

Платформа **CAS SciFinder Discovery** предназначена для поддержки сразу нескольких этапов и типов научных исследований.

Он сочетает в себе информационные решения и инструменты для конкретных задач, в том числе CAS SciFinder<sup>n</sup>, планирование ретросинтеза, биопоследовательности белков и нуклеиновых кислоты, данные по биоактивности молекул, возможности визуализации, CAS Formulus<sup>®</sup>, CAS Analytical Methods<sup>™</sup> и ChemZent<sup>®</sup>, что делает платформу самым полным источником научной информации в мире.

SciFinder<sup>n</sup> — это онлайн-сервис CAS, подразделения Американского химического общества, предназначенный для поиска и анализа информации в области химии, биохимии, фармацевтики, генетики, химической инженерии, материаловедения, нанотехнологий, физики, геологии, металлургии и других смежных дисциплин.

В дополнение к информации о статьях и патентах, веществах, реакциях, данных по поставщикам, CAS SciFinder<sup>n</sup> также позволяет получить результаты, ранжированные по релевантности, пошаговые процедуры и протоколы, картографирование цитирования, поиск биопоследовательностей, ретросинтез, картографирование патентного ландшафта, и многое другое с помощью простого и удобного интерфейса.

Эту платформу можно назвать единственно достоверным источником для точной идентификации химических веществ и связанных с ними химических структур, названий, регуляторной информации и свойств, в том числе регистрационных номеров CAS<sup>®</sup>, а также схем химических реакций, пошагового описания экспериментальных процедур, детализированных условий и данных по выходам продуктов.

ChemZent<sup>®</sup> - это единственный онлайн-источник Chemisches Zentralblatt (старейший реферативный журнал по химии, выходивший в 1830-1969 гг.), позволяющий работать с машинно-переведенными рефератами на английский язык и предоставляющий доступ к оригинальным абстрактам на немецком.

**Ссылка на вход в CAS SciFinder<sup>n</sup> и ChemZent<sup>®</sup>:** <https://scifinder-n.cas.org>

**Дополнительное описание:** <https://www.cas.org/solutions/other-solutions/chemzent>

## CAS Life Science Content

### Данные по биоактивности химических соединений:

В CAS SciFinder<sup>n</sup> вы можете найти один из крупнейших и наиболее полных источников данных о биопоследовательностях и биологической активности химических соединений, интегрированный с самой полной в мире коллекцией химических реакций, веществ и проиндексированных научных источников.

Обширная коллекция данных о биологической активности состоит из сведений о более чем 10 миллионов действительно уникальных веществ с более чем 45 миллионами измерений биоактивности и данными для 90 000 определенных мишеней, включая все человеческие мишени.

Теперь Вы можете исследовать фармакологию взаимодействий лекарственного средства, мишени и токсичности с анализом SAR и ADMET для выявления новых мишеней для терапевтического вмешательства и оценить безопасность уникальных соединений.

The screenshot shows the CAS SciFinder interface for Caffeine. The search bar contains 'Caffeine'. The interface is divided into several sections: 'Experimental Spectra', 'Structure Activity Relationships', and 'Absorption, Distribution, Metabolism, and Excretion Data'. The 'Absorption, Distribution, Metabolism, and Excretion Data' section is expanded, showing a table of data. The table has columns for Target, Function, Parameter, Value, Disease, Organism, Assay, and Source. The data is filtered by Target (A2aR, Adenosine receptors, Central Nervous System, Cytochrome P450 CYP1A2), Function (Antagonist), Parameter (Latency, Plasma concentration, Effective permeability (Pe), CL/F), Disease (Alzheimer disease, Neurodegenerative disease, Hypertension), and Organism (Human). The table also includes a 'View Detail' link and a source count for each entry.

Target	Function	Parameter	Value	Disease	Organism	Assay	Source
A2aR	Antagonist	Latency	99.5 Sec	Alzheimer disease	-	View Detail	(1) CAS
Adenosine receptors	Antagonist	Plasma concentration	Observed that plasma triglycerides levels of caffeine-infused mice were lower than the control	-	-	View Detail	(2) CAS
Adenosine receptors	Antagonist	Plasma concentration	Observed that plasma triglycerides level was markedly decreased of caffeine treated mouse	-	-	View Detail	(2) CAS
Central Nervous System	-	Effective permeability (Pe)	0.00000256 cm/s	Neurodegenerative disease	Human	View Detail	(3) CAS
Cytochrome P450 CYP1A2	Antihypertensive agent	CL/F	Significantly decreased the value of CL/F	Hypertension	-	View Detail	(4) CAS

# CAS Life Science Content

## Работа с биопоследовательностями

Функциональность модуля по работе с биопоследовательностями в CAS SciFinder<sup>®</sup> позволяет одновременно делать поиск в журналах, общедоступных базах данных, патентах и многих других источниках информации, экономя время и обеспечивая тщательность и полноту анализа научной литературы.

Поиск BLAST, CDR и Motif среди более чем 700 миллионов последовательностей белков и нуклеиновых кислот в базе данных, поможет вам идентифицировать наиболее важную информацию для вашего исследования.

The screenshot displays the CAS SciFinder interface for the 'Biosequences' section. The top navigation bar includes the CAS SciFinder logo, a search bar with 'Substances' and 'Enter a query...', and utility icons for 'Draw', search, favorites, clock, and user profile. A 'Return to Home' link is located below the navigation bar.

The main content area is titled 'Biosequences (157)' and includes a 'References' button and a 'Download' icon. Below this is a 'Query Details' section with a 'View More' link. The results are sorted by 'Subject Coverage' and are currently 'Collapsed'.

On the left side, there is a 'CDR Segments' panel with a Venn diagram showing the intersection of CDR1, CDR2, and CDR3 segments. The intersection of all three is highlighted in blue and contains the number 157. Below the diagram are 'Apply' and 'Reset Segments' buttons. Underneath is the 'Bioscape Analysis' section, which includes a description and a 'Create Bioscape Analysis' button. At the bottom of the left panel is a 'Filter by' section with an 'E-Value' filter set from 0 to 10<sup>6</sup>.

The main results area shows two entries, 101 and 102. Each entry displays a sequence alignment with CDR1, CDR2, and CDR3 regions highlighted. Entry 101 has an alignment identity of 96.3%, 26 matches, and 1 mismatch. Entry 102 also has an alignment identity of 96.3%, 26 matches, and 1 mismatch. The subject sequences are labeled with their start and end positions (1-483 for 101 and 1-484 for 102).

## CAS Analytical Methods

**CAS Analytical Methods** — это инструмент для поиска, сравнения и понимания аналитических методик из ведущих журналов и патентов для самых различных областей химии.

Инструмент позволяет получать быстрый доступ к подробным протоколам аналитических исследований, находить методики по ключевым словам, по анализируемому веществу, матрице, методу исследования и так далее.

### Области применения:

- Сельское хозяйство
- Биопробы
- Работа с биологическими макромолекулами
- Анализ окружающей среды
- Анализ продуктов питания
- Топливо / Геология / Биотопливо
- Исторический анализ / датировка
- Анализ органических соединений
- Металлоорганические соединения / неорганические соединения
- Фармакология / Токсикология
- Анализ полимеров
- Анализ воды

### Потенциальная аудитория:

Сами химики, химики-аналитики, а также те, кто занимается охраной окружающей среды и те, кому иногда нужны методики химического анализа различных веществ в различных средах

Ссылка на ресурс: <https://methods.cas.org>

Дополнительное описание: <https://www.cas.org/solutions/cas-scifinder-discovery-platform/cas-analytical-methods>

Учебные материалы: <https://www.cas.org/support/training/analytical-methods>

## CAS Formulus®

**CAS Formulus** – инструмент для поиска и разработки рецептур широкого спектра готовых продуктов:

- Лекарственные средства
- Косметические препараты и средства личной гигиены
- Бытовая химия и чистящие препараты
- Химикаты для сельского хозяйства
- Пищевые продукты
- Лакокрасочные покрытия и чернила

Составы индексируются из патентов и журналов, затем специалисты CAS извлекает информацию, относящуюся к составам, чтобы отразить детали рецептуры, показать конкретные ингредиенты и указать источник информации.

**Потенциальная аудитория:**

Это могут быть химики, занимающиеся разработкой готовых продуктов, а также технологи, если им интересно знать, из чего, как правило, состоят различного рода промышленные продукты.

**Ссылка на ресурс:** <https://formulus.cas.org/>

**Дополнительное описание:** <https://www.cas.org/solutions/cas-scifinder-discovery-platform/cas-formulus>

**Учебные материалы:** <https://www.cas.org/support/training/formulus>