



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	Speichern 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 SciFinder®

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:



This screenshot displays the "Registration Information" form. It includes sections for "Contact Information" (with fields for First Name, Last Name, Email, Confirm Email, Phone Number, Fax Number, Area of Research, and Job Title), "Username and Password" (with fields for Username, Password, and Re-enter Password), and "Security Information" (with fields for Security Question and Answer). Buttons for "Register" and "Clear All" are at the bottom.

This screenshot shows the same registration form but with an error message. The "Password requirements:" section is highlighted with a red border, and a red message at the bottom states "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 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.

CPlus 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 SciFinder®?

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

The screenshot shows the SciFinder-n Help page. On the left is a sidebar with links like 'Searching in SciFinder-n' (All Search, Find Substances, Find Reactions, Find References, Find Suppliers, Search History Page), 'Creating a Retrosynthesis Plan', 'Drawing or Importing a Structure', 'Working with Search Results', 'About SciFinder-n', and 'Sign Up for Research'. The main content area has a header 'Home > Searching in SciFinder-n' and a title 'Searching in SciFinder-n'. It features a search interface with tabs for 'All', 'Substances', 'Reactions', 'References', and 'Suppliers'. Below the tabs is a search bar with placeholder 'Enter a query...' and buttons for 'Draw' and a magnifying glass icon. A note says: 'When you log in to SciFinder®, search options are presented at the top of the Home page. (You can click the SciFinder® logo to return to the Home page at any time.)' It then lists steps: 1. Select the search type (with descriptions for All, Substances, Reactions, References, and Suppliers), 2. Enter a text query or click the Draw button to import or draw a structure query, and 3. Click the magnifying glass to submit the query. At the bottom is a large search bar with the same interface as the top one.

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	References: "natural products"with aconitum (9.148) Rerun Search
<input type="checkbox"/> 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.

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. On the left, there is a sidebar with navigation links: All, Substances, Reactions, References (which is highlighted in purple), and Suppliers. Below this is a 'Recent Searches' section. The main area has a search bar containing 'red wine against heart disease'. A dropdown menu lists various search variations, including 'red wine against heart disease', 'red wine against Heart disease', 'red wine against Heart disease, necrosis', and many others. To the right of the search bar are icons for 'Saved', 'History', and 'Account'.

The screenshot shows the SciFinder search results page for the query 'red wine against heart disease'. At the top, there is a header with the SciFinder logo, a 'References' dropdown, the search term, and various account icons. Below the header, a message says 'Based on your query, we've returned the most relevant results. Would you like to load the entire result set? Learn about result relevance.' There is a 'Load More Results' button. To the left, there is a 'Filter by' sidebar with sections for 'Document Type' (Journal, Patent, Review, Biography, Book), 'Language' (English, Chinese, German, French, Japanese), and 'Publication Year' (a histogram from 1874 to 2020). The main results area shows three entries:

- 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: Cplus
[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: Cplus
[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: Cplus
[View Abstract](#)

Each result entry includes a checkbox, a 'Full Text' link, and buttons for 'Substances', 'Reactions', 'Cited By', and 'Citation Map'.

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 Substanznamenssuche zu erhalten

[← Return to Home](#)

Show only

Substances (6)

Reactions (0)

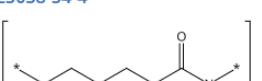
References (3,285)

Suppliers (0)

All Answer Types

Top two answers by relevance from each answer type.

Substances (6)

1 1406-18-4 Image Not Available Unspecified Vitamin E 91K References 209 Reactions 18 Suppliers	2 25038-54-4  $(C_6H_{11}NO)_n$ ON 56K References 1,026 Reactions 19 Suppliers
--	--

[View All Substances](#)

Reactions (0)

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

References (3,285)

1 Effect of tea polyphenols and vitamin E on antioxidant performance in broilers By: Wang, Hong-jin

- 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.

SCI-FINDERⁿ A CAS SOLUTION

Search

All

Substances

Reactions

References

Suppliers

benzene

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

Edit Drawing Remove

All benzene

Show only

Substances (1,329)

Reactions (15,226)

References (20,946)

Suppliers (325)

All A

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

Top two answers

Substances (1,329)

1
91-20-3

C₁₀H₈
Naphthalene
92K References 11K Reactions 118 Suppliers

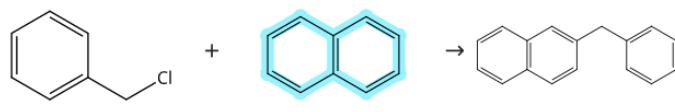
2
1146-65-2

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

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 enthalten die Ergebnisse beide Kriterien im Sinne eines logischen AND.

The screenshot shows the SciFinder search interface. The search bar contains the query "red wine and heart disease". Below the search bar is a dropdown menu showing 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".

Trefferliste

The screenshot shows the SciFinder search results page for the query "red wine and heart disease" under the "References" tab. The results are sorted by Relevance. The first result is a reference titled "Dietary supplementation of grape polyphenols and chronic ethanol administration of LDL oxidation and platelet function in rats". The abstract states that polyphenolic compounds have been implicated as active ingredients for the cardiac protective effect of red wine. The second result is a review titled "New Zealand red wine phenolic content and heart disease". Both results have a "Full Text" link below them.

Detailanzeige

SCI-FINDERⁿ A CAS SOLUTION

References ▾ Enter a query... Draw Search Star Clock User

Reference Detail (9 of 2,358) ← Prev Next →

Substances (3) Reactions (0) Cited By (0) Citation Map Download Email Save

Patent

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 Corchorifoliae 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 Rhodiola, Folium Rhododendri Simsii, feijoa fruit, Folium Kaki, Green Tea, Radix Acanthopanaxis 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

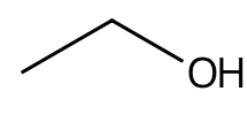
Patent	Language	Kind Code	PatentPak Options	Publication Date	Application Number	Application Date
WO2000050052	Russian	A1	PDF	2000-08-31	WO2000-BY1	2000-02-22
					BY1999-182	1999-02-25

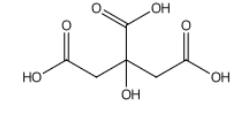
Expand All | Collapse All

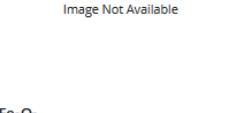
▼ Concepts

▲ Substances

Substances (3)

64-17-5  C₂H₅O Ethanol

77-92-9  C₆H₈O₇ Citric acid

1309-37-1  Fe₂O₃ Iron oxide (Fe₂O₃)

3.2 Gleichzeitige Suche von Text und Struktur

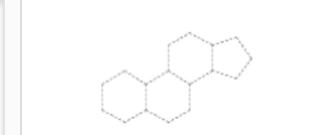
SciFinderⁿ ermöglicht es, gleichzeitig mit Text sowie Struktur- oder Reaktionsqueries zu suchen. Dazu erstellt man sowohl eine Suchanfrage für Text, als auch für Struktur oder Reaktion, siehe auch die Kapitel zur Struktur-, bzw. Reaktionssuche.

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 Search

References (46)

Substances Reactions Cited By



Edit Drawing Remove

The screenshot shows a search interface for 'References' (46). On the left, there's a sidebar with 'Structure Match' options: 'As Drawn (0)' and 'Substructure (46)', with 'Substructure (46)' highlighted in purple. Below this are filters for 'Document Type' (Journal, Patent, Review), 'Substance Role' (Adverse Effect, Analytical Study, Biological Study, Process, Properties), and 'Language'. The main content area displays a reference titled 'Milkweeds, monarch butterflies and the ecological significance of cardenolides' by Malcolm, Stephen B. from Chemoecology (1995), 5(6)(3/4), 101-117. The abstract discusses the review of 139 references on Miriam Rothschild's work regarding monarch butterflies and their milkweed host plants. At the bottom of the page are buttons for 'Full Text', 'Substance (1)', 'Reactions (0)', 'Cited By (19)', and 'Citation Map'.

3.3 Phrasensuche und Maskierung

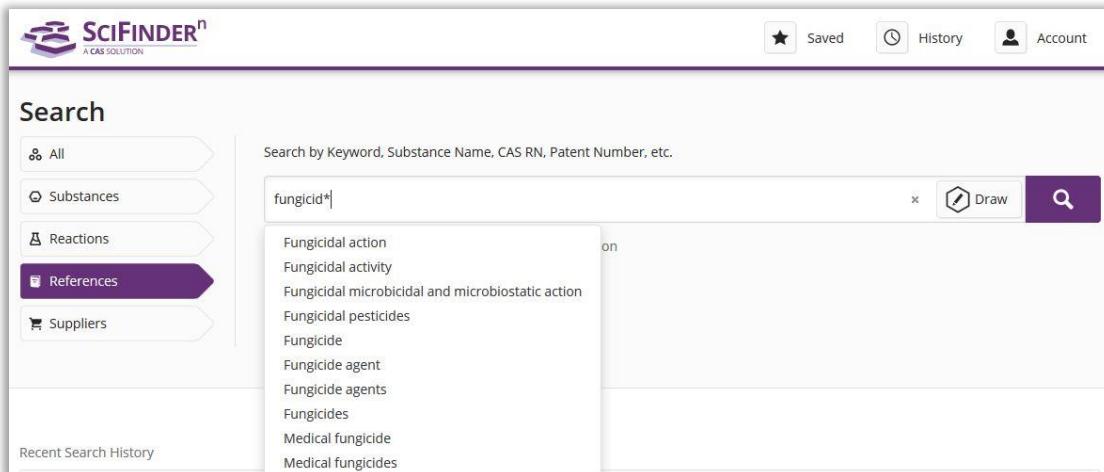
- Durch Anführungszeichen gibt man an, welche Zeichenfolge exakt so gesucht werden soll, z.B. „red wine“ und nicht red AND wine. Eine Maskierung (oder auch Trunkierung) rechts wird verwendet, um nach einem Wortstamm beliebig viele Buchstaben zuzulassen. Bei fungicid* wird z.B. nach fungicid, fungicides, 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 at the top contains the query 'red wine' and 'heart disease'. Below the search bar, a dropdown menu lists suggestions starting with the exact phrase 'red wine' and 'heart disease'. The SciFinder logo is in the top left, and account navigation links (Saved, History, Account) are in the top right. The sidebar on the left includes 'All', 'Substances', 'Reactions', 'References' (highlighted in purple), and 'Suppliers'.

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

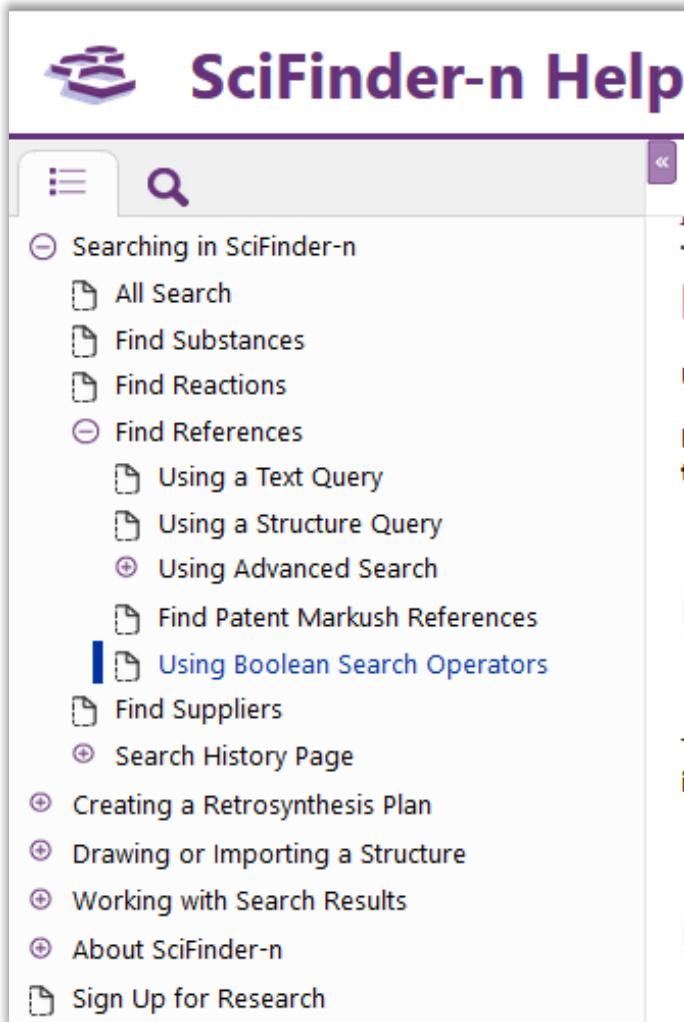
Maskierung



The screenshot shows the SciFinder search interface. On the left, there's a sidebar with categories: All, Substances, Reactions, References (which is selected and highlighted in purple), and Suppliers. Below that is a 'Recent Search History' section. The main search area has a search bar containing 'fungicid*' and a dropdown menu showing suggestions like 'Fungicidal action', 'Fungicidal activity', etc. At the top right are buttons for 'Saved', 'History', and 'Account'. The search results page shows two entries: 'The strobilurine fungicides' and 'Production of p-Tolylsäure'. Each entry has a checkbox, a title, a brief abstract, and a 'View Reference Detail' link. Below each entry are buttons for 'Full Text', 'Substance (1)', 'Reactions (0)', 'Cited By (35)', and 'Citation Map'.

3.4 Suche mit logischen Operatoren

Diese Beispiele findet man auch auf der Hilfeseite zu SciFinderⁿ:

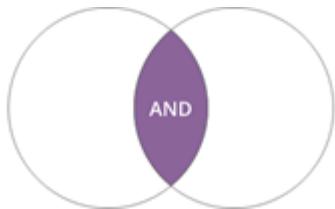


The screenshot shows the SciFinder-n Help interface with a sidebar menu. The menu items are:

- Searching in SciFinder-n
 - All Search
 - Find Substances
 - Find Reactions
 - Find References
 - Using a Text Query
 - Using a Structure Query
 - Using Advanced Search
 - Find Patent Markush References
 - Using Boolean Search Operators
 - Find Suppliers
 - Search History Page- Creating a Retrosynthesis Plan
- Drawing or Importing a Structure
- Working with Search Results
- About SciFinder-n
- Sign Up for Research

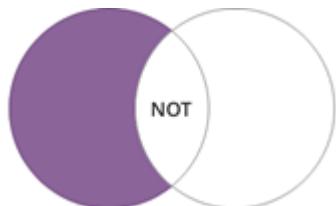
The "Using Boolean Search Operators" link is highlighted with a blue rectangle.

Die folgenden Beispiele sind der Hilfeseite entnommen.



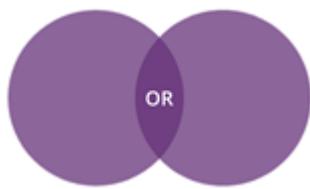
Beispiele:

- 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 term "JP09316484" entered in the search bar. The results page is titled "References (1)". A single result is listed: "Non-tempering type hard butter". The result details: By: Kida, Haruyasu; Arai, Masako; Tashiro, Yoichi. Japan, JP09316484 A 1997-12-09 | Language: Japanese, Database: Caplus. Description: Non-tempering type hard butter suitable for making chocolate, contains no trans acid and no lauric acid, readily breaks apart, and is resistant to heat and blooming effect. The butter contains S0S-type triglycerides 30-60 and SSO-type triglycerides 20-50 % by weight, Solid Fat Index ≥ 50 % at 20° and ≥ 20 % at 30°, and St/P in the fat composition being ≥ 1 where S = C₁₄₋₂₄ saturated fatty acid; St = stearic acid; P = palmitic acid, and O = oleic acid.

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 search interface with the "Advanced Search" option selected. The search bar is empty, and there is a placeholder text "Enter a query...". Below the search bar, there is a link "Use Advanced Search for Author, Journal, or Organization". The sidebar on the left lists search categories: All, Substances, Reactions, References (which is highlighted in purple), and Suppliers.

- 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:

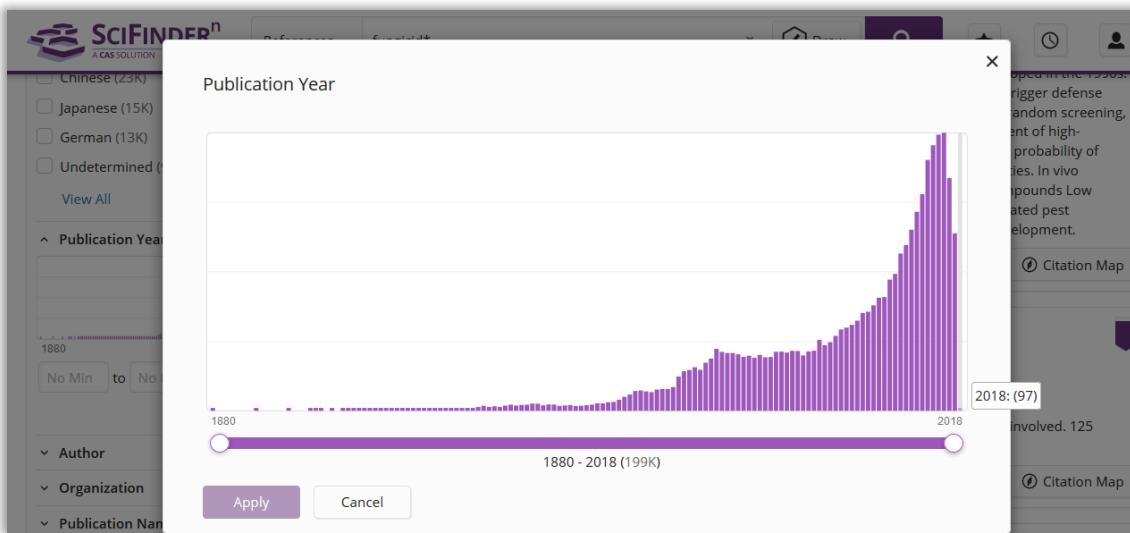
Publication Year

No Min to No Max Apply

View Larger

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.

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](#)

References (2,729)

Sort: Relevance View: Full Abstract

Substances Reactions Cited By

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: Cplus

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 red wine treated. The rings were cultured in cell culture medium with or without treatment for 24 h. Myograph anal. was performed with U46619 (10^{-9} M) for contraction and cumulative bradykinin (10^{-9} to 10^{-5} M) for endothelium-dependent relaxation. The endothelial NO synthase (eNOS) levels were analyzed by RT-PCR, Western blot, and immunohistochem. In response to 10^{-5} M bradykinin, porcine coronary artery rings treated with homocysteine (50 µM) showed a significant reduction of endothelium-dependent vasorelaxation by 43% as compared to controls ($P < 0.05$). However, rings treated with red wine (0.08% alc.) plus homocysteine showed no significant difference as compared to controls. Endothelium-dependent vasorelaxation was not different between control and red wine treated groups. Furthermore, eNOS mRNA d. levels were significantly reduced by 36% in homocysteine treated group as compared to controls ($P < 0.05$). eNOS protein levels were also substantially reduced in the homocysteine-treated group. However, red wine treatment reversed the effect of homocysteine-induced eNOS downregulation. Homocysteine significantly impaired endothelial functions including endothelium-dependent vasorelaxation and eNOS mRNA and protein levels in porcine coronary arteries; and red wine effectively prevented homocysteine-induced endothelial dysfunction. This study suggests that protecting coronary endothelial cells from homocysteine damage may be an important mechanism of red wine for preventing coronary artery disease.

[Full Text](#) Substances (2) Reactions (0) Cited By (31) Citation Map

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

Previous investigations have indicated that angiotensin II (Ang II)-induced hypertension and endothelial dysfunction are

3.8.1 Concepts

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

Concept

- Food contamination (3,848)
- Mycotoxins (3,704)
- Ochratoxins (3,371)
- Animals (1,509)
- Aflatoxins (1,150)

[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.

Concept

Top Count Alphanumeric Search

2 Selected

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

Apply Cancel

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

Concept

Top Count Alphanumeric Search

Concept Name

analy*

3 Selected

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

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.

The screenshot shows the SciFinder interface with the following details:

- Search Bar:** Shows "Enter a query..."
- Result 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 (Journal of Surgical Research, 2003, 115(1), 82-91)
- Abstract:** A brief summary of the study's findings on the effect of red wine on homocysteine-induced endothelial dysfunction.
- View More:** A link to view more details.
- Full Text:** A button to access the full text of the publication.
- Filter by:** A sidebar with two sections:
 - Document Type:** Options include Journal (86), Review (16), and Clinical Trial (1).
 - Author:** Options include Olas, Beata (8), Malinowska, Joanna (7), Chen, Changyi (6), Stochmal, Anna (5), and Oleszek, Wieslaw (4).
- References This Document Cites:** A list of references cited in the original document, such as "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) and "Wine, alcohol, platelets, and the French paradox for coronary heart disease" (Lancet, 1992).
- References Citing This Document:** A list of publications that cite the original document, such as "Wine, beer, alcohol and polyphenols on cardiovascular disease and cancer" (Nutrients, 2012) and "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).

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](#)

 **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

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)

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)

Summary Full Text Tables and Figures Supplementary Material

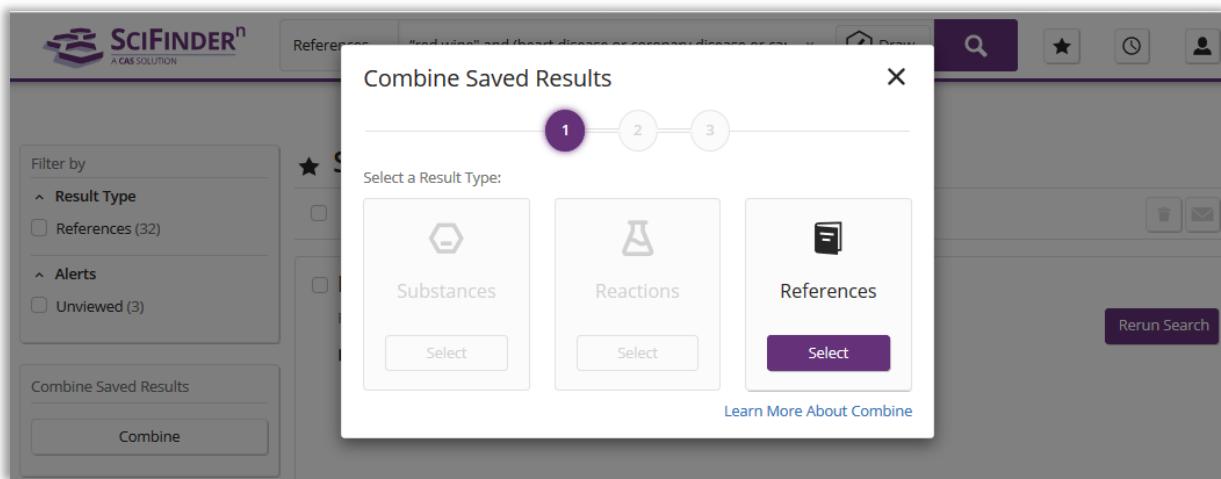
The question of alcohol consumption is an important component of any thorough medical history, but with conflicting evidence about health risks and benefits associated with drinking, what advice should doctors give to patients? After all, chemical components differ between alcoholic drinks and

4. Combine, Speichern, Export, Alerts und History

4.1 Combine

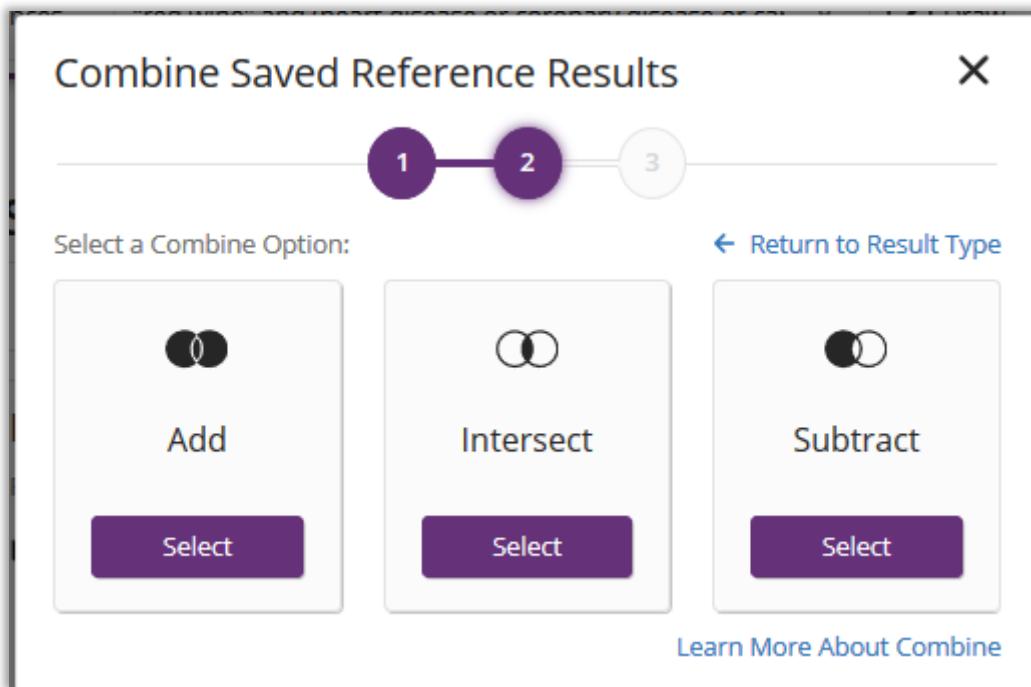
Gespeicherte Antwortsätze können mit Combine miteinander verbunden werden.

- 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

Combine Saved Reference Results: Add

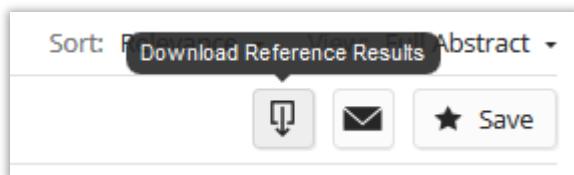
Select up to 5 saved result items:

<input type="checkbox"/> elephas maximus 50 selected (50)	January 4, 2019, 8:16 AM
<input type="checkbox"/> "ear bone" mit select 187 (187)	January 4, 2019, 8:13 AM
<input type="checkbox"/> 59-44=17 (17)	January 2, 2019, 10:32 AM
<input type="checkbox"/> snowy owl ohne Maskierung (44)	January 2, 2019, 10:00 AM
<input checked="" type="checkbox"/> bubo scandiacus (20)	January 2, 2019, 8:43 AM
<input checked="" type="checkbox"/> nyctea scandiaca (22)	January 2, 2019, 8:40 AM
<input checked="" type="checkbox"/> snowy owl (44)	January 2, 2019, 8:38 AM
<input type="checkbox"/> camel spider (11)	December 17, 2018, 2:32 PM
<input type="checkbox"/> 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.

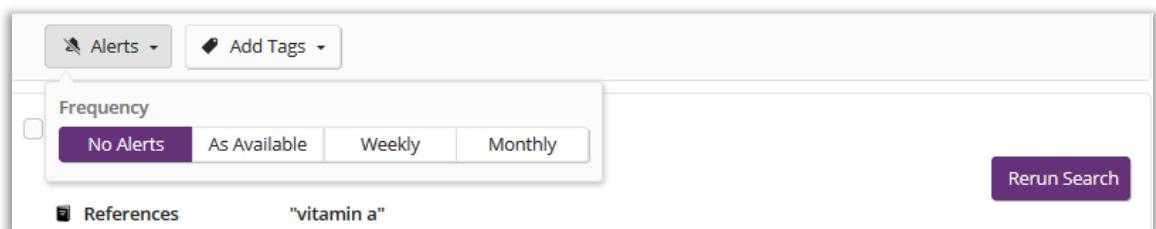
4.2 Speichern und Export von Ergebnissen



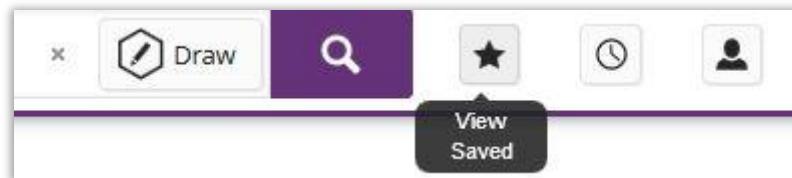
- Der Button „Download Reference Results“ dient zum Herunterladen der Suchergebnisse. Die Ergebnisse der Suche können bei **References**, **Substances** etc. in unterschiedlichen Formaten heruntergeladen werden. Bei References steht neben dem PDF-Format auch das rtf-Format (neben Formaten für den Export 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-Profile (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-Profiles 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"

Rerun Search

View Saved

Alerts Add Tags

Frequency

No Alerts As Available Weekly Monthly

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.

Recent Search History

February 14, 2020

10:18 AM All "ochratoxin B"
Substances: (1)
Reactions: (9)
References: (574)
Suppliers: (34)

10:17 AM References "ochratoxin B" (574)

10:03 AM References "vitamin e" (123K)

February 13, 2020

10:39 AM References US20100239576 (1)

Saved History Account

Rerun Search Edit Search

Rerun Search Edit Search

Rerun Search Edit Search

Rerun Search Edit Search

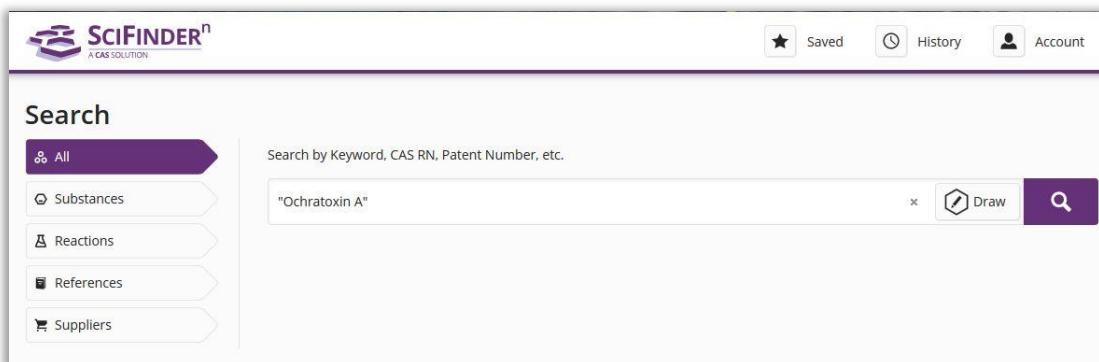
- Mit „Rerun Search“ kann man eine Suche noch einmal starten.
- Die farbige Hervorhebung der Begriffe bleibt erhalten.

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“.



SCI-FINDERⁿ
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)

Suppliers (31) Suppliers (410) Suppliers (3)

[Expand Scheme](#)

Scheme 2 (1 Reaction)

Suppliers (31)

[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 Substanzeintrag 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 shows the SciFinder interface with the following details:

- Header:** SCI-FINDERⁿ A CAS SOLUTION, Substances dropdown, search bar containing "ochratoxin A", Draw button, and a purple search icon.
- Left Sidebar (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
- Center Content:**

Substances (1)

	Key Physical Properties	Value	Condition
<input type="checkbox"/> 303-47-9	Molecular Weight	403.81	-
<input type="checkbox"/> View Detail	Melting Point (Experimental)	169 °C	-
<input type="checkbox"/> Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)	Boiling Point (Predicted)	632.4±55.0 °C	Press: 760 Torr
<input type="checkbox"/> C ₂₀ H ₁₈ CINO ₆	Density (Predicted)	1.425±0.06 g/cm ³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
<input type="checkbox"/> Ochratoxin A	pKa (Predicted)	3.29±0.10	Most Acidic Temp: 25 °C

Bottom Buttons: References (5,812), Reactions (50), Suppliers (42).

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](#)

Substances (1)

303-47-9

Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)

C₂₀H₁₈ClNO₆
Ochratoxin A

5,812 References 50 Reactions 42 Suppliers

View Partial Full

- 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...

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)

1 Selected

303-47-9

Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)

C₂₀H₁₈ClNO₆
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

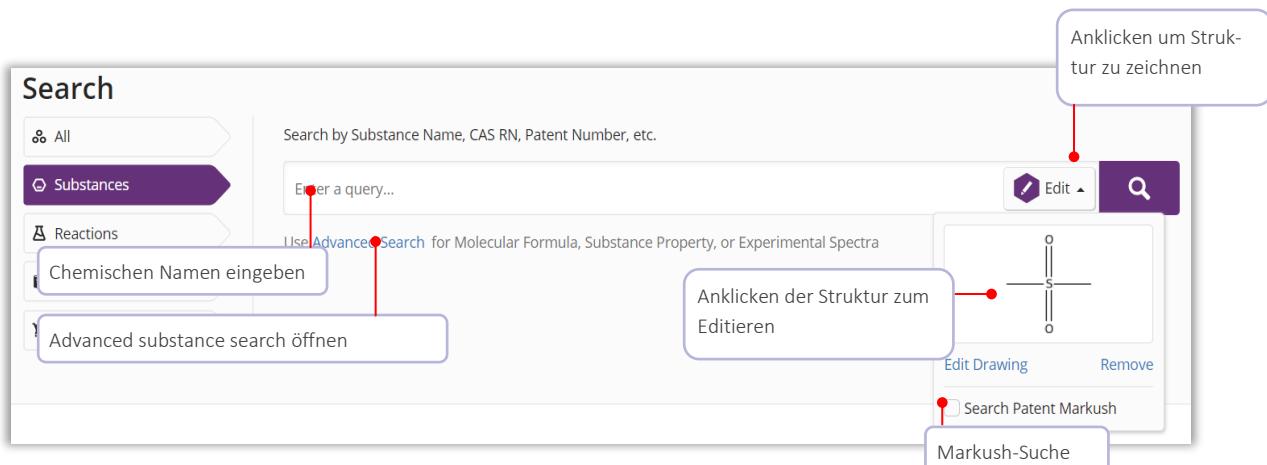
5.3 Substanzsuche mit Namen

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

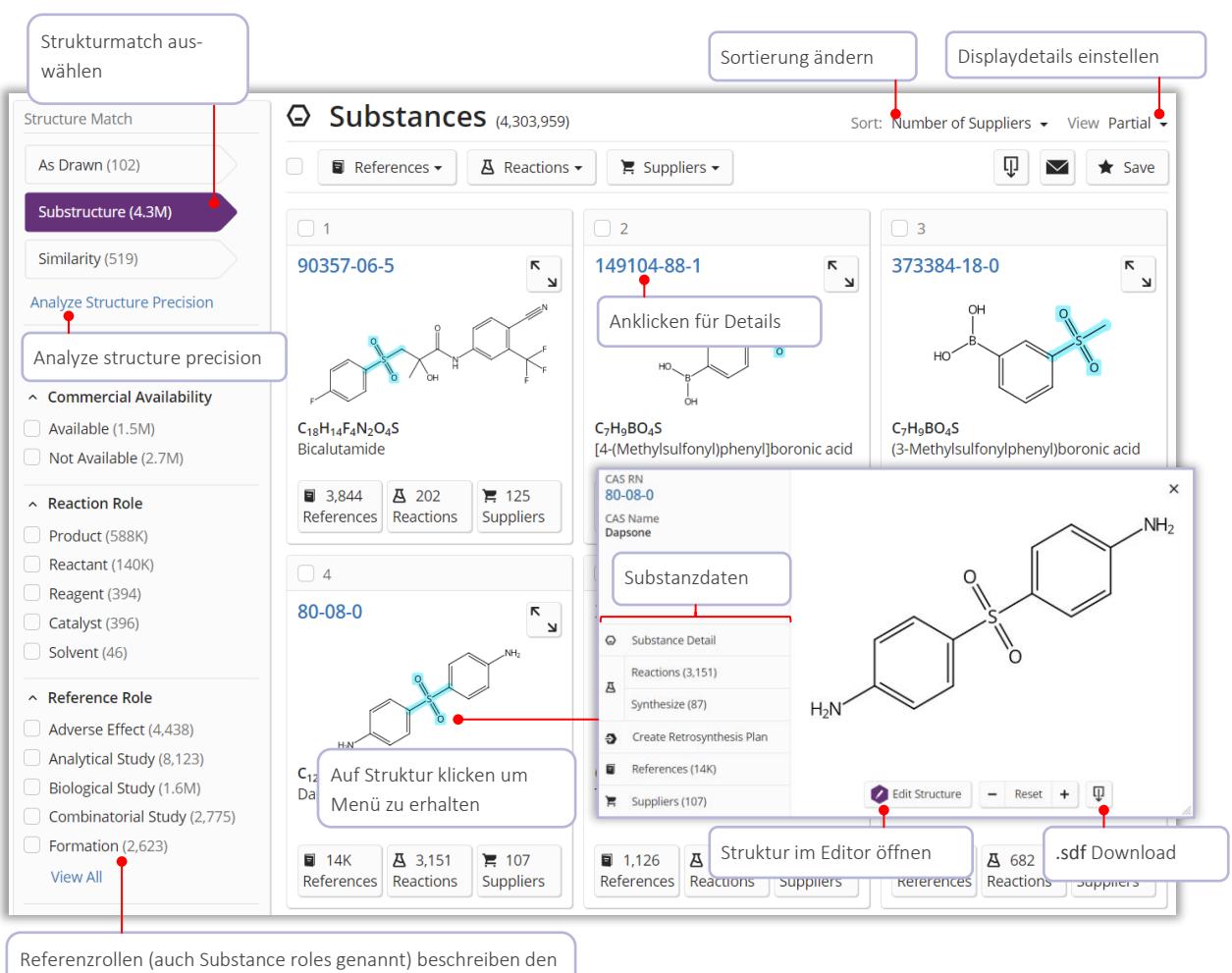
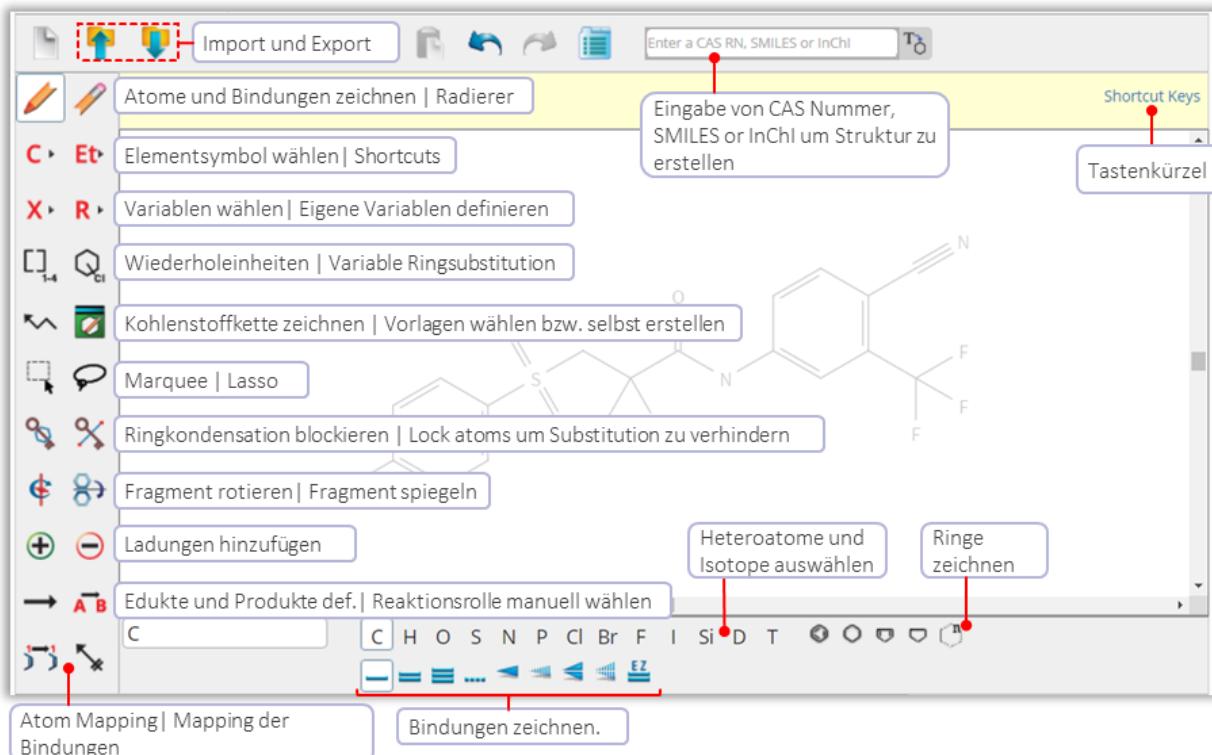
Suche	Ergebnis
Vanillin	Vanillin Substanzeintrag
121-33-5	Vanillin Substanzeintrag
“Vanillin propionate”	Vanillin Propionat Substanzeintrag
Vanillin “Vanillin propionate”	2 Substanzeinträge: Vanillin sowie Vanillin Propionat
Vanillin*	Alle Substanzeinträge, deren chemische Namen mit ‚Vanillin‘ beginnen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

5.4 Struktursuche

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



5.4.1 Struktureditor und Substanzanzeige



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

C18H14F4N2O4S

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

Molekularformel in Hill-Schreibweise
Systematischer Name

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/cm³	Temp: 20 °C; Press: 760 Torr
pKa (Predicted)	11.49±0.29	Most Acidic Temp: 25 °C

Wesentliche Eigenschaften

Other Names
9 Other Names for this Substance

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

Eigenschaften sind angegeben oder im verlinkten Volltext einsehbar

Casode
Casodex
Cosudex
ICI 176334

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

5.5 Suche nach Lieferanten (Supplier)

SCI-FINDERⁿ A CAS SOLUTION

Substances ▾ "ochratoxin A"

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)

1 Selected References Reactions Supplier

303-47-9

Absolute stereochemistry shown, Rotation (-)

C20H18ClNO5
Ochratoxin A

5,812 References 50 Reactions 42 Suppliers

Get Suppliers for Substances Condition

All Results Selected Results

Melting Point (Experimental) 169 °C

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](#)

SCI-FINDERⁿ A CAS SOLUTION

Suppliers ▾ 303-47-9

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)
 - [View All](#)
- 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	
 SA 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	

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.

SCI-FINDERⁿ 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
(C₆H₅)_x
C₂H₂6CuN₂O₅.C₂H₃N

Add Another Molecular Formula

Search

SCI-FINDERⁿ A CAS SOLUTION

Substances Enter a query... Draw

Return to Home

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)
- Stereochemistry
- Number of Components
- Substance Class
- Isotopes
- Metals
- Molecular Weight

Sort: Relevance View Full

Substances (968)

1

50-78-2

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

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

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.

SCI-FINDERⁿ
A CAS SOLUTION

Substances - "Ochratoxin A" "Ochratoxin B"

x 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

Sort: Relevance View Full Save

Substances (2)
<input type="checkbox"/> 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 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
<input type="checkbox"/> 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 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, Dokument-identifikatoren, 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
- References
- Suppliers

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

Anklicken um Reaktionsquery zu editieren

Edit Drawing
Remove

Create Retrosynthesis Plan

Set Plan Options

Recent Search History

Reaktionen nach Strukturmatch

Structure Match

- As Drawn (0)
- Substructure (198)
- Similarity (1,758)

Scheme 10 (4 Reactions)

Suppliers (94)

Suppliers (86)

Ausbeute für angezeigte Reaktionen

Substanzinformationen anzeigen	1 Yield: 39-67%
<p>Reaction Summary Steps: 1 Yield: 67% 1.1 Reagents: Triethylamine, Diphenylphosphoryl azide Solvents: <i>tert</i>-Butanol; 1 h, 60 °C; overnight, reflux; reflux → rt 1.2 Reagents: Water; cooled</p>	
<p>Preparation of quinoline-3-carboxamides as H-PGDS inhibitors By: Cadilla, Rodolfo; et al World Intellectual Property Organization, A1 2017-06-22</p>	
 	

Reaktionsdetails anzeigen

Reaction Summary Steps: 1 Yield: 67%	Preparation of 1,3-disubstituted cyclobutane or azetidine derivatives as hematopoietic prostaglandin D synthase (H-PGDS) inhibitors
<p>1.1 Reagents: Triethylamine, Diphenylphosphoryl azide Solvents: <i>tert</i>-Butanol; 1 h, 60 °C; overnight, reflux; reflux → rt 1.2 Reagents: Water; cooled</p>	
<p>By: Deaton, David Norman; et al World Intellectual Property Organization, WO2018069863 A1 2018-04-19</p>	
 	

Alle Reaktionsübersichten dieses Schemas 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
<p>1.1 Reagents: Triethylamine, Diphenylphosphoryl azide Solvents: <i>tert</i>-Butanol; rt; 16 h, reflux</p>	
<p>By: Liang, Congxin World Intellectual Property Organization, WO2018067422 A1 2018-04-12</p>	
 	

View All Reaction Summaries ▾

Collapse Scheme ▾

Filtern der Reaktionsergebnisse

6.2 Reaktionsdetails

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

Absolute stereochemistry shown.
Rotation (-)

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

Steps: 1
Yield: 85%

Literaturreferenz

Reference
Development of a Scalable Synthesis of an Azaindolyl-Pyrimidine Inhibitor of Influenza Virus Replication
By: Liang, Jianglin; et al
View All • Alle Autoren anzeigen
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	<ol style="list-style-type: none"> 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). Reflux the mixture for 2 h under N₂. Cool the reaction mixture to 60°C and add benzyl alcohol (87 mL, 839 mmol) in one portion. Heat the mixture to 80°C overnight. <p><small>8. Add DMSO (1 mL, 10 mol %) after cooling to room temperature.</small></p>

Characterization Data • Charakterisierende Daten

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

Proton NMR Spectrum	(300 MHz, CDCl ₃) 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 C ₁₇ H ₂₄ NO ₄ 306.1700, found 306.1700
State	sticky solid

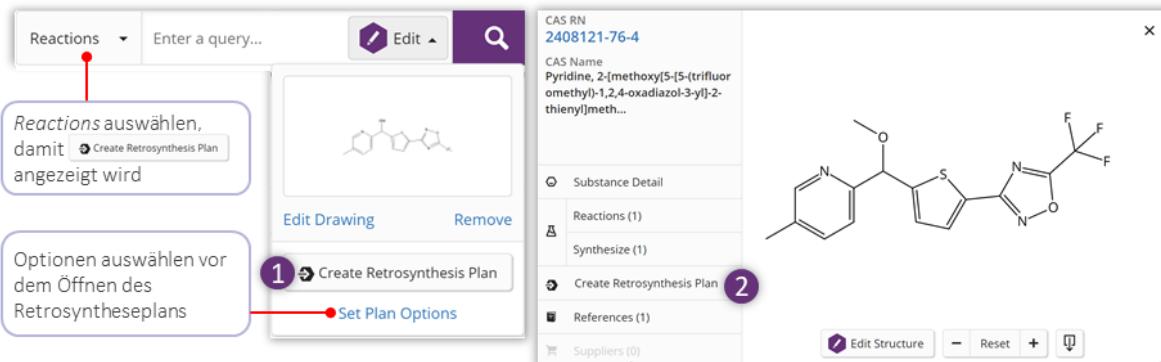
7. Retrosyntheseplanung

7.1. Retrosyntheseplan erstellen

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

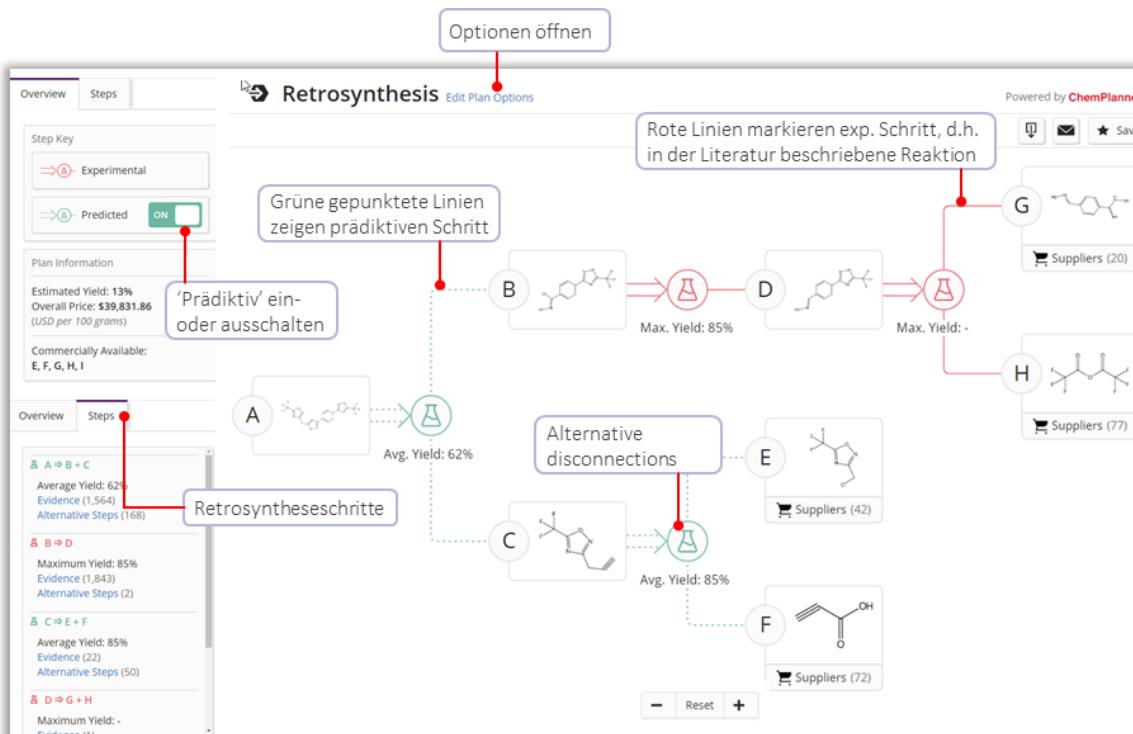
Die Zielsubstanz muss mindestens 5 Nicht-Wasserstoffatome beinhalten.

- 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



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.



7.3 Alternative Schritte

Die alternativen Retrosyntheseschritte bieten einen Überblick über verfügbare experimentelle und prädiktive 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.

The screenshot shows the SciFinder interface with the 'Alternative Steps' feature highlighted. On the left, there's a sidebar with reaction schemes A → B + C, B → D, C → E + F, and D → G + H. A callout box points to the 'Select' button in the main panel, with the text 'Alternative auswählen – der Plan wird entsprechend umgestellt' (Select alternative – the plan will be adjusted accordingly). The main panel displays Scheme 1 (1 Reaction) with two steps. Step 1: Reagents Triethylamine, Water; Catalysts -; Solvents Tetrahydrofuran; Conditions 3 stages. Step 2: Reagents -; Catalysts -; Solvents -; Conditions -.

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

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)

[Create Retrosynthesis Plan](#)

Bindungen markieren,
die im ersten Schritt
gespalten werden sollen

Bindungen
schützen

Zurück-
setzen

Powered by **ChemPlanner®**

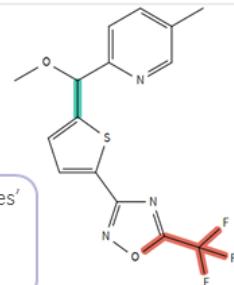
Break and Protect Bonds

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



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 the following details:

- Header:** SCI-FINDERⁿ A CAS SOLUTION, References dropdown, search bar containing "preparing method of patterned template assisted self-", Draw button, and a magnifying glass icon.
- Left Panel:**
 - A message box: "Based on your query, we've returned the most relevant results. Would you like to load the entire result set? Learn about result relevance." with a "Load More Results" button.
 - Filter by:**
 - Document Type:** Journal (4,123), Patent (3,285), Review (477), Book (1), Clinical Trial (5). A "View All" link is also present.
 - Language:** English (4,666), Chinese (2,593), Korean (156).
- Main Content:**
 - References (7,577):** Sort: Relevance, View: Full Abstract. Buttons for Substances, Reactions, Cited By, and a toolbar with Print, Email, Save.
 - Result 1:** Title: "Preparing method of patterned template-assisted self-assembled organic thin film electron device and the patterned template-assisted self-assembled organic thin film electron device". Authors: Kim, Yun Ho; Kim, A Ryeon; Jang, Gwang Seok; Ka, Jae Won; Won, Jong Chan; Kim, Jin Su; Lee, Mi Hye. Date: Korea, Republic of, KR1451301 B1 2014-10-17 | Language: Korean, Database: CAplus.
 - Description:** The title **method** comprises **preparing a template** with a shape contrary to that of a given pattern, forming an insulating layer on a substrate, supplying liquid crystal type organic semiconductor powder to the insulating layer to cover the **template** on the substrate, heating to a temperature higher than isotropic phase transition temperature, and removing the **template**. Simple heat treatment is performed to cause capillary phenomenon, so the semiconductor powder is easily filled in the **template**. The **pattern** with a given size is formed at a given position based on the **template pattern** shape, and high-performance organic thin film transistors and various organic electronic devices with liquid crystal type organic semiconductor can be manufactured.
 - Buttons:** PATENTPAK, Full Text, Substances (9), Reactions (0), Cited By (0), Citation Map.
 - Details:** Patent KR1451301, Language Korean, Kind Code B1, PDF | PDF+ | Viewer.

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

The screenshot shows the PatentPak Viewer interface with the following details:

- Header:** PATENTPAK Viewer, Full Text dropdown.
- Section:** Patent Family
- Table:** A grid showing patent information for the family of US20100239576.

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-US527360	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.

PATENTPAK[®]
A CAS SOLUTION
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

US 20100239576A1

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]c2,3-dihydro-5-methyl-3-oxo-2-phenyl-1H-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]c2,3-dihydro-5-methyl-3-oxo-2-phenyl-1H-pyrazol-1-yl]-1-methylethyl ester, benzoate (1:2)

Analyst Markup Locations (1)

Page 47

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

<p>(54) AMINO ESTER DERIVATIVES, SALTS THEREOF AND METHODS OF USE</p> <p>(76) Inventor: Ning Xi, Thousand Oaks, CA (US)</p> <p>Correspondence Address: Ning Xi 565 Timberwood Ave. Thousand Oaks, CA 91360 (US)</p> <p>(21) Appl. No.: 12/728,153</p> <p>(22) Filed: Mar. 19, 2010</p> <p>(60) Provisional application No. 61/162,260; filed on Mar. 21, 2009.</p>	<p><i>61K 31/704</i> (2006.01) <i>61K 31/708</i> (2006.01) <i>61K 31/710</i> (2006.01) <i>61K 31/573</i> (2006.01) <i>61P 35/04</i> (2006.01) <i>61P 37/06</i> (2006.01) <i>61P 35/02</i> (2006.01) <i>61P 1/04</i> (2006.01) <i>C12N 5/02</i> (2006.01) <i>C12N 9/22</i> (2006.01) <i>C12N 9/99</i> (2006.01)</p> <p>(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</p>
--	---

Related U.S. Application Data

(51) Int. CL.
61K 39/395 (2006.01)
C07D 401/14 (2006.01)
61K 39/709 (2006.01)
61P 35/00 (2006.01)
61P 9/10 (2006.01)
C07D 401/12 (2006.01)

Publication Classification

(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 CAS SOLUTION 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, SAILTS 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

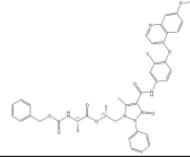
(60) Provisional application No. 61/162,260, filed on Mar. 21, 2009.

(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]-, (1 <i>R</i>)-2-[4-[[3-fluoro-4-[(7-methoxy-4-quinolinyloxy)phenyl]amino]carbonyl]-2,3-dihydro-5-methyl-3-oxo-2-phenyl-1 <i>H</i> -pyrazol-1-yl]-1-methylethyl ester	
1	p.46	1245930-73-7	L-Alanine, (1 <i>R</i>)-2-[4-[[3-fluoro-4-[(7-	