

CAS SCIFINDER[®]

СВЯЗУЮЩЕЕ ЗВЕНО МЕЖДУ ИССЛЕДОВАНИЯМИ И ИННОВАЦИЯМИ — ПРАВИЛЬНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

Благодаря постоянному совершенствованию технологий инновации развиваются стремительными темпами. Для вашей важной работы нужны надежные решения, способные быстро эволюционировать вместе с вашими идеями.

CAS 
A division of the
American Chemical Society

Если вам необходимо увеличить поток инновационных идей, чтобы соответствовать требованиям инвесторов, быть в курсе текущей ситуации в отрасли и в конкуренции, или найти новые возможности для бизнеса, использование CAS SciFinder[®] ускорит процесс поиска актуальной и практичной информации.

Благодаря признанной во всем мире коллекции данных CAS Content Collection™ и самой совершенной и релевантной в отрасли системе поиска платформа CAS SciFinder[®] позволяет быстрее и точнее находить нужную информацию.

Возможности платформы CAS SciFinder[®] выходят далеко за рамки химии. Поделитесь со своими коллегами из области биологических наук информацией о нашей библиотеке медико-биологической литературы из PubChem и новейших возможностях поиска биопоследовательностей.

ИННОВАЦИИ

84 %

исследователей подтверждают, что применение CAS SciFinder[®] помогает им быть более изобретательными, чем при работе с другими решениями.¹

СКОРОСТЬ

77 %

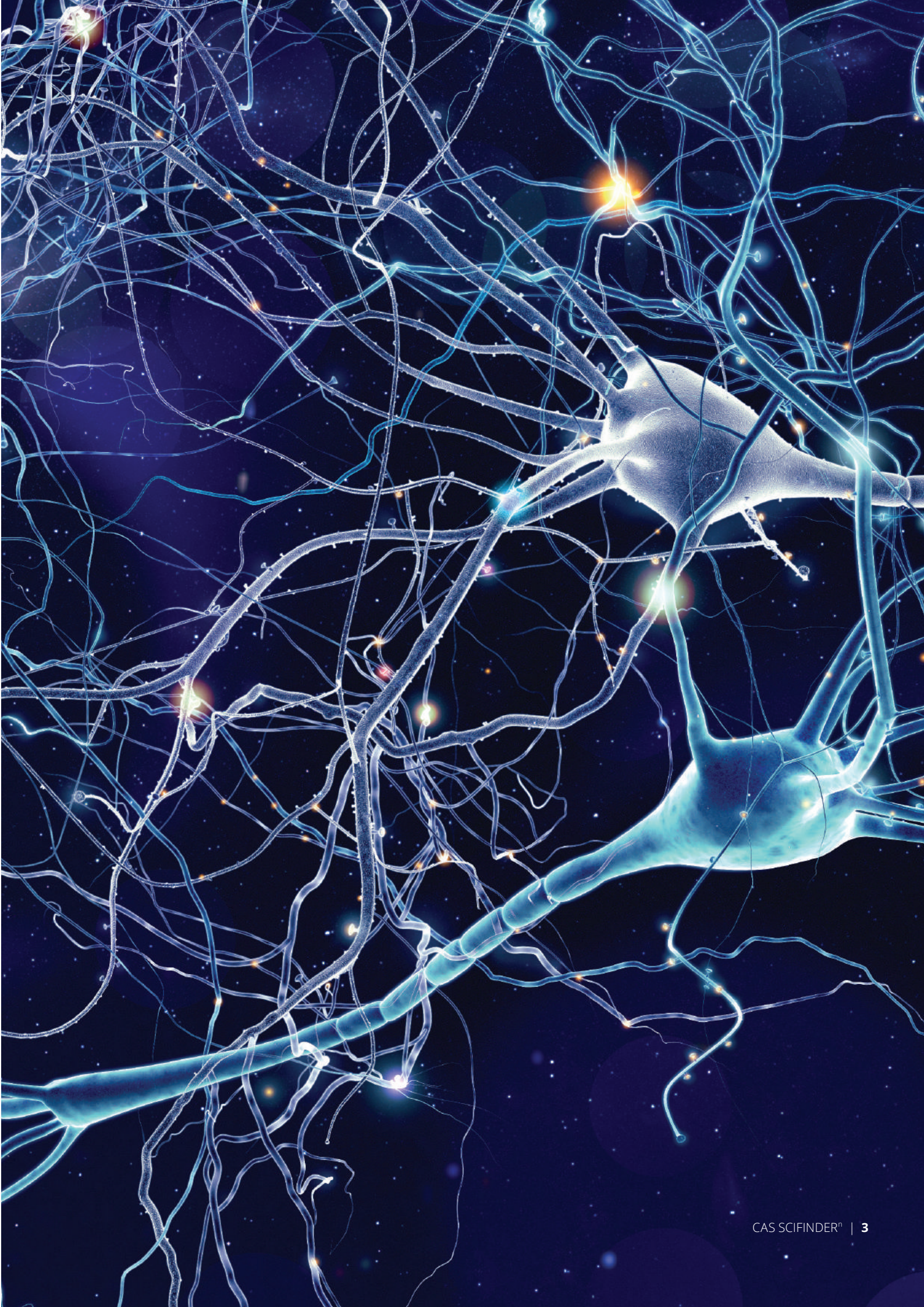
исследователей согласны, что применение CAS SciFinder[®] помогает им работать быстрее, чем при использовании других решений.¹

УВЕРЕННОСТЬ

84 %

исследователей согласны, что применение CAS SciFinder[®] помогает им работать увереннее, чем при использовании других решений.¹

1. По данным исследования производительности платформы CAS SciFinder[®] в 2020 г.





Узнайте, почему исследователи со всего мира доверяют платформе CAS SciFinder[®]

Из-за увеличения объема научной информации поиск необходимых взаимосвязей в хаосе данных может стать трудной задачей. Будучи рядом с вами, платформа CAS SciFinder[®] помогает вам быстрее найти необходимые данные, пока вы работаете над своим исследованием, изучая литературу, последовательности, патенты, и разрабатывая планы экспериментов.

«Платформа CAS SciFinder[®] — важный инструмент, который используется ежедневно.»

Руководитель отдела исследований и разработок, федеральное правительство
TechValidate, TVID: 85F-817-64A

«Я не занимаюсь “химическими исследованиями” в академическом смысле этого слова. Платформа CAS SciFinder[®] является для меня бизнес-инструментом. Ни один инструмент, кроме CAS SciFinder[®], и ни набор инструментов не удовлетворяют мои потребности. Нигде больше нет (практически всей) необходимой мне информации, расположенной в одном месте с привычным, удобным интерфейсом. Проще говоря, платформа CAS SciFinder[®] — необходимый инструмент.»

Бизнес-консультант, фармацевтическая отрасль
TechValidate, TVID: 527-273-919

«Платформа CAS SciFinder[®] необходима моему исследованию, как воздух... Вы не узнаете, насколько она хороша, пока не начнете ей пользоваться.»

Марсело Д. Преите (Marcelo D. Preite)
Преподаватель, uc.cl
TechValidate, 910-7F8-D86



«Платформа CAS SciFindern позволила ускорить и упростить все рабочие процедуры, начиная от поиска реакций и заканчивая приобретением реагентов по наиболее выгодным на рынке ценам.»

Митчелл Чайлдс (Mitchell Childs)
Ученый, KalVista Pharmaceuticals Ltd.
TechValidate, TVID: 055-579-6D5

«Там есть практически все, что мне нужно знать о химических веществах, включая информацию о синтезе, список источников, сведения о патентах и т. д.»

руководитель отдела исследований и разработок,
научно-исследовательский институт
TechValidate, TVID: FF7-451-5FE

«Я пользуюсь инструментами CAS уже несколько десятилетий, и текущая версия платформы CAS SciFinderⁿ просто фантастическая.»

Эрик Шварц (Eric Schwartz)
Вице-президент/директор отдела
исследований и разработок,
Cedilla Therapeutics TechValidate,
TVID: A90-E90-C0B

«Платформа CAS SciFinderⁿ незаменима.»

Ученый, крупная химическая компания
TechValidate, TVID: F47-492-D94

«Платформа CAS SciFinderⁿ позволила мне собрать большую коллекцию возможных объектов для синтеза на основе новизны, физических свойств и доступности исходного сырья.»

Джон Пауэлл (John Powell)
Руководитель отдела исследований и разработок, TIAX LLC
TechValidate, TVID: A76-D9E-052



Поиск и обзор литературных источников

Платформа CAS SciFinder[®] вдвое сокращает время, необходимое для поиска и обзора литературных источников ¹

В современных условиях конкуренции вашей исследовательской группе необходимо быстро получать информацию и генерировать идеи. Вы не можете позволить себе тратить часы на просмотр ненужной информации в патентах и журналах. Именно для этого мы разработали платформу CAS SciFinder[®] с наиболее релевантной для науки системой поиска в отрасли. Она не просто быстрее ищет данные, но делает поиск более интеллектуальным, предугадывает ваши потребности в информации и ускоряет рабочий процесс. Чтобы вы всегда получали актуальную информацию о зарегистрированных в любой стране мира патентах и могли ознакомиться со статьями из научных журналов по различным дисциплинам, каждый день коллекцию CAS Content пополняют данные из различных научных источников. Ученые-аналитики CAS извлекают и проверяют ключевую информацию и множество данных из каждой публикации, устанавливая связи и выявляя тенденции благодаря объединению возможностей профессионального анализа специалистами и самых современных технологий обработки данных.

¹. По данным исследования производительности платформы CAS SciFinder[®] в 2020 г.



Результаты поиска литературных источников отображаются в удобном для понимания формате с полезными фильтрами, включая возможность исключить некоторые критерии, что позволяет быстрее найти необходимую информацию.

The screenshot shows the 'References' section of a search results page. The search query is 'novel coronavirus nonpeptide inhibitors'. The results are sorted by 'Relevance' and shown in 'Partial Abstract' view. The first result is titled 'Structure-Based Drug Design and Structural Biology Study of Novel Nonpeptide Inhibitors of Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus Main Protease'. It includes a chemical structure of a nonpeptide inhibitor (labeled 3) and a 3D molecular model of the SARS-CoV main protease (M^{pro}) with the inhibitor bound. The abstract text describes the study's methodology and findings. The second result is partially visible, titled 'Structure-Based Design, Synthesis, and Biological Evaluation of a Series of Novel and Reversible Inhibitors for the Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus Papain-Like'.

Интерактивная карта цитирования позволяет отследить последовательность составления документов, важных для вашего исследования, чтобы вы ничего не упустили.


The screenshot displays the 'Citation Map' for the article 'Glimepiride: a review of its use in the management of type 2 diabetes mellitus' by Langtry, Heather D.; Balfour, Julia A. The map is a network diagram where the root document is at the center, and lines radiate outwards to other documents that cite it. A tooltip for one of the citing documents is shown, titled 'Impact of obesity on drug metabolism and elimination in adults and children' by Brill, Margreke J. E.; Diepstraten, Jeroen; van Rongen, Anne; van Kralingen, Simone; van den Anker, John N.; Knibbe, Catherine A. J. The map includes a 'Citation Map Key' indicating that purple dots represent documents cited by the root document, and blue dots represent references that cite the root document. The interface also features a filter sidebar on the left and a 'Feedback' button on the right.



Поиск данных о веществах и реакциях

Платформа CAS SciFinder[®] предоставляет доступ к самому надежному в мире ресурсу с информацией о веществах — реестру CAS REGISTRY[®]

Ищете самую актуальную и точную информацию о веществах и химических реакциях, чтобы быстро и аргументированно обогатить свои исследования ключевыми инсайтами? Глобальная сеть ученых-экспертов ежедневно отбирает и объединяет данные из различных научных журналов, патентов, диссертаций, ключевых справочников и делает их полностью доступными благодаря применению инновационной технологии поиска CAS SciFinder[®]. Эту платформу можно назвать единственным достоверным источником для точной идентификации химического вещества и связанных с ним химических структур, названий, регуляторной информации и свойств, в том числе регистрационного номера CAS[®], а также схем химических реакций, пошагового описания экспериментальных процедур, детализированных условий и данных по выходам продуктов.

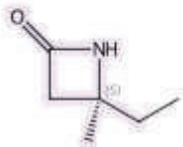


Вы можете ознакомиться с основными физическими свойствами вещества, а также в один щелчок мыши найти список литературы, перечень реакций и поставщиков.

Substances (3,884) Sort: Relevance View Partial

References Reactions Suppliers Save

1821732-51-7
View Detail

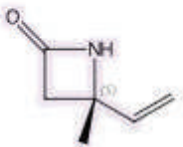


Absolute stereochemistry shown

$C_6H_{11}NO$
2-Azetidinone, 4-ethyl-4-methyl-, (4S)-

0 References 0 Reactions 1 Supplier

39155-99-2
View Detail

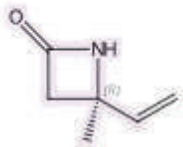


Absolute stereochemistry shown

C_6H_9NO
2-Azetidinone, 4-ethenyl-4-methyl-, (4S)-

1 Reference 0 Reactions 1 Supplier

39155-98-1
View Detail



Absolute stereochemistry shown

C_6H_9NO
2-Azetidinone, 4-ethenyl-4-methyl-, (4R)-

1 Reference 0 Reactions 3 Suppliers

28982-78-7
View Detail

45652-80-0
View Detail

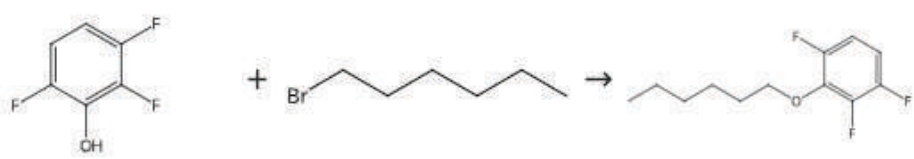
27063-09-8
View Detail

Здесь выделены основные химические компоненты реакций и представлена дополнительная информация о них.

Reactions (2) View Collapsed

References Save

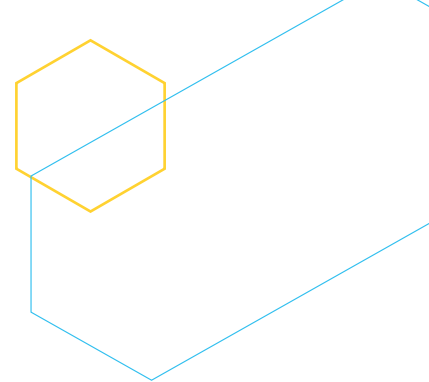
Scheme 1 (1 Reaction) View



Steps: 1
Yield: 100%

Suppliers (83) Suppliers (62)

<input type="checkbox"/> Reaction Summary		Chromophores for photochromic compositions useful for three dimensional display applications View Reference Detail	
Reagents	Potassium tert-butoxide	Steps:	1
Catalysts	-	Yield:	100%
Solvents	Dimethylformamide	By: Gu, Tao; et al	
Conditions	overnight, rt	World Intellectual Property Organization, WO2015164390 A1 2015-10-29	
View Reaction Detail		<input type="button" value="PATENTPAK"/> <input type="button" value="Full Text"/>	



Планирование синтеза

Платформа CAS SciFinder[®] вдвое сокращает время, необходимое для планирования синтеза¹

Для успешной работы в лаборатории необходимо иметь отличный план синтеза. Ваши химики оперируют множеством переменных, особенно при разработке стратегии синтеза новых соединений, не имеющих прецедентов в литературе. Как для известных, так и для неизвестных молекул платформа CAS SciFinder[®] выполнит полный ретросинтетический анализ, основываясь на данных библиотеки реакций CAS. Лучшие потенциальные маршруты синтеза определяются на основе данных из литературы и прогнозируемых шагов, генерируемых нашим алгоритмом химического синтеза. Алгоритм можно настроить в соответствии с конкретной стратегией синтеза, а план позволяет легко оценивать альтернативные способы. Каждый план — это также быстрый доступ к информации о поставщиках материалов, поэтапных методах, отобранных экспертами, выходах продуктов и т. д.

¹. По данным исследования производительности платформы CAS SciFinder[®] в 2020 г.



После создания плана вы можете и дальше управлять масштабом ретросинтеза с помощью профилей оценки.

Воспользуйтесь пошаговыми инструкциями вплоть до работы в лаборатории.

Experimental Protocols

Synthetic Methods

Products	Ruthenium, carbonylchloro[2-[1-(hydroxy-κO)-2-naphthalenyl]-1-diazencarbothioamidato-κN ² ,κS](triphenylphosphine)-, Yield: 80%
Reactants	Carbonylchlorohydrotris(triphenylphosphine)ruthenium 2-(1-Oxo-2(1H)-naphthalenylidene)hydrazinecarbothioamide
Solvents	Benzene
Procedure	<ol style="list-style-type: none"> 1. Add the appropriate ligand (0.023-0.029 g, 0.1 mmol) in 1:1 M ratio to a solution of Ruthenium(II) complex (0.1 g, 0.1 mmol) in benzene (20 cm³). 2. Heat the mixture under reflux for 5 h on water bath. 3. Concentrate the resulting solution to 3 cm³. 4. Precipitate the product by the addition of petroleum ether (60-80 °C). 5. Recrystallize the mixture using CH₂Cl₂. 6. Dry the residue under vacuum to obtain the product.
Transformation	Aromatization of Six-Membered Rings Coordination of a Metal to Carbon and Heteroatom Ligand Substitution



Комплексные исследования биологических препаратов

Использование платформы CAS SciFinder[®] выведет вашу программу исследований и разработок в области биологических препаратов на новый уровень

В платформу CAS SciFinder[®] интегрирована самая полная в мире библиотека данных о химических реакциях, веществах и индексированных научных литературных источников, поэтому она дает возможность расширенного поиска, визуализации, фильтрации и анализа одной из самых больших и полных коллекций последовательностей белков и нуклеиновых кислот, а также модифицированных пептидов и малых молекул. Помимо общедоступных баз данных, например Национального центра биотехнологической информации (NCBI), и обширных баз данных патентов из разных стран мира, в коллекцию биопоследовательностей CAS входят миллионы отобранных и проиндексированных специалистами последовательностей из непатентных литературных источников, в том числе из более 12 000 научных журналов, которые не включены в другие информационные системы. Ученые CAS подготовили профессиональные аннотации ко многим последовательностям с информацией о химических модификациях, происхождении последовательности, ее функции, обозначении гена, сведениями об аллелях и изоформах, а также добавили важные синонимы, в частности, тривиальные названия, торговые названия и лабораторные коды. Вы также можете найти сведения о биоактивности и данные о мишенях для лекарственных веществ, включая как малые молекулы, так и биологические препараты.

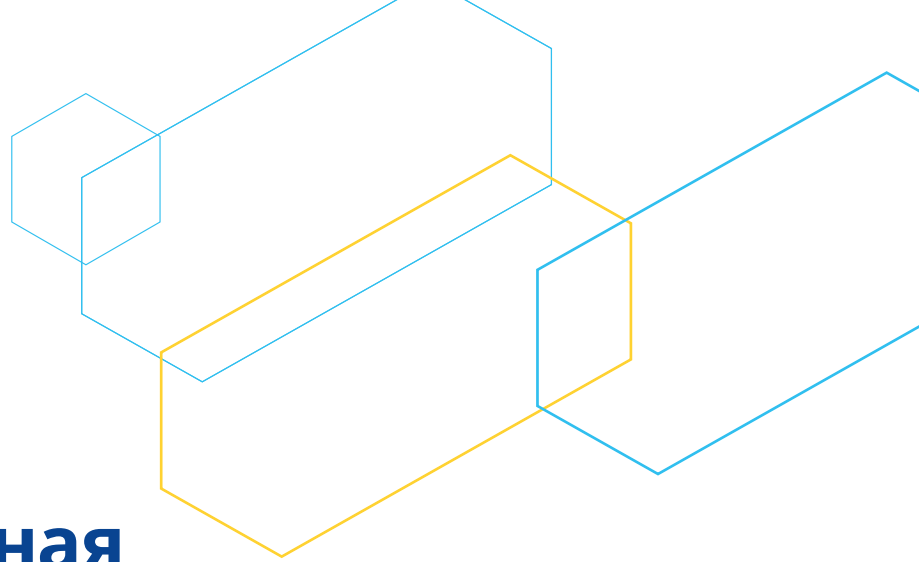
На платформе CAS SciFinder[®] собрана не только наиболее полная коллекция патентов, связанных с разработкой биологических лекарственных препаратов, но и одна из самых больших коллекций записей из научных журналов, в том числе статьи и рефераты по биомедицине и медико-биологическим наукам из PubMed. Благодаря дополнительной индексации, выполненной учеными CAS, включая цитирование и ссылки на цитаты, а также прямые ссылки на полнотекстовые публикации (при их наличии), можно проследить связи между биопоследовательностями и патентными и непатентными* литературными источниками, которые вы не сможете увидеть нигде больше.



Доступны алгоритмы BLAST, Motif и CDR.

Результаты поиска биопоследовательностей представлены с учетом научной значимости и сопровождаются расширенными инструментами визуализации, фильтрации и анализа.

Q	66	QAVVTQEPSV	TVSPGGTVIL	TCGSSTGAVT	SGHYANWFQQ	KPGQAPRALI	FDTDKKYSWT	PGRFSGSLIG	AKAALTISDA	145
S	19	QAVVTQEPGM	TVSPGGTVTL	TCGSSTGAVT	DGHYPYWIQQ	KPGQVPRTLI	YNTDKKHSWT	PARFSGSIQG	GKAALTLSGA	98
Q	146	QPEDEAEYYC	SLSDVDGYLF	GGGTQLTVLS	GGGGSGGGGS	GGGGSGGGGS	QAVVTQEPSV	TVSPGGTVIL	TCGSSTGAVT	225
S	99	QPEDEAEYYC	WL-----YF	SGAHHKSR--	-----	-----S				151



Информационная стратегия в сфере ИС

Платформа CAS SciFinder[®] сокращает время, необходимое для анализа патентного ландшафта интеллектуальной собственности (ИС)

Для того чтобы успешно управлять портфелем разработок и выводить инновации на рынок, необходимо сначала изучить состояние и перспективы развития этих технологий. Платформа CAS SciFinder[®] может помочь ответить на многие вопросы, связанные с интеллектуальной собственностью, например: Есть ли здесь возможности для инноваций? Существуют ли риски нарушения патентных прав? Кто еще работает в этой сфере? Чтобы вы могли всегда быть на шаг впереди технологий, платформа CAS SciFinder[®] предоставляет доступ к лучшим в отрасли решениям: системе поиска патентов Markush и различному контенту, например патентам, аннотированным нашими учеными-химиками.



Используйте систему поиска патентов Markush для поиска структур (включая общие структуры), соответствующих вашему запросу, по патентам.

Patent Markush Match

As Drawn (6)

Substructure (151)

Filter by:

Patent Office

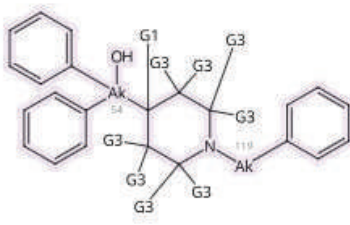
World Intellectual Property Organization (5)

Korea, Republic of (1)

Patent Markush (6)

References

KR2010125109
View Reference Detail



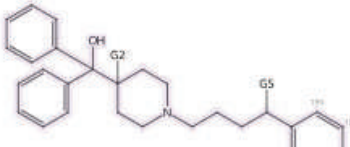
Patent claim 1

PATENTPAK Full Text

54: alkyl <containing 1-10 C> (opt. substd. by G2)

119: alkyl <containing 1-10 C> (opt. substd. by G2)

WO2014052836
View Reference Detail



Patent claim 1

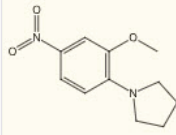
PATENTPAK Full Text

184,185,187,188,190: opt. substd. by 1 or more G11

Получите мгновенный доступ к патентам и содержащимся в них редким химическим данным.

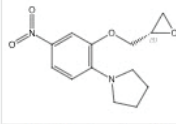
Key Substances in Patent

CAS RN
67828-57-3



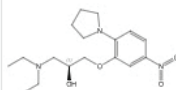
Analyst Markup Locations (1)
Page 21

CAS RN
501007-24-5



Analyst Markup Locations (1)
Page 21

CAS RN
501007-25-6



Step-2:

5 [0078] Dry K₂CO₃ (10 g, 0.072 mol) in NMP (60 mL, 0.626 mol) was heated to 165°C for 1 hr under nitrogen. N-(2-Methoxy-4-nitrophenyl)pyrrolidine (20 g, 0.090 mol) and thiophenol (28 mL, 0.272 mol) were added with stirring at 165°C. Stirring was continued for 2 hr at 150°C. The mixture was cooled to room temperature, neutralized with 1.5 N HCl and extracted with ether. The ether layer was washed with water, brine,

10 dried over Na₂SO₄ and concentrated. The dark red product obtained was purified by column chromatography using petroleum ether-ethylacetate (9:1) as eluent. Yield: 11.5 g, 61 %.

Step-3:

15 [0079] N-(2-Hydroxy-4-nitrophenyl)pyrrolidine (5 g, 0.024 mol), racemic-epichlorohydrin (40 mL) and catalytic amount of tetrabutylammonium bromide (60 mg) in 100 mL 3N flask was heated at 50 °C with stirring for 30 min. NaOH (2.3 g, 0.058 mol) in water (5 mL) was added slowly over 15 min. Stirring was continued at 50°C for 15 hr. Water (100 mL) was added, extracted with chloroform, washed with water, dried

20 over Na₂SO₄ and concentrated. The crude epoxide was purified by column chromatography using 9.5:0.5 petroleum ether:ethylacetate as eluent. Yield: 2.7 g, 43 %.



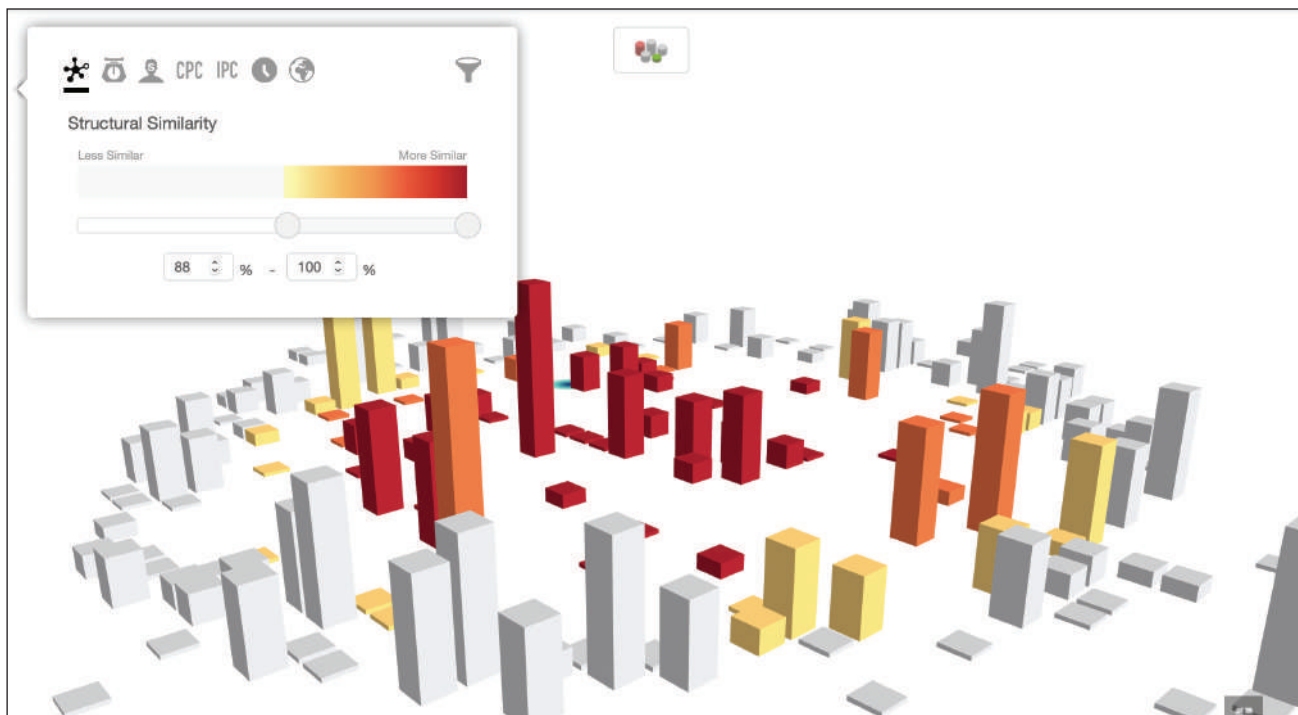
Визуализация результатов поиска

Платформа CAS SciFinder[®] позволяет визуализировать наборы результатов для веществ и биоследовательностей

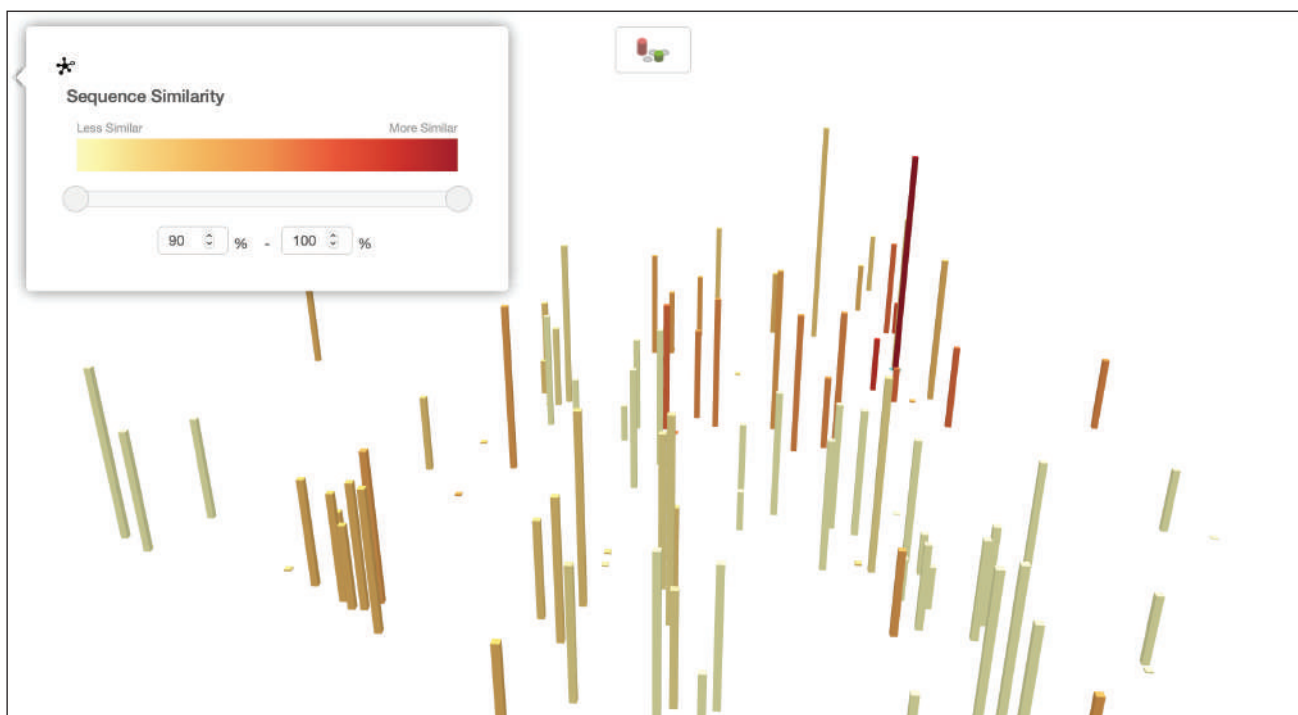
При огромном объеме научных данных порой бывает сложно определить тенденции, закономерности и исключения, чтобы быстрее изучить информацию и принять правильное решение. CAS SciFinder[®] предоставляет удобные инструменты визуализации, применение которых помогает превратить информацию в инсайты. Наглядно изучайте структурное сходство химических веществ и связанные с ними патенты. Просматривайте результаты поиска биоследовательностей и оценивайте пространство последовательностей с точки зрения ИС. Вы можете изменить способ отображения диаграмм, сгруппировать и уточнить результаты, чтобы выделить ключевую информацию, и даже сохранить их для последующего просмотра.

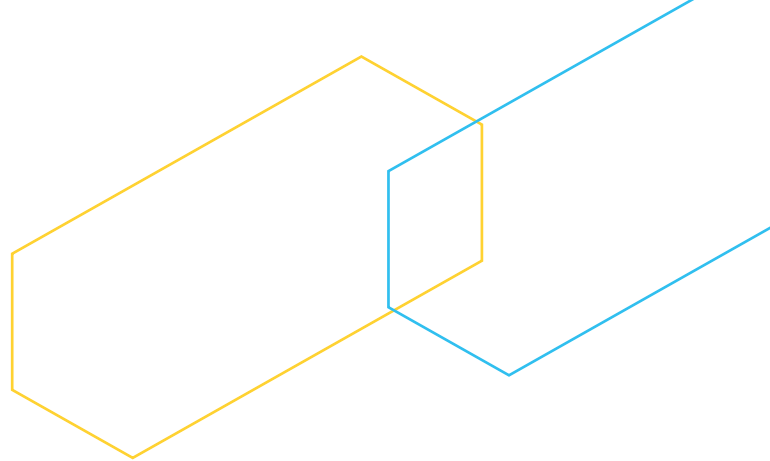


Каталог Chemscape предоставляет возможность визуального представления результатов поиска по веществам, чтобы вы могли наглядно изучить структурное сходство химических веществ и связанные с ними патенты.



Каталог Bioscape оснащен возможностью визуализации результатов поиска биоследовательностей, чтобы вы смогли оценить пространство последовательностей с точки зрения ИС.





Поиск коммерчески доступных химических веществ

CAS SciFinder[®] обладает самым полным перечнем представленных на рынке химических веществ от поставщиков из различных стран мира

Прежде чем отправиться в лабораторию, ученые из ведущих коммерческих, академических и правительственных организаций из разных стран мира используют платформу CAS SciFinder[®] для разработки плана исследований. Встроенный в платформу CAS SciFinder[®] ресурс CAS Commercial Sources[™] помогает ученым легко и быстро находить и сравнивать представленные на рынке источники поставки необходимых материалов. Этот обновляющийся ресурс содержит сведения о миллионах продаваемых в свободном доступе химических веществ из проверенных каталогов сотен поставщиков, где указаны существующие доступные количества, цены и контактная информация поставщика. Многие страницы содержат прямые ссылки для заказа материалов на веб-сайте поставщика.



Отфильтруйте результаты поиска поставщиков по предпочтительным поставщикам, чистоте вещества, количеству, наличию на складе и другим критериям, после чего вы сможете в один щелчок заказать необходимые товары напрямую от поставщика (при наличии возможности прямого заказа).

← Return to Home

Suppliers (85)

Sort: Ships Within

Filter Behavior

Filter by Exclude

^ Preferred Suppliers

No Preference (85)

× Supplier

KANTO CHEMICAL (5)

ALDRICH (3)

ASW MedChem Product List (3)

AK Scientific Product Catalog (2)

Alchem Pharmtech Product List (2)

[View All](#)

^ Purity

≥99% (2)

95-98% (63)

90-94% (3)

^ Quantity

Milligrams (6)

Grams (51)

Supplier	Substance	Details	Availability
<input type="checkbox"/> 1 1PlusChem 1PlusChem Product List United States Updated Mar 31, 2021	1125-88-8 Benzaldehyde Dimethyl Acetal Order Number: 1P0034Y6	Purity 95-98% Quantity 100g	USD 40 Maintained in stock Ships within 1 week View Detail Order from Supplier
<input type="checkbox"/> 2 A2B A2B Chem Product List United States Updated Mar 22, 2021	1125-88-8 Benzaldehyde dimethyl acetal Order Number: AB45582	Purity 95-98% Quantity 100g	USD 14 Maintained in stock Ships within 1 week View Detail Order from Supplier
<input type="checkbox"/> 3 aablocks AA BLOCKS LLC Product	1125-88-8 Benzaldehyde dimethyl acetal	Purity 95-98% Quantity	USD 16 Maintained in stock Ships within 1 week

[Feedback](#)

Просматривайте страницы со сведениями о поставщике, чтобы найти данные о конкретном веществе.

← Return to Results

Supplier Detail

1PlusChem Product List

Web <https://1pchem.com>

Email sales@1pchem.com

Phone (858) 215-1656

Item Details

Chemical Name Benzaldehyde Dimethyl Acetal

Order Number 1P0034Y6

Purity 98%

Quantity, Price
 5g, USD 10
 25g, USD 15
 100g, USD 40
 250g, USD 80
 500g, USD 150

Stock Status Maintained in stock

Ships Within 1 week

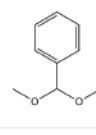
Pricing Information 31 Mar 2021
 Last Updated

[Order From Supplier](#)

Substance Information

CAS Registry Number 1125-88-8

CAS Name Benzaldehyde dimethyl acetal



[Feedback](#)

CAS SciFinder[®] — это решение в составе платформы CAS SciFinder Discovery Platform[™], корпоративного решения, созданного для того, чтобы помогать быстрее выводить разработки на рынок и повышать их рентабельность. CAS SciFinder Discovery Platform предоставляет исследователям информацию, помогающую избежать рисков и разумно инвестировать с учетом последних открытий и анализа конкурентной ситуации.

Компания CAS является лидером в сфере решений для поиска научной информации, сотрудничая с инноваторами со всего мира для ускорения научных открытий. В компании CAS работают более 1400 экспертов, которые отбирают, объединяют и анализируют научные знания, чтобы выявить невидимые связи. На протяжении уже более 100 лет ученые, специалисты по патентам и руководители предприятий доверяют решениям и опыту компании CAS, чтобы обеспечить анализ прошлых данных, выделить важную информацию и спрогнозировать будущее — все это необходимо для построения будущего с учетом уроков прошлого. CAS — это подразделение Американского химического общества.

Свяжитесь с нами по адресу cas.org