



SciFinderⁿ-Anleitung

Stand: 28. April 2021

Ersteller: Universität Jena

Inhaltsverzeichnis

1.	Welche Informationen finde ich im SciFinder ⁿ ?	5
2.	Erste Schritte mit SciFinder ⁿ	6
2.1	Wie erfolgt die Registrierung für die Datenbank?	6
2.2	Wie melde ich mich bei SciFinder ⁿ für die Suche an?	7
2.3	Was mache ich, wenn ich Benutzernamen oder Passwort vergessen habe?	7
2.4	Wo finde ich Hilfen und Videotutorials zur Suche?	8
3.	Grundlagen der Recherchen im SciFinder ⁿ	12
3.1	Welche Suchmöglichkeiten habe ich?	12
3.2	Was ist wichtig zu wissen?	12
3.3	Automatismen bei der Wortsuche im SciFinder ⁿ	13
3.4	Recherchestrategien im SciFinder ⁿ	14
4.	Suche mit Suchmodus „All“	16
5.	Thematische Suchen	18
5.1	Einfache Textsuche	18
5.2	Gleichzeitige Suche von Text und chemischer Struktur	21
5.3	Phrasensuche und Maskierung	22
5.4	Suche mit logischen Operatoren	24
5.5	Wie finde ich Publikationen eines bestimmten Autors? Beispiel für die Erweiterte Textsuche (Advanced Search)	25
6.	Wie kann ich meine Treffermenge eingrenzen?	26
6.1	Wie schränke ich meine Suche zeitlich ein?	26
6.2	Wie grenze ich innerhalb der Ergebnisse über „Filter results“ ein?	27
7.	Wie kann ich mit den Treffern weiter verfahren? Combine, Speichern, Export, Zugang zum Volltext	32
7.1	Combine	32
7.2	Speichen und Export von Ergebnissen	34
7.3	Import von Ergebnissen aus SciFinder ⁿ in EndNote	35
7.4	Wie komme ich zum Volltext?	36
8.	Citation Map	37
9.	Automatische Recherchen nach gespeicherten Profilen (Alerts)	38

10.	History.....	39
11.	Suche nach Substanzen	40
11.1	Wie suche ich nach Substanzen im Suchmodus „All“?	40
11.2	Wie suche ich mit dem Namen bzw. der CAS-Registry-Nummer nach Substanzen?	42
11.3	Kann ich mit Summenformeln nach Substanzen suchen?	46
11.4	Wie suche ich nach Substanzen über die Struktur?	48
11.5	Hinweise für das Zeichnen von chemischen Strukturen	49
11.6	Wie sieht die Trefferliste bei der Substanzsuche aus?	51
11.7	Detailanzeige bei Substanzen.....	53
11.8	Wie kann ich große Treffermengen bei der Substanzsuche über die Struktur einschränken?	54
11.9	Suche nach Chemikalien-Lieferanten.....	55
12.	Suche nach Reaktionen	56
12.1	Wie beginne ich die Suche im Modus „Reactions“?	56
12.2	Welche Ansichten kann ich für die Trefferliste der Reaktionssuche einstellen?.....	57
12.3	Reaktionsdetails	59
12.4	Wie kann ich große Treffermengen bei der Reaktionssuche einschränken?	60
13.	Wie finde ich alle Synthesen einer Substanz?	61
13.1	Wie führe ich die Substanzsuche dazu durch?.....	61
13.2	Ausgabe von vollständigen Synthesevorschriften über „Reactions“	63
13.3	Ausgabe der Nachweise zu Synthesen über „References“	66
14.	Retrosyntheseplanung.....	68
14.1	Wie kann ich einen Retrosyntheseplan erstellen?.....	68
14.2	Retrosyntheseplan öffnen und auswerten	69
14.3	Kann ich alternative Schritte in die Synthese einbauen?.....	70
14.4	Optionen.....	70
15.	Wie kann ich mit BLAST Protein- bzw. Nukleotid-Sequenzen suchen?	71
15.1	Einfache Suche	71
15.2	Erweiterte Suche nach Biosequenzen.....	75
16.	Patente im SciFinder ⁿ und PatentPak.....	76
16.1	Wie finde ich allgemein Patente im SciFinder ⁿ ?	77
16.2	Wie finde ich ein spezielles Patent?	78

16.3	Wie finde ich generische/hypothetische chemische Substanzen in Patenten (Markush-Struktursuchen)	79
16.4	Welche Informationen zu einem Patent finde ich in der detaillierten Einzeltrefferansicht?	83
16.5	Wie erhalte ich mit PatentPak® Zugang zu den Patentvolltexten?	84
16.6	Patent Viewer	86
16.7	Welche Informationen liefert das Deckblatt eines Patentes?	88
17.	MethodsNow	89
17.1	Wie bekomme ich Zugang zu MethodsNow?	89
17.2	Was findet man in MethodsNow?	90
17.3	Wie vergleicht man Methoden miteinander?	93
17.4	Erweiterte Suche in MethodsNow	94

1. Welche Informationen finde ich im SciFinderⁿ?

SciFinderⁿ, produziert vom Chemical Abstracts Service (CAS), ist die weltweit größte Datenbank mit chemierelevanten Inhalten. Sie enthält Informationen zu

- 175 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)
- 68 Millionen Sequenzen
- 132 Millionen chemischen Reaktionen
- Abstracts von > 54 Millionen wissenschaftlicher Artikel
- Patente von 64 Patentorganisationen

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

Mit dem SciFinderⁿ hat man Zugang zu folgenden Teildatenbanken:

- **CAPLUS** Bibliografische Nachweise, inkl. Patente der Chemical Abstracts, ab 1907
- **MEDLINE** Biomedizinische Informationen, ab 1949
- **CASREACT** 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 1988

Eine genaue Übersicht über die aktuellen **Inhalte der einzelnen CAS-Datenbanken** findet man unter: <https://www.cas.org/about/cas-content> bzw. nach einem Klick auf den Datenbanknamen in obiger Liste.

Die CAS-Datenbanken enthalten Veröffentlichungen aus ca. 9.500 Zeitschriften. Davon werden ca. 1500 cover-to-cover ausgewertet. Die Artikel sind in mehr als 50 Sprachen publiziert. Weiterhin sind im Scifinderⁿ auch Nachweise anderer Medien, wie z.B. Bücher, Hochschulschriften, Reports, Konferenz-Proceedings, E-Preprints etc. enthalten.

Die für den Scifinderⁿ 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 [64 Patentämtern](#) weltweit.

Für viele dieser Patente erhält man mit [PatentPak](#)[®] (s. Pkt. 15) den sofortigen Zugriff auf die darin sonst schwer zu findenden chemischen Substanzen.

2. Erste Schritte mit SciFinderⁿ

2.1 Wie erfolgt die Registrierung für die Datenbank?

Vor der Suche in der SciFinderⁿ-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 (Link für Angehörige der Universität Würzburg):

<https://scifinder.cas.org/registration/index.html?corpKey=255EE274-86F3-F014-115B-BAD8FF678E13>



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
 - muss mindestens drei der vier folgenden Zeichenarten enthalten:
 - Buchstaben
 - Groß- und Kleinbuchstaben gemischt
 - Zahlen
 - nicht alphanumerische Zeichen
- z.B. Interpunktionszeichen, @, #, %, &, *)

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

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

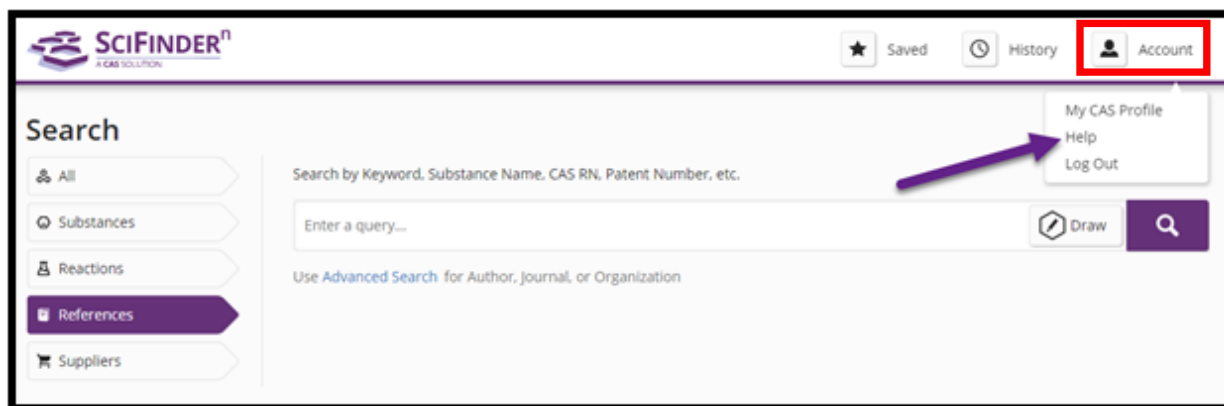
Die Anmeldung dort erfolgt mit dem bei der Registrierung erstellten Benutzernamen und Passwort. Wer bereits für SciFinder registriert ist, kann mit dem dort verwendeten Benutzernamen und dem zugehörigen Passwort ebenfalls mit SciFinderⁿ arbeiten.

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

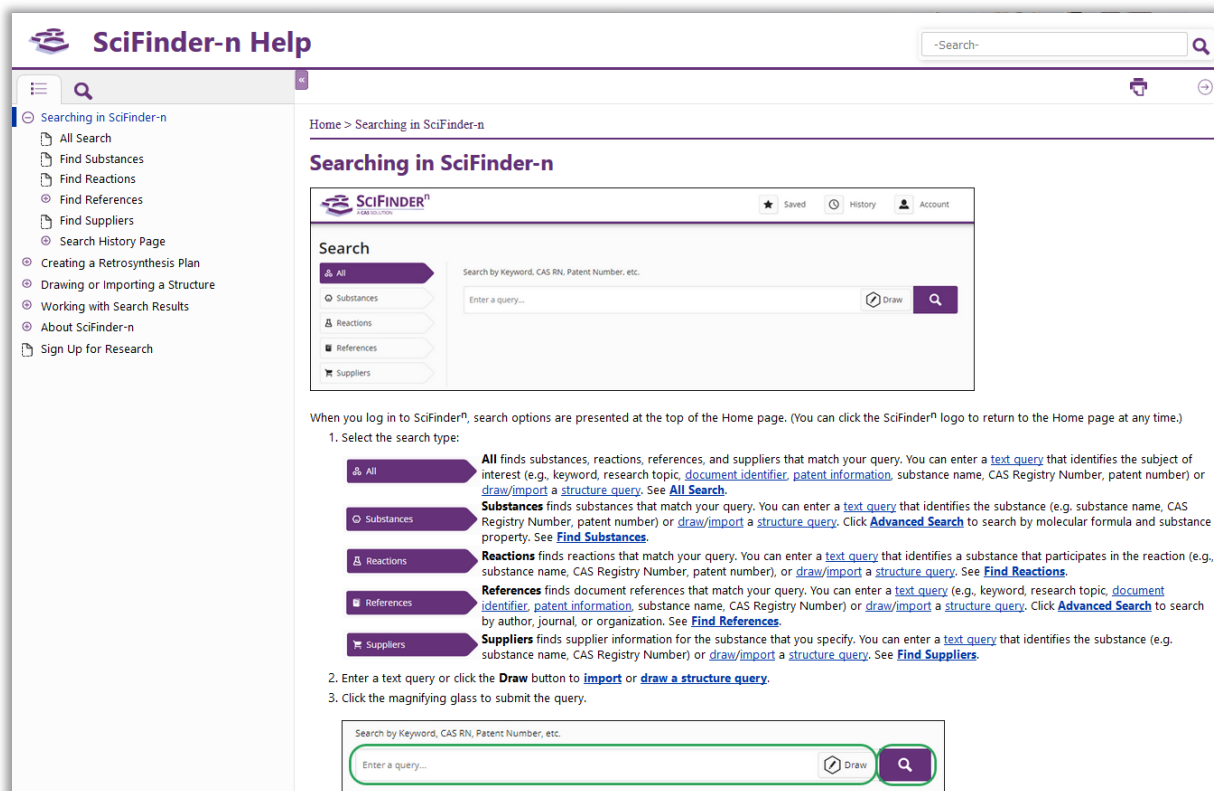
Wenn man seinen Benutzernamen oder sein Passwort vergessen hat, klickt man unterhalb des Log-In-Buttons „**Forgot Username or Password**“ an. Im dann erscheinenden Fenster wird der Nutzernamen **ODER** die Uni-E-Mail-Adresse eingetragen. Nach Beantwortung der **Sicherheitsfrage**, die man bei der Registrierung für den SciFinderⁿ 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 im SciFinderⁿ



Die SciFinderⁿ-Hilfeseiten erreichen Sie während der Recherche mit einem Klick auf den „Hilfe“-Button oben in der Menüzeile unter „Account“ oder direkt über <https://scifinder-n.cas.org/help>



2.4.2 SciFinderⁿ-Schulungsseite des Hochschulbibliotheksentrums HBZ

In den Video-Trainings dieser Seite finden Sie SciFinderⁿ-Grundlagen und "Best Practice"-Suchen zu verschiedenen Bereichen der Chemie und anverwandter Wissenschaften. Die Videos sind in englischer Sprache und dauern meist ca. 10-15 Minuten.

Zugang: <https://www.cas.org/hbz/schulungsseite>

- [Kurzübersicht \(Quick Reference Guide\) \(PDF\)](#)
- [Vorab-Online-hbz-SciFinder-User-Meeting März 2020](#)
- [Online-hbz-SciFinder-User-Meeting Juni/Juli 2020](#)
- [Kurzanleitung zu den Basis-Funktionen im SciFinderⁿ](#)
- [Das CAS Retrosynthese-Tool im SciFinderⁿ](#)
Beispiel: Synthesis of a Squaramide-compound
- [Die prediktive Retrosynthese im SciFindern zur Syntheseplanung für noch nicht beschriebene Substanzen](#)
Beispiel: Finding Cost Effective Synthese im SciFinderⁿ
- [Die kombinierte Suche nach Struktur und Text](#)
Beispiel: Gold Nanoparticles used as therapeutic agents against cancer
- [Die kombinierte Suche nach Struktur und Text - Einsatz von MethodsNow Analysis](#)
Beispiel: GC-MS multidimensionale Analyse von Wein oder Weintrauben auf Sesquiterpene und die Biotransformation zum gesuchten Produkt- optional mit allen Details zur Analytik
- [Die Intellektuelle Indexierung von CAS im SciFinderⁿ](#)
Beispiel: Studies on metal- and phosphorous-containing coordination compounds
- [Die Intellektuelle Indexierung von CAS im SciFinderⁿ – Polymere](#)
Beispiel: Searching bifunctional PEGs used to produce conjugates with biomaterials such as antibodies.
- [Die intellektuelle Indexierung von CAS im SciFinderⁿ – Schmetterlinge und giftige Pflanzeninhaltsstoffe](#)
Beispiel: Searching for Danaus Genus and how it can sequester toxic Carotinoids from Milkweed.
- [Besondere Fälle im SciFinderⁿ – die Suche nach Carbenen im Komplex und als kleines organisches Molekül](#)
Beispiel: Searching Carbenes im SciFinderⁿ
- [Suche nach Deuterium und Tritium Isotopen](#)
Beispiel: Isotopenisomer von Tetrabenazin als optimierter Wirkstoff gegen Chorea Huntington
- [Die richtigen Einstellungen für den „Available at my Institution“ Filter](#)

2.4.3 SciFinderⁿ-Webinars des Chemical Abstracts Service CAS

Bei der Teilnahme an interaktiven SciFinderⁿ-Schulungen (in englischer Sprache), die als Webinare durchgeführt werden, erlernt man die Feinheiten der Suche in dieser Datenbank. Viele Tricks und Tipps helfen bei einer effektiveren Suche.

Alle Webinare werden aufgezeichnet und sind kostenlos zugänglich. Sie dauern meist zwischen 30 und 60 Minuten.

Zugang: <https://www.cas.org/about/events/scifinder-webinars>

- Effektive Suche nach chemischen Substanzen über Struktur bzw. Namen im SciFinderⁿ → [Zum Webinar](#)
- Effiziente Reaktionssuche Searching mit SciFinderⁿ → [Zum Webinar](#)
- Zeitsparende Literatursuche mit SciFinderⁿ (Reference Searching) → [Zum Webinar](#)
- Wie mache ich das? Retrosynthesen für neue und für bekannte chemische Verbindungen → [Zum Webinar](#)
- Retrosynthesen mit SciFinderⁿ: Bringen Sie Ihre Forschung in Schwung! → [Zum Webinar](#)
- Tipps zur Suche nach Polymeren im SciFinderⁿ → [Zum Webinar](#)
- SciFinderⁿ – Nicht nur für die Chemie – Suche nach biologischen Informationen → [Zum Webinar](#)
- Patentsuche im SciFinderⁿ (Neuheitsrecherche, Stand der Technik, Konkurrenzanalyse u.a.) → [Zum Webinar](#)
- Suche nach Eigenschaften und Spektren im SciFinderⁿ → [Zum Webinar](#)
- Suche nach Autoren und Organisationen/Firmen/Institutionen → [Zum Webinar](#)
- Alles für die Analyse - Analytische Literatur mit SciFinderⁿ und MethodsNow[®] finden → [Zum Webinar](#)
- Fortschritte für Ihre agrochemische Forschung mit SciFinderⁿ → [View Webinar](#)
- Synthese neuer Wirkstoffe für die klinische und pharmazeutische Forschung mit SciFinderⁿ und Formulus[®] → [Zum Webinar](#)
- Metalle, Legierungen, Komplexe, Koordinationsverbindungen und Salze – Heben Sie die Schätze in der Literatur zur anorganischen Chemie! → [Zum Webinar](#)

2.4.4 An wen kann ich mich bei Fragen wenden?

- **Innerhalb der Uni Jena!** Bei allgemeinen Fragen zur Suche im SciFinderⁿ und bei Fragen zu Recherchen mit biologischen und pharmazeutischen Inhalten:

Dr. Ina Weiß

Wissenschaftliche Informationsstelle der Fakultät für Biowissenschaften der FSU
am Matthias-Schleiden-Institut für Genetik, Bioinformatik und Molekulare Botanik

Tel.: 03641/949020

Fax.: 03641/949022

Ina.Weiss@uni-jena.de

07743 Jena, Ernst-Abbe-Platz 2, 4. Etage, Raum 3402

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

Heike Göbel

Informationsvermittlungsstelle der Chemisch-Geowissenschaftlichen Fakultät der FSU
Jena

Tel.: (03641) 9 48020

Fax: (03641) 9 48002

Heike.Goebel@uni-jena.de

07743 Jena, Humboldtstr. 11, 1. Etage, Raum 101/102

- Bei allen Fragen zur Suche im SciFinderⁿ sowie bei Wünschen nach speziellen Vor-Ort-Trainingssessions

Dr. Karin Färber

Strategic Account 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

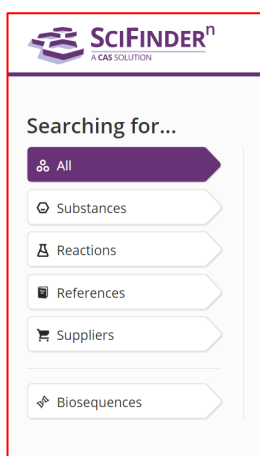
E-Mail: help@cas.org

3. Grundlagen der Recherchen im SciFinderⁿ

3.1 Welche Suchmöglichkeiten habe ich?

SciFinderⁿ 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



Zu Beginn der Suche wird der geeignete Suchtyp für das gewünschte Ergebnis ausgewählt.

3.2 Was ist wichtig zu wissen?

- Man kann gleichzeitig nach Substanzen oder Reaktionen und Referenzen suchen.
- Präposition braucht man bei der Suche nicht mehr zu verwenden, da man inzwischen auch 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.

3.3 Automatismen bei der Wortsuche im SciFinderⁿ

Synonyme	Es werden noch nicht alle Synonyme automatisch gesucht.
Alternative Wortformen	Freeze, freezes, Aber: freezing, frozen, froze werden noch nicht automatisch gefunden.
Irreguläre Pluralformen	Woman: women wird noch nicht automatisch gefunden. mice, mouse, mouses
CAS Standardabkürzungen	oxidation, oxidn preparation, prep
Amerikanische und britische Schreibweisen	synthesize, synthesise color, colour
Trunkierung	Wörter können nach einem Wortstamm mit einem Sternchen (*) versehen werden. - Es werden dann beliebig viele Buchstaben nach dem Wortstamm zugelassen. Außerdem ist ein Fragezeichen (?) als Maskierung für einen oder keinen Buchstaben möglich.

Die obige Tabelle ist noch nicht vollständig, da im SciFinderⁿ derzeit noch nicht alle Funktionalitäten zur automatischen Wortsuche integriert sind.

So sind z.B. noch nicht alle Synonyme, die im alten SciFinder gefunden werden im SciFinderⁿ enthalten.

Weitere Beispiele (Stand 27.2.2020):

Fungus, fungi . Aber fungal wird nicht automatisch gesucht.

Complex : complexes wird nicht automatisch gesucht.

Separation, separations. Aber separated wird nicht automatisch gesucht.

Child, children. Aber infant, baby wird nicht automatisch gesucht.

Nanocrystal, nanocrystals. Aber nanocrystalline, nanocrystallites wird nicht automatisch gesucht.

Synthesis, syntheses, Aber synthetic, synthesized, etc. wird nicht automatisch gesucht.

Mechanical, mechanically, mech. (standard CAS abbreviation), mechanics. Aber mechanism wird nicht automatisch gesucht.

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

3.4 Recherchestrategien im SciFinderⁿ

3.4.1 Generelles zur derzeitigen Suchstrategie

May 24, 2018

☐ 2:14 PM
 References: "natural products"with aconitum (9.148) Rerun Search

☐ 2:11 PM
 References: "natural products" and aconitum (9.148) Rerun Search

- Bei Phrasensuche („“) werden die Begriffe im Titel, in der Zusammenfassung, im kontrollierten Vokabular und den chemischen Namen gesucht.
Die Referenzquery "*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.
- Eine Suche mit WITH entspricht der Suche mit dem logischen Operator AND.
- 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.

3.4.2 Verwendung unterschiedlicher Präpositionen

- Durch die Verwendung verschiedener Präpositionen werden unterschiedliche Ergebnisse erzielt.
- Die Präpositionen werden mitgesucht und somit erklären sich die unterschiedlichen Ergebnisse.

SciFinderⁿ
★ Saved
🕒 History
👤 Account

You can now use BLAST search to mine our newly enhanced collection of more than 500M proteins and nucleotides from 60+ patent authorities dating back to 1957. Plus visually review sequence similarity and frequency across your patent search results.

Searching for...

All
 Substances
 Reactions
 References
 Suppliers
 Biosequences

References

Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. [Learn More](#)

red wine against heart disease
 ×
🔍 Draw
🔍

red wine against Heart Disease
 red wine against Heart Diseases
 red wine against Heart disease, lesion
 red wine against Heart disease, necrosis
 red wine against Heart disease, acidosis
 red wine against Heart diseases, valvular
 red wine against Heart disease, amyloidosis
 red wine against Heart disease, anaphylaxis
 red wine against Heart diseases, heart attack
 red wine against Heart disease, cor pulmonale

[← Return to Home](#)

Filter Behavior

Filter by

Exclude

Document Type

- ☐ Journal (4M)
- ☐ Patent (581K)
- ☐ Review (374K)
- ☐ Biography (4.027)
- ☐ Book (1.832)

[View All](#)

Language

- ☐ English (3,5M)
- ☐ Chinese (364K)
- ☐ Undetermined (232K)
- ☐ Japanese (157K)
- ☐ German (121K)

[View All](#)

Publication Year


 No Min to No Max
[View Larger](#)

Available at My Institution

☐ Author

References (4,759,044)

Sort: Relevance ▾ View: Full Abstract ▾

☐

Substances ▾

Reactions ▾

Cited By ▾

📄

✉

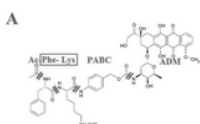
★

Save

☐ 1
Compositions and methods for treating cancer and inflammation-related diseases and conditions

By: Firestone, Raymond A.

United States, US20140364359 A1 2014-12-11 | Language: English, Database: CApius



The invention provides di-peptide conjugated antitumor agents, pharmaceutical compositions and methods for preparation and use thereof for treating various cancer and inflammation-related diseases and conditions. The present invention addresses the shortcomings of the existing anti-tumor and anti-inflammatory drugs, particularly in that the anti-tumor agents of the invention that selectively kill cancer cells with minimal damage to normal cells. Similarly, the anti-inflammatory agents of the invention provide effective treatment of various inflammatory diseases and conditions without the many deleterious side effects commonly associated with steroids.

PATENTPAK ▾

Full Text ▾

Substances (69)

Reactions (0)

Cited By (0)

Citation Map

☐ 2
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, Cecil R.; Hahn, Susan; Diamandis, Eleftherios P.; Soleas, George; Goldberg, David M.

Clinica Chimica Acta (1995), 235(2), 207-19 | Language: English, Database: CApius and MEDLINE

A number of lines of evidence suggest that red wine may be more effective than other alc. 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), hydroxyheptadecatrienoate (HHT) and 12-hydroxyeicosatetraenoate (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

Die Präpositionen WITH, IN, INTO, FROM, TO, BY, und FOR wirken alle wie AND. Die Präpositionen erleichtern dem Nutzer das Formulieren der Suchanfrage, d.h. man muss die logischen Operatoren nicht kennen, das System nutzt dann die Präpositionen quasi an Stelle der logischen Operatoren.

4. Suche mit Suchmodus „All“

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

The screenshot shows the SciFinder search results page. The search bar at the top contains the query "polyphenols with effect on „vitamin e“" and the search mode is set to "All". The results are categorized by "All Answer Types", showing the top two answers by relevance from each answer type.

Substances (1)

1

1563173-83-0

Image Not Available

Unspecified Polyphenols

References (0) Reactions (0) Suppliers (0)

[View All Substances](#)

Reactions (0)

We couldn't find any results. Please update your search query and try again.

References (3,194)

1

Effect of vitamin E and polyphenols on ochratoxin A-induced cytotoxicity in liver (HepG2) cells

By: Hundhausen, Christoph; Boesch-Saadatmandi, Christine; Augustin, Kay; Blank, Ralf; Wolffram, Siegfried; Rimbach, Gerald
Journal of Plant Physiology (2005), 162(7), 818-822 | Language: English, Database: C.Aplus and MEDLINE

It has been shown that oxidative damage contributes to the wide range of toxic effects of the mycotoxin ochratoxin A (OTA). Therefore, we examined the effects of α-tocopherol (α-TOC) and different polyphenols - catechin (CAT), daidzein (DAI), epicatechin

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

The screenshot shows the SciFinder search interface. The search bar contains the query "benzene". The search mode is set to "All". A message box states: "When both text and structure queries are present, the system will ignore the text query in Reaction, Substance and Supplier searching." The chemical structure of benzene is displayed, and there are buttons for "Edit Drawing" and "Remove".

SCIFINDERⁿ
A CAS SOLUTION

All benzene

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

Return to Home

Show only

- Substances (1,329)
- Reactions (15,226)
- References (20,946)
- Suppliers (325)

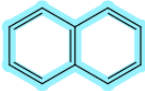
All A

Top two answers

Substances (1,329)

1

91-20-3

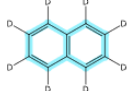


C₁₀H₈
Naphthalene

92K References 11K Reactions 118 Suppliers

2

1146-65-2



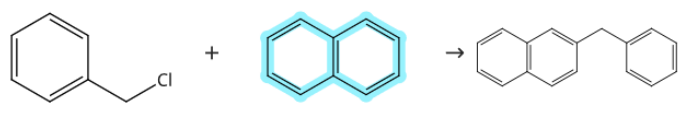
C₁₀D₈
Naphthalene-d₈

773 References 53 Reactions 41 Suppliers

[View All Substances](#)

Reactions (15,226)

Scheme 1 (2 Reactions)



Steps: 1
Yield: 100%

Suppliers (60) Suppliers (118) Suppliers (12)

[Expand Scheme](#)

5. Thematische Suchen

5.1 Einfache Textsuche

- Im SciFinderⁿ sucht man automatisch gleichzeitig in den Datenbanken CAPlus und MEDLINE.
- Man kann Textanfragen eingeben, z.B. Stichworte, Substanznamen, CAS Registrynummern oder Patentnummern.
- In die Textrecherche kann auch eine Substanzsuche eingebaut werden.
- Führt man mit der Textsuche gleichzeitig auch eine Substanzsuche durch, dann enthalten die Ergebnisse beide Kriterien im Sinne eines logischen AND.

Trefferliste

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](#)

Filter Behavior

Filter by

Document Type

- ☐ Journal (243)
- ☐ Patent (27)
- ☐ Review (59)
- ☐ Clinical Trial (33)
- ☐ Commentary (1)
- [View All](#)

Language

- ☐ English (248)
- ☐ Chinese (15)
- ☐ German (5)
- ☐ French (3)
- ☐ Japanese (3)
- [View All](#)

Publication Year

References (281)

Sort: Relevance View: Full Abstract

☐ Substances ☐ Reactions ☐ Cited By

☐ 1

Myocardial protection with red wine extract
 By: Sato, Motoaki; Ray, Partha S.; Maulik, Gautam; Maulik, Nilanjana; Engelman, Richard M.; Bertelli, A. A. E.; Bertelli, A.; Das, Dipak K.
 Journal of Cardiovascular Pharmacology (2000), 35(2), 263-268 | Language: English, Database: CAPlus and MEDLINE

Cardioprotective action of red wine was studied by preperfusing isolated rat hearts with ethanol-free red wine extract for 15 min before subjecting them to 30 min of global ischemia followed by 2 h of reperfusion. Four other group of rats were studied under identical conditions, of which one served as control; one was treated with 10 μ M trans-resveratrol (RVT), one of the major antioxidants found in red wines; another, with 0.07% ethanol; and another, with 0.07% ethanol plus 10 μ M RVT. The results of our study demonstrated that both red wine extract and RVT were equally cardioprotective, as evidenced by their abilities to improve postischemic ventricular functions including developed pressure and aortic flow. Developed pressure values at 60 min after reperfusion were 81.8 ± 1.2 and 68.8 ± 4.1 mm Hg for the red wine extract and RVT groups, resp., vs. 49.7 ± 2.7 mm Hg for the control group. These compounds also reduced myocardial infarct size compared with the control hearts ($20.1 \pm 0.5\%$ and $10.5 \pm 0.3\%$ for red wine extract and RVT groups, resp., vs. $29.9 \pm 3.1\%$ for the control group). The ethanol-treated group displayed slightly better functional recovery, which deteriorated sharply toward the end of the reperfusion period, and the extent of infarction was comparable to that of the control group ($31.5 \pm 0.9\%$). In the ethanol plus RVT group, postischemic contractile function was significantly better than control, and infarct size also was reduced to $20.9 \pm 0.7\%$. The amount of malonaldehyde formation in the postischemic myocardium was reduced by red wine extract and RVT, indicating a reduction of oxidative stress developed in the ischemic reperfused myocardium. In vitro studies revealed that red wine extract is a potent antioxidant as evidenced by its ability to scavenge peroxy radical in vitro. Taken together, the results of our study indicate that red wines are cardioprotective by their ability to function as an in vivo antioxidant.

☐ 2

Resveratrol, a phytoestrogen found in red wine. A possible explanation for the conundrum of the "French paradox"?
 By: Kopp, Peter
 European Journal of Endocrinology (1998), 138(6), 619-620 | Language: English, Database: CAPlus and MEDLINE

A review with 8 references This review discusses the proposed cardioprotective action of red wine in relation to the levels of phytoestrogen resveratrol. The tissue specificity of resveratrol towards MCF-7 and BG-1 cells with regard to binding of estradiol to

Detailanzeige

[← Return to Results](#)

Reference Detail (6 of 281)

[← Prev](#) [Next →](#)
[Substances \(6\)](#)
[Reactions \(0\)](#)
[Cited By \(24\)](#)

[Citation Map](#)

[Save](#)

Journal

Source

Molecules
Volume: 24
Issue: 19
Pages: 3626
Journal; General Review; Article;
Review
2019
DOI:
[10.3390/molecules24193626](https://doi.org/10.3390/molecules24193626)

Database Information

AN: 2019:2298853
PubMed ID: 31597344
CAplus and MEDLINE

Company/Organization

Department of Pharmacy, Faculty
of Pharmacy
University of Naples "Federico II"
Naples 80131
Italy

Email

alberto.ritieni@unina.it

Publisher

MDPI AG

Language

English

Red wine consumption and cardiovascular health

By: Castaldo, Luigi; Narvaez, Alfonso; Izzo, Luana; Graziani, Giulia; Gaspari, Anna; Di Minno, Giovanni; Ritieni, Alberto

A review. **Wine** is a popular alc. beverage that has been consumed for hundreds of years. Benefits from moderate alc. consumption have been widely supported by the scientific literature and, in this line, **red wine** intake has been related to a lesser risk for coronary **heart** disease (CHD). Exptl. studies and meta-analyses have mainly attributed this outcome to the presence in **red wine** of a great variety of polyphenolic compounds such as resveratrol, catechin, epicatechin, quercetin, and anthocyanin. Resveratrol is considered the most effective **wine** compound with respect to the prevention of CHD because of its antioxidant properties. The mechanisms responsible for its putative cardioprotective effects would include changes in lipid profiles, reduction of insulin resistance, and decrease in oxidative stress of low-d. lipoprotein cholesterol (LDL-C). The aim of this review is to summarize the accumulated evidence correlating moderate **red wine** consumption with prevention of CHD by focusing on the different mechanisms underlying this relationship. Furthermore, the chem. of **wine** as well as chem. factors that influence the composition of the bioactive components of **red wine** are also discussed.

Keywords: review cardiovascular health **red wine**; alcohol; antioxidants; cardioprotective; polyphenols; **red wine**; resveratrol

[Full Text ▾](#)
[Expand All](#) | [Collapse All](#)

- ▼ Concepts
- ▼ MEDLINE® Medical Subject Headings
- ▼ Substances
- ▼ Citations

Die Anzeige **Database: CAplus and Medline** in einem Dokument bedeutet, dass diese Publikation sowohl in CAplus 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**.

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

▼ CAS Solutions

▼ Formulation Purpose

▲ Database

☒ CPlus (1.700)

☐ MEDLINE (1.342)

▼ Search Within Results

Angiotensin II induces the **vascular** expression of VEGF and MMP-2 in vivo: Preventive effect of **red wine** polyphenols

By: Walter, Allison; Etienne-Selloum, Nelly; Sarr, Mamadou; Kane, Modou Oumy; Beretz, Alain; Schini-Kerth, Valerie B.
Journal of Vascular Research (2008), 45(5), 386-394 | Language: English, Database: CPlus and MEDLINE

Previous investigations have indicated that angiotensin II (Ang II)-induced hypertension and endothelial dysfunction are prevented by intake of **red wine** polyphenols (RWPs). Ang II has also been shown to increase the expression of VEGF and MMP-2, two major pro-inflammatory factors, in **vascular diseases**. Therefore, the aim of the present study was to determine whether intake of RWPs is able to prevent these effects in rats and, if so, to characterize the underlying mechanism. VEGF and endothelial NO synthase (eNOS) expression was assessed by immunofluorescence and Western blotting. MMP-2 activity by zymog., and reactive oxygen species (ROS) formation by dihydroethidine. Ang II increased VEGF expression and MMP-2 activity in the aortic wall. Ang II-induced MMP-2 activation is inhibited by N^G-nitro-L-arginine and MnTMPyP. Ang II increased the expression of eNOS, the formation of ROS and the nitration of proteins. The stimulatory effects of Ang II on these factors are prevented by RWPs intake. Infusion of Ang II induced **vascular** expression of VEGF and peroxynitrite-dependent activation of MMP-2, with both effects being prevented by RWPs intake. Thus, prevention of VEGF and MMP-2 expression might be involved in the protective effect of **red wine** on **coronary heart diseases**.

Full Text ▾ Substances (11) Reactions (0) Cited By (31) Citation Map

4

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, Cecil R.; Hahn, Susan; Diamandis, Efstherios P.; Soleas, George; Goldberg, David M.
Clinica Chimica Acta (1995), 235(2), 207-19 | Language: English, Database: CPlus and MEDLINE

A number of lines of evidence suggest that **red wine** may be more effective than other alc. 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), hydroxyheptadecatrienoate (HHT) and 12-hydroxyeicosatetraenoate (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.

Generell gilt für die Dokumente: Wenn in der Trefferliste bei Database: CPlus/MEDLINE steht, dann enthält die Detailanzeige diese Angaben (soweit sie für das jeweilige Dokument verfügbar sind):

- **Concepts** (CPlus concepts)
- **Medline Medical Subject Headings** (MEDLINE MESH terms)
- **Supplementary Concepts** (MEDLINE supplementary terms)
- **Substances** (Angaben aus CPlus und Medline)
- **MethodsNow: Analysis** (mit einem Link zu MethodsNow)
- **Formulations** (aus CPlus)

Beispiel:



References ▾ 2017:112799

✕ Draw 🔍 ★ ⌚ 👤

← Return to Home

Filter Behavior

Filter by Exclude

▲ Document Type

☐ Journal (1)

▲ Language

☐ English (1)

▲ Publication Year

2011 to 2021

No Min to No Max Apply

[View Larger](#)

▼ Available at My Institution

▼ Author

▼ Organization

▼ Publication Name

▼ Concept

▼ CAS Solutions

▼ Formulation Purpose

References (1) View: Full Abstract ▾

☐ Substances ▾ Reactions ▾ Cited By ▾ Download Email Save

1

Simultaneous HPLC assay for pretomanid (PA-824), moxifloxacin and pyrazinamide in an inhaler formulation for drug-resistant tuberculosis

By: Momin, Mohammad A. M.; Thien, Sim J.; Krittaphol, Woravimol; Das, Shyamal C.
Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis (2017), 135, 133-139 | Language: English, Database: CPlus and MEDLINE
[| MethodsNow: Analysis](#)

A simple and sensitive reversed phase HPLC method has been developed for the simultaneous quantitation of pretomanid (PA-824), moxifloxacin and pyrazinamide in a combination spray-dried powder formulation for inhalation, without any use of an internal standard. Good resolution of the analytes was achieved on a Luna C18 (2), 150 × 4.6 mm, 5 μm, 100 Å column using gradient elution with a mobile phase containing methanol and triethylamine phosphate buffer (pH 2.5) at a flow rate of 1.0 mL/min in a total run time of 25 min. Pyrazinamide, moxifloxacin and pretomanid (PA-824) were detected at wavelengths (retention times) of 269 nm (3.80 min), 296 nm (7.94 min) and 330 nm (17.46 min), resp. The assay was linear for all analytes in the concentration range 2.5-100 μg/mL (correlation coefficients >0.999) with LODs and LOQs (μg/mL) of pretomanid (PA-824) 0.51 and 1.56, moxifloxacin 0.06 and 0.19 and pyrazinamide 0.35 and 1.06, resp. Recoveries of the three drugs were 99.6-106.8% with intra- and inter-day precisions (as relative standard deviation) of <7%. The method was successfully applied to an evaluation of content uniformity and freedom from interference by L-leucine of a spray-dried combination powder for inhalation.

Full Text ▾ Substances (4) Reactions (0) Cited By (2) Citation Map

SciFinderⁿ A CAS SOLUTION

References 2017:112799

Return to Results

Reference Detail (1 of 1)

Substances (4) Reactions (0) Cited By (1) Citation Map

Journal
Source
Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis
Volume: 135
Pages: 133-139
Journal: Article
2017
DOI:
10.1016/j.jpba.2016.11.046

Database Information
AN: 2017:112799
CAN: 166-202140
PubMed ID: 28024261
Cáplus and MEDLINE

Company/Organization
New Zealand's National School of Pharmacy
University of Otago
Dunedin 9054
New Zealand

Email
shyamal.das@otago.ac.nz

Publisher
Elsevier B.V.

Language
English

Simultaneous HPLC assay for pretomanid (PA-824), moxifloxacin and pyrazinamide in an inhaler formulation for drug-resistant tuberculosis

By: Momin, Mohammad A. M.; Thien, Sim J.; Krittaphol, Woravimol; Das, Shyamal C.

Abstract: A simple and sensitive reversed phase HPLC method has been developed for the simultaneous quantitation of pretomanid (PA-824), moxifloxacin and pyrazinamide in a combination spray-dried powder formulation for inhalation, without any use of an internal standard. Good resolution of the analytes was achieved on a Luna C18 (2), 150 x 4.6 mm, 5 µm, 100 Å column using gradient elution with a mobile phase containing methanol and triethylamine phosphate buffer (pH 2.5) at a flow rate of 1.0 mL/min in a total run time of 25 min. Pyrazinamide, moxifloxacin and pretomanid (PA-824) were detected at wavelengths (retention times) of 269 nm (3.80 min), 296 nm (7.94 min) and 330 nm (17.46 min), resp. The assay was linear for all analytes in the concentration range 2.5-100 µg/mL (correlation coefficients >0.999) with LODs and LLOQs (µg/mL) of pretomanid (PA-824) 0.51 and 1.56, moxifloxacin 0.06 and 0.19 and pyrazinamide 0.35 and 1.06, resp. Recoveries of the three drugs were 99.6-106.8% with intra- and inter-day precisions (as relative standard deviation) of <7%. The method was successfully applied to an evaluation of content uniformity and freedom from interference by L-leucine of a spray-dried combination powder for inhalation.

Full Text

Expand All | Collapse All

Concepts

MEDLINE® Medical Subject Headings

Supplementary Concepts

Substances

MethodsNow: Analysis

Formulations

Citations

5.2 Gleichzeitige Suche von Text und chemischer Struktur

- SciFinderⁿ ermöglicht es, im Suchmodus „References“ gleichzeitig mit Text sowie 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.
- Die folgenden Screenshots zeigen dies anhand einer Substruktursuche für das Grundgerüst der Cardenolide verbunden mit einer Textfrage zum Monarchfalter, *Danaus plexippus*.
- Dabei wird vom System automatisch zusätzlich zu „*Danaus plexippus*“ auch nach *monarch butterfly* bzw. *monarch butterflies* gesucht.

SciFinderⁿ A CAS SOLUTION

References "Danaus plexippus"

Return to Home

Structure Match

As Drawn (0)

Substructure (40)

Filter by

Document Type

Journal (39)

Patent (1)

Review (1)

Substance Role

Biological Study (34)

References (40)

Substances (0) Reactions (0) Cited By (19) Citation Map

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: Cálplus

View Abstract

Full Text

Substance (1) Reactions (0) Cited By (19) Citation Map

2

Cardenolide content and palatability of a population of *Danaus chrysippus* butterflies from West Africa

Reference Detail (1 of 40)

Substance (1) Reactions (0) Cited By (19) Citation Map

Journal

Source

Chemoecology

Volume: 5/6

Issue: 3/4

Pages: 101-117

Journal: General Review

1995

DOI:

10.1007/bf01240595

Database Information

AN: 1996:433952

Milkweeds, monarch butterflies and the ecological significance of cardenolides

By: Malcolm, Stephen B.

A review with 139 references The contribution of the 1914 challenge by the evolutionary biologist *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

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

5.3 Phrasensuche und Maskierung

- Durch Anführungszeichen gibt man an, welche 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 einschließen.
- 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 SciFinder search interface. On the left, under 'Searching for...', the 'References' tab is selected. The main search bar contains the text '"red wine" and "heart disease"'. Below the search bar, a dropdown menu lists several suggestions, including '"red wine" and "heart disease"', '"red wine" and "heart diseases"', '"red wine" and "heart diseased"', '"red wine" and "heart disease's"', '"red wine" and "heart SS disease"', '"red wine" and "heart disease-19"', '"red wine" and "heart Diseases-9"', '"red wine" and "heart Rh disease"', '"red wine" and "heart Disease CML"', and '"red wine" and "heart Eye disease"'. The top right of the interface shows 'Saved', 'History', and 'Account' buttons.

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

Maskierung

The screenshot shows the SciFinder search interface. On the left, under 'Searching for...', the 'References' tab is selected. The main search bar contains the text 'fungicid*'. Below the search bar, a dropdown menu lists several suggestions, including 'fungicid', 'fungicide', 'fungicida', 'fungicides', 'fungicidal', 'Fungicidin', 'fungicidas', 'fungicider', and 'fungiciden'. The top right of the interface shows 'Saved', 'History', and 'Account' buttons.

Document Type

- ☐ Journal (232K)
☐ Patent (134K)
☐ Review (14K)
☐ Biography (7)
☐ Book (191)

[View All](#)
Substance Role

- ☐ Adverse Effect (8.324)
☐ Analytical Study (10K)
☐ Biological Study (60K)
☐ Combinatorial Study (7)
☐ Formation (168)

[View All](#)
Language

- ☐ English (225K)
☐ Chinese (67K)
☐ Japanese (23K)
☐ Undetermined (14K)
☐ German (12K)

[View All](#)
Publication Year

Substances ▾
Reactions ▾
Cited By ▾


Save

☐ 1

The strobilurine fungicides

By: Bartlett, Dave W.; Clough, John M.; Godwin, Jeremy R.; Hall, Alison A.; Hamer, Mick; Parr-Dobrzanski, Bob
 Pest Management Science (2002), 58(7), 649-662 | Language: English, Database: CAlus and MEDLINE

A review. Launched in 1996, the strobilurines now include the world's biggest selling **fungicide**, azoxystrobin. By 2002 there will be six strobilurine active ingredients com. available for agricultural use. This review describes the properties of these active ingredients, their synthesis, biochem. mode of action, biokinetics, **fungicidal** activity, yield and quality benefits, resistance risk and human and environmental safety. It also describes the tech. differences that exist between these active ingredients, particularly in the areas of **fungicidal** activity and biokinetics.

Full Text ▾

 Substances (2)

 Reactions (0)

 Cited By (742)

 Citation Map

☐ 2

Mechanisms influencing the evolution of resistance to Qo inhibitor fungicides

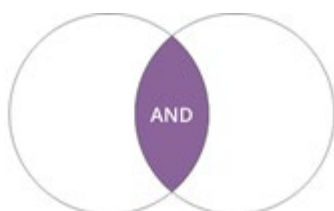
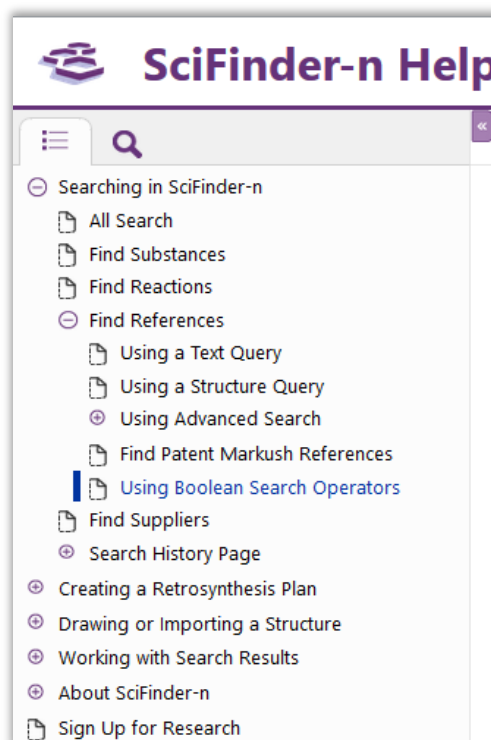
By: Gisi, Ulrich; Sierotzki, Helge; Cook, Alison; McCaffery, Alan
 Pest Management Science (2002), 58(9), 859-867 | Language: English, Database: CAlus and MEDLINE

A review. **Fungicides** inhibiting the mitochondrial respiration of plant pathogens by binding to the cytochrome bc1 enzyme complex (complex III) at the Qo site (Qo inhibitors, QoIs) were first introduced to the market in 1996. After a short time period, isolates resistant to QoIs were detected in field populations of a range of important plant pathogens including *Blumeria graminis* f sp tritici, *Sphaerotheca fuliginea* (Schlecht ex Fr) Poll, *Plasmopara viticola* (Berk & MA Curtis ex de Bary) Berl & de Toni, *Pseudoperonospora cubensis* (Berk & MA Curtis) Rost, *Mycosphaerella fijiensis* Morelet and *Venturia inaequalis* (Cooke) Wint. In most cases, resistance was conferred by a point mutation in the mitochondrial cytochrome b (cyt b) gene leading to an amino-acid change from glycine to alanine at position 143 (G143A), although addnl. mutations and mechanisms have been claimed in a number of organisms. Transformation of sensitive protoplasts of *M. fijiensis* with a DNA fragment of a resistant *M. fijiensis* isolate containing the mutation yielded fully resistant transformants, demonstrating that the G143A substitution may be the most powerful transversion in the cyt b gene conferring resistance. The G143A substitution is claimed not to affect the activity of the enzyme, suggesting that resistant individuals may not suffer from a significant fitness penalty, as was demonstrated in *B. graminis* f sp tritici. It is not known whether this observation applies also for other pathogen species expressing the G143A substitution. Since fungal cells contain a large number of mitochondria, early mitotic events in the evolution of resistance to QoIs have to be considered, such as mutation frequency (claimed to be higher in mitochondrial than nuclear DNA), intracellular proliferation of mitochondria in the heteroplasmatic cell stage, and cell to cell donation of mutated mitochondria. Since the cyt b gene is located in the mitochondrial

5.4 Suche mit logischen Operatoren

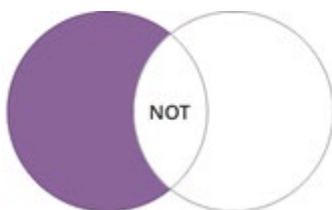
Die folgenden Beispiele sind der Hilfeseite

zu Scifinderⁿ entnommen.



Beispiele:

- flavor **and** extract
- 3463-67-7 **and** 7664-41-7



Beispiele:

- electrolysis not haptens
- 1,5-Di-2-naphthalenyl-3-pentanone not Dibenzylideneacetone



Beispiele:

- ("flavor" or "extract") and ("turmeric" or "curcumin")
- (flavor not dye) or extract
- 13463-67-7 or 7664-41-7

5.5 Wie finde ich Publikationen eines bestimmten Autors?

Beispiel für die Erweiterte Textsuche (Advanced Search)

- Wenn man nach Autoren, Zeitschriften oder Einrichtungen suchen will, dann verwendet man dazu die erweiterte Suche.
- Man klickt auf **Advanced Search** und es erscheint ein neuer Bildschirm.

The screenshot shows the SciFinder home page. On the left, there is a 'Search' sidebar with buttons for 'All', 'Substances', 'Reactions', 'References' (which is highlighted in purple), and 'Suppliers'. The main area has a search bar with the placeholder 'Enter a query...'. Above the search bar, it says 'Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, etc.'. Below the search bar, it says 'Use [Advanced Search](#) for Author, Journal, or Organization'. There are also buttons for 'Draw' and a search icon.

The screenshot shows the 'Advanced Reference Search' page. On the left, there is a sidebar with buttons for 'Substances' and 'References' (which is highlighted in purple). The main area has a title 'Advanced Reference Search'. Below the title, there are sections for 'Author' and 'Journal'. The 'Author' section has a text input field for 'Author Name (Last, First Middle)' with an example 'Ex: Schubert, J A' and a button 'Add Another Author'. The 'Journal' section has a text input field for 'Journal Name', three input fields for 'Volume', 'Issue', and 'Starting Page', and a text input field for 'Title Word(s)' with an example 'Ex: Antibiotic'. There is also a button 'Add Another Journal'.

- Gibt man Autorennamen, Zeitschriftennamen oder die Namen von Einrichtungen ein, dann erscheinen automatische Vorschläge dazu.
- Man kann gleichzeitig nach mehreren Autoren, Zeitschriften oder Einrichtungen suchen, indem man auf **Add Another ...** klickt.

6. Wie kann ich meine Treffermenge eingrenzen?

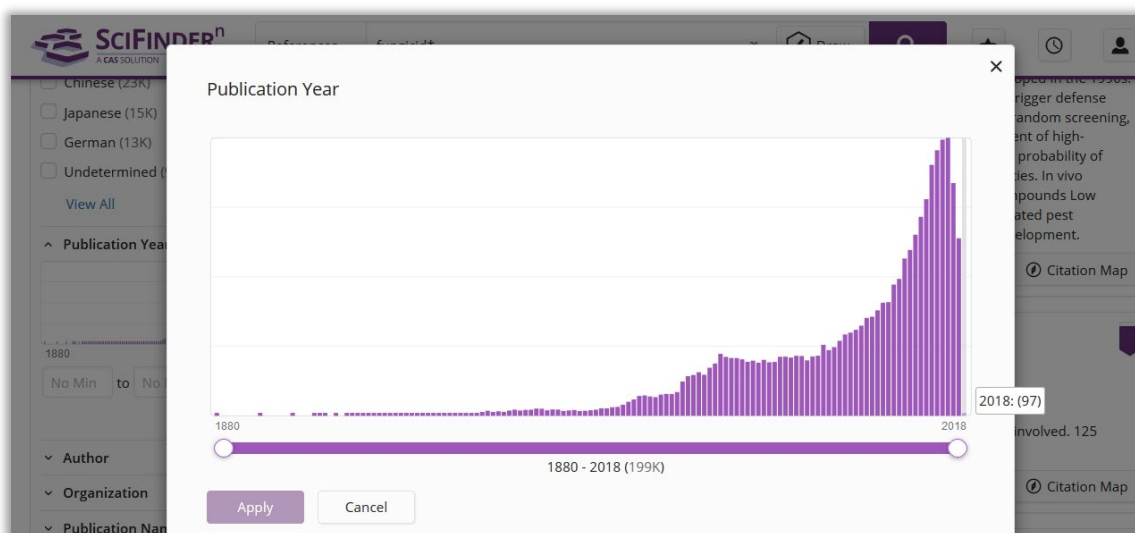
6.1 Wie schränke ich meine Suche zeitlich ein?

Beispiel:



Um die Suche auf bestimmte Publikationsjahre einzuschränken, gibt man einfach den Zeitraum ein oder wählt ihn direkt durch Anklicken der entsprechenden Jahre im Säulendiagramm aus.

Mit **View larger** kann man sich die Abbildung in einem größeren Format ansehen.



6.2 Wie grenze ich innerhalb der Ergebnisse über „Filter results“ ein?

Die Anzeige der Ergebnisse ändert sich automatisch, wenn Filter angewendet oder entfernt werden.

Es stehen u.a. folgende Filter zur Verfügung: Relevanz, Dokumententypen (z.B. Zeitschriften-artikel oder Patente), Sprache, Publikationsjahr, Autoren, Organisationen/Einrichtungen, Zeitschriftennamen, Konzepte bzw. Datenbank.

Filtern nach der Relevanz

- Dem Ranking nach der Relevanz wurde im SciFinderⁿ eine große Bedeutung beigemessen. Ein neuer, eigens dafür entwickelter Algorithmus zeigt in der Trefferliste gleich die relevantesten Ergebnisse an.
- Mit **Load More Results** kann man sich alle Ergebnisse ansehen, auch die weniger relevanten Treffer.

The screenshot displays the SciFinder web interface. At the top, the search bar contains the query "red wine" and "heart disease or coronary disease or car". The interface is divided into a left sidebar for filtering and a main results area.

Left Sidebar (Filter Behavior):

- Filter by:** A dropdown menu set to "Filter by".
- Exclude:** A button to toggle exclusion.
- Document Type:**
 - Journal (52K)
 - Patent (10K)
 - Review (7.791)
 - Biography (50)
 - Book (12)
 - [View All](#)
- Language:**
 - English (47K)
 - Chinese (9.689)
 - Undetermined (1.194)
 - Japanese (921)
 - Russian (719)
 - [View All](#)
- Publication Year:** A range selector.

Main Results Area (References):

Sort: Relevance | View: Full Abstract

1 **Endothelin-1 synthesis reduced by red wine**
 By: Corder, Roger; Douthwaite, Julie A.; Lees, Delphine M.; Khan, Noorafza Q.; Viseu dos Santos, Ana Carolina; Wood, Elizabeth G.; Carrier, Martin J.
 Nature (London, United Kingdom) (2001), 414(6866), 863-864 | Language: English, Database: CAlus and MEDLINE

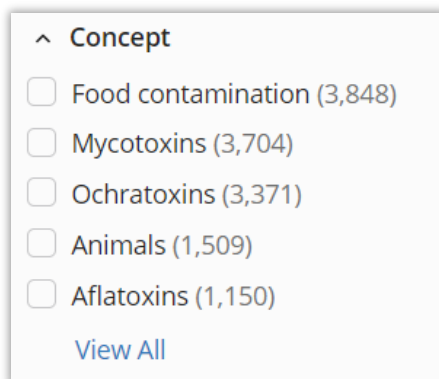
Ethanol-free extracts from 23 red wines, four white wines, one rose wine and one red grape juice were prepared to determine their inhibitory effect on the synthesis of endothelin-1 (ET-1), a vasoactive peptide that is crucial in the development of coronary atherosclerosis. The degree of inhibition of ET-1 by red wine was correlated with its total phenol content. The red-grape juice did not significantly inhibit ET-1 synthesis, while no effect was observed with white and rose wine. The polyphenol content of the red wines were responsible for their inhibitory effect on ET-1 synthesis. The red wine extract caused a significant change in the cell morphol. and a redistribution of phosphotyrosine staining. These effects on tyrosine phosphorylation were due to the modified tyrosine-kinase signaling in endothelial cells. Thus, moderate intake of red wine can prevent coronary heart disease.

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

A number of lines of evidence suggest that red wine may be more effective than other alc. 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), hydroxyheptadecatrienoate (HHT) and 12-hydroxyeicosatetraenoate (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

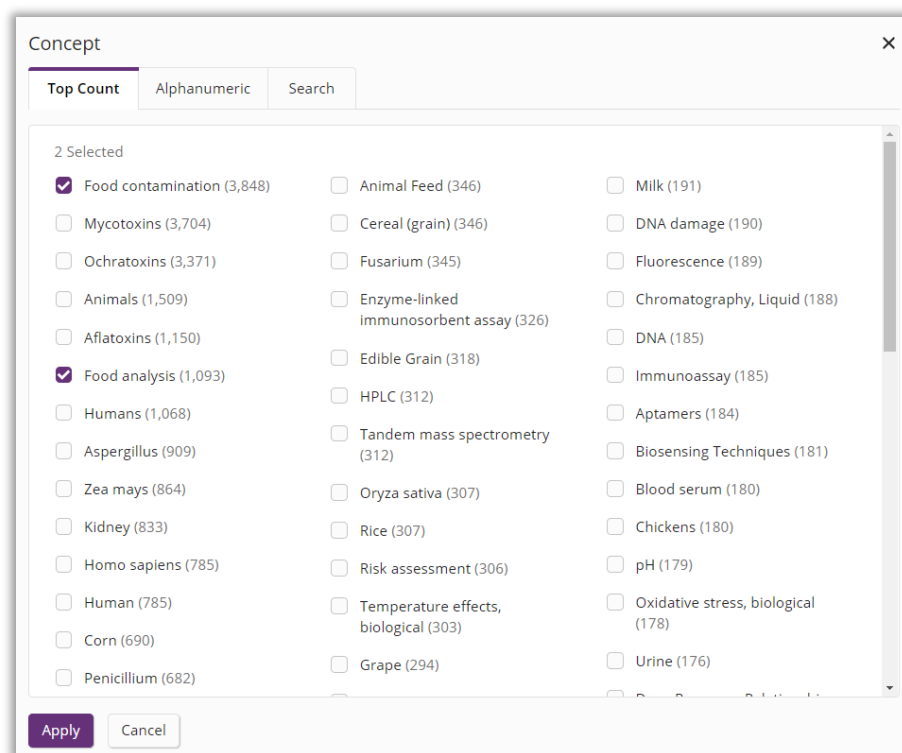
6.2.1 Eingrenzen/Filtern der Treffer mit „Concepts“

In einer Filterkategorie (hier am Beispiel von Concepts) können zusätzliche Elemente zur Filterung hinzugefügt werden (View All).



Top Count gibt die indizierten Konzepte nach Häufigkeit aus.

- **Alphanumeric** zeigt die Liste sortiert nach Anfangsbuchstaben an.
- **Search** erlaubt es, selbst nach kontrollierten Schlagworten zu suchen, auch die Nutzung von Trunkierungen ist hier möglich.



Mittels **Search** kann man indexierte Konzepte suchen und für die Filterung nutzen:

Concept

Top Count

Alphanumeric

Search

Concept Name

Search

3 Selected

☐ Biological analytical standard substances (1)
 ☐ Kinetic analysis (1)
 ☐ Spectrum analysis (1)

☐ Blood analysis (73)
 ☐ Least-Squares Analysis (5)
 ☐ Spectrum Analysis, Raman (7)

☐ Blood Chemical Analysis (18)
 ☐ Meta-Analysis as Topic (1)
 ☐ Statistical analysis (9)

☐ Chemistry Techniques, Analytical (17)
 ☐ Microarray Analysis (5)
 ☐ Survival Analysis (4)

☐ Clinical analysis (2)
 ☐ Microfluidic Analytical Techniques (7)
 ☐ Trace analysis (1)

☐ Cluster analysis (14)
 ☐ Milk analysis (47)
 ☒ Urine analysis (49)

☐ Correlation analysis (2)
 ☐ Monte Carlo statistical analysis (1)
 ☒ Wine analysis (172)

☐ Cost-Benefit Analysis (3)
 ☐ Multiplex analysis (6)

☐ Costs and Cost Analysis (1)

Apply

Cancel

6.2.2 Eingrenzen/Filtern der Treffer mit „Substance Roles“

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

Die 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.

Roles werden sowohl für jede indexierte Substanz als auch für ganze Substanzklassen vergeben.

The screenshot shows the CAS References interface. On the left, a 'Filter by' sidebar is visible. Under 'Document Type', there are checkboxes for Journal (81), Patent (13), Review (2), Conference (1), and Dissertation (2). Under 'Substance Role', there are checkboxes for Adverse Effect (16), Analytical Study (39), Biological Study (51), Occurrence (14), and Preparation (3). A 'View All' link is highlighted with a red box. Below this is a 'Language' filter. The main area is titled 'References (97)'. It has three tabs: 'Substances' (selected), 'Reactions', and 'Cited By'. Below the tabs, there is a list of references. The first reference is titled 'Validation of a liquid chromatography method for ochratoxin A and its analogues in red wines.' by Remiro, Rebeca; Ibáñez-Vea, María; González-Peñas, Elena; Lizarraga, et al. (2010). The abstract describes a validated HPLC method for ochratoxin A (OTA) and its analogues in red wine. A 'View More' link is present. At the bottom of the reference entry, there is a 'Full Text' button and a 'Substances (3)' button.

Roles werden im Rahmen der Indexierung bei CAS im Allgemeinen seit 1967 vergeben. Bei Verwendung dieser 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 Roles.

Die fettgedruckten 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>)

6.2.3 Welche weiteren „CAS Roles“ kann ich im SciFinderⁿ finden?

- **Analytical Study**
 - Analyte
 - Analytical Matrix
 - Analytical Reagent Use
 - Analytical Role, Unclassified
- **Biological Study**
 - Adverse Effect, Including Toxicity
 - Agricultural Use
 - Biological Activity or Effector, Except Adverse
(benutzt von 1967 bis 2001)
 - Biochemical Process ⁽¹⁾
 - Bioindustrial Manufacture
 - Biosynthetic Preparation
 - Biological Study, Unclassified
 - Biological Use, Unclassified
 - Cosmetic Use ⁽¹⁾
 - Diagnostic Use ⁽¹⁾
 - Food or Feed Use
 - Natural Product Occurrence ⁽¹⁾
 - Pharmacological Activity ⁽¹⁾
 - Pharmacokinetics ⁽¹⁾
 - Therapeutic Use
- **Combinatorial Study** ⁽¹⁾
- **Formation, Nonpreparative**
 - Formation, Unclassified
- Geological or Astronomical Formation
- **Nanomaterial**
(benutzt ab CA Vol. 116, 1992)
- **Occurrence**
 - Geological or Astronomical Occurrence
 - Natural Product Occurrence ⁽¹⁾
 - Occurrence, Unclassified
 - Pollutant
- **Preparation** (benutzt seit 1907)
 - Bioindustrial Manufacture
 - Biosynthetic Preparation
 - Byproduct
 - Industrial Manufacture
 - Purification or Recovery
 - Synthetic Preparation
- **Process**
 - Biochemical Process ⁽¹⁾
 - Geological or Astronomical Process
 - Physical, Engineering, or Chemical Process
 - Removal or Disposal
- **Prophetic Substance**
(benutzt seit 2003)
- **Reactant or Reagent**
 - Reactant
 - Reagent
- **Uses**
 - Agricultural Use
 - Analytical Reagent Use
 - Biological Use, Unclassified
 - Catalyst Use
 - Cosmetic Use ⁽¹⁾
 - Diagnostic Use ⁽¹⁾
 - Food or Feed Use
 - Modifier or Additive Use
 - Other Use, Unclassified
 - Polymer in Formulation
 - Technical or Engineered Material Use
 - Therapeutic Use
- **Spezifische Rollen, die zu keiner Superrolle gehören**
 - Miscellaneous
 - Properties

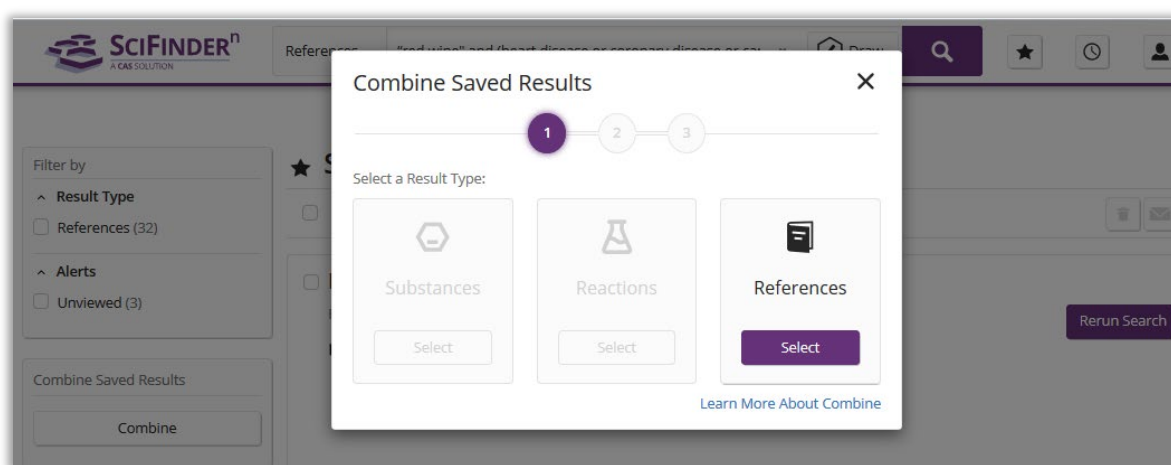
⁽¹⁾ benutzt ab CA Vol. 136 (2002)

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

7.1 Combine

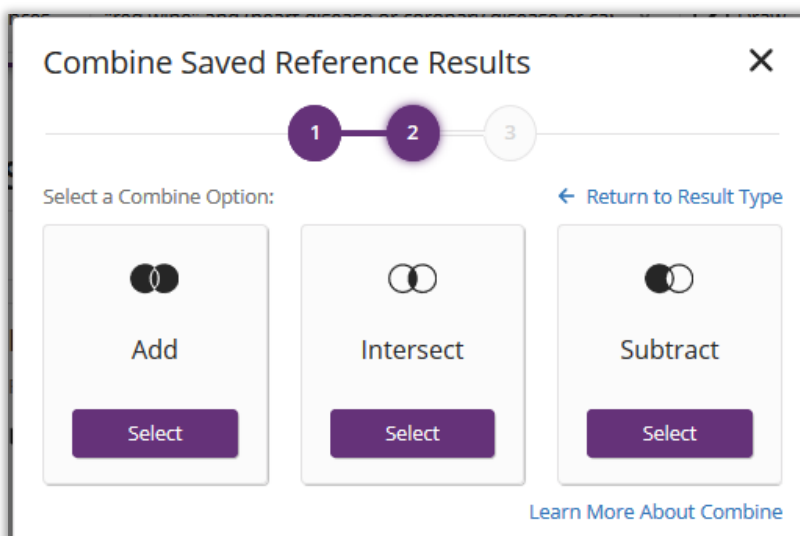
Gespeicherte Antwortsätze können mit Combine miteinander verbunden werden.

- Man kann ein **Combine** nur bei Ergebnissen machen, die man vorher gespeichert hat.
- Die Antwortsätze für das **Combine** müssen den gleichen Typ haben, z.B. References.
 - Eine gespeicherte Antwort bei Reaktionen kann man nicht mit denen bei Substanzen oder References kombinieren.



Es gibt drei Möglichkeiten:

- **Add:** Alle Antworten von 2-5 Antwortsätzen können mit **OR** verknüpft werden.
- **Intersect:** Alle Antworten von 2-5 Antwortsätzen können mit **AND** verknüpft werden.
Hinweis: Bei **Search within Results** maximal drei UND-Verknüpfungen erfolgen!
- **Subtract:** Hiermit kann man Ergebnisse einer Suche bei einer anderen Suche ausschliessen (im Sinne von **NOT**).



Beispiel: Add

Combine Saved Reference Results: Add
×

✓

✓

3

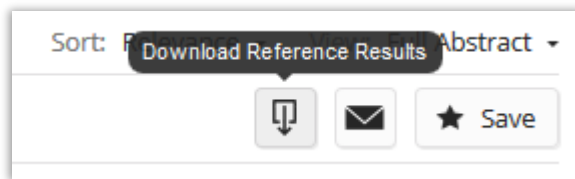
Select up to 5 saved result items:
← Prev

☐	elephas maximus 50 selected (50)	January 4, 2019, 8:16 AM
☐	"ear bone" mit select 187 (187)	January 4, 2019, 8:13 AM
☐	59-44=17 (17)	January 2, 2019, 10:32 AM
☐	snowy owl ohne Maskierung (44)	January 2, 2019, 10:00 AM
☒	bubo scandiacus (20)	January 2, 2019, 8:43 AM
☒	nyctea scandiaca (22)	January 2, 2019, 8:40 AM
☒	snowy owl (44)	January 2, 2019, 8:38 AM
☐	camel spider (11)	December 17, 2018, 2:32 PM
☐	sun spider (3)	December 17, 2018, 2:31 PM

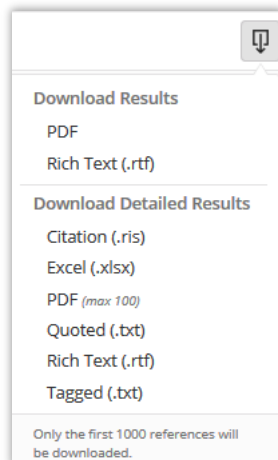
View Results
Cancel
Learn More

Bei **View Results** bekommt man bei **ADD** die mit OR verknüpften Ergebnisse angezeigt.

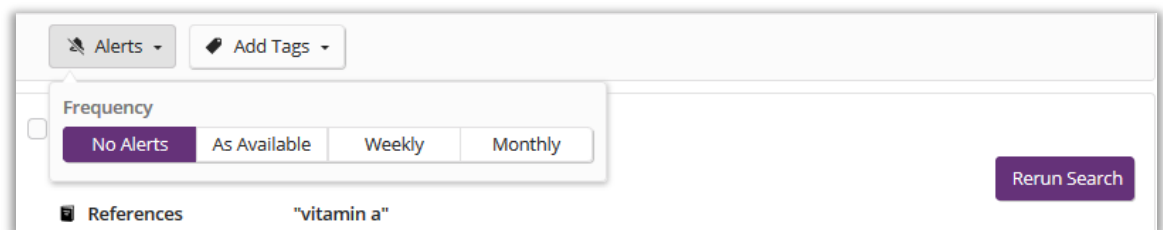
7.2 Speichen und Export von Ergebnissen



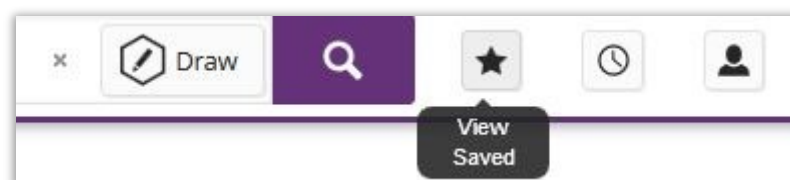
- Der Button „Download Reference Results“ dient zum Herunterladen der Suchergebnisse. Die Ergebnisse der Suche können bei **References**, **Substances** etc. in unterschiedlichen Formaten heruntergeladen werden. Bei References steht neben dem PDF-Format auch das rtf-Format (neben Formaten für den Export in Literaturverwaltungsprogrammen, wie (.ris) und Tagged) zur Verfügung.



- Bei größeren Treffermengen werden die ersten 1000 Dokumente heruntergeladen.
- Mit **Save** kann man Suchen bzw. deren Treffer speichern (unbedingt nötig für ein **Combine** mehrerer Antwortsätze – s. Pkt. 7.1.).
- Beim Speichern der Treffer unter einem selbstgewählten Namen kann gleichzeitig ein **Alert** initiiert werden. Man kann dabei auswählen, ob man zur gespeicherten Suchfrage sofort eine Benachrichtigung erhalten möchte, wenn es neue Treffer gibt („As Available“), oder ob man lieber wöchentlich bzw. monatlich neue Ergebnisse erhalten möchte. Voreingestellt ist dabei „No Alerts“.



- Mit dem **Saved**-Button kann man sich alle gespeicherten Suchen anzeigen lassen.



7.3 Import von Ergebnissen aus SciFinderⁿ 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:

- Import-Option Reference Manager (RIS) auswählen.

Das tagged-Format ist zu bevorzugen, weil hier alle Felder in das Literaturverwaltungsprogramm übertragen werden.

7.4 Wie komme ich zum Volltext?

- Dazu einfach den Button **Full Text** anklicken.
- Wenn die entsprechende Publikation frei verfügbar oder für die eigene Einrichtung lizenziert ist, kann man direkt auf den Volltext der Publikation zugreifen.
- Mit **View all Sources** bekommt man alle Links zum Volltext der gewählten Publikation auf einer Seite angezeigt.

☐ **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
[View Reference Detail](#)

Abstract: There is no abstract available for this document.

Full Text ▾

Substances (0) Reactions (0)

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

 **SCIFINDERⁿ**
A CAS SOLUTION

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)

Publisher Resources
[HTML from Elsevier](#)

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

< Previous Article Volume 13, No. 7, p669-670, July 2012 Next Article >

Access this article on [ScienceDirect](#)

Cancer and Society

Raising a glass of red wine against cancer, or not?
Adam E Frampton, Justin Stebbing
Published: July 2012
PlumX Metrics

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

Article Info

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

Article Options

PDF (95 KB)
Email Article
Add to My Reading List
Export Citation
Create Citation Alert
Cited by in Scopus (1)
Request Permissions
Order Reprints (100 minimum order)

8. Citation Map

Als **Citation Map** wird die übersichtliche Anzeige derjenigen Publikationen bezeichnet, die die aktuelle Publikation zitieren bzw. die, die in der aktuellen Publikation zitiert werden.

Gemeint ist: in der Citation Map erscheinen nur die im SciFinder-n verfügbaren Publikationen, d.h. verlinkte Datenbankrecords.

The screenshot shows the SciFinder interface with the 'Citation Map' tab selected. The main content area displays the title 'Red wine prevents homocysteine-induced endothelial dysfunction in porcine coronary arteries' by Fu, Weiping; Conklin, Brian S.; Lin, Peter H.; Lumsden, Alan B.; Yao, Qizhi; Chen, Changyi. The abstract states: 'Hyperhomocysteinemia is an independent risk factor of coronary artery disease. Clin. studies have indicated that moderate red wine consumption is associated with a reduction of incidence of coronary artery disease. In this study, the authors determined the effect of red wine on homocysteine-induced endothelial dysfunction in porcine coronary arteries. Porcine coronary arteries were dissected from 6 swine hearts and cut into 5-mm ring segments, which were assigned into 4 groups (9 rings/group): blank control, homocysteine treated (50 µM), red wine treated (0.08% alc.), and homocysteine plus re...'. Below the abstract is a 'View More' link.

On the left, there is a 'Filter by' section with two expandable categories: 'Document Type' and 'Author'. Under 'Document Type', there are checkboxes for 'Journal (86)', 'Review (16)', and 'Clinical Trial (1)'. Under 'Author', there are checkboxes for 'Olas, Beata (8)', 'Malinowska, Joanna (7)', 'Chen, Changyi (6)', 'Stochmal, Anna (5)', and 'Oleszek, Wieslaw (4)'. A 'Full Text' button is also present.

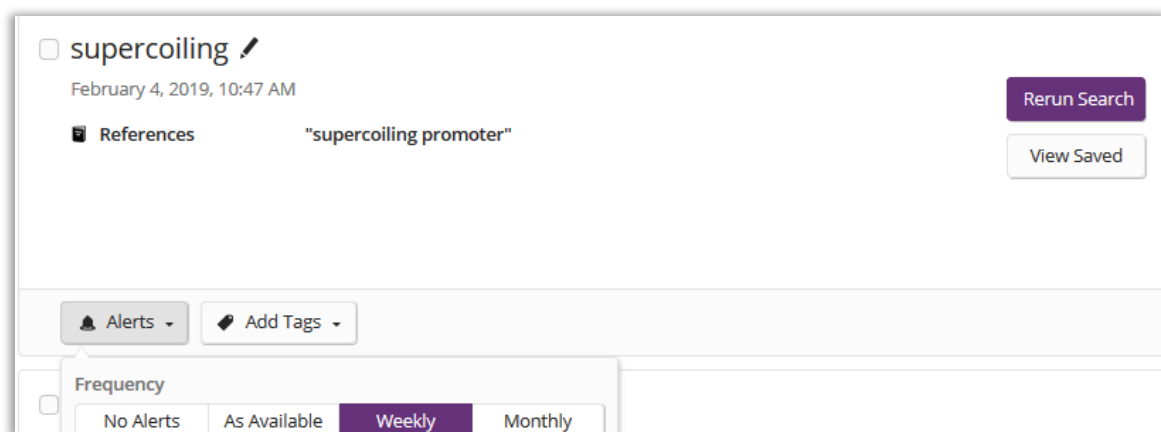
On the right, there are two panels: 'References This Document Cites' and 'References Citing This Document'. The 'References This Document Cites' panel lists three references: 'Apparent hydroxyl radical production by peroxynitrite: implications for endothelial injury from nitric oxide and superoxide' (Cited By 5,609), 'Wine, alcohol, platelets, and the French paradox for coronary heart disease' (Cited By 2,424), and 'Inhibition of oxidation of human low-density lipoprotein by phenolic substances in red wine' (Cited By 1,290). The 'References Citing This Document' panel lists three references: 'Wine, beer, alcohol and polyphenols on cardiovascular disease and cancer' (Citing 200), 'Direct vasoactive and vasoprotective properties of anthocyanin-rich extracts' (Citing 150), and 'Ginsenoside Rb1 Preconditioning Protects Against Myocardial Infarction After Regional Ischemia and Reperfusion by Activation of Phosphatidylinositol-3-kinase Signal Transduction' (Citing 77).

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 forschen.

9. Automatische Recherchen nach gespeicherten Profilen (Alerts)

- Wenn eine Suche erfolgt ist und man das Ergebnis mit **Save** speichert, dann kann man anklicken, ob man gar nicht, sobald neue Ergebnisse verfügbar sind, wöchentlich oder monatlich informiert werden will
- Man bekommt dann zum gewünschten Zeitpunkt eine E-Mail und kann sich die Ergebnisse im SciFinderⁿ ansehen.



10. History

- Auf der Startseite werden immer die letzten vier Suchen angezeigt, diese kann man mit
 - **Rerun Search** nochmals starten (Die farbige Hervorhebung der Suchworte bleibt dabei erhalten)
bzw. mit
 - **Edit** erneut in die Suchzeile einfügen und dort bei Bedarf auch verändern.

The screenshot displays the SciFinder interface with a top navigation bar containing 'Saved', 'History', and 'Account' links. The main content area is titled 'Recent Search History' (highlighted with a red box). It lists searches from February 14, 2020, and February 13, 2020. Each entry shows a timestamp, a filter icon (All or References), the search term, and associated counts (Substances, Reactions, References, Suppliers). Buttons for 'Rerun Search' and 'Edit Search' are provided for each entry. At the bottom, a 'View All Search History' link is highlighted with a red box.

Date	Time	Filter	Search Term	Substances	Reactions	References	Suppliers	Buttons
February 14, 2020	10:18 AM	All	"ochratoxin B"	(1)	(9)	(574)	(34)	Rerun Search, Edit Search
	10:17 AM	References	"ochratoxin B" (574)					Rerun Search, Edit Search
	10:03 AM	References	"vitamin e" (123K)					Rerun Search, Edit Search
February 13, 2020	10:39 AM	References	US20100239576 (1)					Rerun Search, Edit Search

Mit „View All Search History“ **alle** gespeicherten Suchen angezeigt.

11. Suche nach Substanzen

- Chemische Verbindungen können entweder über eine Textsuche mit dem Substanznamen, einer CAS-Registry-Nummer bzw. einer Patentnummer oder über eine Struktursuche gefunden werden.
- Wenn sowohl Text- als auch Strukturfragmente für eine Substanzsuche eingegeben werden, dann wird die Textsuche ignoriert.
- Auf der Startseite der Substanzsuche kann die erweiterte Suche (Advanced Search) benutzt werden, um mit Summenformeln zu suchen.

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 gleichzeitig
 - 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, z.B. „Ochratoxin B“.

Searching for... **All**

All Answer Types
Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. [Learn More](#)

"Ochratoxin B"

Bei den gefundenen Substanzen werden die beiden mit der höchsten Relevanz angezeigt.

Möchte man sich alle gefundenen chemischen Verbindungen ansehen, klickt man auf „View All Substances“.

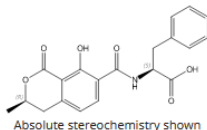
All "Ochratoxin B"

All Answer Types
Top two answers by relevance from each answer type.

Substances (2)

1

4825-86-9



Absolute stereochemistry shown

$C_{20}H_{19}NO_6$
Ochratoxin B

452 References 9 Reactions 38 Suppliers

2

1428244-56-7

Image Not Available

Notes: An immunoaffinity column for purifn. of **ochratoxins** A and **B** (Romer Labs)
Unspecified
Ochrastar R IAC

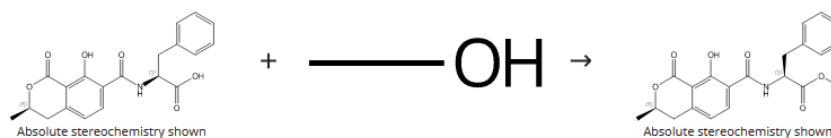
1 Reference 0 Reactions 0 Suppliers

[View All Substances](#)

Reactions (9)

Scheme 1 (1 Reaction)

Steps: 1 Yield: 100%



Suppliers (38)

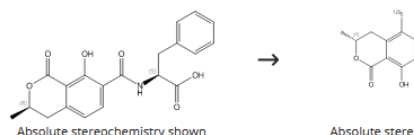
Suppliers (397)

Suppliers (3)

Expand Scheme

Scheme 2 (1 Reaction)

Steps: 1 Yield: 42%



Suppliers (38)

Expand Scheme

View All Reactions

Zwei Reaktionen von Ochratoxin B werden angezeigt.
Möchte man sich alle gefundenen Reaktionen ansehen, klickt man auf „View All Reactions“.

References (504)

1

Biotransformation and nephrotoxicity of ochratoxin B in rats

By: Mally, Angela; Keim-Heusler, Heike; 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

View Abstract

Full Text

Substances (4)

Zwei Textstellen zu Ochratoxin B werden angezeigt.
Möchte man sich alle gefundenen Nachweise ansehen, klickt man auf „View All References“.

2

Acute toxicity of ochratoxins A and B in chicks

By: Peckham, John C.; Doupnik, Ben Jr.; Jones, Oscar H. Jr.

Applied Microbiology (1971), 21(3), 492-4 | Language: English, Database: CAPLUS and MEDLINE

View Abstract

Full Text

Substances (2)

Reactions (0)

Cited By (36)

Citation Map

View All References

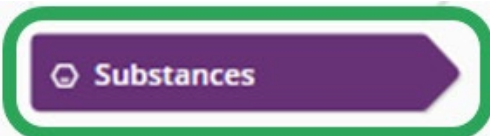
Suppliers (41)

Supplier	Substance	Purity	Purchasing Details	Availability
1				
AK Scientific AK Scientific Product Catalog United States	4825-86-9 Ochratoxin B	95-98%	Order From Supplier 1mg, USD 318 5mg, USD 731 Bulk Screening	Synthesis on demand Ships within 4 weeks
2				
Cayman Cayman Chemical Catalog United States	4825-86-9 Ochratoxin B	95-98%	Order From Supplier 500 µg, USD 85 1 mg, USD 162 5 mg, USD 468 Bulk Screening	Maintained in stock Ships within 1 week

View All Suppliers

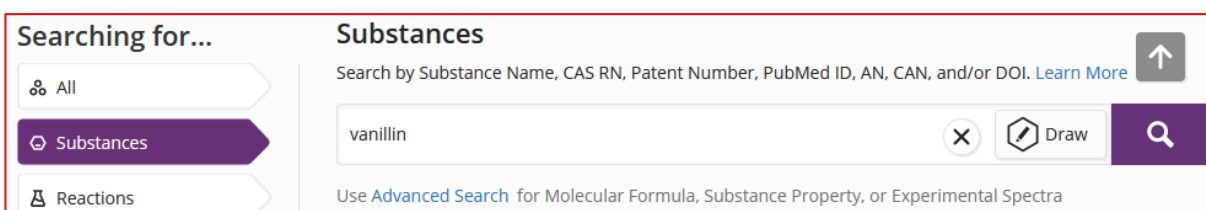
Zwei Lieferanten von Ochratoxin B werden angezeigt. Mehr mit „View All Suppliers“.

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



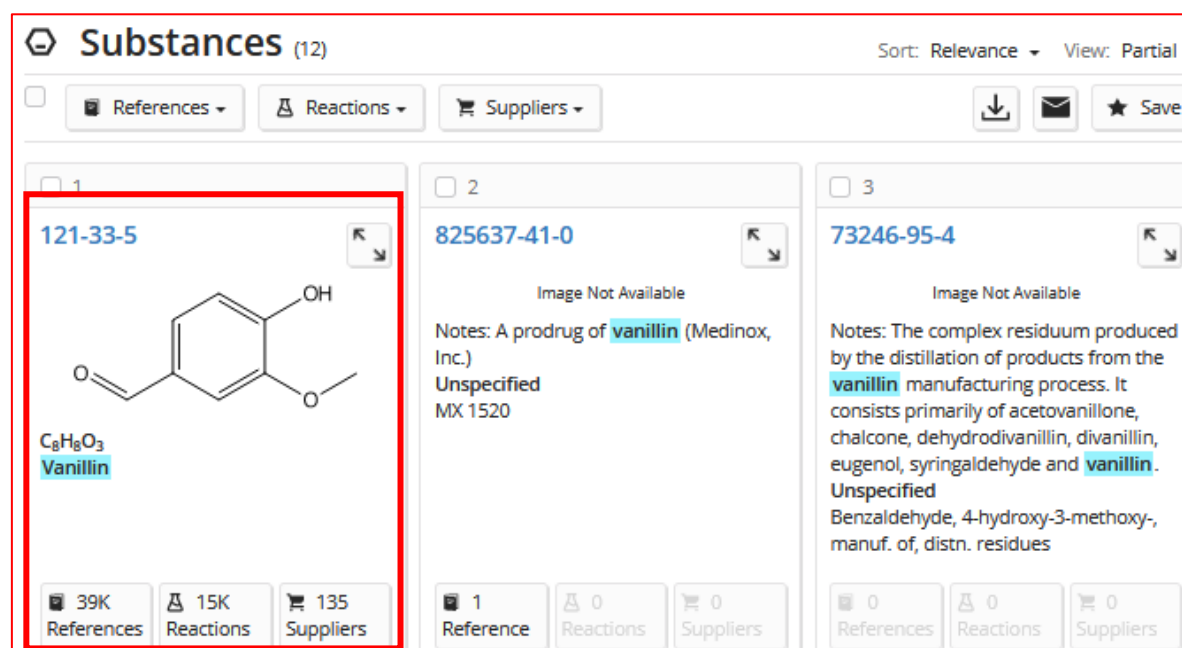
- Wenn mit dem Namen gesucht werden soll, ist es hilfreich, möglichst viele verschiedene **Namensvarianten** auszuprobieren (z.B. Trivial- und Handelsnamen), denn spezifische Substanzen werden nur gefunden, wenn der Name genauso, wie er eingegeben wird, in der Datenbank enthalten ist. Die verschiedenen 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 Namenssuche ist auch mit Wortende-Maskierung mittels ***** möglich.

Beispiel: Suche nach Vanillin mit dem Namen



The screenshot shows a search bar with the text "vanillin". To the left of the search bar are three tabs: "All", "Substances" (which is selected and highlighted in purple), and "Reactions". Above the search bar is the text "Searching for...". To the right of the search bar is a button labeled "Substances" with an upward arrow. Below the search bar is a link that says "Use Advanced Search for Molecular Formula, Substance Property, or Experimental Spectra".

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



The screenshot shows the search results for "vanillin". The results are displayed in a grid with three columns. The first column shows the result for "121-33-5" (Vanillin), which is highlighted with a red box. The second column shows the result for "825637-41-0" (Unspecified MX 1520). The third column shows the result for "73246-95-4" (Unspecified Benzaldehyde, 4-hydroxy-3-methoxy, manuf. of, distn. residues). Each result card includes a chemical structure, the CAS number, the name, and buttons for "References", "Reactions", and "Suppliers".

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

Searching for... **Substances** ↑

Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. [Learn More](#)

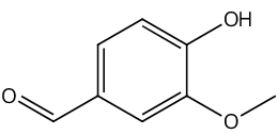
121-33-5 ✕ Draw 🔍

Substances (1)

☐ References ☐ Reactions

☐ 1

121-33-5



$C_8H_8O_3$
Vanillin

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

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

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

RN-Nummern findet man z.B. in Chemikalienkatalogen oder bei Wikipedia.

Beispiel: Suche nach mehreren Substanzen gleichzeitig

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

Searching for... **Substances** ↑

Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. [Learn More](#)

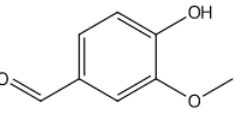
121-33-5 benoxaprofen ✕ Draw 🔍

Substances (2)

☐ References ☐ Reactions ☐ Suppliers

☐ 1

121-33-5

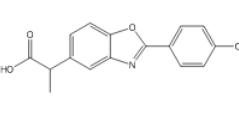


$C_8H_8O_3$
Vanillin

39K References 15K Reactions 135 Suppliers

☐ 2

51234-28-7



$C_{16}H_{12}ClNO_3$
Benoxaprofen

930 References 28 Reactions 32 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

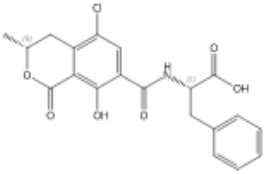
Substances ▾ "Ochratoxin A" X Draw 🔍

Substances (2)

References ▾ Reactions ▾ Suppliers ▾

1

303-47-9



Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)

$C_{20}H_{18}ClNO_6$
Ochratoxin A

2

1428244-56-7

Image Not Available

Notes: An immunoaffinity column for purifn. of **ochratoxins** A and B (Romer Labs)
Unspecified
Ochrastar R IAC

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

Suche nach **Vanillin***, wobei die gesamte Phrase in Anführungszeichen gesetzt wird

Treffermenge: Verbindungen werden gefunden, deren Name mit Vanillin beginnt.

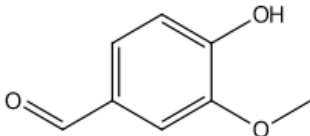
Substances ▾ Vanillin* X Draw 🔍 ★ ⌚ 👤

Substances (417) Sort: Relevance ▾ View: Partial ▾

References ▾ Reactions ▾ Suppliers ▾ ⬇️ ✉️ ★ Save

1

121-33-5

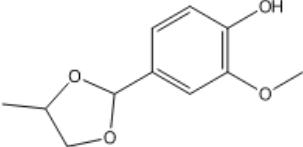


$C_8H_8O_3$
Vanillin

39K References 15K Reactions 135 Suppliers

2

68527-74-2

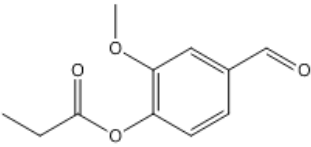


$C_{11}H_{14}O_4$
Vanillin propylene glycol acetal

115 References 27 Reactions 37 Suppliers

3

174143-90-9



$C_{11}H_{12}O_4$
Vanillin propionate

55 References 66 Reactions 36 Suppliers

Zusammenfassung

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

Kennen Sie die CAS-Registry-Nummer der gesuchten Verbindung nicht und wird der eingetragene 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 die **Struktur** gesucht werden (s. Pkt. 11.4).

11.3 Kann ich mit Summenformeln nach Substanzen suchen?

- Eine Suche mit Summenformeln ist im Suchmodus „Substances“ möglich. Dazu die erweiterte Substanzsuche „**Advanced Substance Search**“ auswählen.
- Die gewünschte Summenformel(n) nach dem Hill-System in der Reihenfolge C, H und dann alle anderen Elemente alphabetisch sortiert, eingeben.
- 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.

The screenshot shows the search interface. In the 'Searching for...' section, 'Substances' is selected. In the 'Substances' section, the 'Advanced Search' link is highlighted. In the 'Advanced Substance Search' section, the 'Molecular Formula' input field contains 'C9H8O4'.

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

The screenshot shows the search results for the molecular formula C9H8O4. The results are sorted by Relevance. The first result is Aspirin (50-78-2) and the second is Caffeic acid (331-39-5). Both results show their chemical structures and key physical properties.

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

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

Substances

References

Advanced Substance Search

Molecular Formula
Enter one Molecular Formula.

Ex: C₆H₆
(C₈H₈)_x
C₂₂H₂₆CuN₂O₅.C₂H₃N

Add Another Molecular Formula

— AND —

Substance Property
Select Property

- Select One -

Add Another Property

Experimental Spectra
Select Spectrum

- Select One -

Proton NMR
Carbon-13 NMR
Nitrogen-15 NMR
Fluorine-19 NMR
Phosphorous-31 NMR

Enter Value

Substance Property

Select Property

- Select One -

Biological

Bioconcentration Factor
Median Lethal Dose (mg/kg)

Chemical

Koc
logD
logP
Mass Intrinsic Solubility (g/L)
Mass Solubility (g/L)
Molar Intrinsic Solubility (mol/L)
Molar Solubility (mol/L)
Molecular Weight

pKa
Vapor Pressure (Torr)

Density

Density (g/cm³)
Molar Volume (cm³/mol)

Mögliche Eigenschaften für die Suche

Electrical

Electric Conductance (S)
Electric Conductivity (S/cm)
Electric Resistance (ohm)
Electric Resistivity (ohm*cm)

Lipinski

Freely Rotatable Bonds
Hydrogen Acceptors
Hydrogen Donor/Acceptor Sum
Hydrogen Donors

Magnetic

Magnetic Moment (muB)

Mechanical

Tensile Strength (Mpa)

Optical and Scattering

Optical Rotatory Power (degrees)
Refractive Index

Structure Related

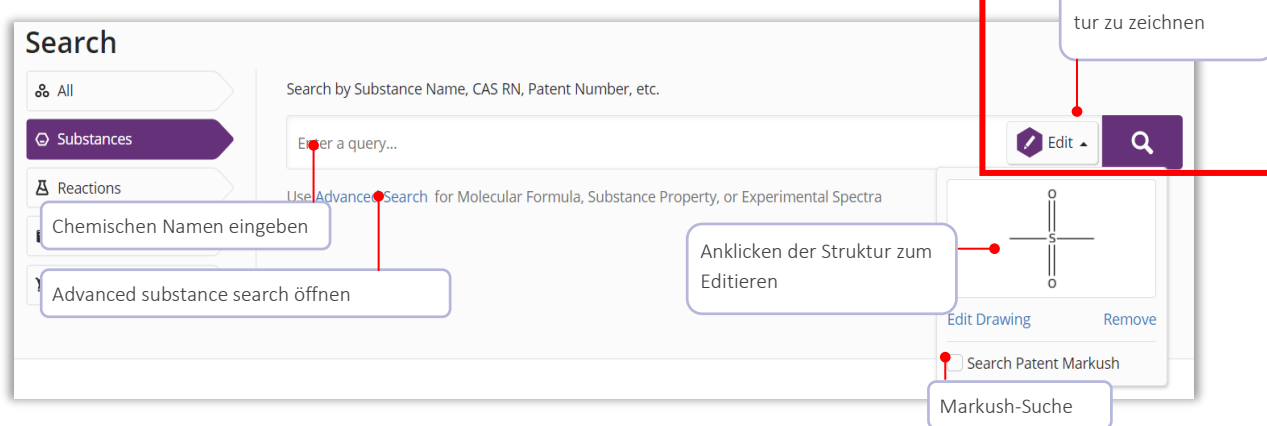
Polar Surface Area (Å²)

Thermal

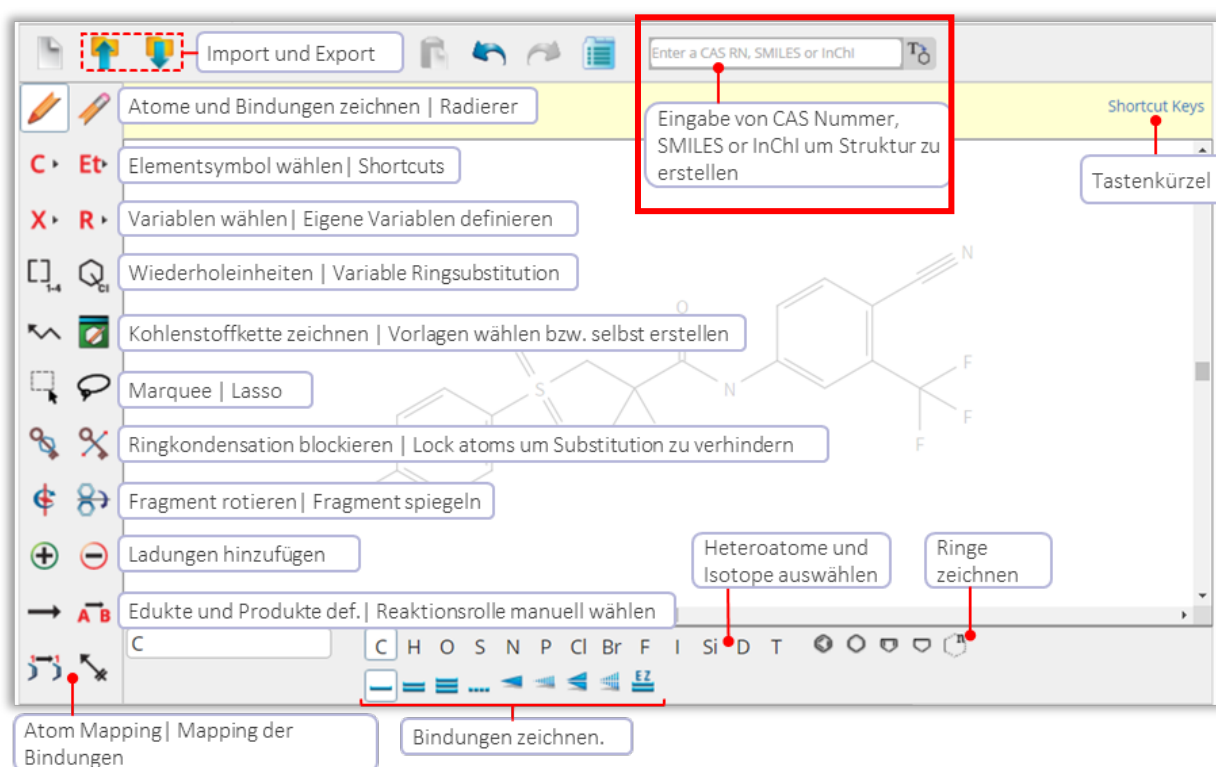
Boiling Point (°C)
Enthalpy Of Vaporization (kJ/mol)
Flash Point (°C)
Glass Transition Temperature (°C)
Melting Point (°C)

11.4 Wie suche ich nach Substanzen über die Struktur?

- Sie kennen die RN-Nummer der von Ihnen gesuchten chemischen Verbindung nicht, der von Ihnen eingegebene Name wird nicht gefunden oder es sollen gleichzeitig Derivate gesucht werden? Dann zeichnen Sie die gewünschte Verbindung. So können Sie sie über die Struktur suchen.
- Eine Suche über die Struktur ist präziser als eine Namenssuche, denn es werden alle Textstellen zu einer Verbindung gefunden, egal welcher Substanzname in den einzelnen Publikationen verwendet wird.
- Nach Auswahl des Suchmodus „Substances“ klickt man neben der Lupe auf „Edit“ 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.



11.5 Hinweise für das Zeichnen von chemischen Strukturen

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

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



Shortcuts									
CH	CH ₂	Me	OMe	Et	OEt	Pr-n	Pr-i		
OPr-n	OPr-i	Bu-n	Bu-i	Bu-s	Bu-t	OBu-n			
OBu-i	OBu-s	OBu-t	Ph	OPh	o-C ₆ H ₄				
m-C ₆ H ₄	p-C ₆ H ₄	CF ₂	CF ₃	CCl ₂	CCl ₃	CBr ₂			
CBr ₃	Cl ₂	Cl ₃	CHO	CN	C(O)CH ₃	CO ₂ H			
COOH	COSH	CS ₂ H	CSSH	NH	NH ₂	NH ₃			
NO ₂	OH	OPO ₃ H ₂	OSO ₃ H	PO ₃ H ₂	SH	SO ₂			
SO ₃ H									

- 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.

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



Variables	
X	Any halogen
M	Any metal
A	Any atom except H
Q	Any atom except C or H
Ak	Any carbon chain
Cy	Any cyde
Cb	Any carbocycle
Hy	Any heterocyde

R-group Definitions

R1 R2 R3 R4 R5 R6 R7 R8 R9 R10

R1 =

Atoms

H	He																
Li	Be																
Na	Mg																
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra																

Lanthanides: La Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu

Actinides: Ac Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No Lr

Isotopes: D T

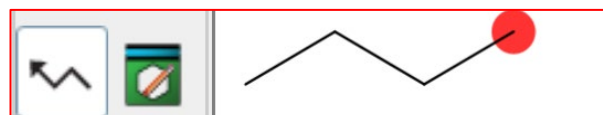
Variables

Shortcuts



Sollen an einer Stelle Ihrer Struktur mehrere Elemente 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.

- 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.



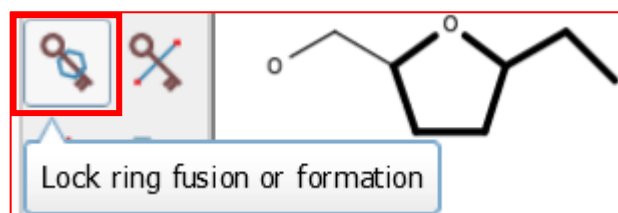
- Mit dem **Ring-Tool** können Sie auf elegante Weise Ringe (3- bis 15-gliedrig) zeichnen. Nach dem Anklicken einfach die gewünschte Ringgröße angeben.

Ring Description

8

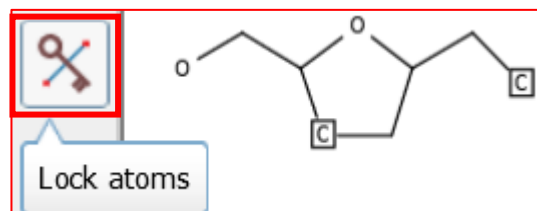
OK Cancel

- 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.

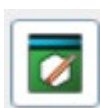


Die für die Ringbildung gesperrte Bindung erscheint dabei fett.

- 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.



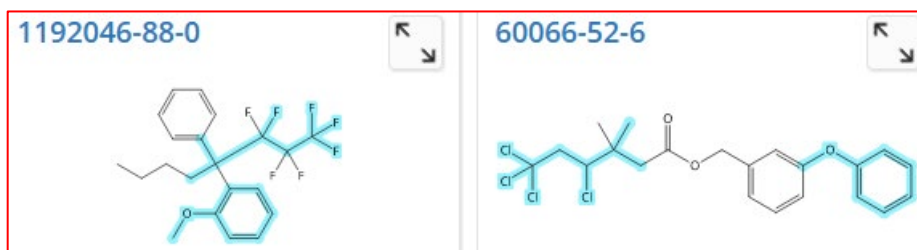
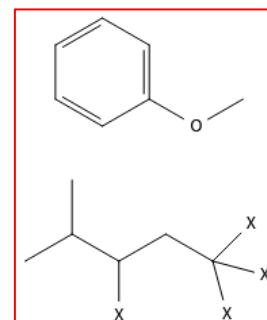
- Für komplizierte Strukturen findet man in der linken Menüleiste **Templates**.



Das sind **vorgezeichnete Grundgerüste**, die das Konstruieren z.B. von großen Ringsystemen durch einfaches Auswählen sehr erleichtern.

► Alkaloid (9)	► N-containing (19)
► Amino Acid (25)	► NOS-containing (10)
► Bicarboyclic (8)	► Nucleic Acid (5)
► Carbohydrate (7)	► O-containing (11)
► Coordination (14)	► Polycarboyclic (13)
► Cycloalkane (13)	► S-containing (6)
► Miscellaneous (6)	► Steroid (7)
► Monocarboyclic (19)	► User-Defined (0)

- 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 besitzen. Was sich zwischen den Fragmenten befindet, ist nebensächlich. (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 wird nach Auswählen der benötigten Elemente/Bindungsarten die zu ändernden **Atome/Bindungen** einfach durch Anklicken (Atom/Bindung wird rot) „**überschrieben**“.

11.6 Wie sieht die Trefferliste bei der Substanzsuche aus?

Welche Ansichten kann ich für die Trefferliste der Substanzsuche einstellen?

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

Beim „Full View“ gelangt man mit einem Klick zu bestimmten Eigenschaften der Substanz.

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

Substances (2,116) Sort: Relevance View: **Full**

References Reactions Suppliers

1

1192046-49-3

C13H13F7O
Benzene, 1-(2,2,3,3,4,4,4-heptafluoro-1,1-dimethylbutyl)-4-methoxy-

2 References 2 Reactions 1 Supplier

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

Spectra

2

2410409-84-4

C19H13F7O2
Phenol, 4-[2,2,3,3,4,4,4-heptafluoro-1-[2-(4-methoxyphenyl)ethynyl]butyl]-

2 References 5 Reactions 0 Suppliers

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 „Partiell View“ ist der voreingestellte Ansichtsmodus. Er ist kompakter und ermöglicht einen schnellen Überblick.

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

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

Substances (2,116) Sort: Relevance View: **Partial**

References Reactions Suppliers

1

1192046-49-3

C13H13F7O
Benzene, 1-(2,2,3,3,4,4,4-heptafluoro-1,1-dimethylbutyl)-4-methoxy-

2 References 2 Reactions 1 Supplier

2

2410409-84-4

C19H13F7O2
Phenol, 4-[2,2,3,3,4,4,4-heptafluoro-1-[2-(4-methoxyphenyl)ethynyl]butyl]-

2 References 5 Reactions 0 Suppliers

3

2460357-50-8

Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)

C19H13F7O2
Phenol, 4-[(1R)-2,2,3,3,4,4,4-heptafluoro-1-[2-(4-methoxyphenyl)ethynyl]butyl]-

1 Reference 2 Reactions 0 Suppliers

Weitere Möglichkeiten in der Liste der gefundenen Substanzen

The screenshot shows the SciFinder Substances interface with several annotations in red boxes:

- Strukturmatch auswählen**: Points to the 'Structure Match' filter section on the left, which includes 'As Drawn (102)', 'Substructure (4.3M)', and 'Similarity (519)'.
- Analyze structure precision**: Points to the 'Analyze Structure Precision' link below the filter section.
- Sortierung ändern**: Points to the 'Sort: Number of Suppliers' dropdown at the top right.
- Displavdetails einstellen**: Points to the 'View Partial' dropdown at the top right.
- Anklicken für Details**: Points to the chemical structure of 149104-88-1.
- Substanzdaten**: Points to the 'Substance Detail' dropdown menu for 80-08-0.
- Auf Struktur klicken um Menü zu erhalten**: Points to the chemical structure of 80-08-0.
- Struktur im Editor öffnen**: Points to the 'Edit Structure' button for 80-08-0.
- .sdf Download**: Points to the download icon for 80-08-0.
- Referenzrollen (auch Substance roles genannt) beschreiben den Kontext der Substanz in der Publikation**: Points to the 'References' section on the left, which lists roles like 'Commercial Availability', 'Reaction Role', and 'Reference Role'.

- Die Möglichkeit, die Treffermenge über die Struktursucheoptionen (**Structure Match**) einzugrenzen, erscheinen nur nach einer Suche mit der Strukturformel.

The screenshot shows the SciFinder Substances page with a detailed view of a substance (303-47-9, Ochrotoxin A). The 'Structure Match' filter is highlighted with a red box. The substance details include:

- Structure Match**: As Drawn (29), Substructure (71), Similarity (786).
- Filter by**: Commercial Availability (Available (6), Not Available (14)), Reaction Role (Product (4)).
- Substance Detail**: 303-47-9, View Detail, Chemical structure, Absolute stereochemistry shown, Rotation (-), $C_{20}H_{18}ClNO_6$, Ochrotoxin A, 5,812 References, 50 Reactions, 42 Suppliers.
- Key Physical Properties**:

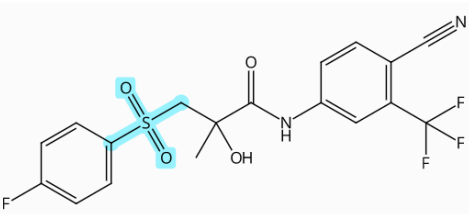
Property	Value	Condition
Molecular Weight	403.81	-
Melting Point (Experimental)	169 °C	-
Boiling Point (Predicted)	632.4±55.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.425±0.06 g/cm ³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
pKa (Predicted)	3.29±0.10	Most Acidic Temp: 25 °C

- Substanzen kann man PDF oder als SD-File herunterladen. Die PDF-Datei enthält Links zu Daten im SciFinderⁿ. Ein Structure Data File (*.sdf) ist ein File-Format, welches von einigen Datenbankprogrammen gelesen werden kann.

11.7 Detailanzeige bei Substanzen

Nach Anklicken der CAS Nummer öffnet sich die detaillierte Anzeige zur Substanz. Dieser beinhaltet u.a. Informationen zu Struktur, Molekularformel, physiko-chemischen Eigenschaften und Spektren.

CAS Registry Number
90357-06-5



Molekularformel in Hill-Schreibweise
C18H14F4N2O4S

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

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	430.37	-
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

Experimental Properties | Spectra

Wesentliche Eigenschaften

Other Names

Experimental Properties

Experimental Spectra

Eigenschaften sind angegeben oder im verlinkten Volltext einsehbar, ebenso auch Spektren.

9 Other Names for this Substance

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

Bicalutamide

Casode

Casodex

Cosudex

ICI 176334

Die aufgelisteten Namen beinhalten systematische Namen, Trivialbezeichnungen, Handelsnamen, Entwicklungs-codes. Die Synonyme werden aus den indierten Publikationen entnommen.

Experimental Properties

Biological	Chemical	Lipinski	Thermal
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, CAbus

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

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

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

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

Experimental Spectra

¹ H NMR	¹³ C NMR	Hetero NMR	IR	Mass	Raman	UV and Visible
Source						
Carbon-13 NMR Spectrum - 2 Sources						(1-2) CAS

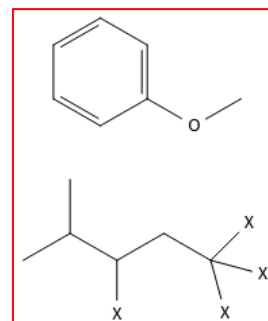
Sources

(1) Sha, Yi; Guangpu Shiyanshi, (2004), 21(1), 6-8, CAbus

(2) Payen, Olivier; Journal of Medicinal Chemistry, (2008), 51(6), 1791-1799, CAbus

11.8 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 2116 Treffer nebenstehender Substanz-Struktursuche 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.

Structure Match

As Drawn (0)

Substructure (2.116)

Similarity (31)

Analyze Structure Precision

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

^ Structure Precision

☐ Conventional Results (2.109)

☐ Tautomers and Zwitterions (7)

Weiterhin kann nach der Struktursuche gezielt ausgewählt werden,

- aus welchen **Substanzklassen** die Treffer kommen sollen,
- ob Stereoverbindungen,
- mehrkomponentige Verbindungen (z.B. **Polymere, Gemische**),
- Isotopenverbindungen oder auch
- Metallverbindungen dabei sein sollen.

Eine Einschränkung durch eine neue Suche innerhalb der Treffer mit einem präzisierten Strukturfragment ist ebenfalls möglich.

^ Search Within Results

Draw

Draw using current structure

^ Stereochemistry

☐ Stereo in Answer Structure (70)

☐ No Stereo in Answer Structure (2.046)

^ Number of Components

☐ 1 (2.050)

☐ 2 (39)

☐ 3 (7)

☐ 4 (7)

☐ 5 or more (13)

^ Substance Class

☐ Organic/Inorganic Small Molecule (2.020)

☐ Polymer (81)

☐ Coordination Compound (11)

☐ Incompletely Defined Substance (2)

☐ Mixture (1)

☐ Salt and Compound With (1)

^ Isotopes

☐ Not Containing Isotopes (2.116)

^ Metals

☐ Containing Metals (12)

☐ Not Containing Metals (2.104)

^ Molecular Weight

No Min to No Max Apply

Available Range: 318 to 1877

11.9 Suche nach Chemikalien-Lieferanten

Searching for...

- All
- Substances
- Reactions
- References
- Suppliers**

Suppliers

Search by Substance Name and/or CAS RN. [Learn More](#)

303-47-9

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

Supplier	Substance	Purity	Purchasing Details	Availability
Merck KGaA Darmstadt, Germany ALDRICH United States	303-47-9 Ochratoxin A from Aspergillus ochraceus		Order From Supplier 1 mg 5 mg 25 mg Bulk	Maintained in stock
1717 CheMall Product List United States	303-47-9 OCHRATOXIN A	95-98%	10mg, USD 550.00 25mg, USD 1340.63 50mg, USD 2612.50	Synthesis on demand Ships within 8 weeks
5A Pharmatech Product List China	303-47-9 OCHRATOXIN A	95-98%	5g, USD 300	Typically in stock
A Chemtek Product List United States	303-47-9 Ochratoxin A	95-98%	Product Information	Limited or intermittent availability Ships within 2 weeks
abcr GmbH Product List Germany	303-47-9 Ochratoxin A		Product Information	
Angene Product List China	303-47-9 Ochratoxin A	95-98%	Product Information 1mg, USD 245 2mg, USD 275 5mg, USD 380 10mg, USD 545 25mg, USD 1025	Typically in stock Ships within 2 weeks

Außerdem findet man nach allen Substanzsuchen sowohl oben im Menü den Button „Suppliers“ als auch bei jeder einzelnen kommerziell verfügbaren Verbindung der Trefferliste.

Substances (1)

1 Selected

303-47-9
View Detail

O=C1C(=C2C(=C1)C(=C(C=C2)O)O)C(=O)N1C=CC=C(C=C1)O
Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)

C₂₀H₁₆ClNO₆
Ochratoxin A

5,812 References

Get Suppliers for Substances

All Results Selected Results

Condition

Boiling Point (Experimental)

Boiling Point (Predicted) 632.4±55.0 °C Press: 760 Torr

Density (Predicted) 1.425±0.06 g/cm³ Temp: 20 °C Press: 760 Torr

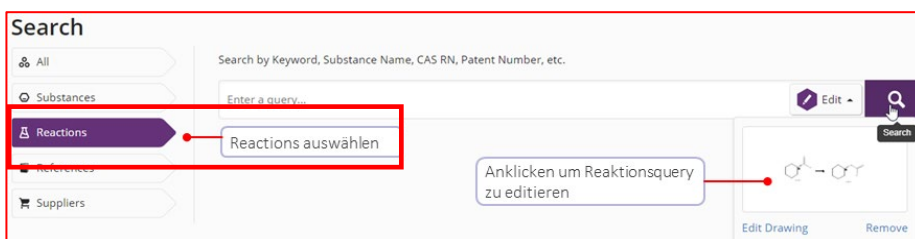
pKa (Predicted) 3.29±0.10 Most Acidic Temp: 25 °C

Experimental Properties | Spectra

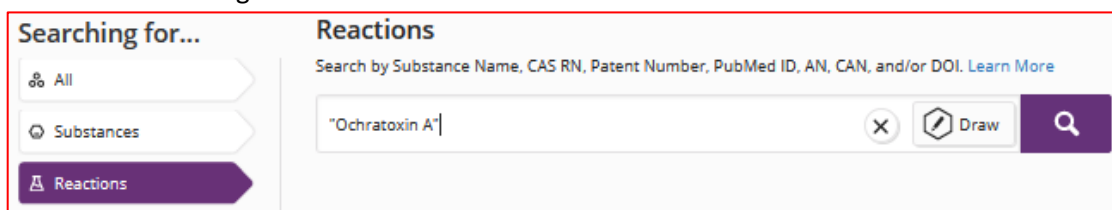
12. Suche nach Reaktionen

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

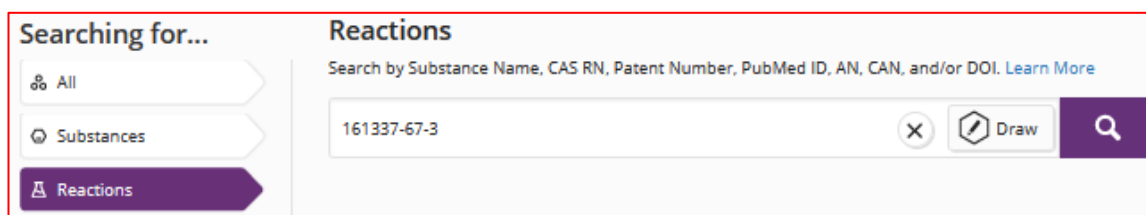
- Reaktionssuchen können mit Hilfe von Substanznamen, CAS-Registry-Nummern, Dokument-Identifikatoren, Strukturen und Reaktionsschemata erstellt werden.



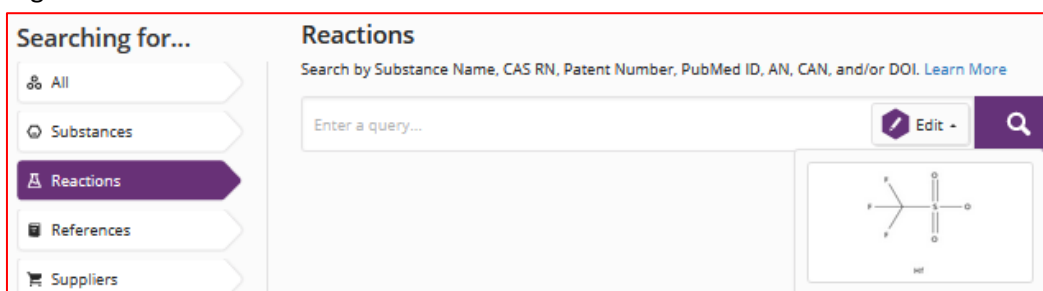
- Suche mit einem Substanznamen → findet Reaktionen, bei denen exakt diese Substanz als Edukt bzw. Produkt beteiligt ist



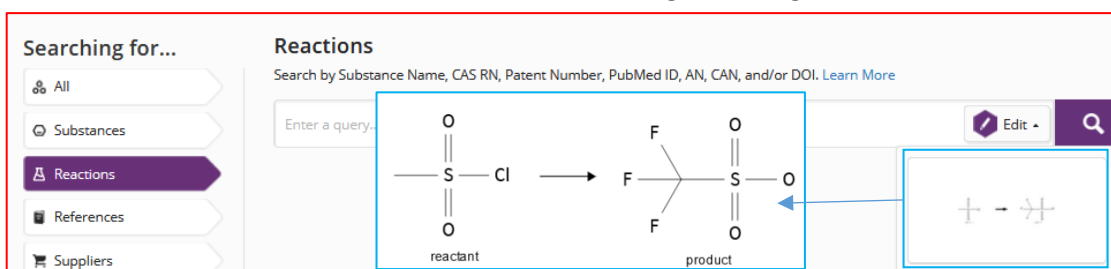
- Suche mit einer CAS-Registry-Nummer → findet Reaktionen, bei denen exakt diese Substanz als Edukt bzw. Produkt beteiligt ist



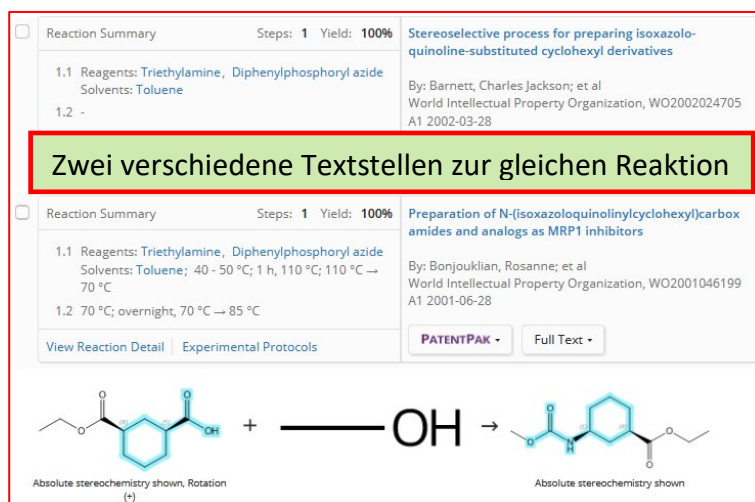
- Suche mit einer gezeichneten Struktur → findet sowohl Reaktionen, die exakt diese Substanz als Edukt oder Produkt enthalten sowie Reaktionen, bei denen die gezeichnete Struktur ein Fragment von Edukt bzw. Produkt ist



- Suche der Reaktion von Edukt A zu Produkt B → nur möglich über gezeichnetes Reaktionsschema

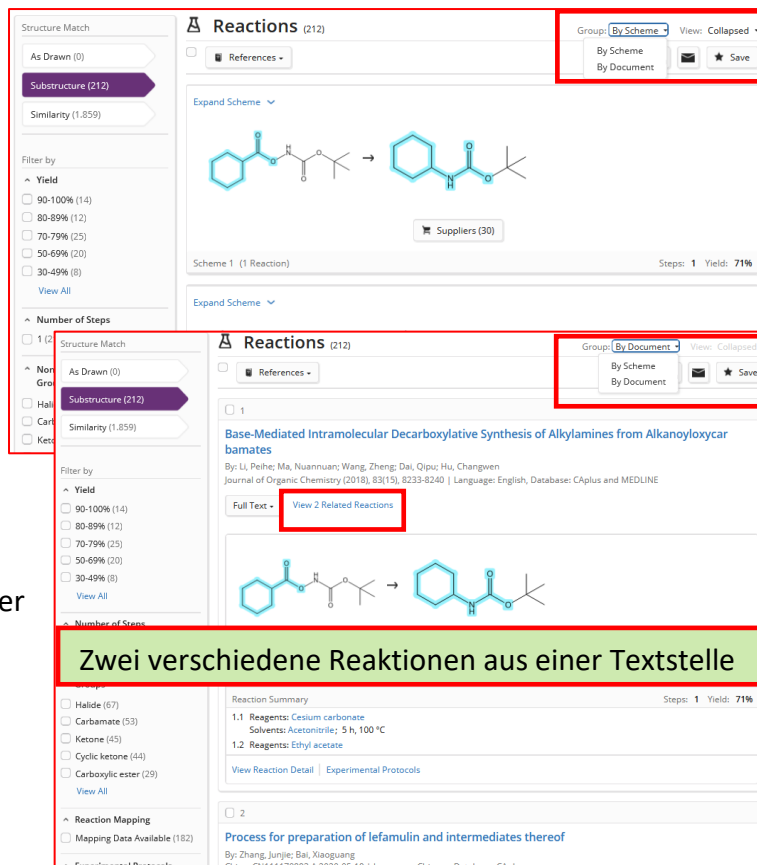


- Voreingestellt ist die Gruppierung der Treffer nach Reaktionsschemata (Schemes). Das entspricht **Fall a**. Dabei sind Reaktionen mit identischen Edukten und Produkten, die von verschiedenen Autoren beschrieben werden, in einem „Schema“ (einer Gruppe) zusammen aufgelistet.



Innerhalb eines Schemas erfolgt die Sortierung der Reaktionen nach fallender Ausbeute.

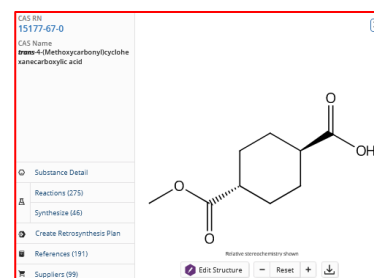
- Für eine schnelle Übersicht können die Reaktionsdetails und die Bibliographischen Informationen (Titel, Autoren, Quelle) ausgeblendet werden (**View**: Collapsed)
- Bei der Gruppierung nach Dokumenten (das entspricht **Fall b**) werden alle Reaktionen, die in einer Veröffentlichung beschrieben werden zusammen dargestellt, unabhängig von verwendeten Ausgangsstoffen und synthetisierten Reaktionsprodukten.



Beispiel: Treffer Nr. 14 in der nach Reaktionschemata geordneten Trefferliste

The screenshot displays a search interface for chemical reactions. On the left, there are filters for 'Structure Match' (As Drawn, Substructure, Similarity) and 'Filter by' (Yield, Number of Steps, Non-Participating Functional Groups, Reaction Mapping). The main area shows 'Scheme 14 (4 Reactions)' with three reaction summaries. Annotations with red boxes and arrows point to specific features: 'Reaktionen nach Strukturmatch' points to the 'Substructure (212)' filter; 'Ausbeute für angezeigte Reaktionen' points to the 'Yield: 39-67%' text; 'Substanzinformationen anzeigen' points to the 'Suppliers (103)' button; 'Literatur-Referenz anzeigen' points to the patent information; 'Substanzeintrag anzeigen' points to the reagents list; 'Reaktionsdetails anzeigen' points to the 'View Reaction Detail' button; 'Alle Reaktionsübersichten dieses Schemas anzeigen' points to the 'View All Reaction Summaries' button; and 'Filtern der Reaktionsergebnisse' points to the filter sidebar.

- Dieser Treffer enthält vier Textstellennachweise (Patente) zu einer Reaktion. Drei davon werden mit einer Kurzzusammenfassung zu Reaktionsbedingungen, Lösungsmitteln und Reaktanden angezeigt, die vierte wird mit „**View all Reaction Summaries**“ aufgeklappt.
- Einen ausführlicheren Blick auf die jeweiligen Besonderheiten der Reaktion in den einzelnen Textstellen bekommt man nach Anklicken von „**View Reaction Details**“ (s. nächste Seite, Pkt. 12.3)
- Mit Klick auf einen Substanznamen bzw. auf eine Strukturformel öffnet sich ein Fenster, über das man sich weitere Informationen zu dieser chemischen Verbindung anzeigen lassen kann.
- Lieferanten (**Suppliers**) für die jeweiligen Ausgangsstoffe lassen sich bequem per Klick anzeigen (s. Pkt. 11.9).
- Um sich Abstract, Verschlagwortung sowie weitere Reaktionen und weitere Substanzen der jeweiligen **Literatur-Referenz** ansehen zu können, klickt man per Rechts-Klick mit der Maus auf den entsprechenden Titel (Ansehen in neuem Tab möglich).
- Mit den Filtermöglichkeiten der linken Leiste lassen sich große Treffermengen effektiv einschränken. (s. Pkt. 12.4)



12.3 Reaktionsdetails

Nach Anklicken von „**View Reaction Details**“ werden detaillierte Information (Lösungsmittel, Katalysatoren, Reagenzien, Reaktionsbedingungen) angezeigt, die direkt aus der Publikation oder deren Supplements entnommen wurden.

Steps: 1
Yield: 85%

Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)

[Stage 2]

Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)

Suppliers (38)

Suppliers (126)

Supplier (1)

Die alternativen Schritte sind die jeweils anderen Reaktionen eines Schemas.

Alternative Schritte anzeigen

Alternative Steps (5)

Stage	Reagents	Catalysts	Solvents	Conditions
1	Triethylamine Diphenylphosphoryl azide	-	Toluene	2 h, reflux; reflux → 60 °C
2	-	-	-	overnight, 60 °C → 80 °C

CAS Reaction Number: 31-451-CAS-15598720

Literaturreferenz

Development of a Scalable Synthesis of an Azindolyl-Pyrimidine Inhibitor of Influenza Virus Replication

By: Liang, Jianglin; et al

View All

Organic Process Research & Development (2016), 20(5), 965-969

Alle Autoren anzeigen

Full Text

Oft wird auch die vollständige experimentelle Vorgehensweise (Experimental Protocols) beschrieben. Sowohl mit „MethodsNow: Synthesis“ als auch mit „Experimental Procedure“ erhalten Sie dabei nachvollziehbare Präparationsvorschriften, die ein Nachlesen in der jeweiligen Originalpublikation unnötig machen. (s. auch Pkt. 13.2)

Experimental Protocols

MethodsNow™ zeigt experimentelle Syntheseprotokolle

Products: Ethyl (1R,3S)-3-[(benzyloxycarbonyl)amino]cyclohexanecarboxylate, Yield: 85%

Reactants: 1,3-Cyclohexanedicarboxylic acid, 1-ethyl ester, (1R,3S)-
Benzyl alcohol

Reagents: Triethylamine
Diphenylphosphoryl azide

Solvents: Toluene

Procedure

1. Add diphenylphosphoryl azide (DPPA) (166 mL, 769 mmol) and triethylamine (107 mL, 769 mmol) to (1S, 3R) -3-ethoxycarbonylcyclohexanecarboxylic acid (140 g, 700 mmol) in toluene (1.4 L).
2. Reflux the mixture for 2 h under N₂.
3. Cool the reaction mixture to 60°C and add benzyl alcohol (87 mL, 839 mmol) in one portion.
4. Heat the mixture to 80°C overnight.
5. Add EtOAc (1 L) and water (1.5 L) after cooling to room temperature.

Characterization Data

Charakterisierende Daten

Ethyl (1R,3S)-3-[(benzyloxycarbonyl)amino]cyclohexanecarboxylate

Proton NMR Spectrum	(300 MHz, CDCl ₃) 6.748-7.30 (m, 5H), 5.11 (s, 2H), 4.67 (s, 1H), 4.13 (q, J = 7.1 Hz, 2H), 3.55 (s, 1H), 2.42 (t, J = 11.8 Hz, 1H), 2.28 (d, J = 12.6 Hz, 1H), 2.10-1.79 (m, 3H), 1.50-1.19 (m, 6H), 1.19-1.00 (m, 1H).
Optical Rotatory Power	≈ -33.3° (c = 1 in DCM).
HRMS	(ESI) [M + H] ⁺ calculated for C ₁₇ H ₂₄ NO ₄ 306.1700, found 306.1700
State	sticky solid

13. Wie finde ich alle Synthesen einer Substanz?

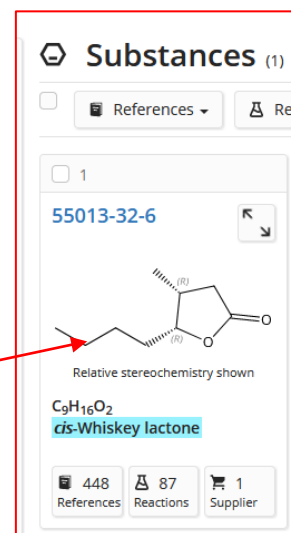
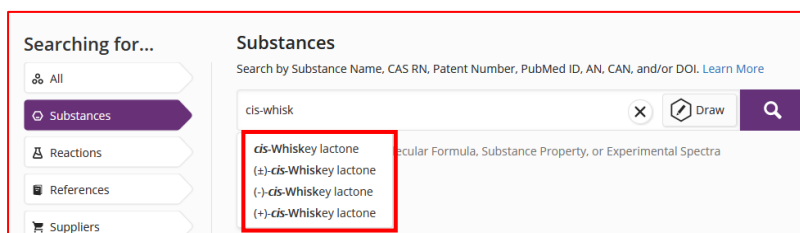
Möchte man eine möglichst **vollständige Auflistung** der in der Literatur bzw. in Patenten beschriebenen Präparationsvorschriften einer chemischen Substanz, sollte man beide Suchvarianten, die hier ausführlich beschrieben werden, durchführen und deren Ergebnisse nach Speicherung der einzelnen Treffersets (s. Pkt. 7.2) mit „Combine“ zusammenführen (s. Pkt. 7.1).

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

Als Beispiel für das Vorgehen soll eine Suche nach Synthesen von *cis-Whisky-Lacton* dienen.

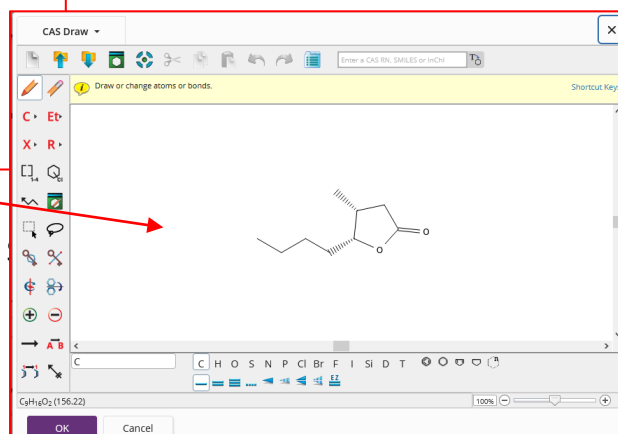
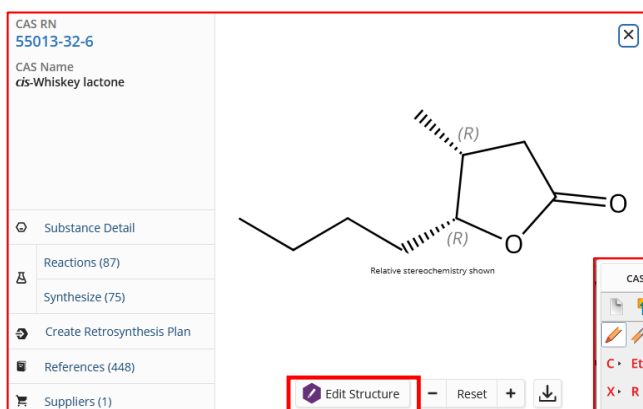
13.1 Wie führe ich die Substanzsuche dazu durch?

Wie im Punkt 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:

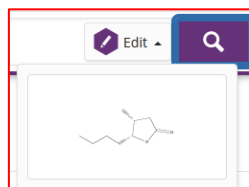


Um auch die anderen *cis*-Isomere in die Suche einzubeziehen, sollte sich aus der Trefferliste heraus eine Struktursuche anschließen.

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



Mit Klick auf „OK“ wird die Struktur vom Zeichenbrett in die



Ein Klick auf die Lupe startet die Suche.

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

Davon werden zunächst nur die 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.

Structure Match

As Drawn (12)

Substructure (50K)

Similarity (8.940)

Analyze Structure Precision

ChemScape Analysis

Visually explore structure similarity with a powerful new tool.

[Learn more about ChemScape.](#)

Create ChemScape Analysis

Filter by

Commercial Availability

Reaction Role

Reference Role

Stereochemistry

☒ Absolute Stereo Match (2)

☒ Absolute Stereo Mirror Image (1)

☒ Relative Stereo Match (1)

☐ Stereo that Doesn't Match Query (4)

☐ No Stereo in Answer Structure (4)

Number of Components

Substances (4)

Sort: Relevance View: Partial

References Reactions Suppliers

1 55013-32-6

Relative stereochemistry shown

$C_9H_{16}O_2$

cis-Whiskey lactone

448 References 87 Reactions 1 Supplier

2 80041-00-5

Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)

$C_9H_{16}O_2$

(-)-cis-Whiskey lactone

52 References 121 Reactions 1 Supplier

3 105015-53-0

Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)

$C_9H_{16}O_2$

(+)-cis-Whiskey lactone

26 References 70 Reactions 3 Suppliers

4 250686-70-5

Absolute stereochemistry shown

$C_9H_{12}D_4O_2$

2(3H)-Furanone-4,5-d₂ 5-(butyl-1,1-d₂) dihydro-4-methyl-, (4R,5R)-

1 Reference 0 Reactions 0 Suppliers

1 von 2 Übereinstimmungen

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

Structure Match

As Drawn (12)

Substructure (50K)

Similarity (8.940)

Analyze Structure Precision

ChemScape Analysis

Visually explore structure similarity with a powerful new tool.

[Learn more about ChemScape.](#)

Create ChemScape Analysis

Filter by

Commercial Availability

Reaction Role

Reference Role

Stereochemistry

☒ Absolute Stereo Match (2)

☒ Absolute Stereo Mirror Image (1)

☒ Relative Stereo Match (1)

☐ Stereo that Doesn't Match Query (4)

☒ No Stereo in Answer Structure (4)

Number of Components

Substances (8)

Sort: Relevance View: Partial

4 Selected References Reactions Suppliers

1 55013-32-6

Relative stereochemistry shown

$C_9H_{16}O_2$

cis-Whiskey lactone

448 References 87 Reactions 1 Supplier

2 39212-23-2

$C_9H_{16}O_2$

Whiskey lactone

224 References 16 Reactions 49 Suppliers

3 80041-00-5

Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)

$C_9H_{16}O_2$

(-)-cis-Whiskey lactone

52 References 121 Reactions 1 Supplier

4 105015-53-0

Absolute stereochemistry shown, Rotation (+)

$C_9H_{16}O_2$

(+)-cis-Whiskey lactone

26 References 70 Reactions 3 Suppliers

5 250686-70-5

Absolute stereochemistry shown

$C_9H_{12}D_4O_2$

2(3H)-Furanone-4,5-d₂ 5-(butyl-1,1-d₂) dihydro-4-methyl-, (4R,5R)-

1 Reference 0 Reactions 0 Suppliers

6 1394230-49-9

$C_9H_{10}D_6O_2$

2(3H)-Furanone-3,3,4,5-d₄ 5-(butyl-1,1-d₂) dihydro-4-methyl-

0 References 0 Reactions 0 Suppliers

Jetzt können auf zwei verschiedenen Wegen die Präparationsvorschriften gesucht werden:

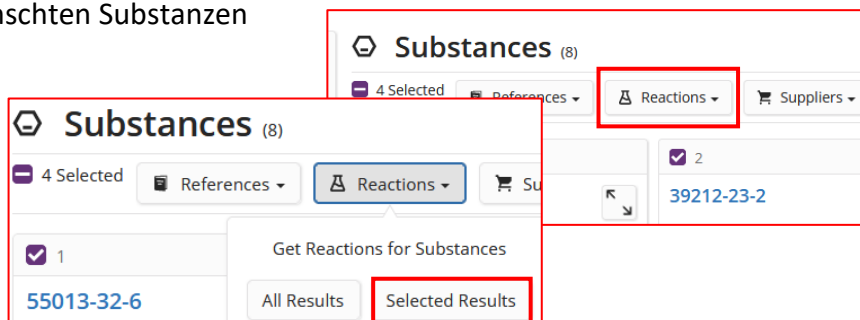
- a) über **Reactions** (s. Pkt. 13.1.2), liefert u.a. komplette Vorschriften
- b) über **References** (s. Pkt. 13.1.1), findet mehr Textstellen mit Vorschriften, aber als Abstract. Für die vollständige Vorschrift muss im Originaltext nachgelesen werden.

Die Treffermengen beider Varianten sind nicht identisch, da sie in verschiedenen Datenbankteilen generiert werden. Braucht man alle Synthesevorschriften, müssen die Ergebnisse beider Teilsuchen über Combine zusammengefasst werden (s. Pkt. 7.1)

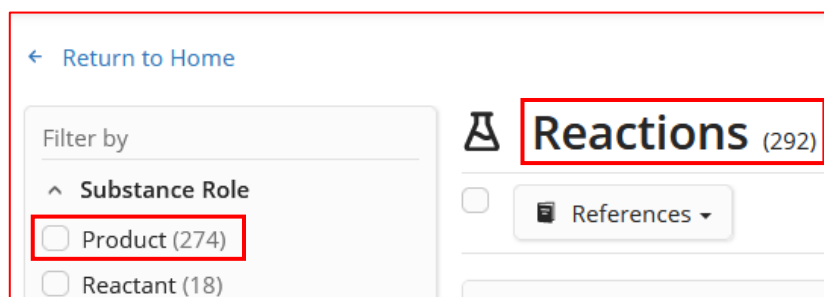
13.2 Ausgabe von vollständigen Synthesevorschriften über „Reactions“

Es werden die vier gewünschten Substanzen mit Häkchen ausgewählt.

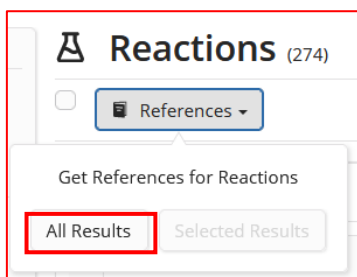
Über „Reactions“ (Selected Results) kommt man zu allen verzeichneten Reaktionen dieser vier Verbindungen.



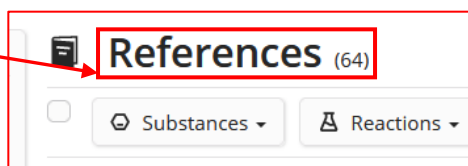
Über „Filter by Substance Role“ → Product kann auf die Synthesen der cis-Whisky-Lactone eingeschränkt werden.



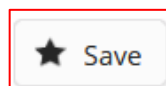
Von den insgesamt 292 Reaktionen sind 274 Synthesen der gesuchten Lactone, bei den restlichen 18 Reaktionen sind die Lactone als Reaktant beteiligt.



Diese 292 Reaktionen sind nicht in 292 Textstellen/Patenten verzeichnet!
In einer Veröffentlichung können durchaus auch mehrere unterschiedliche Synthesen dieser cis-Whisky-Lactone beschrieben werden. Tatsächlich sind diese 292 Reaktionen in 64 Publikationen veröffentlicht worden.



Diese 64 **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 274 Treffer der obigen Reaktionsuche über die **Filterfunktion „Filter by → Experimental Protocols“** eingeschränkt werden.

Filter by

- ▼ Substance Role
- ▼ Yield
- ▼ Number of Steps
- ▼ Non-Participating Functional Groups
- ▲ Experimental Protocols
 - ☐ MethodsNow: Synthesis (60)
 - ☐ Experimental Procedure (50)

Wählen Sie dabei sowohl „MethodsNow: Synthesis“ als auch „Experimental Procedure“ aus.

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

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

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

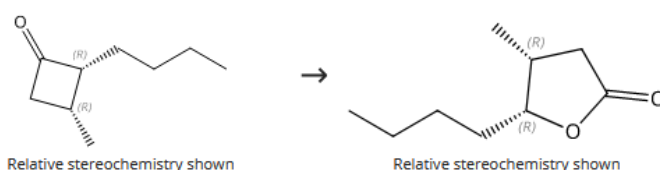
Für den Zugang zu den Vorschriften wird unterhalb der ausgesuchten Reaktion auf „Experimental Protocols“ geklickt:

[View Reaction Detail](#) | [Experimental Protocols](#)

Applications of 1-Alkenyl-1,1-Heterobimetallics in the Stereoselective Synthesis of Cyclopropylboronate Esters, Trisubstituted Cyclopropanols and 2,3-Disubstituted Cyclobutanones

By: Hussain, Mahmud M.; Li, Hongmei; Hussain, Nusrah; Urena, Mercedes; Carroll, Patrick J.; et al
Journal of the American Chemical Society (2009), 131(18), 6516-6524 | Language: English, Database: CAPLUS and MEDLINE

Full Text ▼



Suppliers (2)

Supplier (1)

Reaction Summary

Steps: 1 Yield: 95%

1.1 Reagents: Sodium bicarbonate, *m*-Chloroperbenzoic acid
Solvents: Dichloromethane; 0 °C; 45 min, 0 °C

[View Reaction Detail](#) | [Experimental Protocols](#)

Experimental Protocols

MethodsNow™

Experimental Procedure

Products *cis*-Whiskey lactone, Yield: 95%Reactants *rel*-(2*R*,3*R*)-2-Butyl-3-methylcyclobutanoneReagents 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

MethodsNow enthält eine exklusiv für den SciFinderⁿ erarbeitete, ausführliche Präparationsvorschrift und außerdem Spektren-Daten zur Charakterisierung des Reaktionsproduktes.

Characterization Data

^ *cis*-Whiskey lactoneProton NMR Spectrum CDCl₃, 360 MHz of the mixture is provided in Supporting Information Part 2.Carbon-13 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 Absorption Spectrum Neat 2960, 2934, 2874, 1780, 1461, 1212, 1172 cm⁻¹.

Experimental Protocols

MethodsNow™

Experimental Procedure



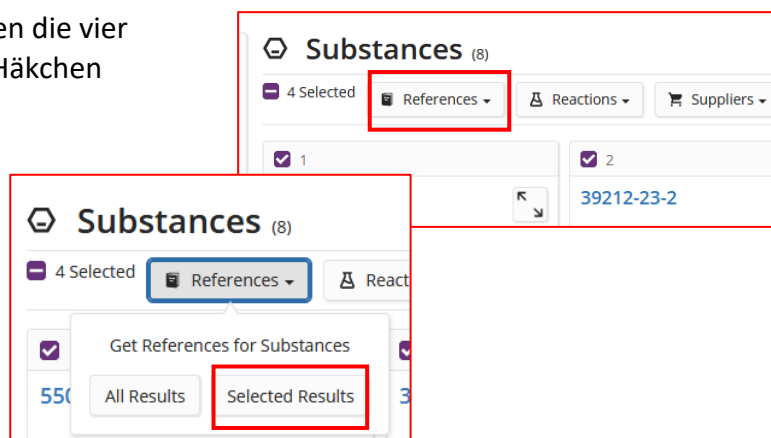
General/Typical Procedure: **General Procedure G: Synthesis of γ-Butyrolactones.** To a solution of cyclobutanone (0.25 mmol) in 1.5 mL of CH₂Cl₂ at 0°C was added NaHCO₃ (27.7 mg, 0.33 mmol). To this mixture was added dropwise a solution of *m*-CPBA (77%, 85.2 mg, 0.49 mmol) in 1 mL of CH₂Cl₂, and the 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 in den „Supporting Informations“ des Originalartikels von den Autoren veröffentlicht wurde.

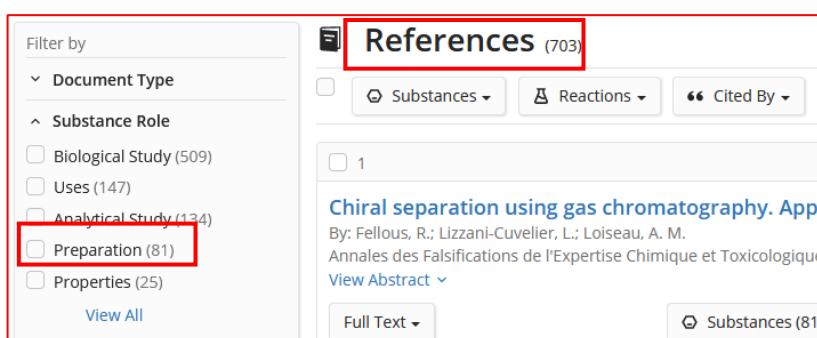
13.3 Ausgabe der Nachweise zu Synthesen über „References“

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 kann auf die Literaturnachweise und Patente zu Synthesen der cis-Whisky-Lactone eingeschränkt werden.

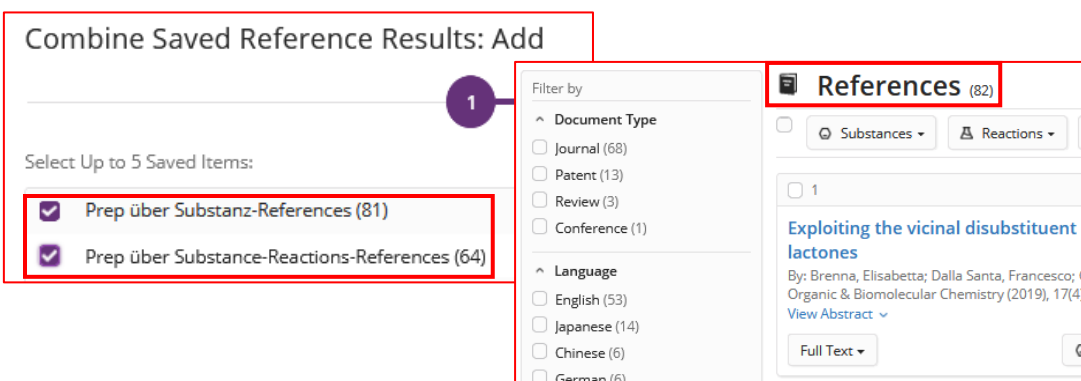


Von den insgesamt 703 Treffern enthalten 81 Nachweise Informationen zur Präparation der gesuchten cis-Lactone.

Diese sollten ebenfalls mit  Save gespeichert werden.



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 82 Treffer.



Reference Detail (18 of 81)

Substances (12) Reactions (14) Cited By (2) Citation Map

Journal
Source
Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry
Volume: 57
Issue: 3
Pages: 515-16
Journal
1993
DOI:
10.1271/bbb.57.515

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

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

Publisher
Unknown

Language
English

Synthesis of (±)-cis-whiskey lactone

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). Debenzylation-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: whiskey lactone isomer total synthesis; cyclohexadiene monoxide conversion whiskey lactone isomer

Full Text

Expand All | Collapse All

Substances

Substances (12)

55013-32-6

C₉H₁₆O₂
cis-Whiskey lactone
Role: Synthetic Preparation, Preparation

150552-39-9

C₁₄H₁₈O₅
2-(3H)-Furanone, dihydro-4-methyl-5-[2-[(4-methylphenyl)sulfonyl]oxy]ethyl-, cis-
Role: Reactant, Synthetic Preparation, Reactant or Reagent, Preparation

150552-38-8

C₇H₁₂O₃
2-(3H)-Furanone, dihydro-5-(2-hydroxyethyl)-4-methyl-, cis-
Role: Reactant, Synthetic Preparation, Reactant or Reagent, Preparation

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-Whiskey 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

Whiskey 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 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*-whiskey lactones has been confirmed to be (3S,4R) and (3S,4S), 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*-whiskey 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 benzoate **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 of **5** was hydrolyzed with sodium hydroxide and then acidified to give γ-lactonic 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 48.1% yield. The corresponding tosylate **7b** was derived from **7a** in the usual manner. Finally, tosylate **7b** was treated with lithium diethylcuprate to give (±)-*cis*-whiskey lactone (**1**) in a 68.3% yield.

In summary, we prepared (±)-*cis*-whiskey lactone (**1**) stereoselectively starting from 1,4-cyclohexadiene (**2**). The overall yield was 10.7% in 7 steps from **2**.

over MgSO₄ 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_D²⁵ 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 C₇H₁₁O, 111.0820.

(1S*,2S*)-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 washed with a 1 N HCl solution and saturated NaHCO₃ solution, dried (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 C₁₄H₁₆O₃: C, 59.99; H, 5.75%.

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.

(1S*,2S*)-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 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

14. Retrosyntheseplanung

- Das CAS-Retrosynthese-Tool in SciFinderⁿ kann Ihnen den Großteil der Recherche-Arbeit für die Retrosyntheseplanung abnehmen.
- Die besten in der Literatur und in Patenten beschriebenen Synthesewege werden in einem übersichtlichen Schema zusammengefasst und nach Priorität geordnet.
- Die erstellten Retrosynthesen können schnell und effektiv nach Alternativen und Referenzen ausgewertet werden.
- Lieferanten für Edukte sind ebenfalls übersichtlich präsentiert.
- Die erstellten Retrosynthesepläne können gespeichert und heruntergeladen bzw. geteilt werden, um in der Arbeitsgruppe besprochen zu werden.

14.1 Wie kann ich einen Retrosyntheseplan erstellen?

Es existieren zwei Optionen, um den Retrosyntheseplaner im SciFinderⁿ zu öffnen.

- 1) „Reaction“-Suchmodus auswählen, Struktur zeichnen (Zielsubstanz muss dabei mindestens fünf Nicht-Wasserstoffatome beinhalten) und anschließend „Create Retrosynthesis Plan“ vom Edit-Button ausführen.

- 2) Struktur-Kontextmenü öffnen (durch z.B. Klicken auf die Struktur einer Verbindung) und „Create Retrosynthesis Plan“ ausführen.

-
- Optionen öffnen
- Retrosynthesis Edit Plan Options
- Powered by ChemPlanner
- Step Key
- Experimental
- Predicted ON
- Plan Information
- Estimated Yield: 13%
Overall Price: \$39,831.86
(USD per 100 grams)
- Commercially Available:
E, F, G, H, I
- Rote Linien markieren exp. Schritt, d.h. in der Literatur beschriebene Reaktion
- Grüne gepunktete Linien zeigen prädictiven Schritt
- 'Prädiktiv' ein- oder ausschalten
- Retrosyntheseschritte
- Alternative disconnections
- Suppliers (20)
- Suppliers (77)
- Suppliers (42)
- Suppliers (72)
- Reset

14.3 Kann ich alternative Schritte in die Synthese einbauen?

- Unter dem Reiter „Steps“ findet man alternative Syntheseschritte „Alternative Steps“ für jede Teilreaktion. Diese Alternativen sind entweder ebenfalls aus der experimentellen Schriften entnommen oder sie werden z.B. aus analogen Vorschriften abgeleitet.
- Mit „Evidence“ werden im SciFinderⁿ enthaltene Reaktionen bezeichnet, die in der Literatur dokumentiert sind. Diese sind unter dem Evidence-Link über ① „Steps“ oder ② „Alternative Steps“ abrufbar.

The screenshot displays the SciFinder interface. On the left, the 'Overview' tab is active, showing a list of reaction steps (A → B + C, B → D, C → E + F, D → G + H) with associated evidence and alternative steps. A red box highlights the 'Evidence (1,564)' and 'Alternative Steps (168)' for step A → B + C. A callout box points to the 'Alternative Steps' section, stating: 'Alternative auswählen – der Plan wird entsprechend umgestellt'. On the right, the 'Reactions' tab is active, showing a detailed view of a reaction scheme. A red box highlights the 'Evidence (1,564)' link, and a callout box points to it, stating: 'Evidence auswählen – der Plan wird entsprechend umgestellt'. The interface also shows various filters like 'Yield', 'Number of Steps', and 'Non-Participating Functional Groups'.

14.4 Optionen

Die Optionen zur Erstellung des Retrosyntheseplanes können mit „Plan Options“ geändert werden, um

- die Anzahl der Retrosyntheseschritte zu verändern: synthetic depth
- mehrere Bindungen in der gesamten Retrosyntheseroute zu schützen
- Bindungen zu markieren, die im ersten Syntheseschritt gebrochen werden sollen

The screenshot shows the 'Plan Options' interface of ChemPlanner. It includes sections for 'Select Synthetic Depth' (with options 1, 2, 3, 4), 'Set Rules Supporting Predicted Reactions' (with options Common, Uncommon, Rare), and 'Break and Protect Bonds'. A red box highlights the 'Break Bond' button, and a callout box points to it, stating: 'Zuerst „Break Bond“ anklicken, danach die entsprechende Bindung'. Another red box highlights the 'Protect Bond' button, and a callout box points to it, stating: 'Zuerst „Protect Bond“ anklicken, danach die entsprechende(n) Bindung(en)'. A third red box highlights the 'Uncommon' or 'Rare rules' option, and a callout box points to it, stating: '„Uncommon“ oder „rare rules“ auswählen, die weniger dokumentierte Reaktionen erfordern'. A fourth red box highlights the 'Feedback' button, and a callout box points to it, stating: 'CAS kontaktieren bei Problemen oder Vorschlägen'. The interface also includes a 'Create Retrosynthesis Plan' button and a 'Powered by ChemPlanner®' logo.

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

15.1 Einfache Suche

In SciFinderⁿ kann man auch nach Biosequenzen suchen.

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

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. Bei „Limit Total Sequence Results to“ gibt man 10-20,000 ein, voreingestellt ist 100.

5. Dann startet man die Suche mit Klick auf den Button „**Start Biosequence Search**“.

Man kommt zurück zur Homepage und kann sich die Ergebnisse ansehen.

Beispiel:

SCIFINDERⁿ
A CAS SOLUTION

★ Saved ⌚ History 👤 Account

Searching for...

- All
- Substances
- Reactions
- References
- Suppliers
- Biosequences**

Biosequences

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

BLAST Upload Sequence Clear Search

```
> 1c1|NM_000492.4_cds_NP_000483.3_1 [gene=CFTR]
[db_xref=CCDS:CCDS773.1] [protein=cystic fibrosis transmembrane
conductance regulator] [protein_id=NP_000483.3] [location=71..4513]
[gbkey=CDS]
ATGCAGAGGTGCGCTCTGGAAGGCGCAGCGTTGTCTCCAACTTTTTTCAGCTGGACGACCAAT
TTTGAGGAAAGGATACAGACAGCGCCTGGAATTGTGAGACATATACCAATCCCTTCTGTTGATTCTG
CTGACCAATCTATCTGAAAAATTGGAAGAGAAATGGGATAGAGAGCTGGCTTCAAAGAAAAATCCTAAA
CTCATTAAATGCGCTTCGGCGATGTTTTTTCTGGAGATTATGTTCTATGGAATCTTTTATATTAGG
GGAAGTCAACCAAGCAGTACAGCCTCTCTTACTGGGAAGATCATAGCTTCTATGACCGGATAACA
AGGAGGAACGCTCTATCGGATTTATCTAGGCATAGGCTTATGCTTCTCTTTATTGTGAGGACACTG
CTCTACACCCAGCCATTTTTGGCCTTCATCACATTGGAATGCAGATGAGAATAGCTATGTTAGTTT
GATTTATAAGAAGACTTTAAAGCTGTCAAGCCGTGTTCTAGATAAATAAGTATTGGACAACTTGTTA
GTCTCCTTTCCAAACACCTGAACAAATTTGATGAGGACTTGCAATTGGCACATTTCTGTGGATCGCT
CCTTTGCAAGTGGCACTCTCATGGGCTAATCTGGGAGTTGTTACAGGCGTCTGCTTCTGTGGACT
```

Sequence Type:
Nucleotide Protein

Search Within:
☒ Nucleotides ☐ Proteins

Limit Total Sequence Results to:
10

Start Biosequence Search

Advanced Biosequence Search >

Recent Search History

January 25, 2021

1:02 PM

🔍 Biosequences

Sequence Type: Nucleotide
Search Within: Nucleotides
BLAST Algorithm: BLASTn
Sequence Identity: 80%
Query Coverage: 90%

> 1c1|NM_000492.4_cds_NP_000483.3_1 [gene=CFTR] ...
ATGCAGAGGTGCGCTCTGGAAGGCGCAGCGTTGTCTCCAACTTTTTT
TCAGCTGGACGACCAATTTTGAGGAAAGGATACAGACAGCGCCTGGA
ATTGTGAGACATATACCAATCCCTTCTGTTGATTCTGCTGACAACTA
TCTGAAAAATTGGAAGAGAAATGGGATAGAGAGCTGGCTTCAAAGAAA...

View Results

Edit Options

Searching...

Results will expire on Feb 24, 2021.

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

Wichtig! 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

January 25, 2021

1:02 PM

🔍 Biosequences

Sequence Type: Nucleotide
Search Within: Nucleotides
BLAST Algorithm: BLASTn
Sequence Identity: 80%
Query Coverage: 90%

> 1c1|NM_000492.4_cds_NP_000483.3_1 [gene=CFTR] ...
ATGCAGAGGTGCGCTCTGGAAGGCGCAGCGTTGTCTCCAACTTTTTT
TCAGCTGGACGACCAATTTTGAGGAAAGGATACAGACAGCGCCTGGA
ATTGTGAGACATATACCAATCCCTTCTGTTGATTCTGCTGACAACTA
TCTGAAAAATTGGAAGAGAAATGGGATAGAGAGCTGGCTTCAAAGAAA...

View Results

Edit Search

Complete

Results will expire on Feb 24, 2021.

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

SCIFINDERⁿ
A CAS SOLUTION

★ Saved ⌚ History 👤 Account

Searching for...

- All
- Substances
- Reactions
- References
- Suppliers
- Biosequences**

Biosequences

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

BLAST Upload Sequence Clear Search

```
> 1c1|NM_000492.4_cds_NP_000483.3_1 [gene=CFTR]
[db_xref=CCDS:CCDS5773.1] [protein=cystic fibrosis transmembrane
conductance regulator] [protein_id=NP_000483.3] [location=71..4513]
[gbkey=CDS]
ATGCAGAGGTGGCTCTGGAAAAGGCCAGGTTGTCTCCAACTTTTTTTCAGCTGGACCAACCAAT
TTTGAGGAAAGGATACAGACAGCGCTGGAATTGTCTAGACATATACCAATCCCTTCTGTGATTCTG
CTGACAACTATCTGAAAAATTGAAAAGAGAATGGGATAGAGAGCTGGCTTCAAAGAAAAATCCTAAA
CTCATTATGCCCTTCGGCGATGTTTTTCTGGAGATTATGTTCTATGGAATCTTTTATATTAGG
GGAAGTCACCAAGCAGTACAGCCTCTCTTACTGGGAAGAATCATAGCTTCCTATGACCCGGATAACA
AGGAGGAACGCTCTATCGCGATTTATCTAGGCATAGGCTTATGCCCTTCTTTATTGTGAGGACACTG
CTCTACACCCAGCCATTTTGGCCTTCATCACATTGGAATGCAGATGAGAATAGCTATGTTAGTTT
GATTTATAAGAAGACTTTAAAGCTGTCAAGCCGTGTTCTAGATAAAATAAGTATTGGACAACTGTTA
GTCTCCTTTCCAAACAACCTGAACAAATTGATGAAGGACTTGCAITGGCACATTTGCTGTGGATCGCT
CCTTTGCAAGTGGCACTCCTCATGGGGCTAATCTGGGAGTTGTTACAGGCGTCTGCCTTCTGTGGACT
```

Sequence Type: **Nucleotide** Protein

Search Within: **Nucleotides** Proteins

Limit Total Sequence Results to: 10

Start Biosequence Search

Advanced Biosequence Search Adjust Parameters for Short Sequences Reset All

Sequence Identity % Match with Gaps? ☐ Yes ☒ No Gap Costs

Query Coverage % Word Size Reward for Match, Penalty for Mismatch

BLAST Algorithm E-Value Exclude Low Complexity Regions

MegaBLAST
BLASTn
BLASTn-short

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

SCIFINDERⁿ
A CAS SOLUTION

Substances Enter a query... Draw Search ★ ⌚ 👤

[Return to Home](#)

Biosequences (10) View: Expanded

Query Details [> 1c1|NM_000492.4_cds_NP_000483.3_1 \[gene=CFTR\] \[db_xref=CCDS:CCDS5773.1\]...](#) [View More](#)

1 Sequence Identity: 100%

Query

Subject

[View More](#)

2 Sequence Identity: 100%

Query

Subject

[View More](#)

3 Sequence Identity: 100%

Query

Subject

BLAST Search Details

Sequence Type: Nucleotide
Search Within: Nucleotides
BLAST Algorithm: BLASTn
Sequence 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 to

Query Coverage % to

Subject Coverage % to

Ergebnisse mit Details:


Substances ▾

Draw
🔍
★
🕒
👤

[Return to Home](#)

BLAST Search Details

Sequence Type: Nucleotide
 Search Within: Nucleotides
 BLAST Algorithm: BLASTn
 Sequence 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

^ Sequence Identity %
 0 to 100

Biosequences (10)

View: Expanded ▾

Query Details > 1c1|NM_000492.4_cds_NP_000483.3_1 [gene=CFTR] [db_xref=CCDS:CCDS5773.1]... [View More](#)

1 Sequence Identity: 100%

Query 1 4,443

Subject 1 4,444

Matches: 4,443
Mismatches: 0

[View Less](#)

Alignment	Subject	References
Alignment Data BLAST Score: 8886 E-Value: 0		
Q	1	ATGCAGAGGT CGCCTCTGGA AAAGGOCAGC GTTGTCTOCA AACTTTTTTT CAGCTGGACC AGACCAATTT 70
S	1	ATGCAGAGGT CGCCTCTGGA AAAGGOCAGC GTTGTCTOCA AACTTTTTTT CAGCTGGACC AGACCAATTT 70
Q	71	TGAGGAAAGG ATACAGACAG CGCCTGGAAT TGTACAGCAT ATACCAATC CCTTCTGTTG ATTCTGCTGA 140
S	71	TGAGGAAAGG ATACAGACAG CGCCTGGAAT TGTACAGCAT ATACCAATC CCTTCTGTTG ATTCTGCTGA 140
Q	141	CAATCTATCT GAAAAATTGG AAAGAGAATG GGATAGAGAG CTGGCTTCAA AGAAAAATCC TAAACTCATT 210
S	141	CAATCTATCT GAAAAATTGG AAAGAGAATG GGATAGAGAG CTGGCTTCAA AGAAAAATCC TAAACTCATT 210

2 Sequence Identity: 100%

Query 1 4,443

Subject 1 6,132

Matches: 4,443
Mismatches: 0

[View Less](#)

Alignment	Subject	References
Alignment Data BLAST Score: 8886 E-Value: 0		
Q	1	ATGCAGAGGT CGCCTCTGGA AAAGGOCAGC GTTGTCTOCA AACTTTTTTT CAGCTGGACC AGACCAATTT 70
S	133	ATGCAGAGGT CGCCTCTGGA AAAGGOCAGC GTTGTCTOCA AACTTTTTTT CAGCTGGACC AGACCAATTT 202
Q	71	TGAGGAAAGG ATACAGACAG CGCCTGGAAT TGTACAGCAT ATACCAATC CCTTCTGTTG ATTCTGCTGA 140
S	203	TGAGGAAAGG ATACAGACAG CGCCTGGAAT TGTACAGCAT ATACCAATC CCTTCTGTTG ATTCTGCTGA 272
Q	141	CAATCTATCT GAAAAATTGG AAAGAGAATG GGATAGAGAG CTGGCTTCAA AGAAAAATCC TAAACTCATT 210
S	273	CAATCTATCT GAAAAATTGG AAAGAGAATG GGATAGAGAG CTGGCTTCAA AGAAAAATCC TAAACTCATT 342

3 Sequence Identity: 100%

Query 1 4,443

Subject 1 6,129

Matches: 4,443
Mismatches: 0

[View Less](#)

15.2 Erweiterte Suche nach Biosequenzen

Bei der erweiterten Suche 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

16. Patente im SciFinderⁿ und PatentPak

SciFinderⁿ enthält mehr als 14 Mio. Patente [aus der ganzen Welt](#) mit chemischen Inhalten (ab 1878). Neben Stoff- und Verfahrenspatenten sind auch Anwendungspatente (allgemeine Anwendungen, Diagnostika, Pharmazeutika usw.) suchbar.

Damit ermöglicht der SciFinderⁿ eine Vielzahl von **Patentrecherchen**:

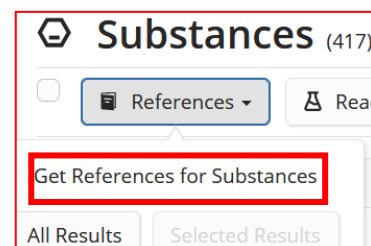
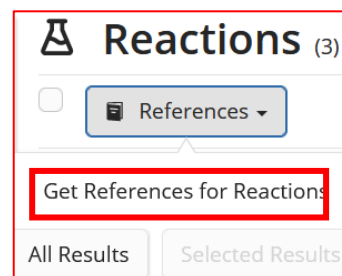
- zur Vermeidung kostspieliger Doppelentwicklungen (Recherche zum Stand der Technik)
- nach neuen Produkten und Verfahren
- nach potentiellen Kooperationspartnern und Lizenznehmern (Konkurrenz- und Marktbeobachtung durch Anmelderrecherche)
- zur Identifizierung neuer technologischer Trends
- zur Beurteilung der Patentfähigkeit einer Erfindung (Neuheitsrecherchen)
- zur Ermittlung störender Schutzrechte Dritter

Einzelheiten zur Patentsuche im SciFinderⁿ (Neuheitsrecherche, Stand der Technik, Konkurrenzanalyse u.a.) erläutert auch dieses [Webinar](#).

16.1 Wie finde ich allgemein Patente im SciFinderⁿ?

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

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



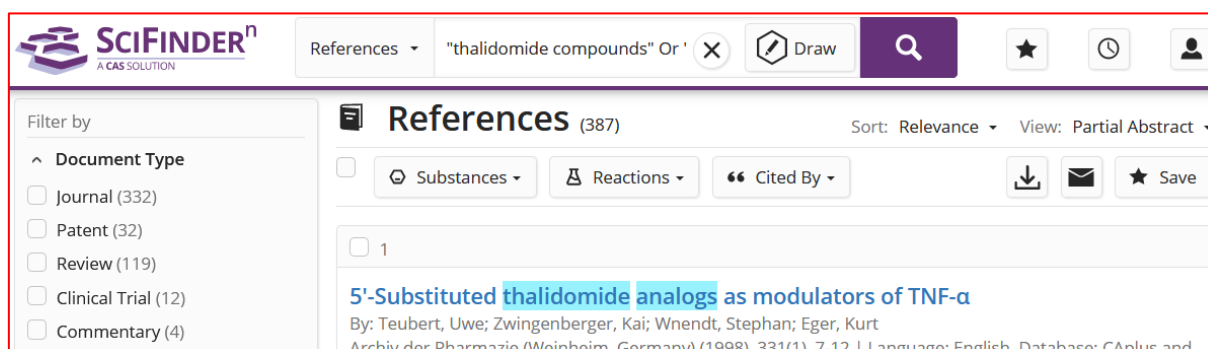
kann die Treffermenge über „**Filter Results**“ mit dem **Dokumententyp** „**Patents**“ eingeschränkt werden.

Hinweis: Die aus einer Substanzsuche resultierenden Patente müssen bei angestrebter Vollständigkeit unbedingt mit den Ergebnissen einer Markush-Struktursuche ergänzt werden (s. Pkt. 15.3).

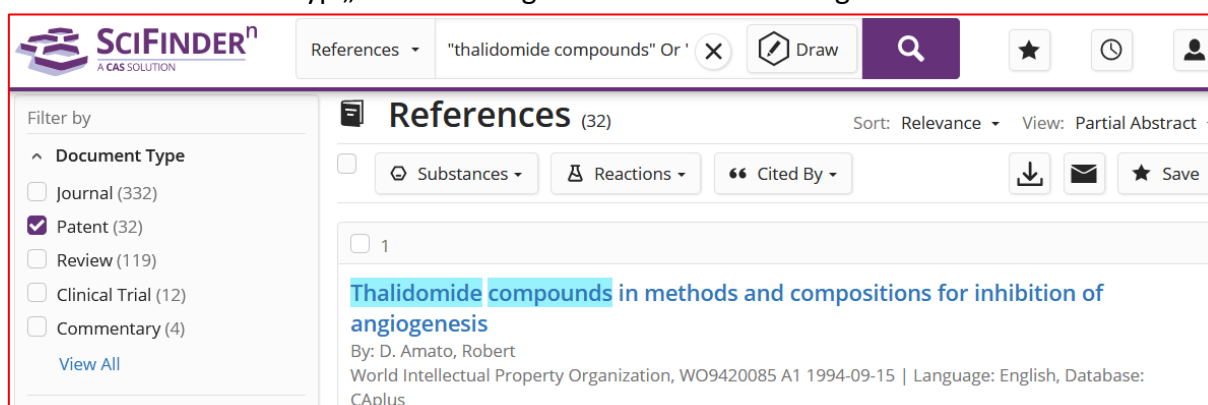
Beispiel: Einschränkung auf Patentdokumente

Gesamte Treffermenge bei thematischer Suche nach

"thalidomide compounds" OR "thalidomide analogs" → 387 Nachweise



Mit dem Dokumententyp „**Patente**“ eingeschränkte Treffermenge → 32 Patente



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

Searching for...
 All
 Substances
 Reactions
References

References
 Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, PubMed ID, AN, CAN, and/or DOI. [Learn More](#)

JP2015030844

Use [Advanced Search](#) for Author, Journal, or Organization

Treffer bei Suche in „References“

References JP2015030844

References (1) View: Partial Abstract

Substances Reactions Cited By

1

Compatibility modifiers for oils and fats
 By: Murai, Takuya; Miyamoto, Yoshiro
 Japan, **JP2015030844** A 2015-02-16 | Language: Japanese, Database: CPlus

Title compatibility modifiers, to be applied to oils and fats comprising (A) cocoa butter and/or tempering-type hard butter and (B) lauric acid-type oils and fats, comprise C₁₆₋₂₂ fatty acid polyglycerides with esterification degree $\geq 75\%$. Thus, polyglycerin stearate was added in a composition containing cocoa butter and hydrogenated palm kernel oil, showing suppressed decrease in m.p. and blooming.

PATENTPAK Full Text

Link zur vollständigen Patentschrift über PatentPak

Substances (10) Reactions (5) Cited By (0) Citation Map

Link zu den Substanzen bzw. Reaktionen

- 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 über „**PatentPak**“ (siehe nächste Seite).
- Auch bei „All“, „Substances“ bzw. „Reactions“ kann mit Hilfe der Patentnummer nach speziellen Patenten gesucht werden.

PATENTPAK Full Text

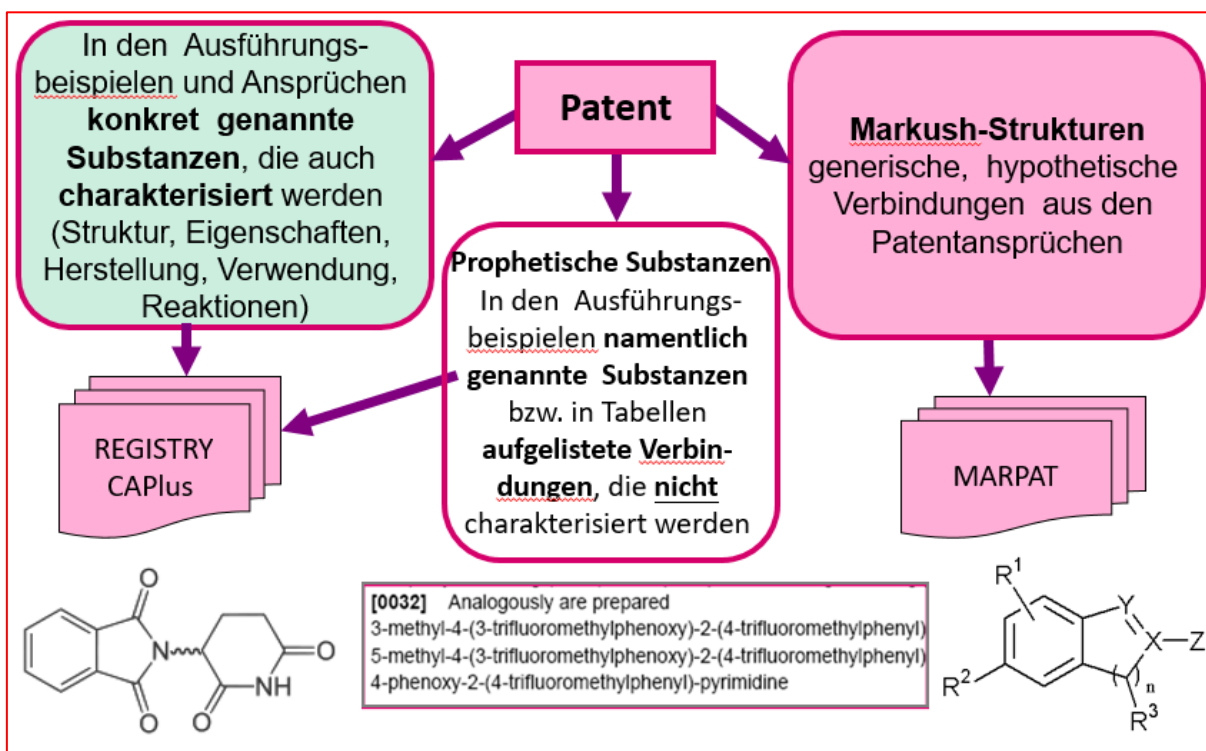
Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options
JP2015030844	Japanese	A	PDF PDF+ Viewer

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

16.3.1 Was sind Markush-Strukturen?

SciFinderⁿ 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 aus den Ansprüchen, sogenannte Markush-Strukturen. Diese Stoffe haben keine CAS-Registry-Nummer, sie sind nicht über eine normale Struktursuche auffindbar, sondern **nur mit einer Markush-Struktursuche**.

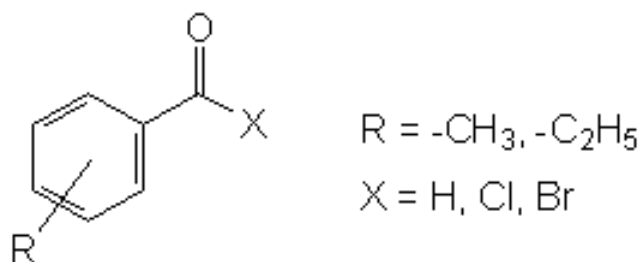
Markush-Strukturen sind **nach Eugene A. Markush benannt**, in dessen Patent US1506316 zu Pyrazolon-Farbstoffen aus dem Jahr 1924 in den Ansprüchen erstmals nicht nur jeweils eine einzelne chemische Verbindung genannt wurde, sondern eine Auswahl aus verschiedenen Substanzen.

Claims:

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

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

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...)



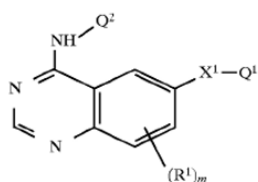
Eine Markush-Formel repräsentiert sehr **viele** potentielle chemische Substanzen (Beschreibung einer ganzen Verbindungsklasse). Dadurch kann in **einer** Patentschrift eine **große Zahl** verschiedener, einander ähnlicher Verbindungen abgedeckt werden.

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

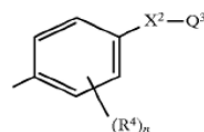


wherein X¹ is a direct link;

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)alkylsulphinyl-(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 Q² 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,

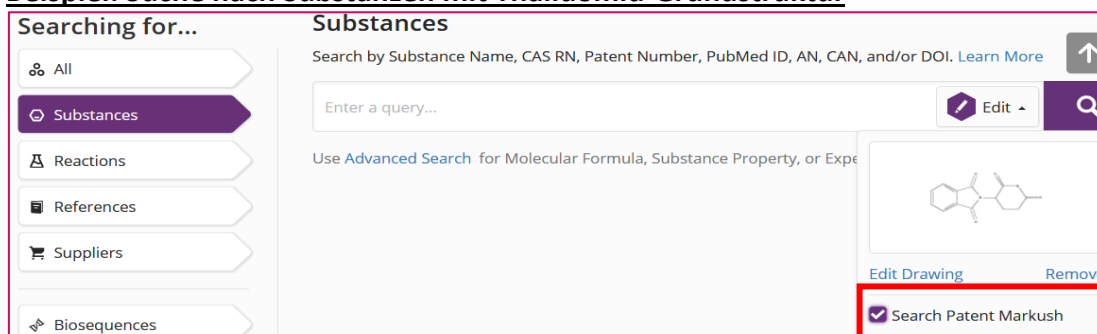
16.3.2 Wie gehe ich bei einer Markush-Struktursuche vor?

Das zu suchende Strukturfragment wird bei „Substances“ → „Draw“ wie gewohnt im Struktureditor gezeichnet bzw. Hochgeladen (s. Pkt. 11.4).



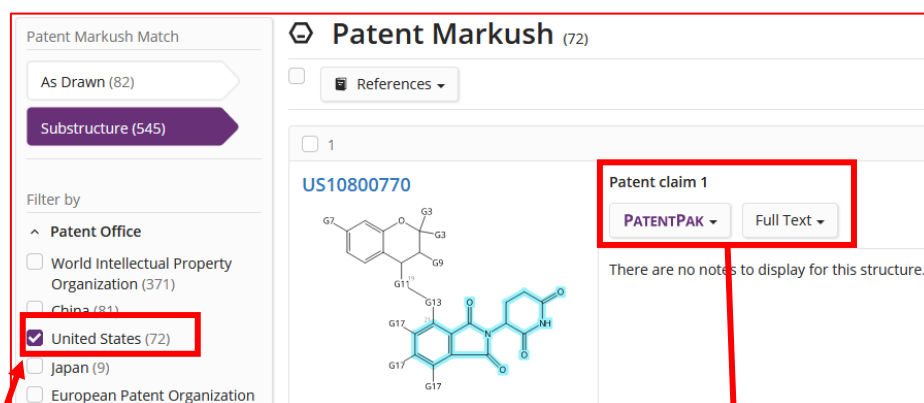
Bevor die Suche mit Klick auf die Lupe gestartet wird, setzt man den Haken bei „Search Patent Markush“.

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.



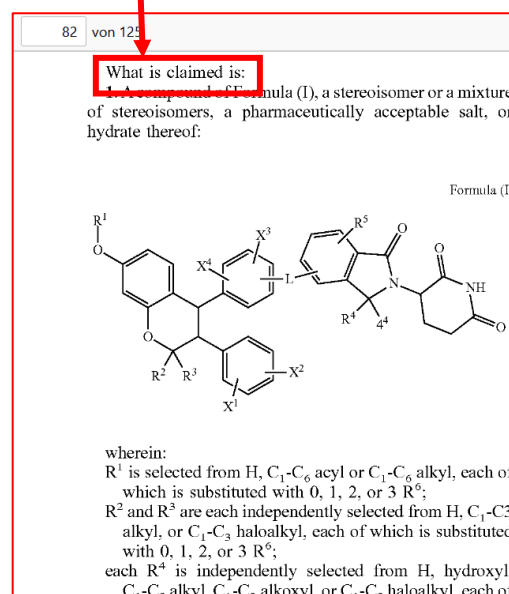
Die gefundenen Patente lassen sich nach den ausstellenden Patentämtern filtern.

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

Der jeweilige Claim, der die Substanz umfasst, wird neben der Summenformel 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 eingeegebene Struktur zu mehreren Ansprüchen (Claims) eines Patent, 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.

The image shows two patent claim entries for JP2009001529. Each entry includes a chemical structure with substituents G1, G4, and G5. The first entry is for Patent claim 1, and the second is for Patent claim 2. Both entries have buttons for 'PATENTPAK' and 'Full Text'.

Bei der Markush-Suche findet man bei den Substrukturen insgesamt 545 passende Claims, die in 313 Patenten enthalten sind.

Zu diesen 313 Patenten kommt man nach Anklicken des References-Buttons.

The image shows the 'Patent Markush' interface with 545 results. A red box highlights the 'References' button, which has a dropdown arrow. Below the button, a tooltip says 'Get References for Patent Markush Structures'. There are also buttons for 'All Results' and 'Selected Results'.

The image shows the 'References' page with 313 results. On the left, there is a 'Filter by' section with various filters like 'Document Type', 'Language', 'Publication Year', etc. The main area shows a list of patent entries. The first entry is 'Cyclic imides' with no inventor data available. The second entry is 'N-[[4-aminobenzoyl]oxy]methyl]thalidomide derivatives, a method for their preparation and their use as immunosuppressants' by Eger, Kurt; Ehninger, Gerhard; Stuhler, Alfred. The third entry is 'Thalidomide compounds in methods and compositions for inhibition of angiogenesis' by D. Amato, Robert. Each entry has buttons for 'Full Text', 'Substances', 'Reactions', 'Cited By', and 'Citation Map'.

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

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

Patentnummer

Reference Detail (3 of 32)

Substances (3) Reactions (0) Cited By (0) Citation Map

Patent

Patent Information

Patent Number
DE19957342

Publication Date
2001-05-31

Application Number
DE1999-19957342

Application Date
1999-11-29

Kind Code
A1

Assignee
Grünenthal G.m.b.H., Germany

Source
Germany

Database Information
AN: 2001:394098
CAN: 135:498
CAplus

Language
German

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

By: Frosch, Stefanie; Germann, Tieno

Erfinder

A combination therapy is provided for the treatment and/or prophylaxis 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 thalidomide compound combination interleukin 12 disease

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

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		2001-06-07	WO2000-EP11179	2000-11-11
AU2001013938	English	A		2001-06-12	AU2001-13938	2000-11-11
WO2001039758	Undetermined	A3		2002-03-28	WO2000-EP11179	2000-11-11
US20030021763	Undetermined	A1		2003-01-30	US2002-156771	2002-05-29

Expand All | Collapse All

Concepts

Substances

Citations

Zur Patentfamilie gehörende Äquivalenz-Patente

Patentanmelder, -inhaber (Assignee)

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

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 Verband-sübereinkunft (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. 15.5).

16.5 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 „Patent Viewer“ (s. Pkt. 15.4).

Beispiel einer PatentPak-Anzeige nach Suche des koreanischen Patent **KR2011133048** bei „References“

The screenshot shows the PatentPak interface with the search results for KR2011133048. The interface includes a search bar at the top, a list of filters (Substances, Reactions, Cited By), and a list of patent entries. The entry for KR2011133048 is highlighted. The interface also shows the PatentPak Options for each entry, including PDF, PDF+, and the Patent Viewer.

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**

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
JP5583751	Japanese	B2	PDF
EP2408300	English	B1	PDF
ES2578990	Spanish	T3	PDF
US8232294	English	B2	PDF

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

PATENTPAK Full Text Substances (257)

Patent Language Kind Code PatentPak Options

US20100239576 English A1 PDF PDF+ Viewer

PATENTPAK Substance table begins on page 102.

US 20100239576A1

(19) **United States**
 (12) **Patent Application Publication**
 Xi

(10) Pub. No.: **US 2010/0239576 A1**
 (43) Pub. Date: **Sep. 23, 2010**

(54) AMINO ESTER DERIVATIVES, SALT
 THEREOF AND METHODS OF USE

(76) Inventor: **Ning Xi**, Thousand Oaks, CA (US)

Correspondence Address:
Ning Xi
 565 Timberwood Ave.
 Thousand Oaks, CA 91360 (US)

(21) Appl. No.: **12/728,153**

(22) Filed: **Mar. 19, 2010**

(52) U.S. CL. **424/133.1; 546/153; 514/312;**

A61K 31/704 (2006.01)
 A61K 31/708 (2006.01)
 A61K 31/661 (2006.01)
 A61K 31/573 (2006.01)
 A61P 35/04 (2006.01)
 A61P 37/06 (2006.01)
 A61P 35/02 (2006.01)
 A61P 1/04 (2006.01)
 C12N 5/02 (2006.01)
 C12N 9/12 (2006.01)
 C12N 9/99 (2006.01)

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-[(phenylmethoxy)carbonyl]-, (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	
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

4 von 119

mammals. In particular, the invention relates to **7001** compounds, and metabolites thereof, which inhibit the protein tyrosine kinase activity, resulting in the inhibition of inter- and/or

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 Patent-Viewer.

46 von 119

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-aminopropanoate

[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-

16.6 Patent Viewer

- Der Patent 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 namentlich oder mit Strukturformeln im Patent enthalten sind.
- Die Patentvolltexte können wieder als PDF bzw. als PDF+ heruntergeladen werden.

The screenshot shows the PatentPAK interface. On the left, under 'Key Substances in Patent', there are two entries: CAS RN 80449-02-1 (Protein tyrosine kinase) and CAS RN 1245930-74-8. The main area displays the patent document for US 2010/0239576 A1, titled 'Patent Application Publication'. The document includes sections for 'United States', 'Patent Application Publication', 'Pub. No.', 'Pub. Date', 'Inventor', 'Correspondence Address', 'Appl. No.', 'Filed', 'Related U.S. Application Data', 'Publication Classification', and 'ABSTRACT'. The 'DOWNLOAD' button is highlighted in a red box.

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 PatentPAK interface with page 63 selected. The sidebar on the left shows 'Key Substances in Patent' with two entries: CAS RN 1245931-31-0 and CAS RN 1245931-32-1. The main area displays the patent text for page 63, including the chemical structure of Example 48 and the text of paragraph [0497]. The 'Page 63' link in the sidebar is highlighted in a red box.

Example 48
 (R)-1-(4-(3-fluoro-4-(7-methoxyquinolin-4-yloxy)phenylcarbamoyl)-5-methyl-3-oxo-2-phenyl-2,3-dihydropyrazol-1-yl)propan-2-yl 2-(methylamino)acetate acetate

[0497]

[0498] The title compound was prepared according to the procedure described in Example 39, step 3 by using (R)-1-(4-

Weitere Möglichkeiten im „Patent Viewer“

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 im SciFinderⁿ

PATENTPAK
A CAS SOLUTION

Key Substances in Patent

Analyst Markup Locations (1)
Page 62

CAS RN
1245931-31-0

Glycine, *N*-methyl-, (1*R*)-2-[4-[[[3-fluoro-4-[(7-methoxy-4-quinolinyl)oxy]phenyl]amino]ca 2,3-dihydro-5-methyl-3-oxo-2-phenyl-1*H*-pyrazol-1-yl]-1-methylethyl ester, acetate (1:2)

Analyst Markup Locations (1)
Page 63

Substance Detail

References (2) Reactions (3) Suppliers (0)

CAS Registry Number
1245931-31-0

1245931-17-2
 $C_{33}H_{32}FN_5O_6$

64-19-7
 $C_2H_4O_2$

$C_{33}H_{32}FN_5O_6 \cdot 2C_2H_4O_2$

Components: 2
Glycine, *N*-methyl-, (1*R*)-2-[4-[[[3-fluoro-4-[(7-methoxy-4-quinolinyl)oxy]phenyl]amino]carbonyl]-2,3-dihydro-5-methyl-3-oxo-2-phenyl-1*H*-pyrazol-1-yl]-1-methylethyl ester, acetate (1:2) (AC1)

Expand All | Collapse All

Other Names and Identifiers

Bioactivity Indicators

Target Indicators

Additional Details

Klickt man dagegen auf den **Namen der Substanz**, erscheint dieses Auswahlpanel, von dem aus man nicht nur zum **Substanzeintrag** (s. auch Pkt. 11.5), zu den **Reaktionen** und **Textstellen** der Verbindung kommt, sondern auch **Synthesevorschriften** findet oder einen **Retrosyntheseplan** erstellen kann (s. auch Pkt. 13).

Key Substances in Patent

Analyst Markup Locations (1)
Page 62

CAS RN
1245931-31-0

Glycine, *N*-methyl-, (1*R*)-2-[4-[[[3-fluoro-4-[(7-methoxy-4-quinolinyl)oxy]phenyl]amino]ca 2,3-dihydro-5-methyl-3-oxo-2-phenyl-1*H*-pyrazol-1-yl]-1-methylethyl ester, acetate (1:2)

Analyst Markup Locations (1)
Page 63

CAS RN
1245931-32-1

Glycine, *N*-methyl-, (1*R*)-2-[4-[[[3-fluoro-4-[(7-methoxy-4-quinolinyl)oxy]phenyl]amino]ca 2,3-dihydro-5-methyl-3-oxo-2-phenyl-1*H*-pyrazol-1-yl]-1-methylethyl ester, acetate (1:2)

Substance Detail

Reactions (3)

Synthesize (3)

Create Retrosynthesis Plan

References (2)

Suppliers (0)

[0496] 1H NMR (400 MHz, d_6 -DMSO): δ 1.09 (d, $J=6.4$ Hz, 3H), 2.28 (s, 3H), 2.78 (s, 3H), 3.78-3.83 (m, 1H), 3.97-4.06 (m, 5H), 4.25-4.33 (m, 1H), 4.90-4.96 (m, 1H), 7.0-7.1 (m, 1H), 7.1-7.2 (m, 1H), 7.2-7.3 (m, 1H), 7.3-7.4 (m, 1H), 7.4-7.5 (m, 1H), 7.5-7.6 (m, 1H), 7.6-7.7 (m, 1H), 7.7-7.8 (m, 1H), 7.8-7.9 (m, 1H), 7.9-8.0 (m, 1H), 8.0-8.1 (m, 1H), 8.1-8.2 (m, 1H), 8.2-8.3 (m, 1H), 8.3-8.4 (m, 1H), 8.4-8.5 (m, 1H), 8.5-8.6 (m, 1H), 8.6-8.7 (m, 1H), 8.7-8.8 (m, 1H), 8.8-8.9 (m, 1H), 8.9-9.0 (m, 1H), 9.0-9.1 (m, 1H), 9.1-9.2 (m, 1H), 9.2-9.3 (m, 1H), 9.3-9.4 (m, 1H), 9.4-9.5 (m, 1H), 9.5-9.6 (m, 1H), 9.6-9.7 (m, 1H), 9.7-9.8 (m, 1H), 9.8-9.9 (m, 1H), 9.9-10.0 (m, 1H), 10.0-10.1 (m, 1H), 10.1-10.2 (m, 1H), 10.2-10.3 (m, 1H), 10.3-10.4 (m, 1H), 10.4-10.5 (m, 1H), 10.5-10.6 (m, 1H), 10.6-10.7 (m, 1H), 10.7-10.8 (m, 1H), 10.8-10.9 (m, 1H), 10.9-11.0 (m, 1H), 11.0-11.1 (m, 1H), 11.1-11.2 (m, 1H), 11.2-11.3 (m, 1H), 11.3-11.4 (m, 1H), 11.4-11.5 (m, 1H), 11.5-11.6 (m, 1H), 11.6-11.7 (m, 1H), 11.7-11.8 (m, 1H), 11.8-11.9 (m, 1H), 11.9-12.0 (m, 1H), 12.0-12.1 (m, 1H), 12.1-12.2 (m, 1H), 12.2-12.3 (m, 1H), 12.3-12.4 (m, 1H), 12.4-12.5 (m, 1H), 12.5-12.6 (m, 1H), 12.6-12.7 (m, 1H), 12.7-12.8 (m, 1H), 12.8-12.9 (m, 1H), 12.9-13.0 (m, 1H), 13.0-13.1 (m, 1H), 13.1-13.2 (m, 1H), 13.2-13.3 (m, 1H), 13.3-13.4 (m, 1H), 13.4-13.5 (m, 1H), 13.5-13.6 (m, 1H), 13.6-13.7 (m, 1H), 13.7-13.8 (m, 1H), 13.8-13.9 (m, 1H), 13.9-14.0 (m, 1H), 14.0-14.1 (m, 1H), 14.1-14.2 (m, 1H), 14.2-14.3 (m, 1H), 14.3-14.4 (m, 1H), 14.4-14.5 (m, 1H), 14.5-14.6 (m, 1H), 14.6-14.7 (m, 1H), 14.7-14.8 (m, 1H), 14.8-14.9 (m, 1H), 14.9-15.0 (m, 1H), 15.0-15.1 (m, 1H), 15.1-15.2 (m, 1H), 15.2-15.3 (m, 1H), 15.3-15.4 (m, 1H), 15.4-15.5 (m, 1H), 15.5-15.6 (m, 1H), 15.6-15.7 (m, 1H), 15.7-15.8 (m, 1H), 15.8-15.9 (m, 1H), 15.9-16.0 (m, 1H), 16.0-16.1 (m, 1H), 16.1-16.2 (m, 1H), 16.2-16.3 (m, 1H), 16.3-16.4 (m, 1H), 16.4-16.5 (m, 1H), 16.5-16.6 (m, 1H), 16.6-16.7 (m, 1H), 16.7-16.8 (m, 1H), 16.8-16.9 (m, 1H), 16.9-17.0 (m, 1H), 17.0-17.1 (m, 1H), 17.1-17.2 (m, 1H), 17.2-17.3 (m, 1H), 17.3-17.4 (m, 1H), 17.4-17.5 (m, 1H), 17.5-17.6 (m, 1H), 17.6-17.7 (m, 1H), 17.7-17.8 (m, 1H), 17.8-17.9 (m, 1H), 17.9-18.0 (m, 1H), 18.0-18.1 (m, 1H), 18.1-18.2 (m, 1H), 18.2-18.3 (m, 1H), 18.3-18.4 (m, 1H), 18.4-18.5 (m, 1H), 18.5-18.6 (m, 1H), 18.6-18.7 (m, 1H), 18.7-18.8 (m, 1H), 18.8-18.9 (m, 1H), 18.9-19.0 (m, 1H), 19.0-19.1 (m, 1H), 19.1-19.2 (m, 1H), 19.2-19.3 (m, 1H), 19.3-19.4 (m, 1H), 19.4-19.5 (m, 1H), 19.5-19.6 (m, 1H), 19.6-19.7 (m, 1H), 19.7-19.8 (m, 1H), 19.8-19.9 (m, 1H), 19.9-20.0 (m, 1H), 20.0-20.1 (m, 1H), 20.1-20.2 (m, 1H), 20.2-20.3 (m, 1H), 20.3-20.4 (m, 1H), 20.4-20.5 (m, 1H), 20.5-20.6 (m, 1H), 20.6-20.7 (m, 1H), 20.7-20.8 (m, 1H), 20.8-20.9 (m, 1H), 20.9-21.0 (m, 1H), 21.0-21.1 (m, 1H), 21.1-21.2 (m, 1H), 21.2-21.3 (m, 1H), 21.3-21.4 (m, 1H), 21.4-21.5 (m, 1H), 21.5-21.6 (m, 1H), 21.6-21.7 (m, 1H), 21.7-21.8 (m, 1H), 21.8-21.9 (m, 1H), 21.9-22.0 (m, 1H), 22.0-22.1 (m, 1H), 22.1-22.2 (m, 1H), 22.2-22.3 (m, 1H), 22.3-22.4 (m, 1H), 22.4-22.5 (m, 1H), 22.5-22.6 (m, 1H), 22.6-22.7 (m, 1H), 22.7-22.8 (m, 1H), 22.8-22.9 (m, 1H), 22.9-23.0 (m, 1H), 23.0-23.1 (m, 1H), 23.1-23.2 (m, 1H), 23.2-23.3 (m, 1H), 23.3-23.4 (m, 1H), 23.4-23.5 (m, 1H), 23.5-23.6 (m, 1H), 23.6-23.7 (m, 1H), 23.7-23.8 (m, 1H), 23.8-23.9 (m, 1H), 23.9-24.0 (m, 1H), 24.0-24.1 (m, 1H), 24.1-24.2 (m, 1H), 24.2-24.3 (m, 1H), 24.3-24.4 (m, 1H), 24.4-24.5 (m, 1H), 24.5-24.6 (m, 1H), 24.6-24.7 (m, 1H), 24.7-24.8 (m, 1H), 24.8-24.9 (m, 1H), 24.9-25.0 (m, 1H), 25.0-25.1 (m, 1H), 25.1-25.2 (m, 1H), 25.2-25.3 (m, 1H), 25.3-25.4 (m, 1H), 25.4-25.5 (m, 1H), 25.5-25.6 (m, 1H), 25.6-25.7 (m, 1H), 25.7-25.8 (m, 1H), 25.8-25.9 (m, 1H), 25.9-26.0 (m, 1H), 26.0-26.1 (m, 1H), 26.1-26.2 (m, 1H), 26.2-26.3 (m, 1H), 26.3-26.4 (m, 1H), 26.4-26.5 (m, 1H), 26.5-26.6 (m, 1H), 26.6-26.7 (m, 1H), 26.7-26.8 (m, 1H), 26.8-26.9 (m, 1H), 26.9-27.0 (m, 1H), 27.0-27.1 (m, 1H), 27.1-27.2 (m, 1H), 27.2-27.3 (m, 1H), 27.3-27.4 (m, 1H), 27.4-27.5 (m, 1H), 27.5-27.6 (m, 1H), 27.6-27.7 (m, 1H), 27.7-27.8 (m, 1H), 27.8-27.9 (m, 1H), 27.9-28.0 (m, 1H), 28.0-28.1 (m, 1H), 28.1-28.2 (m, 1H), 28.2-28.3 (m, 1H), 28.3-28.4 (m, 1H), 28.4-28.5 (m, 1H), 28.5-28.6 (m, 1H), 28.6-28.7 (m, 1H), 28.7-28.8 (m, 1H), 28.8-28.9 (m, 1H), 28.9-29.0 (m, 1H), 29.0-29.1 (m, 1H), 29.1-29.2 (m, 1H), 29.2-29.3 (m, 1H), 29.3-29.4 (m, 1H), 29.4-29.5 (m, 1H), 29.5-29.6 (m, 1H), 29.6-29.7 (m, 1H), 29.7-29.8 (m, 1H), 29.8-29.9 (m, 1H), 29.9-30.0 (m, 1H), 30.0-30.1 (m, 1H), 30.1-30.2 (m, 1H), 30.2-30.3 (m, 1H), 30.3-30.4 (m, 1H), 30.4-30.5 (m, 1H), 30.5-30.6 (m, 1H), 30.6-30.7 (m, 1H), 30.7-30.8 (m, 1H), 30.8-30.9 (m, 1H), 30.9-31.0 (m, 1H), 31.0-31.1 (m, 1H), 31.1-31.2 (m, 1H), 31.2-31.3 (m, 1H), 31.3-31.4 (m, 1H), 31.4-31.5 (m, 1H), 31.5-31.6 (m, 1H), 31.6-31.7 (m, 1H), 31.7-31.8 (m, 1H), 31.8-31.9 (m, 1H), 31.9-32.0 (m, 1H), 32.0-32.1 (m, 1H), 32.1-32.2 (m, 1H), 32.2-32.3 (m, 1H), 32.3-32.4 (m, 1H), 32.4-32.5 (m, 1H), 32.5-32.6 (m, 1H), 32.6-32.7 (m, 1H), 32.7-32.8 (m, 1H), 32.8-32.9 (m, 1H), 32.9-33.0 (m, 1H), 33.0-33.1 (m, 1H), 33.1-33.2 (m, 1H), 33.2-33.3 (m, 1H), 33.3-33.4 (m, 1H), 33.4-33.5 (m, 1H), 33.5-33.6 (m, 1H), 33.6-33.7 (m, 1H), 33.7-33.8 (m, 1H), 33.8-33.9 (m, 1H), 33.9-34.0 (m, 1H), 34.0-34.1 (m, 1H), 34.1-34.2 (m, 1H), 34.2-34.3 (m, 1H), 34.3-34.4 (m, 1H), 34.4-34.5 (m, 1H), 34.5-34.6 (m, 1H), 34.6-34.7 (m, 1H), 34.7-34.8 (m, 1H), 34.8-34.9 (m, 1H), 34.9-35.0 (m, 1H), 35.0-35.1 (m, 1H), 35.1-35.2 (m, 1H), 35.2-35.3 (m, 1H), 35.3-35.4 (m, 1H), 35.4-35.5 (m, 1H), 35.5-35.6 (m, 1H), 35.6-35.7 (m, 1H), 35.7-35.8 (m, 1H), 35.8-35.9 (m, 1H), 35.9-36.0 (m, 1H), 36.0-36.1 (m, 1H), 36.1-36.2 (m, 1H), 36.2-36.3 (m, 1H), 36.3-36.4 (m, 1H), 36.4-36.5 (m, 1H), 36.5-36.6 (m, 1H), 36.6-36.7 (m, 1H), 36.7-36.8 (m, 1H), 36.8-36.9 (m, 1H), 36.9-37.0 (m, 1H), 37.0-37.1 (m, 1H), 37.1-37.2 (m, 1H), 37.2-37.3 (m, 1H), 37.3-37.4 (m, 1H), 37.4-37.5 (m, 1H), 37.5-37.6 (m, 1H), 37.6-37.7 (m, 1H), 37.7-37.8 (m, 1H), 37.8-37.9 (m, 1H), 37.9-38.0 (m, 1H), 38.0-38.1 (m, 1H), 38.1-38.2 (m, 1H), 38.2-38.3 (m, 1H), 38.3-38.4 (m, 1H), 38.4-38.5 (m, 1H), 38.5-38.6 (m, 1H), 38.6-38.7 (m, 1H), 38.7-38.8 (m, 1H), 38.8-38.9 (m, 1H), 38.9-39.0 (m, 1H), 39.0-39.1 (m, 1H), 39.1-39.2 (m, 1H), 39.2-39.3 (m, 1H), 39.3-39.4 (m, 1H), 39.4-39.5 (m, 1H), 39.5-39.6 (m, 1H), 39.6-39.7 (m, 1H), 39.7-39.8 (m, 1H), 39.8-39.9 (m, 1H), 39.9-40.0 (m, 1H), 40.0-40.1 (m, 1H), 40.1-40.2 (m, 1H), 40.2-40.3 (m, 1H), 40.3-40.4 (m, 1H), 40.4-40.5 (m, 1H), 40.5-40.6 (m, 1H), 40.6-40.7 (m, 1H), 40.7-40.8 (m, 1H), 40.8-40.9 (m, 1H), 40.9-41.0 (m, 1H), 41.0-41.1 (m, 1H), 41.1-41.2 (m, 1H), 41.2-41.3 (m, 1H), 41.3-41.4 (m, 1H), 41.4-41.5 (m, 1H), 41.5-41.6 (m, 1H), 41.6-41.7 (m, 1H), 41.7-41.8 (m, 1H), 41.8-41.9 (m, 1H), 41.9-42.0 (m, 1H), 42.0-42.1 (m, 1H), 42.1-42.2 (m, 1H), 42.2-42.3 (m, 1H), 42.3-42.4 (m, 1H), 42.4-42.5 (m, 1H), 42.5-42.6 (m, 1H), 42.6-42.7 (m, 1H), 42.7-42.8 (m, 1H), 42.8-42.9 (m, 1H), 42.9-43.0 (m, 1H), 43.0-43.1 (m, 1H), 43.1-43.2 (m, 1H), 43.2-43.3 (m, 1H), 43.3-43.4 (m, 1H), 43.4-43.5 (m, 1H), 43.5-43.6 (m, 1H), 43.6-43.7 (m, 1H), 43.7-43.8 (m, 1H), 43.8-43.9 (m, 1H), 43.9-44.0 (m, 1H), 44.0-44.1 (m, 1H), 44.1-44.2 (m, 1H), 44.2-44.3 (m, 1H), 44.3-44.4 (m, 1H), 44.4-44.5 (m, 1H), 44.5-44.6 (m, 1H), 44.6-44.7 (m, 1H), 44.7-44.8 (m, 1H), 44.8-44.9 (m, 1H), 44.9-45.0 (m, 1H), 45.0-45.1 (m, 1H), 45.1-45.2 (m, 1H), 45.2-45.3 (m, 1H), 45.3-45.4 (m, 1H), 45.4-45.5 (m, 1H), 45.5-45.6 (m, 1H), 45.6-45.7 (m, 1H), 45.7-45.8 (m, 1H), 45.8-45.9 (m, 1H), 45.9-46.0 (m, 1H), 46.0-46.1 (m, 1H), 46.1-46.2 (m, 1H), 46.2-46.3 (m, 1H), 46.3-46.4 (m, 1H), 46.4-46.5 (m, 1H), 46.5-46.6 (m, 1H), 46.6-46.7 (m, 1H), 46.7-46.8 (m, 1H), 46.8-46.9 (m, 1H), 46.9-47.0 (m, 1H), 47.0-47.1 (m, 1H), 47.1-47.2 (m, 1H), 47.2-47.3 (m, 1H), 47.3-47.4 (m, 1H), 47.4-47.5 (m, 1H), 47.5-47.6 (m, 1H), 47.6-47.7 (m, 1H), 47.7-47.8 (m, 1H), 47.8-47.9 (m, 1H), 47.9-48.0 (m, 1H), 48.0-48.1 (m, 1H), 48.1-48.2 (m, 1H), 48.2-48.3 (m, 1H), 48.3-48.4 (m, 1H), 48.4-48.5 (m, 1H), 48.5-48.6 (m, 1H), 48.6-48.7 (m, 1H), 48.7-48.8 (m, 1H), 48.8-48.9 (m, 1H), 48.9-49.0 (m, 1H), 49.0-49.1 (m, 1H), 49.1-49.2 (m, 1H), 49.2-49.3 (m, 1H), 49.3-49.4 (m, 1H), 49.4-49.5 (m, 1H), 49.5-49.6 (m, 1H), 49.6-49.7 (m, 1H), 49.7-49.8 (m, 1H), 49.8-49.9 (m, 1H), 49.9-50.0 (m, 1H), 50.0-50.1 (m, 1H), 50.1-50.2 (m, 1H), 50.2-50.3 (m, 1H), 50.3-50.4 (m, 1H), 50.4-50.5 (m, 1H), 50.5-50.6 (m, 1H), 50.6-50.7 (m, 1H), 50.7-50.8 (m, 1H), 50.8-50.9 (m, 1H), 50.9-51.0 (m, 1H), 51.0-51.1 (m, 1H), 51.1-51.2 (m, 1H), 51.2-51.3 (m, 1H), 51.3-51.4 (m, 1H), 51.4-51.5 (m, 1H), 51.5-51.6 (m, 1H), 51.6-51.7 (m, 1H), 51.7-51.8 (m, 1H), 51.8-51.9 (m, 1H), 51.9-52.0 (m, 1H), 52.0-52.1 (m, 1H), 52.1-52.2 (m, 1H), 52.2-52.3 (m, 1H), 52.3-52.4 (m, 1H), 52.4-52.5 (m, 1H), 52.5-52.6 (m, 1H), 52.6-52.7 (m, 1H), 52.7-52.8 (m, 1H), 52.8-52.9 (m, 1H), 52.9-53.0 (m, 1H), 53.0-53.1 (m, 1H), 53.1-53.2 (m, 1H), 53.2-53.3 (m, 1H), 53.3-53.4 (m, 1H), 53.4-53.5 (m, 1H), 53.5-53.6 (m, 1H), 53.6-53.7 (m, 1H), 53.7-53.8 (m, 1H), 53.8-53.9 (m, 1H), 53.9-54.0 (m, 1H), 54.0-54.1 (m, 1H), 54.1-54.2 (m, 1H), 54.2-54.3 (m, 1H), 54.3-54.4 (m, 1H), 54.4-54.5 (m, 1H), 54.5-54.6 (m, 1H), 54.6-54.7 (m, 1H), 54.7-54.8 (m, 1H), 54.8-54.9 (m, 1H), 54.9-55.0 (m, 1H), 55.0-55.1 (m, 1H), 55.1-55.2 (m, 1H), 55.2-55.3 (m, 1H), 55.3-55.4 (m, 1H), 55.4-55.5 (m, 1H), 55.5-55.6 (m, 1H), 55.6-55.7 (m, 1H), 55.7-55.8 (m, 1H), 55.8-55.9 (m, 1H), 55.9-56.0 (m, 1H), 56.0-56.1 (m, 1H), 56.1-56.2 (m, 1H), 56.2-56.3 (m, 1H), 56.3-56.4 (m, 1H), 56.4-56.5 (m, 1H), 56.5-56.6 (m, 1H), 56.6-56.7 (m, 1H), 56.7-56.8 (m, 1H), 56.8-56.9 (m, 1H), 56.9-57.0 (m, 1H), 57.0-57.1 (m, 1H), 57.1-57.2 (m, 1H), 57.2-57.3 (m, 1H), 57.3-57.4 (m, 1H), 57.4-57.5 (m, 1H), 57.5-57.6 (m, 1H), 57.6-57.7 (m, 1H), 57.7-57.8 (m, 1H), 57.8-57.9 (m, 1H), 57.9-58.0 (m, 1H), 58.0-58.1 (m, 1H), 58.1-58.2 (m, 1H), 58.2-58.3 (m, 1H), 58.3-58.4 (m, 1H), 58.4-58.5 (m, 1H), 58.5-58.6 (m, 1H), 58.6-58.7 (m, 1H), 58.7-58.8 (m, 1H), 58.8-58.9 (m, 1H), 58.9-59.0 (m, 1H), 59.0-59.1 (m, 1H), 59.1-59.2 (m, 1H), 59.2-59.3 (m, 1H), 59.3-59.4 (m, 1H), 59.4-59.5 (m, 1H), 59.5-59.6 (m, 1H), 59.6-59.7 (m, 1H), 59.7-59.8 (m, 1H), 59.8-59.9 (m, 1H), 59.9-60.0 (m, 1H), 60.0-60.1 (m, 1H), 60.1-60.2 (m, 1H), 60.2-60.3 (m, 1H), 60.3-60.4 (m, 1H), 60.4-60.5 (m, 1H), 60.5-60.6 (m, 1H), 60.6-60.7 (m, 1H), 60.7-60.8 (m, 1H), 60.8-60.9 (m, 1H), 60.9-61.0 (m, 1H), 61.0-61.1 (m, 1H), 61.1-61.2 (m, 1H), 61.2-61.3 (m, 1H), 61.3-61.4 (m, 1H), 61.4-61.5 (m, 1H), 61.5-61.6 (m, 1H), 61.6-61.7 (m, 1H), 61.7-61.8 (m, 1H), 61.8-61.9 (m, 1H), 61.9-62.0 (m, 1H), 62.0-62.1 (m, 1H), 62.1-62.2 (m, 1H), 62.2-62.3 (m, 1H), 62.3-62.4 (m, 1H), 62.4-62.5 (m, 1H), 62.5-62.6 (m, 1H), 62.6-62.7 (m, 1H), 62.7-62.8 (m, 1H), 62.8-62.9 (m, 1H), 62.9-63.0 (m, 1H), 63.0-63.1 (m, 1H), 63.1-63.2 (m, 1H), 63.2-63.3 (m, 1H), 63.3-63.4 (m, 1H), 63.4-63.5 (m, 1H), 63.5-63.6 (m, 1H), 63.6-63.7 (m, 1H), 63.7-63.8 (m, 1H), 63.8-63.9 (m, 1H), 63.9-64.0 (m, 1H), 64.0-64.1 (m, 1H), 64.1-64.2 (m, 1H), 64.2-64.3 (m, 1H), 64.3-64.4 (m, 1H), 64.4-64.5 (m, 1H), 64.5-64.6 (m, 1H), 64.6-64.7 (m, 1H), 64.7-64.8 (m, 1H), 64.8-64.9 (m, 1H), 64.9-65.0 (m, 1H), 65.0-65.1 (m, 1H), 65.1-65.2 (m, 1H), 65.2-65.3 (m, 1H), 65.3-65.4 (m, 1H), 65.4-65.5 (m, 1H), 65.5-65.6 (m, 1H), 65.6-65.7 (m, 1H), 65.7-65.8 (m, 1H), 65.8-65.9 (m, 1H), 65.9-66.0 (m, 1H), 66.0-66.1 (m, 1H), 66.1-66.2 (m, 1H), 66.2-66.3 (m, 1H), 66.3-66.4 (m, 1H), 66.4-66.5 (m, 1H), 66.5-66.6 (m, 1H), 66.6-66.7 (m, 1H), 66.7-66.8 (m, 1H), 66.8-66.9 (m, 1H), 66.9-67.0 (m, 1H), 67.0-67.1 (m, 1H), 67.1-67.2 (m, 1H), 67.2-67.3 (m, 1H), 67.3-67.4 (m, 1H), 67.4-67.5 (m, 1H), 67.5-67.6 (m, 1H), 67.6-67.7 (m, 1H), 67.7-67.8 (m, 1H), 67.8-67.9 (m, 1H), 67.9-68.0 (m, 1H), 68.0-68.1 (m, 1H), 68.1-68.2 (m, 1H), 68.2-68.3 (m, 1H), 68.3-68.4 (m, 1H), 68.4-68.5 (m, 1H), 68.5-68.6 (m, 1H), 68.6-68.7 (m, 1H), 68.7-68.8 (m, 1H), 68.8-68.9 (m, 1H), 68.9-69.0 (m, 1H), 69.0-69.1 (m, 1H), 69.1-69.2 (m, 1H), 69.2-69.3 (m, 1H), 69.3-69.4 (m, 1H), 69.4-69.5 (m, 1H), 69.5-69.6 (m, 1H), 69.6-69.7 (m, 1H), 69.7-69.8 (m, 1H), 69.8-69.9 (m, 1H), 69.9-70.0 (m, 1H), 70.0-70.1 (m, 1H), 70.1-7

16.7 Welche Informationen liefert das Deckblatt eines Patentes?

①⑨ BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND  DEUTSCHES PATENT- UND MARKENAMT	⑫ Offenlegungsschrift ⑩ DE 199 57 342 A 1	⑤① Int. Cl.⁷: A 61 K 38/19 A 61 K 31/4025 A 61 P 29/00 A 61 P 5/48
②① Aktenzeichen: 199 57 342.5 ②② Anmeldetag: 29. 11. 1999 ④③ Offenlegungstag: 31. 5. 2001	DE 199 57 342 A 1	
⑦① Anmelder: Grünenthal GmbH, 52078 Aachen, DE	⑦② Erfinder: Frosch, Stefanie, Dipl.-Biol. Dr., 52078 Aachen, DE; Germann, Tieno, Dr., 52134 Herzogenrath, DE ⑤⑥ Für die Beurteilung der Patentfähigkeit in Betracht zu ziehende Druckschriften: WO 97 41 844 A1 WO 40 269 A2 WO 10 552 A2 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 Annual Meeting, 1998, Vol.55, June, S.35;	
Die folgenden Angaben sind den vom Anmelder eingereichten Unterlagen entnommen ⑤④ Verfahren zur Behandlung und/oder Prophylaxe von IL-12-bedingten Erkrankungen ⑤⑦ 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.		

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. MethodsNow

Zunächst ein kleiner Hinweis (gilt nicht für die Uni Jena!!): falls Sie nicht auf MethodsNow zugreifen können, dann fragen Sie bitte in der örtlichen Bibliothek nach, ob MethodsNow Analytik lizenziert ist. Dieser Teil gehört nicht automatisch zu SciFinderⁿ.

17.1 Wie bekomme ich Zugang zu MethodsNow?

- Mit SciFinderⁿ wurde auch der Zugang zu MethodsNow erworben.
- Der Zugang erfolgt über <https://www.methodsnow.com/>.
- Wenn man bereits im SciFinderⁿ eingeloggt ist, dann braucht man dies nicht mehr in MethodsNow zu machen, sondern bekommt nach Aufruf der o.g. Adresse gleich den Startbildschirm angezeigt.

The screenshot displays the MethodsNow web interface. At the top, there is a header with the 'CAS Solutions' logo and the 'METHODSNOW' logo, along with 'Saved' and 'Account' links. The main section is titled 'Search' and includes a text input field with the placeholder 'Enter keyword, matrix, analyte, etc.' and a search button. Below the search bar is a link for 'Advanced Search'. A section titled 'Browse Method Categories' lists various analytical methods in three columns: Agricultural Applications / Analysis, Bioassays, Biomolecule Isolation, Environmental Analysis, Food Analysis, Fuels / Geology / Biofuels, Historical Analysis / Dating, Miscellaneous, Organic Compound Analysis, Organometallics / Inorganics, Pharmacology / Toxicology, Polymer Analysis, and Water Analysis. At the bottom, there is a 'Recent Searches' section showing two entries: '"red wine"' and 'red wine', each with a delete icon. Below these is a summary of the advanced search criteria: 'Advanced : keyword : food, keyword : nutrition'.

- Hat man bereits Suchen in MethodsNow gemacht, dann werden diese auf der Startseite bei **Recent Searches** angezeigt.

17.2 Was findet man in MethodsNow?

- MethodsNow bietet Schritt-für Schritt-Anleitungen/Vorschriften zu analytischen (u.a. in Bereichen wie der Pharmakologie, Hochleistungsflüssigkeitschromatographie (HPLC), Lebensmittelanalyse, Isolierung von Naturstoffen und Wasseranalyse) und synthetischen Verfahren.
- Durch den direkten Zugriff auf die Details der Prozeduren spart man viel Zeit, da nicht erst die Originalquelle beschafft werden muss.
- Bis zu drei Verfahren lassen sich miteinander vergleichen und als PDF- oder XLS-Datei exportieren und herunterladen.
- Experimentelle Details werden sowohl bei den Analysen als auch bei den Synthesen übersichtlich in Tabellenform dargestellt.
- Dabei werden u.a. die verwendeten Materialien/Ausgangsstoffe, die nötigen Laborgeräte/-mittel sowie die Mess- bzw. Synthesebedingungen dargelegt.
- Die Synthesemethoden in MethodsNow stammen aus 180 Top-Zeitschriften (darunter „Organic Letters“, „Catalysis Letters“, „Journal of Coordination Chemistry“, „Journal of Medicinal Chemistry“, „Journal of the American Chemical Society“, „Angewandte Chemie“, „Tetrahedron“ und „Chemical Science“) und aus Patenten.

MethodsNow Content

	Analytics	Synthesis
Content from years	2000 - present	
Number of methods	>480.000	>4.5M
Content Coverage	Broad range: Key focus in Pharma, Ag, and chemical as well as others	Small molecule synthesis
Source Focus	Full <u>CAPLUSSM</u> database. Future investment may include regulatory agencies and instrumentation	180+ journals titles including new coverage from Wiley, RSC and Elsevier in addition to ACS, Springer, <u>Taylor&Francis</u> , WO patents (2010-present)
Example journal titles	Food Chemistry, Journal of Chromatography A and B, Journal of Agricultural and Food Chemistry, Talanta, Analytica Chimica Acta	Organic Letters, Catalysis Letters, Journal of Coordination Chemistry, Journal of Medicinal Chemistry, Journal of the American Chemical Society, <u>Angewandte Chemie</u> , Tetrahedron, Chemical Science
Language	English only	

Beispielsuche nach „red wine“:

The screenshot shows the MethodsNow search results for the query "red wine". The interface includes a search bar at the top with the query "red wine" and a search icon. Below the search bar, the results are displayed in a table-like format. On the left side, there is a sidebar with filters for Analyte, Matrix, and Method Category. The main results area shows a list of results, with the first result highlighted: "Analysis of Silymarin in Red wine by Spectrophotometry". This result includes details such as the CAS number (2-105-CAS-72640), the analyte (Resveratrol; Silymarin), the matrix (Red wine), the method category (Antioxidant Assay; Food Analysis), the technique (Spectrophotometry), the equipment used (Spectrophotometer), and the source (Antioxidant potential of red wine and silymarin: in-vitro evaluation by Jadhav, G. B.; Upasani, C. D.; Pingale, A. P. in Journal of Pharmacy Research (2009), 2 (4), 636-639).

Search Results Summary:

Filter Category	Item	Count
Analyte	Gallic acid	258
	Catechin	249
	Polyphenols (nonpolymeric)	238
	Caffeic acid	226
	Phenols	223
Matrix	Red wine	1850
	White wine	913
	Wine	352
	Rose wine	151
	Beer	149
Method Category	Food Analysis	2193
	Antioxidant Assay	243
	Natural Product Isolation Analysis	177
	Toxin Assay	172

Highlighted Result:

Title	Analysis of Silymarin in Red wine by Spectrophotometry
CAS MN	2-105-CAS-72640
Analyte	Resveratrol; Silymarin
Matrix	Red wine
Other Materials	Reagent: Acetylacetone; Ammonium acetate; Sodium ferric EDTA; Dimethyl sulfoxide; Trichloroacetic acid; Acetic acid; Phosphate-buffered saline solutions
Method Category	Antioxidant Assay; Food Analysis
Technique	Spectrophotometry
Equipment Used	Spectrophotometer
Source	Antioxidant potential of red wine and silymarin: in-vitro evaluation Jadhav, G. B.; Upasani, C. D.; Pingale, A. P. Journal of Pharmacy Research (2009), 2 (4), 636-639. Journal of Pharmacy Research

- Man kann die Begriffe als Phrase suchen, denn werden sie in Anführungszeichen gesetzt, wie im obigen Beispiel.
- Auf der linken Seite hat man verschiedene Auswahlmöglichkeiten, um die Suche weiter einzugrenzen (z.B. bei Analyte, Matrix, Method Category, Technique, Year).
- Die Detailanzeige zu einem Eintrag sieht so aus:



Method Detail (4 of 13)

[Prev](#) [Next](#)


Analysis of (+)- α -Tocopherol in Argan oil by Extraction

CAS MN: 1-131-CAS-222187

Method Category: Natural Product Isolation Analysis

Technique: UV-visible spectroscopy; HPLC; Extraction

Materials	Role	Image	CAS RN
δ -Tocopherol	analyte	View Structure	119-13-1
α - γ -Tocopherol	analyte	View Structure	7616-22-0
(+)- α -Tocopherol	analyte	View Structure	59-02-9
Tocopherols	analyte		
Argan oil	matrix		
Grafted silica C18 (length 25 cm, diameter 3 μ) column	material		
Methanol	reagent	View Structure	67-56-1

Source

Effects of extraction methods on chemical composition and oxidative stability of Argan oil

Haloui, Rahma Belcadi; Zekhnini, Abderrahmane; Hatimi, Abdelhakim

Journal of Chemical and Pharmaceutical Research (2015), 7 (6), 518 - 524. Journal of Chemical and Pharmaceutical Research

CODEN: JCPRC5 | ISSN: 09757384

[Full Text](#)

Abstract

The effect of four extraction methods on chem. composition and oxidative stability of argan oil were studied. The output was low with artisanal extraction (39%) and press (41%) compared to Soxhlet (59%) and Folch (56%) methods. The acidity, fatty acids, phospholipids and **tocopherols** contents were significantly influenced by the extraction procedure. Acidity and phospholipids rates were superior in the oil extracted with Folch technique. The concentration of fatty acids varied from 19.45 to 20.30%, 44.95 to 47.02% and 32.17 to 34.56% for saturated, monounsaturated and polyunsaturated fatty acids resp. The **tocopherols** content was significantly higher with the methods of Folch (1256 mg/kg) and Soxhlet (1158.5 mg/kg) compared to the traditional technique (588 mg/kg) and the press (864 mg/kg). The oil extracted by Folch was more stable compared to those obtained with other extraction methods. This result was explained by the higher content of antioxidants (**tocopherols** and phospholipids) in the oil extracted by the Folch technique.

Equipment Used

HPLC system

Pump, 880-PU, Jasco

UV detector, 875, Jasco

Spectrophotometer integrator, 4400, Varian

Conditions

Instrument

 column: grafted silica C18 column (length 25 cm, diameter 3 μ); mobile phase: 100% methanol

Instructions

Seed samples

1. Harvest the *Argania spinosa* L. fruits, dry them in open air and then pulp them by hand.
2. Crush the resulting seeds to give kernels used for oil extraction.

Mechanical artisanal extraction of the oil from the seeds

1. Roast the almonds obtained after crushing seeds over low heat, which lasted until almonds reach a brown uniform color.
2. Crush the roasted almonds in a rotary arm grinding stone and mix the obtained paste by hand by adding small quantities of warm water.
3. Obtain the oil, immiscible with water, separated from the paste and floating to the surface.
4. Recover it and then filter it.

HPLC analysis for the determination of **tocopherols** in the oil samples

1. Analyze the samples using the HPLC system consisting of a Jasco 880-PU pump, a Jasco 875 UV detector and a Varian spectrophotometer integrator 4400.
2. Separate the analytes on a grafted silica C18 column (length 25 cm, diameter 3 μ).
3. Use 100% methanol as the mobile phase.
4. Dilute the extract with methanol and then inject the extract samples onto the system for the analysis.
5. Perform the determination of the **tocopherols** content by comparison to a standard mixture.

Validation

Concentration	62 $\pm$ 2.45 mg/kg, α -Tocopherol
---------------	---

17.3 Wie vergleicht man Methoden miteinander?

- Dazu wählt man bis zu drei Methoden aus, indem man auf den **Add to Compare**-Button klickt.
- Dann bekommt man eine Tabelle mit den ausgewählten Methoden angezeigt.

CAS Solutions • **METHODSNOW™** A CAS SOLUTION

← Return to Results

Compare Methods

Expand All | Collapse All

	1	2	3
Title	Analysis of (+)-α-Tocopherol in Argan oil by Extraction	Analysis of (+)-α-Tocopherol in Argan oil by Extraction	Analysis of (+)-α-Tocopherol in Argan oil by Extraction
CAS Method Number	1-131-CAS-222187	1-131-CAS-238429	1-131-CAS-233778
Method Category	Natural Product Isolation Analysis	Natural Product Isolation Analysis	Natural Product Isolation Analysis
Technique	UV-visible spectroscopy; HPLC; Extraction	UV-visible spectroscopy; HPLC; Solvent extraction; Extraction	UV-visible spectroscopy; HPLC; Extraction
Analyte	δ-Tocopherol; DL-γ-Tocopherol; (+)-α-Tocopherol; Tocopherols	δ-Tocopherol; (+)-α-Tocopherol; DL-γ-Tocopherol; Tocopherols	δ-Tocopherol; (+)-α-Tocopherol; DL-γ-Tocopherol; Tocopherols
Matrix	Argan oil	Argan oil	Argan oil
Other Materials	Methanol; Grafted silica C18 (length 25 cm, diameter 3 μ) column	Methanol; Potassium chloride; Chloroform; Grafted silica C18 (length 25 cm, diameter 3 μ) column	Methanol; Grafted silica C18 (length 25 cm, diameter 3 μ) column
Equipment Used	HPLC system; Pump, 880-PU, Jasco; UV detector, 875, Jasco; Spectrophotometer integrator, 4400, View All ▾	HPLC system; Pump, 880-PU, Jasco; UV detector, 875, Jasco; Spectrophotometer integrator, 4400, View All ▾	HPLC system; Pump, 880-PU, Jasco; UV detector, 875, Jasco; Spectrophotometer integrator, 4400, View All ▾
Conditions	Instrument: column: grafted silica C18 column (length 25 cm, diameter 3 μ); mobile phase: 100% methanol	Instrument: column: grafted silica C18 column (length 25 cm, diameter 3 μ); mobile phase: 100% methanol	Instrument: column: grafted silica C18 column (length 25 cm, diameter 3 μ); mobile phase: 100% methanol
Source	Effects of extraction methods on chemical composition and oxidative stability of Argan oil View All ▾	Effects of extraction methods on chemical composition and oxidative stability of Argan oil View All ▾	Effects of extraction methods on chemical composition and oxidative stability of Argan oil View All ▾
Preparation	Seed samples 1. Harvest the <i>Argania spinosa</i> L. fruits, dry them in oven, air and View All ▾	Seed samples 1. Harvest the <i>Argania spinosa</i> L. fruits, dry them in oven, air and View All ▾	Seed samples 1. Harvest the <i>Argania spinosa</i> L. fruits, dry them in oven, air and View All ▾
Method	Mechanical artisanal extraction of the oil from the seeds 1. Roast the almonds obtained View All ▾	Chemical extraction using Folch method 1. Mix 2 g of ground almonds with 13 ml of methanol View All ▾	Mechanical press extraction of the oil from the seeds 1. Press the unroasted almonds View All ▾
Concentration	62 ± 2.45 mg/kg, α-Tocopherol, 450.75 ± 10.99 mg/kg, γ-Tocopherol, 75.50 ± 12.39 mg/kg, δ-Tocopherol	158.50 ± 7.54 mg/kg, α-Tocopherol, 870.75 ± 3.77 mg/kg, γ-Tocopherol, 226.75 ± 2.97 mg/kg, δ-Tocopherol	86.5 ± 2.081 mg/kg, α-Tocopherol, 658.50 ± 5.97 mg/kg, γ-Tocopherol, 119.25 ± 2.5 mg/kg, δ-Tocopherol

17.4 Erweiterte Suche in MethodsNow

- Bei der erweiterten Suche kann man nach mehreren Aspekten gleichzeitig suchen.

The screenshot shows the 'Advanced Search' page of the MethodsNow interface. The 'Keyword' field contains 'vitamin e'. A dropdown menu is open, showing suggestions: 'vitamin e', 'vitamin e succinate', and 'vitamin e, butanedioate'. There are buttons for 'Return to Home', 'Add Search Criteria', and 'Clear'.

- Man kann bei der erweiterten Suche z.B. verschiedene **Stichwörter** mit OR verknüpfen und die Suche dann mit AND auf eine bestimmte **Kategorie** (im Beispiel food analysis) und eine bestimmte **Technik** (hier HPLC) eingrenzen.

The screenshot shows the 'Advanced Search' page with a complex query. The 'Keyword' field contains 'tocopherols'. Below it, there are three rows of search criteria: 'OR' with 'Keyword' 'tocotrienols', 'AND' with 'Method Category' 'food analysis', and 'AND' with 'Technique' 'hplc'. There are buttons for 'Return to Home', 'Add Search Criteria', and 'Clear'.

- Das Ergebnis dieser Suche sieht so aus:

The screenshot shows the 'Results' page of the MethodsNow interface. The search results are sorted by 'Relevance'. The first result is 'Analysis of (+)-α-Tocopherol in Corylus avellana by Solid phase extraction' (CAS MN: 1-124-CAS-54706). The result details include:

- Analyte:** (+)-α-Tocopherol; β-Tocotrienol; δ-Tocotrienol; DL-γ-Tocopherol; δ-Tocopherol; α-Tocotrienol; γ-Tocotrienol; β-Tocopherol
- Matrix:** Corylus avellana
- Other Materials:** Reagent: Sodium chloride; Sodium sulfate; Ethanol; Material: SI column (20 × 3 mm); 0.7 mm sieve
- Method Category:** Food Analysis
- Technique:** HPLC; Solid phase extraction
- Equipment Used:** Evaporator; High performance liquid chromatography system; HPLC pump; Autosampler; Fluorescence detector
- Source:** Simultaneous determination of tocopherols and tocotrienols in hazelnuts by a normal phase liquid chromatographic method; Amaral, Joana S.; Casal, Susana; Torres, Duarte; Seabra, Rosa M.; Oliveira, Beatriz P. P.

On the left side, there is a sidebar with filters for 'Analyte', 'Matrix', 'Method Category', 'Technique', and 'Year'. The 'Analyte' filter shows a list of tocopherols and tocotrienols with their respective counts. The 'Matrix' filter shows a list of matrices with their respective counts. The 'Method Category' filter shows 'Food Analysis' with a count of 21. The 'Technique' filter shows 'HPLC' with a count of 20. The 'Year' filter shows a list of years with their respective counts.



Vielen Dank an das CAS-Team, insbesondere an Jan Baur, für die
Mitarbeit an dieser SciFinderⁿ-Anleitung!