



SciFinder-Anleitung

Stand: 18. August 2024



Mit dem obigen QR-Code können Sie die gesamte SciFinder-Anleitung auf mobilen Endgeräten herunterladen.

<http://pinguin.biologie.uni-jena.de/pub3/1SciFinder/SciFinderAnleitung.docx>

<http://pinguin.biologie.uni-jena.de/pub3/1SciFinder/SciFinderAnleitung.pdf>

oder auch hier:

[SciFinder-Anleitung](#) (Word)

[SciFinder-Anleitung](#) (PDF)

Inhaltsverzeichnis

1.	Welche Informationen finde ich in SciFinder?	6
2.	Erste Schritte mit SciFinder	7
2.1	Wie erfolgt die Registrierung für die Datenbank?	7
2.2	Wie melde ich mich bei SciFinder für die Suche an?	8
2.3	Was mache ich, wenn ich Benutzernamen oder Passwort vergessen habe?.....	8
2.4	Wo finde ich Hilfen und Videotutorials zur Suche?	9
2.4.1	Direkthilfe in SciFinder	9
2.4.2	SciFinder-Training	10
2.4.3	SciFinder-Training im Detail	10
2.4.4	An wen kann ich mich in der FSU Jena bei Fragen wenden?	11
3.	Grundlagen der Recherchen in SciFinder	14
3.1	Navigation allgemeiner Bereiche	14
3.1.1	Hilfe.....	14
3.1.2	Gespeicherte und vergangene Suchen; Projekte	14
3.1.3	Einstellungen	16
3.2	Welche Suchmöglichkeiten habe ich?.....	17
3.3	Was ist wichtig zu wissen?	17
3.4	Automatismen bei der Wortsuche in SciFinder	18
3.5	Recherchestrategien in SciFinder	19
3.5.1	Generelles zur Suchstrategie	19
3.5.2	Suche mit Präpositionen und Verwendung des „CAS Lexicon“	19
4.	Suche mit Suchmodus „All“	21
5.	Thematische Suchen.....	23
5.1	Einfache Textsuche.....	23
5.2	Gleichzeitige Suche von Text und chemischer Struktur.....	26
5.3	Phrasensuche und Maskierung	27
5.4	Suche mit logischen Operatoren.....	29
5.5	Wie finde ich Publikationen eines bestimmten Autors?.....	30
5.6	„For You“ - Registerkarte.....	31
6.	Wie kann ich meine Treffermenge sortieren?	34
7.	Wie kann ich meine Treffermenge eingrenzen?	35
7.1	Wie schränke ich meine Suche mit neuen Wörtern ein?.....	35

7.2	Wie schränke ich meine Suche zeitlich ein?.....	36
7.3	Eingrenzen/Filtern der Treffer mit „ <i>Concepts</i> “	37
7.4	Eingrenzen/Filtern der Treffer mit „ <i>Substance Roles</i> “	38
8.	Wie kann ich mit den Treffern weiter verfahren? Combine, Speichern, Export, Zugang zum Volltext.....	40
8.1	„ <i>Combine</i> “	40
8.1.1	„ <i>Combine</i> “ direkt nach einer Recherche	41
8.1.2	„ <i>Combine</i> “ von gespeicherten Antwortsätzen	41
8.2	Exportieren und Speichern und von Ergebnissen, Erstellen von Alerts.....	42
8.3	Import von Ergebnissen aus SciFinder in EndNote	43
8.4	Wie komme ich zum Volltext?.....	44
9.	„ <i>Citation Map</i> “	45
10.	„ <i>History</i> “	46
11.	Suche nach Substanzen	47
11.1.	Wie suche ich nach Substanzen im Suchmodus „ <i>All</i> “?	48
11.2.	Wie suche ich mit dem Namen bzw. der CAS-Registry-Nummer nach Substanzen?	50
11.3.	Wie suche ich Substanzen mit der Summenformel?	54
11.4.	Die erweiterte Substanzsuche („ <i>Advanced Search Fields</i> “)	55
11.5.	Wie suche ich nach Substanzen über die Struktur?	56
11.6.	Hinweise für das Zeichnen von chemischen Strukturen	57
11.7.	Wie kann ich große Treffermengen bei der Substanz-suche über die Struktur einschränken?	60
11.8.	Wie sieht die Trefferliste bei der Substanzsuche aus?.....	61
11.9.	Was sieht man in der Substanz-Detailanzeige?	63
11.10.	Wie finde ich Chemikalien-Lieferanten?	64
12.	Wie suche ich nach chemischen Reaktionen?.....	65
12.1.	Wie beginne ich die Suche im Modus „ <i>Reactions</i> “?	65
12.2.	Welche Ansichten kann ich für die Trefferliste der Reaktionsuche einstellen?.....	67
12.3.	Wie bekomme ich Reaktionsdetails angezeigt?.....	69
12.4.	Wie kann ich große Treffermengen bei der Reaktionsuche einschränken?	71
13.	Wie finde ich alle Synthesen einer Substanz?	72
13.1.	Vollständige Substanzsuche	72
13.2.	Ausgabe von vollständigen Synthesevorschriften über „ <i>Reactions</i> “	74

13.3.	Ausgabe der Nachweise zu Synthesen über „References“	77
14.	Wie hilft SciFinder bei der Retrosyntheseplanung?	79
14.1.	Wie kann ich die Retrosyntheseplanung beginnen?	80
14.2.	Kann ich alternative Schritte in die Synthese einbauen?	83
14.3.	Kann ich bestimmte Schritte des Retrosyntheseplanes ausschließen?	85
14.4.	Welche Optionen kann ich bei der Retrosyntheseplanung einstellen?	86
15.	Wie kann ich mit BLAST Protein- bzw. Nukleotid-Sequenzen suchen?	88
15.1.	Einfache Suche	88
15.2.	Erweiterte Suche nach Biosequenzen	91
15.3.	Hilfreiche Videos zur Sequenzsuche	92
16.	Patente in SciFinder und „PatentPak“	93
16.1.	Wie finde ich allgemein Patente in SciFinder?	94
16.2.	Wie finde ich ein spezielles Patent?	95
16.3.	Wie kann ich nach dem Stand der Technik suchen?	96
16.4.	Wie finde ich generische/hypothetische chemische Substanzen in Patenten (Markush-Struktursuchen)	98
16.4.1.	Was sind Markush-Strukturen?	98
16.4.2.	Wie gehe ich bei einer Markush-Struktursuche vor?	100
16.5.	Welche Informationen zu einem Patent finde ich in der detaillierten Einzeltrefferansicht?	102
16.6.	Wie erhalte ich mit „PatentPak“ Zugang zu den Patentvolltexten?	103
16.7.	„PatentPak-Viewer“	105
16.8.	Welche Informationen liefert das Deckblatt eines Patentbesitzers?	107
17.	„CAS Analytical Methods“	108
17.1.	Wie komme ich zu den „CAS Analytical Methods“?	108
17.2.	Wie suche ich in „CAS Analytical Methods“?	109
17.3.	Wie vergleicht man Methoden miteinander?	111
17.4.	Erweiterte Suche in „CAS Analytical Methods“	112
17.5.	„Explore Methods“ in „CAS Analytical Methods“	113
17.6.	Navigation zwischen SciFinder und „CAS Analytical Methods“	114
18.	„CAS Formulus“	115
18.1.	Wie komme ich zu „CAS Formulus“?	115
18.2.	Was finde ich in „CAS Formulus“?	116

18.3	Wie suche ich in „CAS Formulus“ nach Formulierungen?.....	116
18.4	Wie suche ich nach Inhaltsstoffen und welche Informationen sind vorhanden? ...	119
18.5	„Formulation Designer“	120
18.6	Navigation zwischen SciFinder und „CAS Formulus“	122

1. Welche Informationen finde ich in SciFinder?

Die vom Chemical Abstracts Service (CAS) produzierte Datenbank SciFinder ist neben „CAS Formulus“ und „CAS Analytical Methods“ Teil der [„CAS Discovery Platform“](#).

Als weltweit größte Datenbank mit chemierelevanten Inhalten enthält sie Informationen zu

- 225 Millionen definierten chemischen Substanzen (u.a. Herstellung, Verwendung, Struktur, Schmelzpunkt, Siedepunkt, Dichte, Brechungsindex, magnetische u. d. elektrische Eigenschaften, Spektren (NMR, IR, MS, ESR, UV-VIS, Bezugsquellen)
- 75 Millionen Sequenzen
- 150 Millionen chemischen Reaktionen
- Abstracts zu ca. 59 Millionen Veröffentlichungen (wissenschaftliche Artikel, Patente, Bücher, Konferenzberichte, Dissertationen)
- Patente von 109 Patentorganisationen

Suchen sind möglich u.a. über Stichwörter, Autorennamen, Firmennamen bzw. Zeitschriftennamen. Ein **Struktureditor** erlaubt den schnellen Zugriff auf chemische Substanzen und Reaktionen über chemische Strukturen. Links zum **Volltext** der gefundenen Artikel und Patente sind ebenfalls vorhanden.

SciFinder enthält die Informationen folgender CAS-Datenbanken:

- [CAPLUS](#) Bibliografische Nachweise der Chemical Abstracts, ab 1808
- [MEDLINE](#) Biomedizinische Informationen, ab 1949 (= Pubmed)
- [CAS REACTIONS](#) Individuell indexierte Reaktionen, ab 1840
- [CAS REGISTRY](#) Organische und anorganische Verbindungen sowie biochem. Sequenzen
- [CHEMCATS](#) Chemikalienlieferanten-Katalog, Informationen zu käuflichen Substanzen
- [CHEMLIST](#) Regulated CHEMicals LISTing: nationale, US-amerikanische und internationale Chemikalienverordnungen
- [MARPAT](#) Suchbare Markush-Strukturen aus Patenten, ab 1961

Eine genaue Übersicht über die aktuellen **Inhalte der einzelnen CAS-Datenbanken** findet man unter: <https://www.cas.org/about/cas-content>.

Die CAS-Datenbanken enthalten Veröffentlichungen aus ca. 9.500 Zeitschriften. Davon werden ca. 1700 cover-to-cover ausgewertet. Die Artikel sind in mehr als 50 Sprachen publiziert. Weiterhin sind in SciFinder auch Nachweise anderer Medien, wie z.B. Bücher, Hochschulschriften, Reports, Konferenz-Proceedings, E-Preprints etc. enthalten.

Die für den SciFinder ausgewerteten Zeitschriften sind in der **CAPLUS Core Journal Coverage List** unter: <https://www.cas.org/support/documentation/references/corejournals> aufgeführt.

CAPLUS enthält außerdem alle chemierelevanten Patente von [Patentämtern weltweit](#). Für viele dieser Patente erhält man mit [PatentPak](#)[®] (s. auch Pkt. 16.6) den sofortigen Zugriff auf die darin sonst schwer zu findenden chemischen Substanzen.

2. Erste Schritte mit SciFinder

2.1 Wie erfolgt die Registrierung für die Datenbank?

Vor der Suche in der SciFinder-Datenbank ist eine persönliche Registrierung als Nutzer notwendig. Dafür muss man sich **im Uni-Netz** befinden bzw. über den VPN-Client mit der Uni verbunden sein und die **Uni-E-Mail-Adresse** verwenden!

Hier der Link zur Registrierung:

<https://scifinder.cas.org/registration/index.html?corpKey=C0691931-86F3-F00A-1166-6BA0191B9037>

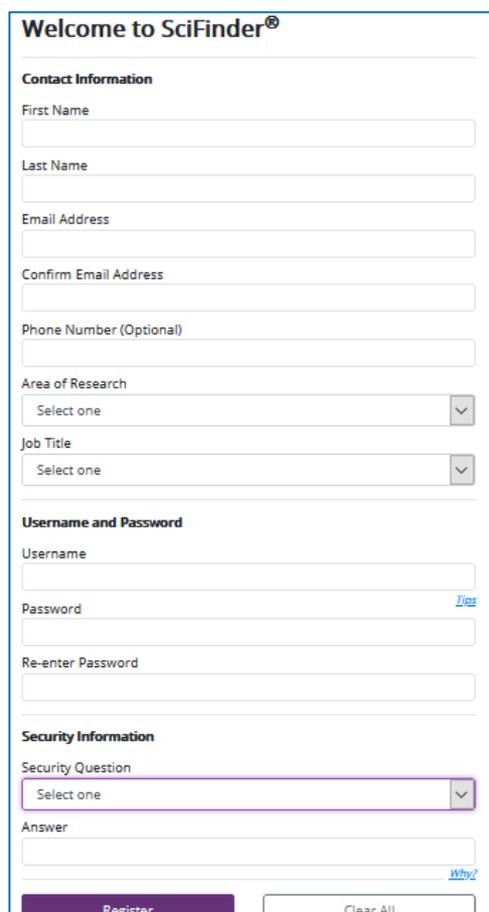


Füllen Sie das **Registrierungsformular** aus.

Nach der Registrierung bekommt man automatisch eine Bestätigungs-E-Mail von CAS. In der E-Mail ist ein **Verifizierungslink** angegeben. Mit diesem wird die Registrierung vervollständigt.

Registrierung und Verifizierung müssen innerhalb von 48 h gemacht werden!

Die Registrierung/Verifizierung soll innerhalb des VPN der Uni erfolgen, es können aber unterschiedliche Geräte (PC, mobile Geräte) für Registrierung und Verifizierung verwendet werden.



Hinweise für den Nutzernamen:

- kann 5-15 Zeichen lang sein
- muss mindestens einen Buchstaben enthalten
- muss mit einem Buchstaben oder einer Zahl beginnen
- kann Zahlen aber auch Bindestriche, Unterstriche, Kommata oder @ enthalten

Hinweise für das Passwort:

- kann 7-15 Zeichen lang sein
- muss sich in mindestens zwei Zeichen vom Nutzernamen unterscheiden
- mindestens drei der vier folgenden Zeichenarten müssen enthalten sein:
 - Buchstaben
 - Groß- und Kleinbuchstaben gemischt
 - Zahlen
 - nicht alphanumerische Zeichen, z.B. @, #, %, &, * oder Interpunktionszeichen

2.2 Wie melde ich mich bei SciFinder für die Suche an?

Zugang zur SciFinder-Datenbank unter: <https://scifinder-n.cas.org>

Die Anmeldung dort erfolgt mit dem bei der Registrierung erstellten Benutzernamen und Passwort.

2.3 Was mache ich, wenn ich Benutzernamen oder Passwort vergessen habe?

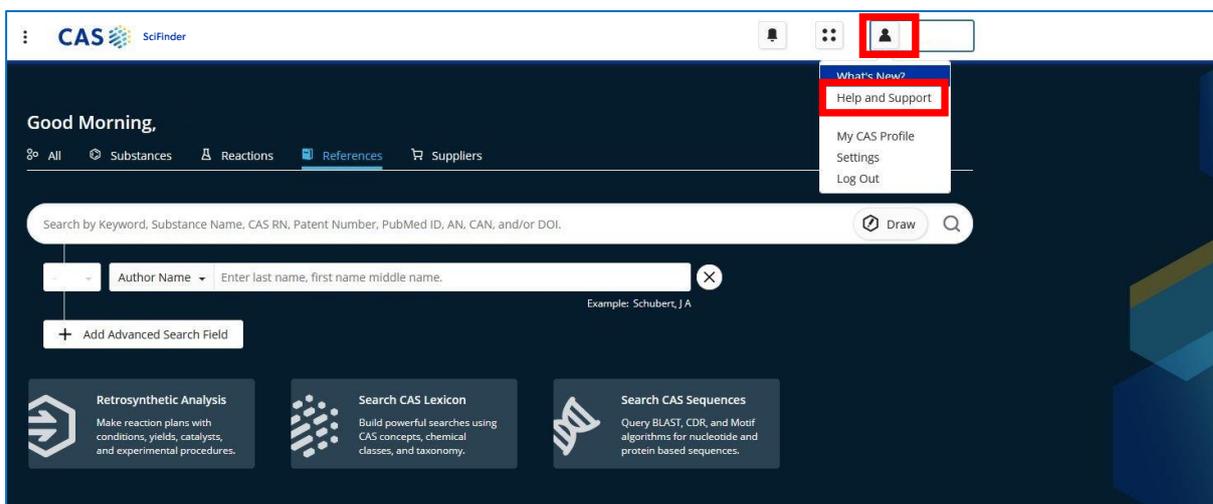
Wenn man seinen Benutzernamen oder sein Passwort vergessen hat, klickt man unterhalb des Log-In-Buttons auf „*Can't log in?*“

Im dann erscheinenden Fenster wird der Nutzernamen **ODER** die Uni-E-Mail-Adresse eingetragen.

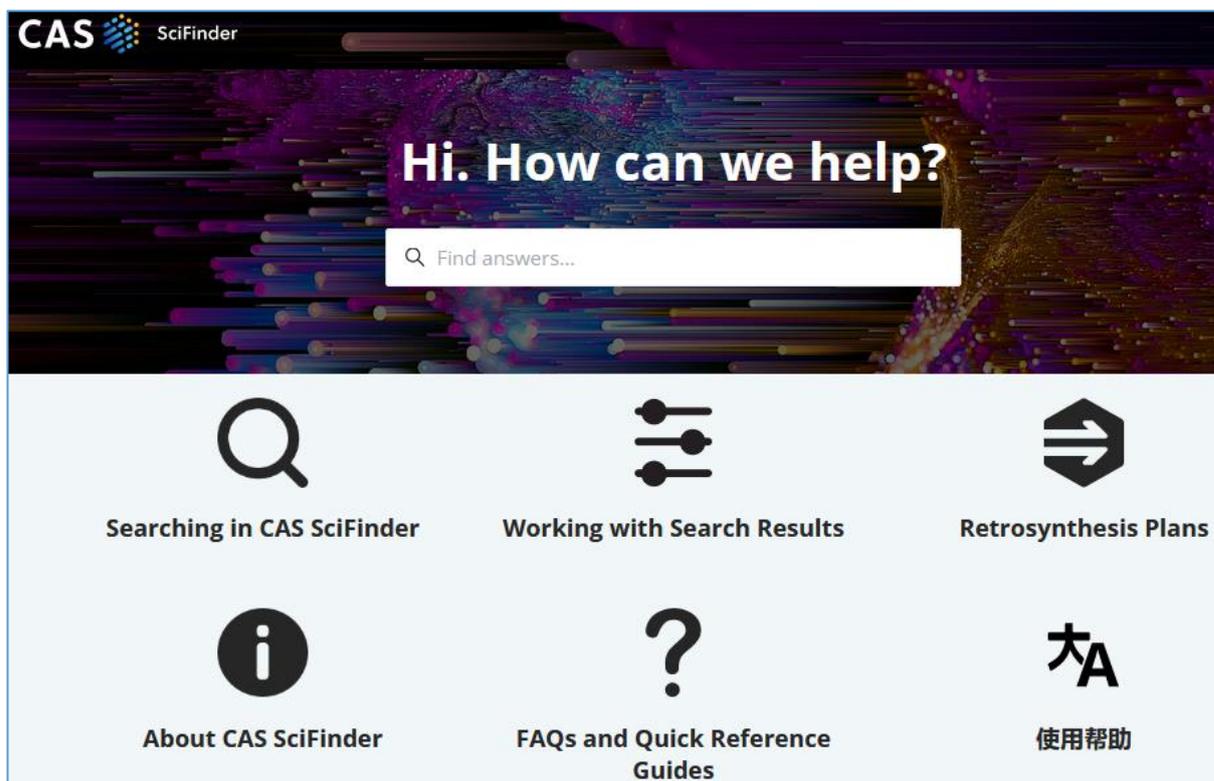
Nach Beantwortung der **Sicherheitsfrage**, die man bei der Registrierung für SciFinder angegeben hat, schickt man das Formular ab und bekommt umgehend eine Mail von CAS, die einen Link zur Änderung des Benutzernamens oder des Passwortes enthält: **schnell und einfach!**

2.4 Wo finde ich Hilfen und Videotutorials zur Suche?

2.4.1 Direkthilfe in SciFinder



Die SciFinder-Hilfeseiten erreichen Sie während der Recherche mit einem Klick auf „**Help and Support**“ beim „**Account**“-Button oben in der Menüzeile oder direkt über <https://cas-product-help.zendesk.com/hc/en-us>

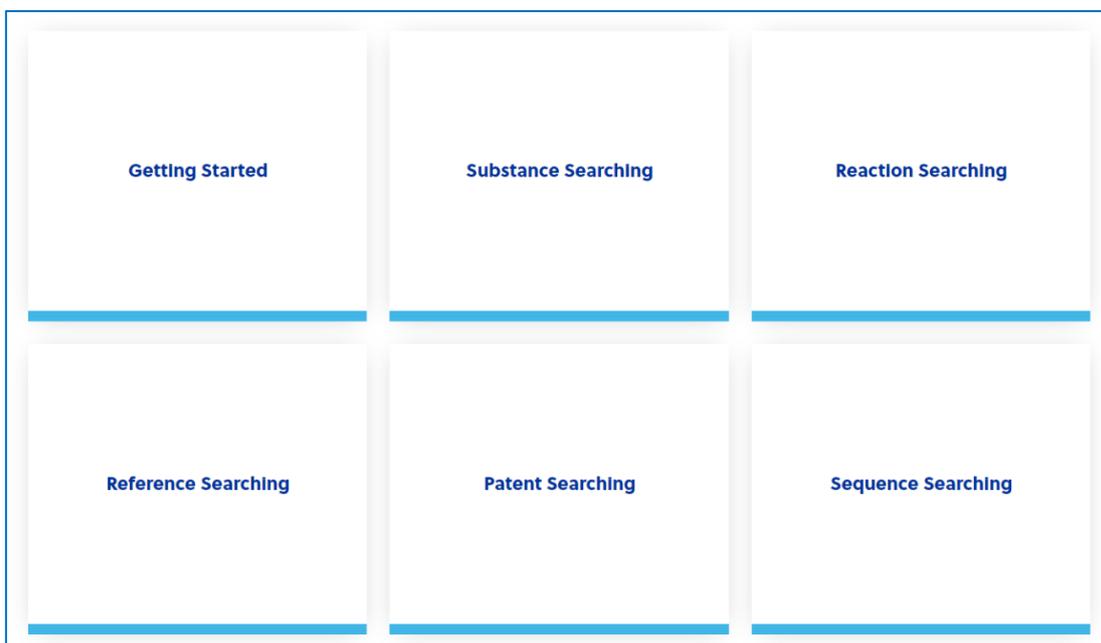


Eine Anmerkung: Auf der Startseite werden die Nutzer mit ihren Vornamen angesprochen und je nach Tageszeit steht dann dort „Good Morning, ...“ oder „Good Afternoon, ...“ In der Anleitung wird die Anrede nicht mit im Screenshot erscheinen.

2.4.2 SciFinder-Training

Zugang: <https://www.cas.org/cas-scifinder-discovery-platform/cas-scifindern>

Hier findet man sehr ausführliche Informationen zu vielen verschiedenen Themen:



2.4.3 SciFinder-Training im Detail

- **Getting started:**
 - [Navigating CAS SciFinder](#)
 - [CAS SciFinder FAQ](#)
 - [Academic Researcher FAQ](#)
 - [Quick Start Guide \(PDF\)](#)
 - [Quick Reference Guide \(PDF\)](#)
 - [Setting up an Alert in CAS SciFinder \(PDF\)](#)
 - [CAS SciFinder help documentation](#)
- **Substance searching:**
 - [Searching for substance details with CAS SciFinder](#)
 - [Searching references for substances with CAS SciFinder](#)
 - [Drawing structures with CAS SciFinder](#)
 - [Introduction to structure searching with CAS SciFinder](#)
 - [Advanced structure searching with CAS SciFinder](#)
 - [Filtering substance and structure search results sets with CAS SciFinder](#)
 - [Finding metal-containing substances with CAS SciFinder](#)
- **Reaction searching**
 - [How to perform a reaction search for known substances with CAS SciFinder](#)
 - [Reaction searching from drawn schemes with CAS SciFinder](#)
 - [How to filter reaction search results sets with CAS SciFinder](#)
 - [How to perform a retrosynthetic analysis using CAS SciFinder](#)

- **Reference Searching**
 - [How to perform a reference search with CAS SciFinder](#)
 - [Using advanced reference searching capabilities with CAS SciFinder](#)
 - [How to filter reference search result sets with CAS SciFinder](#)
 - [Combining reference searches with structures with CAS SciFinder](#)
 - [How to perform a reference search by author with CAS SciFinder](#)
 - [How to perform a reference search by organization with CAS SciFinder](#)
 - [How to use the Knowledge Graph](#) (Interactive view of your search results)
 - [Using ChemZent® in your research](#)

- **Patent searching**
 - [Assessing the IP Landscape with CAS SciFinder](#) (Webinar)
 - [Finding Patent Markush structures in CAS SciFinder](#)
 - [Using the PatentPak viewer in CAS SciFinder](#)

- **Sequence Searching**
 - [Biology-focused reference searching with CAS SciFinder](#)
 - [Performing a BLAST sequence search in CAS SciFinder](#)
 - [Advanced BLAST sequence search techniques in CAS SciFinder](#)
 - [Performing a CDR sequence search in CAS SciFinder](#)
 - [Performing a Motif sequence search in CAS SciFinder](#)

2.4.4 Poster von CAS

Es gibt ein Poster in A0 z.B. für den Raum des Synthesepraktikums der Chemie oder für die Verwendung in den Räumen anderer Praktika und anderer Fachbereiche die mit SciFinder arbeiten.

Es kann auch gerne digital in die Praktikumsunterlagen mit aufgenommen werden.

Das Poster ist auch hier verlinkt:

<https://www.bio.uni-jena.de/10175/informationen-zu-scifinder>



Poster von CAS in englischer Sprache

Poster: CAS SciFinder – Essential Features for Students

Direkt zum Poster gelangt man mit diesem Link: <https://www.bio.uni->

CAS SciFinder – Essential Features for Students

Substances Search

Substance name search
You can search substances by placing one or more substance names or identifiers into the query box. You can also draw or write a structure. Below are some search option examples.

- Supplies only** Finds Supply/stock record
- ST-401** Finds Synonym/stock record using CAS Registry Number® as identifier
- SciFinder** Finds all names that start with the stem Substances
- WCO19237162** Finds all indexed substances for this patent

CAS Draw editor
You can define structure and reaction queries using the CAS Draw structure editor.

Substances search result
Substances search results are displayed in an intuitive interface when you will use the most relevant results for your project.

ChemDraw allows to search structures in SciFinder by using the SciFinder toolbar from the menu or icon. The SciFinder history will show **Search from ChemDraw**.

Reactions Search and Retrosynthesis Planner

Reaction Searching

- Text search**
Search → Filter with substance roles in the next step to limit to the correct context, e.g. product or reactant
Summary of substance connectivity (upper case)
Search → Use **Search Within** in the next step to draw out specific reaction participants following the Suzuki coupling scheme
- Draw reaction diagram** Draw a reaction diagram in the drawing editor or from a reaction answer using **Search Within**. Draw a reaction arrow between reactant and product. If you draw fragments, please make sure to assign an appropriate role. **Reaction search example:**

Reaction search results

Retrosynthesis Planner
There are two primary ways to launch the Retrosynthetic Analysis in CAS SciFinder:
(1) Draw or import a structure into the retrosynthesis draw window accessed by clicking on the Retrosynthetic Analysis option on the landing page. The drawn substance can be used.
(2) Click on the **Start Retrosynthetic Analysis** option found on the substance layout window.

Launching chemical

Selecting plan options

Opening a plan

Interface and References Search

Search Interface
CAS SciFinder features a streamlined search interface.

Reference search result
Performing a reference search provides you with access to a full result set in an easy-to-use interface where:

- References are default sorted by relevance with customizable sorting options.
- You can focus your answer set further using filters.
- You can save searches, send a link of the results, setup alerts, or add results to a project list.
- You can quickly access full details for any of the references displayed.

Boolean operators
You can use logical operators to create precise text queries.
AND Both terms are present within the document
OR Either one or both terms are present (correct synonyms with OR)
NOT Excludes documents from the set containing the word(s) after NOT
Ex: **benzoin** **and** **boron** **OR** **boron** **and** **boron**
Wildcards allow for more comprehensive results. Internal and right-hand truncation is possible.
***** Indicates 0 to any number of characters
? **OR** **escaped** **OR** **escaped** **OR** **escaped**
Phrases enclosed with double quotes ("...") will be searched as a precise phrase.
A search for "best quality product" only finds results that exactly match: cell death protein.

Save, Alerts, Download, Share, Projects

Save allows to save the search and related filter settings or up to 20,000 answers. Tags can be added and used for later filtering.

Share has two options:
(1) **Share Results** allows to share with a SciFinder user identified by the email address. A message can be added.
(2) **Copy Search to Clipboard** stores the URL of the search in the clipboard. This URL can be shared with any SciFinder user.

Add to Project will add selected reference or substance information to project folders. The folder content can be edited collaboratively, making projects an ideal collaboration tool when collecting research or project-specific reference or substance data.

Alerts will re-run the underlying search and filters in a frequency you choose. Results will be available in SciFinder and an email will be sent to the recipients, including links to SciFinder results.

Download will transfer results to your local storage device. Available options depend on the File Type.

Download Reference Results

Project collaborators and their roles can be defined (open collaboration)

Request training
Please send an email to [Dr. Karin Faerber at faerber@cas.org](mailto:Dr.Karin.Faerber@cas.org).

Advanced search
Sequence search

Suppliers CAS Roles
Citations Bioactivity data

Annotated patents
Markush structures
Formulations

Properties
Detailed processes

Analytical Methods

Get the full guide

2.4.5 An wen kann ich mich in der FSU Jena bei Fragen wenden?

- Bei allgemeinen Fragen zur Suche in SciFinder und bei Fragen zu Recherchen mit chemischen Inhalten, insbesondere bei (Struktur-)Suchen nach Reaktionen und Substanzen:

Heike Göbel Heike.Goebel@uni-jena.de

- Bei allgemeinen Fragen zur Suche in SciFinder:

Dr. Ina Weiß Ina.Weiss@uni-jena.de

oder an die Fachreferenten in der ThULB:

<https://www.thulb.uni-jena.de/thulb/organisation/fachreferate>

- Bei allen Fragen zur Suche in SciFinder sowie bei Wünschen nach speziellen Vor-Ort oder Online-Trainingssessions

Dr. Karin Färber

Senior Customer Success Manager

ACSI representing CAS

Tel: +49 2104 831525

Fax:+49 2104 831524

E-Mail: kfaerber@acs-i.org

- Bei Problemen mit Login und Passwort:

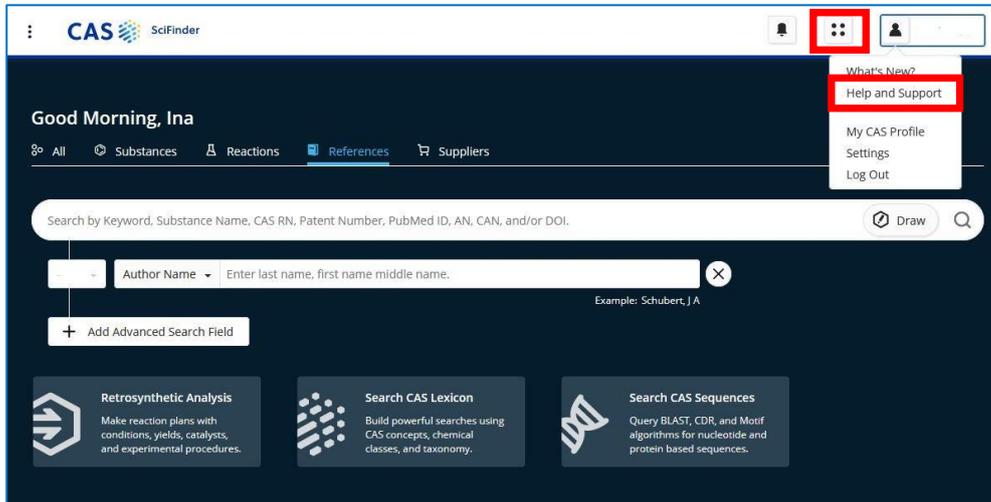
CAS Customer Center

E- Mail: help@cas.org

3. Grundlagen der Recherchen in SciFinder

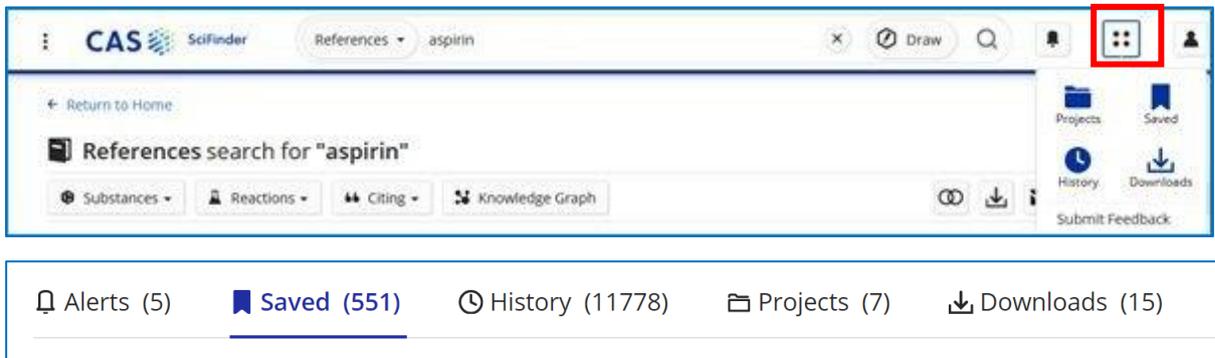
3.1 Navigation allgemeiner Bereiche

3.1.1 Hilfe



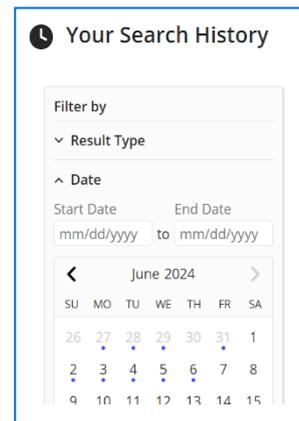
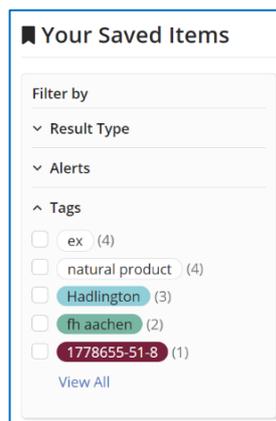
Ausführliche Hinweise in [Pkt. 2.4](#).

3.1.2 Gespeicherte und vergangene Suchen; Projekte

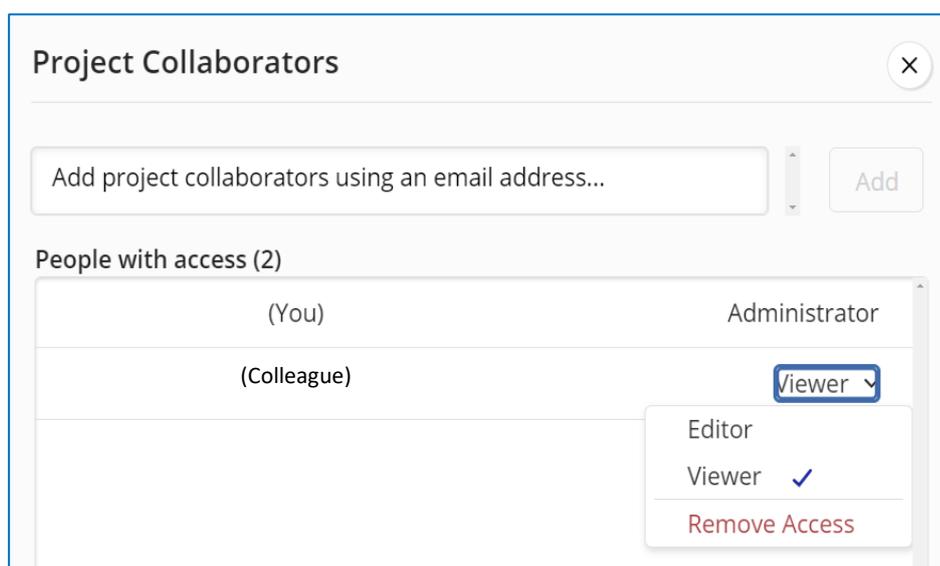
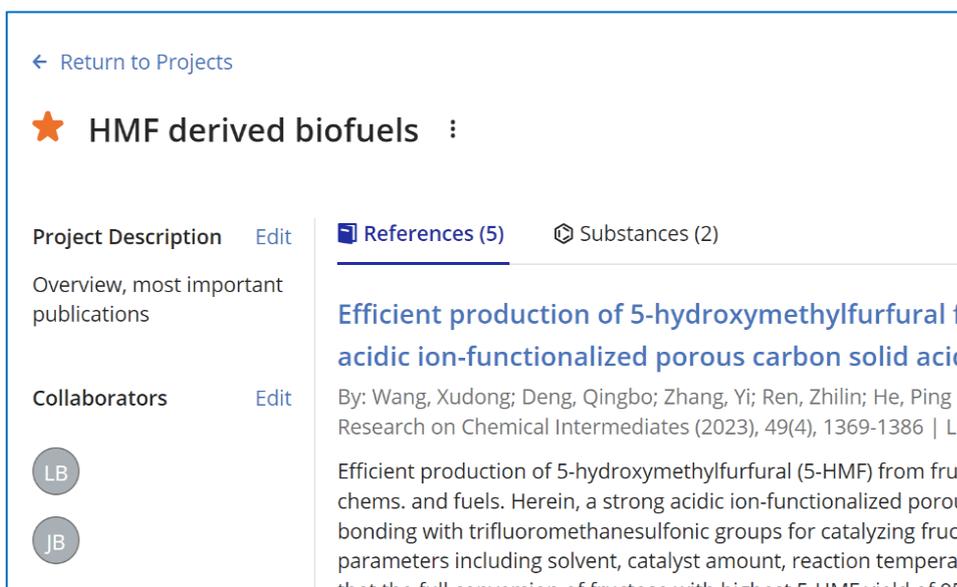
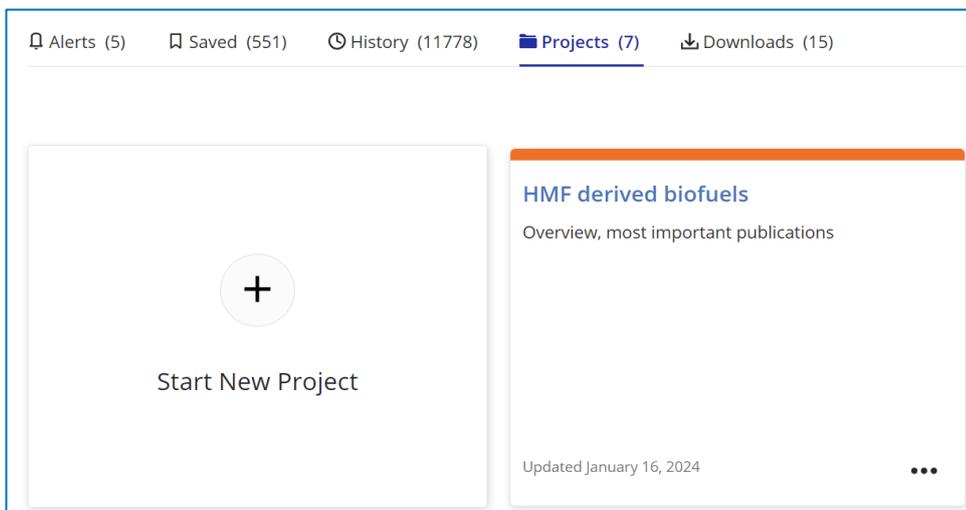


Ein Menu-Button oben rechts erlaubt den Zugriff auf manuell gespeicherte („**Saved**“) und automatisch gespeicherte („**History**“) Suchen.

Verschiedene Filter erlauben einen schnellen Zugriff auf entsprechende Einträge. Manuell gespeicherte Suchen können mit selbst gewählten „**Tags**“ versehen werden, um eine Gruppierung nach Thema oder **Projekt** vorzunehmen

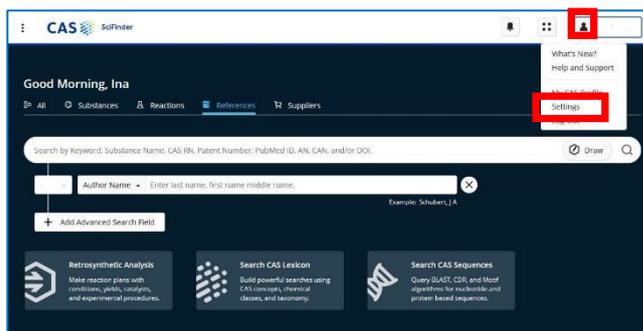


Projekte bieten die Möglichkeit, ausgewählte Publikationen und Substanzen in einem Bereich abzuspeichern, der mit anderen SciFinder-Nutzern geteilt werden kann. Dabei kann unterschieden werden, wer nur Lesezugriff hat und wer die Listen editieren darf.



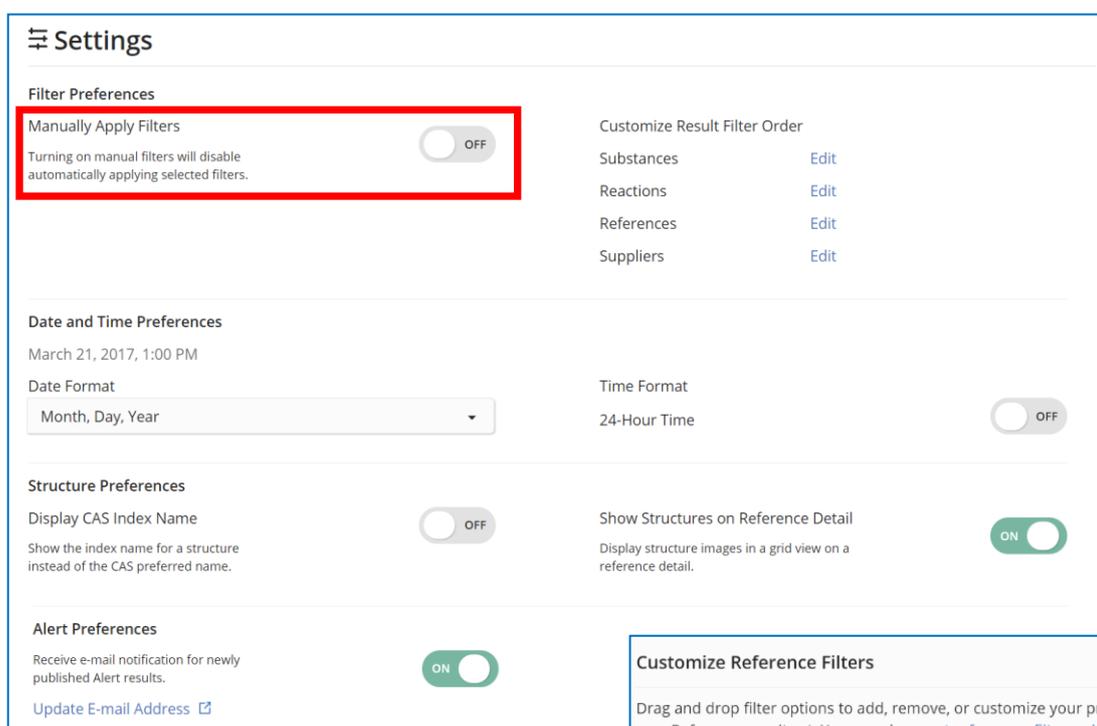
3.1.3 Einstellungen

Die Einstellungen erlauben die Anpassung der SciFinder-Bedienung an eigene Vorlieben und Bedürfnisse.

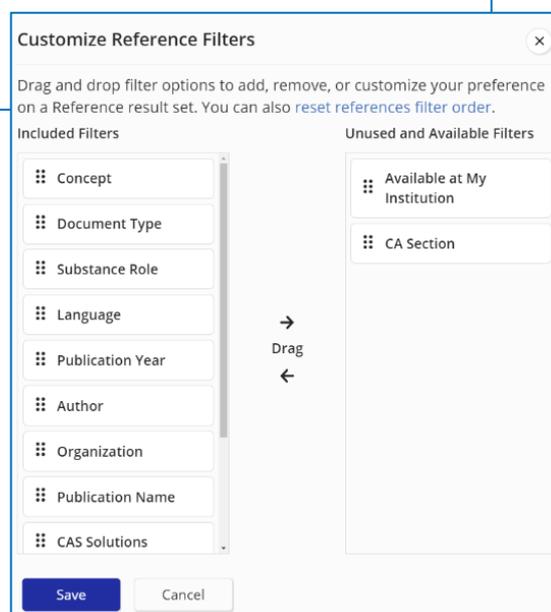


Mit der Aktivierung von „**Manually Apply Filters**“ werden ausgewählte Filteroptionen nicht sofort ausgeführt, sondern erst nachdem ein Button  am Ende der Filterliste betätigt wurde.

Dies ist hilfreich, wenn regelmäßig mehrere Filter in einem Vorgang angewendet werden sollen, ohne zwischendurch die Ergebnisliste neu zu laden.



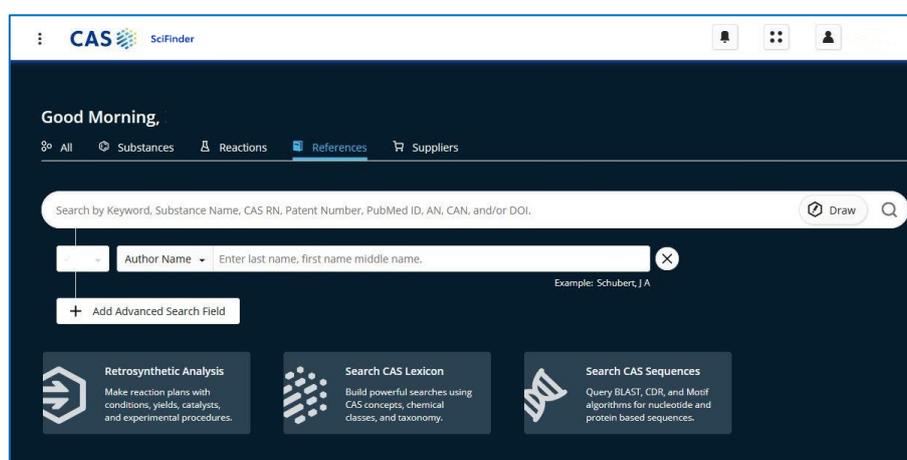
Im Bereich „**Customize Result Filter Order**“ kann für jeden Suchtyp separat die bevorzugte Reihenfolge der Filter ausgewählt und nicht gewünschte Optionen versteckt werden.



3.2 Welche Suchmöglichkeiten habe ich?

SciFinder ermöglicht den Zugang zu einer Vielzahl von Quellen für chemische Informationen. Hilfreich dabei sind diese Suchmöglichkeiten:

- **Strukturen:** Suche nach chemischen Verbindungen über die Struktur (exakte Suche, Substruktursuche bzw. Ähnlichkeitssuche)
- **Substanzen:** Suche nach chemischen Verbindungen mittels Schlagwort, mit dem Namen oder mit CAS-Registry-Nummern
- **Suche nach chemischen Reaktionen**
- **Thematische Suchen**
- **Suche nach Patenten mit chemisch relevanten Inhalten**
- **Retrosyntheseplanung**
- **Suche nach Biosequenzen** (Proteinen oder Nukleotide) mit BLAST



Alle Auswahlmöglichkeiten befinden sich auf der Startseite.

3.3 Was ist wichtig zu wissen?

- Man kann gleichzeitig nach Substanzen oder Reaktionen und Referenzen suchen.
- Präpositionen braucht man bei der Suche nicht mehr zu verwenden, da man mit logischen Operatoren arbeiten kann (AND, OR, NOT)
- Die Ergebnisse werden nach der Relevanz sortiert. Alle Antworten sind mit einem Ranking versehen. Die erste Antwort ist somit die beste Antwort. Ein Kriterium für das Ranking ist die Anzahl der Zitierungen. Publikationen, die häufiger zitiert wurden, stehen weiter oben in der Trefferliste.
Das Ranking ergibt sich auch noch aus weiteren Faktoren, z.B. wie oft kommen die Suchterme im Record vor, wo findet man die Suchterme im Nachweis (vor allem in den Concepts), usw..
- Man kann mit Platzhaltern suchen: mit * nach einem Wortstamm und mit ? nach einem Wortstamm oder innerhalb eines Wortes ([s. Pkt. 5.3](#))

3.4 Automatismen bei der Wortsuche in SciFinder

Synonyme	Es werden viele (aber nicht alle!!!) Synonyme automatisch gesucht. Beispiele: <u>heart disease</u> : gefunden wird auch cardiac disease, cardiac dysfunction, cardiac disorders, myocardial disease <u>fungus</u> : gefunden wird auch fungi, fungal
Alternative Wortformen	freeze, freezing, frozen, froze
Irreguläre Pluralformen	Beispiel: Eingabe von woman - women wird automatisch gefunden. Beispiel: mice, mouse, auch Plural: mouses wird gefunden
CAS Standard-abkürzungen	oxidation, oxidn preparation, prep
Amerikanische und britische Schreibweisen	synthesize, synthesise color, colour
Trunkierung	Wörter können nach einem Wortstamm mit * versehen werden: Es werden dann beliebig viele Buchstaben nach dem Wortstamm zugelassen.

Achtung: Die obige Tabelle ist **nicht** vollständig, sie enthält nur einige Beispiele.

Während (unregelmäßige) Pluralformen automatisch mitgefunden werden, trifft das nicht auf alle Synonyme zu.

Beispiel: *child* findet auch *children* - aber *infant*, *baby*, *newborn* wird nicht automatisch mitgesucht. Diese Suchworte müssen mit OR in die Suche eingebunden werden:

child OR infant OR baby OR newborn

→ findet *child children infant infants baby babies newborn newborns*

Wenn zwingend alle Synonyme eines Suchterms gefunden werden sollen, muss daher der OR-Operator verwendet werden.

Sinnverwandte Worte können auch mit einem * zur Maskierung des Wortendes gefunden werden:

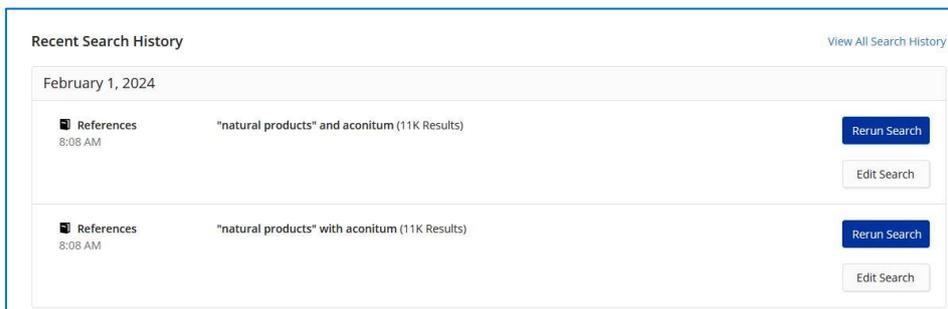
Beispiel: Suche nach *Nanocrystal* findet auch *nanocrystals*. Aber *nanocrystalline*, *nanocrystallites* wird nicht automatisch gesucht – daher mit *nanocrystal** suchen

→ findet *nanocrystal nanocrystals nanocrystalline nanocrystallite nanocrystallites*

Man kann aber auch ganz einfach mit dem logischen Operator **OR** alle Synonyme und/oder unterschiedliche Schreibweisen zu einem Begriff suchen.

3.5 Recherchestrategien in SciFinder

3.5.1 Generelles zur Suchstrategie



- Bei Phrasensuche („ “) werden die Begriffe im Titel (TI), in der Zusammenfassung (AB), im kontrollierten Vokabular (CT) und den chemischen Namen (CN) gesucht.

Beispiel:

Die Referenzsuche *"Mycobacterium marinum" and "putrescine aminotransferase"* findet auch solche Treffer, bei denen diese Transferase ausschließlich als Substanzname vorkommt, aber nicht in TI, AB oder CT gefunden wird.

- Begriffe, die bei „**Search within results**“ eingegeben werden sind eine UND-Verknüpfung. Bei „**Search within results**“ lassen sich auch mehrere Begriffe eingeben, die mit OR oder NOT verbunden werden können.

3.5.2 Suche mit Präpositionen und Verwendung des „CAS Lexicon“

Vorab: Es ist empfehlenswert mit logischen Operatoren **AND** bzw. **OR** bzw. **NOT** statt mit Präpositionen zu suchen. Die Suche mit **WITH** z.B. entspricht der Suche mit dem **AND**-Operator.

Zur Suche mit Präpositionen:

- Die Suche mit Präpositionen führt nicht nur zum konkreten Ziel, sondern auch zu einer sehr großen Antwortmenge, die im unteren Teil auch Dokumente enthält, die nur einen Begriff der Suche beinhalten.
- Im oberen Teil der Antwortmenge sind alle Begriffe der Suche enthalten, wenn nach Relevanz sortiert wird (das ist voreingestellt). Das ist aber nur bei ganz einfachen Suchen als Einstieg hilfreich.

Sehr hilfreich ist hingegen das **CAS-Lexikon**.

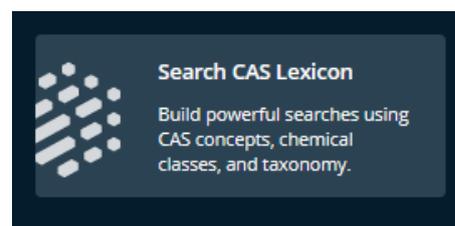
Ein Button mit dem Link zum Lexikon

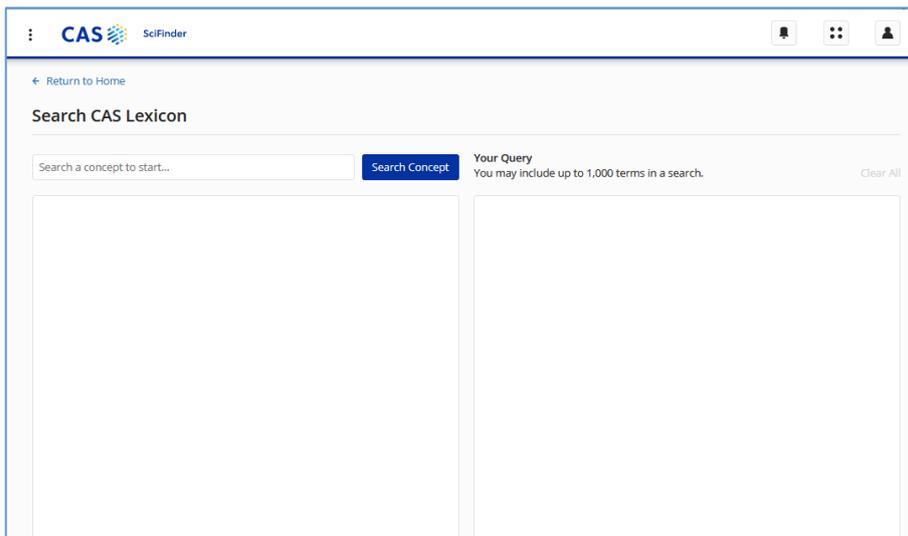
befindet sich auf der Startseite unter den Eingabezeilen:

oder direkt: <https://scifinder-n.cas.org/lexicon/search>

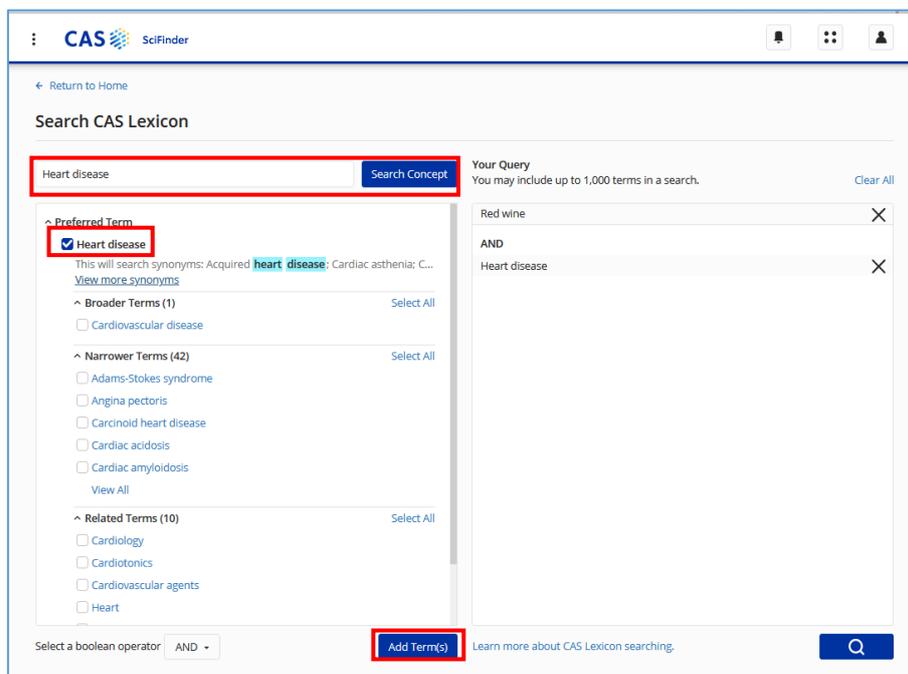
Hilfe zur Benutzung des CAS-Lexikons unter:

[Find-References-Using-CAS-Lexicon-Builder](#)

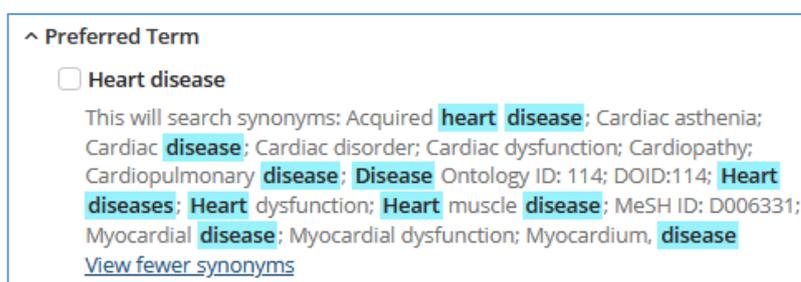




Nach dem Eintragen eines Suchwortes/Concepts schlägt das Lexikon über- und untergeordnete Suchterme vor, die durch Haken setzen und Klick auf „**Add Terms**“ für die Verwendung in der Suche ausgewählt werden können.

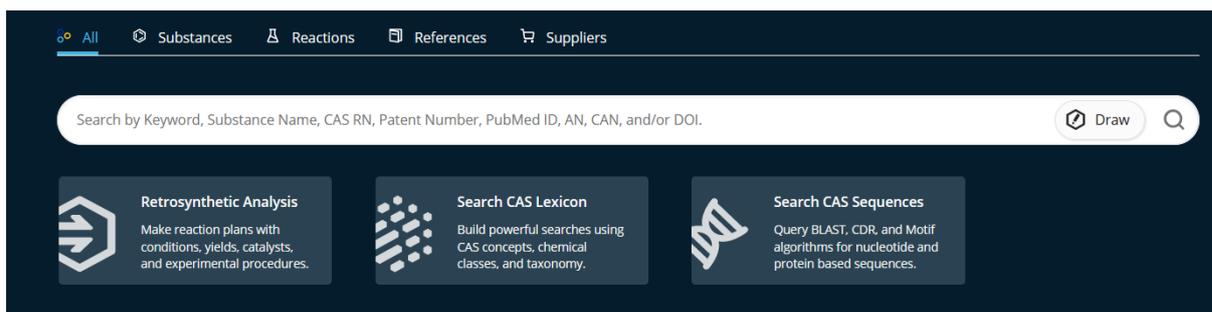


Die Suche anhand des CAS Lexicon Query Builders liefert als Antworten diejenigen Records, die exakt die ausgewählten Concepts enthält. Sind die Begriffe Teil eines längeren Concepts oder werden im Titel oder Abstract erwähnt, führt dies nicht zu einem Treffer.



4. Suche mit Suchmodus „All“

- Bei der Suche mit „All“ werden alle Suchtypen (Referenzsuche, Reaktionssuche, Substanzsuche, Händlersuche) angesprochen und die Anfrage je nach Suchtyp interpretiert.
- „All“ eignet sich, um z.B. erste Ergebnisse zu einer Substanznamensuche zu erhalten.
- Die Suche nach Biosequenzen ist bei „All“ nicht mit enthalten.



Seit November 2023 hat die Anzeige der Ergebnisse bei der Suche mit „All“ ein neues Aussehen. Die Anzeige auf dieser Seite wurde optimiert, um das Scrollen zu minimieren.

Sucht man bei „**All**“ Suchworte (Text) gleichzeitig mit einer Struktur, dann wird bei den Reaktionen, Substanzen und Lieferanten die Textsuche ignoriert. Diese gleichzeitige Suche funktioniert ausschließlich in der Referenzsuche.

When both text and structure queries are present, the system will ignore the text query in Reaction and Supplier searching.

Results for "benzene" + drawn structure

[All](#)
[Substances](#)
[Reactions](#)
[References](#)
[Suppliers](#)

Reactions for "benzene" + drawn structure

VIEW ALL (47,878)

31-085-CAS-17636668
Steps: 1 Yield: 100%

ClCC1=CC=CC=C1 + C1=CC=C2C=CC=CC2=C1 → CC1=CC=C(C=C1)C2=CC=CC=C23=CC=CC=C23

References for "benzene" + drawn structure

VIEW ALL (29,253)

Polymorphism in benzene, naphthalene, and anthracene at high pressure
By: Block, Stanley; Weir, Charles E.; Piermarini, G. J.
Science (Washington, DC, United States) (1970), 169(3945), 586-7 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE

Full Text 3 0 70

Aromatic-aromatic interactions: free energy profiles for the benzene dimer in water, chloroform, and liquid benzene
By: Jorgensen, William L.; Severance, Daniel L.
Journal of the American Chemical Society (1990), 112(12), 4768-74 | Language: English, Database: CAplus

Full Text 3 0 883

Anaerobic Degradation of Benzene and Polycyclic Aromatic Hydrocarbons
By: Meckenstock, Rainer U.; Boll, Matthias; Mouttaki, Housna; Koelschbach, Janina S.; Cunha Tarouco, Paola; Weyrauch, Philip; Dong, Xiyang; Himmelberg, Anne M.
Journal of Molecular Microbiology and Biotechnology (2016), 26(1-3), 92-118 | Language: English, Database: CAplus and MEDLINE

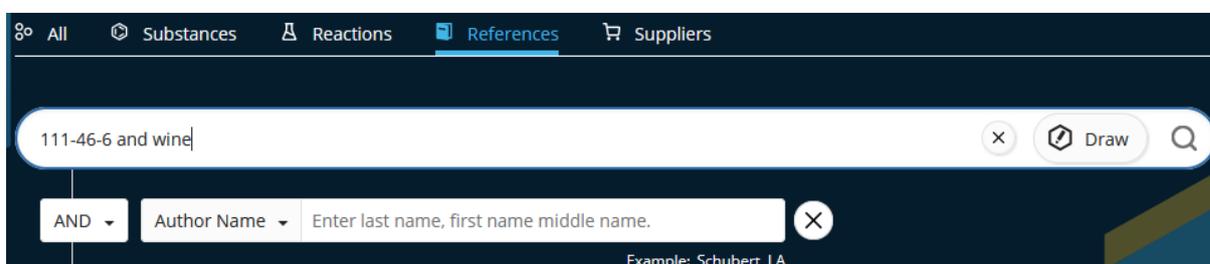
5. Thematische Suchen

5.1 Einfache Textsuche

- In SciFinder sucht man automatisch gleichzeitig in den Datenbanken CPlus/CAS References und MEDLINE.
- Man kann Textanfragen eingeben, z.B. Stichworte, Substanznamen, Patentnummern, oder CAS Registry-Nummern.
- Dabei können CAS-Registry-Nummern oder Substanznamen gleichzeitig mit normalen Textworten als Suchterme benutzt werden.

Eingabe der Suchfrage:

Diethylenglykol (wird mit der CAS-Registry-Nummer gesucht) und *Wein*



Trefferliste

References search for "111-46-6 and wine"

Substances Reactions Citing Knowledge Graph

Based on your query, we've returned the most relevant results. Would you like to load the entire result set? [Learn about result relevance.](#) [Load More Results](#)

85 Results Sort: Publication Date: Newest View: No Abstract

1 [Hydro-liquid soluble films, products and uses thereof](#)
Assignee: Decomer Technology Inc.
United States, US20220144517 A1 2022-05-12 | Language: English, Database: CPlus
[View Abstract](#)

PatentPak Full Text Substances (44) Reactions (0) Citing (0) Citation Map

2 [Impact of chiral tebuconazole on the flavor components and color attributes of Merlot and Cabernet Sauvignon wines at the enantiomeric level](#)
By: Zhao, Shanshan; Li, Minmin; Simal-Gandara, Jesus; Tian, Jian; Chen, Jieyin; Dai, Xiaofeng; Kong, Zhiqiang
Food Chemistry (2022), 373(Part_B), 131577 | Language: English, Database: CPlus and MEDLINE
| Analytical Methods
[View Abstract](#)

Full Text Substances (62) Reactions (0) Citing (13) Citation Map

3 [Proteomics in authentication of wine](#)

Filter Behavior
Filter by Exclude

Search Within Results

Document Type

- Journal (79)
- Patent (4)
- Review (4)
- Conference (2)
- Letter (1)
- Report (1)

Substance Role

Suchbeispiel: „red wine“ and (heart disease or coronary disease or cardio-vascular disease)

Trefferliste

References search for "red wine" and (heart disease or coronary disease or cardio-vascular disease)"

Filter Behavior: Filter by Exclude

Search Within Results

Document Type

- Journal (852)
- Patent (57)
- Review (343)
- Clinical Trial (79)
- Commentary (7)

View All

Language

- English (872)
- Chinese (35)
- French (13)
- German (13)
- Japanese (12)

View All

Publication Year

Available at My Institution

Author

Organization

Publication Name

Concept

CA Section

CAS Solutions

Bioactivity Data

Formulation Purpose

Database

- Cxplus (969)
- MEDLINE (758)

Filter Content Report

Download filter data from this result set.

Filtering: Database: Cxplus

969 Results

Sort: Relevance

View: Full Abstract

1

The red wine phenolics trans-resveratrol and quercetin block human platelet aggregation and eicosanoid synthesis: Implications for protection against coronary heart disease

By Pace-Asciak, Cecili R.; Hahn, Susan; Diamandis, Eleftherios P.; Soleas, George; Goldberg, David M. Clinica Chimica Acta (1995), 235(2), 207-19 | Language: English, Database: Cxplus and MEDLINE

A number of lines of evidence suggest that red wine may be more effective than other alcoholic beverages in decreasing the risk of coronary heart disease (CHD) mortality. This protection over and above that due to ethanol itself may be explained by phenolic components with which red wines are richly endowed. The authors have studied the effects of the trihydroxy stilbene trans-resveratrol on human platelet aggregation and on the synthesis of three eicosanoids from arachidonate by platelets, i.e. thromboxane B₂ (TxB₂), hydroxyheptadecatrienoic acid (HHT) and 12-hydroxyicosatrienoic acid (12-HETE). These effects were compared with the actions of other wine phenolics (quercetin, catechin and epicatechin) and antioxidants (α-tocopherol, hydroquinone and butylated hydroxytoluene). Trans-resveratrol and quercetin demonstrated a dose-dependent inhibition of both thrombin-induced and ADP-induced platelet aggregation, whereas ethanol inhibited only thrombin-induced aggregation. The other compounds tested were inactive. Trans-resveratrol also inhibited the synthesis of TxB₂, HHT, and to a lesser extent 12-HETE, from arachidonate in a dose-dependent manner. Quercetin inhibited only 12-HETE synthesis, and hydroquinone caused slight inhibition of TxB₂ synthesis, the remaining compounds being ineffective. De-alcoholized red wines inhibited platelet aggregation; their ability to inhibit the synthesis of TxB₂ but not that of 12-HETE from labeled arachidonate by washed human platelets was proportional to their trans-resveratrol concentration. These results are consistent with the notion that trans-resveratrol may contribute to the presumed protective role of red wine against atherosclerosis and CHD.

Full Text -

Substance (10) Reactions (0) Citing (57) Citation Map

2

Effects of red wine polyphenolic compounds on the cardiovascular system

By Zenebe, W.; Fachanova, G. Bratislavski Lekarski Listy (2002), 103(4-5), 155-165 | Language: English, Database: Cxplus and MEDLINE

A review. Phenolic phytochemicals are widely distributed in the plant kingdom. Regarding the protective effects on organisms, the polyphenol group is the most important. In different experiments, it has been shown that selected polyphenols, mainly flavonoids, possess protective effects on the cardiovascular system, as well as anticancer, antidiabetic and antimutagenic properties. In coronary heart disease, the protective effects include mainly antithrombotic, antioxidant, anticholesteremic and vasorelaxant properties of flavonoids. It has been hypothesized that the phenomenon of a low incidence of coronary heart disease in French people may be partially related to the pharmacological properties of polyphenolic compounds included in red wine. Many epidemiological studies have shown that regular flavonoid intake is associated with reduced risk of cardiovascular diseases. This review article discusses the chemical structure of polyphenols and their beneficial properties in the cardiovascular system.

Full Text -

Substance (0) Reactions (0) Citing (32) Citation Map

3

Red wine and red wine polyphenolic compounds but not alcohol inhibit ADP-induced platelet aggregation

By De Lange, D. W.; Van Galbe, P. H.; Scholman, W. L. G.; Kraaijenhagen, R. J.; Akkerman, J. W. N.; Van de Walle, A. European Journal of Internal Medicine (2003), 14(6), 361-366 | Language: English, Database: Cxplus and MEDLINE

Background: Moderate alcohol consumption reduces the risk of cardiovascular diseases, especially coronary heart disease (CHD). Because of the presence of polyphenols in red wine, this type of beverage may be superior to other alcoholic drinks in the prevention of CHD. Inhibition of platelet aggregation is thought to be one of the mechanisms underlying this favorable effect. The present study analyzes the direct effects of alcohol and red wine polyphenols on platelet aggregation. Methods: Unfractionated red wine, a red wine polyphenolic extract, and alcohol were added in different concentrations to a standardized quantity of blood platelets 2 min before aggregation was induced by different concentrations of ADP. Aggregation was measured in an aggregometer and results were compared to a control 0.9% NaCl solution. Results: Alcohol, in concentrations up to 0.24% did not inhibit platelet aggregation in vitro initiated with ADP. The polyphenolic red wine extract inhibited aggregation dose-dependently and significantly from concentrations of 45 mg/l (P<0.05) or more. Red wine only inhibited platelet aggregation at very high concentrations (40.24 and 3.48% alc.). Conclusion: Consumption of red wine has an inhibitory effect on platelet aggregation, which is caused by the polyphenolic compounds in the wine. Alcohol itself does not have a direct inhibitory effect within a range up to 0.24%. Since this effect is only observed at very high concentrations, it is unlikely to be of clinical relevance in a moderate drinking pattern. The results do not exclude platelet inhibition by wine in vivo. However, this must be related to metabolic changes rather than to direct blockade.

Full Text -

Substance (0) Reactions (0) Citing (36) Citation Map

4

Detailanzeige eines Treffers

Determination of quantity and quality of polyphenol antioxidants in foods and beverages

By: Vinson, Joe A.; Proch, John; Bose, Pratima
DOI: 10.1016/s0076-6879(01)35235-7

A review with references on detection and determination of polyphenol antioxidants in foods and beverages, especially with use of models relevant to **heart disease** studies. (c) 2001 Academic Press.

Keywords: review polyphenol antioxidant determination food beverage; **heart disease** antioxidant determination diet review

View Source | Full Text

Source	Database Information	Company/Organization	Publisher	Language
Methods in Enzymology Volume: 335 Pages: 103-114 Journal: General Review; Article 2001 DOI: 10.1016/s0076-6879(01)35235-7 CODEN: MENZAU ISSN: 0076-6879 ISSN-L: 0076-6879	AN: 2001:513460 CAN: 135:343440 Pub Med ID: 11400350 CAplus and MEDLINE	Dep. of Chem. Univ. of Scranton Scranton, Pennsylvania 18510 United States	Academic Press	English

Expand All | Collapse All

- ▼ CAS Concepts
- ▼ MEDLINE® Medical Subject Headings
- ▼ Cited Documents

Die Anzeige **Database: CAPlus and Medline** in einem Dokument bedeutet, dass diese Publikation sowohl in CAPlus/CA References als auch in Medline vorkommt.

Wenn man als Filter bei Database z.B. **CAPlus** auswählt, bekommt man alle Dokumente, die in CAPlus zu finden sind. Aber diese Auswahl kann auch Medline-Dokumente enthalten, wenn diese auch in CAPlus vorkommen. Analog gilt dies sinngemäß auch für die Auswahl **Medline**.

Generell gilt für die Dokumente: Wenn in der Trefferliste bei Database: CAPlus/MEDLINE steht, dann enthält die Detailanzeige der Textstelle folgende Angaben/Schlagworte aus **beiden** Datenbanken (soweit sie für das jeweilige Dokument verfügbar sind):

Expand All | Collapse All

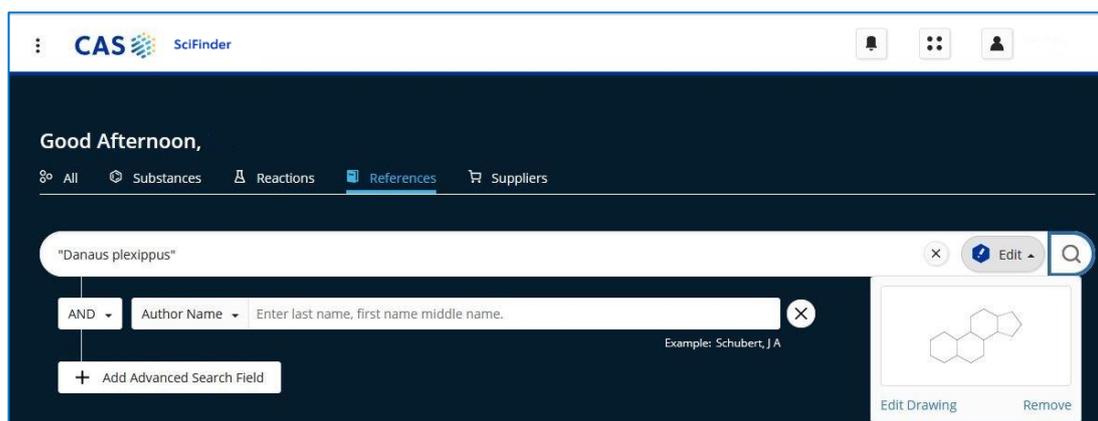
- ▼ CAS Concepts
- ▼ MEDLINE® Medical Subject Headings
- ▼ Supplementary Concepts
- ▼ Substances
- ▲ Analytical Methods

Title	CAS Method Number
Analysis of PA 824 in Pharmaceutical powder inhalants by Spray drying process	1-101-CAS-271579
- ▼ Formulations

- **CAS Concepts** (CAplus concepts)
- **Medline Medical Subject Headings** (MEDLINE MESH terms)
- **Supplementary Concepts** (MEDLINE supplementary terms)
- **Substances** (Angaben aus CAPlus und Medline)
- **Reactions** (Angaben aus CAPlus)
- **Analytical Methods** (mit Link zu [Analytical Methods](#) innerhalb der [Discovery Platform](#))
- **Formulations** (aus CAPlus - mit Link zu [Formulus](#) innerhalb der [Discovery Platform](#))

5.2 Gleichzeitige Suche von Text und chemischer Struktur

- SciFinder ermöglicht es, im Suchmodus „**References**“ gleichzeitig mit Text und Struktur- bzw. Reaktionsfragen zu suchen.
- Dazu erstellt man sowohl eine Suchanfrage für Text als auch für Struktur oder Reaktion, siehe auch die Kapitel zur Struktur- bzw. Reaktionssuche (s. Pkt. [11.5](#) bzw. [12.1](#)).
- Die folgenden Screenshots zeigen dies anhand einer Substruktursuche für das Grundgerüst der Cardenolide verbunden mit einer Textfrage zum Monarchfalter, „*Danaus plexippus*“.
- Die Struktur und die Suchbegriffe werden dabei mit logischer AND Verknüpfung gesucht.



Trefferliste der kombinierten Text- und Struktursuche

References search for ""Danaus plexippus"" + drawn structure

46 Results

Sort: Relevance View: Full Abstract

1

Milkweeds, monarch butterflies and the ecological significance of cardenolides
 By: Malcolm, Stephen B.
 Chemoecology (1995), 5/6(3/4), 101-117 | Language: English, Database: CAplus

A review with 139 references The contribution of Miriam Rothschild to the "monarch cardenolide story" is reviewed in the light of the 1914 challenge by the evolutionary biologist, E. B. Poulton for North American chemists to explain the chem. basis of unpalatability in monarch butterflies and their milkweed host plants. This challenge had lain unaccepted for nearly 50 yr until Miriam Rothschild took up the gauntlet and showed with the help of many able colleagues that monarchs are aposematically colored because they sequester toxic cardenolides from milkweed host plants for use as a defense against predators. By virtue of Dr Rothschild's inspiration and industry, and subsequently that of Lincoln Brower and his colleagues, this tritrophic interaction has become a familiar paradigm for the evolution of chem. defenses and warning coloration. The cardenolide contents of different milkweeds vary quant., qual. and spatially, both within and among species. However, as Dr Rothschild has pointed out in her publications, cardenolides have sometimes blinded us to reality and it is curious how little evidence there is for a defensive function to cardenolides in plants - especially against adapted specialists such as the monarch. Thus the review will conclude with a discussion of the significance of temporal variation and induction of cardenolide production in plants, the "lethal plant defense paradox" and an emphasis on the dynamics of the cardenolide-mediated interaction between milkweeds and monarch larvae.

Full Text

Substance (1) Reactions (0) Citing (31) Citation Map

Einzeltreffer der kombinierten Text- und Struktursuche

CAS SciFinder References "Danaus plexippus"

Milkweeds, monarch butterflies and the ecological significance of cardenolides

Substance (1) Reactions (0) Citing (31) Citation Map Save

JOURNAL

Source
 Chemoecology
 Volume: 5/6
 Issue: 3/4
 Pages: 101-117
 Journal: General Review
 1995
 DOI: [10.1007/bf01240595](https://doi.org/10.1007/bf01240595)
 CODEN: CHMOE9
 ISSN: 0937-7409

Database Information
 AN: 1996:433952
 CAN: 125:81784
 CAplus

Company/Organization
 Department of Biological Sciences
 Western Michigan University
 Kalamazoo, Michigan 49008
 United States

Publisher
 Birkhaeuser

Language
 English

By: Malcolm, Stephen B.

A review with 139 references The contribution of Miriam Rothschild to the "monarch cardenolide story" is reviewed in the light of the 1914 challenge by the evolutionary biologist, E. B. Poulton for North American chemists to explain the chem. basis of unpalatability in monarch butterflies and their milkweed host plants. This challenge had lain unaccepted for nearly 50 yr until Miriam Rothschild took up the gauntlet and showed with the help of many able colleagues that monarchs are aposematically colored because they sequester toxic cardenolides from milkweed host plants for use as a defense against predators. By virtue of Dr Rothschild's inspiration and industry, and subsequently that of Lincoln Brower and his colleagues, this tritrophic interaction has become a familiar paradigm for the evolution of chem. defenses and warning coloration. The cardenolide contents of different milkweeds vary quant., qual. and spatially, both within and among species. However, as Dr Rothschild has pointed out in her publications, cardenolides have sometimes blinded us to reality and it is curious how little evidence there is for a defensive function to cardenolides in plants - especially against adapted specialists such as the monarch. Thus the review will conclude with a discussion of the significance of temporal variation and induction of cardenolide production in plants, the "lethal plant defense paradox" and an emphasis on the dynamics of the cardenolide-mediated interaction between milkweeds and monarch larvae.

Keywords: review milkweed **Danaus** interaction cardenolide

View Source Full Text

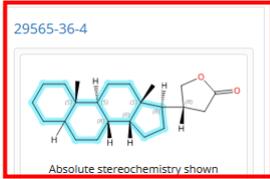
Expand All | Collapse All

Concepts

Substances

Substance (1)

29565-36-4



Absolute stereochemistry shown

Im Einzeltreffernachweis sind sowohl die **Suchworte** als auch das gesuchte **Strukturfragment** farblich unterlegt.

5.3 Phrasensuche und Maskierung

- Durch Anführungszeichen gibt man an, ob eine Zeichenfolge exakt so gesucht werden soll, z.B. „red wine“ und nicht red AND wine.
- Eine Maskierung (oder auch Trunkierung) rechts wird verwendet, um nach einem Wortstamm beliebig viele Buchstaben zuzulassen.
- Bei fungicid* wird nach dem **Wortstamm mit beliebigen Endungen** gesucht, z.B. nach fungicid, fungicides, fungicidal und auch nach Substanzen, deren Name mit Fungicid beginnt.
- Mit einem Fragezeichen (?) kann man nach einem Wortstamm **keins** oder genau **ein** Zeichen zulassen.
- Sowohl das Fragezeichen als auch das Sternchen dürfen auch innerhalb eines Wortes verwendet werden.
- Maskierungen am Wortanfang sind nicht erlaubt.

Phrasensuche

The screenshot shows the CAS SciFinder search page. The search bar contains the text "red wine" and "heart disease". Below the search bar, there are filters for "AND", "Author Name", and "Enter last name, first name middle name". There are also three main search categories: "Retrosynthetic Analysis", "Search CAS Lexicon", and "Search CAS Sequences".

Sucht man Begriffe als Phrase, dann werden diese im Titel, in der Zusammenfassung, im kontrollierten Vokabular (Concepts) und in den Substanznamen gesucht.

Diese Suche findet Nachweise mit der exakten Zeichenfolge und den entsprechenden Plural: *red wine* bzw. *red wines* – aber nicht „*red and white wine*“, da hier zwischen *red* und *wine* noch weitere Worte stehen.

Maskierung (auch Trunkierung bzw. Wildcard)

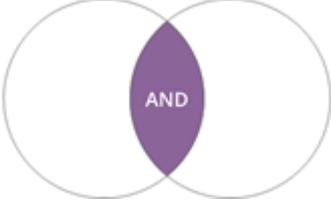
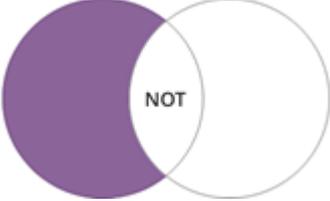
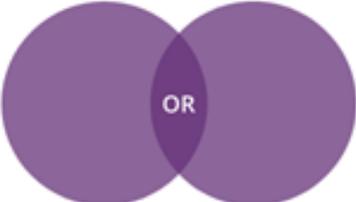
The screenshot shows the CAS SciFinder search page with the search bar containing "fungicid*". A dropdown menu shows suggestions: "Fungicide", "Fungicides", "Fungicidin", "Fungicide R", "Fungicide M", "Fungicide GM", "Fungicide UMA", and "Fungicide DE".

Beispiel einer Wortende-Maskierung: *fungicid** sucht nach dem Wortstamm mit beliebigen Endungen (fungicide, fungicides, fungicidal)

The screenshot shows the search results page for "fungicid*" in CAS SciFinder. The search bar is highlighted with a red box. The results are displayed in a list format. The first result is titled "The strobilurins **fungicides**" and the second is "Mechanisms influencing the evolution of resistance to Qo inhibitor **fungicides**". The word "fungicidal" is also highlighted in red in the first result. The left sidebar shows filter options for "Filter Behavior", "Search Within Results", "Document Type", "Substance Role", "Language", and "Publication Year".

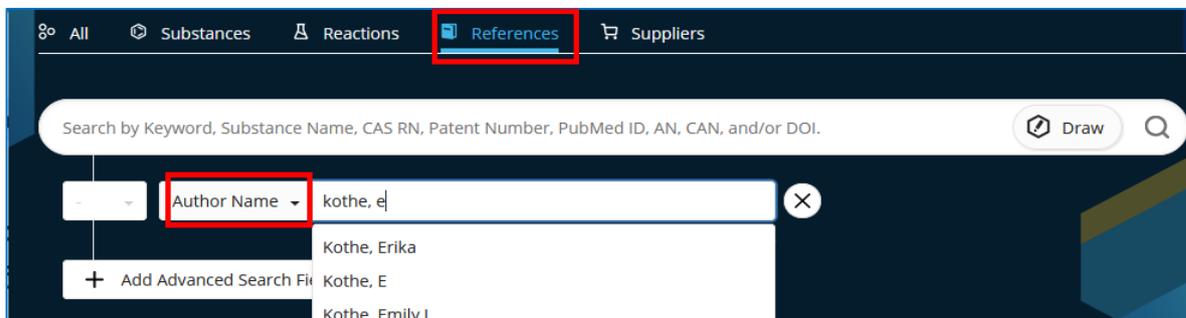
5.4 Suche mit logischen Operatoren

Die folgenden Beispiele sind der Hilfeseite [Reference Search Boolean Operators and Modifiers](#) von SciFinder entnommen:

Operator	Beispiele	Bedeutung
	<ul style="list-style-type: none"> flavor AND extract 3463-67-7 AND 7664-41-7 	<p>Der Operator AND verknüpft Begriffe, die enthalten sein müssen.</p>
	<ul style="list-style-type: none"> electrolysis NOT haptens 1,5-Di-2-naphthalenyl-3-pentanone NOT Dibenzylideneacetone 	<p>Der NOT-Operator gibt einen Begriff an, der ausgeschlossen werden soll.</p>
	<ul style="list-style-type: none"> ("flavor" OR "extract") AND ("turmeric" OR "curcumin") (flavor NOT dye) OR extract 13463-67-7 OR 7664-41-7 	<p>Der Operator OR fordert, dass mindestens einer der Begriffe gefunden wird. Es können natürlich auch mehrere oder alle der mit OR verknüpften Terme enthalten sein.</p>

5.5 Wie finde ich Publikationen eines bestimmten Autors?

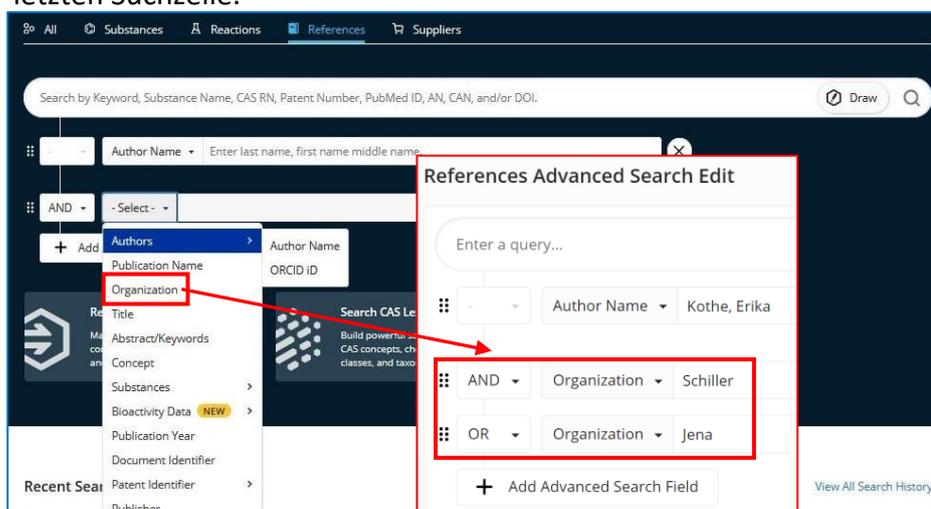
- Wenn man nach Autoren, Zeitschriften oder Einrichtungen suchen will, dann kann der Name des Autors bei *References/Author Name* eingegeben werden.
- Es erscheinen automatisch Vorschläge zu diesem Namen, hier „*Kothe, Erika*“:



- Die Suche nach der Namensvariante mit dem vollständigen Vornamen enthält auch die Publikationen, die mit dem abgekürzten Vornamen gelistet sind.
- Sucht man mit „*Kothe, Erika*“ findet man neben „*Kothe, Erika M.*“ und „*Kothe E*“ auch „*Kothe, E J*“.
- Daher muss sich noch eine Filterung der Treffer nach der richtigen „*Kothe, E.*“ anschließen.
- Das Vorgehen dazu wird im [Punkt 7.](#) erklärt.

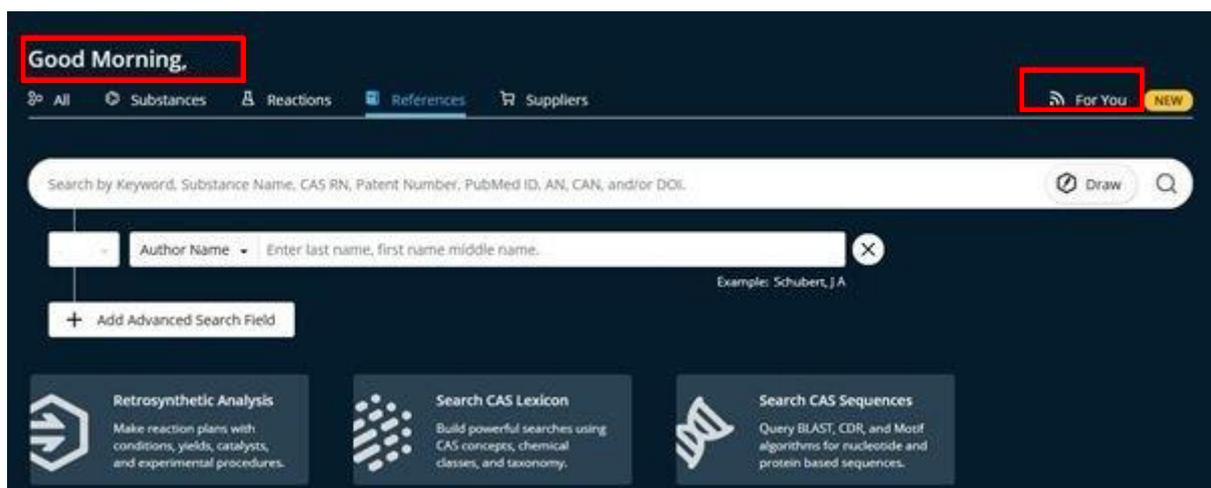


- Es ist auch möglich, die Suche schon bei der Eingabe mit einer weiteren Zeile zu ergänzen und z.B. mit Adressangaben einzuschränken: Jena oder Schiller - reicht als Angabe zur Friedrich-Schiller-Universität.
- Diese neue Zeile erscheint beim Klicken auf **+ Add Advanced Search Field** unter der letzten Suchzeile.



- So kann auch gleichzeitig nach mehreren Autoren, Zeitschriften oder Einrichtungen gesucht werden.

5.6 „For You“ – Registerkarte



„For You“ zeigt eine Liste von Publikationen, die persönlich für den jeweiligen Nutzer basierend auf dessen Suchen und geöffneten Publikationen der letzten 30 Tage ausgewählt wurden. Diese empfohlenen Veröffentlichungen sind innerhalb der letzten sechs Monate veröffentlicht worden.

Die Empfehlungen von „For You“ werden nicht automatisch angezeigt.

Damit ein Nutzer "For You" sieht, ist zuerst eine Implementierung durch SciFinder nötig. Dafür müssen mindestens folgende Bedingungen gegeben sein:

- Referenzsuche im letzten Monat, in der ein bestimmtes Thema identifiziert werden konnte.
- Mit den daraus hervorgegangenen Treffern muss mindestens eine der folgenden Aktionen ausgeführt worden sein: Export, Volltext anzeigen, PatentPak anzeigen, Antworten speichern oder teilen.

Nach einem gewissen Zeitversatz werden dann persönliche Empfehlungen über "For You" zu passenden Artikeln der jüngeren Vergangenheit generiert.

Der Algorithmus zum Identifizieren von Recherchetrends des jeweiligen Nutzers wird täglich ausgeführt. Abhängig vom eigenen Rechercheverhalten ist es daher möglich, dass es Tage gibt, an denen keine Thementrends festgestellt werden und daher die Option „Für Sie“ nicht verfügbar ist.

Beispiel:

- Suche bei „**References**“ nach *uv protective film*, **Filter:** Patents und **CA Section:** “Plastic Fabrication and Uses”
- Die ersten 100 Treffer wurden gespeichert.
- Von einer ACS-Publikation wurde der Volltext heruntergeladen.

The screenshot shows the CAS SciFinder search results for "uv protective film". The search is filtered by "Document Type: Patent" and "CA Section: Plastics Fabrication and Uses". The results list 39,088 items, with 100 selected. The first result is a patent titled "Fully anti-ultraviolet protection film and preparation method thereof" by Guangdong New Vision Film Co., Ltd. The second result is a journal article titled "UV protection multilayer fluoropolymer film" by Toyo Polymer Co., Ltd. A red box highlights the "Patent" filter in the "Filter Behavior" section. Another red box highlights a download button with the text "Downloading file 'UV_tagged_100'. This may take a moment."

- Nach einem Tag war der „For You“ Button auf der Startseite sichtbar und konnte angeklickt werden → zunächst acht Kacheln mit Literaturempfehlungen

The screenshot shows the "For You" section of the CAS SciFinder interface. It displays a grid of eight literature recommendation tiles. The third tile in the top row is highlighted with a red box and has a tooltip menu open over it. The tooltip menu contains three options: "Add to Project", "Save", and "View All". The highlighted tile is titled "Preparation method of fireproof and high-strength protective film for UnionPay cards" by China CN117070105 A 2023-11-17.

- Aus dieser Ansicht heraus lassen sich **einzelne Treffer** oder auch eine Liste mit insgesamt 25 Empfehlungen anzeigen.

- Zu **einzelnen Treffern** in der bekannten Einzeltreffer-Ansicht kommt man nach Anklicken der entsprechenden Kachel.

Preparation method of fireproof and high-strength protective film for UnionPay cards

China CN117070105 A 2023-11-17 |

6 0 0 0 Citation Map

In this Reference By: Wang, Yuanzhen; Ye, Qing; Wu, Lei; Wu, Sai

- [IPC Data](#)
- [CAS Concepts](#)
- [Substances](#)

Title fireproof and high-strength protective film for UnionPay cards composed of: polymer fireproof materials, nanoscale silanizing agents, high-strength fibers and auxiliary materials, the polymer fire-proof materials account for 40%-60% of the total weight of the protective film; nanosilization agents account for 10%-30% of the total weight of the protective film; high-strength fibers account for 10%-20% of the total weight of the protective film; auxiliary materials account for 10%-20% of the total weight of the protective film; auxiliary materials account for 10%-30% of total film weight

Keywords: polymer fireproof strength protective film coating unionpay card

PatentPak Viewer Get Prior Art Analysis Full Text

Publication Information Patent View More

- **Eine Liste aller 25 empfohlenen Publikationen auf einmal** in der gewohnten Trefferlisten-Ansicht öffnet sich nach Anklicken von „**View All**“ unter den drei Punkten.

Mit dieser Trefferliste kann wie gewohnt gearbeitet werden: Eingrenzen über Filter, Speichern, Herunterladen, Teilen usw.

Reference results for you from 20 Februar 2024

Substances Reactions Citing Knowledge Graph

Filter Behavior Filter by Exclude

Search Within Results

Document Type

- Journal (7)
- Patent (18)

Language

- Chinese (10)
- English (7)
- Korean (4)
- German (3)
- Japanese (1)

Publication Year

2014 2024

No. Min. to No. Max. Apply

25 Results

1

Production of composite materials with polymer films and IR-reflective coatings

Assignee: Heiq RAS AG
Germany, DE102022117520 A1 2024-01-18 | Language: German, Database: CPlus

An optically-transparent composite material consists of: a polymer film transparent to IR radiation, the polymer film transparent to IR radiation having a mean spectral transmission of at least 40% in a wavelength range of 5-30µm; and an IR radiation-reflecting coating applied onto the polymer film, the coating comprising at least one elec. conductive material.

PatentPak Full Text Substances (16) Reactions (0) Citing (0) Citation Map

2

Production of composite materials with polymer films and IR-reflective coatings

Assignee: Heiq RAS AG
World Intellectual Property Organization, WO2024013219 A1 2024-01-18 | Language: German, Database: CPlus

An optically-transparent composite material consists of: a polymer film transparent to IR radiation, the polymer film transparent to IR radiation having a mean spectral transmission of at least 40% in a wavelength range of 5-30µm; and an IR radiation-reflecting coating applied onto the polymer film, the coating comprising at least one elec. conductive material.

For You NEW

Add to Project Save View All

- **Weitere Details zu „For You“-Empfehlungen:**
<https://cas-product-help.zendesk.com/hc/en-us/articles/20537850176013-For-You-Recommendations>

6. Wie kann ich meine Treffermenge sortieren?

Jede Trefferliste kann nach verschiedenen **Aspekten** sortiert werden:

- **Chronologisch aufsteigend:** Älteste Publikationen vorn in der Liste, neueste hinten in der Liste
- **Chronologisch absteigend:** Neueste Publikation vorn in der Liste, älteste hinten in der Liste
- **Aufsteigende Zugangsnummern:** Publikationen, die gerade erst in die Datenbank aufgenommen wurden, stehen am Ende der Liste
- **Absteigende Zugangsnummern:** Publikationen, die gerade erst in die Datenbank aufgenommen wurden, stehen am Anfang der Liste
- **Sortierung nach der Zitierhäufigkeit:** Die Veröffentlichung, die am meisten zitiert wird, steht am Anfang der Liste. Die anderen Publikationen sind nach absteigender Zitierhäufigkeit angeordnet.
- **Sortierung nach der Relevanz:** Dem Ranking nach der Relevanz wird in SciFinder eine große Bedeutung beigemessen. Die Sortierung nach der Relevanz ist **voreingestellt**. Ein neuer, eigens dafür entwickelter Algorithmus zeigt am Anfang der Trefferliste gleich die relevantesten Ergebnisse an. Die Treffer am Ende der Liste sind wahrscheinlich am wenigsten relevant.



Hier die Treffer einer Suche nach „Kothe, E“ als Autorin, eingeschränkt mit den Suchworten „fung* OR Schizophyllum“ sortiert nach Neuheit bzw. Zitierhäufigkeit:

The top screenshot shows search results sorted by 'Publication Date: Newest'. The results list includes:

- 1. Special issue: Pathogenic microorganisms. Journal of Basic Microbiology (2024), 64(5), 2400173 | Language: English, Database: CApus and MEDLINE. By: Kothe, Erika.
- 2. Pre-symbiotic response of the compatible host spruce and low-compatibility host pine to the ectomycorrhizal fungus *Tricholoma vaccinum*. Frontiers in microbiology (2023), 14, 1280485 | Language: English, Database: MEDLINE. By: Ezediolokpu, Marycollette Ndid; Halitschke, Rayko; Krause, Katrin; Boland, Wilhelm; Kothe, Erika.
- 3. Ectomycorrhizal Community Shifts at a Former Uranium Mining Site. By: Boedtanou, Olan; Kothe, Erika; Krause, Katrin.

The bottom screenshot shows search results sorted by 'Times Cited'. The results list includes:

- 1. Genome sequence of the model mushroom *Schizophyllum commune*. By: Ohm, Robin A.; de Jong, Jan F.; Lugones, Luis G.; Aerts, Andrea; Kothe, Erika; Stajich, Jason E.; de Vries, Ronald P.; Record, Eric; Levasseur, Anthony; Baker, Scott E.; et al. Nature Biotechnology (2010), 28(9), 957-963 | Language: English, Database: CApus and MEDLINE. Citing (341).
- 2. Basidiomycete mating type genes and pheromone signaling. By: Raudeskoski, Marjatta; Kothe, Erika. Eukaryotic Cell (2010), 9(6), 847-859 | Language: English, Database: CApus and MEDLINE. Citing (118).
- 3. Interaction of endophytic microbes with legumes.

7. Wie kann ich meine Treffermenge eingrenzen?

- Die Trefferanzahl und damit auch die Anzeige der Ergebnisse ändert sich automatisch, wenn Filter angewendet oder wieder entfernt werden.
- Es stehen u.a. folgende Filter zur Verfügung: Dokumententypen (z.B. Zeitschriftenartikel oder Patente), Sprache, Publikationsjahr, Autoren, Organisationen/Einrichtungen, Zeitschriftennamen, Konzepte bzw. Datenbank (CAplus oder Medline).
- Außerdem kann die Trefferzahl mit einer zweiten Suche innerhalb der schon gefundenen Antworten mit „**Search Within Results**“ präzisiert bzw. reduziert werden. (s. Pkt. 7.1)

7.1 Wie schränke ich meine Suche mit neuen Wörtern ein?

- Mit der Schaltfläche „**Search Within Results**“ in der linken Navigationsleiste und der Auswahl von „**Filter by**“ können weitere Suchterme zur Suchfrage hinzugefügt werden, um den Antwortsatz zu präzisieren.
- „**Search Within Results**“ kann bis zu dreimal hintereinander bei einem Antwortsatz erfolgen!
- Wählt man dagegen „**Exclude**“ aus, können auch bestimmte Begriffe von der Suche ausgeschlossen werden

- Neue, auf 24 Treffer **verkürzte** Antwortliste:

7.2 Wie schränke ich meine Suche zeitlich ein?

- Um die Suche auf bestimmte Publikationsjahre einzuschränken, gibt man einfach Anfangs- und Endjahr des gewünschten Zeitraums ein.

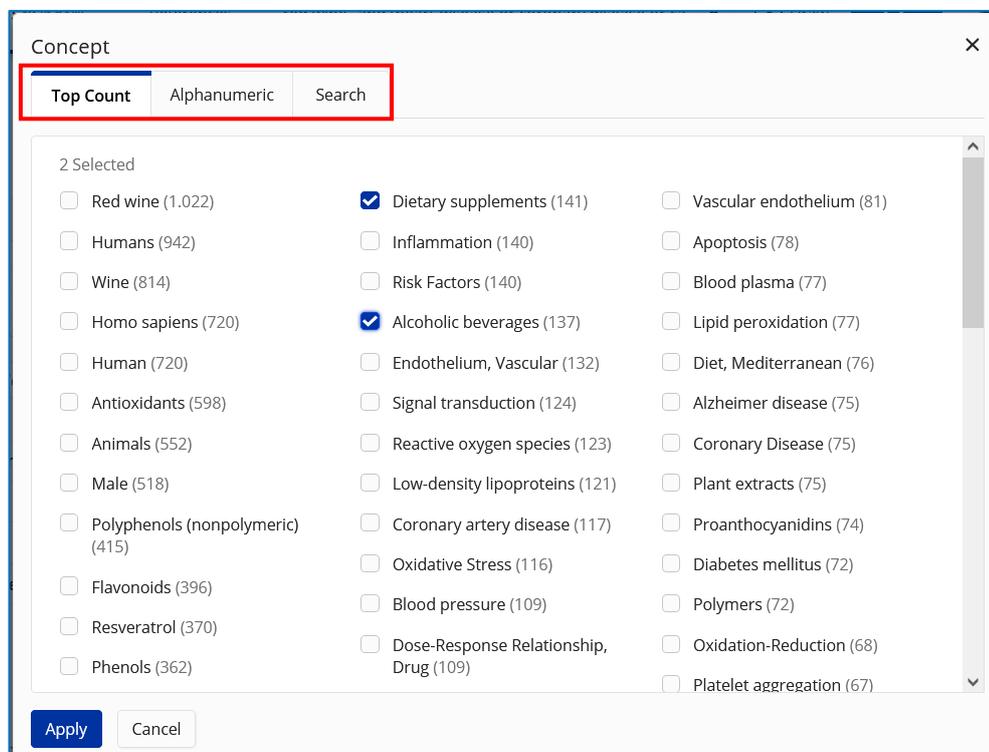
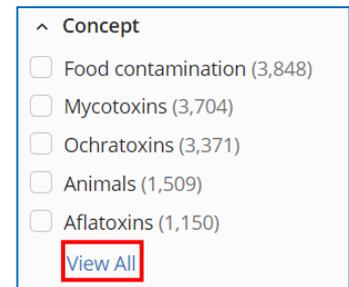


- Mit **View larger** kann man sich die Abbildung in einem größeren Format ansehen und dann den gewünschten Zeitraum direkt unter dem Säulendiagramm mit dem Schieberegler auswählen.

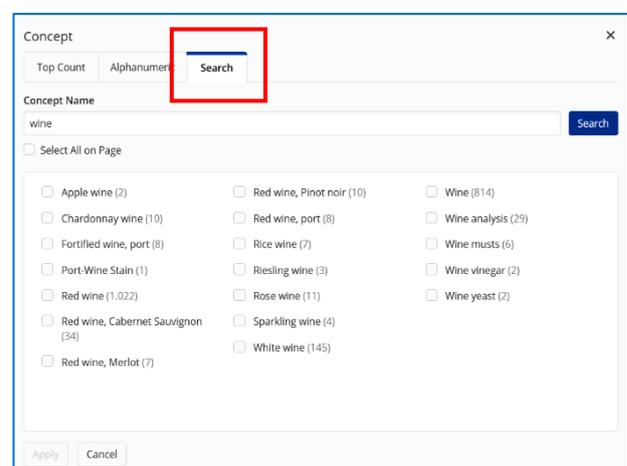


7.3 Eingrenzen/Filtern der Treffer mit „Concepts“

- In jeder Filterkategorie (hier am Beispiel von „Concepts“) können außer den jeweils angezeigten fünf Topwerten mit „View All“ zusätzliche Elemente zur Filterung der Treffermenge hinzugefügt werden.
- Nach Anklicken von „View All“ sieht man alle für die Publikationen in der Trefferliste vergebenen „Concepts“ bzw. Indexterms (Schlagworte).
- Diese Schlagworte lassen sich auf verschiedene Art sortieren:
 - **Top Count** gibt die indizierten Konzepte nach Häufigkeit aus.
 - **Alphanumeric** zeigt die Liste sortiert nach Anfangsbuchstaben an.



- **Search** erlaubt es, selbst nach indizierten Konzepten zu suchen und diese dann für eine Filterung zu nutzen. Dabei ist auch die Anwendung von Trunkierungen möglich.



7.4 Eingrenzen/Filtern der Treffer mit „*Substance Roles*“

Im Anschluss an eine Suche nach chemischen Substanzen und dem Wechsel zur Anzeige der dazugehörigen Referenzen lassen sich diese mithilfe der „*Substance Roles*“ in der linken Navigation auf bestimmte thematische Aspekte eingrenzen.

Die „*Substance Roles*“ präzisieren die Funktion chemischer Verbindungen in einer Textstelle, sie geben z. B. darüber Auskunft, dass die Substanz hergestellt wird oder dass etwas zu deren Verwendung gesagt wird.

„*Substance Roles*“ werden sowohl für jede indexierte Substanz als auch für ganze Substanzklassen vergeben.

The screenshot shows the CAS SciFinder interface. At the top, there's a search bar with 'References' selected and 'Enter a query...' placeholder. Below the search bar, there are navigation tabs: 'Substances', 'Reactions', 'Citing', and 'Knowledge Graph'. The main content area is titled 'References for 303-47-9'. On the left, there's a 'Filter Behavior' panel with 'Filter by' and 'Exclude' options. Under 'Search Within Results', there's a search box and a 'Searching for...' section with 'red wine' and 'liquid chromatography' entered. In the 'Document Type' section, 'Substance Role' is selected and highlighted with a red box. Other options include Occurrence (59), Analytical Study (58), Biological Study (32), Preparation (1), and Uses (1). At the bottom of the filter panel, 'View All' is also highlighted with a red box. The main search results area shows '93 Results' and a list of results. The first result is 'Assay of Ochratoxin A in Wine and Beer by High-Pressure Liquid Chromatography Photodiode Array and Gas Chromatography Mass Selective Detection' by Soleas, George J.; Yan, Joseph; Goldberg, David M. The abstract text is visible, mentioning 'wines' and 'beers'.

„*Substance Roles*“ werden im Rahmen der Indexierung bei CAS im Allgemeinen seit 1967 vergeben. Bei Verwendung dieser „*Substance Roles*“ zur Einschränkung der Treffermenge wird damit automatisch auch der Zeitraum der Antworten auf 1967 bis heute begrenzt.

Wichtige Ausnahme: Die Rolle „Preparation“ reicht bis 1907 zurück und lässt damit Treffer von 1907 bis heute im Antwortsatz.

Die auf der nächsten Seite folgende Liste zeigt alle von CAS verwendeten „*Substance Roles*“.

Die fettgedruckten „*Substance Roles*“ sind sogenannte „*Super Roles*“. Darunter sind die dazugehörigen spezifischen Rollen gelistet, die alle mitgefunden werden, wenn die entsprechende „*Super Role*“ ausgewählt wird.

(Quelle: <https://www.cas.org/sites/default/files/documents/casroles.pdf>)

Welche weiteren „CAS Roles“ kann ich in SciFinder finden?

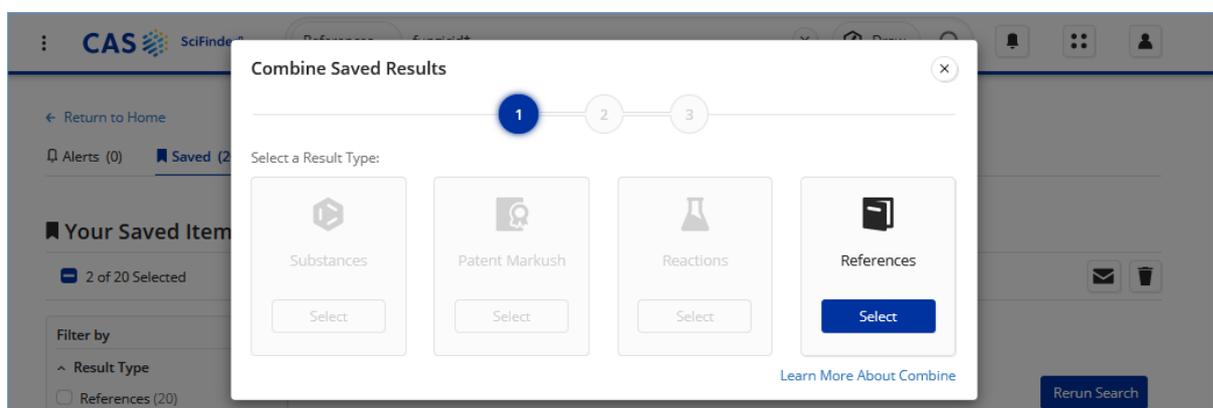
ANST Analytical Study	PREP Preparation (5)
ANT Analyte	BMF Bioindustrial Manufacture
AMX Analytical Matrix	BPN Biosynthetic Preparation
ARG Analytical Reagent Use	BYP Byproduct
ARU Analytical Role, Unclassified	IMF Industrial Manufacture
	PUR Purification or Recovery
	SPN Synthetic Preparation
BIOL Biological Study	PROC Process
ADV Adverse Effect, Including Toxicity	BCP Biochemical Process (3)
AGR Agricultural Use	GPR Geological or Astronomical Process
BAC Biological Activity or Effector, Except Adverse (2)	PEP Physical, Engineering, or Chemical Process
BCP Biochemical Process (3)	REM Removal or Disposal
BMF Bioindustrial Manufacture	
BPN Biosynthetic Preparation	PRPH Prophetic Substance (7)
BSU Biological Study, Unclassified	RACT Reactant or Reagent (3,6)
BUU Biological Use, Unclassified	RCT Reactant (6)
COS Cosmetic Use (3)	RGT Reagent (3)
DGN Diagnostic Use (3)	
FFD Food or Feed Use	USES Uses
NPO Natural Product Occurrence (3)	AGR Agricultural Use
PAC Pharmacological Activity (3)	ARG Analytical Reagent Use
PKT Pharmacokinetics (3)	BUU Biological Use, Unclassified
THU Therapeutic Use	CAT Catalyst Use
	COS Cosmetic Use (3)
CMBI Combinatorial Study (3)	DGN Diagnostic Use (3)
	FFD Food or Feed Use
FORM Formation, Nonpreparative	MOA Modifier or Additive Use
FMU Formation, Unclassified	NUU Other Use, Unclassified (8)
GFM Geological or Astronomical Formation	POF Polymer in Formulation
	TEM Technical or Engineered Material Use
NANO Nanomaterial (4)	THU Therapeutic Use
OCCU Occurrence	
GOC Geological or Astronomical Occurrence	Specific roles that are not associated with any super roles:
NPO Natural Product Occurrence (3)	MSC Miscellaneous
OCU Occurrence, Unclassified	PRP Properties
POL Pollutant	
(1) Super roles have 4-letter codes. Specific roles have 3-letter codes. Under each super role are listed the specific roles that are retrieved when you search that super role.	
(2) Used from CA Vol. 66 (1967) to Vol. 135 (2001).	
(3) Used starting with CA Vol. 136 (2002).	
(4) Used starting with CA Vol. 116 (1992).	
(5) The PREP super role has been added to records back to 1907.	
(6) Searching the RCT role retrieves references from CA Vol. 66 (1967) to the present. Searching the RACT super role retrieves references with RCT or RGT references starting with CA Vol. 136 (2002).	
(7) Used starting with records from 2003 to the present.	
(8) Starting in 2002, the searchable text for the NUU role changed from NONBIOLOGICAL USE, UNCLASSIFIED/RL to OTHER USE, UNCLASSIFIED/RL. Search NUU/RL to retrieve records from CA Vol. 66 (1967) to the present.	
Note: The roles CPN, CPS, CRG, CRT, CST, CUS, DEV, DMA, EPR, MFM and PYP are no longer in use, but have been mapped to current roles. The roles BOC, BPR and PNU have been eliminated and are no longer searchable, but have been replaced by broader roles when appropriate.	

In der SciFinder Hilfe kann die exakte Definition jeder einzelnen Rolle nachgesehen werden:
<https://cas-product-help.zendesk.com/hc/en-us/articles/9946743065101-Advanced-Role-Descriptions>

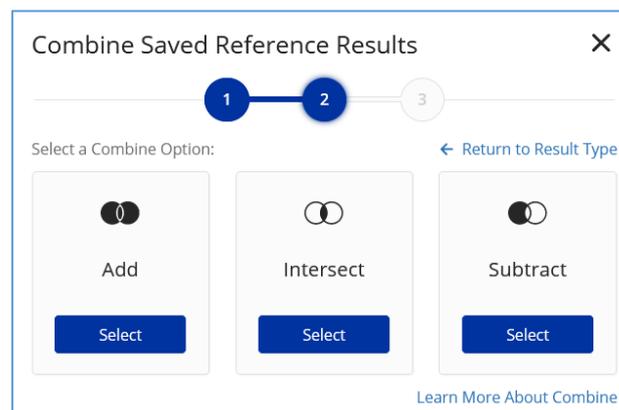
8. Wie kann ich mit den Treffern weiter verfahren? Combine, Speichern, Export, Zugang zum Volltext

8.1 „Combine“

- Antwortsätze können über „**Combine**“ mit anderen (**gespeicherten**) Antwortsätzen verbunden werden.
- Die Antwortsätze müssen für ein „**Combine**“ den gleichen Typ haben, z.B. References: Eine gespeicherte Antwort an Reaktionen kann man nicht mit denen einer Substanz- oder Referenzsuche kombinieren.



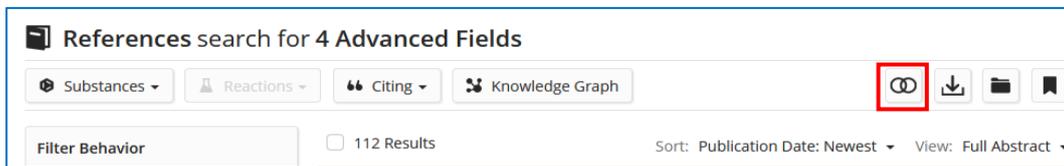
- Es gibt **drei Kombinationsmöglichkeiten**:



- **Add**: Alle Antworten von 2-5 Antwortsätzen können mit **OR** verknüpft werden. Dabei werden Duplikate (Treffer, die in beiden Trefferlisten enthalten sind) entfernt.
- **Intersect**: Alle Antworten von 2-5 Antwortsätzen können mit **AND** verknüpft werden. Es werden nur Treffer angezeigt, die in allen Trefferlisten enthalten sind.
- **Subtract**: Hiermit kann man die Ergebnisse einer Suche bei den Treffern einer anderen Suche ausschließen (im Sinne von **NOT**).

8.1.1 „Combine“ direkt nach einer Recherche

Gleich nach einer Substanz-, Patent-Markush-, Reaktions- oder Referenzsuche wird oberhalb der Trefferliste auf das Symbol „Combine“ geklickt:



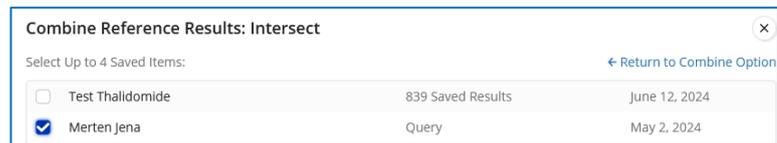
Hinweis: Diese Option ist nur verfügbar, wenn mindestens ein gespeichertes Element desselben Such-/Ergebnistyps vorhanden ist ansonsten ist das Symbol nicht anklickbar.

Eine der drei oben gezeigten Kombinationsmöglichkeiten „Add – Intersect – Subtract“ wird durch Anklicken ausgewählt.



Beispiel „Intersect“:

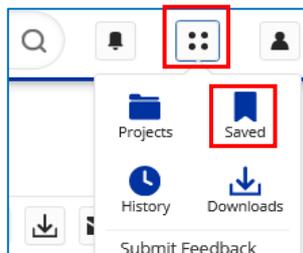
Aus den gespeicherten Antwortsätzen wird der für die Kombination gewünschte mit einem Haken versehen.



[View Results](#)

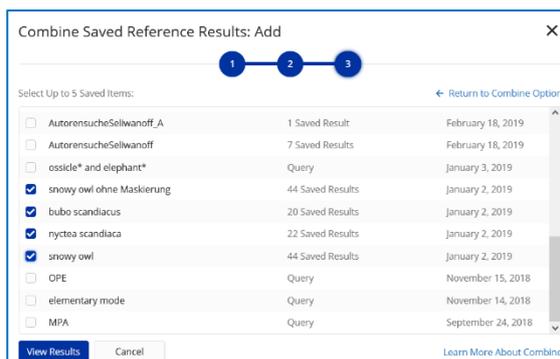
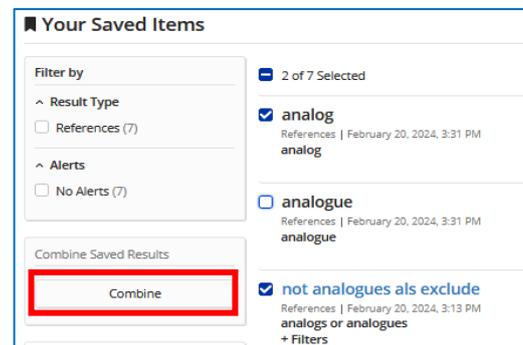
„View Results“ öffnet dann die kombinierte Trefferliste.

8.1.2 „Combine“ von gespeicherten Antwortsätzen



Im Menü-Symbol wird „Saved“ ausgewählt, um zu den gespeicherten Antwortsätzen vorheriger Substanz-, Patent-Markush-, Reaktions- oder Referenzsuchen zu kommen.

Nach Auswahl der zu kombinierenden Trefferlisten führt das Anklicken von „Combine“ zur Auswahl der Kombinationsmöglichkeiten „Add – Intersect – Subtract“.



Beispiel: ADD

(mit OR verknüpfte Ergebnisse)

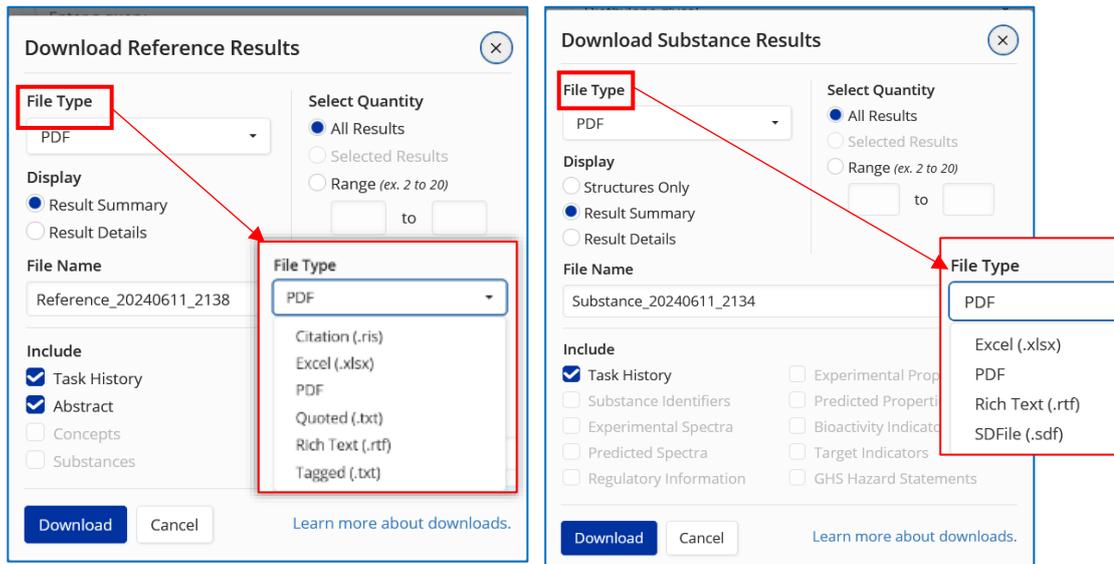
Mit „View Results“ bekommt man die resultierende Trefferliste angezeigt.

8.2 Exportieren und Speichern und von Ergebnissen, Erstellen von Alerts

- Der Button „**Download Results**“ oberhalb der Trefferliste dient zum Herunterladen der Suchergebnisse.



- Die Trefferlisten der Suche können bei **References**, **Substances** etc. jeweils in unterschiedlichen Formaten heruntergeladen werden.
- Bei References steht neben dem PDF-Format auch das rtf-Format (neben Formaten für den Export in Literaturverwaltungsprogrammen, wie (.ris) und Tagged) zur Verfügung.

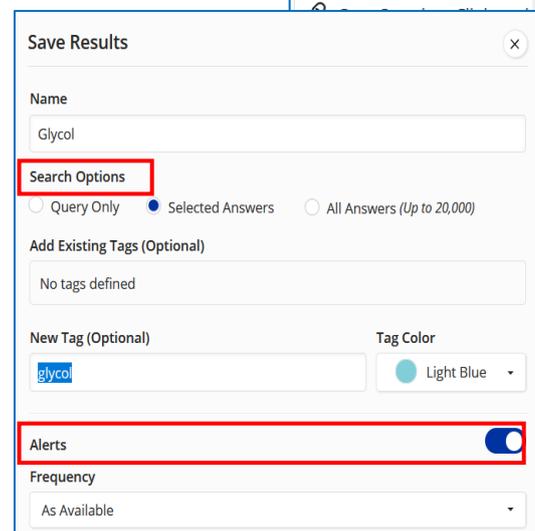


- Bei größeren Treffermengen werden bei „**Result Summary**“ die ersten 500 Dokumente heruntergeladen und im Detailformat („**Result Detail**“) die ersten 100.

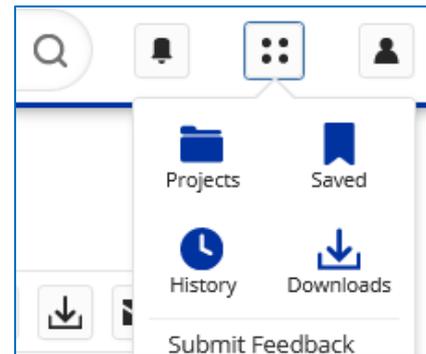
- Mit „**Save**“ kann man Suchfragen bzw. deren Trefferlisten unter einem selbstgewählten Namen speichern (nötig für ein „**Combine**“ mehrerer Antwortsätze, [s. Pkt. 8.1](#)).



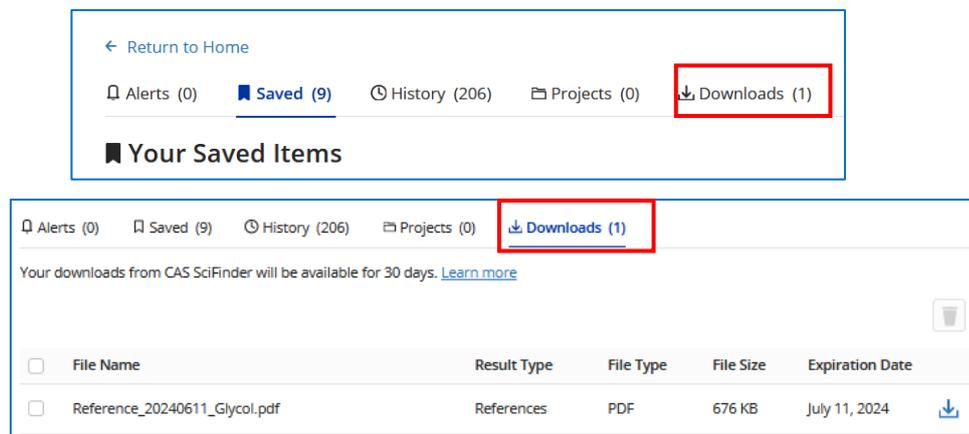
- Beim Speichern der Treffer kann gleichzeitig ein „**Alert**“ initiiert werden.
- Man kann dabei auswählen, wann man benachrichtigt werden will: sofort, wenn es neue Treffer gibt („**As Available**“) oder lieber wöchentlich bzw. monatlich.
- Man bekommt dann zum gewünschten Zeitpunkt eine E-Mail und kann sich die Ergebnisse in SciFinder ansehen.
- Zum Initiieren des Alerts muss der Button aktiviert werden. Voreingestellt ist „**No Alerts**“.



- Mit dem Button „**Menu**“ kann man sich alle gespeicherten Suchen („**Saved**“) anzeigen lassen und ebenso den Suchverlauf („**History**“).



- Alle eigenen Downloads der Rechercheergebnisse sind zusätzlich für 30 Tage bei den gespeicherten Suchen für ein erneutes Herunterladen verfügbar.



8.3 Import von Ergebnissen aus SciFinder in EndNote

- Zum Import der Rechercheergebnisse speichert man diese über den „**Download**“-Link im **tagged** – oder **ris**-Format:
 - **Import im tagged-Format:**
Bei Import-Option in EndNote: **SciFinder (CAS)** auswählen.
 - **Import im ris-Format:**
Bei Import-Option in EndNote: **Reference Manager (RIS)** auswählen.
- Das **tagged**-Format ist zu bevorzugen, weil hier der Inhalt aller Felder in das Literaturverwaltungsprogramm übertragen wird.

8.4 Wie komme ich zum Volltext?

- Dazu einfach den Button „Full Text“ anklicken.

Raising a glass of red wine against cancer, or not?
 By: Frampton, Adam E; Stebbing, Justin
 The Lancet. Oncology (2012), 13(7), 669-70 | Language: English, Database: MEDLINE

There is no abstract available for this document.

Full Text ▾

Substances (0) Reactions (0) Citing (1) Citation Map

ThULB-LINKING
 Elektronische Zeitschriftenbibliothek Regensburg (EZB)
 DOI
View all Sources

- Wenn die entsprechende Publikation frei verfügbar oder für die eigene Einrichtung lizenziert ist, kann man direkt auf den Volltext der Publikation zugreifen (**Thulb Linking**).

Home Journals Specialties The Lancet Clinic Global Health Multimedia Campaigns More Information for Submit a Paper

THE LANCET Oncology

Online First Current Issue All Issues Special Issues Multimedia About the Journal

Access provided by Jena University Friedrich Schiller

Volume 13, No. 7, p669-670, July 2012

Raising a glass of red wine against cancer, or not?
 Adam E Frampton, Justin Stebbing
 Published: July 2012
 DOI: [https://doi.org/10.1016/S1470-2045\(12\)70313-3](https://doi.org/10.1016/S1470-2045(12)70313-3)

Summary **Full Text** Tables and Figures Supplementary Material

The question of alcohol consumption is an important component of any thorough medical history, but with conflicting evidence about health risks and benefits associated with drinking, what advice should doctors give to patients? After all, chemical components differ between alcoholic drinks and

Raising a glass of red wine against cancer, or not?

The question of alcohol consumption is an important component of any thorough medical history, but with conflicting evidence about health risks and benefits associated with drinking, what advice should doctors give to patients? After all, chemical components differ between alcoholic drinks and the potential effects are likely to vary. Similarly, or perhaps with evidence, most doctors will default to the "in moderation, as part of a healthy diet" approach. Over the past decade, researchers have attempted to show the health benefits of drinking red wine and have mainly focused on antioxidant and cardioprotective properties. So what is the reality about red wine and cancer? Dr Alexander Henning once proclaimed "Penicillin cures, but wine makes people happy". Is this the extent of red wine's medicinal powers?

The mystical properties of wine have been ingrained in society since the Neolithic period (8500-4500 BC). Archaeological excavations unearthed evidence for large-scale wine production in regions of the Caucasus Mountains, and subsequently in the northern Zagros mountains of Iran. These communities were among the first to fully domesticate the Eurasian grapevine (*Vitis vinifera* ssp. *sativa*), cultivars of which are the basis of most wine production to this day. Wine was a valuable trade commodity and the universal drug at that time: it also provided a lot of energy and was noted to be a social lubricator with psychotropic effects. Around 2350 BC, ancient Egyptians realized the medicinal benefits of plant exudates, especially when dissolved in an alcoholic medium such as Abyssinian wine. Many scholars believe that wine was the primary impetus for the development of western civilization, because healthier individuals (even if intoxicated) lived longer, and the increased human interaction led to enhanced reproductive success. The consequent spread of viticulture can be traced linguistically: the word wine is derived from the Latin *vinum*, the Greek *oinos*, the Arabic *wine*, and the Hebrew *yayin*. The word *oinos* comes from the name of the debauched Greek god of ecstasy, Dionysus (known as Bacchus in Roman mythology), who supposedly provided the ancient Greeks with the secret of

- Mit „View all Sources“ bekommt man alle Links zum Volltext der gewählten Publikation auf einer Seite angezeigt und kann gegebenenfalls eine alternative Quelle auswählen.

CAS SciFinder

Raising a glass of red wine against cancer, or not?
 By: Frampton, Adam E; Stebbing, Justin
 The Lancet. Oncology (2012), 13(7), 669-70 | Language: English, Database: MEDLINE

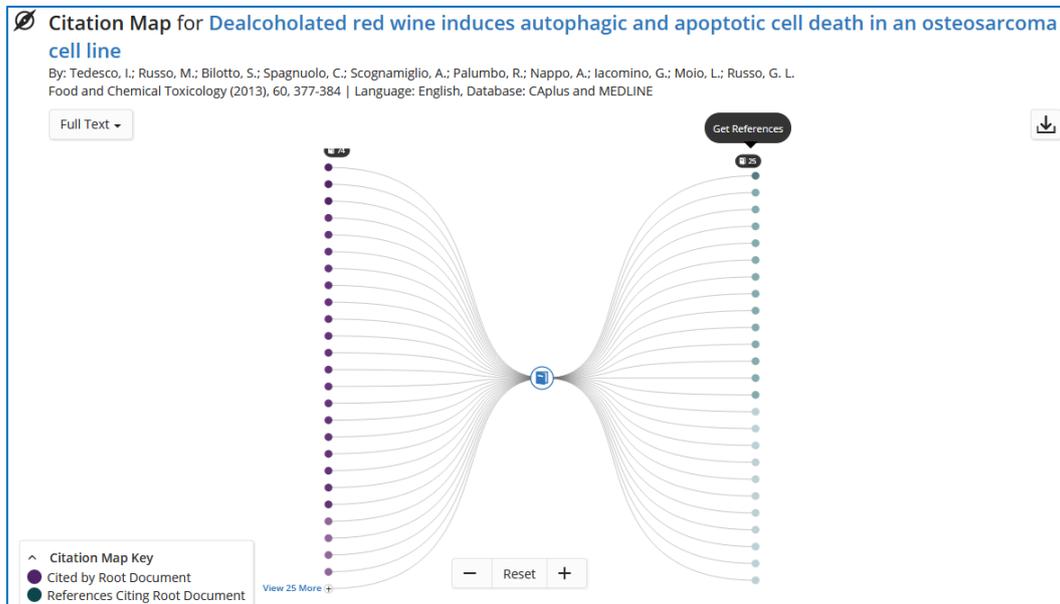
In-house Resources

ThULB-LINKING
 Elektronische Zeitschriftenbibliothek Regensburg (EZB)

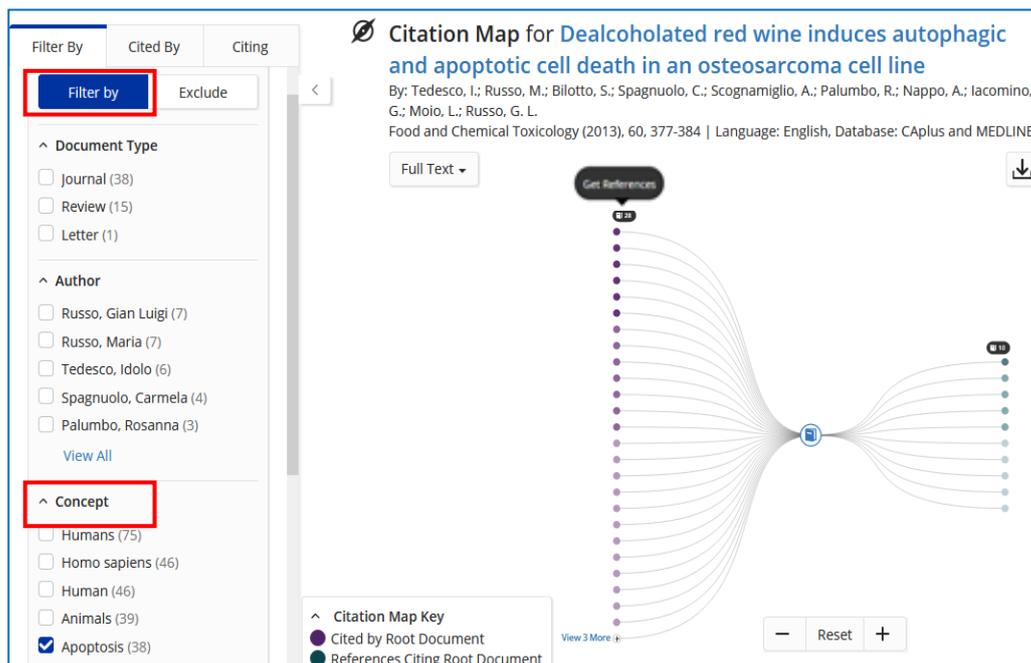
DOI
[10.1016/S1470-2045\(12\)70313-3](https://doi.org/10.1016/S1470-2045(12)70313-3)

9. „Citation Map“

- Die „**Citation Map**“ ist eine übersichtliche Anzeige derjenigen Publikationen, die die aktuell betrachtete Publikation zitieren bzw. die in dieser Publikation zitiert werden.
Hinweis: In der „**Citation Map**“ erscheinen nur die in SciFinder verfügbaren Publikationen, d.h. hier verlinkte Datenbankrecords.



- In der Citation Map gibt es die Filterspalte, die beispielsweise erlaubt, mittels „**Concepts**“ ausschließlich die Zitierungen zu filtern. Das ist eine sehr gute Möglichkeit, zielgerichtet in den Zitierungen einer Schrift nach passenden Publikationen zu suchen.
- Mit „**Get References**“ (sichtbar nach Anklicken der Zahl der zitierten bzw. zitierenden Veröffentlichungen) wird daraus anschließend eine neue Trefferliste generiert, die man speichern bzw. heruntergeladen kann.



10. „History“

- Auf der Startseite werden nach dem Einloggen immer die letzten Suchen angezeigt.
- Diese kann man mit „**Rerun Search**“ nochmals starten (farbige Hervorhebung der Suchworte bleibt dabei erhalten) bzw. mit „**Edit**“ erneut in die Suchzeile einfügen und dort bei Bedarf auch verändern.

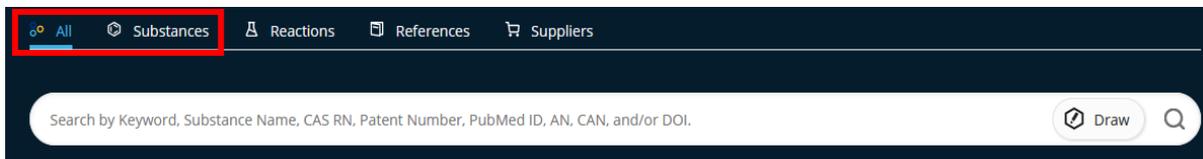
- Während einer Recherche kann mit dem Button „**Menu**“ ebenfalls auf den Suchverlauf („**History**“) zugegriffen werden. Dabei sind auch schon länger zurückliegende Suchen zugänglich.

- Die Such-Historie kann man   herunterladen oder löschen.

Die exportierte History ist eine gute Grundlage für die Erstellung eines Rechercheprotokolls.

11. Suche nach Substanzen

- Vom Startbildschirm aus kann eine Suche nach chemischen Verbindungen sowohl im Modus „**All**“ ([s. Pkt. 11.1](#)) als auch direkt mit „**Substances**“ begonnen werden.



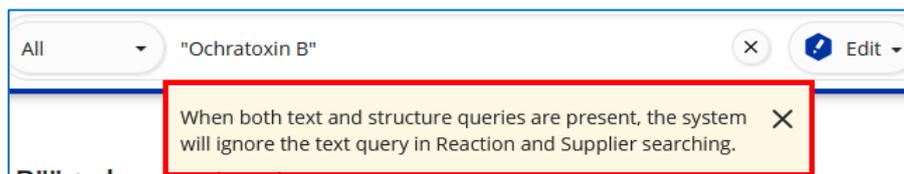
- Die Verbindungen können dabei entweder über eine **Textsuche** mit dem Substanznamen bzw. mit der CAS-Registry-Nummer ([s. auch Pkt. 11.2](#)) oder über eine **Struktursuche** ([s. auch Pkt. 11.5](#)) gefunden werden.
- Eine Identifizierung chemischer Substanzen über bestimmte Eigenschaften, wie z.B. Schmelz- und Siedepunkte, Dichte oder auch über Spektren ist mit der „**Advanced Search**“ möglich ([s. auch Pkt. 11.4](#)).

11.1. Wie suche ich nach Substanzen im Suchmodus „All“?

- Wird bei „All“ ein Substanzname oder eine CAS-Registry-Nummer eingegeben bzw. über „Draw“ eine Verbindung gezeichnet, wird parallel
 - in der Substanzdatenbank,
 - bei den Reaktionen,
 - bei den Lieferanten und
 - nach Publikationen zu dieser Substanz gesucht.



- Substanzen, deren Name aus mehr als einem Wort besteht, sucht man als Phrase mit Anführungszeichen, z.B. „Ochratoxin B“.
- Werden sowohl Text- als auch Strukturfragmente für eine „All“-Search eingegeben, wird die Textteil bei der Suche nach Reaktionen bzw. Lieferanten dieser chemischen Verbindung ignoriert.



- Im Trefferbildschirm werden gleichzeitig die Ergebnisse aus der Substanz- und aus der Reaktionsdatenbank zu der gesuchten Verbindung angezeigt sowie Publikationen (References) zu dieser Substanz und Lieferanten (Suppliers), bei denen man diese kaufen kann.

Results for "Ochratoxin B"

4825-86-9

Reactions for "Ochratoxin B"
View All (30)

31-356-CAS-5464523
Steps: 1 Yield: 100%

References for "Ochratoxin B"
View All (670)

Biotransformation and nephrotoxicity of ochratoxin B in rats
By: Mally, Angela; Keilm-Heusler, Helke; Amberg, Alexander; Kurz, Michael; Zepnik, Herbert; Mantle, Peter; Voelkel, Wolfgang; Hard, Gordon C.; Dekant, Wolfgang
Toxicology and Applied Pharmacology (2005), 206(1), 43-53 | Language: English, Database: CAPlus and MEDLINE

Acute toxicity of ochratoxins A and B in chicks
By: Peckham, John C.; Douplik, Ben Jr.; Jones, Oscar H, Jr.
Applied Microbiology (1971), 21(3), 492-4 | Language: English, Database: CAPlus and MEDLINE

More Substances for "Ochratoxin B"
View All (2)

- Bei den gefundenen **Substanzen** wird zunächst die mit der höchsten Relevanz angezeigt

- Möchte man sich alle gefundenen chemischen Verbindungen ansehen, klickt man bei **„More Substances for Ochratoxin B“** auf **„View All“** (siehe obige Abb).

Dann werden alle bei dieser Suche gefundenen chemischen Verbindungen angezeigt.

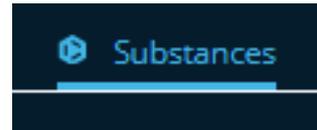
- Eine **Reaktion** und einige **Textstellen** zu Ochratoxin B werden im Ergebnisbildschirm ebenfalls angezeigt. Möchte man sich alle Reaktionen, an denen Ochratoxin B als Reaktant bzw. als Produkt beteiligt ist, ansehen, klickt man auf **„View All“**.

Das gilt auch für die gefundenen Textstellennachweise bzw. Patente, in denen Ochratoxin B vorkommt (**„References“**).

- Die Lieferanten von Ochratoxin B werden beim Klick auf **„Suppliers“** im Trefferbildschirm angezeigt.

Supplier	Substance	Purity	Purchasing Details	Availability
AA BLOCKS LLC Product List United States Last Updated: 19 Dec 2023	4825-86-9 L-Phenylalanine.N-[(3R)-3,4-dihydro-8-hydroxy-3-methyl-1-oxo-1H-2-benzopyran-7-yl]carboxyl-	95-98%	Order From Supplier 1 mg. USD 205.00 5 mg. USD 589.00 Screening	Maintained in stock Ships within 1 week
eNovation Chemicals Product List United States Last Updated: 29 Dec 2023	4825-86-9 L-Phenylalanine.N-[(3R)-3,4-dihydro-8-hydroxy-3-methyl-1-oxo-1H-2-benzopyran-7-yl]carboxyl-	≥99%	Product Information 1 mg. USD 380.00 5 mg. USD 930.00	Maintained in stock Ships within 1 week
Cayman Chemical Catalog United States Last Updated: 5 Jan 2024	4825-86-9 Ochratoxin B	95-98%	Order From Supplier 500 µg. USD 111.00 1 mg. USD 210.00 5 mg. USD 601.00 Screening	Maintained in stock Ships within 1 week
AA BLOCKS LLC Product List United States Last Updated: 19 Dec 2023	4825-86-9 (S)-8-hydroxy-3-methyl-1-oxoisochromane-7-carboxyl-L-phenylalanine	95-98%	Order From Supplier 1 mg 5 mg	Typically in stock Ships within 1 week

11.2. Wie suche ich mit dem Namen bzw. der CAS-Registry-Nummer nach Substanzen?



- Wenn mit dem Namen gesucht werden soll, ist es hilfreich, möglichst viele verschiedene **Namensvarianten** auszuprobieren (z.B. Trivial- und Handelsnamen), denn spezifische Substanzen werden nur gefunden, wenn der Name genauso, wie er eingegeben wird, in der Datenbank enthalten ist. Die verschiedenen Namen trennt man bei der Eingabe mit einem Leerzeichen.
- Möchte man Substanznamen suchen, die aus mehreren Termen bestehen, setzt man die gesamte **Phrase in Anführungszeichen**, z.B. *“Ochratoxin B”* bzw. *“Vanillin propionate”*
- Man kann auch **gleichzeitig nach mehreren verschiedenen Substanzen** suchen. Dazu werden die entsprechenden CAS-Registry-Nummern und/oder Substanznamen nacheinander – ebenfalls getrennt durch Leerzeichen – eingegeben. Bei der gleichzeitigen Suche mit verschiedenen Namen bzw. CAS-RNs bitte **nicht** den logischen Operator **OR** verwenden, OR würde dabei ebenfalls als Substanz betrachtet.
- Eine Namensuche ist auch mit Wortende-Maskierung mittels ***** möglich.

Beispiel: Suche nach Vanillin mit dem Namen

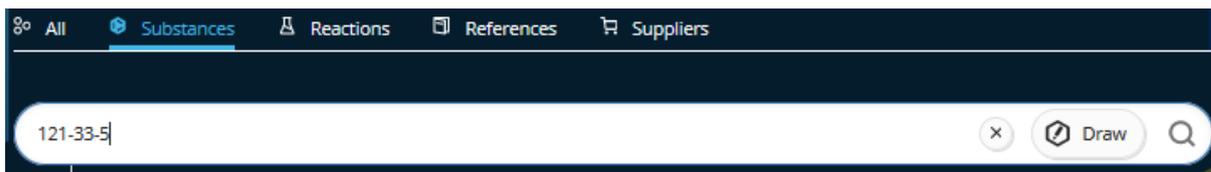


Treffermenge: Außer dem Substanzeintrag des gesuchten Vanillins werden auch einige Verbindungen angezeigt, die u.a. Vanillin enthalten.

Beispiel: Suche nach Vanillin mit der CAS-Registry-Nummer

Was ist die CAS-Registry-Nummer?

- Internationaler Bezeichnungsstandard für chemische Substanzen
- Registrierungsnummer, die jede Chemikalie bei Aufnahme in die CAS-Substanzdatenbank erhält.
- Ermöglicht eine **eindeutige** Identifizierung, da jede Nummer nur für die entsprechende Substanz gilt.



Das **Ergebnis** enthält nur einen Eintrag, das Vanillin.

1 Result

1 ⋮

121-33-5 ↶ ↷

C₈H₈O₃
Vanillin

45K
References

19K
Reactions

144
Suppliers

Es ist somit eindeutiger als die Ergebnismenge bei der Suche mit dem chemischen Namen als Suchterm.

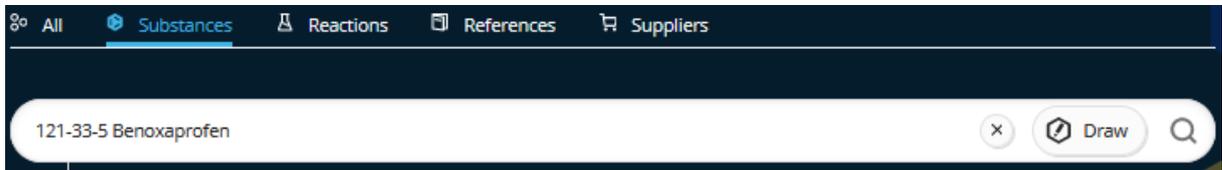
Die Suche mit der CAS RN ist daher der Suche mit dem Namen vorzuziehen.

CAS RN werden in vielen Zusammenhängen genutzt, auch in Chemikalienkatalogen oder bei Wikipedia. Unterschiedliche Varianten einer Substanz, z.B. Salze, Isotope, Enantiomere, Radikale haben je eine eigene CAS RN.

Wenn widersprüchliche Auflistungen zu Fragen nach der korrekten CAS RN führen, ist SciFinder als Quelle immer vorzuziehen. CAS ist die Organisation, die die CAS RN vergibt.

Beispiel: Suche nach mehreren Substanzen gleichzeitig

Die CAS-Registry-Nummern und/oder Substanznamen nacheinander eingeben, getrennt durch Leerzeichen:



The screenshot displays the search results for '121-33-5 benoxaprofen'. On the left, there is a 'Filter Behavior' panel with options for 'Filter by' and 'Exclude', and a 'Search Within Results' section with filters for 'Reaction Role' (Product, Reactant, Reagent, Catalyst, Solvent) and 'Reference Role' (Adverse Effect). The main results area shows two items:

- Item 1:** CAS number 121-33-5, chemical structure of Vanillin ($C_8H_8O_3$), with 45K references, 19K reactions, and 144 suppliers.
- Item 2:** CAS number 51234-28-7, chemical structure of Benoxaprofen ($C_{16}H_{12}ClNO_3$), with 981 references, 45 reactions, and 47 suppliers.

Beide Substanzen werden gefunden, die zum Treffer führenden Suchterme sind **hellblau** unterlegt.

Beispiel: Suche nach Substanzen, deren Namen aus mehreren Teilen besteht

Suche nach „Ochratoxin A“, wobei die gesamte Phrase in Anführungszeichen gesetzt wird.

The screenshot shows the search results for 'Ochratoxin A'. The search bar contains the query 'Ochratoxin A' in quotes. The results panel shows two items:

- Item 1:** CAS number 303-47-9, chemical structure of Ochratoxin A ($C_{20}H_{18}ClNO_6$), with 9,174 references, 54 reactions, and 58 suppliers. A note indicates 'Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)'.
- Item 2:** CAS number 1428244-56-7, with the note 'Image Not Available' and 'Notes: An immunoaffinity column for purifn. of ochratoxins A and B (Romer Labs)'. It is identified as 'Unspecified Ochrastar R IAC' and has 1 reference, 0 reactions, and 0 suppliers.

Beispiel: Suche nach Substanzen, deren Namen am Wortende maskiert wird

Gesucht werden Vanillinverbindungen → der Suchterm ist hier **Vanillin***.

Das * dient hier zur Maskierung des Wortendes, d.h. es ist egal, welche Schriftzeichen nach Vanillin noch kommen.

Treffermenge: Gefunden werden alle Verbindungen, deren Name mit Vanillin beginnt.

The screenshot shows the CAS SciFinder search results for "vanillin*". The search bar contains "vanillin*" and the results are sorted by relevance. The left sidebar shows filter options for Reaction Role (Product, Reactant, Reagent, Catalyst, Solvent) and Reference Role. The main results area displays three entries:

- 121-33-5**: Vanillin (C₈H₈O₃). 46K References, 19K Reactions, 142 Suppliers.
- 68527-74-2**: Vanillin propylene glycol acetal (C₁₁H₁₄O₄). 137 References, 27 Reactions, 43 Suppliers.
- 174143-90-9**: Vanillin propionate (C₁₁H₁₂O₄). 58 References, 69 Reactions, 34 Suppliers.

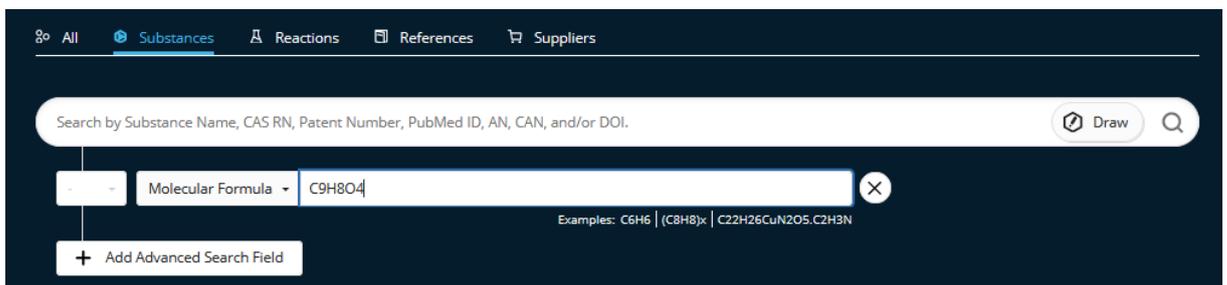
Zusammenfassung

Suchworte	Ergebnis
<i>Vanillin</i>	Vanillin-Substanzeintrag
<i>121-33-5</i>	Vanillin-Substanzeintrag
<i>“Vanillin propionate“</i>	Vanillinpropionat-Substanzeintrag
<i>Vanillin “Vanillin propionate“</i>	2 Substanzeinträge: Vanillin sowie Vanillinpropionat
<i>Vanillin*</i>	Alle Substanzeinträge, deren chemische Namen mit ‚Vanillin‘ beginnen.
<i>WO2019020773</i>	Alle Einträge der für die Patentanmeldung WO2019020773 indextierten spezifischen Substanzen

Kennen Sie die CAS-Registry-Nummer der gesuchten Verbindung nicht und wird der eingegebene Name nicht gefunden, so kann unter Umständen eine Suche mit der **Summenformel** versucht werden (s. nächste Seite). Führt auch das nicht zum Erfolg muss die Substanz über das Zeichnen der **Struktur** gesucht werden ([s. Pkt. 11.5](#)).

11.3. Wie suche ich Substanzen mit der Summenformel?

- Eine Suche mit Summenformeln ist im Suchmodus „**Substances**“ möglich. Dazu bei der Substanzsuche in das Advanced Search Feld „**Molecular Formula**“ die Summenformel eingeben.
- Die gewünschte Summenformel(n) nach dem **Hill-System** in der Reihenfolge C, H und dann alle anderen Elemente alphabetisch sortiert, eingeben. Eine Gruppierung in Funktionelle Gruppen geschieht nicht.
- Bei Verbindungen ohne Kohlenstoff erfolgt die Anordnung streng alphabetisch, der Wasserstoff wird dann eingereiht. Isotopenabkürzungen wie D und T werden wie eigene Elemente behandelt und entsprechend einsortiert.



- Bei rein organischen Substanzen ist eine Suche mit der Summenformel alleine aufgrund der Vielzahl der möglichen Isomeren meist wenig sinnvoll. Erfolgversprechender in dem Fall eine Suche mit dem Namen oder mit der Struktur.

Substances search for "C9H8O4" Molecular Formula

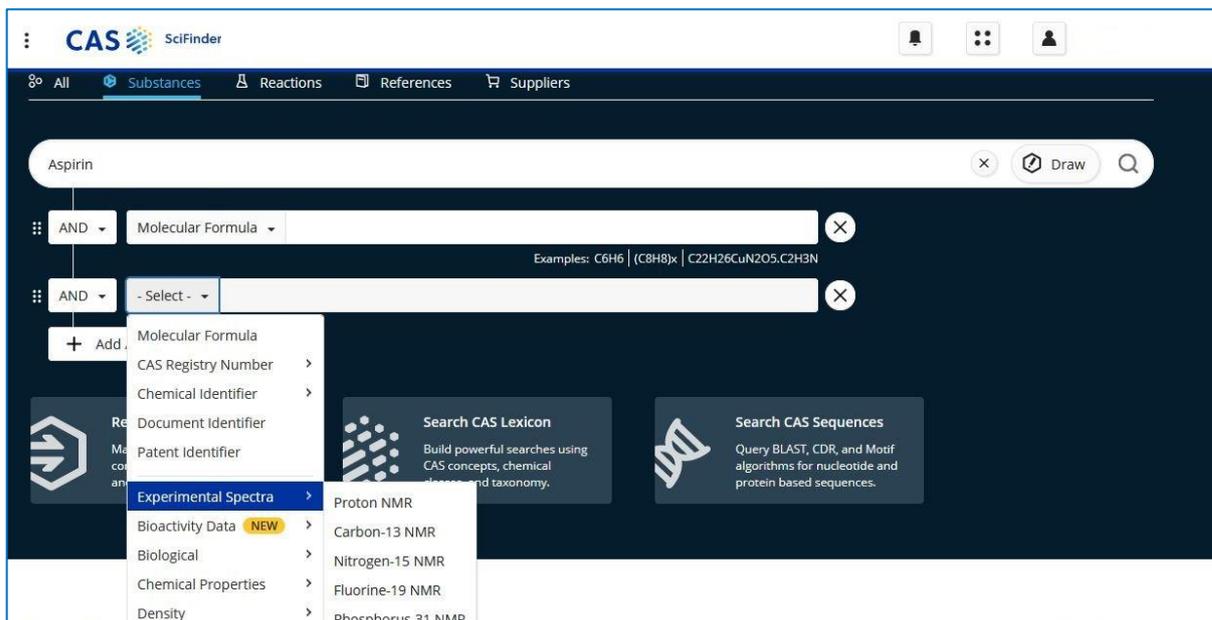
1,099 Results

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	180.16	-
Melting Point (Experimental)	135 °C	-
Boiling Point (Experimental)	197-200 °C	Press: 7 Torr
Density (Experimental)	1.40 g/cm ³	-
pKa (Predicted)	3.48±0.10	Most Acidic Temp: 25 °C

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	180.16	-
Melting Point (Experimental)	225 °C (decomp)	-
Boiling Point (Predicted)	416.8±35.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.478±0.06 g/cm ³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
pKa (Predicted)	4.58±0.10	Most Acidic Temp: 25 °C

11.4. Die erweiterte Substanzsuche („Advanced Search Fields)

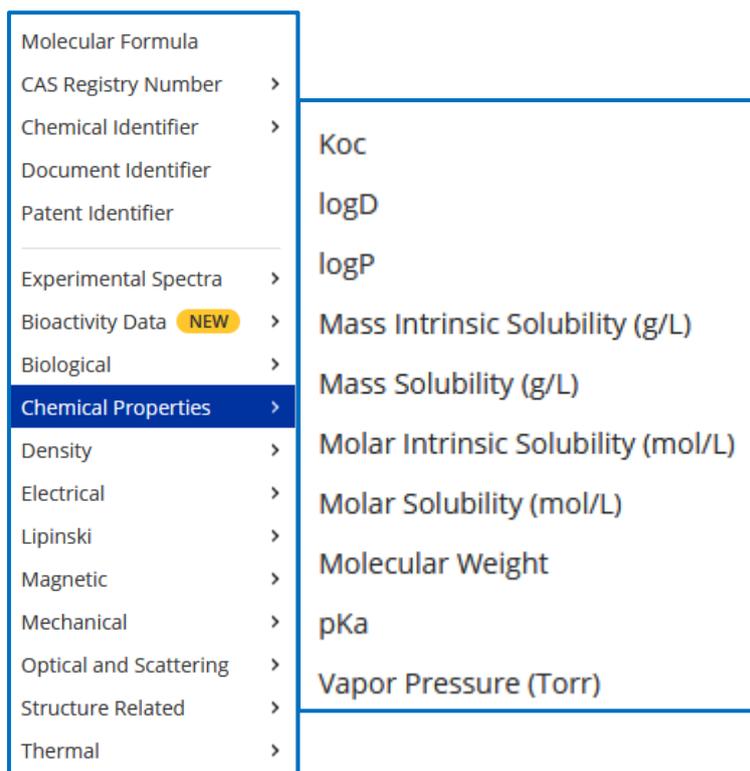
Die erweiterte Substanzsuche ermöglicht die explizite Suche nach chemischen Verbindungen mit speziellen **physikochemischen Eigenschaften** oder auch das Finden von Substanzen über ihre **NMR-Spektren**.



Mögliche Eigenschaften für die Suche nach Substanzen

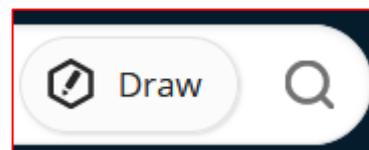
Gleich auf der Startseite der Substanzsuche können weitere Eigenschaften für die Suche ausgewählt werden.

Beim jeweiligen Eintrag mit einem Pfeil öffnet sich ein Untermenü, hier ein Beispiel für **Chemical Properties**.



11.5. Wie suche ich nach Substanzen über die Struktur?

- Sie kennen die CAS-Registry-Nummer der von Ihnen gesuchten chemischen Verbindung nicht, der von Ihnen eingegebene Name wird nicht gefunden oder es sollen gleichzeitig bestimmte Derivate gesucht werden? Dann zeichnen Sie die gewünschte Verbindung. So können Sie sie über die Struktur suchen.
- Eine Suche über die Struktur ist umfassender als eine Namensuche, denn es werden alle Varianten einer Verbindung gefunden, auch Salze, Isotope, Enantiomere etc.
- Nach Auswahl des Suchmodus „**Substances**“ klickt man neben der Lupe auf „**Draw**“ und gelangt so in den Struktureditor. Das ist das „Zeichenbrett“, auf dem das zu suchende Strukturfragment erstellt werden kann.
- Im **Struktureditor** lassen sich Strukturen mittels SMILES, InChI, .mol oder CAS-Nummern direkt importieren oder komplett neu zeichnen.



Upload von gespeicherten Strukturen, auch Download von gezeichneten Verbindungen

Wahl des Zeichenprogramms: CAS DRAW bzw. ChemDoodle

Eingabe von InChi, CAS-Nummer bzw. Smiles, um die Struktur zu erstellen

The screenshot shows the CAS Draw interface with several callouts:

- Top Left:** CAS Draw dropdown menu.
- Top Center:** Input field for "Enter a CAS Registry Number, SMILES, or InChI" with a question mark icon.
- Top Right:** Keyboard shortcut icon for faster drawing.
- Left Toolbar:**
 - Lasso und Viereck zur Auswahl von Fragmenten der Struktur
 - Stift und Radierer
 - Et: PSE zur Elementauswahl / Shortcuts funkt. Gruppen
 - X R: Variablen wählen / Eigene Variablen definieren
 - Fn: Substitutionspunkt für R-Gruppen / Vorlagen auswählen
 - + -: Ladungen hinzufügen
 - [] ~: Wiederholeinheiten / C-Ketten zeichnen
 - Variable Ringsubstitution / Blockieren von Atomen für Substitution
 - Ringkondensation blockieren / Fragment rotieren
 - A B: Reaktionsrolle manuell wählen/ Atom Mapping in Reaktionen
 - Mapping der Bindungen in Reaktionen / Edukte u. Produkte
- Right Panel:**
 - Wichtige Atome (C, H, O, S, N, P, Cl, Si)
 - Bindungstypen auswählen
 - Ringe zeichnen, auch mit variabler Größe

11.6. Hinweise für das Zeichnen von chemischen Strukturen

- Beim **Shortcut-Button (Et)** finden Sie **gängige Gruppen** (OMe, Ph, COOH, NH₂ ...).

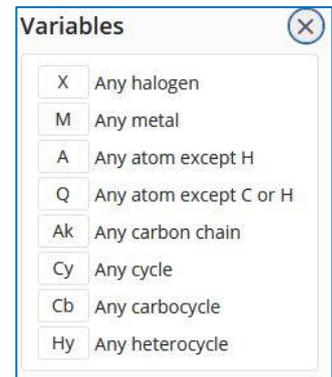
Et



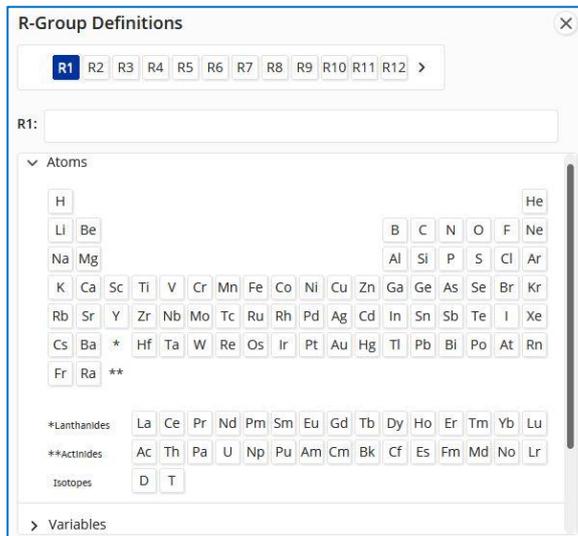
Achtung: Shortcuts sind bei einer Substruktursuche für weitere **Substitutionen blockiert**.

- Mit dem **X-Button** können auch ganze **Elementgruppen** (Halogene, Metalle ...) auf einmal für eine Substitution zugelassen werden. Die ausgewählten **Variablen** sind hier für **weitere Substitutionen offen**.

X



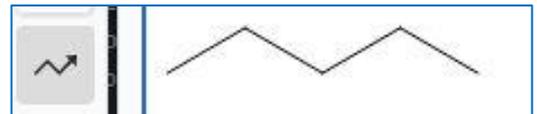
Mit der Variablen **Ak** für Alkylketten findet man sowohl lineare als auch verzweigte gesättigte oder ungesättigte Kohlenstoffketten.



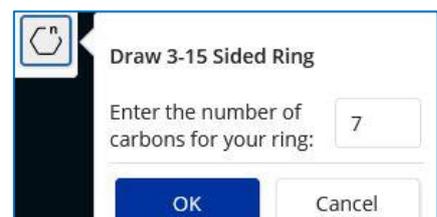
R

Sollen **an einer Stelle** Ihrer Struktur **mehrere Elemente oder Gruppen möglich** sein, z.B. C, N, P bzw. S, dann definieren Sie **R-Gruppen** mit dem **R-Button**. Es erscheint ein Fenster, in dem Sie Atome, Shortcuts und/oder Variable auswählen können. Es ist auch möglich, eigene Fragmente zu zeichnen und als mögliche Reste zu definieren.

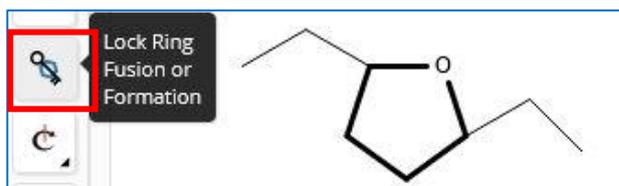
- Wird eine (längere) **C-Kette** gebraucht, so geht das hervorragend mit dem **Ketten-Tool**. Klicken Sie auf die Stelle, an der die Kette beginnen soll, halten Sie dabei die linke Maustaste gedrückt und ziehen nach rechts bis die gewünschte Kettenlänge als Zahl neben dem Cursor erscheint.



- Mit dem **Ring-Tool** können Sie auf elegante Weise Ringe (3- bis 15-gliedrig) zeichnen. Nach dem Anklicken einfach die gewünschte Ringgröße angeben.

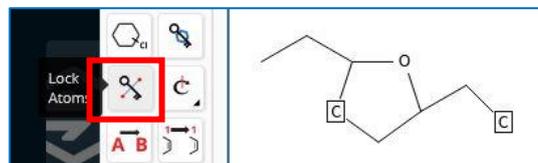


- Wollen Sie bei einer Struktursuche eine Ringbildung an einer gezeichneten „Kette“ von Atomen bzw. die Vergrößerung eines Ringsystems durch Anellieren von weiteren Ringen verhindern, benutzen Sie den **“Lock Rings”**-Schlüssel. Die für die Ringbildung gesperrte Bindung erscheint dabei fett.



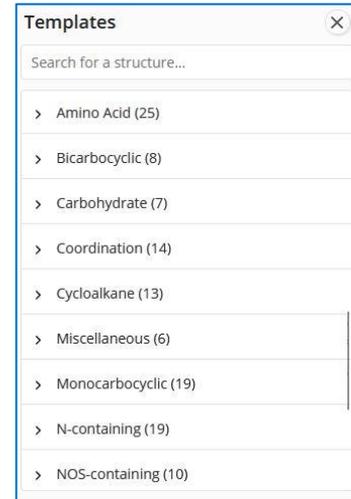
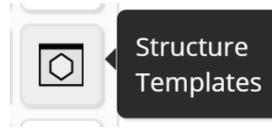
Suchstruktur				
Für Ringschluss bzw. Anellierung gesperrtes Fragment	keines	Methoxyphenyl-gruppe	Tetra-Halogen-4-methylpentan-Fragment	beide Fragmente
Trefferzahl „Substructure“	2169	2107	164	142

- Wollen Sie bei einer Struktursuche eine Substitution an bestimmten Atomen verhindern, benutzen Sie den **“Lock Atom”**-Schlüssel. Die für die Substitution gesperrten Atome erscheinen dabei in einem Kästchen.

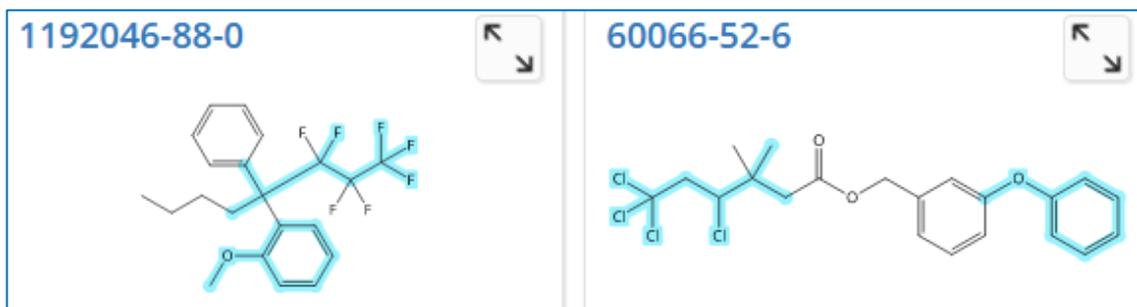
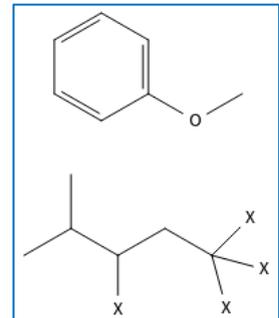


Suchstruktur				
Für Substitutionen gesperrte Atome	C-Atom 4	C-Atome 3 und 4	alle C-Atome im Phenylring	C-Atome 2 und 3
Trefferzahl „Substructure“	643	54	41	6

- Für komplizierte Strukturen findet man in der linken Menüleiste **Templates**. Das sind **vorgezeichnete Grundgerüste**, die das Konstruieren z.B. von großen Ringsystemen durch einfaches Auswählen sehr erleichtern.

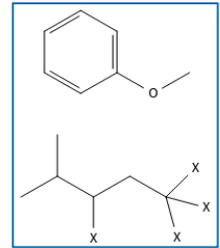


- Es ist möglich, in einer Struktursuche nach Verbindungen zu recherchieren, die **zwei oder mehr spezielle Fragmente** enthalten. Zeichnen Sie die Strukturfragmente, die das Molekül enthalten soll, einfach nebeneinander. Es werden alle Verbindungen gefunden, die diese Fragmente gleichzeitig ohne Überlappung besitzen. (Rechts: gesuchte Struktur, unten: zwei der Treffer)



- Um beim Zeichnen nicht ständig Elemente und Bindungen wechseln zu müssen, kann man zuerst alles mit C-Atomen und Einfachbindungen zeichnen. Bei der fertigen Struktur werden nach Auswählen der benötigten Elemente/Bindungsarten die zu ändernde **Atome/Bindungen** einfach durch Anklicken (Atom/Bindung wird rot) **überschrieben**.

11.7. Wie kann ich große Treffermengen bei der Substanzsuche über die Struktur einschränken?



- Mit den Filtermöglichkeiten auf der linken Seite der Trefferliste kann man große Treffermengen effektiv einengen. Die mehr als 2100 Treffer nebenstehender Substanz-Struktur-suche lassen sich nach vielen Kriterien einschränken.
- Bei der Substanzsuche mit einer **gezeichneten Struktur** werden u.a. automatisch **Stereoisomere, Tautomere** (incl. Keto-Enol), **geladene Verbindungen, Radikale, Isotopenverbindungen, (Homo-)Polymere** sowie **Metallverbindungen** (Salze bzw. Metallkomplexe) gefunden.

- Mit der Funktion „**Analyze Structure Precision**“ können die Tautomere bei Bedarf aus der Treffermenge entfernt werden.

- Weiterhin kann nach der Struktursuche gezielt ausgewählt werden,
 - aus welchen **Substanzklassen** die Treffer sein sollen,
 - ob **Stereo**verbindungen,
 - Mehrkomponenten**-Verbindungen (z.B. **Polymere, Gemische, Salze**),
 - Isotopen**verbindungen oder auch
 - Metall**verbindungen dabei sein sollen.

- Eine Einschränkung durch eine neue Struktursuche innerhalb der Treffer (Search within Results) mit einem präzisierten **Strukturfragment** ist ebenfalls möglich.

Alle Einschränkungen, die im Abschnitt 11.6 beschrieben wurden, können auch bei der Einschränkung eines Treffersatzes mittels „**Search within Results**“ genutzt werden.

11.8. Wie sieht die Trefferliste bei der Substanzsuche aus?

Einstellen verschiedener Ansichten für die Trefferliste der Substanzsuche

Bei der Ansicht „**View**“ kann zwischen „**Full**“ bzw. „**Partial**“ gewählt werden.

Beim „**Full View**“ werden ausgewählte Eigenschaften in der Ergebnisübersicht aufgelistet. Mit einem Klick auf eine Eigenschaft gelangt man zu allen gemessenen Werten dazu.

Generell gilt: wenn bei einem Link mit der Maus rechts-klickt, kann man den Link in einem neuen Fenster öffnen oder in einem neuen Tab. Dann kann man in den verschiedenen Fenstern/Tabs parallel arbeiten.

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	318.23	-
Boiling Point (Predicted)	237.4±40.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.265±0.06 g/cm ³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	406.29	-
Boiling Point (Predicted)	402.9±45.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.41±0.1 g/cm ³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
pKa (Predicted)	9.26±0.26	Most Acidic Temp: 25 °C

Der „**Partial View**“ ist der voreingestellte Ansichtsmodus. Er ist kompakter und ermöglicht einen schnellen Überblick über eine größere Antwortmenge.

Zu den Eigenschaftsinformationen gelangt man hier nach Klick auf die jeweilige CAS-RN-Nummer.

Bei den mit einer Struktursuche gefundenen Substanzen sind als Suchfrage **gezeichnete Fragmente** zur besseren Beurteilung der Treffer **blau hervorgehoben**.

Weitere Möglichkeiten in der Gesamtliste der gefundenen Substanzen

Strukturmatch auswählen

Sortierung ändern

Displaydetails einstellen

Anklicken für Details

Substanzdaten

Auf Struktur klicken, um dieses Menü zu erhalten

Struktur im Editor öffnen

Download der Struktur

- Die Möglichkeit, die Größe der Treffermenge über die Struktursuche-Optionen (**Structure Match**) einzustellen, erscheint nur, wenn die chemischen Verbindungen mit einer gezeichneten Strukturformel gesucht wurden.

Download Substance Results

Download Substance Results

File Type

PDF

Excel (.xlsx)

PDF

Rich Text (.rtf)

SDFFile (.sdf)

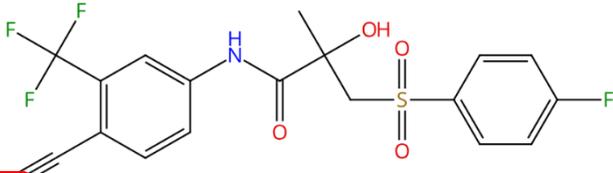
- Die Liste der gefundenen chemischen Substanzen kann vollständig oder in ausgewählten Teilen in verschiedenen Dateiformaten heruntergeladen werden. Die Dateien enthalten jeweils Links zu den Datensätzen in SciFinder.

11.9. Was sieht man in der Substanz-Detailanzeige?

Nach Anklicken der CAS-Registry-Nummer einer ausgewählten chemischen Verbindung in der Trefferliste öffnet sich die detaillierte Anzeige dieser Substanz. Diese beinhaltet u.a. Informationen zu Struktur und Namensvarianten, zu verschiedenen experimentell bestimmten oder auch berechneten physiko-chemischen Eigenschaften und Spektren.

CAS Registry Number: 90357-06-5

4,407 | 234 | 115



Molekularformel in Hill-Schreibweise

Gefährdungspotential

C₁₈H₁₄F₄N₂O₄S

Propanamide, N-[4-cyano-3-(trifluoromethyl)phenyl]-3-[(4-fluorophenyl)sulfonyl]-2-hydroxy-2-methyl- Systematischer Name

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	430.38	-
Melting Point (Experimental)	190-195 °C (decomp)	-
Boiling Point (Predicted)	650.3±55.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.52±0.1 g/cm ³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
pKa (Predicted)	11.49±0.29	Most Acidic Temp: 25 °C



Wesentliche Eigenschaften

Other Names

Experimental Properties

Experimental Spectra

9 Other Names for this Substance

(±)-4'-Cyano-α,α,α-trifluoro-3-[(p-fluorophenyl)sulfonyl]-2-methyl-m-lactoluidide

Bicalutamide

Casode

Casodex

Cosudex

ICI 176334

Die aufgelisteten Namen beinhalten systematische Namen, Trivialbezeichnungen, Handelsnamen, Entwicklungscodes. Die Synonyme werden aus den indexierten Publikationen entnommen.

Experimental Properties

Biological	Chemical	Lipinski	Thermal																
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th>Property</th> <th>Value</th> <th>Condition</th> <th>Source</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion) - 3 Sources</td> <td>See Full Text</td> <td></td> <td>(1-3) CAS</td> </tr> <tr> <td>Half-Life (Biological) - 1 Source</td> <td>See Full Text</td> <td></td> <td>(4) CAS</td> </tr> <tr> <td>Toxic Equivalence Factors - 1 Source</td> <td>See Full Text</td> <td></td> <td>(5) CAS</td> </tr> </tbody> </table>				Property	Value	Condition	Source	ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion) - 3 Sources	See Full Text		(1-3) CAS	Half-Life (Biological) - 1 Source	See Full Text		(4) CAS	Toxic Equivalence Factors - 1 Source	See Full Text		(5) CAS
Property	Value	Condition	Source																
ADME (Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion) - 3 Sources	See Full Text		(1-3) CAS																
Half-Life (Biological) - 1 Source	See Full Text		(4) CAS																
Toxic Equivalence Factors - 1 Source	See Full Text		(5) CAS																

Sources

(1) Cockshott, Ian D.; Clinical Pharmacokinetics, (2004), 43(13), 855-878, CAplus

(2) Reiter, Edward O.; Journal of Pediatric Endocrinology & Metabolism, (2010), 23(10), 999-1009, CAplus

(3) Foster, William R.; Prostate (Hoboken, NJ, United States), (2011), 71(5), 480-488, CAplus

(4) Cockshott, Ian D.; Clinical Pharmacokinetics, (2004), 43(13), 855-878, CAplus

(5) Sanseverino, John; Toxicological Sciences, (2009), 107(1), 122-134, CAplus

Experimental Spectra

¹ H NMR	¹³ C NMR	Hetero NMR	IR	Mass	Raman	UV and Visible
View Carbon-13 NMR Spectrum				Solvent	Source	
View Carbon-13 NMR Spectrum				DMSO-d ₆	(1) CAS	
View Carbon-13 NMR Spectrum				DMSO-d ₆	(2) CAS	
View Carbon-13 NMR Spectrum				DMSO-d ₆	(3) CAS	
View Carbon-13 NMR Spectrum - 3 Sources				DMSO-d ₆	(4-5) CAS	

Eigenschaften sind angegeben oder im verlinkten Volltext einsehbar, ebenso auch

11.10. Wie finde ich Chemikalien-Lieferanten?

Nach Lieferanten chemischer Verbindungen kann gezielt im Suchmodus „**Supplier**“ gesucht werden.



Supplier	Substance	Purity	Purchasing Details	Availability
Cayman Cayman Chemical Catalog United States Last Updated: 5 Oct 2023	303-47-9 Ochratoxin A	95-98%	Order From Supplier 1 mg, USD 59.00 5 mg, USD 229.00 10 mg, USD 428.00 Screening	Maintained in stock Ships within 1 week
AURUM PHARMATECH AURUM Pharmatech Product List United States Last Updated: 11 Apr 2023	303-47-9 Ochratoxin A Standard Solution	95-98%	Order From Supplier 500 mg, USD 262.70 1 g, USD 350.30 5 g, USD 1118.20 10 g, USD 2012.80 25 g, USD 4226.90 View all	Maintained in stock Ships within 1 week
APOLLO SCIENTIFIC Apollo Scientific Biochemicals Product List United Kingdom Last Updated: 13 Nov 2023	303-47-9 Ochratoxin A Standard Solution		Order From Supplier 1 ml, GBP 175.00 5 ml, GBP 685.00	Maintained in stock Ships within 1 week
APOLLO SCIENTIFIC Apollo Scientific Biochemicals Product List United Kingdom Last Updated: 13 Nov 2023	303-47-9 Ochratoxin A from Aspergillus ochraceus		Order From Supplier 1 mg, GBP 95.00 5 mg, GBP 365.00	Synthesis on demand Ships within 4 weeks

In allen Substanzsuchergebnissen findet sich sowohl oben im Menü in der Gesamttrefferliste den Button „**Suppliers**“ als auch bei jeder Detailanzeige von Verbindungen, wenn diese kommerziell verfügbar sind.

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	403.81	-
Melting Point (Experimental)	169 °C	-
Boiling Point (Predicted)	632.4±55.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.425±0.06 g/cm ³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
pKa (Predicted)	3.29±0.10	Most Acidic Temp: 25 °C

9,117 References
 53 Reactions
 58 Suppliers

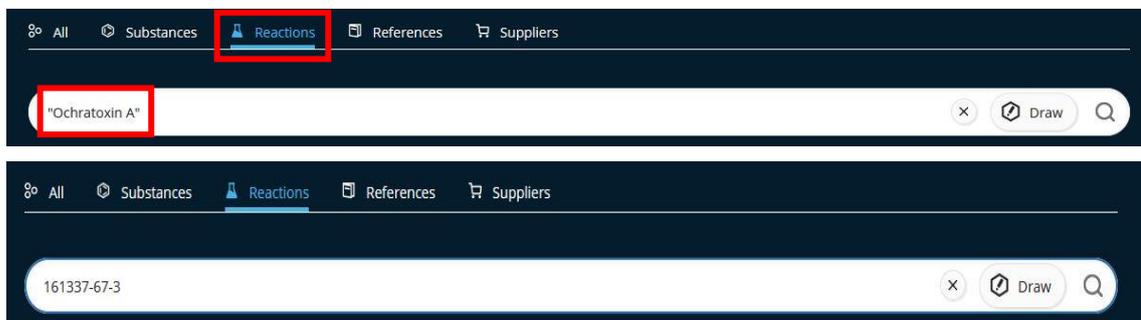
12. Wie suche ich nach chemischen Reaktionen?

12.1. Wie beginne ich die Suche im Modus „Reactions“?

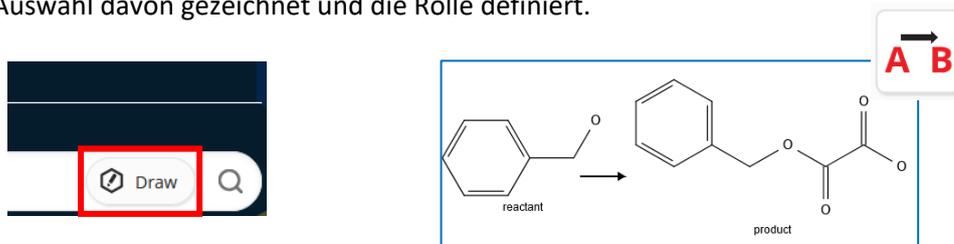
Im SciFinder-Startbildschirm wird „**Reactions**“ als Suchmodus ausgewählt:



- Mögliche **Startpunkte** für eine Reaktionssuche:
 - Substanzname
 - CAS-Registry-Nummer
 - Beschreibung der Reaktion mittels Stichworten
 - Dokumenten-Nummer (Patentnummer oder CAS Accession Number)
 - CAS-Reaktions-Nummer
 - Strukturzeichnung einer chemischen Verbindung
 - Edukt → ?
 - ? → Produkt
 - Vollständige Reaktionschemata bestehend aus Strukturzeichnungen für Edukt(e) sowie Produkt(e)
 - Edukt A (+ Edukt B ...) → Produkt 1 (+ Produkt 2 ...)
- Suche mit einem **Substanznamen** oder einer **CAS RN** → findet Reaktionen, bei denen exakt diese Substanz beteiligt ist, als Edukt, Produkt bzw. als Reagenz.



- Für Reaktionssuchen ausgehend von der **Struktur** des Ausgangsstoffes bzw. des Produktes wird mit Klick auf „**Draw**“ der Struktureditor geöffnet und Edukt, Produkt und Reagenz oder eine Auswahl davon gezeichnet und die Rolle definiert.



- Bei Reaktionssuchen über die gezeichnete Struktur findet man neben Reaktionen, die exakt diese Substanz als Edukt bzw. Produkt enthalten, auch Reaktionen, bei denen die gezeichnete Struktur nur ein Teilfragment von Edukt bzw. Produkt ist sowie Reaktionen ähnlicher Substanzen (As Drawn – Substructure – Similarity).

- Die Suche anhand von **Stichworten** kann mit chemischen Namen und CAS RN für spezifische Substanzen oder Namen von Substanzklassen geschehen.

synthesis of 35448-14-7 from "Benzyl alcohol"

Reactions search for "synthesis of 35448-14-7 from "benzyl alcohol""

References

Filter Behavior

Filter by Exclude

Search Within Results

Yield

90-100% (2)

7 Results

Group: By Scheme Sort: Yield View: Expanded

Scheme 1 (1 Reaction) Steps: 1 Yield: 93%

c1ccc(cc1)CO + ClC(=O)O → c1ccc(cc1)COC(=O)O

- Verschiedene Präpositionen definieren die Rolle der jeweiligen Substanz. Zusätzlich können die Operatoren AND, OR und NOT verwendet werden.

Rolle	Präposition / Begleitworte
Produkt	Synthesis of Preparation of
Reaktand	From
Reagenz	With
Katalysator	Catalyzed by
Lösungsmittel	in

synthesis of aldehydes catalyzed by palladium in alcohols

- Es ist möglich Namensreaktionen oder spezifische Transformationen in eine Textsuche zu integrieren.

suzuki coupling reaction of p-Bromoacetophenone

Reactions search for "suzuki coupling reaction of p-bromoacetophenone"

References

Filter Behavior

Filter by Exclude

Search Within Results

Yield

4,306 Results

Group: By Transformation Sort: Reaction Count: Descending View: Expanded

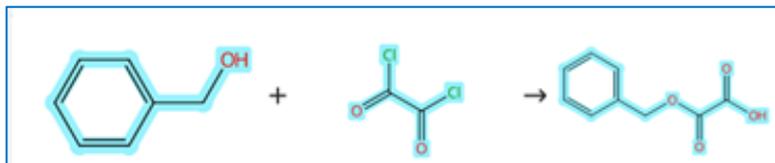
1

Coupling of Aryl Compounds with Arylboronic Acid Derivatives/ Suzuki Coupling

[View 4306 Related Reactions](#)

12.2. Welche Ansichten kann ich für die Trefferliste der Reaktionssuche einstellen?

- Beispielsuche mit 137 Treffern (Substruktur)



- Oben in der Trefferliste werden Möglichkeiten zur Gruppierung und Sortierung der Ergebnisse angeboten.

- Voreingestellt ist die Gruppierung der Treffer nach Reaktionsschema **“By Scheme”**.

Dabei sind Reaktionen mit identischen Edukten und Produkten, die von verschiedenen Autoren beschrieben werden, in einem „Schema“ (einer Gruppe) zusammen aufgelistet.

Bei der Gruppierung nach Reaktionsschemata kann eine **Sortierung** der Reaktionen nach Relevanz, Ausbeute, Publikationsdatum bzw. der Anzahl der Reaktionsstufen erfolgen.

- Eine ausführliche Übersicht mit **Reaktionsdetails** und den **bibliographischen** Informationen (Titel, Autoren, Quelle) erhält man mit dem „**View**“: Expanded. In einer Kurzzusammenfassung werden Reaktionsbedingungen, Lösungsmittel und Reagenzien angezeigt. Für eine schnelle Übersicht können die Reaktionsdetails und die bibliographischen Informationen ausgeblendet werden („**View**“: Collapsed).

- Die Treffer der Reaktionssuche können auch mit der Gruppierungsvariante **“By Document”** zusammengefasst werden.

Bei der Gruppierung nach Dokumenten werden alle in einer Veröffentlichung beschriebenen Reaktionen gemeinsam aufgelistet, unabhängig von verwendeten Ausgangsstoffen und synthetisierten Reaktionsprodukten.

Bei der Gruppierung nach Dokumenten kann ebenfalls eine **Sortierung** der Reaktionen nach Relevanz, Ausbeute, Publikationsdatum bzw. der Anzahl der Reaktionsstufen erfolgen.

In der hier gezeigten Publikation werden vier Synthesen beschrieben, die der gesuchten Reaktion entsprechen.

Um sich alle Reaktionen aus einer interessierenden Publikation ansehen zu können, wird **„View Related Reactions“** angeklickt.

- Eine letzte Variante zur Gruppierung der Ergebnisse einer Reaktionssuche ist die Anordnung gemäß dem Reaktionstyp mittels **„By Transformation“**. Dabei wird ein verallgemeinertes Reaktionsschema des Reaktionstyps angezeigt und die entsprechenden Reaktionen darunter zusammengefasst.

Bei der Gruppierung nach Transformationen/Reaktionstypen kann eine **Sortierung** der Häufigkeit bzw. dem Namen der Transformation erfolgen.

Die hier beispielhaft gezeigten Transformationen, die bei obiger Reaktionssuche gefunden wurden, umfassen 57 Alkoholysereaktionen und 12 Hydrolysen eines Carbonsäurehalogenids/Acyhalogenids (hier: Oxalylchlorid/Oxalsäuredichlorid).

Um sich alle Reaktionen eines interessierenden Transformationstyps ansehen zu können, klickt man **„View Related Reactions“** an.

12.3. Wie bekomme ich Reaktionsdetails angezeigt?

- Einen ausführlichen Blick auf die jeweiligen Besonderheiten einer Reaktion erhält man je nach Reaktionsanzeige entweder nach Anklicken von „*Experimental Protocols*“ oder der jeweiligen *Reaktionsnummer*, z.B. [31-614-CAS-38329207](#) bzw. nach Klick auf „*View Reaction Details*“, (s. nächste Seite)

Scheme 2 (1 Reaction) Steps: 1 Yield: 98% ...

Suppliers (66) Suppliers (74)

31-614-CAS-38329207 Steps: 1 Yield: 98% ... **Formal Radical Deoxyfluorination of Oxalate-Activated Alcohols Triggered by the Selectfluor-DMAP Charge-Transfer Complex**

1.1 Solvents: [Diethyl ether](#); 1 h, 0 °C; 2 h, 0 °C
1.2 Reagents: [Water](#); 0 °C

Experimental Protocols

Scheme 44 (3 Reactions)

Relative stereochemistry shown Suppliers (63) Suppliers (74)

View Reaction Detail Steps: 2 **Efficient synthesis and hydrolysis of cyclic glycols**

1.1 Reagents: [Triethylamine](#)
Solvents: [Acetonitrile](#)
2.1 Reagents: [Water](#)
Solvents: [Acetone](#)

By: Itaya, Taisuke; et al
Chemical & Pharmaceutical Bulletin (2002),
Full Text ▾

- Mit Klick auf einen Substanznamen bzw. auf eine Strukturformel in der Reaktionsanzeige öffnet sich ein Fenster, über das man sich weitere Informationen zu dieser chemischen Verbindung anzeigen lassen kann.

Scheme 6 (1 Reaction) Steps: 1 Yield: 91%

Suppliers (98) Suppliers (74)

31-614-CAS-38329214 Steps: 1 Yield: 91% ... **Formal Radical Deoxyfluorination of Oxalate-Activated Alcohols Triggered by the Selectfluor-DMAP Charge-Transfer Complex**

1.1 Solvents: [Diethyl ether](#); 1 h, 0 °C; 2 h, 0 °C
1.2 Reagents: [Water](#); 0 °C; 30 min, 0 °C

By: Baunils, Haralds; et al
European Journal of Organic Chemistry (2022) e202300769

Get Substance Details
Get Bioactivity Data
Get Reactions (232K)
Synthesize (78)
Start Retrosynthetic Analysis
Get References (15K)
Get Suppliers (74)

Lieferanten („Suppliers“) anzeigen (s. Pkt. 11.10).

Literaturreferenz anzeigen

- Anzeige der Reaktionseinzelheiten: Reaktionsschema, Reagenzien, Katalysatoren, Lösungsmittel, detaillierte Angaben zum experimentellen Vorgehen, Daten zur Charakterisierung der Reaktionsprodukte und Link zum Abstract der Publikation/des Patentes und zum entsprechenden Volltext.

CAS Reaction Number: 31-354-CAS-5908619

Get Similar Reactions 🔗 📄 📌 Save

Suppliers (63) Suppliers (74) 75%

Reaction Overview

Steps: 1 Yield: 75%

JOURNAL

Reactions of 2-(pyrrol-1-yl)benzyl radicals and related species under flash vacuum pyrolysis conditions

By: Cadogan, J. I. G.; et al
View All

Organic & Biomolecular Chemistry (2009), 7(24), 5173-5183

View PDF Full Text

Company/Organization
Department of Chemistry
University of Wales Swansea
Swansea SA2 3PP
United Kingdom

Step 1

Stage	Reagents	Catalysts	Solvents	Conditions
1	Triethylamine	-	Diethyl ether	cooled; 2 h, rt

Experimental Protocols Alternative Steps (0)

Synthetic Methods

Products	1,2-Bis[[2-(1H-pyrrol-1-yl)phenyl]methyl] ethanedioate, Yield: 75%
Reactants	Oxalyl chloride 2-(1H-Pyrrol-1-yl)benzenemethanol
Reagents	Triethylamine
Solvents	Diethyl ether

Procedure

1. Cool the solution of N-[2-(hydroxymethyl)phenyl]pyrrole (4.00 g, 23 mmol) and triethylamine (3.03 g, 30 mmol) in dry ether (200 cm³) in ice.
2. Add a solution of oxalyl chloride (1.51 g, 11.5 mmol) in dry ether (20 cm³) to the solvent dropwise.
3. Stir the mixture for 2 hours and add water (100 cm³).
4. Extract the mixture with dichloromethane (3 x 50 cm³).
5. Dry the combine organic layer over (MgSO₄).
6. Remove the solvent to obtain bis-[2-(pyrrol-1-yl)benzyl] oxalate.

Transformation: Alcoholysis of Acyl Halides and Analogs

Scale: gram

Characterization Data

1,2-Bis[[2-(1H-pyrrol-1-yl)phenyl]methyl] ethanedioate

Proton NMR Spectrum	δ _H 7.57-7.31 (8H, m), 6.84 (4H, t, ³ J) and ⁴ J 2.1), 6.30 (4H, t, ³ J) and ⁴ J 2.1) and 5.15 (4H, s)
Carbon-13 NMR	δ _C 184.31 (quat), 156.83 (quat), 140.90 (quat), 130.70, 129.78, 127.77, 126.92, 122.43, 109.50 and 64.44
Elemental Analysis	Found: C, 71.8; H, 4.95; N, 7.0. C ₂₄ H ₂₀ N ₂ O ₄ requires C, 72.0; H, 5.05; N, 7.0%
Mass Spectrum	400 (M ⁺ 7%), 399 (20), 172 (22), 157 (16), 156 (100), 155 (55), 154 (35), 129 (11) and 128(12)
Melting Point	153-155 °C

CAS Method Number 3-354-CAS-5908619

Transformations

1. Alcoholysis of Acyl Halides and Analogs

Um sich Abstract und Verschlagwortung jeweiligen Literatur-Referenz ansehen zu können, klickt man auf den

Experimental Protocols

Synthetic Methods

Products 1,2-Bis[[2-(1H-pyrrol-1-yl)phenyl]methyl] ethanedioate, Yield: 75%

Reactants Oxalyl chloride
2-(1H-Pyrrol-1-yl)benzenemethanol

Reagents Triethylamine

Solvents Diethyl ether

Informationen zu Lösungsmittel, Katalysatoren, Reagenzien

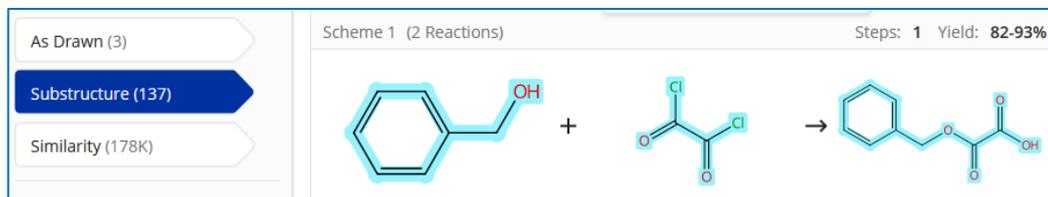
Detaillierte Angaben zum experimentellen Vorgehen (direkt aus der Publikation oder deren Supplements entnommen)

So erhält man nachvollziehbare Präparationsvorschriften, die ein Nachlesen in der jeweiligen Originalpublikation unnötig machen.

Daten zur Charakterisierung der Reaktionsprodukte

12.4. Wie kann ich große Treffermengen bei der Reaktionssuche einschränken?

- Mit den Filtermöglichkeiten auf der linken Seite der Trefferliste kann man große Treffermengen effektiv einengen. Die mehr als 130 Treffer dieser Reaktionssuche lassen sich nach vielen Kriterien einschränken.



- Praktisch für die Laborarbeit ist sicherlich das Eingrenzen auf eine **hohe Ausbeute**, **wenige Reaktionsstufen** und auf **vorhandene experimentelle Beschreibungen** der Synthesen („*Experimental Protocols*“). Auch eine erneute Suche innerhalb der Treffer mit einem **konkretisierten Strukturfragment** („*Search within Results*“) ist eine vielversprechende Möglichkeit.

The screenshot shows a search filter interface with the following categories and options:

- Filter by** (As Drawn (3), Substructure (137), Similarity (178K))
- Search Within Results** (Search for up to 3 structures within the result set. Draw, Search)
- Yield**
 - 90-100% (7)
 - 80-89% (7)
 - 70-79% (7)
 - 50-69% (15)
 - 30-49% (7)
 - [View All](#)
- Number of Steps**
 - 1 (58)
 - 2 (32)
 - 3 (13)
 - 4 (9)
 - 5 (6)
 - 6-10 (19)
- Non-Participating Functional Groups**
 - Carboxylic ester (8)
 - Ether (8)
 - Halide (5)
 - Alcohol (4)
 - Alkene (4)
 - [View All](#)
- Reaction Scale**
 - Milligram (63)
 - Gram (52)
 - No Scale Provided (63)
- Experimental Protocols**
 - Synthetic Methods (74)
 - Experimental Procedure (15)
- Reaction Type**
- Stereochemistry**
- Reagent**
 - Water (59)
 - Triethylamine (58)
 - Lithium aluminum hydride (34)
 - Ammonium chloride (32)
 - Sodium hydroxide (32)
 - [View All](#)
- Catalyst**
 - 4-(Dimethylamino)pyridine (25)
 - Iridium(1+), [4,4'-bis(1,1-dimethylethyl)-2,2'-bipyridine-κN¹,κN¹]bis[3,5-difluoro-2-[5-(trifluoromethyl)-2-pyridinyl-κN]phenyl-κC]-, (OC-6-33)-, hexafluorophosphate(1-) (1:1) (18)
 - Benzyltrimethylammonium hydroxide (1)
 - Potassium carbonate (1)
 - Pyridinium *p*-toluenesulfonate (1)
 - Triphenylphosphine oxide (1)
- Solvent**
 - Diethyl ether (85)
 - Dichloromethane (70)
 - Tetrahydrofuran (61)
 - Water (57)
 - Ethyl acetate (32)
 - [View All](#)
- Commercial Availability**
- Reaction Notes**
 - Stereoselective (49)
 - Photochemical (18)
 - Green Chemistry (1)
 - Prophetic Reaction (1)
- Source Reference**
- Document Type**
 - Journal (124)
 - Patent (12)
 - Preprint (1)
- Language**
- Publication Year**
- Organization**
- Publication Name**
- CA Section**

13. Wie finde ich alle Synthesen einer Substanz?

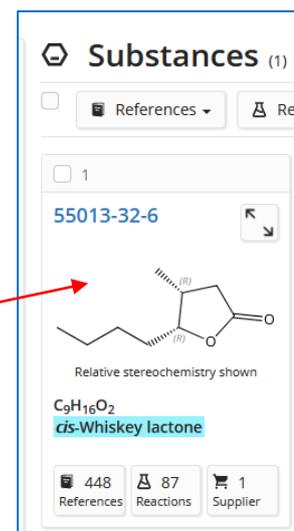
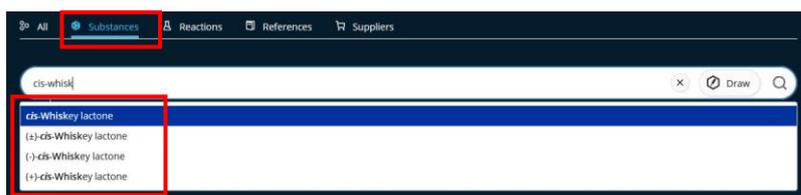
Möchte man eine möglichst **vollständige Auflistung** der in der Literatur bzw. in Patenten beschriebenen Präparationsvorschriften einer chemischen Substanz, sollte man die Suche sowohl in den Reaktionen als auch in den Referenzen ausführen und deren Ergebnisse **nach** Speicherung der einzelnen Treffersets (s. Pkt. 8.2) mit „**Combine**“ zusammenführen (s. Pkt. 8.1). Beide Suchvarianten werden hier ausführlich beschrieben.

Braucht man dagegen **wenige**, dafür aber **komplette Synthesevorschriften**, reicht das Vorgehen nach Pkt. 13.2 für einen schnellen Zugriff auf vollständige Präparationsanleitungen.

Als Beispiel für eine vollständige Recherche soll hier die Suche nach allen veröffentlichten Synthesen von *cis-Whisky-Lacton* dienen.

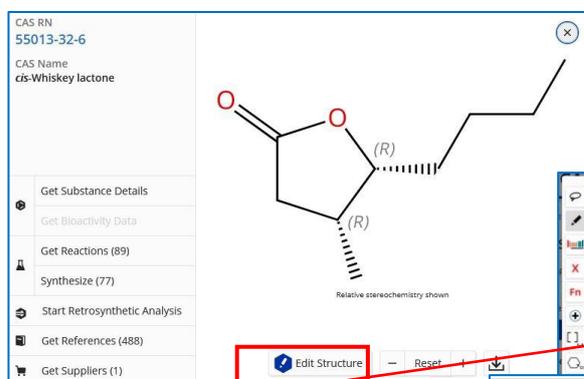
13.1. Vollständige Substanzsuche

Wie im Pkt 11.2 beschrieben, wird zuerst bei „**Substances**“ über den Namen nach der (den) entsprechenden Substanz(en) gesucht, alternativ wäre auch die Suche mit einer CAS-Registry-Nummer möglich:



Um auch die anderen *cis*-Isomere in die Suche einzubeziehen, sollte sich aus der Trefferliste heraus eine Struktursuche anschließen.

Ein Doppel-Klick auf die Strukturzeichnung des Lactons öffnet ein neues Fenster mit der Möglichkeit, diese chemische Verbindung in das Zeichenbrett zu kopieren (*Edit Structure*).



Mit Klick auf „OK“ wird die Struktur vom Zeichenbrett in die Suche exportiert. Ein Klick auf die Lupe startet die Suche.

Es werden 12 Substanzen gefunden, die exakt die gesuchte Struktur haben („*As Drawn*“)

(Stand 14.06.24).

Davon werden zunächst nur die vier Treffer angezeigt, die genau die gesuchte Stereochemie haben bzw. deren Stereo-Spiegelbilder.

Es ist zu empfehlen, sich auch die Substanzen anzeigen zu lassen, bei denen keine Stereo-Informationen angegeben sind.

Aus den Treffern werden dann die geeigneten Verbindungen mit einem Häkchen ausgewählt.

Jetzt können auf zwei verschiedenen Wegen die Präparationsvorschriften gesucht werden:

- über **Reactions** (s. Pkt. 13.2), liefert u.a. komplette Vorschriften
- über **References** (s. Pkt. 13.3), findet mehr Textstellen mit Vorschriften, aber als Abstract. Für die vollständige Vorschrift muss im Originaltext nachgelesen werden.

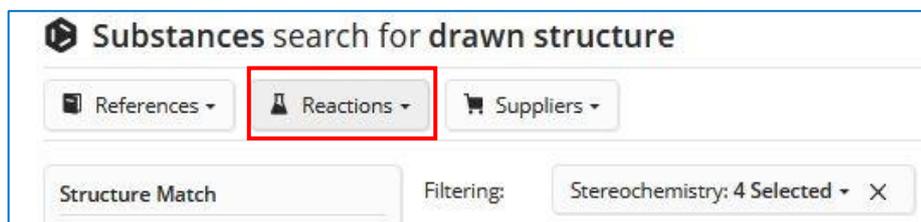
Die Treffermengen beider Varianten sind nicht identisch, da sie in verschiedenen Datenbankteilen von SciFinder generiert werden.

Braucht man **alle** Synthesevorschriften, müssen die Ergebnissen beider Teilsuchen über „**Combine**“ zusammengefasst werden (s. Pkt. 8.1).

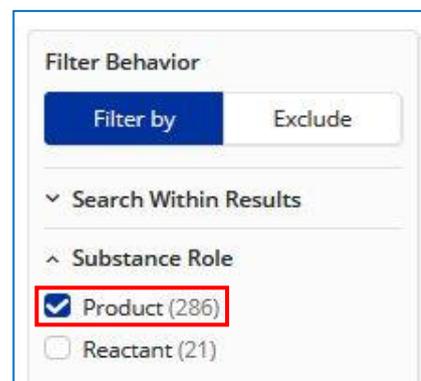
13.2. Ausgabe von vollständigen Synthesevorschriften über „Reactions“

Es werden die vier gewünschten Substanzen mit Häkchen ausgewählt.

Über „**Reactions**“ (**Selected Results**) kommt man zu allen verzeichneten Reaktionen der unter 13.1 ausgewählten vier Verbindungen.



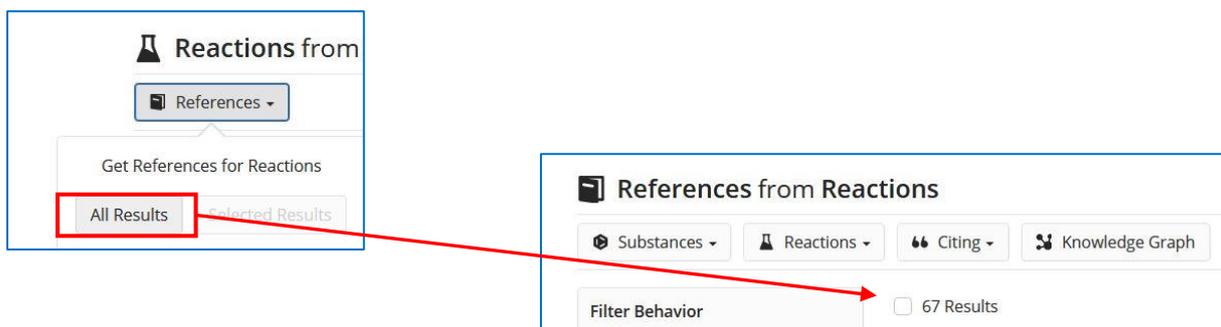
Diese Reaktionen können dann über „**Filter by**“ → **Substance Role** → **Product** auf die Synthesen der cis-Whisky-Lactone eingeschränkt werden.

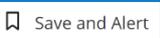


Von den insgesamt 307 Reaktionen sind 286 Synthesen der gesuchten Lactone, bei den restlichen 21 Reaktionen sind die Lactone als Reaktant beteiligt.

Diese 286 Reaktionen sind nicht in 286 unterschiedlichen Textstellen/Patenten verzeichnet! In einer Veröffentlichung können durchaus auch mehrere unterschiedliche Synthesen dieser cis-Whisky-Lactone beschrieben werden.

Tatsächlich sind diese 286 Reaktionen in 67 Publikationen veröffentlicht worden.



Diese **67 Referenz-Nachweise** sollten mit  gespeichert werden, damit sie mit den Antworten von [Pkt. 13.3](#) über „**Combine**“ bei Bedarf zu einem einzigen Antwortsatz zusammengefasst werden können.

Möchte man möglichst schnell und bequem auf vollständige „Kochvorschriften“ zugreifen, sollten die 286 Treffer der obigen Reaktionsuche über die **Filterfunktion „Filter by → Experimental Protocols“** eingeschränkt werden.

Wählen Sie dabei sowohl „**Synthetic Methods**“ als auch „**Experimental Procedure**“ aus.

So erhalten Sie alle Synthesen, zu denen es schon in der Datenbank SciFinder die vollständige und nachvollziehbare Präparationsvorschrift gibt.

Ein Nachlesen in der jeweiligen Originalpublikation, um sich die vollständigen Angaben für die Synthesevorschriften **herauszusuchen**, ist in diesen Fällen unnötig, da alle relevanten Informationen in SciFinder übernommen wurden.

Bei manchen Reaktionen gibt es beide Arten der ausführlichen Syntheseanleitungen, oft ist aber nur eines davon vorhanden: entweder „**Synthetic Methods**“ oder „**Experimental procedure**“.

Für den Zugang zu den Vorschriften wird unterhalb der ausgesuchten Reaktion auf „**Experimental Protocols**“ geklickt:

Experimental Protocols

Experimental Protocols

Synthetic Methods Experimental Procedure

Products [cis-Whiskey lactone](#), Yield: 95%

Reactants [rel-\(2R,3R\)-2-Butyl-3-methylcyclobutanone](#)

Reagents [Sodium bicarbonate](#)
[m-Chloroperbenzoic acid](#)

Solvents [Dichloromethane](#)

Procedure

1. Add NaHCO₃ (0.33 mmol) to a solution of *cis*-2-butyl-3-methylcyclobutanone (0.25 mmol) in 1.5 ml of CH₂Cl₂ at 0°C.
2. Add a solution of *m*-CPBA (77%) in 1 ml of CH₂Cl₂ dropwise to the reaction mixture.
3. Stir the reaction mixture at 0 °C for 45 minutes until monitor the completion of reaction by TLC.
4. Pour the solution into a mixture of 1.6 ml of saturated aqueous sodium bicarbonate and 0.4 ml of saturated sodium sulfite.
5. Extract the reaction mixture with diethyl ether (3 x 5 ml).
6. Wash the combined diethyl ether phase with brine.
7. Dry the combined diethyl ether phase with anhydrous Na₂SO₄.
8. Remove the solvent under reduced pressure.
9. Purify the crude product by flash column chromatography on silica gel (pentane:diethyl ether = 90:10).

Transformation Baeyer-Villiger Rearrangement

Scale milligram

Characterization Data

^ cis-Whiskey lactone

Proton NMR Spectrum	CDCl ₃ , 360 MHz of the mixture is provided in Supporting Information Part 2.
Carbon-13 NMR	CDCl ₃ , 90 MHz of the major <i>trans</i> product δ 14.1, 17.7, 22.7, 28.0, 33.9, 36.3, 37.3, 87.7, 176.7.
IR Absorption Spectrum	Neat 2960, 2934, 2874, 1780, 1461, 1212, 1172 cm ⁻¹ .

CAS Method Number 3-454-CAS-13747196

„Synthetic Methods“ enthält eine exklusiv für SciFinder erarbeitete, ausführliche Präparationsvorschrift und außerdem Spektren-Daten zur Charakterisierung des Reaktionsproduktes.

Experimental Protocols

Synthetic Methods **Experimental Procedure**

JIAICIS General/Typical Procedure: General (0.25 mmol) in 1.5 mL of CH₂Cl₂ at 0°C was added NaHCO₃ (27.7 mg, 0.33 mmol). To this mixture was added dropwise a solution of *m*-CPBA (77%, 85.2 mg, 0.49 mmol) in 1 mL of CH₂Cl₂, and the reaction stirred at 0°C for 45 min, or until the reaction was complete by TLC. The solution was then poured into a mixture of 1.6 mL of saturated aqueous sodium bicarbonate and 0.4 mL of saturated sodium sulfite and extracted with diethyl ether (3 x 5 mL). The combined diethyl ether phase was washed with brine, dried with anhydrous Na₂SO₄, and the solvent was removed under reduced pressure. The crude product was purified by flash column chromatography on silica gel (pentane:diethyl ether = 90:10) to obtain the pure γ -butyrolactone as an oil. **trans-4-Butyl-3-methyl butanolide ((±)-Quercus Lactone A)**. The product was prepared by General Procedure G using a 5:1 diastereomeric mixture of *trans*- and *cis*-2-butyl-3-methylcyclobutanone (35.1 mg, 0.25 mmol), respectively, NaHCO₃ (27.7 mg, 0.33 mmol) and *m*-CPBA (77%, 85.2 mg, 0.49 mmol) to yield the γ -butyrolactone as a 5:1 diastereomeric mixture of *trans* and *cis* butanolide respectively (35.1 mg, 90%yield). The ¹H NMR, ¹³C{¹H} NMR, and IR of the major diastereomer are identical to those previously reported for this butyrolactone.^{13, 14} The ¹H NMR (CDCl₃, 360 MHz) of the mixture is provided in Supporting Information Part 2. ¹³C{¹H} NMR (CDCl₃, 90 MHz) of the major *trans*product δ 14.1, 17.7, 22.7, 28.0, 33.9, 36.3, 37.3, 87.7, 176.7; IR (neat) 2960, 2934, 2874, 1780, 1461, 1212, 1172 cm⁻¹.

„Experimental Procedure“ enthält die Präparationsvorschrift, die im Originalartikel oder den dazu gehörigen „Supporting Information“ von den Autoren veröffentlicht wurde.

13.3. Ausgabe der Nachweise zu Synthesen über „References“

Nach der Substanzsuche werden die vier gewünschten Substanzen mit Häkchen ausgewählt.

Über „References“ → **Selected Results** kommt man zu allen Literaturstellen und Patenten dieser vier Verbindungen.

Über „**Filter by Substance Roles**“ → **Preparation** können die insgesamt 827 Treffer auf die 95 Literaturnachweise und Patente zu **Synthesen** der cis-Whisky-Lactone eingeschränkt werden.

Diese sollten ebenfalls unter „Save und Alert“ gespeichert werden.

Save and Alert

Dann können sie mit den Antworten von [Pkt. 13.2](#) über „**Combine**“ bei Bedarf zu einem einzigen Antwortsatz zusammengefasst werden, wenn man wirklich **alle** Textstellen mit Synthesen braucht. Nach der Zusammenführung erhält man insgesamt 96 Treffer.

Synthesis of (±)-cis-whisky lactone

Substances (12) Reactions (14) Citing (2) Citation Map

JOURNAL
 Source
 Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry
 Volume: 57
 Issue: 3
 Pages: 515-516
 Journal
 1993
 DOI:
[10.1271/bbb.57.515](https://doi.org/10.1271/bbb.57.515)
 CODEN: BBBIEJ
 ISSN: 0916-8451

Database Information
 AN: 1993:495210
 CAN: 119:95210
 CAlpus

Company/Organization
 Life Sci. Res. Lab.
 Japan Tob. Inc.
 Yokohama 227
 Japan

Publisher
 Unknown

Language
 English

By: Ebata, Takashi; Kawakami, Hiroshi; Matsumoto, Katsuya; Koseki, Koshi; Okano, Koji; Matsushita, Hajime

The title compound (I, R = Pr) was stereoselectively prepared in 7 steps from 1,4-cyclohexadiene monoxide (II), which was cleaved with Me₂CuLi to give methylcyclohexenol III. Benzoylation of the latter compound and catalytic oxidative cleavage with NaO₂-RuO₂ gave 82.7% (3S*,4S*)-HO₂CCH₂CHMeCH(O₂CPh)CH₂CO₂H (IV). Debenzoylation-lactonization of IV with NaOH gave I (R = CO₂H), which was reduced with diborane-THF complex, tosylated, and coupled with Et₂CuLi to give 68.3% I (R = Pr).

Keywords: whisky lactone isomer total synthesis; cyclohexadiene monoxide conversion whisky lactone isomer

View PDF Full Text

Similar References

- Synthesis of 5-tert-butylbenzo[b]thiophene-2-carboxylic acid
 Synthetic Communications (1989), 19(15), 2731-6 | Language: English, Database: CAlpus
- Synthesis of cis-6-alken-4-olides
 Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas (1975), 94(2), 43-4 | Language: English, Database: CAlpus
- Total synthesis of (+)-hanegokedial
 Tetrahedron Letters (1983), 24(18), 1867-70 | Language: English, Database: CAlpus

Expand All | Collapse All

Substances

Substances (12)

- 55013-32-6

 Relative stereochemistry shown
- 150552-39-9

 Relative stereochemistry shown
- 150552-38-8

 Relative stereochemistry shown

Das ist ein **Beispieltreffer**.

Die Synthesevorschrift muss selbst aus dem Original-Volltext der Publikation herausgesucht werden.

Biosci. Biotech. Biochem., 57 (3), 515–516, 1993

Note

Synthesis of (±)-cis-Whisky Lactone

Takashi EBATA,[†] Hiroshi KAWAKAMI, Katsuya MATSUMOTO, Koshi KOSEKI, Koji OKANO, and Hajime MATSUSHITA

Life Science Research Laboratory, Japan Tobacco Inc., 6-2 Umegaoka, Midori-ku, Yokohama, Kanagawa 227, Japan
 Received October 21, 1992

Whisky lactone (3-methyloctan-4-olide) has been identified as a key aroma component of aged alcoholic beverages such as whisky, brandy and wine.¹⁾ Two isomeric compounds (*cis* and *trans*) are present in nature. These two isomeric compounds are original components of oak, which is used for barrels to age such alcoholic beverages, and are considered to be extracted slowly from oak barrels into alcoholic beverages during maturing. The absolute configurations of natural *trans*- and *cis*-whisky lactones has been confirmed to be (3*S*,4*R*) and (3*S*,4*S*), respectively.²⁾ Very recent investigations have shown that these racemic compounds had insect repellent activity,³⁾ which raised our interest in their synthesis.⁴⁾ This paper describes a simple stereoselective synthesis of (±)-*cis*-whisky lactone 1 starting from 1,4-cyclohexadiene (2).

As shown in the scheme, our synthesis is simple and straightforward. 1,4-Cyclohexadiene (2) was oxidized with mCPBA under Uchida's procedure⁵⁾ to give 3. Treatment of 3 with lithium dimethylcuprate yielded 4a in an 80.8% yield. This was converted to the corresponding 4b in an 81.9% yield. 4b was oxidized under the Sharpless condition⁶⁾ to give 5 in an 82.7% yield (mp 125–127°C). The protective group hydrolyzed with sodium hydroxide and then acidified to give carboxylic acid 6 in a 95.6% yield (mp 74–75°C). This was reduced with diborane-tetrahydrofuran complex to give alcohol 7a in a 48%. The corresponding tosylate 7b was derived from 7a in the usual way. Finally, tosylate 7b was treated with lithium diethylcuprate to give (±)-*cis*-whisky lactone (1) in a 68.3% yield.

In summary, we prepared (±)-*cis*-whisky lactone (1) stereoselectively starting from 1,4-cyclohexadiene (2). The overall yield was 10.8% from 2.

over MgSO₂ and concentrated under atmospheric pressure. The residue was distilled to give 15.2 g (80.8%) of 4a, bp 104–107°C/82 mmHg; n_D²⁰ 1.4779; IR ν_{max}, cm⁻¹: 3342 (s), 3030 (m), 2956 (m), 2904 (s), 2838 (m), 1046 (s); ¹H-NMR (CDCl₃) δ: 1.03 (3H, d, J = 6.3 Hz, Me), 1.65–1.84 (3H, m, H-2, H-6, OH), 1.95–2.07 (1H, m, H-3), 2.18–2.29 (1H, m, H-3), 2.34–2.45 (1H, m, H-6), 3.53 (1H, dt, J = 5.3 and 11.8 Hz, H-1), 5.52–5.64 (2H, m, H-4, H-5). MS (m/z): Found, 111.0815 (M⁺ - 1); calcd. for C₈H₁₄O, 111.0820.

(1*S**,2*S**)-1-Benzoyloxy-2-methyl-4-cyclohexene (4b). Benzoyl chloride (13.3 ml, 114 mmol) was added to a solution of 4a (8.54 g, 76.2 mmol) in dry pyridine (85 ml) while stirring and ice-cooling. Stirring was continued overnight at room temperature before MeOH (5 ml) was added to this mixture. The reaction mixture was concentrated under reduced pressure, and the residue was diluted with ether (50 ml). This was then successively

(1*S**,2*S**)-2-Methyl-4-cyclohexen-1-ol (4a). A solution of methylolithium in ether (1.4*N*, 357 ml, 499 mmol) was added dropwise to a suspension of CuI (47.6 g, 250 mmol) in dry ether (120 ml) at -78°C under Ar. To the stirred and cooled mixture, a solution of 3 (16.0 g, 167 mmol) in ether was added dropwise at -20°C under Ar. The reaction mixture was stirred for 30 min at -20°C and then overnight at room temperature. This was poured into a mixture of saturated aqueous NH₄Cl and ice, before being stirred for 1 h and filtered to remove the insoluble material. The filtrate was extracted with ether. The ethereal solution was washed with brine, dried

Experimental

All boiling point (bp) and melting point (mp) values are uncorrected. IR spectra were measured with a Jasco FT/IR 5000 spectrometer. ¹H-NMR spectra were recorded at 300 MHz and ¹³C-NMR at 75 MHz, with TMS as an internal standard on a Bruker AC-300P spectrometer. MS (EI) spectra were recorded on a JMS DX-303 spectrometer at 70 eV.

347 ml) was added to a biphasic solution of 4b (12.5 g, 57.8 mmol) in CCl₄ (173 ml), MeCN (173 ml) and water (260 ml), before RuO₂ (250 mg, 1.91 mmol) was added to the mixture. This was stirred vigorously for 3 h at room temperature. The reaction mixture was filtered to remove the insoluble material, and the filtrate was extracted with chloroform. The organic layer was dried over MgSO₄ and concentrated under reduced pressure to give 50 ml residual solution. This was chromatographed over Florisil. Elution with ethyl acetate-formic acid (1000:1) gave 5 as crystals. These were recrystallized from *n*-hexane-chloroform to give pure 5 (13.4 g, 82.7%), mp 125–127°C; IR ν_{max}, cm⁻¹: 3000 (br.), 1723 (s), 1711 (s), 1296 (s), 1274 (s), 1112 (s), 717 (s); ¹H-NMR (CDCl₃) δ: 1.00 (3H, d, J = 6.7 Hz, Me), 2.12 (1H, dd, J = 7.2 and 14.5 Hz, H-5), 2.28–2.43 (2H, m, H-4, H-5), 2.58–2.75 (2H, m, H-2), 5.38–5.45 (1H, m, H-3), 7.45–7.73 (3H, m, aromatic H), 7.88–8.05 (2H, m, aromatic H), 12.28 (2H, br, COOH). Anal. Found: C, 60.24; H, 5.68%. Calcd. for C₁₄H₁₆O₄: C, 59.99; H, 5.75%.

14. Wie hilft SciFinder bei der Retrosyntheseplanung?

Die Retrosynthese oder auch retrosynthetische Analyse ist eine Strategie beim Planen einer chemischen Synthese von komplexen organischen Molekülen. Dabei wird das Zielmolekül gedanklich in einfachere Bausteine, sogenannte Synthone zerlegt, für deren Verknüpfung Synthesebeispiele bekannt sind. So gelangt man schrittweise rückwärts zu käuflichen und möglichst billigen oder literaturbekannten Startmolekülen.

Das CAS-Retrosynthese-Tool in SciFinder kann Ihnen den Großteil der Recherche-Arbeit für die Retrosyntheseplanung abnehmen und Ihren **Zeitaufwand dafür minimieren**.

Das Retrosynthese Tool präsentiert publizierte Möglichkeiten übersichtlich und auch Vorhersagen zu weiteren potentiellen Vorgehensweisen.

Experimentelle Beispiele:

Für jedes bekannte Molekül werden alle in Literatur und Patenten beschriebenen Synthesewege analysiert und in einem übersichtlichen Schema zusammengefasst. Wenn gleiche Zwischenprodukte involviert sind, werden Synthesewege unterschiedlicher Publikationen miteinander verbunden. Die so erstellten Retrosynthesen können schnell und effektiv nach Alternativen und Referenzen ausgewertet werden.

Vorhersagen („*Predicted Steps*“)

Basierend auf publizierten Reaktionstypen und Transformationen werden Vorschläge für das gesuchte Zielmolekül gemacht. Die den Vorschlägen zugrunde liegenden Reaktionen können leicht eingesehen werden, um passende Reaktionsbedingungen ermitteln zu können.

Auf diese Art und Weise kann man neue, noch nicht veröffentlichte Syntheserouten für bestehende Moleküle erhalten, aber auch retrosynthetische Routen für unbekannt, neuartige chemische Verbindungen entwickeln.

Retrosynthesepläne können gespeichert und heruntergeladen bzw. geteilt werden, um z.B. in der Arbeitsgruppe besprochen zu werden.

Die Lieferanten für Edukte und Zwischenprodukte sind über den Retrosyntheseplan ebenfalls einfach zugänglich.

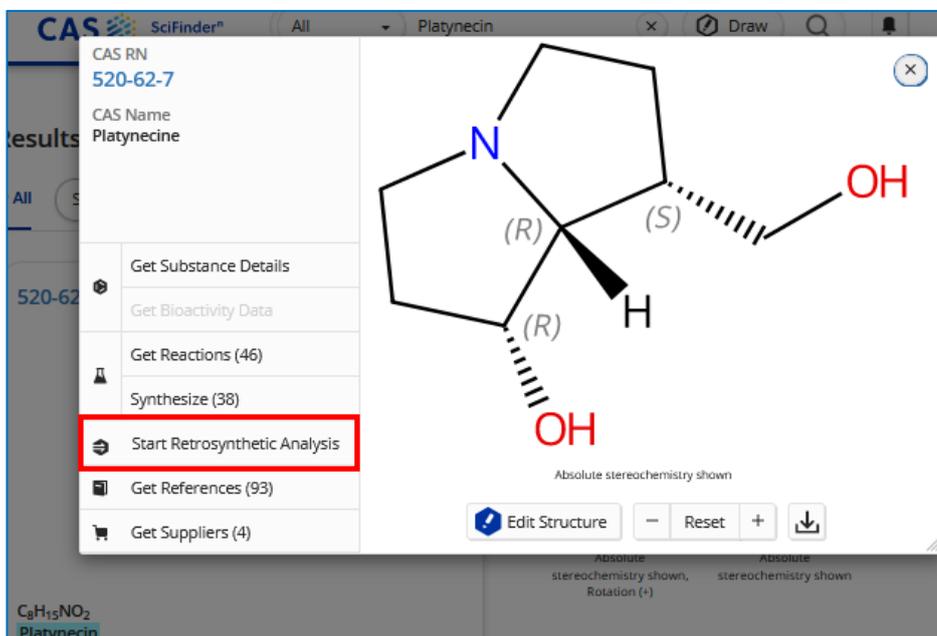
Hilfreiche Videos zur Retrosynthese

- [How to perform a retrosynthetic analysis using CAS SciFinder](https://www.cas.org/how-perform-retrosynthetic-analysis-using-cas-scifinder) (2024)
(<https://www.cas.org/how-perform-retrosynthetic-analysis-using-cas-scifinder>)
- [Predictive Retrosynthesis in SciFinder-n, incl. Background Information](https://youtu.be/BM-BokX3V_U?feature=shared) (2022)
(https://youtu.be/BM-BokX3V_U?feature=shared)

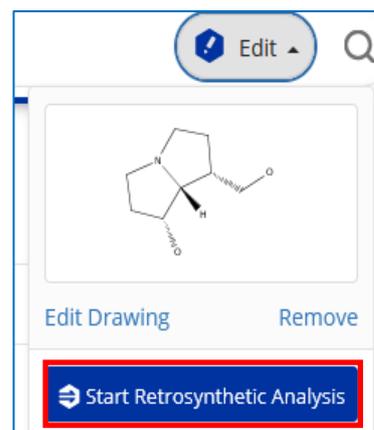
14.1. Wie kann ich die Retrosyntheseplanung beginnen?

Beginnen kann man die Syntheseplanung an verschiedenen Stellen in SciFinder:

- Direkter Start aus dem Popup-Fenster nach Klick auf eine Substanz in einer Reaktion bzw. Trefferliste:



- Im Suchmodus „**Reactions**“ wird nach dem Zeichnen einer chemischen Verbindung die Möglichkeit der Retrosynthese-Analyse angeboten.



- Auf allen Such-Startseiten öffnet sich nach Anklicken des Buttons „**Retrosynthetic Analysis**“ das Zeichenbrett, auf dem das Zielmolekül erstellt werden kann (s. auch Pkt. [11.5](#) und [11.6](#)). Nachdem eine Struktur gezeichnet oder importiert wurde, auf den Button klicken.

All Substances Reactions **References** Suppliers

Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI.

Author Name Enter last name, first name middle name. Example: Schubert, J

+ Add Advanced Search Field

Retrosynthetic Analysis
Make reaction plans with conditions, yields, catalysts, and experimental procedures.

Retrosynthetic Analysis
Draw or import a structure.

Draw or change atoms or bonds.

Start Retrosynthetic Analysis

- Für eine erste Syntheseplanung können die Standardeinstellungen übernommen werden (Synthesetiefe 3, normale Regeln, Kosten der Startmaterialien max. \$1,000 USD/mol bzw. \$10 USD/g). Sollte der damit vorgeschlagene Plan nicht passen, können diese Optionen geändert werden ([s. Pkt. 14.3](#))

Retrosynthesis Plan Options for drawn structure
Powered by ChemPlanner®

Select Synthetic Depth [Learn more.](#)

1
 2
 3
 4



Set Rules Supporting Predicted Reactions [Learn more.](#)

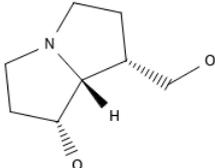
Common
 Uncommon (includes Common Rules)
 Rare (includes Common and Uncommon Rules)

Set Starting Materials Cost Limit [Learn more.](#)

Email me when my plan is complete

[Create Retrosynthesis Plan](#)

Break and Protect Bonds [Learn more.](#)



- Mit Klick auf die Schaltfläche „**Create Retrosynthesis Plan**“ wird die Planung gestartet. Hinweis: Sie haben auch die Möglichkeit, eine E-Mail zu erhalten, wenn der Plan fertig erstellt ist.
- Nachdem Sie auf die Schaltfläche „**Retrosyntheseplan erstellen**“ geklickt haben, wird eine von zwei Meldungen angezeigt:

Welcome to your Retrosynthesis Plan

SciFinder® creates plans that include experimental and predicted steps. Based on one or more literature sources, experimental steps are based on proven reactions and predicted steps are based on potentially achievable reactions.

For each plan step, there may be a number of alternative steps. Click the or icon to view, and then select an alternative step.

Don't show me this again.

Plan in progress...

It's taking a little longer than expected to generate your plan. Click the OK button to return to the Home page where you can check the status of your plan under [Recent Search History](#).

Eine Nachricht, die Sie zu Ihrem Retrosyntheseplan willkommen heißt. Klicken Sie auf die Schaltfläche „**OK**“, um Ihren Plan auf der Seite „**Retrosynthesis Plan**“ anzuzeigen.

Eine Nachricht, die Sie darüber informiert, dass Ihr Plan einige Zeit dauern kann. Klicken Sie auf die Schaltfläche „**OK**“, um zur Startseite zurückzukehren.

So sieht der fertige Plan aus:

Prognostizierte Schritte an- und ausschalten

Retrosynthesis Plan for drawn structure Powered by ChemPlanner®

Key Experimental Steps Predicted Steps Speichern oder Download des Planes

Ändern der Voreinstellungen

Nähere Informationen zu den Reaktionsschritten und zu alternativen

Plan Information

Estimated Yield: 47%
Overall Price: \$13,663.09
(USD per 100 grams)

Scoring Profiles

Complexity Reduction

Convergence

Evidence

Cost

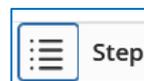
Yield

Step	Evidence
<p>← A ⇒ B</p> <p><i>Stereoselective</i></p> <p>Maximum Yield: 90%</p> <p>Evidence (968)</p> <p>Alternative steps (31)</p>	<p>1.1 Reagents: Hydrogen</p> <p>Catalysts: Nickel</p> <p>Solvents: Ethanol; 1 bar, 50 °C</p>
<p>▶ B ⇒ C</p> <p>Maximum Yield: 95%</p> <p>Evidence (2)</p> <p>Alternative steps (38)</p>	<p>1.1 Reagents: Diisobutylaluminum hydride</p> <p>Solvents: Dichloromethane</p> <p>Experimental Protocols</p>
<p>▶ C ⇒ D + E</p> <p>Maximum Yield: 55%</p> <p>Evidence (1)</p> <p>Alternative steps (16)</p>	<p>1.1 Reagents: Silver fluoride</p> <p>Solvents: Acetonitrile</p> <p>Experimental Protocols</p>

14.2. Kann ich alternative Schritte in die Synthese einbauen?

- Alternative Syntheseschritte „**Alternative Steps**“ für jede Teilreaktion sind mit Klick auf den blauen Kreis mit dem Erlenmeyerkolben zugänglich.

Die alternativen Schritte findet man außerdem auch unter dem Reiter „**Step**“ rechts oben.



View all alternatives (7)
View evidence (2)

- Diese Alternativreaktionen sind entweder aus weiteren experimentellen Schriften entnommen („**Experimental Steps**“)

B ⇒ C

Maximum Yield: 95%

Evidence (2)

Alternative steps (38)

1.1 Reagents:

Diisobutylaluminum hydride

Solvents: Dichloromethane

[Experimental Protocols](#)

oder sie werden aus passenden Analogvorschriften („**Predicted Steps**“) abgeleitet.

1 of 24 Experimental Step

Selected View 1 similar Alternative View evidence (2)

Maximum yield: 95%

2 of 24

Select View evidence

Maximum yield: 100%

Mit „**View evidence**“ kommt man zu den Reaktionsvorschriften, die den jeweiligen Reaktionsschritt **experimentell** beschreiben.

1 of 20 Predicted Step

Select View evidence (12,288)

Average yield: 76%

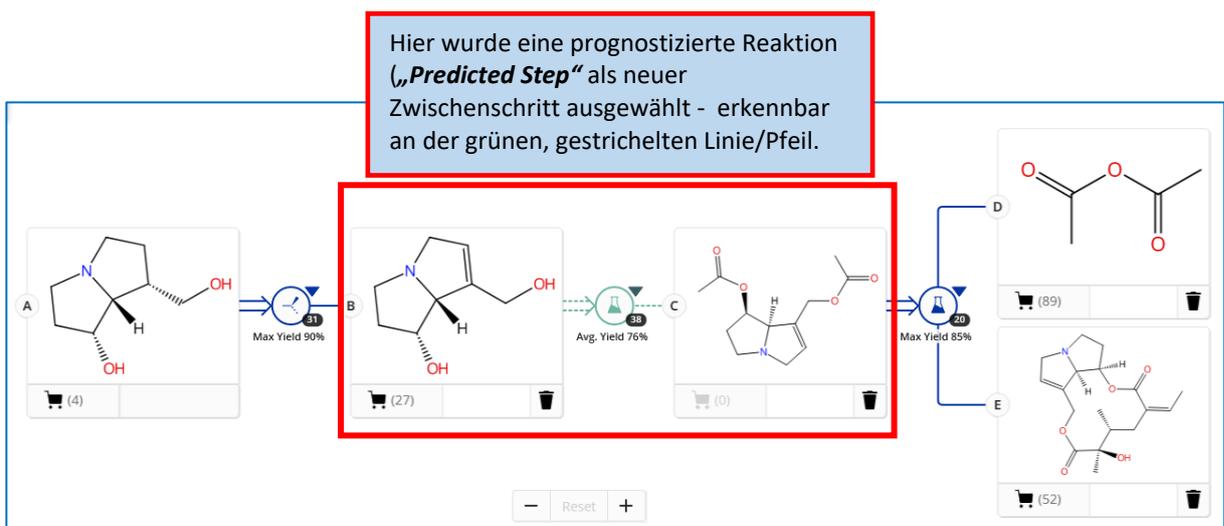
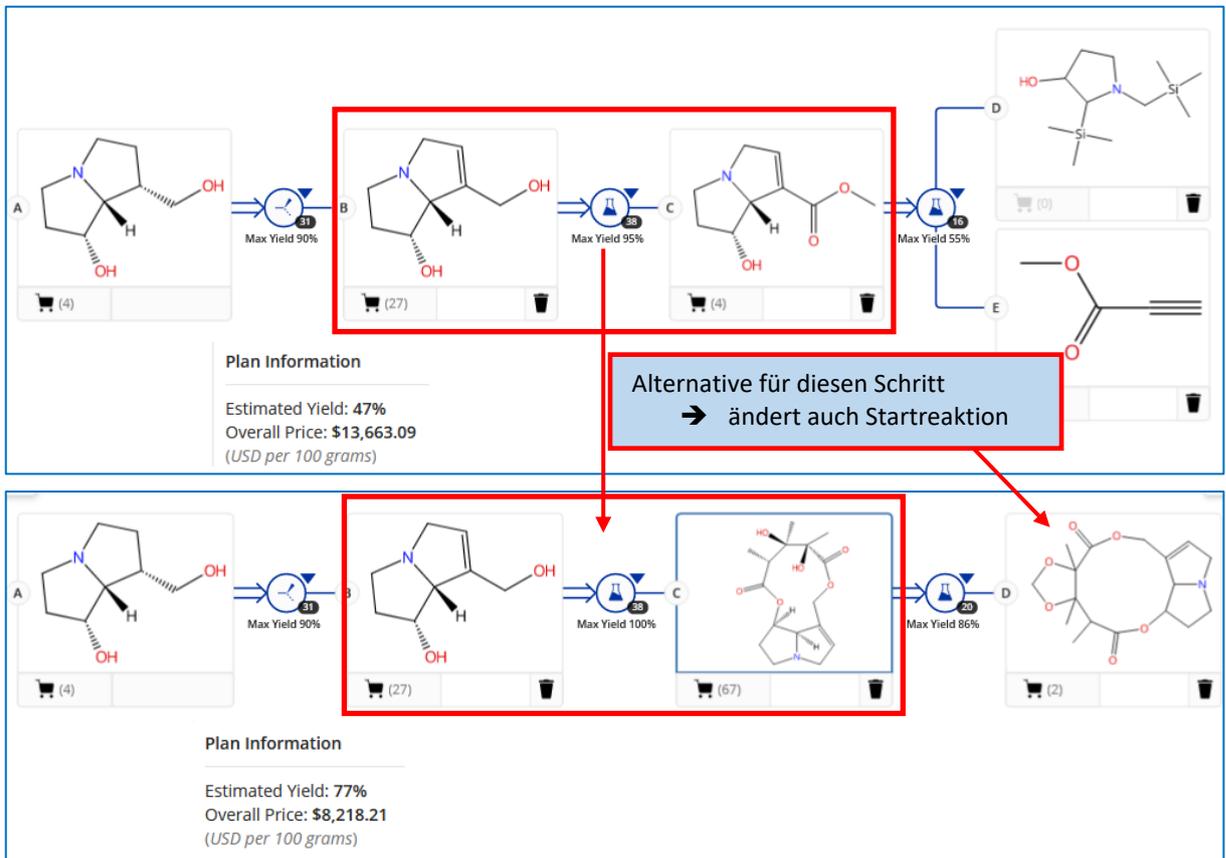
2 of 20 Predicted Step

Select View 2 similar Alternatives View evidence (3,831)

Average yield: 56%

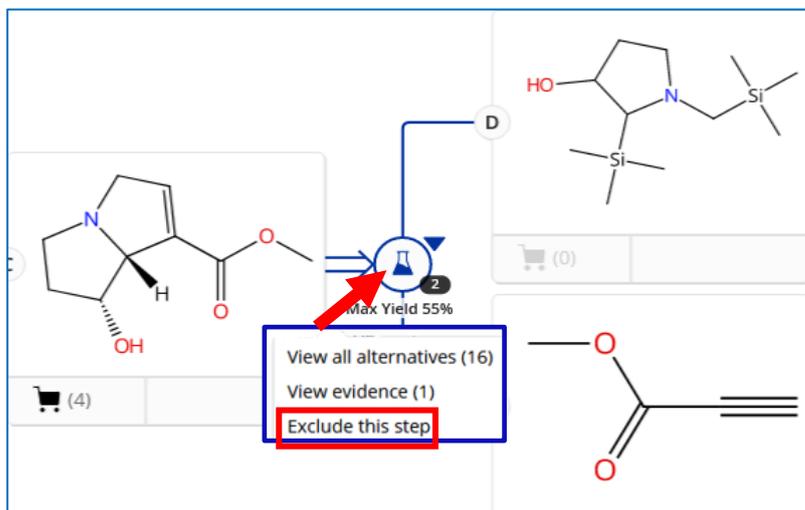
Mit „**View evidence**“ kommt man zu publizierten Reaktionsvorschriften, die **analoge Synthesen** zum jeweiligen Reaktionsschritt

- Nach Auswahl eines alternativen Schrittes (höhere Ausbeute, billigere Ausgangsstoffe, geeignetere Reaktionsbedingungen usw.) wird der Reaktionsplan entsprechend angepasst.
- Die alternativen Schritte können sowohl aus experimentellen Arbeiten als auch aus prognostizierten, analogen Reaktionen stammen.

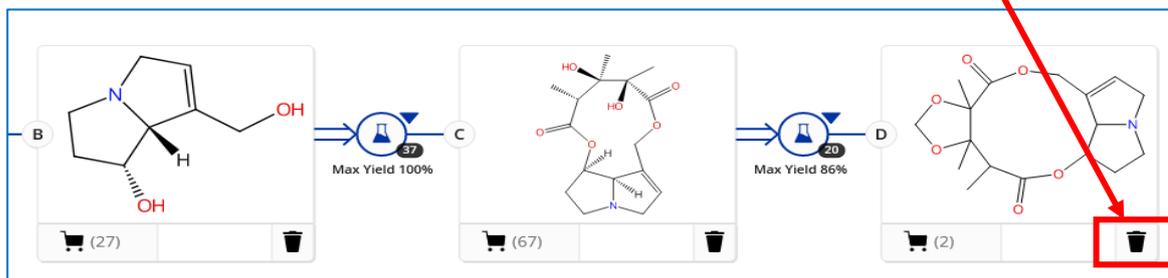


14.3. Kann ich bestimmte Schritte des Retrosyntheseplanes ausschließen?

- Wenn die „**Predicted Steps**“ aktiviert sind, hat man die Möglichkeit, Schritte oder Zwischenprodukte aus dem Retrosyntheseplan auszuschließen.
Mit Klick auf den blauen Kreis mit dem Erlenmeyerkolben erscheint „**Exclude this step**“.



- Nach dem Ausschluss wird ein alternativer Zwischenschritt angezeigt:



- Der Ausschluss von Reaktionsstufen ist reversibel:

Retrosynthesis Plan for drawn structure Powered by ChemPlanner®

Key Experimental Steps Predicted Steps Edit Plan Options

View Excluded Options

Excluded Options for this Plan

Structures Steps

Recover

Recover

Mit „**View Excluded Options**“ werden diese angezeigt und sind mit „**Recover**“ wieder in den Synthesepan integrierbar.

14.4. Welche Optionen kann ich bei der Retrosyntheseplanung einstellen?

- **Voreingestellte Optionen:**
 - Synthetic Depth: **3**
 - Break and Protect Bonds: **None**
 - Rules Supporting Predicted Reactions: **Common**
 - Starting Material Cost Limit: **\$1,000 USD/mol or \$10 USD/g**
- Diese können direkt vor dem Start der Syntheseplanung geändert werden.

Retrosynthesis Plan Options

Select Synthetic Depth [Learn more.](#)

1
 2
 3
 4

Set Rules Supporting Predicted Reactions [Learn more.](#)

Common
 Uncommon (includes Common Rules)
 Rare (includes Common and Uncommon Rules)

Set Starting Materials Cost Limit [Learn more.](#)

1000 USD/mol

- **Synthetic Depth** - beschränkt die Anzahl der synthetischen Schritte, die zulässig sind, d.h. die Zahl der Bindungsspaltungen (Disconnections). Standardmäßig sind drei Schritte eingestellt. Ein Plan kann eine von der eingestellten Option abweichende Anzahl an Schritten aufweisen, wenn bereits nach weniger Schritten die Ausgangsstoffe zum angegebenen Preis erhältlich sind (Starting Material Cost Limit).
 - **Rules Supporting Predicted Reactions**
 - Zu den Common Rules gehören häufig für Synthesen verwendete Reaktionstypen, die durch viele Literaturbeispiele gestützt werden.
 - Zu Uncommon oder Rare Rules gibt es weniger Beispiele in der Literatur, jedoch können sie möglicherweise mehr neuartige synthetische Ansätze aufzeigen.
Achtung: Die Suchdauer kann sich verlängern, wenn diese ausgewählt werden.
 - Wird bei der Suche mittels Common Rules kein Ergebnis gefunden, erweitert das Tool das Regelset selbstständig auf eine größere Anzahl. Die manuelle Einstellung der Uncommon oder Rare Rules ist in der Praxis sehr selten notwendig.
 - **Starting Material Cost Limit**
Für jeden Schritt des Plans werden bei der retrosynthetischen Suche die Ausgangsstoffe mit kommerziell erhältlichen Verbindungen abgeglichen. Der Plan ist fertig, wenn er entweder die festgelegte Kostengrenze eines Edukts oder die synthetische Tiefengrenze erreicht.
Das voreingestellte Standardlimit liegt bei 1.000 USD/mol oder 10 USD/g.
- Achtung:** Das festgelegte Kostenlimit, mit dem ein Plan erstellt wird, bleibt solange für die weitere Plangenerierung bestehen, bis es wieder geändert wird.

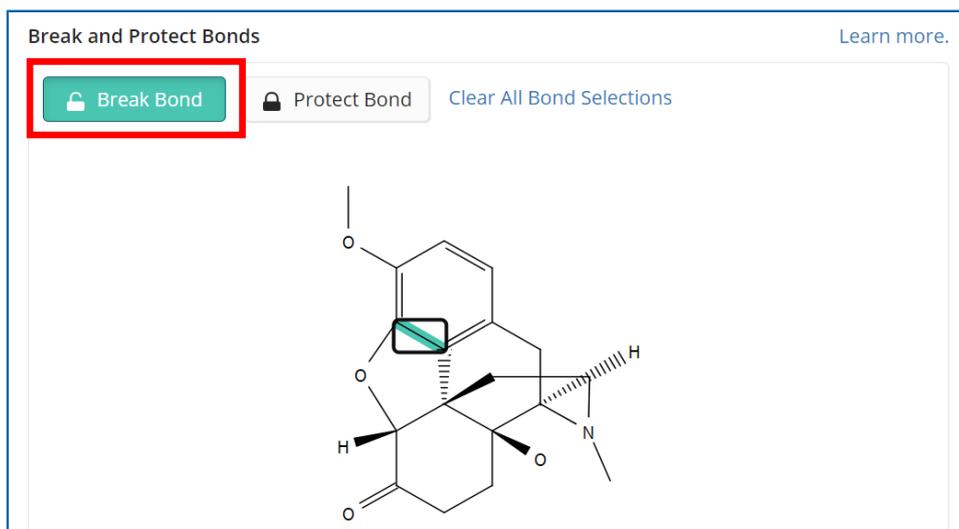
- **Break and Protect Bonds**

Möchte man die Retrosynthese-Erstellung konkretisieren, um die Präzision der Abfrage zu erhöhen und die Menge der Ergebnisse einzuschränken, kann einerseits die Bindung markiert werden, die im ersten Syntheseschritt gebrochen werden soll (**Break Bond**). Andererseits kann man mehrere Bindungen markieren, die über die gesamte Retrosyntheseroute geschützt sind (**Protect bond**).

Um eine bestimmte Bindung aufzubrechen, klickt man auf die Schaltfläche „**Break Bond**“ und dann auf die ausgewählte Bindung in der Struktur.

Diese Bindung wird nun **grün** hervorgehoben.

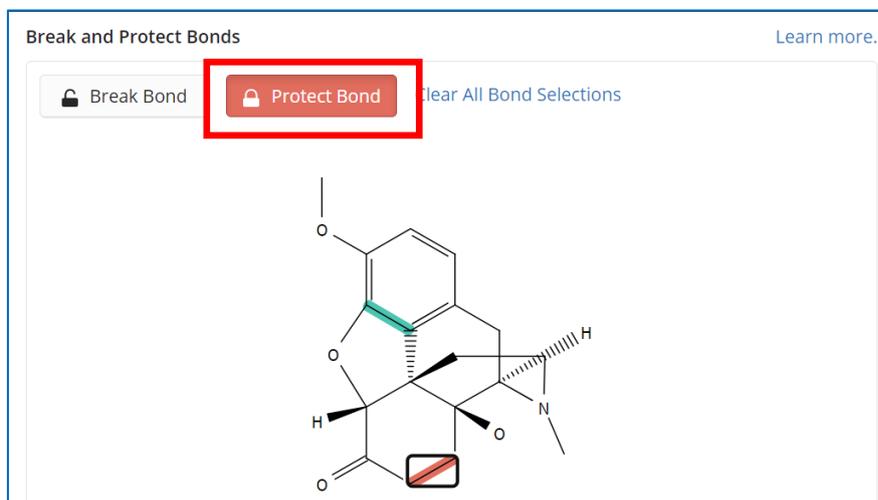
Dieser Bindungsbruch bezieht sich auf die erste Bindungsspaltung der Retrosynthetischen Analyse.



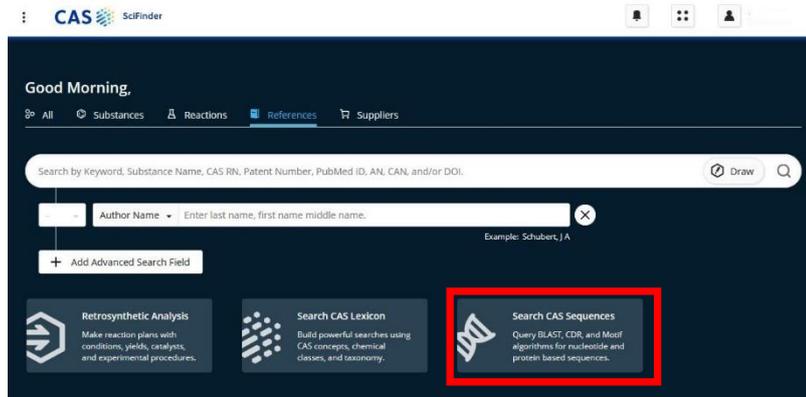
Um bestimmte Bindungen zu schützen, klickt man auf die Schaltfläche „**Protect Bond**“ und dann auf die ausgewählte(n) Bindung(en) in der Struktur.

Diese Bindung wird nun **rot** hervorgehoben.

Die geschützten Bindungen bleiben im gesamten Synthesepfad über alle Stufen bestehen, allerdings kann sich ihre Bindungsordnung ändern.

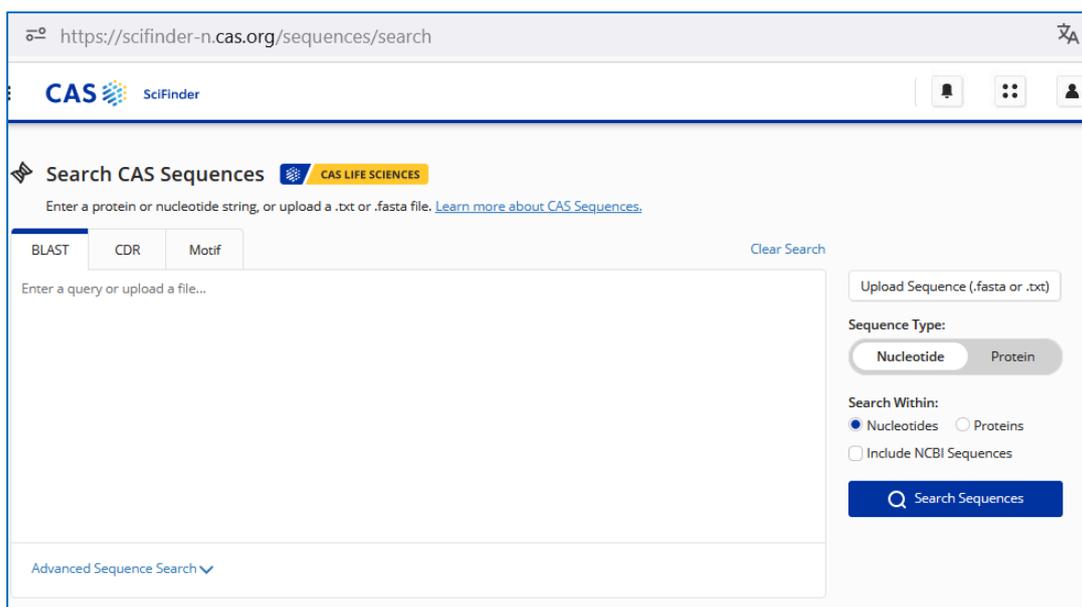


15. Wie kann ich mit BLAST Protein- bzw. Nukleotid-Sequenzen suchen?



In SciFinder kann man auch nach Biosequenzen suchen. Der Zugang erfolgt über die normale Startseite mit Klick auf „**Search CAS Sequences**“.

15.1. Einfache Suche



Ablauf der Suche

1. Man gibt eine Protein- oder Nucleotidsequenz ein oder lädt eine Datei mit der Sequenz hoch:
 - Einzelsequenz: .txt-Datei
 - Multiple Sequenz: .fasta-Datei
2. Auswahl des Sequenztyps (Nucleotid oder Protein).
3. Bei „**Search Within**“ wählt man die entsprechende Option: Nucleotid oder Protein.
4. Dann startet man die Suche mit Klick auf den Button „**Search Sequences**“.
5. Man kommt zurück zur Homepage und kann sich die Ergebnisse ansehen.

Beispiel:

CAS SciFinder

Search CAS Sequences CAS LIFE SCIENCES

Enter a protein or nucleotide string, or upload a .txt or .fasta file. [Learn more about CAS Sequences.](#)

BLAST CDR Motif Clear Search

AGGAGTCGATAATACATATAAGAGAT

Upload Sequence (.fasta or .txt)

Sequence Type: Nucleotide Protein

Search Within: Nucleotides Proteins

Include NCBI Sequences

Search Sequences

Advanced Sequence Search

Recent Search History View All Search History

November 29, 2023

<p>Sequences</p> <p>9:40 AM</p>	<p>Sequence Type: Nucleotide</p> <p>Search Within: Nucleotides</p> <p>NCBI Included: No</p> <p>BLAST Algorithm: BLASTn</p> <p>Alignment Identity: 80%</p> <p>Query Coverage: 90%</p> <p>Results will expire on Dec 29, 2023.</p>	<p>AGGAGTCGATAATACATATAAGAGAT</p> <p>View Results</p> <p>Edit Options</p> <p>Searching</p>
---------------------------------	--	--

Sobald die Suche abgeschlossen ist, erscheint in der History „**View Results**“ und es steht „**Complete**“ darunter.

Achtung: Die Anzeige unter „**Edit Options**“ aktualisiert sich nicht automatisch. Daher die Seite einfach neu laden. Die Suche selber dauert nur kurze Zeit.

Recent Search History View All Search History

November 29, 2023

<p>Sequences</p> <p>9:40 AM</p>	<p>Sequence Type: Nucleotide</p> <p>Search Within: Nucleotides</p> <p>NCBI Included: No</p> <p>BLAST Algorithm: BLASTn</p> <p>Alignment Identity: 80%</p> <p>Query Coverage: 90%</p> <p>Results will expire on Dec 29, 2023.</p>	<p>AGGAGTCGATAATACATATAAGAGAT</p> <p>View Results</p> <p>Edit Search</p> <p>Complete</p>
---------------------------------	--	--

Mit „**Edit Search**“ kann man die Einstellungen der Suche nach Biosequenzen ändern und dann die Suche neu starten.

Wichtig: Die Ergebnisse der Suche nach Biosequenzen bleiben nur bis 30 Tage nach der ersten Suche zur jeweiligen Sequenz gespeichert.

Mit „**View Results**“ kann man sich die Ergebnisse ansehen.

Sequences search for your query

References - [Download] [Email]

BLAST Search Details
 Sequence Type: Nucleotide
 Search Within: Nucleotides
 BLAST Algorithm: BLASTn
 NCBI Included: No
 Alignment Identity: 80%
 Query Coverage: 90%
 E-Value: 10
 Match with Gaps?: No
 Gap Costs: Existence 5
 Extension 2
 Word Size: 11

Bioscape Analysis
 Visually explore sequence similarity with a new tool.
[Learn more about Bioscape.](#)
 Create Bioscape Analysis

Filter by
 E-Value
 0 to 10⁶
 Query Coverage %
 0 to 100
 Subject Coverage %
 0 to 100

Query Details AGGAGTCGATAATACATATAAGAGAT [View Less](#)

AGGAGTCGATAATACATATAAGAGAT

4 Results Sort: Alignment Identity View: Expanded

1 Alignment Identity: 87.5%
 Query 1 26
 Subject 1 194,774
 Matches: 21
 Mismatches: 3
[View More](#)

2 Alignment Identity: 87.5%
 Query 1 26
 Subject 1 796
 Matches: 21
 Mismatches: 3
[View More](#)

3 Alignment Identity: 87.5%
 Query 1 26
 Subject 1 924
 Matches: 21
 Mismatches: 3

Ergebnisse mit Details:

Sequences search for your query

References - [Download] [Email]

BLAST Search Details
 Sequence Type: Nucleotide
 Search Within: Nucleotides
 BLAST Algorithm: BLASTn
 NCBI Included: No
 Alignment Identity: 80%
 Query Coverage: 90%
 E-Value: 10
 Match with Gaps?: No
 Gap Costs: Existence 5
 Extension 2
 Word Size: 11

Bioscape Analysis
 Visually explore sequence similarity with a new tool.
[Learn more about Bioscape.](#)
 Create Bioscape Analysis

Filter by
 E-Value
 0 to 10⁶
 Query Coverage %
 0 to 100
 Subject Coverage %
 0 to 100

Query Details AGGAGTCGATAATACATATAAGAGAT [View More](#)

4 Results Sort: Alignment Identity View: Expanded

1 Alignment Identity: 87.5%
 Query 1 26
 Subject 1 194,774
 Matches: 21
 Mismatches: 3
[View Less](#)

Alignment Subject

Alignment Data
 BLAST Score: 33
 E-Value: 5.07029

```

Q      3  GAGTCGATAA TACATATAAG AGAT 26
      ||| | | | | | | | | | | | | | | |
S    2389 GAGTGGCTGA TACATATAAG AGAT 2412
  
```

CAS Registry Number: 441836-23-3
 Length: 194,774 nt

Sequence

```

1  TACATTTGCT GGAGGACACA TCCAAGACAC ATAAGAACTG TAACAATTA GATCAATATC AAGTTGGTGA GAGCACAAGG
81  CTTAAACAGG TTTTGATTT TAAGCATTGG TGTTGGTAGC TAATCTTAGT TGTCACTTGG ATTGCATCTG GGATCAACTG
161 GAGCTCAAGC TGCTGAGAAG TCAGGTGAGG AACTTTTTGA TTAGACAATT TTAAGCACGA GTATCCAGAA ATCTGAGTGG
241 CATCTTCTGG TGGCATCCCA GACAACAGA CATGGAAGAG GGAACCTTTG CTCTCCCTCC TGATGGACAG TCCATCTATC
321 CTGCTGCTGT GCCACTCCTT CGCTAATACT AGAACCTTCT TCTTCGTGAT TCCAATGTAG GCGGAAGACT AGCAGCCCTC
401 TGGAAATTTCC TCAAGTTTCT AGCACTAGAT TGAGACTGAA GAAACGTCCA GATTACAGGA GTCTCAGCTT TTTCTGTGCT
481 GGACAGCCAC TGTGGACTA CCCAGAATAT GTCCTGTAAG TCAGTCTAAT AAGTAGAATA AATCCTATTA CATAAAATGA
561 ATACATTGAT AGTATTTGTA TCAATATTAT ACATACTTTA GATAATGAAT TTATATATAT ATATATATAT ATATATATAT
641 ATATATATAT ATATTGAGT AGTTATGTTT CTTCAAAAAA TCCTGACCAG TACACATTGG ATATCAAAA TCCTGTAAAA
721 TATCAAAAAGT ATACTCGGTC TCTTTAACCA CCAATGTGAT ACAAATTAAG GCTGCCAGAG AATGCCACAT AAGGGCACCA
  
```

15.2. Erweiterte Suche nach Biosequenzen

The screenshot shows the 'Search CAS Sequences' interface. The 'Advanced Sequence Search' section is highlighted with a red box. The 'BLAST Algorithm' dropdown is also highlighted with a red box and set to 'BLASTn'. The 'Search Within' section is highlighted with a red box and set to 'Nucleotides'. The 'Query Coverage %' is set to 90, 'Word Size' is 11, and 'E-Value' is 10. The 'Match with Gaps?' option is set to 'No'.

Bei der erweiterten Suche (Advanced Search) sind Werte voreingestellt, diese sind abhängig vom Sequenztyp und den Optionen bei „*Search Within*“.

Sequence Type / Search Within	Options (Default Value Shown)										
	Adjust Parameters for Short Sequences	Sequence Identity %	Match with Gaps	Gap Costs	Query Coverage %	Word Size	Reward for Match, Penalty for Mismatch	Scoring Matrix	BLAST Algorithm	E-Value	Exclude Low-Complexity Regions
Nucleotide / Nucleotides	Available	80	No	Existence 5, Extension 2	90	11	2, -3	—	BLASTn	10	No
Nucleotide / Proteins	N/A	—	No	Existence 11, Extension 1	90	6	—	BLOSUM62	BLASTx-fast	10	—
Protein / Nucleotides	N/A	—	No	Existence 11, Extension 1	90	6	—	BLOSUM62	TBLASTn-fast	10	—
Protein / Proteins	Available	—	No	Existence 11, Extension 1	90	3	—	BLOSUM62	BLASTp	10	No

15.3. Hilfreiche Videos zur Sequenzsuche

- [Performing a BLAST Sequence Search with CAS SciFinder](#)
 - How to perform a BLAST sequence search using CAS SciFinder
 - Accessing NCBI source information directly from CAS SciFinder
 - Filtering capabilities to effectively target relevant sequences
 - Finding relevant resources containing target sequences
- [Performing a CDR Sequence Search with CAS SciFinder](#)
 - How to perform a CDR search among highly relevant sequences using CAS SciFinder
 - Refining a CDR search to identify targeted sequences and related indexed documents, including patents
- [Performing a Motif Sequence Search with CAS SciFinder](#)
 - How to perform a Motif search using CAS SciFinder
 - Combining results in a Motif search

[Advanced BLAST Sequence Search Techniques with CAS SciFinder](#)

- How to upload multiple sequences to search at one time
- Downloading and sharing answer sets using an Excel spreadsheet
- Searching for Nucleotide sequences

16. Patente in SciFinder und PatentPak

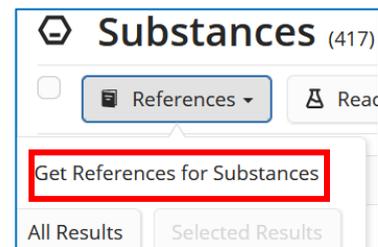
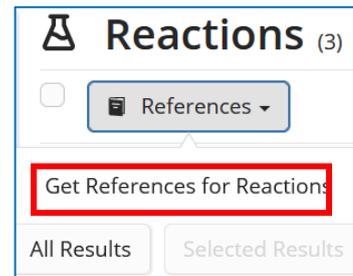
SciFinder enthält Patente [aus der ganzen Welt](#) mit chemischen Inhalten (ab 1808). Neben Stoff- und Verfahrenspatenten sind auch Anwendungspatente (allgemeine Anwendungen, Diagnostika, Pharmazeutika usw.) suchbar.

- Damit ermöglicht der SciFinder eine Vielzahl von **Patentrecherchen**:
 - Recherche zum Stand der Technik zur Vermeidung kostspieliger Doppelentwicklungen
 - nach neuen Produkten und Verfahren
 - nach potentiellen Kooperationspartnern und Lizenznehmern (Konkurrenz- und Marktbeobachtung durch Anmelderrecherche)
 - zur Identifizierung neuer technologischer Trends
 - zur Beurteilung der Patentfähigkeit einer Erfindung (Neuheitsrecherchen)
 - zur Ermittlung störender Schutzrechte Dritter
- Alle Patente erhalten unabhängig von der Originalsprache englische Titel, Abstracts und Schlagworte. Sie sind u. a. über chemische Substanzen, Patentklassifikationen, Wortsuchen bzw. über Suchen nach Erfindern und Inhabern auffindbar.
- Die in SciFinder enthaltenen Patente umfassen nicht nur die gesamte Chemie, sondern auch Pharmazeutika, Konsumgüter, Materialien sowie ingenieurwissenschaftliche und landwirtschaftliche Themen.
- Zusammengehörige Erfindungen werden in Patentfamilien zusammengefasst, so dass man schnell ein Äquivalentpatent in einer vertrauten Sprache findet und in einer Trefferliste jede Erfindung nur einmal enthalten ist.
- In SciFinder steht PatentPak® zum Lesen der Patentschriften zur Verfügung. PatentPak® ist eine Patent-Workflow-Lösung, die den Abruf und die Analyse von Volltext-Patentinformationen unterstützt. Der Zeitaufwand für die Durchsicht von Patenten und die Ermittlung der darin enthaltenen relevanten Informationen zu chemischen Substanzen wird damit stark reduziert.
- Einzelheiten zur Patentsuche in SciFinder (Neuheitsrecherche, Stand der Technik, Konkurrenzanalyse u.a.) erläutert auch dieses Webinar:
[How green is this pasture? - assessing the IP landscape with SciFinder.](#)

16.1. Wie finde ich allgemein Patente in SciFinder?

Jedesmal, wenn man in der Trefferliste („**References**“) mit den Textstellennachweisen ist, d.h.

- nach einer thematischen Suche
- nach einer Reaktionssuche und anschließendem Klick auf „**References**“ bzw.
- nach einer Substanzsuche und anschließendem Klick auf „**References**“



kann die Treffermenge über „**Filter Results**“ auf den **Dokumententyp** „**Patente**“ eingeschränkt werden.

Hinweis: Die aus einer Substanzsuche resultierenden Patente müssen bei angestrebter Vollständigkeit unbedingt mit den Ergebnissen einer Markush-Struktursuche ergänzt werden (s. Pkt. 16.4).

- **Beispiel:** Einschränkung der Treffer einer Referenzsuche auf Patentdokumente

Gesamte Treffermenge bei thematischer Suche nach
 "thalidomide compounds" OR "thalidomide analogs"
 Mit dem Dokumententyp „**Patente**“ gefilterte Treffer

(Stand: 12.06.2024)

→ 424 Nachweise

→ 39 Patente

References search for "thalidomide compounds" OR "thalidomide analogs"

424 Results

Sort: Relevance View: Full Abstract

5'-Substituted thalidomide analogs as modulators of TNF- α

By: Teubert, Uwe; Zwingerberger, Kai; Wnendt, Stephan; Eger, Kurt
 Archiv der Pharmazie (Weinheim, Germany) (1998), 331(1), 7-12 | Language: English, Database: C4plus and MEDLINE

The synthesis of 5'-substituted thalidomide analogs is described. The required substituted glutamates were prepared by Michael reaction. Condensation with phthalic anhydrides followed by reaction with urea yielded the imides I (R = Me, Ph; R¹ = H) as diastereomeric mixtures. Furthermore, glutethimide was brominated by an improved method and the resulting bromide was reacted in several steps with NaN₃, H₂, and phthalic anhydride to give I (R = Ph, R¹ = Et). In a similar manner, the bromide was reacted with NaN₃ and various phthalic anhydrides to give the imides II (R, R¹, R² = H; R = R¹ = MeO, R² = H; R = H, R¹ = R² = MeO). All final compounds were tested in vitro for their inhibitory activity on the release of TNF- α , using stimulated peripheral mononuclear blood cells (PBMCs). Compounds with an aryl, aromatic substituent in position 5' of the thalidomide mol. were more active than thalidomide. Compound II (R = H; R¹, R² = MeO) was able to reduce increased levels of IL-2 in vitro.

Chemical structures I and II are shown.

Substances (22) Reactions (18) Citing (30) Citation Map

Hinweis: Die hier bei der Referenzsuche nach Thalidomidderivaten gefundenen Patente müssen bei angestrebter Vollständigkeit („Ich will **alle** Patente zu Thalidomidverbindungen!“) unbedingt mit den Ergebnissen einer normalen Struktursuche (s. Pkt. 11.5) sowie einer Markush-Struktursuche ergänzt werden (s. Pkt. 16.4).

Außerdem sollten bei der Wortsuche oben auch noch andere Varianten, z.B. „substituted thalidomides“ oder auch „thalidomide derivatives“ berücksichtigt werden.

16.2. Wie finde ich ein spezielles Patent?

- Im Suchmodus „**References**“ kann mit Hilfe der **Patentnummer** gezielt nach speziellen Patenten gesucht werden.
- Die Patentnummer muss dabei **ohne Leerzeichen** zwischen dem Länderkürzel und der Zahl eingegeben werden, z.B. *JP2015030844*



Treffer bei Suche in „References“

Link zur vollständigen Patentschrift sowie zur gesamten

Link zur vollständigen Patentschrift über Espacenet

Link zu den Substanzen bzw. Reaktionen, die in dem Patent beschrieben werden

- Über das nach der Suche in der Trefferliste angezeigte Abstract des Patent es kann man sich alle in Patent enthaltenen **Substanzen** oder **Reaktionen** durch Klick auf den entsprechenden Button **anzeigen** lassen.

- Der Zugang zur vollständigen Patentschrift im Original erfolgt am besten über „**PatentPak**“ (s. Pkt. 16.5). Dort hat man u.a. direkten Zugriff auf im Patent gelistete chemischen Verbindungen.

Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options
JP2015030844	Japanese	A	PDF PDF+ Viewer

- Auch im Suchmodus „**All**“, „**Substances**“ bzw. „**Reactions**“ kann mit Hilfe der Patentnummer nach speziellen Patenten gesucht werden.

16.3. Wie kann ich nach dem Stand der Technik suchen?

- Soll eine chemische Verbindung, deren Herstellung und/oder ihre Verwendung patentiert werden, ist es nötig, vorher den Stand der Technik (engl. prior art) zu ermitteln, da eine Erfindung nur dann als neu – und damit patentierbar – gilt, wenn sie sich vom Stand der Technik abhebt.
- Im Patentrecht bezeichnet „Stand der Technik“ daher diejenigen Verfahren oder Vorrichtungen, welche bereits bekannt und durch schriftliche (Paper, Patente) oder mündliche Beschreibung (öffentliche Vorträge, nicht nur auf Kongressen und Symposien), durch Benutzung oder in sonstiger Weise der Öffentlichkeit zugänglich gemacht worden sind.
- Hat man die thematische Suche und sowie eine Struktur- und Markush-Suche zu einem Patentthema absolviert und die Treffer ausgewertet, sollte man bei gefundenen, thematisch sehr nahestehenden Patenten eine automatisierte „Analyse des Stands der Technik“ („Get Prior Art Analysis“) initiieren.
- Dabei wird der Titel, die Zusammenfassung, die Ansprüche und Schlagworte sowie die Substanzen des vorliegenden Patents analysiert, um ähnliche relevante Schutzrechte und auch Nichtpatent-Literatur zu finden.

- Benutzen Sie dafür den entsprechenden Button unter dem Abstract in der Einzeltrefferanzeige.

Achtung: Diese Schaltfläche gibt es nur bei Patenten.

Acyloxymethyl-substituted thalidomides and their hydrochlorides as water-solution thalidomide derivatives for use in the treatment of diseases requiring modulation of TNF-α

Substances (98) Reactions (98) Citing (0) Citation Map

PATENT

Patent Number: US20100240651
 Publication Date: 2010-09-23
 Application Number: US2010-12793972
 Application Date: 2010-06-04
 Kind Code: A1

By: Zhang, Hesheng

Water-soluble thalidomide derivatives which are useful in diseases that need TNF-α modulation are disclosed in this invention.

Keywords: antiinflammatory antitumor thalidomide derivative preparation autoimmune disease

Buttons: PatentPak Viewer, **Get Prior Art Analysis**, Full Text

- SciFinder schickt eine E-Mail-Benachrichtigung an die mit Ihrem Konto verknüpfte Adresse. Bei Bedarf kann eine andere E-Mail-Adresse angegeben werden.

Zum Start der Analyse klicken Sie auf die Schaltfläche „**Submit**“.

Prior Art Analysis

SciFinder[®] will search for all relevant information and send you a Prior Art Analysis based on this document. You can view the status of the request in your Recent Search History and on the History Page. You may continue to search while the analysis is processing.

Email Address

heike.goebel@uni-jena.de

Buttons: Submit, Cancel

Your Search History

121 Searches

February 14, 2024

References 3:43 PM	Prior Art Analysis Acyloxymethyl-substituted thalidomides and their hydrochlorides as water-solution thalidomide derivatives for use in the treatment of diseases requiring modulation of TNF-α	View Results Searching...
References 3:20 PM	Prior Art Analysis (183) Preparation of isotopes-enriched pomalidomide derivatives for use as antitumor agents	View Results Complete

Der Status der Analyse wird unter „**History**“ angezeigt.

Projects

History

- Die Schaltfläche „**View Results**“ wird aktiv, wenn die Analyse abgeschlossen ist. Klicken Sie darauf, um die Analyse als Treffersatz bei „**References**“ anzuzeigen.
- Wie oben erwähnt, erhält man eine E-Mail-Benachrichtigung, wenn die Analyse abgeschlossen ist. Die E-Mail enthält außerdem Links zu den ersten fünf Analyse-Ergebnissen sowie eine Schaltfläche zum Anzeigen der gesamten Treffermenge in SciFinder.

- Die so gefundenen Dokumente haben alle ein Prioritätsdatum vor dem des analysierten Patents und spiegeln den Stand der Technik vor dessen Anmeldung wider.

- Bis zu 200 Publikationen bzw. Patente werden bei so einer „Stand-der-Technik-Analyse“ angezeigt. Diese sind mit absteigender Ähnlichkeit zum analysierten Patent geordnet.

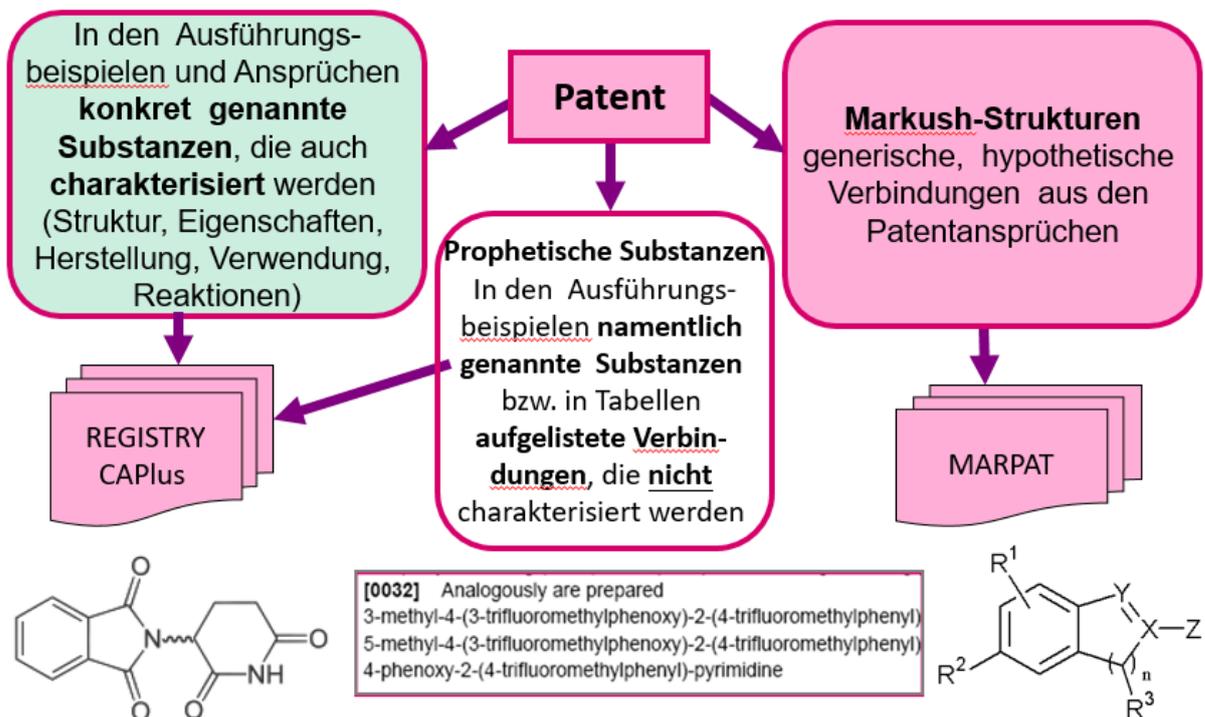
Hinweis: Die automatisierte „Prior Art Analysis“ ersetzt keine sorgfältig durchdachte und durchgeführte manuelle Recherche. Sie ist eine gute Ergänzung oder kann den Start erleichtern!

16.4. Wie finde ich generische/hypothetische chemische Substanzen in Patenten (Markush-Struktursuchen)

16.4.1. Was sind Markush-Strukturen?

SciFinder enthält drei verschiedene Substanz„arten“ aus den indexierten Patenten:

- Verbindungen aus den Ansprüchen und Beispielen, deren Existenz mit weiteren angeführten Daten abgesichert ist. Diese Stoffe bekommen eine eigene CAS-Registry-Nummer, sie sind mit dieser Nummer und **über eine Struktursuche auffindbar**.
- Weiterhin enthält SciFinder chemische Verbindungen, die in den Ausführungsbeispielen eines Patenten vorkommen, die aber ohne nähere Erläuterungen nur beispielhaft namentlich erwähnt oder tabellarisch aufgeführt werden. Diese "Prophetic in Patents" genannten Stoffe bekommen ebenfalls eine eigene CAS-Registry-Nummer und sind mit dieser Nummer bzw. **über eine Struktursuche auffindbar**.



- Hypothetische Verbindungen, die generisch beschrieben sind, sogenannte Markush-Strukturen. Diese Stoffe haben keine CAS-Registry-Nummer, sie sind nicht über eine normale Struktursuche auffindbar, sondern **nur mit einer Markush-Struktursuche**.

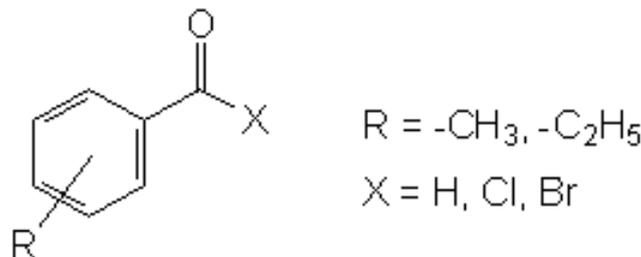
Markush-Strukturen sind **nach Eugene A. Markush benannt**, in dessen Patent US1506316 zu Pyrazolon-Farbstoffen aus dem Jahr 1924 in den Ansprüchen erstmals nicht nur jeweils eine einzelne chemische Verbindung genannt wurde, sondern eine Auswahl aus verschiedenen Substanzen.

Claims: 95

1. The process for the manufacture of dyes which comprises coupling with a halogen-substituted pyrazolone, a diazotized sulphonated material selected from the group consisting of aniline, homologues of aniline and halogen substitution products of aniline. 100

2. The process for the manufacture of dyes which comprises coupling with a halogen-substituted pyrazolone, a diazotized un-sulphonated material selected from the group consisting of aniline, homologues of aniline and halogen substitution products of aniline. 105

Markush-Strukturformeln enthalten variable (generische) Symbole mit Platzhaltern für bestimmte Substituenten, z.B. R für organische Reste (R = Methyl, Isopropyl, Pentyl...) oder X für Halogene bzw. Heteroatome (X = N, O, S, Cl, Br...)



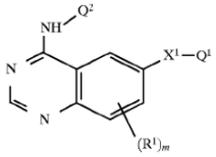
Eine Markush-Formel repräsentiert sehr **viele** potentielle chemische Substanzen (Beschreibung einer ganzen Verbindungsklasse). Dadurch kann in **einer** Patentschrift eine **große Zahl** verschiedener, einander ähnlicher Verbindungen abgedeckt werden.

Typisches Beispiel für Markush-Strukturen in den Ansprüchen des Patentes US 5866572

„Quinazoline derivatives“

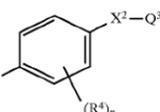
What we claim is:

I. A quinazoline derivative of the formula I



wherein X¹ is a direct link;
wherein Q¹ is a 5-membered heteroaryl moiety containing one heteroatom selected from oxygen and sulphur, which heterocyclic moiety is a single ring or is fused to a benzo ring, and Q¹ optionally bears up to 3 substituents selected from halogeno, hydroxy, amino, trifluoromethoxy, trifluoromethyl, cyano, nitro, carboxy, carbamoyl, (1-4C)alkoxycarbonyl, (1-4C)alkyl, (1-4C)alkoxy, (2-4C)alkenyl, (2-4C)alkynyl, (1-3C)alkenedioxy, (1-4C)alkylamino, di-[(1-4C)alkyl]amino, pyrrolidin-1-yl, piperidino, morpholino, piperazin-1-yl, 4-(1-4C)alkylpiperazin-1-yl, (2-4C)alkanoylamino, N-(1-4C)alkylcarbamoyl, N,N-di-[(1-4C)alkyl]carbamoyl, amino-(1-4C)alkyl, (1-4C)alkylamino-(1-4C)alkyl, di-[(1-4C)alkyl]amino-(1-4C)alkyl, pyrrolidin-1-yl-(1-4C)alkyl, piperidino-(1-4C)alkyl, morpholino-(1-4C)alkyl, piperazin-1-yl-(1-4C)alkyl, 4-(1-4C)alkylpiperazin-1-yl-(1-4C)alkyl, halogeno-(2-4C)alkoxy, hydroxy-(2-4C)alkoxy, (1-4C)alkoxy-(2-4C)alkoxy, amino-(2-4C)alkoxy, (1-4C)alkylamino-(2-4C)alkoxy, di-[(1-4C)alkyl]amino-(2-4C)alkoxy, pyrrolidin-1-yl-(2-4C)alkoxy, piperidino-(2-4C)alkoxy, morpholino-(2-4C)alkoxy, piperazin-1-yl-(2-4C)alkoxy, 4-(1-4C)alkylpiperazin-1-yl-(2-4C)alkoxy, (1-4C)alkylthio-(2-4C)alkoxy, (1-4C)alkylsulphonyl-(2-4C)alkoxy, (1-4C)alkylsulphonyl-(2-4C)alkoxy,

wherein m is 1 or 2 and each R¹ is independently hydrogen, halogeno, trifluoromethyl, hydroxy, amino, nitro, cyano, carboxy, carbamoyl, (1-4C)alkoxycarbonyl, (1-4C)alkyl, (1-4C)alkoxy, (1-4C)alkylamino, di-[(1-4C)alkyl]amino, (2-4C)alkanoylamino, N-(1-4C)alkylcarbamoyl or N,N-di-[(1-4C)alkyl]carbamoyl;
and wherein Q¹ is phenyl optionally bearing up to 3 substituents selected from halogeno, trifluoromethyl, cyano, hydroxy, amino, nitro, carboxy, carbamoyl, (1-4C)alkoxycarbonyl, (1-4C)alkyl, (1-4C)alkoxy, (1-4C)alkylamino, di-[(1-4C)alkyl]amino, (2-4C)alkanoylamino, N-(1-4C)alkylcarbamoyl and N,N-di-[(1-4C)alkyl]carbamoyl, or Q² is a group of the formula II



wherein X² is a group of the formula CO, C(R³)₂, CH(OR³), C(R³)₂-C(R³)₂, C(R³)=C(R³), C≡C, CH(CN), O, S, SO, SO₂, N(R³), CON(R³), SO₂N(R³), N(R³)CO, N(R³)SO₂, OC(R³)₂, SC(R³)₂, C(R³)₂O or C(R³)₂S wherein each R³ is independently hydrogen or (1-4C)alkyl, Q³ is phenyl or naphthyl or a 5- or 6-membered heteroaryl moiety containing up to 3 heteroatoms selected from oxygen, nitrogen and sulphur, which heteroaryl moiety is a single ring or is fused to a benzo ring, and wherein said phenyl or naphthyl group or heteroaryl moiety optionally bears up to 3 substituents selected from halogeno, trifluoromethyl, cyano, hydroxy, amino, nitro, carboxy, carbamoyl, (1-4C)alkoxycarbonyl, (1-4C)alkyl, (1-4C)alkoxy, (1-4C)alkylamino, di-[(1-4C)alkyl]amino, (2-4C)alkanoylamino, N-(1-4C)alkylcarbamoyl and N,N-di-[(1-4C)alkyl]carbamoyl, n is 1

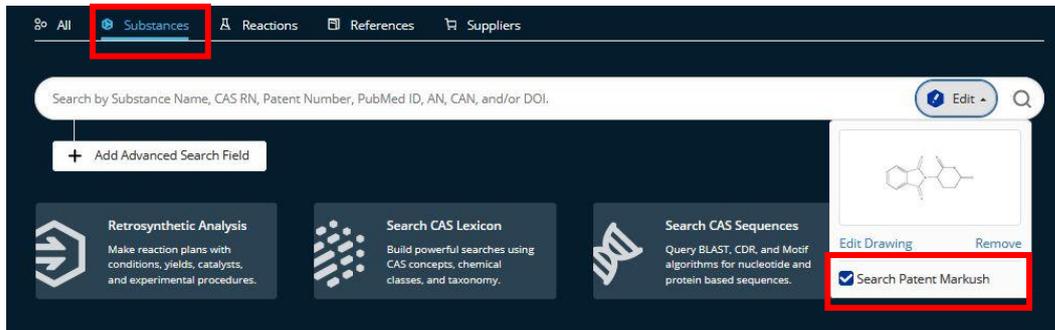
16.4.2. Wie gehe ich bei einer Markush-Struktursuche vor?

Das zu suchende Strukturfragment wird bei „**Substances**“ → „**Draw**“ wie gewohnt im Struktureditor gezeichnet bzw. hochgeladen (s. Pkt. 11.5).



Bevor die Suche mit Klick auf die Lupe gestartet wird, setzt man den Haken bei „**Search Patent Markush**“.

Beispiel: Suche nach Substanzen mit Thalidomid-Grundstruktur



Ergebnis der Markush-Struktursuche: Patent Markush Match

Angezeigt werden alle in der Datenbank gefundenen generischen (hypothetischen) chemischen Verbindungen, die in den ausgewerteten Patentschriften durch die jeweiligen Ansprüche (Claims) geschützt sind.

wherein:
 R^1 is selected from H, C_1-C_6 acyl or C_1-C_6 alkyl, each of which is substituted with 0, 1, 2, or 3 R^6 ;
 R^2 and R^3 are each independently selected from H, C_1-C_3 alkyl, or C_1-C_3 haloalkyl, each of which is substituted with 0, 1, 2, or 3 R^6 ;
 each R^4 is independently selected from H, hydroxyl, C_1-C_3 alkyl, C_1-C_3 alkoxy, or C_1-C_3 haloalkyl, each of

Die gefundenen Patente lassen sich nach den ausstellenden Patentämtern filtern.

Hier z.B. wurden die US-Patente ausgewählt.

Der jeweilige Claim, der die Substanz umfasst, wird neben der Struktur angegeben und ist über **PatentPak** bzw. über den **Volltext-Link** zugänglich.

Die Ansprüche stehen meist am Ende einer Patentschrift, erkennbar z.B. an

- *What is claimed is ...*
- *What we claim is ...*
- *Claims*

Passt die für die Markush-Suche eingegebene Struktur zu mehreren Ansprüchen (Claims) eines Patentes, so erscheint das Patent für jeden passenden Claim in der Trefferliste.

Beispiel:

Im japanischen Patent JP2009001529 wurden passende Strukturen in zwei Claims gefunden. Das Patent erscheint zweimal in der Liste.

Mit der Markush-Suche findet man bei den Substrukturen insgesamt 1451 passende Claims, die in 766 Patenten enthalten sind.

Zu diesen 766 Patenten kommt man nach Anklicken des References-Buttons.

Diese Patent-Nachweise können bei Bedarf über die Anwendung von Filtern („**Filter by**“) eingeschränkt werden (s. Pkt. 6.2).

Hinweis: Eine Markush-Suche sollte **zusätzlich** zu einer regulären Struktursuche und eventuell zu einer Suchbegriff-basierter Recherche durchgeführt werden. Die jeweiligen Ergebnisse können mittels „**Combine**“ (s. Pkt. 8.1) zusammengeführt werden.

16.5. Welche Informationen zu einem Patent finde ich in der detaillierten Einzeltrefferansicht?

Method using a thalidomide compound and an antiinflammatory cytokine for the treatment and/or prophylaxis of interleukin-12-caused diseases

In this Reference

By: Frosch, Stefanie; Germann, Tino **Erfinder**

A combination therapy is provided for the treatment of diseases which are caused by the formation of the proinflammatory cytokine interleukin-12 (IL-12), in which a thalidomide compound (e.g. thalidomide, α-methylthalidomide (EM 978)) and an antiinflammatory cytokine (e.g. IL-10) are applied at the same time.

Keywords: thalidomide compound cytokine combination interleukin 12 disease; methylthalidomide cytokine combination interleukin 12 disease; EM978 cytokine combination interleukin 12 disease; IL10

Patentnummer PatentPak PDF Get Prior Art Analysis Full Text -

Anmeldedatum - Am 29.11.1999 ist das Patent von Grünenthal beim Patentamt eingegangen.

Publication Information - Patent

Patent Number	Publication Date	Application Number	Application Date	Kind Code
DE19957342	2001-05-31	DE1999-19957342	1999-11-29	A1

Patentanmelder, -inhaber

Assignee	Source	Database Information	Language
Grünenthal G.m.b.H., Germany	Germany CODEN: GWXXBX	AN: 2001:394098 CAN: 135:408 CAplus	German

Veröffentlichungsdatum - Am 31. Mai 2001 wurde das Patent in Deutschland veröffentlicht.

Patent Family

Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
DE19957342	German	A1	PDF	2001-05-31	DE1999-19957342	1999-11-29
WO2001039758	Undetermined	A2			WO2000-EP11179	2000-11-11
AU2001013938	English	A			AU2001-13938	2000-11-11
WO2001039758	Undetermined	A3			WO2000-EP11179	2000-11-11
US20030021763	Undetermined	A1			US2002-156771	2002-05-29

Zur Patentfamilie gehörende Äquivalenz-Patente

Priority Application

Priority Application Number	Application Date
DE1999-19957342	1999-11-29
WO2000-EP11179	2000-11-11

Patentfamilie

Eine Gruppe von Patentanmeldungen und -erteilungen, die durch eine gemeinsame Priorität (Erstanmeldedatum) miteinander verbunden sind.

Beispiel: Zu einer Erstanmeldung in Deutschland am 29. November 1999 sind identische Nachanmeldungen bis zum 29. November 2000 in den Mitgliedsstaaten der Pariser Verbandsübereinkunft (z.B. GB, US, EP) möglich, ohne dass ein Stand der Technik, der innerhalb dieser Jahresfrist bekannt wird, der Neuheit der Nachanmeldungen entgegensteht.

Patentfamilienmitglieder (Äquivalenzpatente) sind auch nützlich, wenn sie - im Gegensatz zum Ursprungspatent, der Prioritätsschrift, in einer Sprache verfasst sind, die man beherrscht (s. auch Pkt. 16.6, nächste Seite).

16.6. Wie erhalte ich mit PatentPak® Zugang zu den Patentvolltexten?

- Mehr als 18 Mio. Patentvolltexte (ab 1998) von insgesamt 46 Patentämtern (u. a. D, F, GB, JP, US, RU, KR, IN, CN, EP, WO) sind über PatentPak® als vollständig durchsuchbare PDF-Dateien griffbereit für den Nutzer.
- Das Durcharbeiten von sehr langen Patentschriften nach den benötigten Informationen zu gesuchten chemischen Substanzen, ihren Anwendungen bzw. Reaktionen kann sehr zeitaufwendig sein. PatentPak® ermöglicht eine immens beschleunigte Auswertung der Patenttreffer durch den interaktiven „**PatentPak Viewer**“ (s. Pkt. 16.7).
- Beispiel einer PatentPak-Anzeige nach Suche des koreanischen Patent **KR2011133048** bei „**References**“

References - KR2011133048

Preparation of heterocyclic amino ester derivatives as protein tyrosine kinase and signal transduction modulators useful in treatment of hyperproliferative disorders

Assignees: Shenzhen Dongyangguang Industrial Development Co., Ltd.; Sunshine Lake Pharma Co., Ltd.
United States, US20100239576 A1 2010-09-23 | Language: English, Database: CPlus

This invention relates to novel heterocyclic amino ester derivatives of general formula I (wherein each of R¹, R², R³ and R⁴ is independently H, aliphatic, haloaliph., etc.; each of Y¹ and Y² is independently a divalent group derived from aliphatic-C(:O)-, aliphatic-C(:O)O-, -O₂S-, etc.; W is O, NH, substituted amino, etc.; Q is a cyclic based moiety) and salts thereof, which are useful in the treatment of hyperproliferative diseases, such as cancer, in mammals. In particular, the invention relates to compounds, and metabolites thereof, which inhibit protein tyrosine kinase activity, resulting in the inhibition of inter- and/or intracellular signaling. This invention also relates to a method of using such compounds in the treatment of hyperproliferative diseases in mammals, especially humans, and to pharmaceutical compositions containing such compounds. Synthetic procedures for preparing I are exemplified. Example compound II-2HCl was prepared in a multistep synthesis that involved reaction of a BOC-protected pyrazole-4-carboxylic acid intermediate with 3-fluoro-4-(7-methoxyquinolin-4-yloxy)benzenamine to give protected-II, which was subsequently deprotected. In athymic nude mice bearing s.c. U87MG tumors, II was administered orally (p.o.) at doses of 10, 30 and 100 mg/kg once a day (QD), for 21 consecutive days. On the last day of treatment (Day 21), the 10, 30 and 100 mg/kg doses decreased mean tumor volume by 47 %, 76 %, and 99 %, resp., compared to the mean tumor volume of the vehicle-treated group.

Chemical structure I: R1N(R2)C(R3)C(=O)OY1WY2Q

Chemical structure II: COC1=CC=C2C(=C1)N=CN=C2OC3=CC=C(C=C3)FNC(=O)N4C(=O)N(C5=CC=CC=C5)N4

PatentPak - Full Text - Substances (256)

Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options
US20100239576	English	A1	PDF PDF+ Viewer
AU2010229147	English	A1	PDF
KR2011133048	Korean	A	PDF
AU2010229147	English	B2	PDF
JP2012521348	Japanese	T	PDF
JP5503751	Japanese	B2	PDF
EP2408300	English	B1	PDF
ES2578990	Spanish	T3	PDF
US8232294	English	B2	PDF

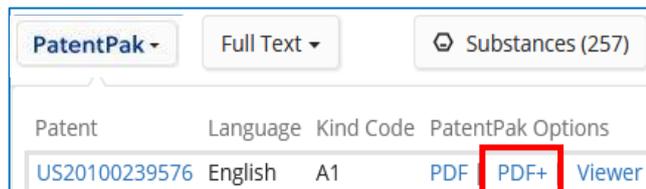
PatentPak-Optionen zur Ansicht des Originalpatentes:

- als durchsuchbare pdf-Datei (PDF)
- als durchsuchbare pdf-Datei mit einer Tabelle sämtlicher Substanzen, die im Patent enthalten sind (PDF+)
- Ansicht über den interaktiven Patent-Viewer

Mehrere alternative Versionen der Patente in englischer Sprache sind über Patentfamilien-Mitglieder als pdf-Dateien zugänglich. Die pdf-Dateien sind vollständig durchsuchbar.

Nach Anklicken von „PDF+“
öffnet sich das Patentedokument als
reine PDF Datei.

Im Anschluss an den eigentlichen
Patenttext findet man ab **Seite 102**
die Tabelle mit allen im Patent
aufgeführten chemischen Verbindungen.



PATENTPAK A CAS SOLUTION Substance table begins on page 102.

US 20100239576A1

(19) **United States**
(12) **Patent Application Publication** (10) **Pub. No.: US 2010/0239576 A1**
Xi (43) **Pub. Date: Sep. 23, 2010**

(54) **AMINO ESTER DERIVATIVES, SALT
THEREOF AND METHODS OF USE** A61K 31/704 (2006.01)
A61K 31/708 (2006.01)
A61K 31/661 (2006.01)

(76) Inventor: **Ning Xi, Thousand Oaks, CA (US)** A61K 31/573 (2006.01)
A61P 35/04 (2006.01)
Correspondence Address: A61P 37/06 (2006.01)
Ning Xi A61P 35/02 (2006.01)
565 Timberwood Ave. A61P 1/04 (2006.01)
Thousand Oaks, CA 91360 (US) C12N 5/02 (2006.01)
C12N 9/12 (2006.01)

(21) Appl. No.: **12/728,153** C12N 9/99 (2006.01)

(22) Filed: **Mar. 19, 2010** (52) **U.S. CL. 424/133.1; 546/153; 514/312;**

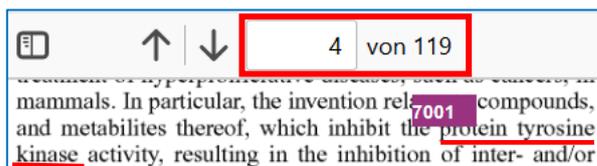
Die Tabelle schlüsselt die Fundstellen der Substanzen im Patent auf. Jede chemische
Verbindung wird auf der genannten Seite mit einer nummerierten Markierung
gekennzeichnet. Neben der CAS-Registry-Nummer und dem systematischen CAS-Namen ist
meist auch die Strukturformel der Verbindung aufgeführt.

102 von 119 Originalgröße

Key Substances in Patent

Mark	Page #	CAS RN	Name	Structure
7001	p.4	80449-02-1	Protein tyrosine kinase	
2	p.46	1245930-74-8	L-Alanine, N-[[[3-fluoro-4-[(7-methoxy-4-quinolinyl)oxy]phenyl]amino]carbonyl]-2,3-dihydro-5-methyl-3-oxo-2-phenyl-1H-pyrazol-1-yl]-1-methylethyl ester	
1	p.46	1245930-73-7	L-Alanine, (1R)-2-[4-[[[3-fluoro-4-[(7-methoxy-4-quinolinyl)oxy]phenyl]amino]carbonyl]-2,3-dihydro-5-methyl-3-oxo-2-phenyl-1H-pyrazol-1-yl]-1-methylethyl ester, (2E)-2-butenedioate (1:2)	

Substanzen **1** und **2** auf Seite 46;
Substanz **7001** auf Seite 4



Die tabellarische Auflistung der chemischen
Substanzen ist sehr hilfreich bei der Durchsicht
eines Patentes und der Beurteilung seiner
Relevanz für die eigene Forschung. Noch
besser gelingt das mit dem PatentPak-Viewer.

46 von 119 125 %

Step 2) (S)—((R)-1-(4-(3-fluoro-4-(7-methoxyquinolin-4-yloxy)phenyl)carbamoyl)-5-methyl-3-oxo-2-phenyl-2,3-dihydropyrazol-1-yl)propan-2-yl) 2-aminopropanoat

[0303] To a solution of (S)—((R)-1-(4-(3-fluoro-4-(7-methoxyquinolin-4-yloxy)phenyl)carbamoyl)-5-methyl-3-oxo-2-phenyl-2,3-dihydropyrazol-1-yl)propan-2-yl)2-(benzyloxy-carbonyl-amino)propanoate (74.7 mg, 0.1 mmol) in a mixture of EtOAc (15 mL) and MeOH (10 mL) was added catalytic amount Pd/C (10%, ~55% w/w water content, 20 mg) under N₂ atmosphere. The suspension was degassed under vacuum and then purged with H₂. The reaction mixture was stirred at rt for 20 minutes under H₂ balloon. The mixture was filtered and the residue was washed with MeOH (5 mL×3). The filtrate used for the next step immediately.

[0304] MS (ESI, pos. ion) m/z: 614.1 (M+1).

Step 3) (S)—((R)-1-(4-(3-fluoro-4-(7-methoxyquinolin-4-yloxy)phenyl)carbamoyl)-5-methyl-3-oxo-2-phenyl-2,3-dihydropyrazol-1-yl)propan-2-yl) 2-aminopropanoate fumarate

[0305] To a solution of (S)—((R)-1-(4-(3-fluoro-4-(7-methoxyquinolin-4-yloxy)phenyl)carbamoyl)-5-methyl-3-oxo-2-phenyl-2,3-dihydropyrazol-1-yl)propan-2-yl)2-

16.7. PatentPak Viewer

- Der PatentPak Viewer zeigt eine interaktive Version des Patentvolltextes.
- Mit einem Klick auf die entsprechende Seitenzahl in der Liste der „Schlüsselsubstanzen“ auf der linken Seite findet man punktgenau die Position dieser Substanz in der Patentschrift.
- Diese Direktlinks führen zu allen Substanzen einer Patentschrift, die von CAS indexiert wurden.
- Die Patentvolltexte können wieder als PDF bzw. als PDF+ heruntergeladen werden.

The screenshot shows the CAS PatentPak Viewer interface. At the top, there are navigation controls for 'PAGE' (1/101), 'ZOOM', and 'DOWNLOAD' (PDF, PDF+). The sidebar on the left lists 'Key Substances in Patent' with CAS RNs and names. The main content area displays patent information for US 2010/0239576 A1, including the title 'AMINO ESTER DERIVATIVES, SALTS THEREOF AND METHODS OF USE', inventor 'Ning Xi', and various classification codes. A chemical structure is shown in the bottom right of the main area.

Beispiel: Nach Anklicken von „**Page 63**“ springt die Darstellung sofort zur chemischen Verbindung mit der CAS-Registry-Nummer **1245931-31-0** auf **Seite 63** der Patentschrift.

The screenshot shows the CAS PatentPak Viewer interface with the 'Page 63' button highlighted in the sidebar. The main content area displays the chemical structure of (R)-1-(4-(3-fluoro-4-(7-methoxyquinolin-4-yloxy)phenylcarbamoyl)-5-methyl-3-oxo-2-phenyl-1H-pyrazol-1-yl)propan-2-yl 2-(methylamino)acetate acetate, labeled as Example 48. The chemical structure is shown in a green box, and the text above it includes the name and the label [0497].

Weitere Möglichkeiten im „PatentPak Viewer“

The screenshot shows the CAS PatentPak Viewer interface. On the left, a sidebar lists 'Key Substances in Patent' with the CAS RN 1245931-31-0 highlighted in a red box. An arrow points from this box to the main content area. The main area displays the CAS Registry Number 1245931-31-0 at the top, followed by the chemical structure of Glycine, N-methyl-, (1R)-2-[4-[[[3-fluoro-4-[(7-methoxy-4-quinolinyl)oxy]phenyl]amino]carbamoyl]phenyl]-1H-pyrazol-1-yl]-1-methylethyl ester, acetate (1:2). The molecular formula is C₃₃H₃₂FN₅O₆·2C₂H₄O₂. Below this, a table shows 'Key Physical Properties' with 'Molecular Weight' listed as 733.74. At the bottom, there are expandable sections for 'Other Names and Identifiers', 'Predicted Properties', 'Bioactivity Indicators', and 'Target Indicators', with the latter three highlighted in a green box.

Klickt man auf die CAS-Registry-Nummer einer Substanz (hier **1245931-31-0**), öffnet sich in einem neuen Fenster der detaillierte Eintrag dieser chemischen Verbindung in SciFinder.

Hier findet man neben einigen **Eigenschaften** auch Links zu **Reaktionen** dieser Substanz und zu weiteren **Publikationen** (Referenzen) über sie.

Klickt man dagegen auf den **Namen der Substanz**, erscheint dieses Auswahlpanel, von dem aus man nicht nur zum **Substanzeintrag** (s. auch Pkt. 11.9), zu den **Reaktionen** und **Textstellen** der Verbindung kommt, sondern auch **Synthesevorschriften** findet oder einen **Retrosyntheseplan** erstellen kann (s. auch Pkt. 14).

The screenshot shows the detailed entry for CAS RN 1245931-31-0. The left sidebar lists 'Key Substances in Patent' with the CAS RN 1245931-31-0 highlighted in a red box. The main content area displays the CAS Name: Glycine, N-methyl-, (1R)-2-[4-[[[3-fluoro-4-[(7-methoxy-4-quinolinyl)oxy]phenyl]amino]carbamoyl]phenyl]-1H-pyrazol-1-yl]-1-methylethyl ester, acetate (1:2). Below this, a list of actions is shown: 'Get Substance Details' (yellow box), 'Get Bioactivity Data', 'Get Reactions (3)' (blue box), 'Synthesize (3)' (orange box), 'Start Retrosynthetic Analysis' (green box), 'Get References (2)' (purple box), and 'Get Suppliers (0)'. To the right, the chemical structure is displayed, with a zoomed-in view of the carboxylic acid group (OH and O) highlighted in a red box. The interface also includes a 'PAGE' indicator (63 / 101), 'ZOOM' controls, and 'DOWNLOAD' options (PDF, PDF+).

16.8. Welche Informationen liefert das Deckblatt eines Patentes?

<p>⑮ BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND</p>  <p>DEUTSCHES PATENT- UND MARKENAMT</p>	<p>⑫ Offenlegungsschrift ⑩ DE 199 57 342 A 1</p>	<p>⑤① Int. Cl.⁷: A 61 K 38/19 A 61 K 31/4025 A 61 P 29/00 A 61 P 5/48</p>	<p>DE 199 57 342 A 1</p>
<p>⑲ Aktenzeichen: 199 57 342.5 ⑳ Anmeldetag: 29. 11. 1999 ㉑ Offenlegungstag: 31. 5. 2001</p>			
<p>⑲ Anmelder: Grünenthal GmbH, 52078 Aachen, DE</p>	<p>⑲ Erfinder: Frosch, Stefanie, Dipl.-Biol. Dr., 52078 Aachen, DE; Germann, Tieno, Dr., 52134 Herzogenrath, DE</p>		
<p>⑤⑥ Für die Beurteilung der Patentfähigkeit in Betracht zu ziehende Druckschriften:</p> <p>WO 97 41 844 A1 WO 40 269 A2 WO 10 552 A2</p> <p>GALLILY,R.,et.al.: Mycoplasma fermentans - Induced inflammatory response of astrocytes: Selective modulation by aminoguanidine, thalidomide , pentoxifylline and IL-10. Inflammation,1996, 23/6, S.495-505; PISCITELLI,S.C.: Use of immunomodulation for the treatment of HIV infection. ASHP Annua l Meeting, 1998,Vol.55,June,S.35;</p>			
<p>Die folgenden Angaben sind den vom Anmelder eingereichten Unterlagen entnommen</p>			
<p>⑤④ Verfahren zur Behandlung und/oder Prophylaxe von IL-12-bedingten Erkrankungen</p>			
<p>⑤① Es wird eine Kombinationstherapie zur Behandlung von Erkrankungen, die durch die Bildung des entzündungsfördernden Zytokins IL-12 hervorgerufen werden, beschrieben, wobei gleichzeitig eine Thalidomidverbindung und ein antiinflammatorisches Zytokon appliziert werden.</p>			

Nummern zur Identifikation bibliografischer Daten

- (51) Internationale Patentklassifikation IPC
- (11) Nummer des Patents
- (43) Datum der Veröffentlichung durch Druck (Ungeprüftes Patentdokument)
- (45) Datum der Veröffentlichung durch Druck (Geprüftes Patentdokument)
- (21) Nummer der Anmeldung
- (22) Anmeldedatum
- (54) Bezeichnung der Erfindung (Titel)
- (71) Anmeldername(n) oder
- (73) Inhabername(n)
- (72) Erfindername(n), falls bekannt
- (74) Name(n) des / der Patentanwälte oder Vertreter
- (56) Entgegenhaltungen
- (57) Zusammenfassung oder Anspruch: Bezeichnung der Erfindung, Kurzfassung des technischen Inhalts der Anmeldung (Problem und dessen Lösung, hauptsächliche Verwendungsmöglichkeit), häufig auch ausgewählte Zeichnung bzw. chemische Strukturformel, die die Erfindung am deutlichsten kennzeichnet.

17. "CAS Analytical Methods"

Hinweis (gilt nicht für die Uni Jena!): Falls Sie nicht auf „CAS Analytical Methods“ zugreifen können, dann fragen Sie bitte in der örtlichen Bibliothek nach, ob sie in Ihrer Einrichtung lizenziert sind. Dieser Teil gehört nicht automatisch zu SciFinder.

„CAS Analytical Methods“ bietet Schritt-für Schritt-Anleitungen/Vorschriften zu analytischen Verfahren, u.a. in Bereichen wie der Pharmakologie, Lebensmittelanalyse, Wasseranalyse, Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC) und Isolierung von Naturstoffen.

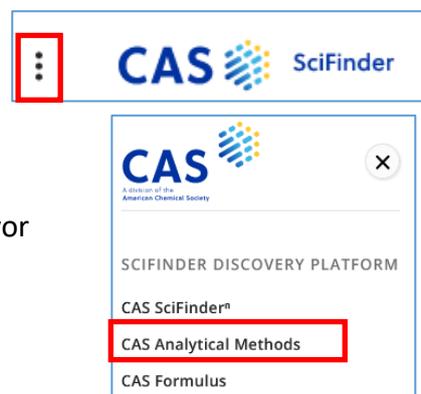
Durch den direkten Zugriff auf die Prozessdetails spart man viel Zeit, da nicht erst die Originalquelle beschafft werden muss.

Bis zu drei Verfahren lassen sich tabellarisch miteinander vergleichen und die Übersicht als PDF- oder XLS-Datei exportieren und herunterladen. Experimentelle Details werden übersichtlich in Tabellenform dargestellt. Dabei werden u.a. die verwendeten Materialien/Ausgangsstoffe, die nötigen Laborgeräte/-mittel sowie die Messbedingungen erläutert.

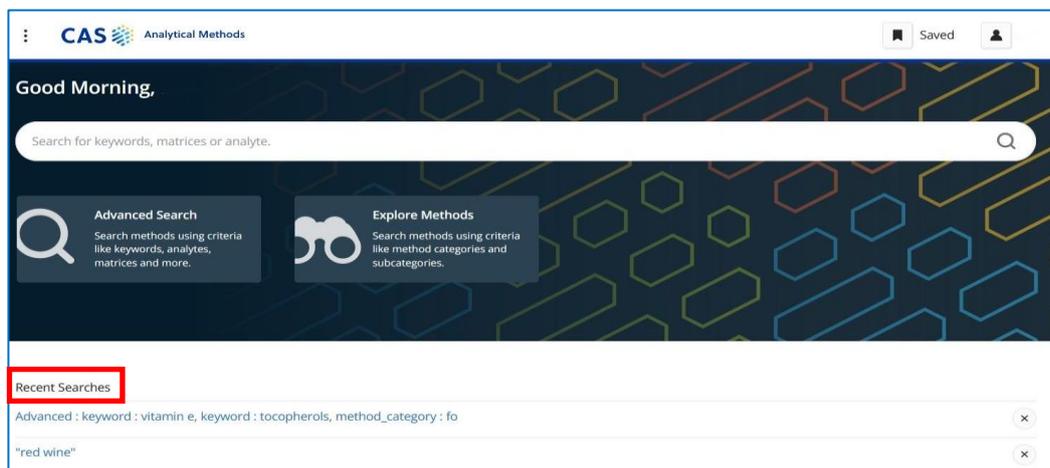
17.1. Wie komme ich zu den „CAS Analytical Methods“?

- Die bekannten Login-Daten für SciFinder erlauben auch den Zugriff auf „CAS Analytical Methods“.

- Der Zugang erfolgt entweder direkt über <https://methods.cas.org> oder - wenn man bereits in SciFinder eingeloggt ist - einfach mit Klick auf die drei Punkte vor dem CAS-Logo und Auswahl von „CAS Analytical Methods“.



- Wurden bereits Suchen in „CAS Analytical Methods“ durchgeführt, dann werden diese auf der Startseite bei „Recent Searches“ angezeigt.



17.2. Wie suche ich in "CAS Analytical Methods"?

- Die Suche ist nur über Text, nicht per Struktur möglich. In das allgemeine Suchfeld auf der Startseite können Substanzen mit Namen oder CAS RN und andere Suchbegriffe eingegeben werden.
- Alle Informationen der Anleitungen inklusive der Auflistung des Equipments, den Messbedingungen, der Vorgehensweise und den Validierungsinformationen werden durchsucht und können als Suchbegriffe gewählt werden.
- Mehrere Begriffe im Suchfeld werden mit einem AND verknüpft. Es erscheinen also nur Treffer, die alle Suchbegriffe enthalten in der Ergebnisliste.
- Die gezielte Verwendung der in 5.4 vorgestellten Operatoren für Scifinder ist aktuell (Stand Juni 2024) in CAS Analytical Methods nicht möglich.
- **Hilfe:** [Kurzanleitung von CAS zu „CAS Analytical Methods“](https://www.cas.org/sites/default/files/documents/AnalyticalMethodsQRG-2-17-23.pdf):
<https://www.cas.org/sites/default/files/documents/AnalyticalMethodsQRG-2-17-23.pdf>
- **Video:** <https://www.cas.org/searching-analytical-methods>

Beispielsuche nach: „red wine“, **Method Category:** Food analysis, **Technique:** HPLC

The screenshot shows the CAS Analytical Methods search interface. The search term "red wine" is entered in the search bar. The results page displays 468 results, sorted by Relevance. The left sidebar shows filter options for Analyte, Matrix, Method Category, and Technique. The main content area shows two search results. The first result is "Analysis of Delphinidin chloride in Red wine, Cabernet Sauvignon by Hydrolysis" by Nyman, N. Annika, Kumpulainen, Jorma T. The second result is "Analysis of Caffeic acid in Red wine by Solid phase extraction" by Gomes, S. A. S. S.; Nogueira, J. M. F.; Rebelo, M. J. F.

Filter By

- Analyte**
 - Gallic acid (88)
 - Catechin (80)
 - Resveratrol (77)
 - Epicatechin (73)
 - Quercetin (72)
 - [View All](#)
- Matrix**
 - Red wine (340)
 - White wine (104)
 - Wine (45)
 - Vitis vinifera (30)
 - Rose wine (23)
 - [View All](#)
- Method Category**
 - Food Analysis (468)
 - Toxin Assay (64)
 - Natural Product Isolation Analysis (21)
 - Suboptimal Analysis (10)
 - Herbicide Analysis (8)
 - [View All](#)
- Technique**
 - Spectrophotometry (617)
 - HPLC (468)
 - Solid phase extraction (400)

Results for "red wine"

468 Results Sort: Relevance Group: By Method

1

Analysis of Delphinidin chloride in Red wine, Cabernet Sauvignon by Hydrolysis JOURNAL

By: Nyman, N. Annika; Kumpulainen, Jorma T.
Determination of anthocyanidins in berries and red wine by HPLC
Journal of Agricultural and Food Chemistry (2001), 49 (9), 4183-4187. American Chemical Society

Analyte Petunidin; Pelargonidin chloride; Malvidin; Peonidin; Cyanidin chloride; Delphinidin chloride
Matrix Red wine, Cabernet Sauvignon
Other Materials Reagent: Methanol; Hydrochloric acid
Material: C-18 Inertsil ODS-3 (4.0 × 150 mm, particle size = 3 μm) column; C-18 guard column; 0.2 μm PTFE filter
[View All](#)

Method Category Food Analysis
Technique Hydrolysis; Liquid chromatography spectrometric detectors; HPLC
Equipment Used HPLC; Diode array detector

[View Abstract](#) [Full Text](#) [View in CAS SciFinder](#)

2

Analysis of Caffeic acid in Red wine by Solid phase extraction JOURNAL

By: Gomes, S. A. S. S.; Nogueira, J. M. F.; Rebelo, M. J. F.
An amperometric biosensor for polyphenolic compounds in red wine
Biosensors & Bioelectronics (2004), 20 (6), 1211-1216. Elsevier B.V.

Analyte Resveratrol; Catechin; Caffeic acid; Gallic acid; Quercetin; Malvidin; Rutin; Polyphenols (nonpolymeric)
Matrix Red wine
Other Materials Reagent: Sulfuric acid; Acetic acid; Ethanol; Hydrochloric acid; Acetate ion; Methanol; Ethyl acetate
Material: Solid phase extraction (SPE) cartridge (SDB, 3 mL, 250 mg); Zorbax Eclipse (Agilent Technologies) column (XDB C18: 150 mm × 4.6 mm, 5 μm particle size); Polysulfone membranes (0.45 μm); Column
[View All](#)

- Man kann die Begriffe als Phrase suchen, dann werden sie in Anführungszeichen gesetzt, wie im obigen Beispiel.
- Auf der linken Seite hat man verschiedene Auswahlmöglichkeiten, um die Suche weiter einzugrenzen (z.B. **Analyte**, **Matrix**, **Method Category**, **Technique**, **Year**).

- Die **Detailanzeige** zu einem Eintrag sieht so aus:

Analysis of Caffeic acid in **Red wine** by Solid phase extraction

CAS MN: 1-124-CAS-10426

Method Category: Food Analysis
Technique: Liquid chromatography spectrometric detectors; HPLC; Solid phase extraction

Materials	Role	Image	CAS RN
Resveratrol	analyte	View Structure	501-36-0
Catechin	analyte	View Structure	154-23-4
Caffeic acid	analyte	View Structure	331-39-5
Gallic acid	analyte	View Structure	149-91-7
Quercetin	analyte	View Structure	117-39-5
Malvidin	analyte	View Structure	643-84-5
Rutin	analyte	View Structure	153-18-4
Polyphenols (nonpolymeric)	analyte		
Red wine	matrix		
Solid phase extraction (SPE) cartridge (SDB, 3 mL, 250 mg)	material		
Zorbax Eclipse (Agilent Technologies) column (XDB C18; 150 mm x 4.6 mm, 5 µm particle size)	material		
Polyethersulphon membranes (0.45 µm)	material		
Column (XDB C18; 150 mm x 4.6 mm, 5 µm particle size)	material		
Sulfuric acid	reagent	View Structure	7664-93-9
Acetic acid	reagent	View Structure	64-19-7
Ethanol	reagent	View Structure	64-17-5
Hydrochloric acid	reagent	View Structure	7647-01-0
Acetate ion	reagent	View Structure	71-50-1
Methanol	reagent	View Structure	67-56-1
Ethyl acetate	reagent	View Structure	141-78-6

Source

An amperometric biosensor for polyphenolic compounds in **red wine**

Gomes, S. A. S. S.; Nogueira, J. M. F.; Rebelo, M. J. F.
Biosensors & Bioelectronics (2004), 20 (6), 1211- 1216. Elsevier B.V.
CODEN : BBIOE4 | ISSN : 09565663 | DOI : 10.1016/j.bios.2004.05.013

[View Abstract](#) | [Full Text](#) | [View in CAS SciFinder](#)

Equipment Used

Vacuum manifold, Supelco
HPLC system, 1100 series, Agilent
Quaternary pump, Agilent Technologies
Diode-array detector, Agilent Technologies

Conditions

Instrument
column, column (XDB C18; 150 mm x 4.6 mm, 5 µm particle size); mobile phase, 1% (v/v) acetic acid in water (solvent A) and 1% (v/v) acetic acid in methanol (solvent B); flow rate, 1.0 mL/min; temperature, 25 °C; injection volume, 10 µL; detection wavelength, 280, 360 and 520 nm
detection wavelength, 280, 360 and 520 nm

Instructions

Reagent Preparation

1. Prepare acetate buffer solutions with sodium acetate and acetic acid.
2. Prepare the substrate solutions daily.

Solid phase extraction (SPE)

1. Use a vacuum manifold (Supelco) and cartridges from Envi Chrom P (Supelco; SDB, 3 mL, 250 mg) for solid phase extraction (SPE) assays.
2. Condition each cartridge with 3 mL of methanol and 3 mL of diluted HCl (pH 2.5) and slowly aspirate (-0.2 bar).
3. Load with 3 mL of the **red wine** sample (pH 2.5; -0.4 bar), wash the column four times with 1 mL of sulphuric acid 20 mM, followed by vacuum drying for 30 min.
4. Perform elution with 3 mL of ethyl acetate and evaporate to dryness under a gentle stream of nitrogen.
5. Redissolve the dry extracts in 1 mL of methanol or 60 µL acetate buffer (pH 3.5) having 12% ethanol.
6. Stir in a vortex and use for HPLC or the biosensor assays, respectively.

HPLC analysis

1. Perform the analysis on a benchtop Agilent 1100 series equipped with a quaternary pump and a diode-array detector (Agilent Technologies).
2. Use a Zorbax Eclipse (Agilent Technologies) column (XDB C18; 150 mm x 4.6 mm, 5 µm particle size).
3. Use a mobile phase consisting of 1% (v/v) acetic acid in water (solvent A) and 1% (v/v) acetic acid in methanol (solvent B).
4. Apply a gradient as: 0-25 min: 10-22% B, 25-45 min: 22-50% B, 45-55 min: 50-95% B, 55-60 min: 95% B, isocratic.

17.3. Wie vergleicht man Methoden miteinander?

- Bis zu drei Verfahren lassen sich tabellarisch miteinander vergleichen.
- Dazu wählt man bis zu drei Methoden aus, indem man auf den „**Add to Compare**“-Button klickt und den Vergleich dann mit einem Button oben rechts auf der Seite aufruft.



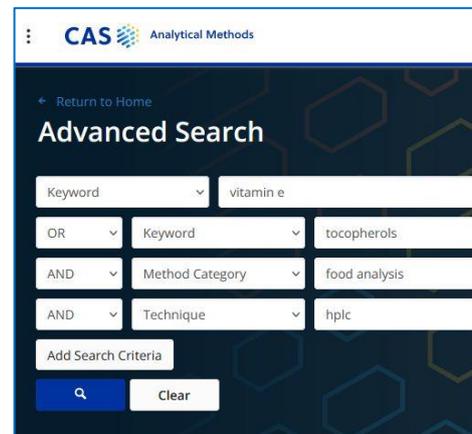
Compare (3/3)

- Man erhält eine Tabelle mit den ausgewählten Methoden angezeigt, die sich auch als PDF- oder XLS-Datei exportieren und herunterladen lässt.

Comparing your 3 selected Methods			
	Method 1 ×	Method 2 ×	Method 3 ×
	Analysis of Caffeic acid in Red wine by Solid phase extraction	Analysis of Gallic acid in Red wine by HPLC	Analysis of Resveratrol in Red wine by HPLC
CAS Method Number	1-124-CAS-10426	1-124-CAS-502241	1-124-CAS-344190
Method Category	Food Analysis	Food Analysis	Food Analysis
Technique	Liquid chromatography spectrometric detectors; HPLC; Solid phase extraction	Liquid chromatography diode array detectors; HPLC	Liquid chromatography diode array detectors; HPLC
Analyte	Resveratrol; Catechin; Caffeic acid; Gallic acid; Quercetin; Malvidin; Rutin; Polyphenols (nonpolymeric)	Ferulic acid; Naringin; Syringic acid; Epicatechin; Naringenin; Quercetin; Gallic acid; Caffeic acid; Malvidin; Sulphosides View All	Resveratrol
Matrix	Red wine	Red wine	Red wine
Other Materials	Sulfuric acid; Acetic acid; Ethanol; Hydrochloric acid; Acetate ion; Methanol; Ethyl acetate; Solid phase extraction (SPE) View All	Zorbax Eclipse XDB-C18 (150 × 4.6 mm, i.d., 5 µm)	Teflon filter (0.45 µm); Zorbax Eclipse-C18 column (15 cm × 4.6 mm ID, 5 µm); Guard column Supelco Discovery HS C18 (2 cm × 4.6 mm ID, 5 µm) View All
Equipment Used	Vacuum manifold, Supelco; HPLC system, 1100 series, Agilent; Quaternary pump, Agilent Technologies; Diode-array detector View All	High performance liquid chromatographic (HPLC) system, 1200, Agilent Technologies, Palo Alto, CA, USA; Ultra violet-diode array View All	HPLC system, Elite LaChrom, Merck, Darmstadt, Germany; Diode array detector, L-2455, Merck, Darmstadt, Germany View All
Conditions	Instrument: column, column (XDB C18; 150 mm × 4.6 mm, 5 µm particle size); mobile phase: 1% NaOAc/acetic acid in water (solvent) View All	-	Instrument: column: Zorbax Eclipse-C18 column (15 cm × 4.6 mm ID, 5 µm) equipped with a guard column Supelco View All
Preparation	Reagent Preparation 1. Prepare acetate buffer solutions with sodium acetate and acetic acid. View All	Preparation of wine sample 1. Harvest grapes at the stage of full maturity and immediately process in View All	Preparation of red wine sample 1. Obtain red wine samples. 2. Use the wines immediately after View All
Method	Solid phase extraction (SPE) 1. Use a vacuum manifold (Supelco) and cartridges from Elite Chrom B View All	High performance liquid chromatography - diode array detection 1. Perform the analysis of phenolic View All	High performance liquid chromatography (HPLC) with diode array detection (DAD) method View All
Linearity Range	1.0 × 10 ⁻⁶ - 1.0 × 10 ⁻⁴ M	-	0.5 - 10 mg/L
Limit of Detection	1.0 × 10 ⁻⁶ M	-	3.73 µg/L
Concentration	(2.22 ± 0.11) × 10 ⁻⁵ M, catechin, (2.90 ± 0.11) × 10 ⁻⁵ M, caffeic acid	5.77% vs. 5.21% (Wine with anis vs. Control), Gallic acid, 1.04% (Wine with anis), Syringic acid, 0.70% (Wine with anis), Epicatechin	0.877 ± 0.266 mg/L

17.4. Erweiterte Suche in „CAS Analytical Methods“

- Bei der erweiterten Suche kann man nach mehreren Aspekten gleichzeitig suchen.
- Es können z. B. verschiedene Stichwörter mit **OR** verknüpft werden und die Suche dann mit **AND** auf eine bestimmte Kategorie (im Beispiel „food analysis“) und eine bestimmte Technik (hier **HPLC**) eingegrenzt werden.



- Das Ergebnis dieser Suche sieht so aus:

Search for keywords, matrices or analyte.

Return to Advanced Search

Results for Custom query

949 Results Sort: Relevance Group: By Method

Filter By

- Analyte**
 - (+)-α-Tocopherol (533)
 - δ-Tocopherol (363)
 - β-Tocopherol (329)
 - (+)-γ-Tocopherol (286)
 - DL-γ-Tocopherol (189)
 - [View All](#)
- Matrix**
 - Oilseed (97)
 - Seed (94)
 - Fruits (41)
 - Olive oil (39)
 - Oryza sativa (36)
 - [View All](#)
- Method Category**
- Technique**
- Year**
 - 2000 to 2023
 - No Min to No Max

1

Analysis of (+)-α-Tocopherol in Sea buckthorn glyceridic oil by Solvent extraction Add to Compare

By: Aksoz, Elif; Korkut, Oguzhan; Aksit, Dilek; Gokbulut, Cengiz
Vitamin E (α-, β + γ- and δ-tocopherol) levels in plant oils
 Flavour and Fragrance Journal (2020), 35 (5), 504-510. John Wiley & Sons Ltd.

Analyte (+)-α-Tocopherol; β-Tocopherol; δ-Tocopherol; (+)-γ-Tocopherol; **Tocopherols**
Matrix Apricot kernel oil; Sunflower oil; Safflower oil; Corn oil; Castor oil; Hemp oil; Fats and Glyceridic oils, pumpkin seed; Hazelnut oil; Sea buckthorn glyceridic oil
Other Materials Material: Nucleosil C18 analytic column (Zorbax Rx, 3 μ, 150 × 4.6 mm)

Method Category **Food Analysis**
Technique Fluorescence spectroscopy; **HPLC**; Solvent extraction
Equipment Used HPLC system; Fluorescence detector

2

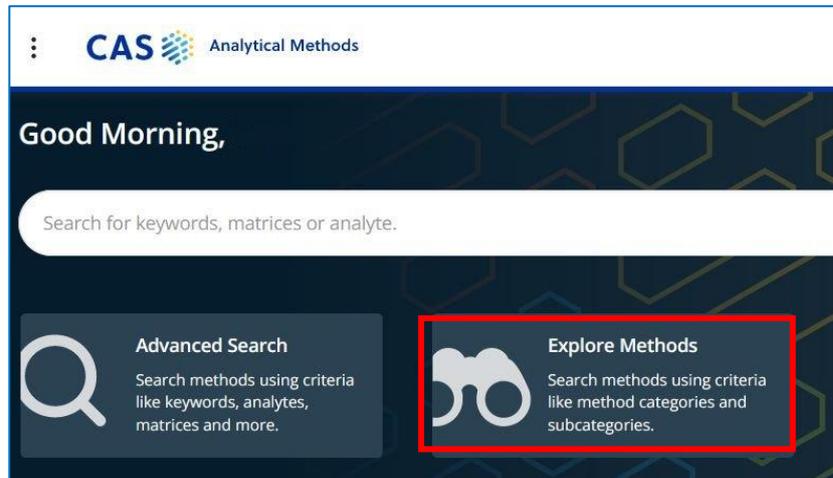
Analysis of β-Tocopherol in Oryza sativa by Soxhlet extractor JOURNAL

By: Karladee, Dumnern; Boonsit, Panita; Suriyong, Sangtiwa; Sringarm, Korawan
 Antioxidant capacities of **vitamin E (tocopherols)** in purple rice (*Oryza sativa* L. indica), perilla (*Perilla frutescens* L.) and sesame (*Sesamum indicum*)
 Agricultural Technology (2013), 9 (1), 177-191. Association of Agricultural Technology in Southeast Asia (AATSEA)

Analyte DL-γ-Tocopherol; β-Tocopherol; (+)-α-Tocopherol
Matrix Oryza sativa; Sesamum indicum; Perilla frutescens; Bran
Other Materials Reagent: Dichloromethane
 Material: Thimble; Injector; Pinnacle DB silica column (5 μm, 250 × 46 mm); Guard column (5 cm × 4.6 mm L-d. with 40 μm silica)

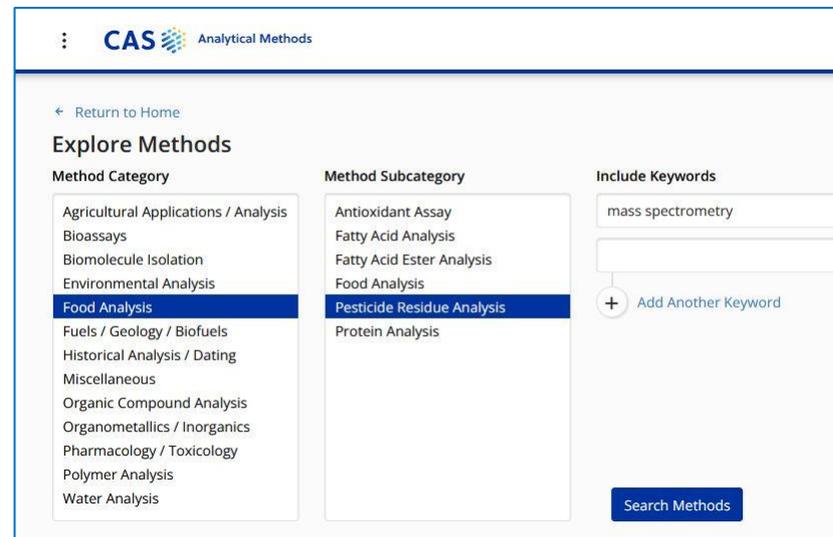
17.5. „Explore Methods“ in „CAS Analytical Methods“

- „Blättermodus“ für eine schnelle Durchsicht thematisch vorsortierter Analysemethoden



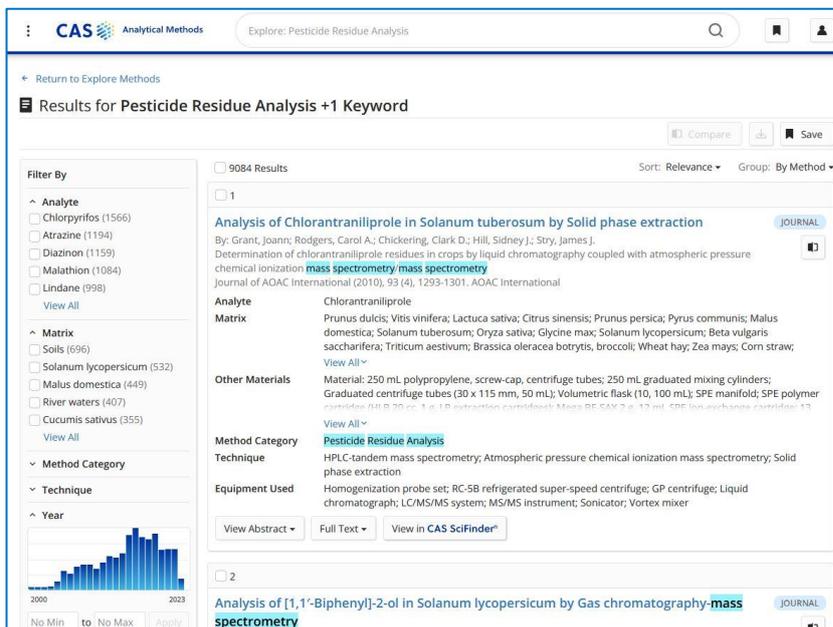
- Auswahl der Analysemethoden nach Fachgebietskategorien und -unterkategorien.

Diese können mit zusätzlichen Suchworten spezifiziert werden.



- Die gefundenen Treffer können wie bei einer gezielten Suche mittels der Filter eingegrenzt werden:

- Analyt
- Analyse-Matrix
- Methodenkategorie
- Technik
- Publikationsjahr



17.6. Navigation zwischen SciFinder und „CAS Analytical Methods“

Von einem Ergebnis in “CAS Analytical Methods“ kann man sowohl von der Übersichtsseite als auch der Detailseite zum Eintrag der Publikation in SciFinder springen.

Source

JOURNAL

An amperometric biosensor for polyphenolic compounds in red wine
Gomes, S. A. S. S.; Nogueira, J. M. F.; Rebelo, M. J. F.

Biosensors & Bioelectronics (2004), 20 (6), 1211 - 1216. Elsevier B.V.
CODEN : BBIOE4 | ISSN : 09565663 | DOI : 10.1016/j.bios.2004.05.013

View Abstract ▾ Full Text ▾ **View in CAS SciFinder**

Copyright © 2024 American Chemical Society. All Rights Reserved. | 82.3

Öffnet man den Detaileintrag einer Publikation in SciFinder, aus der eine detaillierte Analysevorschrift indexiert wurde, befindet sich der Abschnitt Analytical Methods unter den Concepts und Substanzen. Die CAS Methods Numbers sind Direktlinks zu den vollständigen Einträgen in CAS Analytical Methods.

<ul style="list-style-type: none"> ✓ CAS Concepts ✓ MEDLINE® Medical Subject Headings ✓ Substances ^ Analytical Methods 	<table border="1"> <thead> <tr> <th>Title</th> <th>CAS Method Number</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Analysis of Caffeic acid in Red wine by Solid phase extraction</td> <td>1-124-CAS-10426 ↗</td> </tr> <tr> <td>Analysis of Caffeic acid in Red wine by Solid phase extraction</td> <td>1-124-CAS-13394 ↗</td> </tr> </tbody> </table>	Title	CAS Method Number	Analysis of Caffeic acid in Red wine by Solid phase extraction	1-124-CAS-10426 ↗	Analysis of Caffeic acid in Red wine by Solid phase extraction	1-124-CAS-13394 ↗
Title	CAS Method Number						
Analysis of Caffeic acid in Red wine by Solid phase extraction	1-124-CAS-10426 ↗						
Analysis of Caffeic acid in Red wine by Solid phase extraction	1-124-CAS-13394 ↗						

Aus einer Referenzliste lassen sich in SciFinder leicht die Publikationen ermitteln, die einen solchen Eintrag beinhalten. Dafür wird im Filter *CAS Solutions* die Option *Analytical Methods* ausgewählt.

CAS SciFinder

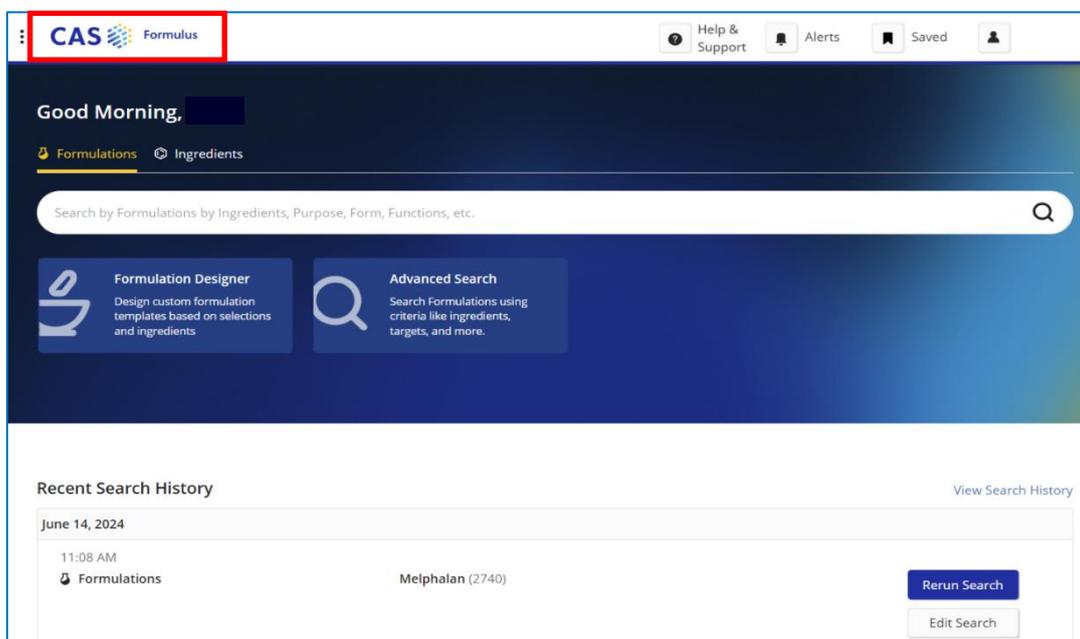
References ▾ "red wine"

- ✓ CA Section
 - ^ **CAS Solutions**
 - Analytical Methods (1,780)
 - Formulus (249)

their aroma was investigated. Both fr
wines and then analyzed by gas chro
compounds and both forms, resp. Ga
extracts and pure β-damascenone. T
the highest dilution factor in aroma e
confirmed the huge importance of th
solution as compared to red wine, w
notes of Et cinnamate and caproate a

18. „CAS Formulus“

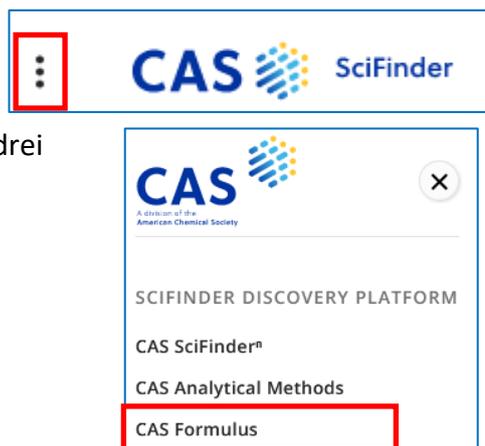
Hinweis (gilt nicht für die Uni Jena!): Falls Sie nicht auf „CAS Formulus“ zugreifen können, dann fragen Sie bitte in der örtlichen Bibliothek nach, ob es in Ihrer Einrichtung lizenziert ist. Dieser Teil ist nicht in jeder Organisation Teil der SciFinder-Lizenz.



18.1 Wie komme ich zu „CAS Formulus“?

Die bekannten Logindaten für SciFinder erlauben auch den Zugriff zu „CAS Formulus“.

Der Zugang erfolgt entweder direkt über <https://formulus.cas.org> oder - wenn man bereits in SciFinder eingeloggt ist - einfach mit Klick auf die drei Punkte vor dem CAS-Logo und Auswahl von „CAS Formulus“.

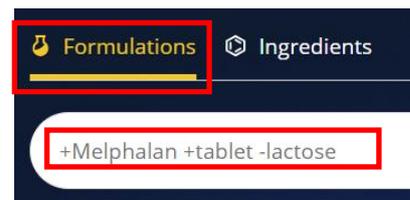


18.2 Was finde ich in „CAS Formulus“?

- Formulierungen sind im weitesten Sinne Mischungen von Substanzen, die einen spezifischen Zweck haben. Der Begriff ist vor allem in der Pharmazie verbreitet. Formulierungen gibt es aber in vielen Feldern wie der Kosmetik, Agro- oder Bauchemie aber auch für Reinigungsmittel, Beschichtungen und in vielen anderen.
- „**CAS Formulus**“ bietet Zugriff auf vollständige Inhaltsangaben zu Formulierungen aus Patenten, wissenschaftlichen Journalen und Beipackzetteln (Medikamente).
- Informationen zum Herstellungsprozess und Aktivitäts- / Dosisangaben werden zusätzlich aufgeführt.
- Die Suche innerhalb von **Formulus** hat den Vorteil, dass diese detaillierten Informationen direkt und ohne Beschaffung und Durchsicht der Originalquelle verfügbar sind.
- Die Auflistung aller (aktiven und inaktiven) Inhaltstoffe einer Formulierung erleichtert das Auffinden spezifischer Kombinationen, die über die Granularität von SciFinder hinaus geht.

18.3 Wie suche ich in “CAS Formulus” nach Formulierungen?

- In das allgemeine Suchfeld auf der Startseite können Substanzen mittels Namen oder CAS RN sowie andere Informationen zur gesuchten Formulierung eingetragen werden.
- Mehrere Begriffe im Suchfeld werden mit einem OR verknüpft. Es erscheinen also Treffer, die alle oder nur einzelne Suchbegriffe enthalten in der Ergebnisliste.
- Die gezielte Verwendung der in 5.4 vorgestellten Operatoren für SciFinder ist aktuell (Stand Juni 2024) in CAS Formulus nicht möglich.



Werden + oder - einem Suchbegriff vorangestellt, definiert dies ob ein Begriff zwingend erforderlich (+) ist oder ausgeschlossen (-) werden soll.

Formulations search for "+Melphalan +tablet -lactose"

Get Additional References

Compare (0/3) | Download | Save

Filter by

- Industry
 - Cleaning & Surfactant Products
 - Cosmetics & Personal Care
 - Food & Related
 - Inks, Paints, & Coatings
 - Pharmaceutical
 - Unclassified
- Purpose
 - Antitumor agents (896)
 - Pharmaceutical formulations (144)
 - Drug delivery systems (93)
 - Antiproliferative agents (88)
 - Anti-inflammatory agents (61)
- Physical Form
 - Tablets (112)
 - Capsules (106)
 - Solutions (57)
 - Powders (53)
 - Particles (51)

1,697 Results

Sort: Relevance | Group: By Family

1

Melphalan Tablet: Alkylating Agent

Location: Product insert
 Purpose: Alkylating agents
 Target: Carcinoma, Homo sapiens, Multiple myeloma
 Delivery Route: Oral drug delivery systems
 Physical Form: **tablet**

Add to Compare

Component	Function	Amount Reported
Melphalan	-	2 mg
Cellulose	-	-
Silica	-	-
Poly(vinylpyrrolidone)	-	-

Additional components reported
View Formulation Detail

2

Pharmaceutical Composition

PRODUCT INSERT
melphalan tablet
Distributor: Alvogon, Inc.
NDC: 47781-200-50

- Um eine komplexere Suche aufzusetzen und auf einzelne Felder einzuschränken, kann die „**Advanced Search**“ über die „**Formulus**“-Startseite aufgerufen werden.

Advanced Formulations Search ?

Searches the following content fields: Ingredient, Function, Purpose, Physical Form, Delivery Route, and Target.
At least two search terms are required.

Search For Operator Enter one term

Ingredient Required Melphalan
Ex: caffeine, sodium, 50-00-0

Search For Operator Enter one term

All Fields Required tablet
General search of all fields

Search For Operator Enter one term

Ingredient Excluded lactose
Ex: caffeine, sodium, 50-00-0

Advanced Search

Search Formulations using criteria like ingredients, targets, and more.

- Trefferliste dieser „**Advanced Search**“

CAS Formulus
Formulations +Ingredient:"Melphalan" +"Tablets" -Ingredient:"Lactose"
🔍

← Return to Home

Formulations search for "+Ingredient:"Melphalan" +"Tablets" -Ingredient:"Lactose""

Filter by

- ▼ Industry
- ▼ Purpose
- ▼ Physical Form
- ▼ State of Matter
- ▼ Delivery Route
- ▼ Information Included
- ▼ Document Type
- ▼ Organization
- ▼ Language
- ▲ Publication Year

1996 2023

No Min to No Max

1,697 Results Sort: Relevance Group: By Family

1

Pharmaceutical Composition

Location: Claim 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 16
Purpose: Pharmaceutical formulations
Physical Form: Tablets

Component	Function	Amount Reported
<small>Group: chlorambucil or melphalan</small>		
Melphalan	Antitumor agents [Ⓜ]	1-5 % by weight
Chlorambucil	Antitumor agents [Ⓜ]	1-5 % by weight
Cellulose	-	20-95 % by weight

Ⓜ Predicted value

[View Formulation Detail](#)

40,486 Similar Formulations - [View All](#)

PATENT

Pharmaceutical compositions containing chlorambucil or melphalan
US20040034099
Language: English

Pharmaceutical Composition

Einzeltreffer der „Advanced Search“



Save

Purpose	Target	Delivery Route	Physical Form	Source
Pharmaceutical formulations	-	-	Tablets	View

Formulation Ingredients

Component	Function	Amount Reported	Optionality
Melphalan	-	2.00 mg	Mandatory
Cellulose	diluent, Disintegrants	96.25 mg	Mandatory
Silica	glidant	0.25 mg	Mandatory
Poly(vinylpyrrolidone)	Disintegrants	1.00 mg	Mandatory
Magnesium stearate	Lubricants	0.50 mg	Mandatory
purified water ³	Suspending agents	22 mg	Mandatory
OpaDry white YS-118097 ²	Coating materials	3.0 mg	Mandatory

More Formulations like this...

Composition: Pharmaceutical Composition

Purpose: Drug delivery systems
Target: -
Delivery Route: -
Physical Form: -

Pharmaceutical Composition

Purpose: Pharmaceutical formulations
Target: -
Delivery Route: -
Physical Form: Tablets

Pharmaceutical Composition

Purpose: Pharmaceutical formulations
Target: -
Delivery Route: -
Physical Form: Tablets

Pharmaceutical Composition

Purpose: Pharmaceutical formulations
Target: -
Delivery Route: -
Physical Form: Tablets

Process

Stage 1 comprises the appropriate quantities of microcrystalline cellulose, colloidal silicon dioxide, and croscopovidone, are weighed, passed through an appropriately sized screen (typically 850 µm), and added into a stainless steel blending container. the appropriate quantity of Magnesium stearate is weighed. the required quantity of melphalan is weighed and passed through an appropriately sized screen (typically 850 µm) into the blending container. prior to lubrication of the blend, the Magnesium stearate is passed through an appropriately sized screen (typically 850 µm) and added to the blender container. the blender containing the above ingredients except Magnesium stearate is mixed for specific time.

Stage 2 comprises the screened Magnesium stearate is added to the blender and the powders are mixed for specific time. the lubricated powder blend is compressed using 6.5 mm standard concave round tooling using a suitable rotary tablet press. In-process testing for average weight, uniformity of weight, average hardness, friability, and disintegration time are performed and adjustments made to the tablet press if necessary.

Stage 3 comprises purified water is weighed into a suitable mixing vessel, such as a stainless steel tank.

Stage 4 comprises the stirrer is turned on and the OpaDry is slowly added to the mixing vessel. the coating suspension is stirred for at specific time to suitably disperse the OpaDry, based on visual examination. the mixing tank containing the coating suspension is attached to an appropriate spray pump.

condition order 1: the mixing tank containing the coating suspension is attached to an appropriate spray pump. the tablets are charged into a perforated coating pan and warmed until the exhaust air temperature reaches a point suitable to initiate the spraying, specific temperature. the suspension is sprayed onto the rolling tablet bed. A suitable exhaust air temperature is maintained at specific time. to ensure that the tablets do not become overly wet or hot during the coating process. the coating suspension is applied until the theoretical application weight of dry coating solids is reached within the range of 2.5-3% w/w, equivalent to the theoretical range of 2.5-3.0 mg per tablet. the typical target is a 3% theoretical weight gain (3 mg/tablet).

condition order 2: the completion of suspension application, the tablets are dried in a warm air stream providing an exhaust air temperature of specific temperature for approximately specific time.

Stage 1 conditions: 20 to 40 min

Stage 4 substances: Mandatory substances (OpaDry white YS-1180972)

Experimental Activity

Descriptor	Notes	Details
stability test	the stability of alkeran(melphalan)tablets, 2 mg.	the appearance of the tablet is as no significant change in appearance was observed for those tablets

Source Patent

Pharmaceutical compositions containing chlorambucil or melphalan

US20040034099
Language: English
Location: Example 1, 3

Patent PDF

View in CAS SciFinder®

18.4 Wie suche ich nach Inhaltsstoffen und welche Informationen sind vorhanden?



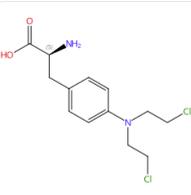
Eine Suche in der Kategorie „**Ingredients**“ ergibt eine Substanzliste als Ergebnis. Diese enthält alle Substanzen, die den Suchbegriff enthalten. Das Ergebnis der Suche nach Melphalan schließt also sowohl Melphalan als auch Melphalan Hydrochlorid ein.

Die Informationen auf der Detailseite einer Substanz entsprechen teilweise denen der Substanzinformationen in SciFinder. Jedoch sind nicht alle Rubriken gelistet, aber Formulus enthält auch zusätzliche Informationen:

- **Commonly Used As:** Bis zu 10 häufigste Rollen der Substanz in Formulierungen
- **Commonly Formulated With:** Bis zu 1000 Substanzen, die in den gleichen Formulierungen vorkommen.
- **Similar Ingredients with Regulatory Information:** Substanzen, die strukturell sehr ähnlich sind, zB Salze oder einfache Derivate, und regulatorische Informationen beinhalten.
- **Regulatory Information:** Zulassungsinformationen. Im Vergleich zu SciFinder mehr Listen mit detaillierteren Informationen enthalten, zB FDA Approved Drugs, ANMAT, EU Pesticides
- **Experimental Properties:** analog zu SciFinder
- **Other Names:** analog zu SciFinder

Ingredient Detail ↓ Save

CAS RN: 148-82-3



$C_{13}H_{18}Cl_2N_2O_2$

[View in CAS SciFinder®](#)

[Get Formulations](#) [Suppliers](#) [Add to Formulation Designer](#)

Melphalan

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	305.20	-
Melting Point (Experimental)	182-183 °C (decomp)	-

Commonly Used As: Antitumor agents; Alkylating agents; Antiproliferative agents; Cytotoxic agents; Topoisomerase inhibitors...

Similar Ingredients with Regulatory Information

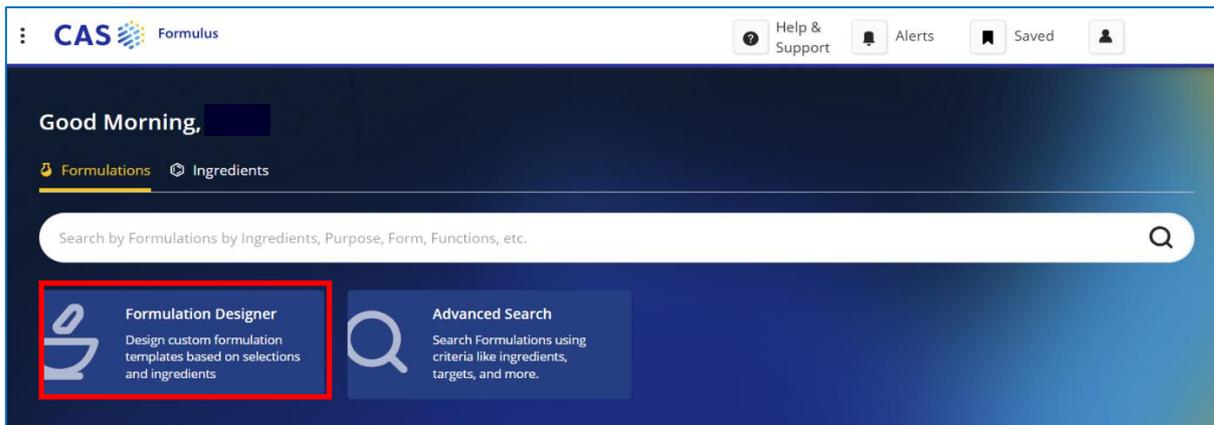
[3223-07-2](#) [Melphalan hydrochloride](#)

[View Details](#)

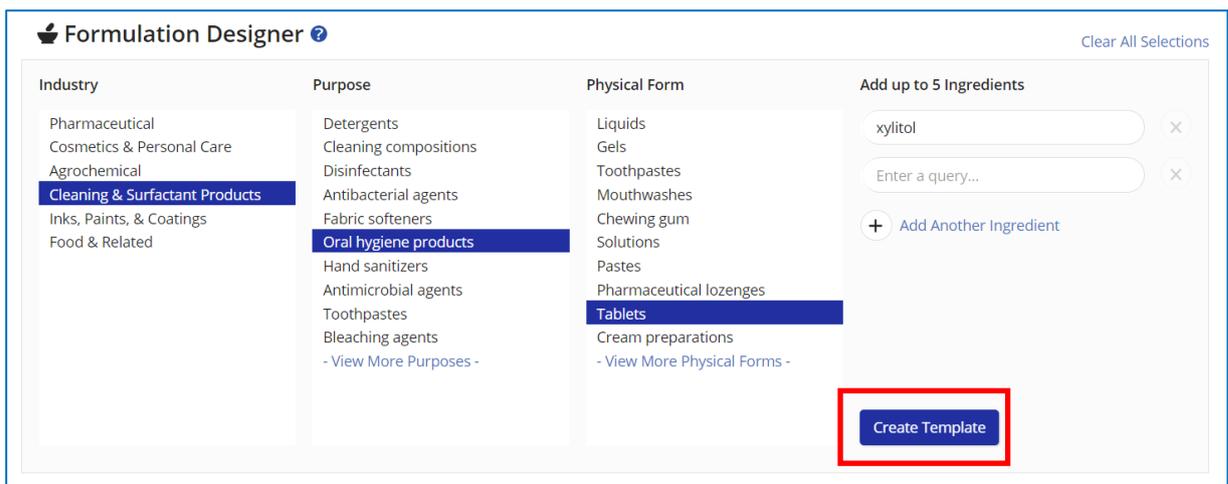
[Commonly Formulated With](#) | [Regulatory Information](#) | [Experimental Properties](#)

- ✓ [Commonly Used As](#)
- ✓ [Commonly Formulated With](#)
- ✓ [Similar Ingredients with Regulatory Information](#)
- ✓ [Regulatory Information](#)
- ✓ [Experimental Properties](#)
- ✓ [Other Names](#)

18.5 „Formulation Designer“



- Von der Startseite erreicht man den „**Formulation Designer**“, der anhand grober Angaben zu Zweck und primären Inhaltsstoffen eine Formulierung mit allen erforderlichen Komponenten vorschlägt.
- Der Vorschlag enthält Informationen zu notwendigen Bestandteilen anhand der Funktion und listet mehrere mögliche Substanzen mit ihren regulatorischen Informationen auf.
- Die Vorschläge werden durch CAS Formulus generiert und sind nicht zwingend bereits so veröffentlicht worden. Es ist jedoch möglich, dass sie bereits exakt so beschrieben wurden. Der Formulation Designer erhebt keinen Anspruch auf Neuheitswert.



Formulation Designer
Clear All Selections

Industry	Purpose	Physical Form	Active or Featured Ingredient
Cleaning & Surfactant Products	Oral hygiene products	Tablets	Xylitol

Edit Selections
Save

Your Template Unit Size mg Clear

Function	Ingredient	Regulatory	Top Alternatives	Amounts
Active or Featured Ingredient:	Xylitol	Cosing: Cosmetic Ingredient Inventory; Drug Master File List; EMA Excipients List; FDA Inactive Ingredients Database	-	Amount not available ✕
Sweetening agents	Sodium saccharin View More Alternatives	Cosing: Cosmetic Ingredient Inventory; EPA Pesticide Inactive Ingredients; FDA Inactive Ingredients Database	Glycyrrhizic acid; Erythritol; Aspartame; Chlorogenic acid; Acesulfame	Approximately 1% ✕
Pharmaceutical carriers	Sorbitol View More Alternatives	Cosing: Cosmetic Ingredient Inventory; Drug Master File List; EMA Excipients List; EPA Pesticide Inactive Ingredients; EPA Safer Chemical Ingredients; FDA GRAS (Part 182, Subpart A); FDA GRAS (Part 184); FDA Inactive Ingredients Database; FDA Orange Book; NMPA	Ethylene oxide-propylene oxide triblock copolymer; Water; Hyaluronic acid; Sodium alginate; Cellulose	Approximate Range: 24 - 27% ✕
Flavoring materials	Benzaldehyde View More Alternatives	Cosing: Cosmetic Ingredient Inventory; EPA Pesticide Inactive Ingredients; FDA GRAS (Part 182, Subpart A); FDA Inactive Ingredients Database	Anethole; Limonene; (±)-Menthol; 3-(3-Hydroxy-4-methoxyphenyl)-1-(2,4,6-trihydroxyphenyl)-1-propanone; 2,4-Dihydroxybenzoic acid vanillylamide	Approximate Range: 5 - 9% ✕
Formulation excipients	α-Cyclodextrin View More Alternatives	EMA Excipients List; EPA Pesticide Inactive Ingredients; FDA Inactive Ingredients Database	Sodium bicarbonate; Fluoride; γ-Cyclodextrin; Vitamins; Glycerol	Approximate Range: 9 - 29% ✕
Solvents	1,3-Butanediol View More Alternatives	Drug Master File List; EPA Pesticide Inactive Ingredients; EPA Safer Chemical Ingredients	1,5-Pentanediol; 1,3-Propanediol; 1,2-Pentanediol; (±)-Propylene glycol; Ethanol	Approximately 1% ✕
Preservatives	Benzyl alcohol View More Alternatives	Cosing: Cosmetic Ingredient Inventory; Drug Master File List; EMA Excipients List; EPA Pesticide Inactive Ingredients; EPA Safer Chemical Ingredients; FDA Inactive Ingredients Database; FDA Orange Book	Benzaldehyde; 1,3-Butanediol; Phenol; Sorbic acid; Phenoxyethanol	Amount not available ✕
Thickening agents	Calcium chloride View More Alternatives	ANMAT; Cosing: Cosmetic Ingredient Inventory; Drug Master File List; EPA Pesticide Inactive Ingredients; EPA Safer Chemical Ingredients; EU Active Substances in Pesticides; FDA GRAS (Part 184); FDA Inactive Ingredients Database; FDA Orange Book; NMPA	Xanthan gum; Cyclodextrin; Sorbitol; Maltitol; Polydextrose	Approximate Range: 4 - 8% ✕

18.6 Navigation zwischen SciFinder und „CAS Formulus“

- Von einem Ergebnis in **„CAS Formulus“** kann man sowohl von der Übersichtsseite als auch der Detailseite zum Eintrag der Publikation in **SciFinder** springen.

PATENT

Pharmaceutical compositions containing chlorambucil or melphalan

US20040034099

Language: English

Patent PDF View in CAS SciFinder[®]

- Öffnet man den Detaileintrag einer Publikation in SciFinder, aus der eine oder mehrere Formulierungen indexiert wurden, befindet sich der Abschnitt **„Formulations“** unter den Concepts und Substanzen. Der Link führt direkt zu den vollständigen Einträgen in **„CAS Formulus“**.

Pharmaceutical Composition

View CAS Formulus[®] Detail

Location: Example 2, 4
Purpose: Drugs

Component	Function	Amount Reported
Cellulose	diluent, disintegrant	29.00 mg
Silica	glidant	0.25 mg
(+)-Lactose	diluent	67.65 mg
Chlorambucil	-	2.10 mg

Additional Components Reported in Full Text

- Aus einer Referenzliste lassen sich in SciFinder leicht die Publikationen ermitteln, die einen solchen Eintrag beinhalten. Dafür wird im Filter **„CAS Solutions“** die Option **„Formulus“** ausgewählt.

References ▾ "red wine"

CA Section

^ CAS Solutions

Analytical Methods (1,780)

Formulus (249)

their aroma was investigated. Both fr
wines and then analyzed by gas chro
compounds and both forms, resp. Ga
extracts and pure β-damascenone. T
the highest dilution factor in aroma e
confirmed the huge importance of th
solution as compared to red wine, w
notes of Et cinnamate and caproate a



Vielen Dank an das gesamte CAS-Team,
insbesondere an Lena Blumenthal und Jan Baur,
für die Mitarbeit an dieser SciFinder-Anleitung!