



SciFinderⁿ-Anleitung

Stand: 5. März 2020



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

(Für die WWU Münster leicht angepasst von Heike Seidel, März 2020)

Inhaltsverzeichnis

1.	Erste Schritte mit SciFinder ⁿ	4
1.1	Registrierung	4
1.2	Wie kann ich mich bei SciFinder ⁿ anmelden?.....	5
1.3	Welche Informationen finde ich in SciFinder ⁿ ?	5
1.4	Wo finde ich Hilfe zu SciFinder ⁿ ?	6
1.5	Automatismen bei der Wortsuche in SciFinder ⁿ	7
2.	Recherche in SciFinder ⁿ	8
2.1	Was ist neu?.....	8
2.2	Recherchestrategien in SciFinder ⁿ	8
2.3	Suche mit All	10
3.	Thematische Suche.....	12
3.1	Einfache Textsuche	12
3.2	Gleichzeitige Suche von Text und Struktur	13
3.3	Phrasensuche und Maskierung.....	14
3.4	Suche mit logischen Operatoren	16
3.5	Suche nach Patenten	19
3.6	Erweiterte Textsuche	19
3.7	Wie kann ich meine Suche zeitlich eingrenzen?.....	20
3.8	Suche innerhalb der Ergebnisse (Filter results)	21
3.9	Citation Map	24
3.10	Wie komme ich zum Volltext?	24
4.	Combine, Speichern, Export, Alerts und History	27
4.1	Combine	27
4.2	Speichen und Export von Ergebnissen.....	29
4.3	Import von Ergebnissen aus SciFinder ⁿ in EndNote	30
4.4	Wie übertrage ich gespeicherte Antworten und Keep Me Posted-Profile (KMP) aus SciFinder in SciFinder ⁿ ?	30
4.5	Automatische Recherchen nach gespeicherten Profilen (Alerts).....	30
4.6	History.....	31
5.	Suche nach Substanzen	32
5.1	Substanzsuche mit All	32

5.2	Substanzanzeige in SciFinder ⁿ	34
5.3	Substanzsuche mit Namen	36
5.4	Struktursuche.....	36
5.5	Suche nach Lieferanten (Supplier).....	39
5.6	Erweiterte Substanzsuche	40
5.7	Suche nach mehreren Substanzen gleichzeitig	41
6.	Suche nach Reaktionen 6.1. Übersicht	42
	6.2 Reaktionsdetails.....	43
7.	Retrosyntheseplanung.....	44
	7.1. Retrosyntheseplan erstellen.....	44
	7.2 Retrosyntheseplan öffnen und auswerten.....	44
	7.3 Alternative Schritte.....	45
	7.4 Optionen	45
8.	PatentPak.....	47
	8.1 Was ist PatentPak?	47
	8.2. Patent Viewer	48

1. Erste Schritte mit SciFinderⁿ

1.1 Registrierung

Füllen Sie bitte das Online-Formular aus unter

<https://www.uni-muenster.de/Chemie.bib005/RechercheFernleihe/Datenbanken/registrierung.html>


Sie erhalten per Mail einen Link zur Registrierung bei CAS, dem Sie bitte folgen:



Welcome to User Registration for SciFinder[®]

Click Next to begin registration as a new user.

Next >>



Registration Information

Please provide the following information:
(bold* = required)

Contact Information

First Name*:

Last Name*:

Email*:

Confirm Email*:

Phone Number:

Fax Number:

Area of Research:

Job Title:

Username and Password

Username*: [Tips](#)


Password*:

Re-enter Password*:

Security Information

Security Question*:

Answer*: [Why?](#)



Registration Information

Please provide the following information:
(bold* = required)

Password requirements:

- 7-15 characters
- Not too similar to the username
- Not too similar to the previous password
- Includes at least three of the following:
 - Lowercase letters
 - Uppercase letters
 - Numbers
 - Non-alphanumeric characters (Examples: @, #, %, &, *)

Try again, or [contact us](#) for assistance.

Nach der Registrierung bekommt man automatisch eine Bestätigungs-E-Mail von CAS.

In der E-Mail ist ein Link angegeben. Mit diesem wird die Registrierung vervollständigt.

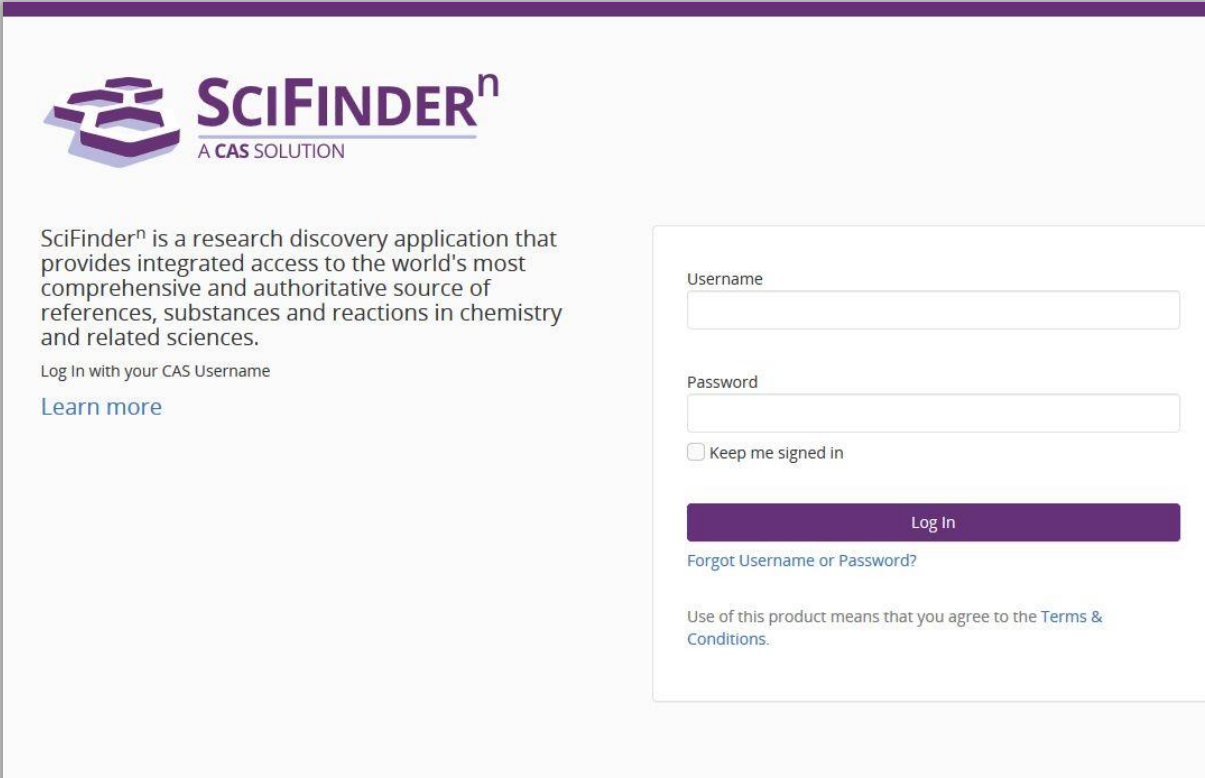
1.2 Wie kann ich mich bei SciFinderⁿ anmelden?

Wer bereits für SciFinder registriert ist, kann mit diesem Benutzernamen und Passwort auch mit SciFinderⁿ arbeiten.

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

Link zu SciFinderⁿ:

<https://scifinder-n.cas.org/>



SCIFINDERⁿ
A CAS SOLUTION

SciFinderⁿ is a research discovery application that provides integrated access to the world's most comprehensive and authoritative source of references, substances and reactions in chemistry and related sciences.

Log In with your CAS Username
[Learn more](#)

Username

Password

Keep me signed in

Log In

[Forgot Username or Password?](#)

Use of this product means that you agree to the [Terms & Conditions](#).

1.3 Welche Informationen finde ich in SciFinderⁿ?

Mit SciFinderⁿ hat man Zugang zu folgenden Datenbanken:

CAPLUS	Bibliografische Datenbank (inkl. Patente)
MEDLINE	Biomedizinische Informationen
CASreact	Reaktionen
Registry	organische und anorganische Verbindungen und Sequenzen
Chemcats	Informationen zu käufliche Substanzen
Chemlist	Regulated CHEMicals LISTing: Informationen zu chemischen Substanzen aus nationalen, US-amerikanischen und internationalen Verzeichnissen und Regelwerken

Informationsquellen für die CAS-Datenbanken

Artikel aus ca. 9.500 Zeitschriften.

- Rund 1500 wichtige chemische Zeitschriften werden cover-to-cover ausgewertet.

CAPLUS Core Journal Coverage List:

<https://www.cas.org/support/documentation/references/corejournals>

CAPLUS enthält auch Patente von derzeit 63 Patentämtern.

Die Artikel sind in mehr als 50 Sprachen publiziert:

- Artikel aus verschiedenen Medien (Bücher, Hochschulschriften, Elektronische Zeitschriften, E-Preprints etc.)

Eine Übersicht über die aktuellen **Inhalte der einzelnen CAS-Datenbanken** bekommt man hier:

<https://www.cas.org/about/cas-content>

1.4 Wo finde ich Hilfe zu SciFinderⁿ?

<https://scifinder-n.cas.org/help>

SciFinder-n Help

Home > Searching in SciFinder-n

Searching in SciFinder-n

Search by Keyword, CAS RN, Patent Number, etc.

Enter a query... Draw

When you log in to SciFinderⁿ, search options are presented at the top of the Home page. (You can click the SciFinderⁿ logo to return to the Home page at any time.)

- Select the search type:
 - All** finds substances, reactions, references, and suppliers that match your query. You can enter a **text query** that identifies the subject of interest (e.g., keyword, research topic, **document identifier**, **patent information**, substance name, CAS Registry Number, patent number) or **draw/import a structure query**. See **All Search**.
 - Substances** finds substances that match your query. You can enter a **text query** that identifies the substance (e.g., substance name, CAS Registry Number, patent number) or **draw/import a structure query**. Click **Advanced Search** to search by molecular formula and substance property. See **Find Substances**.
 - Reactions** finds reactions that match your query. You can enter a **text query** that identifies a substance that participates in the reaction (e.g., substance name, CAS Registry Number, patent number), or **draw/import a structure query**. See **Find Reactions**.
 - References** finds document references that match your query. You can enter a **text query** (e.g., keyword, research topic, **document identifier**, **patent information**, substance name, CAS Registry Number) or **draw/import a structure query**. Click **Advanced Search** to search by author, journal, or organization. See **Find References**.
 - Suppliers** finds supplier information for the substance that you specify. You can enter a **text query** that identifies the substance (e.g., substance name, CAS Registry Number) or **draw/import a structure query**. See **Find Suppliers**.
- Enter a text query or click the **Draw** button to **import** or **draw a structure query**.
- Click the magnifying glass to submit the query.

Search by Keyword, CAS RN, Patent Number, etc.

Enter a query... Draw

Weitere Informationen finden Sie auch auf der HBZ-Trainingsseite:

<https://www.cas.org/hbz/schulungseite>

1.5 Automatismen bei der Wortsuche in 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 Zeichen (auch Leerzeichen!) nach dem Wortstamm zugelassen. Außerdem ist ein Fragezeichen (?) als Maskierung möglich.

Die obige Tabelle ist noch nicht vollständig, da in 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 in 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.

2. Recherche in SciFinderⁿ

2.1 Was ist neu?

- 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 1. Antwort ist somit die beste Antwort. Ein Kriterium für das Ranking ist die Anzahl der Zitierungen. Was häufiger zitiert wurde, steht weiter oben in der Trefferliste. Das Ranking ergibt sich allerdings aus mehreren Faktoren, u.a. Anzahl Treffer im Record, Ort des Treffers im Record (v.a. in den Concepts), etc..
- Man kann mit Platzhaltern suchen: * nach einem Wortstamm und ? nach einem Wortstamm oder innerhalb eines Wortes.

Was ist wichtig? SciFinderⁿ wird auch bezüglich der **Textsuche** stetig verbessert.

2.2 Recherchestrategien in SciFinderⁿ

2.2.1 Generelles zur derzeitigen Suchstrategie

May 24, 2018	
<input type="checkbox"/> 2:14 PM	
<input checked="" type="checkbox"/> References: "natural products"with aconitum (9.148)	<input type="button" value="Rerun Search"/>
<input type="checkbox"/> 2:11 PM	
<input checked="" type="checkbox"/> References: "natural products" and aconitum (9.148)	<input type="button" value="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.

2.2.2 Verwendung unterschiedlicher Präpositionen

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

The screenshot shows the SciFinder search interface. The search bar contains the text "red wine against heart disease". A dropdown menu displays several suggestions, including "red wine against heart disease", "red wine against Heart disease", "red wine against Heart disease, necrosis", "red wine against Heart diseases, heart attack", "red wine against Heart diseases", "red wine against Heart diseases, congenital malformation", "red wine against Heart diseases, left ventricular", "red wine against Heart diseases, valvular", "red wine against Heart disease, cardiac overload", and "red wine against Heart disease, cor pulmonale".

The screenshot shows the SciFinder search results page for the query "red wine against heart disease". The page displays a list of references under the heading "References (118,923)". The results are sorted by Relevance and viewed as No Abstract. The first three results are:

- Do flavonoids in tea, red wine and onions protect against heart disease and cancer?**
By: Hertog, Michael G. L.
Polyphenols Actualites (1995), 13, 17-19 | Language: French, Database: CAplus
View Abstract
- New Zealand red wine phenolic content and heart disease**
By: Charlton, Heather; Duxbury, Mark; Sharpe, Norman; Small, Charles
Chemistry in New Zealand (1997), 61(2), 21-26 | Language: English, Database: CAplus
View Abstract
- Dietary supplementation of grape polyphenols and chronic ethanol administration of LDL oxidation and platelet function in rats**
By: Xia, Jinming; Allenbrand, Brian; Sun, Grace Y.
Life Sciences (1998), 63(5), 383-390 | Language: English, Database: CAplus
View Abstract

The page also includes a filter sidebar on the left with options for Document Type, Language, and Publication Year. A publication chart at the bottom left shows the number of results over time, with a peak around 2020.

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.

2.3 Suche mit All

In der ALL Search werden alle Suchtypen angesprochen und die Query je nach Suchtyp interpretiert. Die ALL Search eignet sich, um z.B. erste Ergebnisse zu einer Substanznamensuche zu erhalten

The screenshot displays the SCIFINDER search results page for the query "polyphenols with effect on vitamin e". The interface includes a search bar at the top with the query and a "Draw" button. On the left, there is a sidebar with "Return to Home" and a "Show only" filter menu listing "Substances (6)", "Reactions (0)", "References (3,285)", and "Suppliers (0)".

The main content area is titled "All Answer Types" and shows "Top two answers by relevance from each answer type." Under the "Substances (6)" category, two results are displayed:

- 1**: 1406-18-4. Image Not Available. Unspecified Vitamin E. 91K References, 209 Reactions, 18 Suppliers.
- 2**: 25038-54-4. Chemical structure of a polyphenol is shown. $(C_6H_{11}NO)_n$. 56K References, 1.026 Reactions, 19 Suppliers.

Below the substances, there is a "View All Substances" link. Under the "Reactions (0)" category, a message states: "We couldn't find any results. Please update your search query and try again." Under the "References (3,285)" category, the first result is: "Effect of tea polyphenols and vitamin E on antioxidant performance in broilers" by Wang, Hong-qin.

3. Thematische Suche

3.1 Einfache Textsuche

- In 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 erhalten die Ergebnisse beide Kriterien im Sinne eines logischen AND.

The screenshot shows the SciFinder search page. The search bar contains the text "red wine and heart disease". Below the search bar, a dropdown menu displays several suggestions: "red wine and Heart Disease", "red wine and Heart Diseases", "red wine and Heart disease, lesion", "red wine and Heart disease, necrosis", "red wine and Heart disease, acidosis", "red wine and Heart diseases, valvular", "red wine and Heart disease, amyloidosis", "red wine and Heart disease, anaphylaxis", and "red wine and Heart diseases, heart attack". The left sidebar shows navigation options: All, Substances, Reactions, References (selected), and Suppliers.

Trefferliste

The screenshot shows the SciFinder search results page for the query "red wine and heart disease". The page displays a list of references. The first reference is titled "Dietary supplementation of grape polyphenols and chronic ethanol administration of LDL oxidation and platelet function in rats" by Xia, Jinming; Allenbrand, Brian; Sun, Grace Y. The second reference is titled "New Zealand red wine phenolic content and heart disease" by Charlton, Heather; Duxbury, Mark; Sharpe, Norman; Small, Charles. The page includes a filter sidebar on the left with options for Document Type, Language, and Publication Year. The top right shows the search bar with the query and a "References" dropdown menu.

Detailanzeige

SciFINDERⁿ A CAS SOLUTION

References - Enter a query... Draw 🔍 ⭐ ⌚ 👤

Reference Detail (9 of 2,358) ⏪ Prev Next ⏩

🔍 Substances (3) 🧪 Reactions (0) 🗨 Cited By (0) 📄 Citation Map 📄 📧 ⭐ Save

Patent

Patent Information

Patent Number
WO2000050052

Publication Date
2000-08-31

Application Number
WO2000-BY1

Application Date
2000-02-22

Kind Code
A1

Assignee
Unknown

Source
World Intellectual Property Organization

Database Information
AN: 2000:606962
CAplus

Language
Russian

A medicated liquor for treating cardiovascular system diseases and blood diseases

By: Shengeliya, Alexandr Otarievich; Mardaleishvili, Vazha Akakievich

Abstract: A medicated liquor, GRAAL, comprises Aloe Arborescens Mill., Folium Juglandis, Cortex Querci Acutissimae, olive tree flower, Folium Rubi Corchorifolii Immaturus, Ginseng Radix, Folium Fici, Citri Limoniae flower, Prussia red, Orthosiphon Stamineus Folia leaf and bud, Cornu Cervi Pantotrichum, chaya (POL-POLA; AERVA LANATA), Propolis, Pollen, Radix Rhodiolae, Folium Rhododendri Simsii, feijoa fruit, Folium Kaki, Green Tea, Radix Acanthopanax Senticosi, red wine, citric acid, pigment, Mel, Succus Mali Pumilae, and ethanol. The product can regulate functions of immune system, endocrine system, nervous system and digestive system; improve memory and working ability; and can be used for treating cardiovascular diseases (such as hypertension, atherosclerosis, and coronary heart disease) and blood diseases (such as iron deficiency anemia, thrombocytopenic purpura, headache, ulcer, and allergic disease).

PATENTPAK PDF Full Text -

Patent Family

Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
WO2000050052	Russian	A1	PDF	2000-08-31	WO2000-BY1	2000-02-22
					BY1999-182	1999-02-25

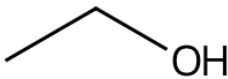
Expand All | Collapse All

▼ Concepts

▲ Substances

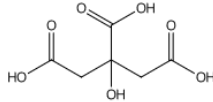
🔍 Substances (3)

64-17-5



C2H6O
Ethanol

77-92-9



C6H8O7
Citric acid

1309-37-1

Image Not Available

Fe2O3
Iron oxide (Fe₂O₃)

3.2 Gleichzeitige Suche von Text und Struktur


SciFinderⁿ ermöglicht es, gleichzeitig mit Text sowie Struktur- oder Reaktionsqueries zu suchen. Dazu erstellt man sowohl eine Suchanfrage für Text, als auch für Struktur oder Reaktion, siehe auch die Kapitel zur Struktur-, bzw. Reaktionsuche.

Die folgenden Screenshots zeigen dies anhand einer Substruktursuche für das Grundgerüst der Cardenolide sowie einer Textquery für den Monarchfalter, *Danaus plexippus*.

References - "danaus plexippus" × Edit 🔍

References (46)

🔍 Substances ▼ 🧪 Reactions ▼ 🗨 Cited By ▼ Edit Drawing Remove



The screenshot shows a search results interface for 'References' (46 results). The left sidebar has filters for 'Structure Match' (As Drawn (0), Substructure (46)), 'Filter by' (Document Type: Journal (45), Patent (1), Review (1); Substance Role: Adverse Effect (3), Analytical Study (3), Biological Study (37), Process (3), Properties (2); Language), and 'Full Text' (1). The main content area displays a reference titled 'Milkweeds, monarch butterflies and the ecological significance of cardenolides' by Malcolm, Stephen B. (1995). The abstract discusses the contribution of Miriam Rothschild to the 'monarch cardenolide story' and the evolution of cardenolide production in plants and monarch butterflies.

3.3 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 z.B. nach fungicid, fungicides, fungicidal und auch nach Substanzen, deren Name mit Fungicid beginnt gesucht. Das Sternchen ersetzt auch Leerzeichen, so wird z.B. mit wine* auch wine pigments gefunden.
- Mit einem Fragezeichen (?) kann man nach einem Wortstamm 0 oder 1 Zeichen einschließen.
- Das Fragezeichen und das Sternchen darf auch innerhalb eines Wortes verwendet werden.
- Maskierungen am Wortanfang sind nicht erlaubt.

Phrasensuche

The screenshot shows the SciFinder search interface. The search bar contains the query "red wine" and "heart disease". Below the search bar, a dropdown menu displays suggestions for phrase searches, 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 Diseases-9", "red wine" and "heart Rh disease", "red wine" and "heart Disease CML", and "red wine" and "heart Eye disease".

- 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 page. The search bar contains the text 'fungicid*'. A dropdown menu is open, displaying the following suggestions:

- Fungicidal action
- Fungicidal activity
- Fungicidal microbicial and microbiostatic action
- Fungicidal pesticides
- Fungicide
- Fungicide agent
- Fungicide agents
- Fungicides
- Medical fungicide
- Medical fungicides

On the left side, there is a navigation menu with options: All, Substances, Reactions, References (selected), and Suppliers. The top right corner includes 'Saved', 'History', and 'Account' buttons.

The screenshot shows the search results for 'fungicid*'. The results are displayed in a list format under the 'References' tab.

The strobilurine fungicides

By: Clough, John M.; Godfrey, Christopher R. A.
 Edited by Hutson, David; Miyamoto, Junshi
 Fungicidal Activity (1998), 109-148 | Language: English, Database: CAplus
[View Reference Detail](#)

Abstract: A review with many references on strobilurines and their natural and synthetic analogs.

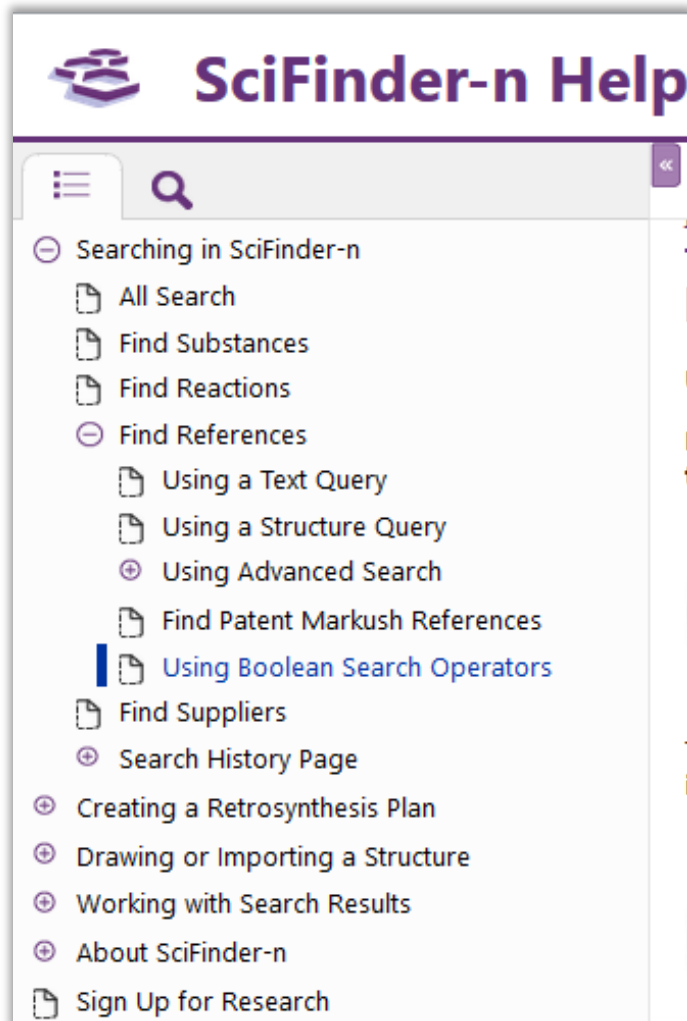
Full Text ▾ Substance (1) Reactions (0) Cited By (35) Citation Map

Production of p-Tolylsäure

By: Johnston, Howard; -bromid, Pentachlorbenzolsulfenylchlorid bzw.; F. 102—103° bzw.; wird durch Rk. von Pentachlorthiophenol mit Cl₂ oder Bra in CCl₄ oder Hexan bei: Pentachlorhenylmercapto-2.3-dibrompropionaldehyd, bes. 25° erhalten. Durch Rk. mit Acrolein u. Bromieren entsteht; **Fungicid**, der als: Rhizoctonia, bes. gegen; Sulfenamide, solani dient. Mit Aminen entstehen; vom23/11.1956, mit Ketonen substituierte Ketone. — Zwischenprodukte. (A. P.2944080; Arnold, ausg. 5/7.1960.) G. Krauss.H1090 Zdenök; et al
 FR1 217 587 1960-05-04 | Language: German, Database: CHEMZENT
[View Reference Detail](#)

3.4 Suche mit logischen Operatoren

Diese Beispiele findet man auch auf der Hilfeseite zu SciFinderⁿ:

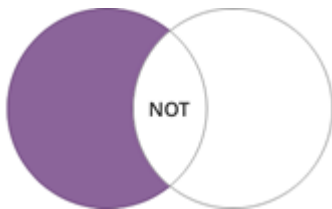


Die folgenden Beispiele sind der Hilfeseite entnommen.



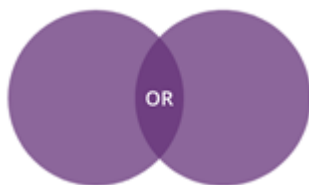
Beispiele:

- 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

3.5 Suche nach Patenten

- Bei All, Substances, Reactions oder References kann man auch nach Patenten suchen, z.B. mit Hilfe der Patentnummer.
- Die Patentnummer muss **ohne Leerzeichen** zwischen dem Länderkürzel und der Zahl angegeben werden. Beispiel: **JP09316484**

The screenshot shows the SciFinder interface with the search results for the patent JP09316484. The search bar at the top contains 'References JP09316484'. The left sidebar has filters for Document Type (Patent (1)), Language (Japanese (1)), and Publication Year (1992 to 2002). The main content area displays the reference details for 'Non-tempering type hard butter' by Kida, Haruyasu; Arai, Masako; Tashiro, Yoichi, published in Japan in 1997-12-09. The abstract describes a butter suitable for chocolate making, containing specific triglycerides and fatty acid compositions. The interface includes options for 'Full Text', 'Substances (0)', 'Reactions (0)', 'Cited By (11)', and 'Citation Map'.

3.6 Erweiterte Textsuche

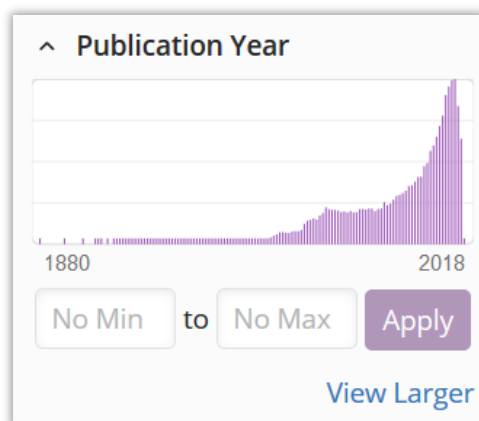
- Wenn man nach Autoren, Zeitschriften oder Einrichtungen suchen will, dann verwendet man dazu die erweiterte Suche.
- Man klickt auf **Advanced Search** und es erscheint ein neuer Bildschirm.

The screenshot shows the SciFinder Advanced Search interface. The search bar is empty, and the left sidebar has filters for All, Substances, Reactions, References (selected), and Suppliers. The main content area displays the search criteria: 'Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, etc.' and a search bar with the placeholder 'Enter a query...'. The interface includes options for 'Draw' and 'Search'.

- 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.

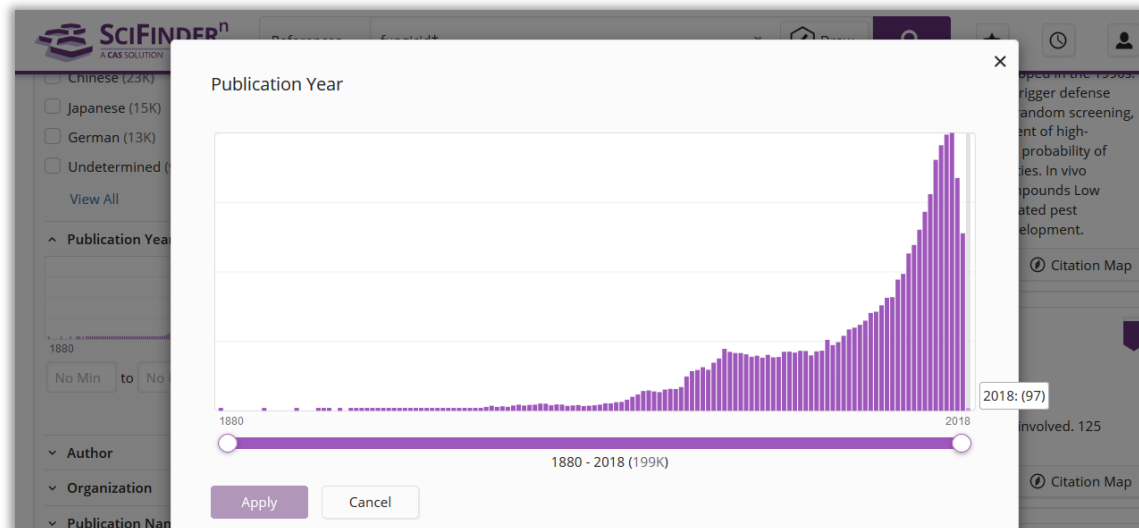
3.7 Wie kann ich meine Suche zeitlich eingrenzen?

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.



3.8 Suche innerhalb der Ergebnisse (Filter results)

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

Es stehen folgende Filter zur Verfügung: Relevanz, Dokumententypen, Sprache, Publikationsjahr.

Filter nach der Relevanz

- Dem Ranking nach der Relevanz wurde in 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.

The screenshot shows the SCIFINDER search results page. The search query is "red wine" and (heart disease or coronary disease or ca...". The interface includes a navigation bar with "References" and "Draw" buttons, and a search bar. The main content area displays a list of references, with the first one selected. The selected reference is titled "Red wine prevents homocysteine-induced endothelial dysfunction in porcine coronary arteries" by Fu, Weiping et al. (2003). The abstract text is visible, discussing the effects of red wine on endothelial dysfunction. The interface also features a filter sidebar on the left with categories like Document Type, Language, and Publication Year, and a bar chart showing the distribution of results over time.

3.8.1 Concepts

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

The screenshot shows the 'Concepts' filter sidebar. It lists several concepts with their respective counts: Food contamination (3,848), Mycotoxins (3,704), Ochratoxins (3,371), Animals (1,509), and Aflatoxins (1,150). A 'View All' link is provided at the bottom of the list.

- **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.

Concept

Top Count Alphanumeric Search

2 Selected

- Food contamination (3,848)
- Mycotoxins (3,704)
- Ochratoxins (3,371)
- Animals (1,509)
- Aflatoxins (1,150)
- Food analysis (1,093)
- Humans (1,068)
- Aspergillus (909)
- Zea mays (864)
- Kidney (833)
- Homo sapiens (785)
- Human (785)
- Corn (690)
- Penicillium (682)
- Animal Feed (346)
- Cereal (grain) (346)
- Fusarium (345)
- Enzyme-linked immunosorbent assay (326)
- Edible Grain (318)
- HPLC (312)
- Tandem mass spectrometry (312)
- Oryza sativa (307)
- Rice (307)
- Risk assessment (306)
- Temperature effects, biological (303)
- Grape (294)
- Milk (191)
- DNA damage (190)
- Fluorescence (189)
- Chromatography, Liquid (188)
- DNA (185)
- Immunoassay (185)
- Aptamers (184)
- Biosensing Techniques (181)
- Blood serum (180)
- Chickens (180)
- pH (179)
- Oxidative stress, biological (178)
- Urine (176)

Apply Cancel

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

Concept

Top Count Alphanumeric Search

Concept Name

analy* Search

3 Selected

- Biological analytical standard substances (1)
- Blood analysis (73)
- Blood Chemical Analysis (18)
- Chemistry Techniques, Analytical (17)
- Clinical analysis (2)
- Cluster analysis (14)
- Correlation analysis (2)
- Cost-Benefit Analysis (3)
- Costs and Cost Analysis (1)
- Kinetic analysis (1)
- Least-Squares Analysis (5)
- Meta-Analysis as Topic (1)
- Microarray Analysis (5)
- Microfluidic Analytical Techniques (7)
- Milk analysis (47)
- Monte Carlo statistical analysis (1)
- Multiplex analysis (6)
- Spectrum Analysis (1)
- Spectrum Analysis, Raman (7)
- Statistical analysis (9)
- Survival Analysis (4)
- Trace analysis (1)
- Urine analysis (49)
- Wine analysis (172)

Apply Cancel

3.9 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 in SciFinder-n verfügbaren Publikationen, d.h. verlinkte Datenbankrecords.

SCI FINDERⁿ
A CAS SOLUTION

References ▾ Enter a query...

Citation Map

[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
Journal of Surgical Research (2003), 115(1), 82-91 | Language: English, Database: CAplus

Abstract: 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...

[View More ▾](#)

Full Text ▾

Filter by

- Document Type
 - Journal (86)
 - Review (16)
 - Clinical Trial (1)
- Author
 - Olas, Beata (8)
 - Malinowska, Joanna (7)
 - Chen, Changyi (6)
 - Stochmal, Anna (5)
 - Oleszek, Wieslaw (4)

References This Document Cites

- Apparent hydroxyl radical production by peroxynitrite: implications for endothelial injury from nitric oxide and superoxide
Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America (1990)
Cited By 5.609 [Map](#)
- Wine, alcohol, platelets, and the French paradox for coronary heart disease.
Lancet (London, England) (1992)
Cited By 2.424 [Map](#)
- Inhibition of oxidation of human low-density lipoprotein by phenolic substances in red wine
Lancet (1993)
Cited By 1.290 [Map](#)

References Citing This Document

- Wine, beer, alcohol and polyphenols on cardiovascular disease and cancer
Nutrients (2012)
Citing 200 [Map](#)
- Direct vasoactive and vasoprotective properties of anthocyanin-rich extracts
Journal of Applied Physiology (2006)
Citing 150 [Map](#)
- Ginsenoside Rb1 Preconditioning Protects Against Myocardial Infarction After Regional Ischemia and Reperfusion by Activation of Phosphatidylinositol-3-kinase Signal Transduction
Cardiovascular Drugs and Therapy (2008)
Citing 77 [Map](#)

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.

3.10 Wie komme ich zum Volltext?

- Dazu einfach den Button **Full Text** anklicken.
- Wenn die entsprechende Publikation frei verfügbar ist oder für die eigene Einrichtung lizenziert ist, dann kann man 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](#)



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

Login Register Claim Your Subscription Subscribe

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

All Content Search Advanced Search

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

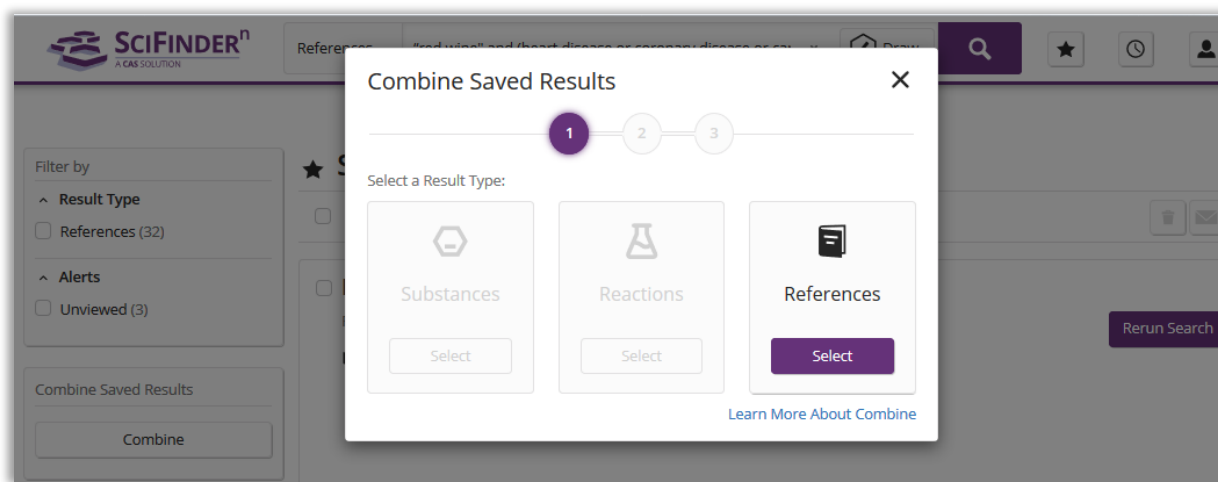
- PDF (95 KB)
- Email Article
- Add to My Reading List
- Export Citation
- Create Citation Alert
- Cited by in Scopus (1)
- Request Permissions
- Order Reprints (100 minimum order)

4. Combine, Speichern, Export, Alerts und History

4.1 Combine

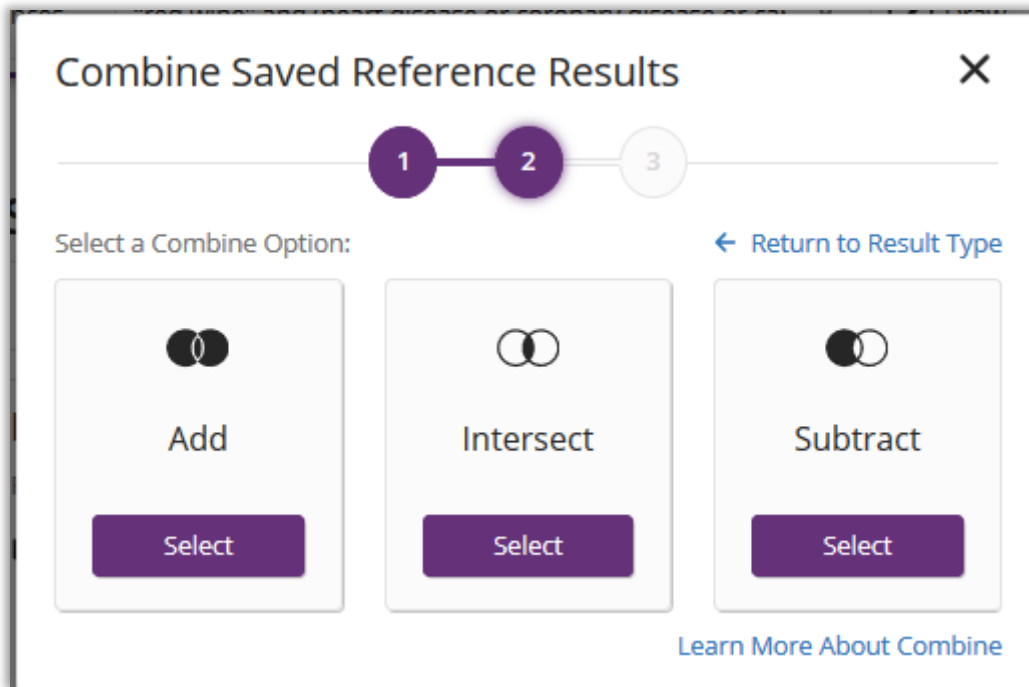
Gespeicherte Antwortsätze können mit Combine miteinander verbunden werden.

- 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.

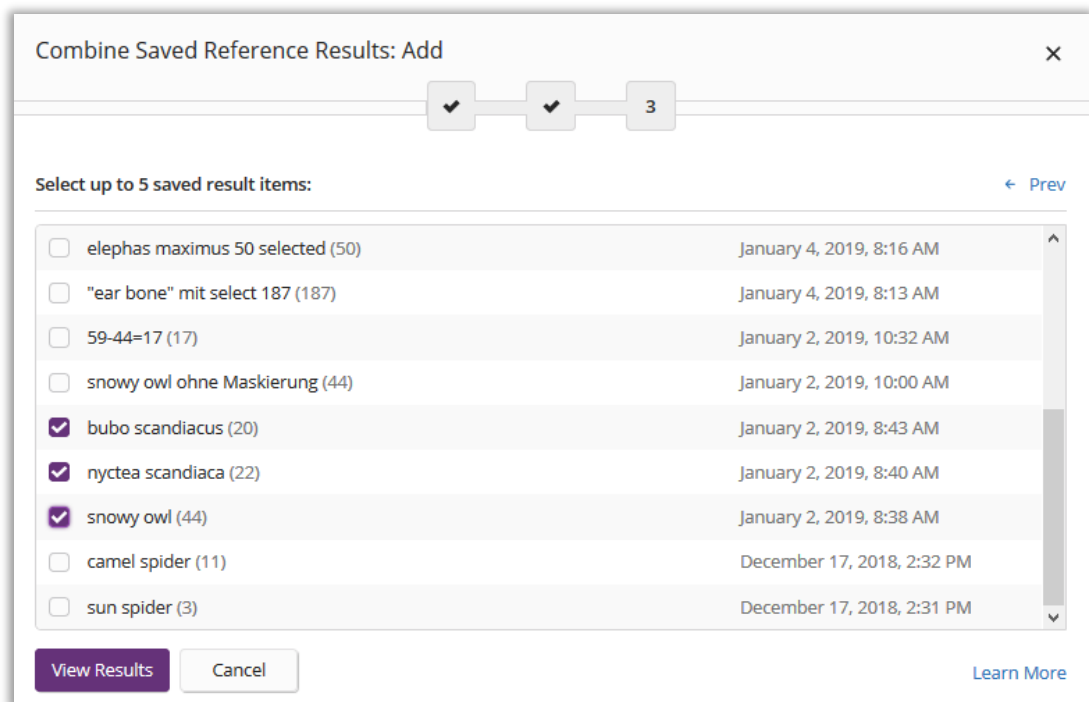


Es gibt 3 Möglichkeiten:

- **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** können nur 3 UND-Verknüpfungen erfolgen!
- **Substract:** Hiermit kann man Ergebnisse einer Suche bei einer anderen Suche ausschliessen (im Sinne von **NOT**).

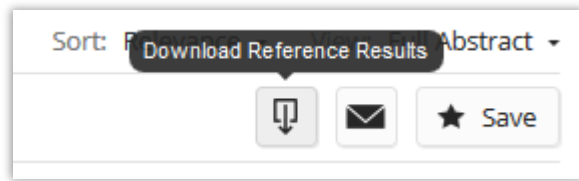


Beispiel: Add

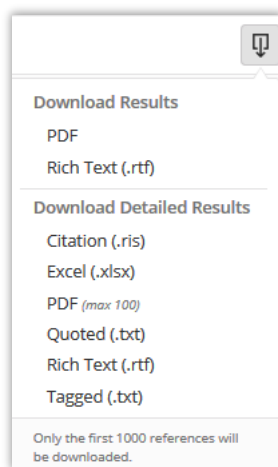


Bei **View Results** bekommt man bei **ADD** die mit OR verknüpften Ergebnisse angezeigt.

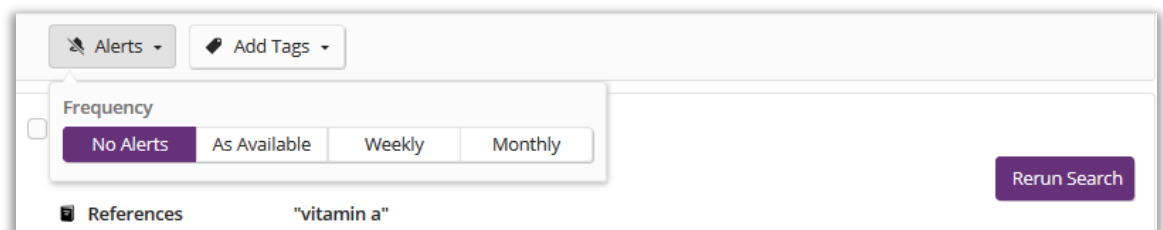
4.2 Speichen und Export von Ergebnissen



- 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 speichern.
- Hinter Alerts verbirgt sich das „Keep Me Posted“ aus der SciFinder-Version.
- Man kann nun auswählen, ob man zu dieser Thematik keine, wenn verfügbar, wöchentlich oder monatlich neue Ergebnisse erhalten möchte.



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



4.3 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.

4.4 Wie übertrage ich gespeicherte Antworten und Keep Me Posted-Profil (KMP) aus SciFinder in SciFinderⁿ?

- Dazu gibt es in SciFinderⁿ bei **Saved** den Button **Migrate**. Wenn man diesen Button anklickt, dann werden aus SciFinder alle gespeicherten Antwortsätze und alle KMP-Profilen in SciFinderⁿ übertragen.
- Sowohl mit den gespeicherten Antworten als auch mit den Profilen zu Literaturstellen (References) können jederzeit erneut Suchen mit **Rerun Search** erfolgen.
- Bitte erwarten Sie aufgrund der unterschiedlichen Suchalgorithmen abweichende Ergebnisse in SciFinder und SciFinderⁿ.

4.5 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 in SciFinderⁿ ansehen.

supercoiling ✎
 February 4, 2019, 10:47 AM
 References "supercoiling promoter"
 Alerts Add Tags
 Frequency
 No Alerts As Available Weekly Monthly
 Rerun Search
 View Saved

4.6 History

- Auf der Startseite werden immer die letzten 4 Suchen angezeigt, diese kann man mit **Edit** in die Suchzeile einfügen und dort auch verändern.

SciFINDERⁿ
 Saved History Account
 Recent Search History
 February 14, 2020
 10:18 AM
 All "ochratoxin B"
 Substances: (1)
 Reactions: (9)
 References: (574)
 Suppliers: (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

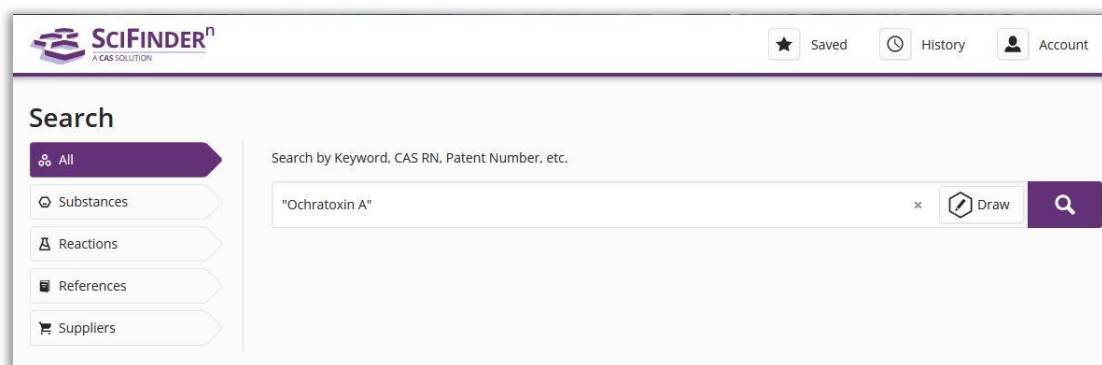
- Mit „Rerun Search“ kann man eine Suche noch einmal starten.
- Die farbige Hervorhebung der Begriffe bleibt erhalten.

5. Suche nach Substanzen

- Man kann einen Text eingeben (z.B. einen Substanznamen, eine CAS-Registrynummer, eine Patentnummer), der eine Substanz identifiziert oder eine Struktursuche machen.
- Wenn sowohl Text- als auch Struktursuchen für eine Substanzsuche eingegeben werden, dann wird die Textsuche ignoriert.
- Von der Startseite der Datenbank aus kann man die erweiterte Suche aufrufen, um die Suche mit einer Molekularformel zu starten.

5.1 Substanzsuche mit All

- Man kann eine Substanz bei **All** eingeben und somit gleichzeitig in der Substanzdatenbank, bei den Reaktionen und nach Literatur zu dieser Substanz suchen.
- Substanzen, die aus mehr als 1 Wort bestehen sucht man als Phrase, z.B. „ochratoxin B“.



SciFinderⁿ
A CAS SOLUTION

All "ochratoxin B" Draw 🔍 ⭐ ⌚ 👤

Return to Home

Show only

- Substances (1)
- Reactions (9)
- References (574)
- Suppliers (34)

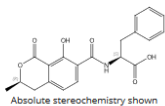
All Answer Types

Top two answers by relevance from each answer type.

Substances (1)

1

4825-86-9



Absolute stereochemistry shown

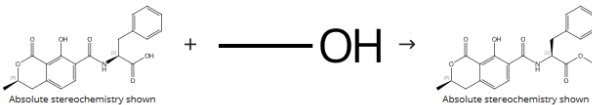
C₂₀H₁₉NO₆
Ochratoxin B

452 References 9 Reactions 31 Suppliers

[View All Substances](#)

Reactions (9)

Scheme 1 (1 Reaction)



Absolute stereochemistry shown

Suppliers (31)

Suppliers (410)

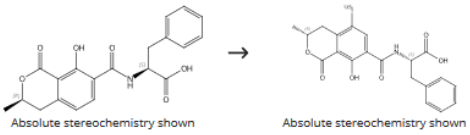
Absolute stereochemistry shown

Suppliers (3)

Steps: 1
Yield: 100%

[Expand Scheme](#)

Scheme 2 (1 Reaction)



Absolute stereochemistry shown

Absolute stereochemistry shown

Suppliers (31)

Steps: 1
Yield: 42%

[Expand Scheme](#)

[View All Reactions](#)

References (574)

1

Biotransformation and nephrotoxicity of ochratoxin B in rats.

By: Mally, Angela; Keim-Heusler, Heike; Amberg, Alexander; Kurz, Michael; Zepnik, Herbert; Mantle, Peter; Völkel, Wolfgang; Hard, Gordon C; Dekant, Wolfgang

Toxicology and applied pharmacology (2005), 206(1), 43-53 | Language: English, Database: MEDLINE

Ochratoxin B (OTB), a secondary metabolite of *Aspergillus ochraceus*, is the nonchlorinated analogue of the mycotoxin ochratoxin A (OTA), which is one of the most potent renal carcinogens in rodents. Despite the closely related structure, OTB is considered to be of much lower toxicity. OTA is poorly metabolized and slowly eliminated, and this may play an important role in OTA toxicity, carcinogenicity, and organ specificity. Since little is known regarding biotransformation and renal toxicity of OTB, the aim of this study was to investigate biotransformation of OTB in rats and to characterize the nephrotoxicity and cytotoxicity of OTB. Male F344 rats were administered either a single dose of OTB (10 mg/kg bw) or repeated doses (2 mg/kg bw, 5 days/week for 2 weeks) and euthanized 72 h after the last dosing. In proximal tubule cells of animals treated with a single high dose of OTB, a slight increase in mitotic figures was observed, but no treatment-related changes were evident in clinical chemistry, in renal function, and histopathology after repeated administration. Excretion of OTB and metabolites in urine and feces was analyzed using both HPLC with fluorescence detection and LC-MS/MS. Ochratoxin beta, which results from cleavage of the peptide bond, was the major metabolite excreted in urine in addition to small amounts of 4-hydroxy-OTB. In total, 19% of the administered dose was recovered as OTB and ochratoxin beta in urine and feces within 72 h after a single dose. In contrast to OTA, no tissue-specific retention of OTB was evident after single and repeated administration. In LLC-PK1 cells, a renal cell culture system that retains much of the specific features of the proximal tubule, only minor differences in the extent of cytotoxicity of OTA and OTB were observed. At low concentrations (< 25 microM), treatment with OTA was slightly more toxic, whereas reduction in cell viability was similar at concentrations up to 100 microM. In summary, these data suggest that OTA and OTB have a similar potential to induce cytotoxicity *in vitro*, but large differences in their potential to induce nephrotoxicity in rodents. OTB is more extensively metabolized and more rapidly eliminated than OTA. The lack of specific retention of OTB in the kidneys and the differences in toxicokinetics may therefore provide an explanation for the lower toxicity of OTB.

5.2 Substanzanzeige in SciFinderⁿ

Generell gilt: wenn bei einem Link rechts-klickt, dann kann man den Link in einem neuen Fenster öffnen oder in einem neuen Tab. Man kann dann in den verschiedenen Fenstern/Tabs separat arbeiten.

- Wenn man auf der Startseite mit der Suche nach Substanzen beginnt, dann bekommt man den Substanzbildschirm angezeigt.
- Das Bild unten zeigt die Ansicht mit **View Full**, man kann sich auch weniger Informationen anzeigen lassen mit **View Partial**.

The screenshot displays the SciFinder interface for the search term "ochratoxin A". The main content area shows the substance details for CAS number 303-47-9. The chemical structure is shown with absolute stereochemistry. The molecular formula is $C_{20}H_{18}ClNO_6$. The interface includes a filter sidebar on the left and a table of key physical properties on the right.

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

Experimental Properties | Spectra

SciFINDERⁿ A CAS SOLUTION

Substances - "ochratoxin A" × Draw 🔍 ☆ ⌚ 👤

← Return to Home

Filter by

- Commercial Availability
 - Available (1)
- Reaction Role
 - Product (1)
 - Reactant (1)
- Reference Role
 - Adverse Effect (1)
 - Analytical Study (1)
 - Biological Study (1)
 - Combinatorial Study (1)
 - Formation (1)
 - View All
- Stereochemistry
- Number of Components
- Substance Class
- Molecular Weight
- Experimental Property

Substances (1) View Partial

References Reactions Supplier

303-47-9 View Detail

Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)

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

5,812 References 50 Reactions 42 Suppliers

- Die Struktursucheoptionen (**Structure Match**) erscheinen nur nach einer Suche mit der Strukturformel.
- Substanzen kann man PDF oder als SDFfile herunterladen. Die PDF-Datei enthält Links zu Daten in SciFinderⁿ. Ein Structure Data File (*.sdf) ist ein File-Format, welches von einigen Datenbankprogrammen gelesen werden kann.

SciFINDERⁿ A CAS SOLUTION

Substances - Enter a query... Edit 🔍 ☆ ⌚ 👤

← Return to Home

Structure Match

- As Drawn (29)
- Substructure (71)
- Similarity (786)

Filter by

- Commercial Availability
 - Available (6)
 - Not Available (14)
- Reaction Role
 - Product (4)

Substances (20) View Full

1 Selected References Reactions Supplier

303-47-9 View Detail

Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)

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

5,812 References 50 Reactions 42 Suppliers

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

Experimental Properties | Spectra

5.3 Substanzsuche mit Namen

Eine oder mehrere Substanzen können mit Hilfe von Identifikatoren wie der CAS Registry Number oder chemischen Namen gesucht werden.

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

5.4 Struktursuche

Strukturen lassen sich mittels SMILES, InChI, .mol oder CAS Nummern in den Struktureditor importieren oder komplett neu zeichnen.

The screenshot shows a search interface with the following elements and annotations:

- Search by Substance Name, CAS RN, Patent Number, etc.**: The main search bar with the placeholder text "Enter a query...".
- Chemischen Namen eingeben**: Annotation pointing to the search bar.
- Advanced substance search öffnen**: Annotation pointing to the "Advanced Search" link below the search bar.
- Use Advanced Search for Molecular Formula, Substance Property, or Experimental Spectra**: Text below the search bar.
- Markush-Suche**: Annotation pointing to the "Search Patent Markush" button.
- Struktur**: A chemical structure of a sulfonamide group (NS(=O)(=O)C) is displayed.
- Anklicken der Struktur zum Editieren**: Annotation pointing to the structure.
- Anklicken um Struktur zu zeichnen**: Annotation pointing to the "Edit" button.
- Edit Drawing** and **Remove**: Buttons below the structure.

5.4.1 Struktureditor und Substanzanzeige

Import und Export

Enter a CAS RN, SMILES or InChI

Atome und Bindungen zeichnen | Radierer

Eingabe von CAS Nummer, SMILES or InChI um Struktur zu erstellen

Shortcut Keys

Tastenkürzel

Elementsymbol wählen | Shortcuts

Variablen wählen | Eigene Variablen definieren

Wiederholeinheiten | Variable Ringsubstitution

Kohlenstoffkette zeichnen | Vorlagen wählen bzw. selbst erstellen

Marquee | Lasso

Ringkondensation blockieren | Lock atoms um Substitution zu verhindern

Fragment rotieren | Fragment spiegeln

Ladungen hinzufügen

Heteroatome und Isotope auswählen

Ringe zeichnen

Edukte und Produkte def. | Reaktionsrolle manuell wählen

C H O S N P Cl Br F I Si D T

Atom Mapping | Mapping der Bindungen

Bindungen zeichnen.

Strukturmatch auswählen

Sortierung ändern

Displaydetails einstellen

Structure Match

As Drawn (102)

Substructure (4.3M)

Similarity (519)

Analyze Structure Precision

Analyze structure precision

Commercial Availability

Available (1.5M)

Not Available (2.7M)

Reaction Role

Product (588K)

Reactant (140K)

Reagent (394)

Catalyst (396)

Solvent (46)

Reference Role

Adverse Effect (4,438)

Analytical Study (8,123)

Biological Study (1.6M)

Combinatorial Study (2,775)

Formation (2,623)

View All

Substances (4,303,959)

Sort: Number of Suppliers

View Partial

References

Reactions

Suppliers

1 90357-06-5

2 149104-88-1

3 373384-18-0

Anklicken für Details

4 80-08-0

Auf Struktur klicken um Menü zu erhalten

Substanzdaten

Substance Detail

Reactions (3,151)

Synthesize (87)

Create Retrosynthesis Plan

References (14K)

Suppliers (107)

Edit Structure

Reset

.sdf Download

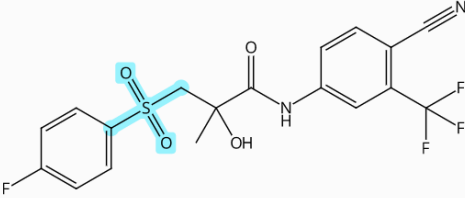
Struktur im Editor öffnen

Referenzrollen (auch Substance roles genannt) beschreiben den Kontext der Substanz in der Publikation

5.4.2 Detailanzeige bei Substanzen

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

CAS Registry Number
90357-06-5



Molekularformel in Hill-Schreibweise

$C_{18}H_{14}F_4N_2O_4S$

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

Wesentliche Eigenschaften

Experimental Properties | Spectra

Other Names

Experimental Properties

Eigenschaften sind angegeben oder im verlinkten Volltext einsehbar

9 Other Names for this Substance

- (±)-4'-Cyano-α,α,α-trifluoro-3-[(p-fluorophenyl)sulfonyl]-2-methyl-m-lactotolidide
- Bicalutamide
- Casode
- Casodex
- Cosudex
- ICI 176334

Die aufgelisteten Namen beinhalten Systematische Namen, Trivialbezeichnungen, Handelsnamen, Entwicklungs-codes. Die Synonyme werden aus den inde-

5.5 Suche nach Lieferanten (Supplier)

SCI FINDERⁿ A CAS SOLUTION

Substances ▾ "ochratoxin A" × Draw 🔍 ★ ⌚ 👤

← Return to Home

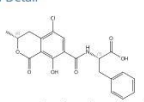
Filter by

- Commercial Availability
 - Available (1)
- Reaction Role
 - Product (1)
 - Reactant (1)
- Reference Role
 - Adverse Effect (1)
 - Analytical Study (1)
 - Biological Study (1)
 - Combinatorial Study (1)
 - Formation (1)
- Stereochemistry
- Number of Components
- Substance Class
- Molecular Weight
- Experimental Property

Substances (1) View Full ▾

1 Selected References ▾ Reactions ▾ Supplier ▾

303-47-9 View Detail



Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)

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

5,812 References 50 Reactions 42 Suppliers

Get Suppliers for Substances

All Results Selected Results

Condition	
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

Experimental Properties | Spectra

SCI FINDERⁿ A CAS SOLUTION






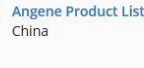
Suppliers ▾ 303-47-9 × Draw 🔍 ★ ⌚ 👤

← Return to Home

Filter by

- Preferred Suppliers
 - Preferred (1)
 - No Preference (41)
- Supplier
 - SIAL (3)
 - SIGMA (3)
 - Wako Pure Chemicals Product List (3)
 - Apollo Scientific Biochemicals Product List (2)
 - ZereneX Molecular Building Blocks (2)
- Purity
 - ≥99% (1)
 - 95-98% (17)
 - 90-94% (1)
- Quantity
 - Milligrams (19)
 - Grams (6)
 - Bulk (13)
 - Screening (6)
- Ships Within
- Stock Status
- Order From Supplier
- Country

Suppliers (42)

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 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

5.6 Erweiterte Substanzsuche

- Bei der erweiterten Substanzsuche kann man auch nach Summenformeln suchen.
- Zusätzlich kann man dort nach physiko-chemischen Eigenschaften oder Spektren suchen.

SciFinder[®]
A CAS SOLUTION

Return to Home Page

Substances

References

Advanced Substance Search

Use up to ten search criteria to make your Substance search.

Molecular Formula

Enter one Molecular Formula.

C9H8O4

Ex: C6H6
(C8H8)_x
C22H26CuN2O5.C2H3N

Add Another Molecular Formula

Q

SciFinder[®]
A CAS SOLUTION

Substances ▾ Enter a query...

Draw

Q

★

🕒

👤

Return to Home

Substances (968)

Sort: Relevance ▾ View Full ▾

References ▾ Reactions ▾ Suppliers ▾

1

50-78-2

CC(=O)OC1=CC=CC=C1C(=O)O

C₉H₈O₄
Aspirin

90K References 1.810 Reactions 107 Suppliers

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

Experimental Properties | Spectra

2

331-39-5

O=C(O)/C=C/c1ccc(O)c(O)c1

C₉H₈O₄
Caffeic acid

26K References 1.168 Reactions 126 Suppliers

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

Experimental Properties | Spectra

Filter by

- Commercial Availability
 - Available (612)
 - Not Available (356)
- Reaction Role
 - Product (457)
 - Reactant (293)
 - Reagent (9)
 - Catalyst (7)
 - Solvent (1)
- Reference Role
 - Adverse Effect (16)
 - Analytical Study (77)
 - Biological Study (195)
 - Combinatorial Study (19)
 - Formation (68)
 - View All
- Stereochemistry
- Number of Components
- Substance Class
- Isotopes
- Metals
- Molecular Weight

5.7 Suche nach mehreren Substanzen gleichzeitig

- Man kann gleichzeitig nach mehreren Substanzen suchen.
- Dazu gibt man die Registrynummern oder Substanznamen nacheinander ein (getrennt durch Leerzeichen).
- Möchte man Substanznamen suchen, die aus mehreren Termen bestehen, setzt man den gesamten Ausdruck in Anführungszeichen, z.B. "Ochratoxin B"
- Die gleichzeitige Suche von mehreren Substanzen mit dem logischen Operator OR funktioniert im Prinzip zwar auch, aber OR wird hier auch als Substanz betrachtet.

SCIFINDERⁿ
A CAS SOLUTION

Substances ▾ "Ochratoxin A" "Ochratoxin B" × Draw 🔍 ★ 🕒 👤

← Return to Home

Filter by

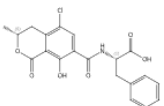
- Commercial Availability
 - Available (2)
- Reaction Role
 - Product (2)
 - Reactant (2)
- Reference Role
 - Adverse Effect (2)
 - Analytical Study (2)
 - Biological Study (2)
 - Combinatorial Study (1)
 - Formation (2)
 - [View All](#)
- Stereochemistry
- Number of Components
- Substance Class
- Isotopes
- Metals
- Molecular Weight
- Experimental Property
- Regulatory Information
- Search Within Results

Substances (2) Sort: Relevance ▾ View Full ▾

References ▾ Reactions ▾ Suppliers ▾ Save

1

303-47-9



Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)

C₂₀H₁₈ClNO₆
Ochratoxin A

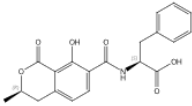
9.323 References 50 Reactions 59 Suppliers

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

[Experimental Properties](#) | [Spectra](#)

2

4825-86-9



Absolute stereochemistry shown

C₂₀H₁₉NO₆
Ochratoxin B

452 References 9 Reactions 31 Suppliers

Key Physical Properties	Value	Condition
Molecular Weight	369.37	-
Melting Point (Experimental)	221 °C	-
Boiling Point (Predicted)	632.4±55.0 °C	Press: 760 Torr
Density (Predicted)	1.361±0.06 g/cm ³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
pKa (Predicted)	3.40±0.10	Most Acidic Temp: 25 °C

[Experimental Properties](#) | [Spectra](#)

6. Suche nach Reaktionen

6.1. Übersicht

Reaktionssuchen können mit Hilfe von Substanznamen, CAS Registry Numbers, Dokumentidentifikatoren, chemischen Namen, Strukturen und Reaktionschemata erstellt werden.

Reaktionen mit identischen Edukten und Produkten sind in Schemata gruppiert, innerhalb eines Schemas erfolgt die Sortierung der Reaktionen nach Ausbeute.

Search

All

Substances

Reactions (Reaktionen auswählen)

References

Suppliers

Search by Keyword, Substance Name, CAS RN, Patent Number, etc.

Enter a query...

Edit

Search

Anklicken um Reaktionsquery zu editieren

Edit Drawing

Remove

Create Retrosynthesis Plan

Set Plan Options

Recent Search History

Reaktionen nach Strukturmatch

Ausbeute für angezeigte Reaktionen

Structure Match

As Drawn (0)

Substructure (198)

Similarity (1,758)

Filter by

Suppliers anzeigen Suppliers (103)

Yield

90-100% (13)

80-89% (16)

70-79% (29)

50-69% (23)

30-49% (12)

View All

Number of Steps

1 (198)

Non-Participating Functional Groups

Carbamate (55)

Ketone (47)

Cyclic ketone (46)

Halide (45)

Carboxylic ester (25)

View All

Reaction Mapping

Mapping Data Available (177)

Substanzinformationen anzeigen

Scheme 10 (4 Reactions)

1 Yield: 39-67%

Reaction Summary Steps: 1 Yield: 67%

Preparation of quinoline-3-carboxamides as H-PGDS inhibitors

By: Cadilla, Rodolfo; et al
World Intellectual Property Organization, A1 2017-06-22

Substanzbeitrag anzeigen

Reaction Summary Steps: 1 Yield: 67%

Preparation of 1,3-disubstituted cyclobutane or azetidine derivatives as hematopoietic prostaglandin D synthase (H-PGDS) inhibitors

By: Deaton, David Norman; et al
World Intellectual Property Organization, WO2018069863 A1 2018-04-19

Reaktionsdetails anzeigen

Reaction Summary Steps: 1 Yield: 39%

Preparation of furo[3,2-b]imidazo[4,5-d]pyridine derivatives as novel JAK1 selective inhibitors and uses thereof

By: Liang, Congxin
World Intellectual Property Organization, WO2018067422 A1 2018-04-12

Alle Reaktionsübersichten dieses Schemas anzeigen

View All Reaction Summaries

Collapse Scheme

Filtern der Reaktionsergebnisse

Literatur-Referenz anzeigen

6.2 Reaktionsdetails

Detaillierte Information inkl. Lösungsmittel, Katalysatoren, Reagenzien, Reaktionsbedingungen sowie experimentelle Protokolle, die aus der Publikation oder deren Supplement entnommen wurden.

Steps: 1
Yield: 85%

Absolute stereochemistry shown. Rotation (+)
Suppliers (38)

[Stage 2]
Suppliers (126)

Absolute stereochemistry shown. Rotation (-)
85%
Supplier (1)

Step 1

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

Reference

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

By: Liang, Jianglin; et al
View All

Alle Autoren anzeigen

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

Full Text

Experimental Protocols

MethodsNow™

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.

Characterization Data

Charakterisierende Daten

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

Proton NMR Spectrum (300 MHz, CDCl₃) δ 7.48-7.30 (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 C₁₇H₂₄NO₄ 306.1700, found 306.1700

State sticky solid

7. Retrosyntheseplanung

7.1. Retrosyntheseplan erstellen

Es existieren 2 Optionen um den Retrosyntheseplaner von SciFinderⁿ zu öffnen.

Die Zielsubstanz muss mindestens 5 Nicht-Wasserstoffatome beinhalten.

- 1) Reaction-Suche auswählen, Struktur zeichnen und anschließend ‚Create Retrosynthesis Plan‘ vom ‚Edit‘ Button ausführen.
- 2) Struktur-Kontextmenü öffnen (durch z.B. Klicken auf Struktur) und ‚Create Retrosynthesis Plan‘ ausführen

Reactions auswählen, damit **Create Retrosynthesis Plan** angezeigt wird

Optionen auswählen vor dem Öffnen des Retrosyntheseplans

1 **Create Retrosynthesis Plan**

2 **Create Retrosynthesis Plan**

Substance Detail
CAS RN 2408121-76-4
CAS Name Pyridine, 2-[methoxy[5-(5-(trifluoromethyl)-1,2,4-oxadiazol-3-yl)-2-thienyl]meth...

7.2 Retrosyntheseplan öffnen und auswerten

Der experimentelle Plan ist typischerweise innerhalb weniger Sekunden abrufbar. Wenn der prädiktive Plan verfügbar ist, erhält man eine E-Mail.

Optionen öffnen

Rote Linien markieren exp. Schritt, d.h. in der Literatur beschriebene Reaktion

Grüne gepunktete Linien zeigen prädiktiven Schritt

‚Prädiktiv‘ ein- oder ausschalten

Retrosyntheseschritte

Alternative disconnections

Suppliers (20)

Suppliers (77)

Suppliers (42)

Suppliers (72)

Reset

7.3 Alternative Schritte

Die alternativen Retrosyntheseschritte bieten einen Überblick über verfügbare experimentelle und prädikative Alternativen. Mit ‚Evidence‘ werden in SciFinderⁿ vorhandene Reaktionen bezeichnet, die in der Literatur dokumentiert sind. Diese sind unter dem gleichnamigen Link über ① ‚Steps‘ oder ② ‚Alternative Steps‘ abrufbar.

Alternative auswählen – der Plan wird entsprechend umgestellt

1 of 168

2 of 168

Selected

Predicted Step

Evidence (1,564)

Average Yield: 62%

Experimental Step

Evidence (1)

Maximum Yield: 22%

Reactions (808)

Yield

90-100% (40)

80-89% (100)

70-79% (102)

50-69% (135)

30-49% (88)

View All

Number of Steps

1 (808)

Non-Participating Functional Groups

Oxime (749)

Halide (376)

Ether (258)

Phenyl halide (253)

Imine (251)

View All

Experimental Protocols

MethodsNow: Synthesis (347)

Experimental Procedure (512)

Reagents

Triethylamine

Water

Catalysts

-

Solvents

Tetrahydrofuran

Conditions

3 stages

View Reaction Detail

Experimental Protocols

View 1 Reaction

Collapse Scheme

Preparation of bis(heteroaryl) substituted isoxazoles for use as therapeutic neuronal nicotinic receptor modulators

By: Gopalakrishnan, Murali; et al
World Intellectual Property Organization, WO2009149135
A1 2009-12-10

PATENTPAK - Full Text -

7.4 Optionen

Die ‚Plan Options‘ können geändert werden, um...

- Die Anzahl der Retrosyntheseschritte zu verändern: synthetic depth
- Einen Plan zu erstellen, der passendere Trennungen (disconnections) enthält, z.B. im Hinblick auf poly- oder heterozyklische Moleküle
- Bindungen zu schützen in der gesamten Retrosyntheseroute
- Bindungen in der ersten Trennung (disconnection) zu spalten

Zahl der disconnections im Plan anpassen

Retrosynthesis Edit Plan Options

Plan Options

Bindungen markieren, die im ersten Schritt gespalten werden sollen

Bindungen schützen

Zurücksetzen

Powered by **ChemPlanner®**

Select Synthetic Depth

Synthetic depth restricts the number of steps generated in the plan. [Learn More.](#)

- 1
 2
 3
 4



Set Rules Supporting Predicted Reactions

Common rules are supported by many literature examples. Uncommon and Rare rules are supported by fewer examples, but may expose novel approaches. [Learn More.](#)

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

Break and Protect Bonds

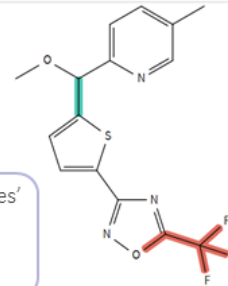
You may select one bond to break in the first step of the plan. Any bonds you protect will not break, though their order may change. [Learn More.](#)

Break Bond

Protect Bond

[Clear All Bond Selections](#)

'Uncommon' oder 'rare rules' auswählen, die weniger dokumentierte Reaktionen erfordern



CAS kontaktieren bei Problemen oder Vorschlägen



[Create Retrosynthesis Plan](#)

8. PatentPak

8.1 Was ist PatentPak?

- Zugang zu PatentPak hat man in SciFinderⁿ.
- Wie der Name verrät geht es hier um Patente.

The screenshot shows the SciFinder interface with a search query: "preparing method of patterned template assisted self-assembly organic thin film electron device". The results page displays a list of references, with the top result highlighted. The title of the reference is "Preparing method of patterned template-assisted self-assembly organic thin film electron device and the patterned template-assisted self-assembly organic thin film electron device". The authors listed are Kim, Yun Ho; Kim, A Ryeon; Jang, Gwang Seok; Ka, Jae Won; Won, Jong Chan; Kim, Jin Su; Lee, Mi Hye. The patent number is KR1451301 B1, dated 2014-10-17. The interface includes filters for document type (Journal, Patent, Review, Book, Clinical Trial) and language (English, Chinese, Korean). A diagram illustrates the manufacturing process, showing the deposition of an insulating layer, the application of liquid crystal type organic semiconductor powder, and the subsequent heating and removal of the template to form a patterned semiconductor.

- Ein weiteres Beispiel einer Anzeige bei PatentPak:
Suche mit **US20100239576** bei References:

PATENTPAK Viewer Full Text -

Patent Family

Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
US20100239576	English	A1	PDF PDF+ Viewer	2010-09-23	US2010-12728153	2010-03-19
		P			US2009-61162260P	2009-03-21
CA2752421	English	A1		2010-09-30	CA2010-2752421	2010-03-15
WO2010111063	English	A1		2010-09-30	WO2010-US27360	2010-03-15
AU2010229147	English	A1	PDF	2011-08-25	AU2010-229147	2010-03-15
KR2011133048	Korean	A	PDF	2011-12-09	KR2011-7024669	2010-03-15
EP2408300	English	A1		2012-01-25	EP2010-756591	2010-03-15
AU2010229147	English	B2	PDF	2012-07-05	AU2010-229147	2010-03-15
JP2012521348	Japanese	T	PDF	2012-09-13	JP2012-500859	2010-03-15
CA2752421	English	C		2013-08-06	CA2010-2752421	2010-03-15
JP5583751	Japanese	B2	PDF	2014-09-03	JP2012-500859	2010-03-15

8.2. Patent Viewer

Der Patent Viewer zeigt eine interaktive Version des Patentvolltextes.

PAGE

1 / 101

ZOOM

– +

DOWNLOAD

PDF | PDF+

Key Substances in Patent

CAS RN
80449-02-1

Protein tyrosine kinase

Analyst Markup Locations (1)

Page 4

CAS RN
1245930-74-8

Analyst Markup Locations (1)

Page 46

CAS RN
1245930-73-7

L-Alanine, (1R)-2-[4-[[[3-fluoro-4-[[7-methoxy-4-quinolinyl]oxy]phenyl]amino]cyclohexyl]methyl]pyrazol-1-yl]-1-methylethyl ester, (2E)-2-butenedioate (1:2)

Analyst Markup Locations (1)

Page 46

CAS RN
1245930-75-9

L-Alanine, (1R)-2-[4-[[[3-fluoro-4-[[7-methoxy-4-quinolinyl]oxy]phenyl]amino]cyclohexyl]methyl]pyrazol-1-yl]-1-methylethyl ester, benzoate (1:2)

Analyst Markup Locations (1)

Page 47

US 20100239576A1

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

(54) AMINO ESTER DERIVATIVES, SALTS 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.: 12728,153

(22) Filed: Mar. 19, 2010

Related U.S. Application Data

(60) Provisional application No. 61/162,260, filed on Mar. 21, 2009.

Publication Classification

(51) Int. Cl.

<i>A61K 39/395</i> (2006.01)	<i>A61K 31/704</i> (2006.01)
<i>C07D 401/14</i> (2006.01)	<i>A61K 31/708</i> (2006.01)
<i>A61K 31/4709</i> (2006.01)	<i>A61K 31/661</i> (2006.01)
<i>A61P 35/00</i> (2006.01)	<i>A61K 31/573</i> (2006.01)
<i>A61P 9/10</i> (2006.01)	<i>A61P 35/04</i> (2006.01)
<i>C07D 401/12</i> (2006.01)	<i>A61P 37/06</i> (2006.01)
	<i>A61P 35/02</i> (2006.01)
	<i>A61P 1/04</i> (2006.01)
	<i>C12N 5/02</i> (2006.01)
	<i>C12N 9/12</i> (2006.01)
	<i>C12N 9/99</i> (2006.01)

(52) U.S. CL. 424/133.1; 546/153; 514/312; 514/278; 546/15; 514/34; 514/49; 514/110; 514/171; 424/155.1; 424/142.1; 435/375; 435/194; 435/184


(57) ABSTRACT

The present invention provides amino ester compounds, salts, and pharmaceutical formulations thereof useful in modulating the protein tyrosine kinase activity, and in modulating inter- and/or intra-cellular signaling. The invention also provides pharmaceutically acceptable compositions comprising such compounds and methods of using the compositions in the treatment of hyperproliferative disorders in mammals, especially humans.

Anzeige bei PDF+:

PATENTPAK
A GAS SOLUTION

Substance table begins on page 102.



US 20100239576A1

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

(54) **AMINO ESTER DERIVATIVES, SALTS 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**

Related U.S. Application Data

(60) Provisional application No. 61/162,260, filed on Mar. 21, 2009.

Publication Classification

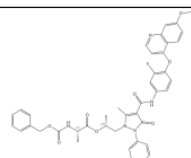
(51) **Int. Cl.**
A61K 39/395 (2006.01)
C07D 401/14 (2006.01)
A61K 31/4709 (2006.01)
A61P 35/00 (2006.01)
A61P 9/10 (2006.01)
C07D 401/12 (2006.01)

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)

(52) **U.S. Cl.** **424/133.1**; 546/153; 514/312; 514/278; 546/15; 514/34; 514/49; 514/110; 514/171; 424/155.1; 424/142.1; 435/375; 435/194; 435/184

(57) **ABSTRACT**
 The present invention provides amino ester compounds, salts, and pharmaceutical formulations thereof useful in modulating the protein tyrosine kinase activity, and in modulating inter- and/or intra-cellular signaling. The invention also provides pharmaceutically acceptable compositions comprising such compounds and methods of using the compositions in the treatment of hyperproliferative disorders in mammals, especially humans.

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-	