihydroxypregnen-4-ene-3,20-dione  
 11β,17,21-Trihydroxyprogesterone  
 11β,17β,21-Trihydroxypregnen-4-ene-3,20-dione  
 11β-Hydroxycortisone  
[View more...](#)

**Absolute stereochemistry.**

# Фільтри SciFinder полегшують пошук релевантної інформації

## Categoryize

1. Select a heading and category.

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

Biology > Immunology

2. Select index terms of interest.

Index Terms	Selected Terms
<b>Select All</b> <b>Deselect All</b>	
<input type="checkbox"/> Interferons 7	
<input type="checkbox"/> Antibodies and Immunoglobulins 5	
<input type="checkbox"/> Interferons, $\alpha$ 5	
<input type="checkbox"/> Vaccines 5	
<input type="checkbox"/> Interleukin 2 3	
<input type="checkbox"/> Interleukin 4 3	
<input type="checkbox"/> Leukotriene B4 3	
<input type="checkbox"/> RANTES (chemokine) 3	
<input type="checkbox"/> Spleen 3	
<input type="checkbox"/> Tumor necrosis factor $\alpha$ 3	
<input type="checkbox"/> Anti-HIV agents, vaccines 2	
<input type="checkbox"/> CD4 antigens 2	
<input type="checkbox"/> CXC chemokines 2	
<input type="checkbox"/> Etanercept 2	
<input type="checkbox"/> High throughput screening 2	

## SUBSTANCES

Get References   Get Reactions   Get Commercial Sources

Sort by: CAS Registry Number

Analyze   Refine

Analyze by: Target Indicators

- Bioactivity Indicators
- Commercial Availability
- Elements
- Reaction Availability
- Substance Role
- Target Indicators
- Transport proteins (all) 1

Show More

0 of 1 Substance Selected

1. **28911-01-5**

~2061   ~34

**C<sub>17</sub> H<sub>12</sub> Cl<sub>2</sub> N<sub>4</sub>**  
4H-[1,2,4]Triazolo[4,3-a][1,4]benzodiazepine, 8-chloro-6-(2-chlorophenyl)-1-methyl-

Regulatory Information  
Spectra  
Experimental Properties

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

Вибір  
джерела



Індексування  
документів



Індексування  
сполук



Індексування  
реакцій



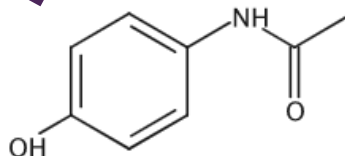
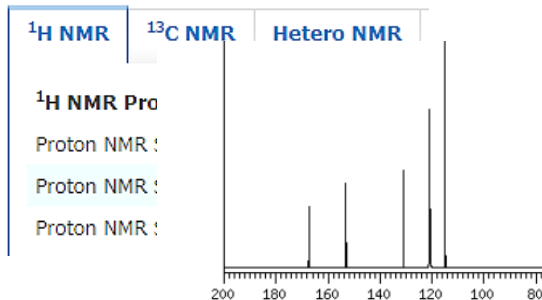
Обробка



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

# Що відомо про цю речовину?

## EXPERIMENTAL SPECTRA



CAS Registry Number 103-90-2

~28,599 ~162

**C<sub>8</sub> H<sub>9</sub> N O<sub>2</sub>**  
Acetamide, *N*-(4-hydroxyphenyl)-

## EXPERIMENTAL PROPERTIES

Biological	Chemical	Density	Flow and Diffusion
Density Properties		Value	
Density		1.40 g/cm <sup>3</sup>	
Density		1.30 g/cm <sup>3</sup>	
Density		1.294 g/cm <sup>3</sup>	

### Other Names

Acetanilide, 4'-hydroxy- (7CI,8CI)  
*N*-(4-Hydroxyphenyl)acetamide  
4-(Acetylamino)phenol  
4-(*N*-Acetylamino)phenol  
4-Acetamidophenol  
4-Acetaminophenol  
4-Hydroxyacetanilide  
4'-Hydroxyacetanilide



**SCIFINDER<sup>®</sup>**  
A CAS SOLUTION

# Розумний пошук в SciFinder



- ☐ Інтелектуальне індексування
  - ✓ синоніми: cancer → e.g. tumor
  - ✓ різні словоформи: freeze → frozen
  - ✓ однина і множина: mouse → mice
  - ✓ аббревіатура: HPLC
  - ✓ скорочення: solvable → solv
- ☐ Альтернативні варіанти написання



# SciFinder економить ваш час, забезпечуючи вас цінною інформацією для просування вашого дослідження



Дані з жовтня 2017

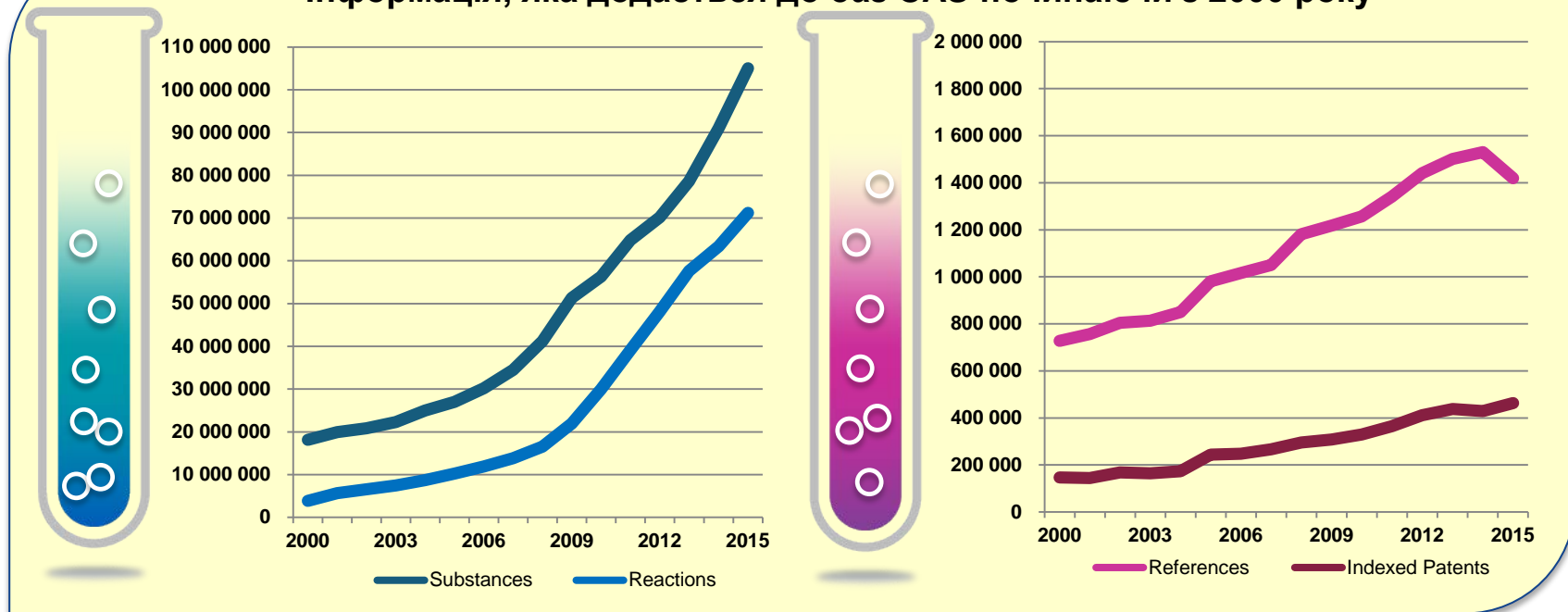


**SciFinder®**  
A CAS SOLUTION



# Швидкий ріст наукової інформації в базах CAS

Інформація, яка додається до баз CAS починаючи з 2000 року



# На відміну від своїх конкурентів, CAS включає патенти на багатьох мовах з покращеними перекладами

## 9. Process for the preparation of favipiravir

Quick View

PATENTPAK

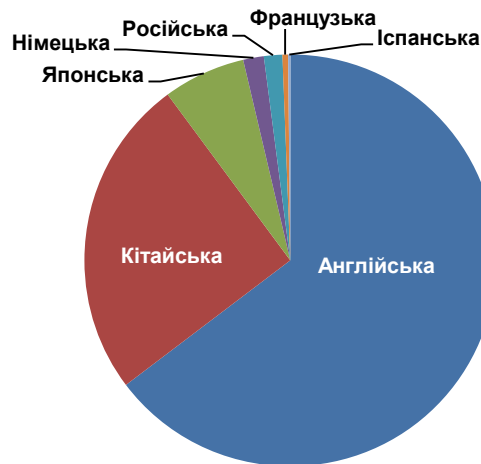
By Bao, Jinyuan; H  
From Faming Zhua

Patent No.	Kind	Language
CN 104496917	A	Chinese

qing

A 20150408. | Language: Chinese, Database: CAPLUS

The invention relates to process for the prepn. of favipiravir. For example, favipiravir was pre bromopyrazine-2-carboxylic acid to afford Me 3-amino-6-bromopyrazine-2-carboxylate, which underwent and fluorination to afford Me 3-(benzyloxy)-6-fluoropyrazine-2-carboxylate, which underwent debenzylatio



Мова першоджерел - 40% не опубліковані англійською

(19) 中华人民共和国国家知识产权局



(12) 发明专利申请



(10) 申请公布号 CN 104496917 A

(43) 申请公布日 2015.04.08

(21) 申请号 201410709559.5

(22) 申请日 2014.12.15

(71) 申请人 南京华威医药科技发展有限公司

地址 210012 江苏省南京市仙林大学城纬地路9号

(72) 发明人 毛金超 黄辉 梅玉伟 张孝清

(51) Int. Cl.

C07D 241/24(2006.01)

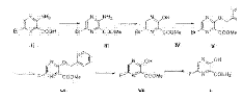
权利要求书(2页) 说明书(6页)

(54) 发明名称

一种西拉韦的合成方法

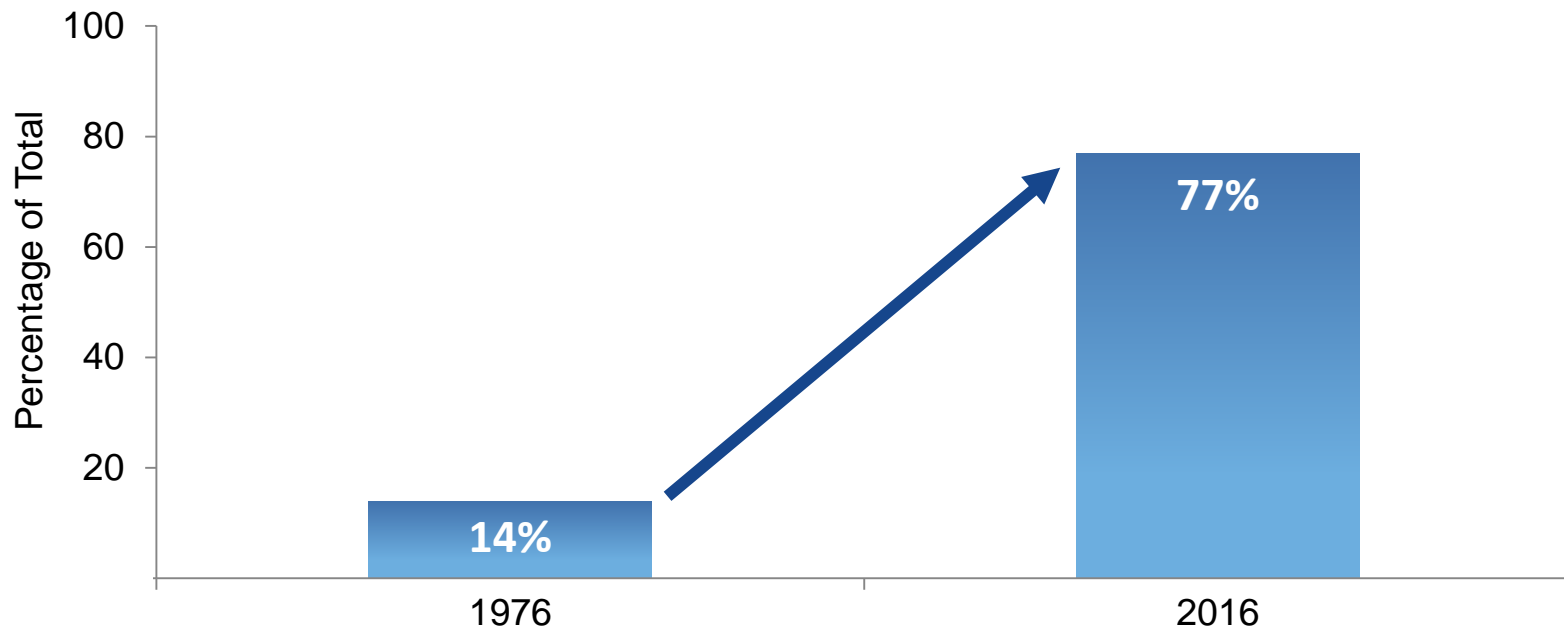
(57) 摘要

本发明属于药物化学领域,具体涉及一种法西拉韦的合成方法。该方法是:以式(II)为原料,经过羧基保护生成化合物(III),在浓硫酸和亚硝酸钠的作用下经重氮水解反应生成化合物(IV),然后经脱羧反应生成化合物(V),然后在氯化钾和四丁基氟化铵的作用下生成化合物(VI),脱羧基保护基生成化合物(VII),然后加入氯化氢进行氯化反应生成法西拉韦(式I)。本发明提供的方法反应周期短,操作简便,生产成本低,产品质量好,适合工业化生产。



# Все частіше нові сполуки вперше публікуються в патентах

## Відсоток нових сполук у патентах



# Відстежуйте релевантні сполуки в патентах

- Миттєвий доступ до повнотекстових патентів від основних патентних бюро по всьому світу
- Патентне сімейство охоплено на кількох мовах
- Відображення розташування сполук
- Інтерактивний переглядач із вбудованою функцією пошуку в SciFinder
- Щоденні оновлення



**Quick View**

Novel crystalline forms of organic arsenic compounds such as darinasarin and methods of use thereof for treating cancer

**PatentPAK™**  
By Amelio, John C., Jr.  
From PCT Int. Appl. (2015), WO 2015/02019 A2 Jun 11, 2015. | Language: English, Database: CAPUS

The present invention relates generally to the field of anti-cancer therapy. More particularly, it provides novel crystal forms of organic arsenic compounds and methods for their use in treating cancers such as leukemia and solid tumors. Specifically, a crystal form of darinasarin, wherein the crystal form has a m.p. in the range of about 190-200 deg C.

**Substance Images**  
05219-00-9F Darinasarin

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 ... 50 of 75

Absolute stereochemistry.

**PATENTPAK™**  
A CAS SOLUTION

Key Substances in Patent  
CAS RN 7440-38-2D

**As**  
compd.  
Search in SciFinder | View Detail

Analyst Markup Location  
page 2  
page 3

CAS RN 69819-86-9

Search in SciFinder | View Detail

Analyst Markup Location  
page 3  
page 3  
page 19  
page 21

CAS RN 70-18-8

Search in SciFinder | View Detail

Analyst Markup Location  
page 19

**[0005]** The present invention provides novel crystalline forms of organic arsenical compounds having anti-cancer properties. In certain embodiments, the present invention provides a crystalline form of a compound having a structure of formula (I) (darinasarin)

(I)

**[0006]** wherein the crystalline form has a melting point greater than or equal to 185 °C. In some embodiments, the crystalline form has a melting point in the range of about 185-200 °C. In some embodiments, the crystalline form has a melting point in the range of about 187-200 °C, e.g., 187-197 °C. In some embodiments, the crystalline form has a melting point in the range of about 190-200 °C. In other embodiments, the invention provides a crystalline form of a compound having a structure of formula (I) (darinasarin) wherein the crystal form has an X-ray-powder diffraction pattern comprising characteristic peaks, expressed in terms of 2θ, at one or more of the following angles: about 16.6°, about 17.4°, about 21.4° and about 25.2°.

**[0007]** In some embodiments, the X-ray powder diffraction pattern of the crystalline form of a compound having a structure of formula (I) (darinasarin) also has characteristic peaks, expressed in terms of 2θ, at one or more of the following angles: about 14.4°, about 19.3°, about 22.0°, about 23.3° and about 25.0°. In some embodiments, the X-ray powder diffraction pattern of the crystalline form of a compound having a structure of formula (I) (darinasarin) has



# SciFinder дозволяє досліджувати і аналізувати зміст баз CAS, що допомагає бути більш ефективними в роботі

Залишайтеся  
в курсі  
останніх  
досліджень

Ви зможете  
швидко знайти  
та  
проаналізувати  
інформацію

Поділіться  
ідеями з  
колегами та  
співробітниками

The screenshot displays the SciFinder web interface. At the top, there's a navigation bar with 'CAS Solutions', 'SciFINDER A CAS SOLUTION', 'Preferences', 'SciFinder Help', and 'Sign Out'. Below this is a secondary navigation bar with 'Explore', 'Saved Searches', 'SciPlanner', 'Save', 'Print', and 'Export'. A purple box highlights the 'Keep Me Posted "Hydrogenation of Alkenes"[Apr 16, 2016] (3)' link. The main content area is divided into 'REFERENCES' and 'Analyze' sections. The 'Analyze' section has a dropdown menu for 'Analyze by:' with 'Author Name' selected. A list of authors is shown: Martinez Ruben M (2), Obradors Carla (2), Shenvi Ryan A (2), Hanninen Mikko M (1), and Hayes Paul G (1). The 'REFERENCES' section shows two results, both titled '1. Ph(i-PrO)SiH2: An Exceptional Reductant for Metal-Catalyzed Hydrogen Atom Transfers'. The first result includes a chemical reaction scheme showing the hydrogenation of an alkene using a silane reagent, with a catalyst [Mn] or [Fe]. The second result is a duplicate of the first. A purple box highlights the 'Send to SciPlanner' button in the top right corner of the results area.

# Організації в усьому світі покладаються на SciFinder





SciFinder.mp4

**Тетяна Хрістова**  
Account Consultant  
Eastern Europe & South Caucasus region  
Chemical Abstracts Service  
[TKhristova@acs-i.org](mailto:TKhristova@acs-i.org)

Connect with SciFinder



*Дякую за увагу!*